大学院：固体物理１

内容

1. 結晶の周期性と電子の振舞い
2. 多電子波動関数とハートレー・フォック近似
3. 温度グリーン関数
4. 電子ガス
5. 密度汎関数理論
6. フェルミ液体
7. 電子相関
8. 金属・絶縁体転移

http://fujimac.t.u-tokyo.ac.jp/FujiwaraLab/index-j.html

このページから、講義資料などがダウンロードできる．

３．温度グリーン関数

量子統計力学と温度グリーン関数

熱力学ポテンシャルΩ

$$Z = \exp(-\beta\Omega) = \mathrm{Tr} e^{-\beta H}$$

自由エネルギー

$$F = \Omega + \mu N$$

$$H = H_0 + H_1$$

量子統計力学と温度グリーン関数 2.

$$Z = \exp(-\beta\Omega) = \mathrm{Tr} e^{-\beta H} = \mathrm{Tr} e^{-\beta H_0} S(\beta, 0)$$

$$S(\beta, 0) = e^{\beta H_0} e^{-\beta H}$$

S 行列

$$S(\tau, \tau') \equiv U(\tau) U(\tau')^{-1}$$
$$U(\tau) = e^{\tau H_0} e^{-\tau H}$$

$$\begin{aligned} -\frac{\partial U(\tau)}{\partial \tau} &= e^{H_0 \tau} H_1 e^{-H_0 \tau} U(\tau) \equiv H_1(\tau) U(\tau) \\ -\frac{\partial S(\tau, \tau')}{\partial \tau} &= H_1(\tau) S(\tau, \tau') \end{aligned}$$

S 行列

$$S(\tau,\tau)=1$$

$$\begin{aligned}
S(\tau,\tau') &= 1-\int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 H_1(\tau_1) S(\tau_1,\tau') \\
&= 1-\int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 H_1(\tau_1)+\int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau'}^{\tau_1} d\tau_2 H_1(\tau_1) H_1(\tau_2)+\cdots \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \cdots \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_n T_\tau [H_1(\tau_1)\cdots H_1(\tau_n)] \\
&\equiv T_\tau \exp\left[-\int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 H_1(\tau_1)\right]
\end{aligned}$$

$$\langle A\rangle_0 \equiv e^{\beta\Omega_0}\mathrm{Tr} e^{-\beta H_0} A$$

$$Z=e^{-\beta\Omega_0}\langle T_\tau \exp\left[-\int_0^\beta d\tau H_1(\tau)\right]\rangle_0$$

$$\Rightarrow \quad \Omega \quad \Rightarrow \quad F$$

Bloch= de Dominicis の定理 1

A_i は生成消滅演算子 a_i または $a_i^\dagger$

仮定 ： $A_iA_j + A_jA_i = (ij)$ ， (ij) は $c-$ 数

$$
\begin{aligned}
&\langle A_1A_2\cdots A_{2n}\rangle_0 \\
&= (12)\langle A_3\cdots A_{2n}\rangle_0 - \langle A_2A_1A_3\cdots A_{2n}\rangle_0 \\
&= (12)\langle A_3\cdots A_{2n}\rangle_0 - (13)\langle A_2A_4\cdots A_{2n}\rangle_0 + \langle A_2A_3A_1\cdots A_{2n}\rangle_0 \\
&= \cdots \\
&= (12)\langle A_3\cdots A_{2n}\rangle_0 - (13)\langle A_2A_4\cdots A_{2n}\rangle_0 + \cdots \\
&\qquad +(1,2n)\langle A_2A_3A_4\cdots A_{2n-1}\rangle_0 - \langle A_2A_3A_4\cdots A_{2n}A_1\rangle_0
\end{aligned}
$$

Bloch= de Dominicis の定理 2

$$
\begin{aligned}
\langle A_2 A_3 \cdots A_{2n} A_1 \rangle &= \frac{\mathrm{Tr} A_2 \cdots A_{2n} A_1 e^{-\beta H_0}}{\mathrm{Tr} e^{-\beta H_0}} \\
&= \frac{\mathrm{Tr}(A_2 \cdots A_{2n} e^{-\beta H_0} A_1) e^{\mp \beta \varepsilon_1}}{\mathrm{Tr} e^{-\beta H_0}}
\end{aligned}
$$

$$
\langle A_2 \cdots A_{2n} A_1 \rangle_0 = \langle A_1 A_2 \cdots A_{2n} \rangle_0 e^{-\beta H_0}
$$

$$
\begin{aligned}
&(1 + e^{\mp \beta \varepsilon_1}) \langle A_1 A_2 \cdots A_{2n} \rangle_0 \\
&= (12) \langle A_3 \cdots A_{2n} \rangle_0 - (13) \langle A_2 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \cdots \\
&\quad + (1, 2n) \langle A_2 A_3 A_4 \cdots A_{2n-1} \rangle_0
\end{aligned}
$$

Bloch= de Dominicis の定理 3

$$\frac{(12)}{1+e^{\mp\beta\varepsilon_1}} = \langle A_1 A_2\rangle_0$$

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

$$\begin{aligned}
&\langle A_1 A_2 \cdots A_{2n}\rangle_0 \\
&= \sum_P (-1)^{\delta(P)} \langle A_{i_1} A_{i_2}\rangle_0 \langle A_{i_3} A_{i_4}\rangle_0 \cdots \langle A_{i_{2n-1}} A_{i_{2n}}\rangle_0
\end{aligned}$$

熱力学ポテンシャルに対する摂動展開

Bloch = de Dominicis の定理および各項に対する図形的考察により (参考文献：阿部龍蔵 「統計力学」（東大出版会））)

$$H_1 = \frac{1}{2V}\sum_{rsr's'}\langle rs|v|r's'\rangle a_r^\dagger a_s^\dagger a_{s'} a_{r'}$$

$$\langle rs|v|r's'\rangle = \sum_{\sigma\sigma'}\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\phi_r^*(\xi)\psi_s^*(\xi')v(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\phi_{r'}(\xi)\psi_{s'}(\xi')$$

$$\begin{aligned}\Omega - \Omega_0 \;&=\; \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{\beta n!(2V)^n}\sum_{\text{connected diagram}}(-1)^{n_c}\Pi_{i=1}^{n}\langle r_i s_i|v|r_i' s_i'\rangle \\ &\quad\times\int_0^\beta \Pi\{-\langle T_\tau a_r(u)a_r^\dagger(u')\rangle\}du_1 du_2\cdots du_n\end{aligned}$$

n_c:closed loop

$$G_{rs}(u,u') = -\langle T_\tau a_r(u)a_s^\dagger(u')\rangle = \begin{cases} -\langle a_r(u)a_s^\dagger(u')\rangle & (u>u') \\ \langle a_s^\dagger(u')a_r(u)\rangle & (u<u')\end{cases}$$

温度グリーン関数／松原グリーン関数 (Fermion case) 1

original defined region $0 \le \tau,\ \tau' \le \beta$:

$$G_{rs}(\tau,\tau') = -\langle T_\tau a_r(\tau) a_s^\dagger(\tau')\rangle = G_{rs}(\tau-\tau')$$
$$-\beta \le \tau,\ \tau' \le \beta$$

$$G_{rs}(\tau-\tau'+2\beta) \equiv G_{rs}(\tau-\tau')$$

$-e^{-\beta E} f(-E) = f(E)\ :\ f(E) = 1/(1+e^{\beta E})$ を用いると

$$G_{rs}(\tau-\tau'+\beta) = -G_{rs}(\tau-\tau')$$

$$\begin{aligned} G_{rs}(\tau) &= \frac{1}{\beta}\sum_n G_{rs}(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \\ \omega_n &= \frac{\pi(2n+1)}{\beta}\ :\ \text{Matsubara frequency} \end{aligned}$$

温度グリーン関数／松原グリーン関数 (Fermion case) 2

$$G_{rs}(i\omega_n) \underset{|i\omega_n|\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{i\omega_n}\delta_{rs}$$

Dyson equation

$$\begin{aligned} G &= G^{(0)} + G^{(0)}\Sigma G^{(0)} + G^{(0)}\Sigma G^{(0)}\Sigma G^{(0)} + \cdots \\ &= G^{(0)} + G^{(0)}\Sigma G \end{aligned}$$

２時間グリーン関数 (Fermion case)

$$
\begin{aligned}
A(t) &= e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} \\
\langle \cdots \rangle &= \mathrm{Tr}\{\cdots e^{\beta(\Omega - H)}\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
G^{C}_{AB}(t,t') &= -\frac{i}{\hbar}\langle T_t A(t) B(t')\rangle, \\
G^{R}_{AB}(t,t') &= -\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\langle A(t)B(t') \mp B(t')A(t)\rangle, \\
G^{A}_{AB}(t,t') &= -\frac{i}{\hbar}\theta(t'-t)\langle A(t)B(t') \mp B(t')A(t)\rangle.
\end{aligned}
$$

$$
G^{C/R/A}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G^{C/R/A}(t) e^{i\omega t}
$$

$G^R(\omega) = G(\hbar\omega + i\delta) \Leftarrow G(i\omega_n)$ 温度グリーン関数から解析接続

温度グリーン関数 $\Longrightarrow$ 熱力学、エネルギースペクトル（２時間グリーン関数）