第 11 章
グリーン関数に対する摂動論

Ryoi Ohashi

Department of Applied Physics, Nagoya University

July 16, 2018

目的

- グリーン関数を用いた摂動展開手法を学ぶ
- 熱力学ポテンシャル Ω をグリーン関数より導出する

目次

復習

ハミルトニアンが $H = H_0 + H^{'}$, $\mathscr{H} = H + \mu N$ のとき
以下のように定義を行う.

1 体のグリーン関数

$$G_r[u, u'] = - < T A_r(u) A_r^{\dagger}(u') > \tag{1}$$

- r は状態を表す指数
- $A_r^{(\dagger)}(u)$ は $a_r^{(\dagger)}$ のハイゼンベルグ表示
- $< X >$ は演算子 X の大正準集団に対する平均

$$< X > = \mathrm{tr}(X e^{-\beta \mathscr{H}}) / \mathrm{tr}(e^{-\beta \mathscr{H}}) \tag{3}$$

復習

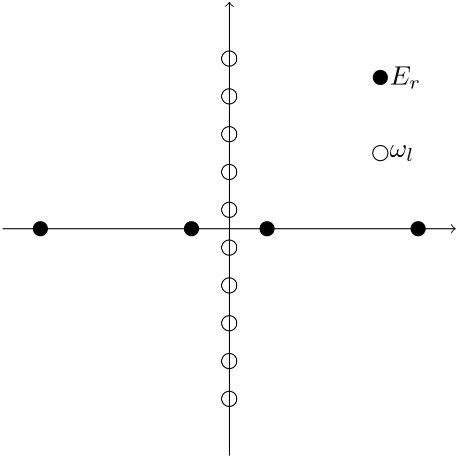
u に対して ω という量を定義することで, フーリエ級数展開を行える.

$$G_r[u, u'] = \frac{1}{\beta} \sum_l G_r(i\omega_l) e^{-i\omega_l (u-u')} \tag{1}$$

フェルミ粒子であれば, ω_l は次のような離散的な値をとる.

$$\omega_l = (2l+1)\pi/\beta, \quad l \in \mathbb{Z} \tag{2}$$

復習



$U(\beta)$ を次のように定める

$$e^{-\beta \mathscr{H}} = e^{-\beta \mathscr{H}_0} U(\beta) \tag{7}$$

(8.22) により, $U(\beta)$ は摂動展開した形になる

$$U(\beta) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} P\left[H^{'}(u_1) \cdots H^{'}(u_n)\right] du_1 \cdots du_n \tag{3}$$

P は *Wick* の記号 (P.132) である

Wick の記号

時間の大きさの順に並べる際に,

- 奇数回の置換なら $-$ 符号
- 偶数回の置換なら $+$ 符号

をつける

T 記号

時間順序積を示す記号
a, a' 偶数個でできている演算子 C について次が成立する

$$T[C(1), C(2)] = P[C(2), C(1)] \tag{16}$$

$$T[a^{(\dagger)}(1), C(2)] = T[C(2), a^{(\dagger)}(1)] \tag{17}$$

H' が a, a' を偶数個含んでいる場合は,
P を T で置き換えが可能となる

$U^{-1}(u)$ を次のように定める

$$\left(e^{-u\mathscr{H}}\right)^{-1} = \left(e^{-u\mathscr{H}_0}U(u)\right)^{-1} = U^{-1}(u)e^{u\mathscr{H}_0} \tag{18}$$

これを用いて次の表記を定義する

$$U(u,u^{'}) = U(u)U^{-1}(u^{'}) = T\exp\left[-\int_{u^{'}}^{u} H^{'}(u_1)du_1\right] \tag{24}$$

以降, a_r に対して

- $a_r(u) = e^{u\mathscr{H}_0}a_r e^{-u\mathscr{H}_0}$: 相互作用表示
- $A_r(u) = e^{u\mathscr{H}}a_r e^{-u\mathscr{H}}$: ハイゼンベルグ表示

と表記する

グリーン関数をこの $U(\beta)$ を用いて変形する

Recall

$$G_r[u,u'] = - < TA_r(u)A_r^\dagger(u') > \tag{1}$$

$u > u^{'}$ と仮定すると

$$\begin{aligned} G_r[u,u'] &= \mathrm{tr}(e^{-\beta\mathscr{H}}A_r(u)A_r^\dagger(u'))/\mathrm{tr}(e^{-\beta\mathscr{H}}) \\ &= \mathrm{tr}(e^{-\beta\mathscr{H}}A_r(u)A_r^\dagger(u'))/Z_{G0} < U(\beta) >_0 \end{aligned}$$

分子について

$$\mathrm{tr}(e^{-\beta\mathscr{H}}A_r(u)A_r^\dagger(u')) = \mathrm{tr}(e^{-\beta\mathscr{H}_0}U(\beta,u)a_r(u)U(u,u^{'})a_r^\dagger(u')U(u^{'},0))$$

$$= \mathrm{tr}\left(e^{-\beta\mathscr{H}_0}T\left[\exp\left\{-\int_0^\beta H^{'}(u_1)du_1\right\}a_r(u)a_r^\dagger(u^{'})\right]\right) \tag{27}$$

グリーン関数

$$G_r[u,u^{'}] = -\frac{\left\langle T\left[\exp\left\{-\int_0^\beta H^{'}(u_1)du_1\right\}a_r(u)a_r^\dagger(u^{'})\right]\right\rangle_0}{\left\langle T\left[\exp\left\{-\int_0^\beta H^{\prime}(u_1)du_1\right\}\right]\right\rangle_0} \tag{28}$$

この結果は $u > u^{'}$ と同様に $u < u^{'}$ でも成立する
記号的に次のような表記もする

$$G_r[u,u^{'}] = \frac{-\left\langle TU(\beta)a_r(u)a_r^\dagger(u^{'})\right\rangle_0}{\langle U(\beta)\rangle_0} \tag{29}$$

グリーン関数はフーリエの形で次のようになる

$$G_r[u,u^{'}] = \frac{1}{\beta}\sum_l G_r(i\omega_l)e^{-i\omega_l(u-u^{'})} \tag{4}$$

この時の $G_r(i\omega)$ はどのようにに求めるのか?

↓

次のページの順序に従うと計算可能!

計算手順

1. 外線とつながった n 次のすべての可能なファインマン図形を描く
2. そのような図形に次の式を当てはめる

$$\frac{(-1)^n(-1)^{n_l}}{n!(2\beta V)^n}\prod_{i=1}^{n}(r_is_i|v|r_i's_i')$$

3. r, l の電子線に次の式を対応させる

$$g_r(i\omega_l) = (i\omega_l - \varepsilon_r)^{-1}$$

同時刻の場合は

$$(i\omega_l - \varepsilon_r)^{-1}\exp(i\omega_l 0)$$

4. エネルギー保存則を考慮する

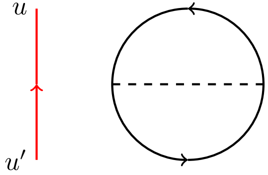
$$\omega_{l_1} + \omega_{l_2} = \omega_{l_3} + \omega_{l_4}$$

5. 外線の r,l は固定し, 他の変数に関して和をとる

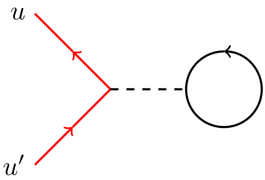
外線

外線とは

u' から出ている線, 及び u に入る線



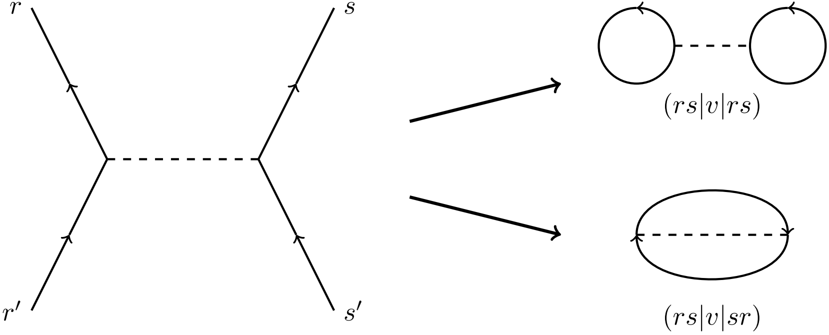
つながらない図形



つながった図形

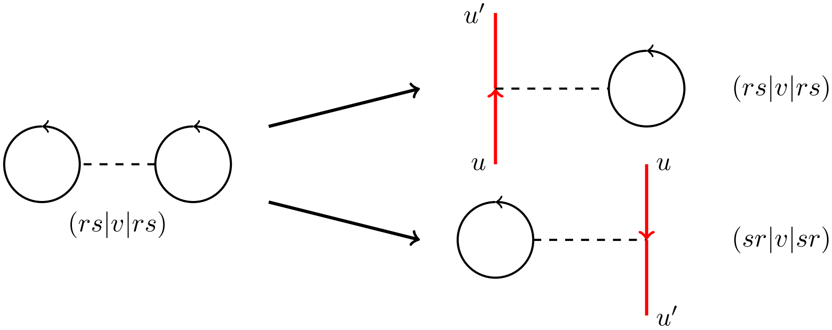
例:1 次でのファインマン図

図 8.2 より一次のファインマン図は次の二通り



例:1 次でのファインマン図

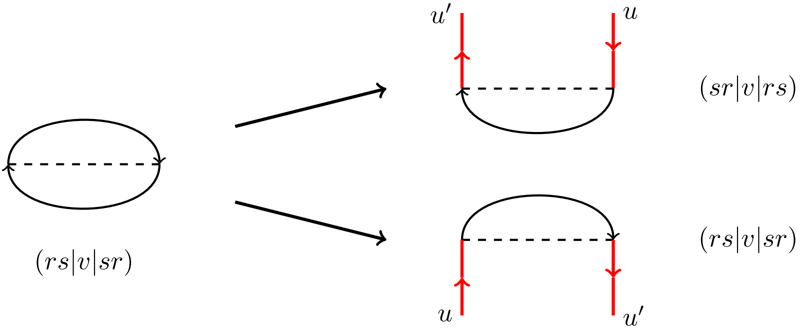
片方の線を外線と結ぶように開く



閉じた図形の数は $n_l = 1$

例:1 次でのファインマン図

片方の線を外線と結ぶように開く



閉じた図形の数は $n_l = 0$

計算手順 (Remind)

1. 外線とつながった n 次のすべての可能なファインマン図形を描く
2. そのような図形に次の式を当てはめる

$$\frac{(-1)^n(-1)^{n_l}}{n!(2\beta V)^n}\prod_{i=1}^{n}(r_i s_i|v|r_i' s_i')$$

3. r, l の電子線に次の式を対応させる

$$g_r(i\omega_l) = (i\omega_l - \varepsilon_r)^{-1}$$

同時刻の場合は

$$(i\omega_l - \varepsilon_r)^{-1}\exp(i\omega_l 0)$$

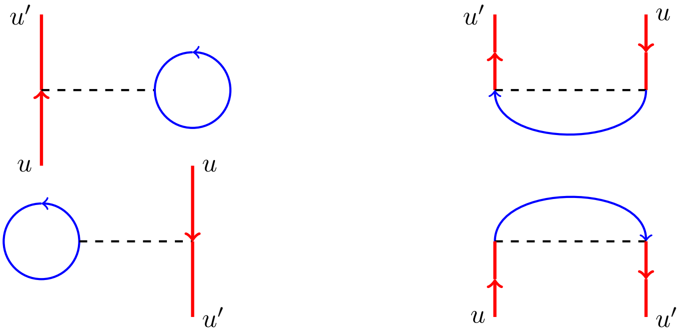
→ どの図形が当てはまる?

4. エネルギー保存則を考慮する

$$\omega_{l_1} + \omega_{l_2} = \omega_{l_3} + \omega_{l_4}$$

5. 外線の r,l は固定し, 他の変数に関して和をとる

図形と式の当てはめ方



: $(i\omega_l - \varepsilon_r)^{-1}$

: $(i\omega_l - \varepsilon_r)^{-1} \exp(i\omega_l 0)$

この手順に従った結果が次の通り

$G_r(i\omega_l)$ の 1 次の寄与

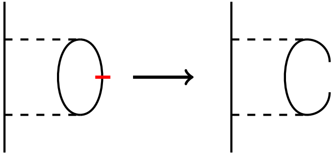
$$\frac{1}{2\beta V}\frac{1}{(i\omega_l-\varepsilon_r)^2}\sum_{sm}[(rs|v|rs)+(sr|v|sr) \\ -(rs|v|sr)-(sr|v|rs)]\frac{\exp(i\omega_m 0)}{i\omega_m-\varepsilon_s} \tag{47}$$

この方法を $n=2,3,\cdots$ と次数を増やした場合でも計算していくことで, $G_r(i\omega_l)$ を求めることが可能

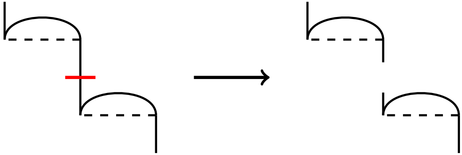
自己エネルギー

固有 (proper) な図形を描いたときの,
外線以外の部分を**自己エネルギー部分**といい
自己エネルギー部分からのグリーン関数への寄与を
自己エネルギー $(\Sigma_r(i\omega_l))$ と書く

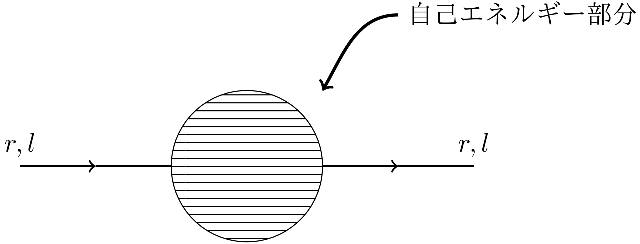
- 固有 (proper): 分裂しないとき



- 非固有 (improper): 分裂するとき



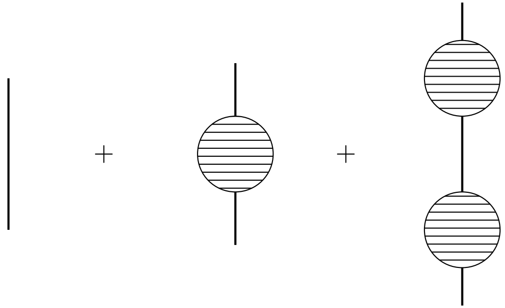
自己エネルギーを用いると,



上のファインマン図形は次のように表される

$$\frac{1}{(i\omega_l - \varepsilon_r)^2}\Sigma_r(i\omega_l) \tag{49}$$

一般的に自己エネルギー部分を含む図形の和で, グリーン関数を計算することができる



$$\Leftrightarrow G_r(i\omega_l) = g_r(i\omega_l) + g_r^2(i\omega_l)\Sigma_r(i\omega_l) + g_r^3(i\omega_l)\Sigma_r^2(i\omega_l) + \cdots$$
$$= \frac{1}{i\omega_l - \varepsilon_r - \Sigma_r(i\omega_l)} \tag{50}$$

準粒子のエネルギー

$$z - \varepsilon_r - \Sigma_r(z) = 0 \tag{51a}$$

電子ガスの低温比熱は

$$\frac{m}{m_t} = 1 - \frac{\alpha r_s}{\pi}\left(1 + \frac{1}{2}\ln\frac{\alpha r_s}{\pi}\right) \tag{67}$$

··· クーロン相互作用は電子比熱に数パーセントの補正を与える

リング近似との関係

リング近似を用いたときの Ω' を算出すると

$$\begin{aligned}\Omega' &= \frac{1}{2\beta}\sum_{qn}\int_0^1\left[\frac{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{\Pi}_n(\boldsymbol{q})}{1+g\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{\Pi}_n(\boldsymbol{q})-\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{\Pi}_n(\boldsymbol{q})}\right]dg \\ &= \frac{1}{2\beta}\sum_{qn}\left[\ln\left\{1+\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{\Pi}_n(\boldsymbol{q})\right\}-\boldsymbol{v}(\boldsymbol{q})\boldsymbol{\Pi}_n(\boldsymbol{q})\right] \end{aligned} \tag{71}$$