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

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

- 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

$$\langle X \rangle = \operatorname{tr}(Xe^{-\beta\mathscr{H}})/\operatorname{tr}(e^{-\beta\mathscr{H}})$$
 (3)

復習

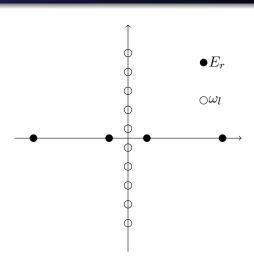
u に対して ω という量を定義することで, フーリエ級数展開を行える.

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

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

復習



- 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

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

(8.22) により, $U(\beta)$ は摂動展開した形になる

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

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

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

T 指数関数および T 記号の性質

 $U^{-1}(u)$ を次のように定める

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

これを用いて次の表記を定義する

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

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

u > u' と仮定すると

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

分子について

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

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

T 指数関数および T 記号の性質

ーン関数

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

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

- 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

計算手順

- **lacktriangle** 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

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

■ エネルギー保存則を考慮する

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

 \bullet 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

- 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

- 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