Green 関数のエネルギー－運動量表示と準粒子描像

永井佑紀

平成 19 年 10 月 18 日

フェルミ粒子の Green 関数をエネルギー－運動量表示することで、低エネルギー領域でよく成り立つ準粒子描像についての理解を深めることがこのノートの目的である。

1 Green 関数のエネルギー－運動量表示：自由粒子の場合

1.1 Green 関数

並進対称性を持つ系におけるフェルミ粒子の非摂動 Green 関数を

$$G_0(x-x') \equiv i\langle T[\Psi^\dagger(x)\Psi(x')]\rangle \tag{1}$$

と定義する[1]。ここで、x は座標と時間を含む。相互作用表示における場の演算子 $\Psi(x)$ は相互作用表示において

$$\Psi(x) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\epsilon(\mathbf{k})t} b_{\mathbf{k}} \tag{2}$$

と書ける。ここで、$b_{\mathbf{k}}$ は波数 $\mathbf{k}$ の粒子の消滅演算子であり、$\langle\cdots\rangle$ は非摂動ハミルトニアンによる期待値を取ることを意味する。なお、生成消滅させる波動関数の基本関数系としては、自由空間では波数 $\mathbf{k}$ の平面波、完全結晶中の電子の場合は波数 $\mathbf{k}$ のブロッホ関数（Bloch function）がよく用いられる[2]。また、エネルギーはフェルミエネルギー $\epsilon_{\rm F}$ から測ることにする。基底状態においてフェルミ球を作っており、フェルミエネルギー以上のエネルギーを持つ粒子の生成消滅演算子であれば、消滅演算子が右側にある場合は値はゼロになる。したがって、時間順序積を用いないで書くと

$$\begin{aligned} G_0(x-x') &= i\langle[\theta(t-t')\Psi^\dagger(x)\Psi(x') - \theta(t'-t)\Psi(x')\Psi^\dagger(x)]\rangle && (3)\\ &= -i\theta(t'-t)\langle\Psi(x')\Psi^\dagger(x)\rangle && (4)\\ &= -i\theta(t'-t)\langle\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'-\mathbf{k}\mathbf{r})} e^{-i(\epsilon(\mathbf{k}')t'-\epsilon(\mathbf{k})t)} b_{\mathbf{k}'} b^\dagger_{\mathbf{k}}\rangle && (5)\\ &= -i\theta(t'-t)\sum_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{i(\epsilon(\mathbf{k})(t-t')} && (6) \end{aligned}$$

となる。ここで $T = t'-t$ と置くと $G_0(x-x')$ のフーリエ変換である $G_0(\mathbf{k},\epsilon)$：

$$G_0(\mathbf{k},\epsilon) = -i\theta(T)e^{-i\epsilon(\mathbf{k})T} \tag{7}$$

を得る。この上式にはまだ時間 T が残っている。これをさらにフーリエ変換した「エネルギー－運動量表示」の Green 関数が欲しい。そこで、上式の性質を持つ関数の解析的な表現を考えてみる。これは複素積分を考えることで得られる。つまり、

$$G_0(\mathbf{k},\epsilon) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\Omega T}}{\Omega-\epsilon(\mathbf{k})+i\delta} d\Omega \tag{8}$$

[1] 符号は教科書によって異なる。今回は参考にしたザイマン「現代量子論の基礎」と同じにした。
[2] 一般的には完全規格直交系であればよい。

とすればよい。ここで δ は無限小の正数である。この複素積分は

$$G_0(\mathbf{k},\epsilon) = \frac{1}{2\pi}\int_C \frac{\exp[-i\mathrm{Re}\,\Omega T + \mathrm{Im}\,\Omega T]}{\Omega - \epsilon(\mathbf{k}) + i\delta} d\Omega \tag{9}$$

と書け、極は $\Omega = \epsilon(\mathbf{k}) - i\delta$ にあり、コーシーの積分公式を使えば積分できる。$T < 0$ のとき、積分経路 C は複素平面の上半平面を取ればよく[3]、その場合はゼロとなる。$T > 0$ のとき、積分経路 C は複素平面の下半平面を取り、留数定理から $-i\exp(-i\epsilon(\mathbf{k})T)$ となる。

ここで、Green 関数 $G(x-x') = G(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t-t') = G(\boldsymbol{R}, T)$ の時間と空間に関するフーリエ変換を

$$G(\mathbf{k},\omega) \equiv \int\int G(\boldsymbol{R},T)e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{R}}e^{-i\omega T}d^3RdT \tag{10}$$

と定義する。一方、式 (6) と式 (8) を用いれば $G_0(\boldsymbol{R},T)$ は

$$G_0(\boldsymbol{R},T) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int\int \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{R}}e^{-i\Omega T}}{\Omega - \epsilon(\mathbf{k}) + i\delta} d^3k d\Omega \tag{11}$$

と書ける[4]。以上から、自由粒子 Green 関数のエネルギー－運動量表示は

$$G_0(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon(\mathbf{k}) + i\delta} \tag{12}$$

となる。$\epsilon(\mathbf{k})$ は電子の励起エネルギーなので、この関数は電子の励起エネルギーに関係する量である。これは、式 (5) を見ればわかるように、$b^\dagger_{\mathbf{k}}$ により基底状態から波数 $\mathbf{k}$ の電子が生成し、$b_{\mathbf{k}}$ で消える。また、状態密度との関係を見ることで理解しやすくなる。

1.2 状態密度と Green 関数

得られた Green 関数で物理量を表現してみることにしよう。ここでは、例として状態密度を考える。状態密度 $\rho(\epsilon)$ は

$$\rho(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) \tag{13}$$

と書くことができる。ここで $\epsilon_{\mathbf{k}}$ は波数 $\mathbf{k}$ で特徴付けられる系の固有値である。この表現は物理的には以下のように考えることができる。簡単のため有限系を考えると系のエネルギー準位は離散的であり、固有値は $\epsilon_{\mathbf{k}_n}$ で与えられるとする。このとき状態密度は「密度」であるから、$\epsilon = \epsilon_{\mathbf{k}_n}$ において無限大になっている。フェルミ粒子であればフェルミ球をなすので、エネルギーの低い順から状態がつまっており、このときの粒子数 N は

$$N = \int_0^{\epsilon_{\mathrm{F}}} \rho(\epsilon)d\epsilon \tag{14}$$

と書ける。よって、被積分関数にデルタ関数があるのは準位の数を数えていることと等しい。

さて、ここで

$$\lim_{\delta\to 0}\frac{1}{x+i\delta} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x) \tag{15}$$

という公式を用いて状態密度と Green 関数を関係付けることにする。ここで $\mathcal{P}$ は「主値」を表す。よって、自由粒子の Green 関数では

$$\mathrm{Im}\,G_0(\mathbf{k},\omega) = -\pi\delta(\omega - \epsilon(\mathbf{k})) \tag{16}$$

という関係が成り立ち、状態密度は

$$\rho(\epsilon) = -\frac{1}{\pi}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{Im}\,G_0(\mathbf{k},\epsilon) \tag{17}$$

と書ける。

[3] 半円部からの寄与が半径 $R \to \infty$ で消えるように積分路を選ぶ。
[4] $1/(2\pi)^3$ の因子は和を積分に直したことによる。

1.3　物理量の期待値と Green 関数

ある波数 $\mathbf{k}$ の粒子数の期待値 $n_{\mathbf{k}}$ は

$$n_{\mathbf{k}} = \langle | b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} | \rangle \tag{18}$$

と書ける[5]。よって、Green 関数を用いて書くと

$$n_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\epsilon_{\mathrm{F}}}^{0} \mathrm{Im}\, G_0(\mathbf{k}, \epsilon) \tag{19}$$

となる。

2　相互作用する系の場合

2.1　準粒子励起と寿命

相互作用する系の場合、エネルギーー運動量表示がどのような形になるかは自明ではない。そこで、相互作用する系における Green 関数が

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{\omega - \mathcal{E}(\omega, \mathbf{k}) + i\delta} \tag{20}$$

と書けたとする。

もし、$\mathcal{E}(\omega, \mathbf{k})$ が実関数であれば、これは何らかの励起された粒子のエネルギーに相当していることは、相互作用のない系の Green 関数からの類推で理解できる。したがって、この Green 関数は基底状態からの励起を表しており、その励起は何らかの生成演算子によって書けるだろう。この励起によって生じる粒子は、実際の粒子とは異なるので、準粒子と呼ばれる。

また、$\mathcal{E}(\omega, \mathbf{k}) = E(\omega, \mathbf{k}) - i\Gamma(\omega, \mathbf{k})$ と書けたとする。このとき、

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \frac{A(\omega, \mathbf{k})}{\omega - E(\omega, \mathbf{k}) + i\Gamma(\omega, \mathbf{k})} \tag{21}$$

と書けていたとして[6]、これを時間に対してフーリエ変換した「運動量ー時刻表示」の Green 関数は

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, t) &= \frac{1}{2\pi} \int G(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega && (22) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(\omega, \mathbf{k})}{\omega - E(\omega, \mathbf{k}) + i\Gamma(\omega, \mathbf{k})} e^{-i\omega t} d\omega && (23) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(\mathbf{k})}{\omega - E(\omega, \mathbf{k}) + i\Gamma(\omega, \mathbf{k})} e^{-i\mathrm{Re}\,\omega t + \mathrm{Im}\,\omega t} d\omega && (24) \end{aligned}$$

となる。$t < 0$ のとき、積分は上半平面を取ることができ、留数が無いので値はゼロである。$t > 0$ のとき、下半平面が積分範囲であり、留数を取ればよい。よって、

$$G(\mathbf{k}, t) = iA(\omega, \mathbf{k}) e^{-iE(\omega, \mathbf{k})t} e^{-\Gamma(\omega, \mathbf{k})t} \theta(t) \tag{25}$$

となる。Green 関数はある時刻 $t = 0$ において生成された粒子が時刻 t においてどの程度存在しているかを意味する「伝播関数」でもあるので、$t = 0$ で励起された準粒子は Γ^{-1} 程度の時定数で減衰してしまうことそ意味している。これはつまり準粒子の寿命を表している。

[5]基底状態をフェルミ球としたので、フェルミエネルギー以下のエネルギーを持つ粒子の消滅演算子を基底状態に作用させてもゼロにはならない。これは基底状態から測って考えると正孔的励起に相当している。正孔的励起を考える場合は、前節の議論はそのまま成り立たないが、同様の議論を行うことで Green 関数のエネルギーー運動量表示を得ることができる。

[6]δ は無限小の正数なので、有限の虚部があるときは先に $\delta \to 0$ として差し支えない。

2.2　自己エネルギーと Dyson 方程式

この準粒子描像が良く成り立つのは、無摂動状態の励起エネルギー $\epsilon(\mathbf{k})$ と $\mathcal{E}(\omega,\mathbf{k})$ の差 $\Sigma(\omega,\mathbf{k})$ が十分に小さく、$\Sigma(\omega,\mathbf{k})$ が $\epsilon(\mathbf{k})$ に対する摂動と見なせる場合である[7]。このとき式 (27) は

$$G(\omega,\mathbf{k}) = \frac{1}{\omega - \epsilon(\mathbf{k}) + \Sigma(\omega,\mathbf{k}) + i\delta} \tag{26}$$

と書けるので、無摂動 Green 関数 $G_0(\omega,\mathbf{k}) = (\omega - \epsilon(\mathbf{k}) + i\delta)^{-1}$ を用いて書き直せば

$$G(\omega,\mathbf{k}) = \frac{1}{G_0(\omega,\mathbf{k})^{-1} + \Sigma(\omega,\mathbf{k})} \tag{27}$$

となり、

$$G(\omega,\mathbf{k}) = G_0(\omega,\mathbf{k}) + G_0(\omega,\mathbf{k})\Sigma(\omega,\mathbf{k})G(\omega,\mathbf{k}) \tag{28}$$

という方程式が得られる。これが Dyson 方程式である。このとき $\Sigma(\omega,\mathbf{k})$ は自己エネルギーと呼ばれる。

ファインマンダイヤグラムを用いた際にこの Dyson 方程式が現れる。ファインマンダイヤグラムはそもそもある無摂動状態が存在した上でそれに摂動を加えていった場合の計算方法であるから、今回得られた方程式と同じ方程式になるのである。

参考文献

J. M. ザイマン「現代量子論の基礎」　丸善プラネット株式会社

A. M. ザゴスキン「多体系の量子論＜技法と応用＞」　シュプリンガー・フェアラーク東京

[7] 虚部 Γ が大きすぎる場合、急速に減衰する準粒子というのはもはや安定な準粒子ではないという事情もある。