経路積分表示でのAnderson模型のHartree-Fock近似

永井佑紀

平成20年4月9日

ノート「Anderson模型のHartree-Fock近似」において、Hartree-Fock近似によるGreen関数を求めた。このノートでは経路積分表示において有効作用がどのように表されるかをまとめる。ハミルトニアンからラグランジアンと作用を求め、伝導電子に関するグラスマン数のガウス積分を行って有効作用を求めた。このノートの目的は、DMFTを理解するための下準備として経路積分表示のAnderson模型を理解することにある。

1 Anderson模型

すでに以前のノートで述べているので詳しくは説明しない。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (V_{\mathbf{k}d} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} d_{\sigma} + V^{*}_{\mathbf{k}d} d^{\dagger}_{\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}) + E_d \sum_{\sigma} d^{\dagger}_{\sigma} d_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \tag{1}$$

と書ける。

1.1 Anderson模型のラグランジアンと作用

以前のノート[1]の処方箋に従い、ラグランジアンを書き下そう。グラスマン数 $c, c^{\dagger}, d, d^{\dagger}$ を用いて、ラグランジアン $\mathcal{L}$ は

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \partial_{\tau} c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) + \epsilon_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) + (V_{\mathbf{k}d} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) d_{\sigma}(\tau) + V^{*}_{\mathbf{k}d} d^{\dagger}_{\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)) \right] \\ &\quad + \sum_{\sigma} \left[d^{\dagger}_{\sigma}(\tau) \partial_{\tau} d_{\sigma}(\tau) + E_d d^{\dagger}_{\sigma}(\tau) d_{\sigma}(\tau) \right] + U n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau)\end{aligned} \tag{2}$$

と書ける。ここで τ は虚時間である。次にフーリエ変換：

$$c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n} e^{-i\omega_n \tau} c_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n) \tag{3}$$

$$c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n} e^{i\omega_n \tau} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n) \tag{4}$$

$$d_{\sigma}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n} e^{-i\omega_n \tau} d_{\sigma}(\omega_n) \tag{5}$$

$$d^{\dagger}_{\sigma}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n} e^{i\omega_n \tau} d^{\dagger}_{\sigma}(\omega_n) \tag{6}$$

を用いると

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{1}{\beta} \sum_{n\mathbf{k}\sigma} \left[(-i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}}) c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n) + (V_{\mathbf{k}d} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n) d_{\sigma}(\omega_n) + V^{*}_{\mathbf{k}d} d^{\dagger}_{\sigma}(\omega_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n)) \right] \\ &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_{n\sigma} (-i\omega_n + E_d) d^{\dagger}_{\sigma}(\omega_n) d_{\sigma}(\omega_n) + U n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau)\end{aligned} \tag{7}$$

[1] ノート「経路積分表示 part3：Green 関数」参照。

となり、作用は

$$
\begin{aligned}
S &= \int_0^\beta \mathcal{L} d\tau \qquad (8)\\
&= \sum_{n\mathbf{k}\sigma} \left[(-i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}}) c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n) + (V_{\mathbf{k}d} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n) d_\sigma(\omega_n) + V^*_{\mathbf{k}d} d^\dagger_\sigma(\omega_n) c_{\mathbf{k}\sigma}(\omega_n))\right] \\
&\quad + \sum_{n\sigma} (-i\omega_n + E_d) d^\dagger_\sigma(\omega_n) d_\sigma(\omega_n) + U \int_0^\beta n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau) \qquad (9)
\end{aligned}
$$

と書けることがわかる。

1.2 Anderson 模型の状態和と有効作用

グラスマン数が四種類あるので、汎関数積分による状態和 $\mathcal{Z}$ の表式は

$$
\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}c^* \mathcal{D}c \mathcal{D}d^* \mathcal{D}d \exp\left[-S[c^*, c, d^*, d]\right] \qquad (10)
$$

と書ける。ここで、式 (9) を見ると、グラスマン数 c, c^* に関しては積分が実行できることがわかる。これは以前のノート[2]で導出したグラスマン数に関するガウス積分の公式：

$$
\int d\eta_1^* \eta_1 \cdots d\eta_N^* d\eta_N \exp\left[-\boldsymbol{\eta}^\dagger \hat{M} \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{K}^\dagger \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\eta}^\dagger \boldsymbol{K}\right] = \exp\left[\boldsymbol{K}^\dagger \hat{M}^{-1} \boldsymbol{K}\right] \det \hat{M} \qquad (11)
$$

を使えばよい。つまり、グラスマン数 $c_{\mathbf{k}\sigma}$ を要素とする無限次元ベクトル $\boldsymbol{c}_\sigma = (c_{\mathbf{k}_1\sigma}, c_{\mathbf{k}_2\sigma}, \cdots, c_{\mathbf{k}_i\sigma}, \cdots)$ を導入して

$$
\hat{M} = \begin{pmatrix} -i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}_1} & 0 & \cdots & \cdots \\ 0 & \ddots & 0 & \cdots \\ \vdots & \cdots & -i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}_i} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \ddots \end{pmatrix} \qquad (12)
$$

$$
\boldsymbol{K} = -d_\sigma \begin{pmatrix} V_{\mathbf{k}_1 d} \\ \vdots \\ V_{\mathbf{k}_i d} \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (13)
$$

として公式を用いればよい。ここで $\hat{M}$ はすでに対角化されているので、$\hat{M}^{-1}$ の各要素は $\hat{M}$ の各要素の逆数で書ける。ここで、σ は $\uparrow$ と $\downarrow$ をとることに注意して c, c^* の積分を行うと、

$$
\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \int \mathcal{D}d^* \mathcal{D}d \, (\det\hat{M})^2 \exp\left[-\sum_{n\sigma}\left(-i\omega_n + E_d + \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}d}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}}\right) d^\dagger_\sigma(\omega_n) d_\sigma(\omega_n) - U\int_0^\beta n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau)\right] \\
&= \int \mathcal{D}d^* \mathcal{D}d \, \exp\left[-\sum_{n\sigma}\left(-i\omega_n + E_d + \Gamma(\omega_n)\right) d^\dagger_\sigma(\omega_n) d_\sigma(\omega_n) - U\int_0^\beta n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau) + \ln(\det\hat{M})^2\right] \qquad (14)\\
&= \int \mathcal{D}d^* \mathcal{D}d \, \exp\left[-\sum_{n\sigma}\left(-i\omega_n + E_d + \Gamma(\omega_n)\right) d^\dagger_\sigma(\omega_n) d_\sigma(\omega_n) - U\int_0^\beta n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau) + F(\omega_n)\right] \qquad (15)\\
\Gamma(\omega_n) &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}d}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}} \qquad (16)\\
F(\omega_n) &= 2\sum_{\mathbf{k}} \ln(-i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}}) \qquad (17)
\end{aligned}
$$

[2] ノート「経路積分表示 part2：ボソン系、フェルミオン系の場合」参照。

となる。ここで、物理量は全て状態和で割ることで規格化されるということと、$F(\omega_n)$ はグラスマン数を全く含まないということを考えると、$F(\omega_n)$ を無視することができて、状態和は

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}d^* \mathcal{D}d \exp\left[-S_{\text{eff}}\right] \tag{18}$$

と書くことができる。ここで、

$$S_{\text{eff}} = \sum_{n\sigma} \left(-i\omega_n + E_d + \Gamma(\omega_n)\right) d_\sigma^\dagger(\omega_n) d_\sigma(\omega_n) + U \int_0^\beta n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau) \tag{19}$$

である。この S_{eff} を有効作用と呼ぶ。さらに、$U = 0$ のときの Green 関数を $\mathcal{G}_0$ と置けば、

$$S_{\text{eff}} = \sum_{n\sigma} -d_\sigma^\dagger(\omega_n) \mathcal{G}_0^{-1}(\omega_n) d_\sigma(\omega_n) + U \int_0^\beta n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau) \tag{20}$$

となり、さらに ω_n に関して逆フーリエ変換すれば

$$\begin{aligned}
S_{\text{eff}} &= -\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{n\sigma} d_\sigma^\dagger(\tau) e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}_0^{-1}(\omega_n) e^{i\omega_n \tau'} d_\sigma(\tau') + U \int_0^\beta n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau) && (21) \\
&= -\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{n\sigma} d_\sigma^\dagger(\tau) e^{-i\omega_n (\tau - \tau')} \mathcal{G}_0^{-1}(\omega_n) d_\sigma(\tau') + U \int_0^\beta n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau) && (22) \\
&= -\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\sigma} d_\sigma^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') d_\sigma(\tau') + U \int_0^\beta n_{d\uparrow}(\tau) n_{d\downarrow}(\tau) && (23)
\end{aligned}$$

となる。この有効作用は、時刻 τ' で d 電子が消え、$\tau - \tau'$ だけどこかへ行ったあと τ で再び現れることを意味している。これは、$\tau - \tau'$ の間は熱浴をさまよっていると解釈できる。

1.3 Hartree-Fock 近似

式 (23) においてすでに

$$\mathcal{G}_0(\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_d - \Gamma(\omega_n)} \tag{24}$$

という $U = 0$ の非摂動の Green 関数が求まっている。よって、Hartree-Fock 近似は

$$E_d \to E_d + U \sum_\sigma \langle n_{d-\sigma} \rangle \equiv \tilde{E}_d \tag{25}$$

というエネルギーシフトを与えるだけであるから、d 電子の温度 Green 関数 $G_{\text{HF}}(\omega_n)$ は

$$G_{\text{HF}}(\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \tilde{E}_d - \Gamma(\omega_n)} \tag{26}$$

と書ける。よって、遅延 Green 関数 $G_{\text{HF}}^{\text{R}}(\epsilon)$ は

$$G_{\text{HF}}^{\text{R}}(\epsilon) = \lim_{\delta \to +0} \frac{1}{\epsilon + i\delta - \tilde{E}_d - \Gamma(\epsilon + i\delta)} \tag{27}$$

と書け[3]、以前の Hartree-Fock 近似の Green 関数と等しくなる。

参考文献

永長直人「物性論における場の量子論」
永長直人「電子相関における場の量子論」

[3]簡単のため $\epsilon > 0$ とする。