

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

- ① T 指数関数および T 記号の性質
- ② グリーン関数に対する表式
- ③ グリーン関数に対するファインマン図形
- ④ 自己エネルギー (self-energy)
- ⑤ 電子ガスへの応用

復習

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

1 体のグリーン関数

$$G_r[u, u'] = - \langle T A_r(u) A_r^\dagger(u') \rangle \quad (1)$$

- 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
- $\langle X \rangle$ は演算子 X の大正準集団に対する平均

$$\langle X \rangle = \text{tr}(X e^{-\beta \mathcal{H}}) / \text{tr}(e^{-\beta \mathcal{H}}) \quad (3)$$

復習

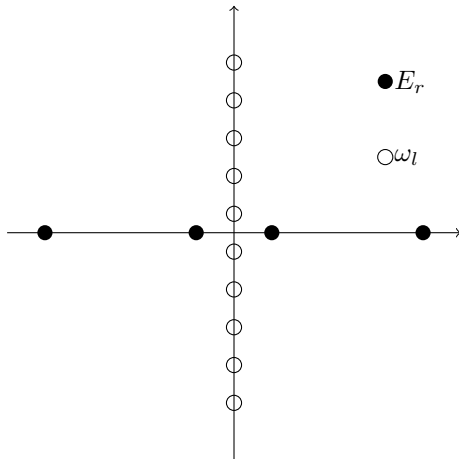
u に対して ω という量を定義することで, フーリエ級数展開を行える.

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

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.

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

復習



- 1 T 指数関数および T 記号の性質
- 2 グリーン関数に対する表式
- 3 グリーン関数に対するファインマン図形
- 4 自己エネルギー (self-energy)
- 5 電子ガスへの応用

$U(\beta)$ は次のように決まる

$$e^{-\beta\mathcal{H}} = e^{-\beta\mathcal{H}_0}U(\beta) \quad (7)$$

(8.22) により, $U(\beta)$ は摂動展開した形になる

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

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

$$T[C(1), C(2)] = P[C(2), C(1)] \quad (16)$$

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

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

- ① T 指数関数および T 記号の性質
- ② グリーン関数に対する表式
- ③ グリーン関数に対するファインマン図形
- ④ 自己エネルギー (self-energy)
- ⑤ 電子ガスへの応用

$U^{-1}(u)$ を次のように定める

$$(e^{-u\mathcal{H}})^{-1} = (e^{-u\mathcal{H}_0}U(u))^{-1} = U^{-1}(u)e^{u\mathcal{H}_0} \quad (18)$$

これを用いて次の表記を定義する

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

以降, a_r に対して

- $a_r(u) = e^{u\mathcal{H}_0} a_r e^{-u\mathcal{H}_0}$: 相互作用表示
- $A_r(u) = e^{u\mathcal{H}} a_r e^{-u\mathcal{H}}$: 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

$$G_r[u, u'] = - \langle T A_r(u) A_r^\dagger(u') \rangle \quad (1)$$

$u > u'$ と仮定すると

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

分子について

$$\begin{aligned}
 \text{tr}(e^{-\beta \mathcal{H}} A_r(u) A_r^\dagger(u')) &= \text{tr}(e^{-\beta \mathcal{H}_0} U(\beta, u) a_r(u) U(u, u') a_r^\dagger(u') U(u', 0)) \\
 &= \text{tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}_0} T \left[\exp \left\{ - \int_0^\beta H'(u_1) du_1 \right\} a_r(u) a_r^\dagger(u') \right] \right) \quad (27)
 \end{aligned}$$

グリーン関数

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

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

$$G_r[u, u'] = \frac{- \left\langle T U(\beta) a_r(u) a_r^\dagger(u') \right\rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} \quad (29)$$

- 1 T 指数関数および T 記号の性質
- 2 グリーン関数に対する表式
- 3 グリーン関数に対するファインマン図形
- 4 自己エネルギー (self-energy)
- 5 電子ガスへの応用

グリーン関数はフーリエの形で次のようになる

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

この時の $G_r(i\omega)$ はどのように求めるのか?



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

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

- 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

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

- ④ エネルギー保存則を考慮する

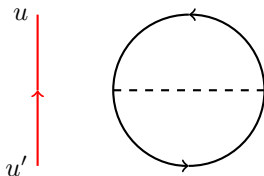
$$\omega_{l_1} + \omega_{l_2} = \omega_{l_3} + \omega_{l_4}$$

- ⑤ 外線の r, l は固定し, 他の変数に関して和をとる

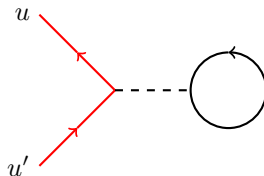
外線

外線とは

u' から出ている線, 及び u に入る線



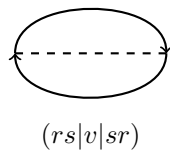
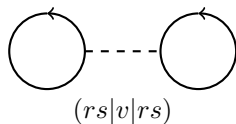
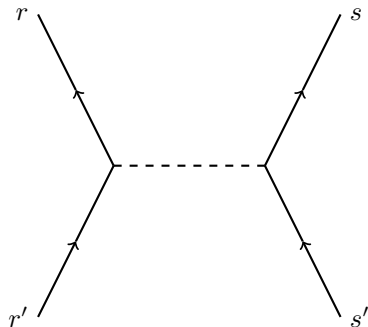
つながらない図形



つながった図形

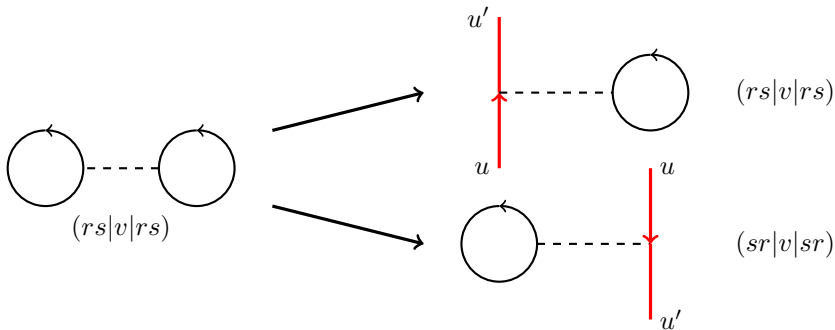
例:1 次でのファインマン図

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

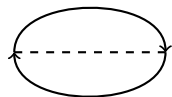
片方の線を外線と結ぶように開く



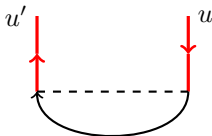
閉じた図形の数 $n_l = 1$

例:1 次でのファインマン図

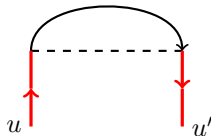
片方の線を外線と結ぶように開く



$$(rs|v|sr)$$



$$(sr|v|rs)$$



$$(rs|v|sr)$$

閉じた図形の数 $n_l = 0$

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

$G_r(i\omega_l)$ の1次の寄与

- 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

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

同時刻の場合は

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

→ 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

1 次でのファインマン図

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

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

この方法を $n = 2, 3, \dots$ 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

- ① T 指数関数および T 記号の性質
- ② グリーン関数に対する表式
- ③ グリーン関数に対するファインマン図形
- ④ 自己エネルギー (self-energy)
- ⑤ 電子ガスへの応用

hello

- ① T 指数関数および T 記号の性質
- ② グリーン関数に対する表式
- ③ グリーン関数に対するファインマン図形
- ④ 自己エネルギー (self-energy)
- ⑤ 電子ガスへの応用

hello