経路積分表示 part 3：Green 関数

永井佑紀

平成 19 年 10 月 29 日

経路積分表示 part3 では、経路積分表示と温度 Green 関数の間の関係についてまとめる。このノートではフェルミオン系を扱う。

1 Green 関数

1.1 物理量の計算

以前のノート[1]に既出だが、ここでおさらいをしておく。有限温度において、物理量 A の期待値は

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\left[\rho A_{\mathrm{H}}\right] \tag{1}$$

と表すことができる。ここで、

$$\rho \equiv \frac{\exp\{-\beta(H-\mu N)\}}{\mathcal{Z}} \tag{2}$$

$$\mathcal{Z} \equiv \mathrm{Tr}\left[\exp\{-\beta(H-\mu N)\}\right] \tag{3}$$

$$\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T \tag{4}$$

と置いた。$\mathcal{Z}$ は状態和であるから経路積分表示ができて

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}c^*\mathcal{D}c e^{-S[c^*,c]} \tag{5}$$

と書ける[2]。

1.2 Green 関数

Green 関数の経路積分表示の導出については参考文献を参照することにする。結果、Green 関数は

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(i\epsilon_n) = \langle c^*_{\sigma}(\mathbf{k},\epsilon_n) c_{\sigma}(\mathbf{k},\epsilon_n)\rangle \tag{6}$$

となる。ここで、$\langle\cdots\rangle$ は

$$\langle\cdots\rangle = \frac{\int\cdots\mathcal{D}c^*\mathcal{D}c e^{-S}}{\mathcal{Z}} \tag{7}$$

である。この表式は、統計力学における物理量の期待値の表式にとても似ている。

[1]「物理量の計算と摂動展開」ノート。

[2]指数関数の肩の符号は教科書によって異なる場合がある。その違いは作用の定義の違いとなって現われるので結局どの本も同じ式になっている。

1.3 Green 関数と状態和の関係

状態和 $\mathcal{Z}$ と Green 関数を見比べると、ある関係式が得られる。
ハミルトニアンが

$$-\sum_{\mathbf{k}\sigma n} E_\sigma(\mathbf{k}) c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) + H_I[c^\dagger, c] \tag{8}$$

と書かれているとしよう。もしこのように書かれていれば、Green 関数は

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(i\epsilon_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\delta \mathcal{Z}}{\delta E_\sigma(\mathbf{k})} \tag{9}$$

と書ける。δ は変分を取ることを意味している。なぜなら、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\delta \mathcal{Z}}{\delta E_\sigma(\mathbf{k})} &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}c^* \mathcal{D}c \frac{\delta(e^{-S})}{\delta E_\sigma(\mathbf{k})} && (10) \\ &= \int \mathcal{D}c^* \mathcal{D}c c^*_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon_n) c_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon_n) e^{-S} && (11) \\ &= G_{\mathbf{k}\sigma}(i\epsilon_n) && (12) \end{aligned}$$

となるからである。

1.4 計算例：自由電子系の場合

自由電子系の Green 関数を経路積分表示から計算してみる。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}, \tau) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_0) c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \tag{13}$$

と書ける。このときラグランジアン $\mathcal{L}$ は

$$\mathcal{L} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \partial_\tau c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_0) c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \right) \tag{14}$$

と書ける。ここで c をフーリエ変換すると

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\sigma n} \left(e^{i\epsilon_n \tau} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) \partial_\tau e^{-i\epsilon_n \tau} c_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_0) c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) \right) && (15) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\sigma n} \left(c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n)(-i\epsilon_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_0) c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) \right) && (16) \end{aligned}$$

となる。よって作用 S は

$$S = \int_0^\beta \mathcal{L} d\tau = \sum_{\mathbf{k}\sigma n} (-i\epsilon_n + \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_0) c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) \tag{17}$$

となる。ゆえに、状態和は

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}c^* \mathcal{D}c \exp \left[\sum_{\mathbf{k}\sigma n} (i\epsilon_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu_0) c^*_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon_n) c_\sigma(\mathbf{k}, \epsilon_n) \right] \tag{18}$$

この経路積分はガウス型なので以前のノート[3]で示した積分公式を用いれば

$$\mathcal{Z} = \prod_{\mathbf{k}\sigma n} -(i\epsilon_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu_0) \tag{19}$$

[3]「経路積分表示 part 2：ボソン系、フェルミオン系の場合」ノート。

と計算できる。よって、式 (9) を用いれば

$$
\begin{aligned}
G_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) &= \frac{\prod_{\mathbf{k}'\neq\mathbf{k}\sigma n} -(i\epsilon_n - \epsilon_{\mathbf{k}'} + \mu_0)(+1)}{\prod_{\mathbf{k}\sigma n} -(i\epsilon_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu_0)} && (20)\\
&= \frac{1}{i\epsilon_n - \epsilon_k + \mu_0} && (21)
\end{aligned}
$$

となる。これは通常の方法で得られる Green 関数と等しい。また、Green 関数が極を持つ時、作用が 0 になっている。

1.5 作用の中の Green 関数

以上から、相互作用のない場合の Green 関数 $G^{(0)}$ を用いて相互作用のない場合の作用は

$$
S = \sum_{\mathbf{k}\sigma n} \left[c^*_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n)(G^{(0)}_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n))^{-1} c_{\mathbf{k}\sigma}(\epsilon_n) \right] \tag{22}
$$

と書ける。この式からの類推によって、相互作用のある系における「有効作用」S_{eff} は相互作用の効果を自己エネルギーにとりこんだ Green 関数 $\mathcal{G}$ を用いれば

$$
S_{\text{eff}} = \int_0^\beta d\tau \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\int_0^\beta d\tau' c^*_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \mathcal{G}^{-1}(\tau - \tau') c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau') \right] \tag{23}
$$

などと書けることが予想できる。

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

永長直人「物性論における場の量子論」　岩波書店

M. S. スワンソン「経路積分法-量子力学から場の理論へー」　吉岡書店

大貫義郎 *et al.*「経路積分の方法」　岩波書店

斯波弘行「電子相関の物理」　岩波書店