Green 関数のレーマン表示と解析接続

永井佑紀

平成 20 年 5 月 28 日

ファインマンダイヤグラムで得られた温度 Green 関数や自己エネルギーを解析接続するためのノートである。まず、松原振動数の和が複素積分で表すことができることを確認する。次に、レーマン表示を求める。最後に、例として、自己エネルギーの二次のダイヤグラムを解析接続して実エネルギー表示を求める。

簡単のため 0 次元を考える[1]。また、扱うのはすべてフェルミオンである。

1 松原振動数の和

温度 Green 関数 $G(\tau)$ は

$$G(\tau) = -\langle T_\tau a(\tau) a^\dagger(0) \rangle \tag{1}$$

と書ける。ここで、演算子 $a(\tau)$、$a^\dagger(\tau)$ は Heisenberg 表示：

$$a(\tau) = e^{\tau\mathcal{H}} a e^{-\tau\mathcal{H}} \tag{2}$$

$$a^\dagger(\tau) = e^{-\tau\mathcal{H}} a^\dagger e^{\tau\mathcal{H}} \tag{3}$$

$$\mathcal{H} = H - \mu N \tag{4}$$

であり、$\langle\cdots\rangle$ は

$$\langle\cdots\rangle = \mathrm{tr}\,(\cdots e^{-\beta\mathcal{H}})/\Xi \tag{5}$$

$$\Xi = \mathrm{tr}\,(e^{-\beta\mathcal{H}}) \tag{6}$$

である。

また、温度 Green 関数のフーリエ変換は

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_l G(i\omega_l) e^{-i\omega_l \tau} \tag{7}$$

$$G(i\omega_l) = \int_0^\beta d\tau G(\tau) e^{i\omega_l \tau} \tag{8}$$

$$i\omega_l = (2l+1)i\pi/\beta \tag{9}$$

である。

次に、松原振動数の和で書けている $G(\tau)$ を複素積分で表すことを考える。ある点 $z = k$ に極を持ちそれ以外で正則な複素関数 $f(z)$ の経路 C での複素積分は、留数定理より

$$\frac{1}{2\pi i}\oint_C dz f(z) = \mathrm{Res}_{z=k} f(z) \tag{10}$$

と書ける。極が複数あれば

$$\frac{1}{2\pi i}\oint_C dz f(z) = \sum_i \mathrm{Res}_{z=k_i} f(z) \tag{11}$$

[1] Anderson 模型を念頭に置いている。

である。$G(i\omega_l)$ は松原振動数を変数とする離散的な関数である。ここで、$G(i\omega_l) \to G(z)$ として、その合成関数 $g(z)$ が $z = i\omega_l$ に極を持つ関数であるとする。このとき、$g(z)$ の留数が $G(i\omega_l)$ と見なせるような関数として $g(z)$ を定義できれば、松原振動数の和を複素関数に直すことができる。そこで、$z = i\omega_l$ に極を持つ複素関数を $g(z)$ を

$$g(z) = \frac{f(z)}{e^{\beta z} + 1} \tag{12}$$

とする。図.1 のような積分範囲をとると

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi i}\oint_C g(z)dz &= \sum_l \mathrm{Res}_{z=i\omega_l} g(z) &(13)\\
&= \sum_l \lim_{z\to i\omega_l}(z-i\omega_l)\frac{f(z)}{e^{\beta z}+1} &(14)\\
&= \sum_l \lim_{z\to i\omega_l}(z-i\omega_l)\frac{f(z)}{\beta e^{\beta i\omega_l}(z-i\omega_l)} &(15)\\
&= \frac{1}{\beta}\sum_l f(i\omega_l) &(16)
\end{aligned}$$

となる。ここで、$e^{\beta i\omega_l} = e^{i\beta(2l+1)\pi/\beta} = e^{2i\pi l}e^{i\pi} = -1$ と

$$e^{\beta z} \sim e^{\beta i\omega_l} + 1 + \beta e^{\beta i\omega_l}(z - i\omega_l) = \beta(z - i\omega_l) \tag{17}$$

を用いた。よって、$G(\tau)$ は

$$G(\tau) = \frac{1}{2\pi i}\oint_C dz e^{-z\tau}\frac{G(z)}{e^{\beta z}+1} \tag{18}$$

と書ける。ここで、今後の計算の簡略化のため、$e^{\beta i\omega_l} = e^{-\beta i\omega_l} = -1$ を用いて

$$\begin{aligned}
G(\tau) &= -\frac{1}{2\pi i}\oint_C dz e^{-z(\tau-\beta)}\frac{G(z)}{e^{\beta z}+1} &(19)\\
G(-\tau) &= \frac{1}{2\pi i}\oint_C dz e^{z(\tau+\beta)}e^{-z\beta}\frac{G(z)}{e^{\beta z}+1} &\\
&= \frac{1}{2\pi i}\oint_C dz e^{z(\tau-\beta)}\frac{G(z)}{1+e^{-\beta z}} &(20)
\end{aligned}$$

と変形しておく。もし、$G(z)$ が実軸と虚軸以外で正則（極を持たない）のならば、積分路 C を変形し実軸に沿った経路にしてもよい。$G(z)$ がどのような関数であるかについては、次の節でみていく。

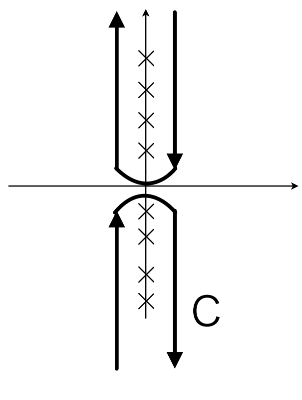

図 1: 温度 Green 関数の積分範囲

2 レーマン表示

$G(i\omega_l)$ の変数を複素数 z とした関数 $G(z)$ ががどのような関数であるかを調べる。また、$G(\tau)$ と状態密度 $\rho(\omega)$ を関係づける。この関係が得られると、最大エントロピー法等を用いて $G(\tau)$ から状態密度を求めることができるようになる。

2.1 $G(z)$ と $\rho(\omega)$ の関係の導出

式 (8) は式 (1) を用いて

$$G(i\omega_l) = -\int_0^\beta d\tau \langle T_\tau a(\tau) a^\dagger(0)\rangle e^{i\omega_l \tau} \tag{21}$$

と書ける。この式を tr を使って書き直せば

$$G(i\omega_l) \quad = \quad -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l\tau} \mathrm{tr}\,(e^{-\beta\mathcal{H}} e^{\tau\mathcal{H}} a e^{-\tau\mathcal{H}} a^\dagger)/\Xi \tag{22}$$

となる。

この tr を計算するために、$\mathcal{H}$ が対角的になっている表示を考え、$\mathcal{H}$ の固有ベクトルを $|\alpha'\rangle$、その固有値を E'：

$$\mathcal{H}|\alpha'\rangle = E'|\alpha'\rangle \tag{23}$$

とする。この表示を用いれば、tr は対角成分の和であるから

$$\begin{aligned} G(i\omega_l) &= -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l\tau} \sum_{\alpha'} \langle\alpha'|e^{-\beta\mathcal{H}} e^{\tau\mathcal{H}} a e^{-\tau\mathcal{H}} a^\dagger)|\alpha'\rangle/\Xi & (24)\\ &= -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l\tau} \sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'} e^{\tau E'} \langle\alpha'|a|\alpha''\rangle\langle\alpha''|e^{-\tau\mathcal{H}} a^\dagger|\alpha'\rangle/\Xi & (25)\\ &= -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l\tau} \sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'} \langle\alpha'|a|\alpha''\rangle e^{\tau(E'-E'')} \langle\alpha''|a^\dagger|\alpha'\rangle/\Xi & (26) \end{aligned}$$

となる[2]。この形に書くと τ に関する積分を実行することができる。したがって、

$$\begin{aligned} G(i\omega_l) &= -\frac{1}{\Xi} \sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'} \langle\alpha'|a|\alpha''\rangle\langle\alpha''|a^\dagger|\alpha'\rangle \int_0^\beta d\tau e^{(i\omega_l+E'-E'')\tau} & (27)\\ &= -\frac{1}{\Xi} \sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'} \langle\alpha'|a|\alpha''\rangle\langle\alpha''|a^\dagger|\alpha'\rangle \frac{e^{(i\omega_l+E'-E'')\beta}-1}{i\omega_l+E'-E''} \int_0^\beta d\tau e^{(i\omega_l+E'-E'')\tau} & (28)\\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'} \langle\alpha'|a|\alpha''\rangle\langle\alpha''|a^\dagger|\alpha'\rangle \frac{e^{(E'-E'')\beta}+1}{i\omega_l+E'-E''} & (29) \end{aligned}$$

となる。ここで、$'$ と $''$ を付け替えて整理すると

$$\begin{aligned} G(i\omega_l) &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E''} \langle\alpha''|a|\alpha'\rangle\langle\alpha'|a^\dagger|\alpha''\rangle \frac{e^{(E''-E')\beta}+1}{i\omega_l-(E'-E'')} & (30)\\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\alpha',\alpha''} \langle\alpha''|a|\alpha'\rangle\langle\alpha'|a^\dagger|\alpha''\rangle e^{-\beta E''} \frac{e^{(E''-E')\beta}+e^{-\beta E''}}{i\omega_l-(E'-E'')} & (31)\\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\alpha',\alpha''} |\langle\alpha''|a|\alpha'\rangle|^2 \frac{e^{-\beta E'}+e^{-\beta E'')\beta}}{i\omega_l-(E'-E'')} & (32)\\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'} \left(\frac{|\langle\alpha''|a|\alpha'\rangle|^2}{i\omega_l-(E'-E'')} + \frac{|\langle\alpha''|a^\dagger|\alpha'\rangle|^2}{i\omega_l-(E''-E')} \right) & (33) \end{aligned}$$

[2] ここでは、完全形 $\sum_{\alpha''}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|=1$ を挟んで変形している。

と書き直すことができる。この表式が得られたところで、変数 $i\omega_l$ は複素数 z に解析接続する。このとき、$G(z)$ は

$$G(z) \quad = \quad \frac{1}{\Xi}\sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'}\left(\frac{|\langle\alpha''|a|\alpha'\rangle|^2}{z-(E'-E'')}+\frac{|\langle\alpha''|a^\dagger|\alpha'\rangle|^2}{z-(E''-E')}\right) \tag{34}$$

となり、$z = E' - E''$ に極を持つ関数となっている。また、$|\alpha''\rangle$ は $|\alpha'\rangle$ に粒子を一つ付け加えた状態であり、E は $\mathcal{H} = H - \mu N$ の固有値であったことを思い出すと

$$z = K - \mu \tag{35}$$

と書ける。ここで K は $H(\alpha'') - H(\alpha')$ に対応する固有値であり、粒子数が一つ増えた分 $-\mu$ が加わっている。この K は準粒子のエネルギーと呼ばれる[3]。

得られた $G(z)$ を $z = \omega + i\delta$ とすれば遅延 Green 関数:

$$G(\omega+i\delta) \quad = \quad \frac{1}{\Xi}\sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'}\left(\frac{|\langle\alpha''|a|\alpha'\rangle|^2}{\omega-(E'-E'')+i\delta}+\frac{|\langle\alpha''|a^\dagger|\alpha'\rangle|^2}{\omega-(E''-E')+i\delta}\right) \tag{36}$$

が得られる。ここで、

$$\frac{1}{x \pm i0} = \mathrm{P}\,\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \tag{37}$$

という公式を用いれば

$$\begin{aligned} G(\omega+i\delta) \quad = \quad & \frac{1}{\Xi}\sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'}\mathrm{P}\left(\frac{|\langle\alpha''|a|\alpha'\rangle|^2}{\omega-(E'-E'')}+\frac{|\langle\alpha''|a^\dagger|\alpha'\rangle|^2}{\omega-(E''-E')}\right) \\ & -\frac{i\pi}{\Xi}\sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'}\left[\delta(\omega-(E'-E''))|\langle\alpha''|a|\alpha'\rangle|^2+\delta(\omega-(E''-E'))|\langle\alpha''|a^\dagger|\alpha'\rangle|^2\right] \end{aligned} \tag{38}$$

となり、実部と虚部を分けることができる。よって、

$$\rho(\omega) \equiv -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\,G(\omega+i\delta) = \frac{1}{\Xi}\sum_{\alpha',\alpha''} e^{-\beta E'}\left[\delta(\omega-(E'-E''))|\langle\alpha''|a|\alpha'\rangle|^2+\delta(\omega-(E''-E'))|\langle\alpha''|a^\dagger|\alpha'\rangle|^2\right] \tag{39}$$

を定義すれば、$G(z)$ は

$$G(z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\rho(\omega)}{z-\omega} \tag{40}$$

と書ける。

2.2 $G(\tau)$ と $\rho(\omega)$ の関係の導出

ここまできて、やっと $G(z)$ をすっきりとした形に書くことができた。この表式を式 (19) に代入すると、

$$G(\tau) \quad = \quad -\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \oint_C dz e^{-z(\tau-\beta)}\frac{\rho(\omega)}{(e^{\beta z}+1)(z-\omega)} \tag{41}$$

$$\tag{42}$$

となる。ここで、被積分関数は実軸上 $z = \omega$ と虚軸上 $z = i\omega_l$ に極をもつ関数であり（それ以外では正則）、$z \to \infty$ でゼロになるので[4]、複素積分は積分路 C を変形して実軸上の留数をとればよいことになる。以上から、

$$\begin{aligned} G(\tau) \quad &= \quad -\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-\omega(\tau-\beta)}\frac{\rho(\omega)}{e^{\beta\omega}+1} && (43) \\ &= \quad -\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-\omega(\tau-\beta)}\rho(\omega)f(\omega) && (44) \end{aligned}$$

[3]詳しくは参考文献参照。
[4]分子と分母の指数関数に着目する。

が得られる。ここで $f(\omega)$ はフェルミ分布関数である。また、$G(\tau)$ は他の表現もできるので、それらを書き下すと

$$G(\tau) = -\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-\omega\tau}\rho(\omega)f(\omega) \tag{45}$$

$$G(\tau) = -\int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-\omega(\tau-\beta)}\rho(\omega)f(\omega) \tag{46}$$

$$G(-\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{\omega(\tau-\beta)}\rho(\omega)f(-\omega) \tag{47}$$

となる。式 (39) はよくみると状態密度の表式そのものであるので、上の式は温度 Green 関数 $G(\tau)$ が状態密度 $\rho(\omega)$ で書けている、ということを意味している。この式の逆問題を解くことができれば、量子モンテカルロ法などで得られた温度 Green 関数 $G(\tau)$ を使って状態密度 $\rho(\omega)$ を計算することができる。逆問題を解く方法の一つとして、最大エントロピー法がある。

3 自己エネルギー

$G(\tau)$ を $\rho(\omega)$ を使って書けたことの利点の一つは、温度 Green 関数のダイヤグラム展開で得られた自己エネルギー等を虚時間を使わずに表すことができるということである。この節では例として、接触型相互作用 $U\delta(\tau_1-\tau_2)$ のある場合の U の二次のファインマンダイヤグラムの自己エネルギーの表式を求める。

3.1 二次のファインマンダイヤグラム

考えるファインマンダイヤグラムは図.2 としよう[5]。考えている系は 0 次元なので、 虚時間 τ に関する積分を行えばよい。また、外線に接続されている頂点 1 と頂点 3 は積分する必要はない。

よって、虚時間表示の自己エネルギーは

$$\Sigma(\tau_3-\tau_1) = -\int\int_0^\beta d\tau_2 d\tau_4 U^2\delta(\tau_2-\tau_1)\delta(\tau_3-\tau_4)G(\tau_3-\tau_1)G(\tau_4-\tau_2)G(\tau_2-\tau_4) \tag{48}$$

$$= -U^2 G(\tau_3-\tau_1)G(\tau_3-\tau_1)G(\tau_1-\tau_3) \tag{49}$$

となる。$\tau=\tau_3-\tau_1$ として、上式をフーリエ変換すると

$$\Sigma(i\omega_l) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l\tau}\Sigma(\tau) \tag{50}$$

$$= -U^2\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l\tau}G(\tau)G(\tau)G(-\tau) \tag{51}$$

となる。この表式を整理して最後に $i\omega_l\to\omega+i\delta$ の置き換えをすれば、自己エネルギーを実エネルギーを変数として書いたことになり、虚時間から実時間への解析接続を行ったことになる。

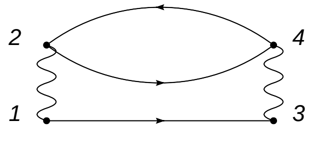

図 2: 自己エネルギーの U の二次のダイヤグラム

[5]JaxoDraw で描いた。

3.2 具体的な計算

式 (51) に $G(\tau)$ の具体的な表式 (46)(47) を代入して計算を行う。

式 (51) は

$$
\begin{aligned}
\Sigma(i\omega_l) &= -U^2\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l\tau}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_1 e^{-\omega_1(\tau-\beta)}\rho(\omega_1)f(\omega_1)\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_2 e^{-\omega_2(\tau-\beta)}\rho(\omega_2)f(\omega_2)\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_3 e^{\omega_3(\tau-\beta)}\rho(\omega_3)f(-\omega_3) \\
&= -U^2\int_0^\beta d\tau\int\int\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 e^{i\omega_l\tau}e^{(\tau-\beta)(-\omega_1-\omega_2+\omega_3)}\rho(\omega_1)f(\omega_1)\rho(\omega_2)f(\omega_2)\rho(\omega_3)f(-\omega_3) && (52) \\
&= -U^2\int\int\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3\frac{e^{-\beta(-\omega_1-\omega_2+\omega_3)}(e^{\beta(i\omega_l-\omega_1-\omega_2+\omega_3)}-1)}{i\omega_l-\omega_1-\omega_2+\omega_3}\rho(\omega_1)f(\omega_1)\rho(\omega_2)f(\omega_2)\rho(\omega_3)f(-\omega_3) && (53) \\
&= U^2\int\int\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3\frac{e^{-\beta(-\omega_1-\omega_2+\omega_3)}(e^{\beta(-\omega_1-\omega_2+\omega_3)}+1)}{i\omega_l-\omega_1-\omega_2+\omega_3}\rho(\omega_1)f(\omega_1)\rho(\omega_2)f(\omega_2)\rho(\omega_3)f(-\omega_3) && (54) \\
&= U^2\int\int\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3\frac{(1+e^{-\beta(-\omega_1-\omega_2+\omega_3)})}{i\omega_l-\omega_1-\omega_2+\omega_3}\rho(\omega_1)f(\omega_1)\rho(\omega_2)f(\omega_2)\rho(\omega_3)f(-\omega_3) && (55) \\
&= U^2\int\int\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3\rho(\omega_1)\rho(\omega_2)\rho(\omega_3)\frac{(f(\omega_1)f(\omega_2)f(-\omega_3)+f(-\omega_1)f(-\omega_2)f(\omega_3))}{i\omega_l-\omega_1-\omega_2+\omega_3} && (56)
\end{aligned}
$$

と書くことができる。

以上から、$i\omega_l \to \epsilon + i\delta$ と置き換えれば

$$
\Sigma(\epsilon+i\delta) = U^2\int\int\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3\rho(\omega_1)\rho(\omega_2)\rho(\omega_3)\frac{(f(\omega_1)f(\omega_2)f(-\omega_3)+f(-\omega_1)f(-\omega_2)f(\omega_3))}{\epsilon+i\delta-\omega_1-\omega_2+\omega_3} \quad (57)
$$

となり、$\delta \to 0$ として

$$
\Sigma(\epsilon) = U^2\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3\rho(\omega_1)\rho(\omega_2)\rho(\omega_3)\frac{(f(\omega_1)f(\omega_2)f(-\omega_3)+f(-\omega_1)f(-\omega_2)f(\omega_3))}{\epsilon-\omega_1-\omega_2+\omega_3} \quad (58)
$$

が得られる。この結果は、虚時間表示を使わずに導出した二次摂動の結果と等しい。

参考文献

阿部龍蔵「統計力学」東京大学出版会

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