

# 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  $\Omega$  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

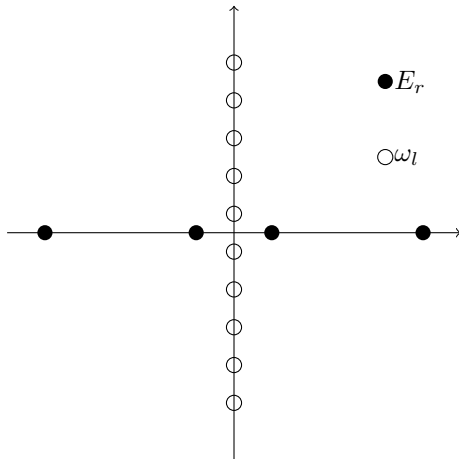
$u$  に対して  $\omega$  という量を定義することで, フーリエ級数展開を行える.

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

フェルミ粒子であれば,  $\omega_l$  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

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

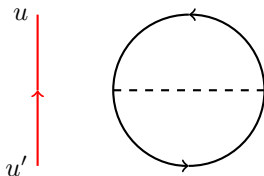
- ⑤ 外線の  $r, l$  は固定し、他の変数に関して和をとる



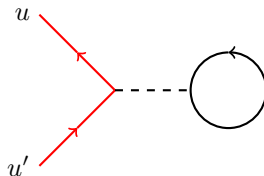
# 外線

## 外線とは

$u'$  から出ている線, 及び  $u$  に入る線



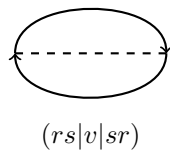
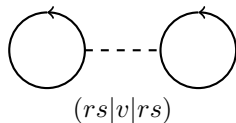
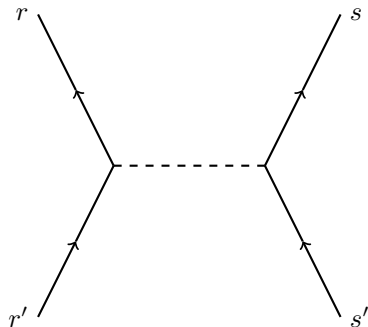
つながらない図形



つながった図形

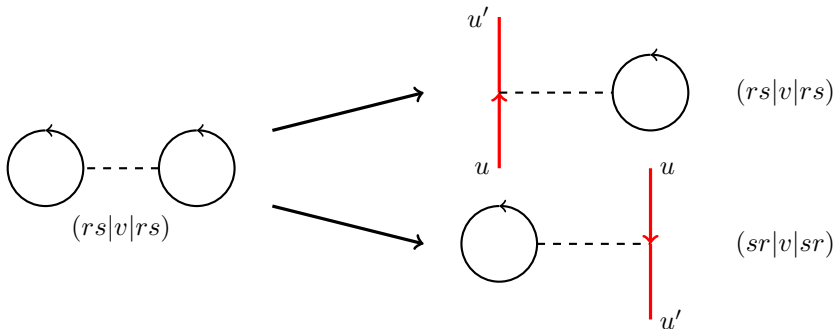
## 例:1 次でのファインマン図

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

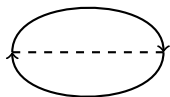
片方の線を外線と結ぶように開く



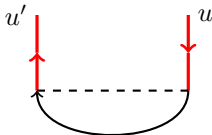
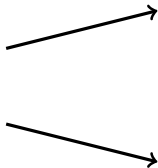
閉じた図形の数  $n_l = 1$

## 例:1 次でのファインマン図

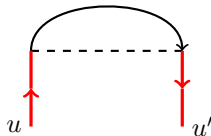
片方の線を外線と結ぶように開く



$$(rs|v|sr)$$



$$(sr|v|rs)$$



$$(rs|v|sr)$$

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

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

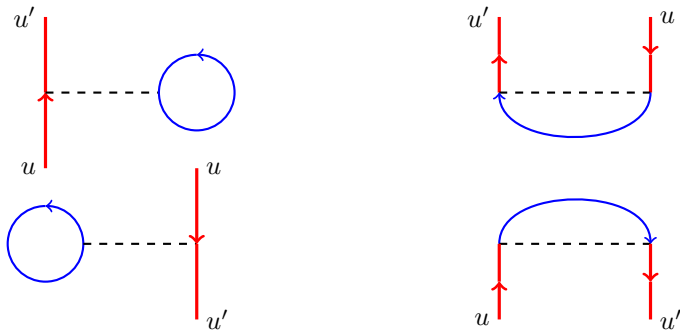
→ どの図形が当てはまる?

- 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

# 図形と式の当てはめ方



$$\begin{aligned}
 \text{Red line with arrow} &: (i\omega_l - \varepsilon_r)^{-1} \\
 \text{Blue line with arrow} &: (i\omega_l - \varepsilon_r)^{-1} \exp(i\omega_l 0)
 \end{aligned}$$

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

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

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