

A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* 計算ノート

東京大学大学院総合文化研究科 広域科学専攻 相関基礎科学系 加藤雄介研究室
國見昌哉

2011年9月15日

注意

このノートは國見が学部4年生の9月から12月くらいにかけて読んだ Fetter and Walecka[1] の主に Chapter3 から Chapter10 の計算過程をまとめたものです。特に、計算に詰まった部分や、めんどくさい計算の部分をまとめました。学部4年生時の理解で書いているので、物理的解釈等は不適切、あるいは間違っている部分が含まれている可能性があります。ただし、計算自体はそれほど間違っていないと思うので、計算に詰まったときに参考にする程度の使い方が適切かと思われます。間違いを発見した方は連絡をくださると助かります。^{*1}

更新履歴

2011年9月15日公開

^{*1} 連絡先は <http://park.itc.u-tokyo.ac.jp/kato-yusuke-lab/kunimi/kunimihomepage> に書いてあります。

目次

1.1	Green 関数と遅延 Green 関数と先進 Green 関数	3
1.2	Green 関数の極の物理的意味	4
1.3	Hartree-Fock 近似でのエネルギー固有値	7
1.4	運動量表示での Feynman ルール (絶対零度の Fermion 系)	8
1.5	相互作用する希薄 Fermi 気体での低エネルギー散乱	9
1.6	遮蔽効果の計算	19
1.7	電子ガス関連の計算	22
1.8	プラズマ振動の計算	32
1.9	ボーズ粒子系の相互作用ポテンシャル	35
1.10	ボーズ粒子系の Feynman ルール (座標表示)	38
1.11	ボーズ粒子系の Feynman ルール (運動量表示)	39
1.12	ボーズ粒子系の Dyson 方程式	40
1.13	温度 Green 関数を用いた様々な物理量の期待値	42
1.14	温度 Green 関数のファインマンルール (運動量表示)	46
1.15	有限温度における Hartree-Fock 近似	47
1.16	低温における不完全 Fermi 気体	51
1.17	Ring 近似 (有限温度)	55
1.18	実時間 Green 関数	60
1.19	有限温度の線型応答	63
1.20	電子ガスの遮蔽効果 (有限温度)	64
1.21	プラズマ振動 (有限温度)	67
1.22	Bogoliubov 変換 (Bose 粒子系)	69
1.23	Bogoliubov 変換 (Fermi 粒子系)	75
1.24	相互作用が無い Phonon 系	86
1.25	電子-格子相互作用	88
1.26	Phonon の Green 関数のファインマンルール (絶対零度)	92
1.27	Migdal の定理	95

1.1 Green 関数と遅延 Green 関数と先進 Green 関数

絶対零度の Green 関数の Lehmann 表示は

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \int_0^\infty d\omega' \left[\frac{A(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' - \mu/\hbar + i\eta} + \frac{B(\mathbf{k}, \omega')}{\omega + \omega' - \mu/\hbar - i\eta} \right] \quad (1)$$

である。ただし、 $A(\mathbf{k}, \omega)$ 、 $B(\mathbf{k}, \omega)$ はスペクトル関数であり、実数で正の値をとる。遅延 Green 関数、先進 Green 関数は

$$G^R(\mathbf{k}, \omega) = \int_0^\infty d\omega' \left[\frac{A(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' - \mu/\hbar + i\eta} + \frac{B(\mathbf{k}, \omega')}{\omega + \omega' - \mu/\hbar + i\eta} \right] \quad (2)$$

$$G^A(\mathbf{k}, \omega) = \int_0^\infty d\omega' \left[\frac{A(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' - \mu/\hbar - i\eta} + \frac{B(\mathbf{k}, \omega')}{\omega + \omega' - \mu/\hbar - i\eta} \right] \quad (3)$$

である。ここで、 G^R は

$$G^R(\mathbf{k}, \omega) = \text{Re}G(\mathbf{k}, \omega) + i \text{sgn}(\omega - \mu/\hbar) \text{Im}G(\mathbf{k}, \omega) \quad (4)$$

を満たすことがわかっている。これより G から G^R を求めてみる。主値積分の公式

$$\frac{1}{\omega \pm i\eta} = P \frac{1}{\omega} \mp i\pi\delta(\omega) \quad (5)$$

を用いると

$$\text{Im}G(\mathbf{k}, \omega) = \begin{cases} -i\pi A(\mathbf{k}, \omega - \mu/\hbar), & (\omega > \frac{\mu}{\hbar}) \\ i\pi B(\mathbf{k}, \mu/\hbar - \omega), & (\omega < \frac{\mu}{\hbar}) \end{cases} \quad (6)$$

であるから

$$\begin{aligned} G^R(\mathbf{k}, \omega) &= P \int_0^\infty d\omega' \left[\frac{A(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' - \mu/\hbar} + \frac{B(\mathbf{k}, \omega')}{\omega + \omega' - \mu/\hbar} \right] \\ &\quad - i\pi [A(\mathbf{k}, \omega - \mu/\hbar)\theta(\omega - \mu/\hbar) + B(\mathbf{k}, \omega)\theta(\mu/\hbar - \omega)] \\ &= P \int_0^\infty d\omega' \left[\frac{A(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' - \mu/\hbar} \right] - i\pi \int_0^\infty d\omega' A(\mathbf{k}, \omega')\delta(\omega' - \omega + \mu/\hbar) \\ &\quad + P \int_0^\infty d\omega' \left[\frac{B(\mathbf{k}, \omega')}{\omega + \omega' - \mu/\hbar} \right] - i\pi \int_0^\infty d\omega' B(\mathbf{k}, \omega')\delta(\omega' + \omega + \mu/\hbar) \\ &= \int_0^\infty d\omega' \left[P \frac{A(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' - \mu/\hbar} - i\pi\delta(\omega' - \omega + \mu/\hbar)A(\mathbf{k}, \omega') \right] \\ &\quad + \int_0^\infty d\omega' \left[P \frac{B(\mathbf{k}, \omega')}{\omega + \omega' - \mu/\hbar} - i\pi\delta(\omega' + \omega + \mu/\hbar)B(\mathbf{k}, \omega') \right] \\ &= \int_0^\infty d\omega' \left[\frac{A(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' - \mu/\hbar + i\eta} + \frac{B(\mathbf{k}, \omega')}{\omega + \omega' - \mu/\hbar + i\eta} \right] \end{aligned} \quad (7)$$

を得る。1つ目のイコールから2つ目のイコールの変形は逆をたどればできることに注意。

1.2 Green 関数の極の物理的意味

Green 関数の運動量表示の Fourier 変換

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, t) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega) \\ &= \int_{-\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega) + \int_{\mu/\hbar}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega) \end{aligned} \quad (8)$$

を考える。ここで、

$$G^R(\mathbf{k}, \omega) = G(\mathbf{k}, \omega) \quad (\hbar\omega > \mu) \quad (9)$$

$$G^A(\mathbf{k}, \omega) = G(\mathbf{k}, \omega) \quad (\hbar\omega < \mu) \quad (10)$$

より

$$\int_{-\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^A(\mathbf{k}, \omega) \quad (11)$$

となる。 G^A は下半平面で解析的。よって、積分路を以下のように変形すると

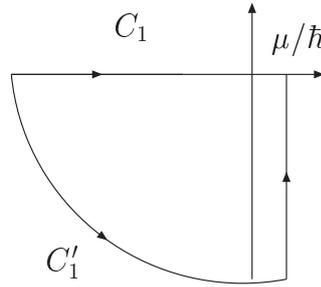


図1 G^A の積分路

$$\begin{aligned} \oint_{C_1 - C_1'} &= \int_{C_1} - \int_{C_1'} = 0 \\ \int_{C_1} &= \int_{C_1'} \end{aligned} \quad (12)$$

となる。また、 G, G^A, G^R は $|\omega| \rightarrow \infty$ で、 $\frac{1}{\omega}$ のように振舞う。よって、Jordan の補助定理より、弧の部分の積分は0になる。ゆえに、

$$\int_{-\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega) = \int_{\mu/\hbar - i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^A(\mathbf{k}, \omega) \quad (13)$$

となる。(8) の第2項は

$$\int_{\mu/\hbar}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega) = \int_{\mu/\hbar}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^R(\mathbf{k}, \omega) \quad (14)$$

であるが、 G^R は下半平面で解析的でない。ここで、 G^R は実軸の近くで1位の極 $\omega = \epsilon_k/\hbar - i\gamma_k$ を持つと仮定する。また、このときの留数を a とし、 $\epsilon_k \gg \mu$ と $\epsilon_k - \mu \gg \hbar\gamma_k \geq 0$ を仮定する。これより

$$\oint_{C_2 - C'_2} = \int_{C_2} - \int_{C'_2} - (\text{留数}) = 0 \quad (15)$$

なので

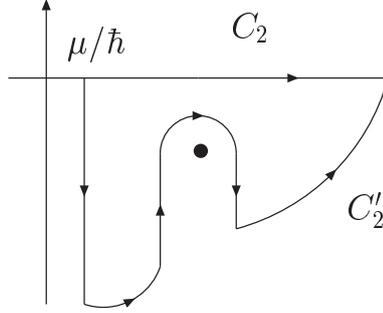


図2 G^R の積分路

$$\begin{aligned} \int_{\mu/\hbar}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\mathbf{k}, \omega) &= \int_{\mu/\hbar - i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^R(\mathbf{k}, \omega) - 2\pi i \frac{1}{2\pi} e^{-i(\epsilon_k/\hbar - i\gamma_k)t} a \\ &= \int_{\mu/\hbar - i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^R(\mathbf{k}, \omega) - i a e^{-i\frac{\epsilon_k}{\hbar} t} e^{-\gamma_k t} \end{aligned} \quad (16)$$

となる。ここで、 t が大きすぎず、小さすぎないとき、積分は無視でき、1粒子が追加された状態は近似的に振動数 ϵ_k/\hbar 、damping constant γ_k の固有状態として振舞う事を証明する。厳密には

$$1, \quad |t|(\epsilon_k - \mu) \gg \hbar \quad (17)$$

$$2, \quad |t|\gamma_k \leq 1 \quad (18)$$

のとき

$$G(\mathbf{k}, t) \simeq -i a e^{-i\frac{\epsilon_k}{\hbar} t} e^{-\gamma_k t} \quad (19)$$

を証明する。

(16) の被積分関数は $\text{Im}(\omega)$ が負で大きいとき、指数関数的に小さくなるので、主要な寄与は実軸の近くだけになる。ゆえに、

$$G^R(\mathbf{k}, t) \simeq \frac{a}{\omega - \epsilon_k/\hbar + i\gamma_k} \quad (20)$$

$$G^A(\mathbf{k}, t) = [G^R(\mathbf{k}, t)]^* \simeq \frac{a}{\omega - \epsilon_k/\hbar - i\gamma_k} \quad (21)$$

と近似する。この近似により、(16) の積分は

$$\begin{aligned}
& \int_{\mu/\hbar-i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} [G^A(\mathbf{k}, \omega) - G^R(\mathbf{k}, \omega)] \\
& \simeq \int_{\mu/\hbar-i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \left[\frac{a}{\omega - \epsilon_k/\hbar - i\gamma_k} - \frac{a}{\omega - \epsilon_k/\hbar + i\gamma_k} \right] \\
& = a \int_{\mu/\hbar-i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{2i\gamma_k}{(\omega - \epsilon_k/\hbar)^2 + \gamma_k^2} \\
& = 2ia\gamma_k \int_{\infty}^0 \frac{-idu}{2\pi} e^{-i(\mu/\hbar-iu)t} \frac{1}{\gamma_k^2 + [(\mu - \epsilon_k/\hbar) - iu]^2} \quad (u \equiv i(\omega - \hbar^{-1}\mu)) \\
& = -\frac{\gamma_k a}{\pi t} e^{-i\frac{\mu}{\hbar}t} \int_0^{\infty} dx e^{-x} \left\{ \gamma_k^2 + \left(\frac{\mu - \epsilon_k}{\hbar} \right)^2 \left[1 + \frac{i\hbar x}{(\epsilon_k - \mu)t} \right]^2 \right\}^{-1} \quad (x \equiv ut) \quad (22)
\end{aligned}$$

ここで、 $|t|(\epsilon_k - \mu) \gg \hbar$, $|t|\gamma_k \ll 1$, $(\epsilon_k - \mu)\hbar^{-1} \gg \gamma_k$ より

$$\frac{|t|(\epsilon_k - \mu)}{\hbar} \gg 1 \rightarrow \frac{\hbar}{|t|(\epsilon_k - \mu)} \ll 1 \quad (23)$$

だから

$$\begin{aligned}
\int_{\mu/\hbar-i\infty}^{\mu/\hbar} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} [G^A(\mathbf{k}, \omega) - G^R(\mathbf{k}, \omega)] & \simeq \frac{-\gamma_k a}{\pi t} e^{-i\frac{\mu}{\hbar}t} \int_0^{\infty} dx \left(\frac{\hbar}{\mu - \epsilon_k} \right)^2 e^{-x} \\
& = -(\pi t)^{-1} \gamma_k a \hbar^2 (\mu - \epsilon_k)^{-2} e^{-i\frac{\mu}{\hbar}t} \\
& \ll -ia e^{-i\frac{\mu}{\hbar}t} e^{-\gamma_k t} \quad (24)
\end{aligned}$$

となる。最後の不等式は $\left(\frac{\hbar}{\mu - \epsilon_k} \right)^2 \ll t^2$ より

$$\left(\frac{\hbar}{\mu - \epsilon_k} \right)^2 \frac{\gamma_k}{t} \ll \gamma_k t \leq 1 \quad (25)$$

による。

1.3 Hartree-Fock 近似でのエネルギー固有値

[1] の (10.17) 式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 + U(\mathbf{x}) \right] \varphi_k(\mathbf{x}_1) + \int d\mathbf{x}_2 \hbar \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \varphi_k(\mathbf{x}_2) = \epsilon_k \varphi_k(\mathbf{x}_1) \quad (26)$$

において、 $U(\mathbf{x}) = 0$, $\varphi_k(\mathbf{x}) = V^{-1/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ のとき、エネルギー固有値を求める。上式の両辺に $\varphi_k^*(\mathbf{x}_1)$ をかけ、 \mathbf{x}_1 で積分すると

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 \varphi_k(\mathbf{x}_1) \hbar \Sigma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \varphi_k(\mathbf{x}_2) = \epsilon_k \quad (27)$$

となる。ここで、左辺第1項を ϵ_k^0 とおく。さらに、第2項で $\mathbf{r} \equiv \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$, $\mathbf{R} \equiv (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/2$ と変数変換すると

$$\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{R} \frac{\hbar}{V} \Sigma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} = \hbar \Sigma(\mathbf{k}) \quad (28)$$

となる。ゆえに、エネルギー固有値は以下のようになる。

$$\epsilon_k = \epsilon_k^0 + \hbar \Sigma(\mathbf{k}) \quad (29)$$

以上の計算より、 φ に自由粒子の固有関数を選んだときは、Self Energy の Fourier 変換を求めればエネルギー固有値がわかる。ここで、

$$\hbar \Sigma(\mathbf{k}) = \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \hbar \Sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (30)$$

である。また、[1] の (10.16) より

$$\begin{aligned} \hbar \Sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= (2s + 1) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \int d\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \sum_k |\varphi_k(\mathbf{x}_1)|^2 \theta(k_F - k) \\ &\quad - V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \sum_k \varphi_k(\mathbf{x}) \varphi_k^*(\mathbf{x}') \theta(k_F - k) \\ &= (2s + 1) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \int d\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \sum_{k'} \theta(k_F - k') \\ &\quad - V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \theta(k_F - k') \end{aligned} \quad (31)$$

である。 n を $n \equiv (2s + 1) \sum_{k'} \theta(k_F - k')$ と定義すれば (30) は

$$\begin{aligned} \hbar \Sigma(\mathbf{k}) &= n \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \int d\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \\ &\quad - \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \theta(\epsilon_F - \epsilon_{k'}) \\ &= n \int d\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) - \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\cdot(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \theta(k_F - k') \\ &= nV(0) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \theta(k_F - k') \end{aligned} \quad (32)$$

と変形できる。

1.4 運動量表示での Feynman ルール (絶対零度の Fermion 系)

1. n 本の相互作用線と、 $2n + 1$ 本の粒子線でできた独立なつながった図形を描く。
2. 各線に、4 元運動量を対応させる。相互作用線には $\bar{V}(p)$ 、粒子線には $G^{(0)}(p)$ を対応させる。
3. 各頂点で運動量を保存させる。
4. $\left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{(-1)^{n_l}}{(2\pi)^{4n}}$ を係数とする。 n_l はループの数である。
5. n 個の独立な運動量で積分。
6. 粒子線がループしていたり、同じ相互作用線につながっている場合は $e^{i\omega\eta}$ をつける。

以上より、1 次の運動量表示の Green 関数は

$$\begin{aligned}
 G^{(1)}(\mathbf{k}, \omega) = & -\frac{i}{\hbar} \int \frac{d^4 k_1}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) \bar{V}(0) G^{(0)}(k_1) e^{i\omega_1 \eta} G^{(0)}(k) \\
 & + \frac{i}{\hbar} \int \frac{d^4 k_1}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) \bar{V}(k - k_1) G^{(0)}(k_1) e^{i\omega_1 \eta} G^{(0)}(k)
 \end{aligned} \tag{33}$$

となる。また、1 次の Self Energy は

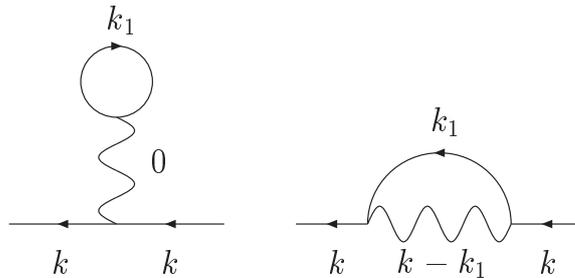


図3 運動量表示での 1 次の Feynman ダイアグラム。各点で運動量が保存している。

$$\begin{aligned}
 \Sigma^{(1)}(k) = & -\frac{i}{\hbar} \int \frac{d^4 k_1}{(2\pi)^4} \bar{V}(0) G^{(0)}(k_1) e^{i\omega_1 \eta} \\
 & + \frac{i}{\hbar} \int \frac{d^4 k_1}{(2\pi)^4} \bar{V}(k - k_1) G^{(0)}(k_1) e^{i\omega_1 \eta}
 \end{aligned} \tag{34}$$

となる。

1.5 相互作用する希薄 Fermi 気体での低エネルギー散乱

希薄 Fermi 気体での 1 粒子あたりの基底状態のエネルギーは、Fermi 波数を用いて

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} [A + B(k_F a) + C(k_F a)^2 + \dots] \quad (35)$$

と展開できる。ただし、この表式は $k_F \rightarrow 0$, $a \rightarrow 0$ の極限において有効である。この最初の 2 項は、はしご近似の 1 次、すなわち、Hartree-Fock 近似で得られることを以下で示す。

粒子のスピンは $\frac{1}{2}$ とし、特異性の無いポテンシャルとすると、基底状態のエネルギーは [1] の (10.22) より

$$E = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left[\epsilon_k^0 + \frac{\hbar}{2} \Sigma^{(1)}(\mathbf{k}) \right] \theta(k_F - k) \quad (36)$$

となる。これに (32) を代入して

$$\begin{aligned} \frac{E}{V} &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \frac{2}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \theta(k_F - k) + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} n V(0) \theta(k_F - k) \\ &\quad - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \theta(k_F - k') \theta(k_F - k) \\ &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k_F^3}{3} + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} 2V(0) \theta(k_F - k') \theta(k_F - k) \\ &\quad - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \theta(k_F - k') \theta(k_F - k) \\ &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \frac{N}{V} + \int^{k_F} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int^{k_F} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] \end{aligned} \quad (37)$$

となる。ただし、

$$n \equiv 2 \sum_{k'} \theta(k_F - k'), \quad \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (38)$$

である。さらに $V(0)$ は散乱振幅

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \equiv -\frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{y} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{y}} v(\mathbf{y}) \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{y}) \quad (39)$$

$$v(\mathbf{y}) \equiv \frac{mV(\mathbf{y})}{\hbar^2} \quad (40)$$

で、1 次の Born 近似、 $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{y}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{y}}$ のとき

$$V(0) = \int d\mathbf{x} V(\mathbf{x}) = -\frac{4\pi\hbar^2}{m} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \quad (41)$$

と書ける。低エネルギー散乱、すなわち、 $k_F \rightarrow 0$ では

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \rightarrow -a \quad (42)$$

となり、さらに、 $\mathbf{k} \simeq \mathbf{k}'$ より、

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \simeq V(0) \quad (43)$$

と近似できる。これらの近似により、(37) は

$$\begin{aligned} E &\simeq \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} N + \frac{N^2}{4V} V(0) \\ &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} N + \frac{N}{V} \frac{\pi \hbar^2 a}{m} N \\ &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} N + N \frac{k_F^3}{3\pi^2} \frac{\pi \hbar^2 a}{m} \\ \frac{E}{N} &= \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \left[\frac{3}{5} + \frac{2}{3\pi^2} k_F a + \dots \right] \end{aligned} \quad (44)$$

となる。途中で

$$\int^{k_F} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k_F^3}{3} = \frac{N}{2V} \quad (45)$$

を用いた。

ここで、(42) を示しておく。低エネルギー散乱では、 s 波散乱のみを考えれば十分なので、部分波展開の公式

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (46)$$

で、 $l=0$ のみを考える。すなわち、散乱振幅が

$$f(\theta) = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 \quad (47)$$

となる。剛体球ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} \infty & (r < a) \\ 0 & (r > a) \end{cases} \quad (48)$$

を考えると、Schrödinger 方程式より

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] \chi_0(r) = 0 \quad (49)$$

$$\chi_0(r) = A \sin k(r - a) \quad (50)$$

となる。これは境界条件 $\chi_0(a) = 0$ を用いた。これより、位相のずれは

$$\delta_0(k) = -ka \quad (51)$$

となる。これより、散乱振幅は $k \rightarrow 0$ の極限で

$$f(\theta) \longrightarrow \frac{1}{k} (1 + i\delta_0) \delta_0 = -a + O(\delta_0^2) \quad (52)$$

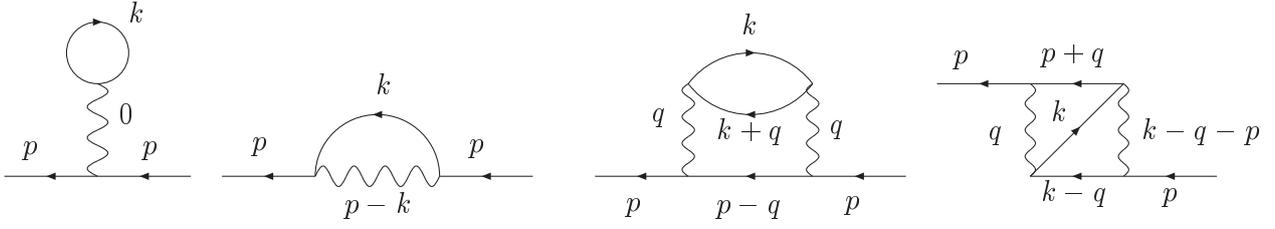


図4 はしご近似で用いる1次と2次のダイアグラム。

となり、(42) が示された。

ここで、はしご近似で用いる1次と2次のダイアグラムは図4の4つである。ファインマンルールより、1次の Self-energy は

$$\hbar\Sigma_{(1)}^*(p) = -2i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} U_0(0) G^{(0)}(k) e^{ik_0\eta} + i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} U_0(p-k) G^{(0)}(k) e^{ik_0\eta} \quad (53)$$

である。ここで、相互作用はスピンの依存しないとした。2次は

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma_{(2)}^*(p) &= \frac{2}{\hbar} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} U_0(q) G^{(0)}(k) G^{(0)}(k+q) G^{(0)}(p-q) U_0(q) \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} U_0(q) G^{(0)}(k-q) G^{(0)}(k) G^{(0)}(p+q) U_0(k-p-q) \end{aligned} \quad (54)$$

となる。はしご近似では以下のようなダイアグラムをとる。これは全次数について言えるので、

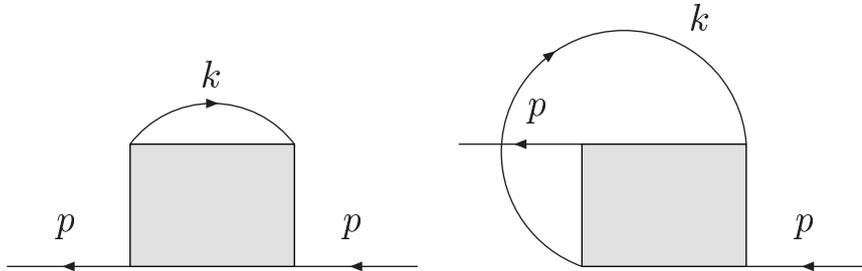


図5 はしご近似で用いるダイアグラム。色つきの部分は vertex 部分である。

proper な Self-energy は

$$\hbar\Sigma^*(p) = -2i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) \Gamma(pk; pk) + i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) \Gamma(kp; pk) \quad (55)$$

と書ける。ここで、vertex 部分 Γ は以下のダイアグラムで表される。これを式で表現すると、

$$\begin{aligned} \Gamma(p_1 p_2; p_3 p_4) &= U_0(p_1 - p_3) + \frac{i}{\hbar} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} U_0(q) G^{(0)}(p_1 - q) G^{(0)}(p_2 + q) U_0(p_1 - q - p_3) \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (56)$$

となる。これは、図7より、積分方程式の形で書くことができ

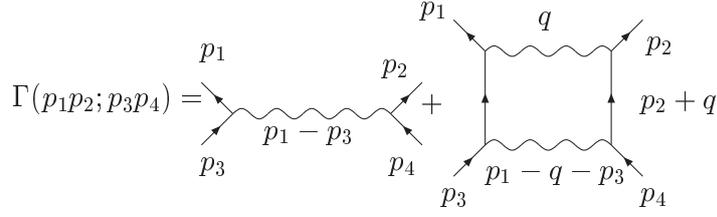


図6 はしご近似での vertex 部分。

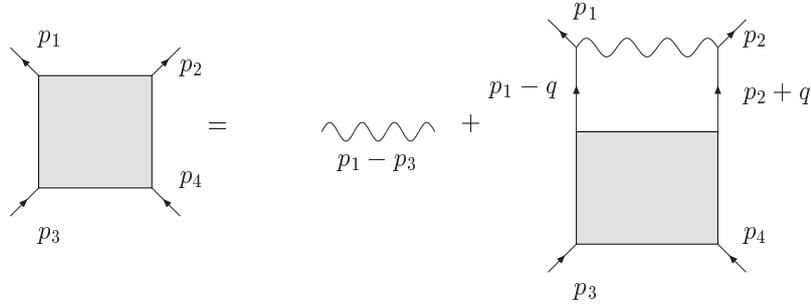


図7 vertex 部分の積分方程式を表すダイアグラム。

$$\Gamma(p_1 p_2; p_3 p_4) = U_0(p_1 - p_3) + \frac{i}{\hbar} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} U_0(q) G^{(0)}(p_1 - q) G^{(0)}(p_2 + q) \Gamma(p_1 - q, p_2 + q; p_3 p_4) \quad (57)$$

となる。これを Bethe-Salpeter 方程式と呼ぶ。

以上より、 Σ^* が知りたければ、 Γ を知ればよいことになる。しかし、散乱振幅とのアナロジーより、有効波動関数を導入した方がわかりやすい。すなわち、

$$\Gamma(p_1 p_2; p_3 p_4) \equiv \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} U_0(q) Q(p_1 - q, p_2 + q; p_3 p_4) \quad (58)$$

$$Q(p_1, p_2; p_3 p_4) \equiv (2\pi)^4 \delta(p_1 - p_3) + \frac{i}{\hbar} G^{(0)}(p_1) G^{(0)}(p_2) \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} U_0(q) Q(p_1 - q, p_2 + q; p_3 p_4) \quad (59)$$

Q を Γ に代入し、 Γ の 2 字まで計算してみると

$$\begin{aligned} & \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} U_0(q) \left[(2\pi)^4 \delta(p_1 - q - p_3) + \frac{i}{\hbar} G^{(0)}(p_1 - q) G^{(0)}(p_2 + q) \right. \\ & \quad \left. \times \int \frac{d^4 q'}{(2\pi)^4} U_0(q') Q(p_1 - q - q', p_2 + q + q'; p_3 p_4) \right] \\ &= U_0(p_1 - p_3) + \frac{i}{\hbar} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q'}{(2\pi)^4} U_0(q) G^{(0)}(p_1 - q) G^{(0)}(p_2 + q) U_0(q') \\ & \quad \times (2\pi)^4 \delta(p_1 - q - q' - p_3) \\ &= U_0(p_1 - p_3) + \frac{i}{\hbar} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} U_0(q) G^{(0)}(p_1 - q) G^{(0)}(p_2 + q) U_0(p_1 - q - p_3) \end{aligned} \quad (60)$$

となり、(56) と一致する。

ここで、新たな変数 P を

$$P \equiv p_1 + p_2 = p_3 + p_4 \quad (61)$$

で定義する。これは重心における波数ベクトルである。さらに、相対波数ベクトルを

$$\mathbf{p} \equiv \frac{1}{2}(p_1 - p_2), \quad \mathbf{p}' \equiv \frac{1}{2}(p_3 - p_4) \quad (62)$$

で定義する。ここで、ポテンシャル $U_0(\mathbf{q}) = U_0(\mathbf{q})$ なので、振動数に依存しない。これより、(59) の振動数についての積分は実行できる。よって、重心の4元運動量 $\hbar P$ を固定したときの (59) の振動数積分を

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) &\equiv \int_P \frac{dp_0}{2\pi} Q\left(\frac{1}{2}P + p, \frac{1}{2}P - p; \frac{1}{2}P + p', \frac{1}{2}P - p'\right) \\ &= \int_P \frac{dp_0}{2\pi} Q(p_1 p_2; p_3 p_4) \end{aligned} \quad (63)$$

と定義する。ただし、 $p_1 = P/2 + p$, $p_2 = P/2 - p$, $p_3 = P/2 - p'$, $p_4 = P/2 - p'$ である。(63) を Q に代入すれば

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) &= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') + \frac{i}{\hbar} \int \frac{dp_0}{2\pi} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} U_0(\mathbf{q}) Q(p_1 - q, p_2 + q; p_3 p_4) G^{(0)}(p_1) G^{(0)}(p_2) \\ &= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') + \frac{i}{\hbar} \int \frac{dp_0}{2\pi} G^{(0)}(P/2 + p) G^{(0)}(P/2 - p) \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \\ &\quad \times U_0(\mathbf{q}) Q(P/2 + p - q, P/2 - p + q; P/2 + p', P/2 - p') \\ &= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') + \frac{i}{\hbar} \int \frac{dp_0}{2\pi} G^{(0)}(P/2 + p) G^{(0)}(P/2 - p) \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \chi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P) \end{aligned} \quad (64)$$

となる。ここで、上式の Green 関数の積を評価する。Green 関数には、上半平面に1つ、下半平面に1つの極を持っている。よって、これらの積は上半平面に2つ、下半平面に2つ、両方に1つずつ極を持つ4個の項からなる。どちらかの平面に極が2つある場合は、積分路を反対の平面にとれば、その積分値は0になるから、そうでない場合を考えると、

$$\begin{aligned} &\frac{i}{\hbar} \int \frac{dp_0}{2\pi} G^{(0)}(P/2 + p) G^{(0)}(P/2 - p) \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \frac{dp_0}{2\pi} \left[\frac{\theta(|\mathbf{P}/2 + \mathbf{p}| - k_F)}{P_0/2 + p_0 - \omega_{P/2+p} + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{P}/2 + \mathbf{p}|)}{P_0/2 + p_0 - \omega_{P/2+p} - i\eta} \right] \\ &\quad \times \left[\frac{\theta(|\mathbf{P}/2 - \mathbf{p}| - k_F)}{P_0/2 - p_0 - \omega_{P/2-p} + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{P}/2 - \mathbf{p}|)}{P_0/2 - p_0 - \omega_{P/2-p} - i\eta} \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \frac{dp_0}{2\pi} \left[\frac{\theta(|\mathbf{P}/2 + \mathbf{p}| - k_F)}{P_0/2 + p_0 - \omega_{P/2+p} + i\eta} \frac{\theta(|\mathbf{P}/2 - \mathbf{p}| - k_F)}{P_0/2 - p_0 - \omega_{P/2-p} + i\eta} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{P}/2 + \mathbf{p}|)}{P_0/2 + p_0 - \omega_{P/2+p} - i\eta} \frac{\theta(k_F - |\mathbf{P}/2 - \mathbf{p}|)}{P_0/2 - p_0 - \omega_{P/2-p} - i\eta} \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \frac{dp_0}{2\pi} \left[-\frac{\theta(|\mathbf{P}/2 + \mathbf{p}| - k_F)}{P_0/2 + p_0 - \omega_{P/2+p} + i\eta} \frac{\theta(|\mathbf{P}/2 - \mathbf{p}| - k_F)}{p_0 - P_0/2 + \omega_{P/2-p} - i\eta} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\theta(k_F - |\mathbf{P}/2 + \mathbf{p}|)}{P_0/2 + p_0 - \omega_{P/2+p} - i\eta} \frac{\theta(k_F - |\mathbf{P}/2 - \mathbf{p}|)}{p_0 - P_0/2 + \omega_{P/2-p} + i\eta} \right] \end{aligned} \quad (65)$$

ここで、積分路を上半平面とすると、留数定理より、

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \int \frac{dp_0}{2\pi} G^{(0)}(P/2+p)G^{(0)}(P/2-p) &= \frac{\theta(|\mathbf{P}/2+\mathbf{p}|-k_F)\theta(|\mathbf{P}/2-\mathbf{p}|-k_F)}{\hbar P_0 - \epsilon_{\frac{P}{2}+p}^0 - \epsilon_{\frac{P}{2}-p}^0 + i\eta} \\ &\quad - \frac{\theta(k_F - |\mathbf{P}/2+\mathbf{p}|)\theta(k_F - |\mathbf{P}/2-\mathbf{p}|)}{\hbar P_0 - \epsilon_{\frac{P}{2}+p}^0 - \epsilon_{\frac{P}{2}-p}^0 - i\eta} \end{aligned} \quad (66)$$

となる。ここで、全エネルギー E

$$E \equiv \hbar P_0 - \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{4m} \quad (67)$$

と

$$N(\mathbf{P}, \mathbf{p}) \equiv 1 - n_{\frac{P}{2}+p}^0 - n_{\frac{P}{2}-p}^0 \quad (68)$$

を定義する。ここで、 $n_p^0 \equiv \theta(k_F - p)$ である。

$$\begin{aligned} \hbar P_0 - \epsilon_{\frac{P}{2}+p}^0 - \epsilon_{\frac{P}{2}-p}^0 &= \hbar P_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\mathbf{P}^2}{4} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p}^2 + \frac{\mathbf{P}^2}{4} - \mathbf{P} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p}^2 \right) \\ &= E - \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{m} \end{aligned} \quad (69)$$

なので、(66) は

$$\frac{i}{\hbar} \int \frac{dp_0}{2\pi} G^{(0)}(P/2+p)G^{(0)}(P/2-p) = \frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{p})}{E - \hbar^2 \mathbf{p}^2/m + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{p})} \quad (70)$$

と書ける。よって、(64) は

$$\chi(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') + \frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{p})}{E - \hbar^2 \mathbf{p}^2/m + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{p})} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} U_0(\mathbf{q}) \chi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P) \quad (71)$$

となる。また、 Γ を重心の波数ベクトルと、相対波数ベクトルで書き直しておく。

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) &\equiv \Gamma(P/2+p, P/2-p; P/2+p', P/2-p') \\ &= \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} U_0(\mathbf{q}) \chi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P) \end{aligned} \quad (72)$$

ここで、(71)、(72) を散乱振幅 \tilde{f} について書き換える。そこで、新たな変数

$$v \equiv \frac{mU_0}{\hbar^2}, \quad \epsilon \equiv \frac{mE}{\hbar^2} \quad (73)$$

を定義し、(71) で $N = 1$ の場合を考える。これは、 $k_F \rightarrow 0$ 、すなわち、低密度極限での結果と一致する。 χ_0 を (71) の $N = 1$ の解とすると

$$(\epsilon - p^2 + i\eta)\chi_0(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) - \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P) = (2\pi)^3(\epsilon - p^2 + i\eta)\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (74)$$

となる。ここで、運動量表示での Schrödinger 方程式は

$$(k^2 - p^2 + i\eta)\psi_k(\mathbf{p}) - \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q})\psi_k(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = 0 \quad (75)$$

である。(75)を用いると χ_0 は

$$\chi_0(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) = (\epsilon - p'^2 + i\eta) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p} - \mathbf{q})\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{p}')}{\epsilon - k^2 + i\eta} \quad (76)$$

と書ける。これは以下の計算によりわかる。

$$\begin{aligned} & (\epsilon - p^2 + i\eta)(\epsilon - p'^2 + i\eta) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{p}')}{\epsilon - k^2 + i\eta} - \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q})(\epsilon - p'^2 + i\eta) \\ & \times \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p} - \mathbf{q})\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{p}')}{\epsilon - k^2 + i\eta} \\ & = (\epsilon - p'^2 + i\eta) \left[(\epsilon - p'^2 + i\eta) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{p}')}{\epsilon - k^2 + i\eta} \right. \\ & \quad \left. - \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q}) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p} - \mathbf{q})\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{p}')}{\epsilon - k^2 + i\eta} \right] \\ & = (\epsilon - p'^2 + i\eta) \left[(\epsilon - p'^2 + i\eta) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{p}')}{\epsilon - k^2 + i\eta} \right. \\ & \quad \left. - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{k^2 - p^2 + i\eta}{\epsilon - k^2 + i\eta} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{p}') \right] \\ & = (\epsilon - p'^2 + i\eta) \left[\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\epsilon - p^2 + i\eta - k^2 + p^2 - i\eta}{\epsilon - k^2 + i\eta} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{p}') \right] \\ & = (\epsilon - p'^2 + i\eta) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{p}') = (2\pi)^3 (\epsilon - p'^2 + i\eta) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \end{aligned} \quad (77)$$

ここで、

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}) + \frac{\tilde{f}(\mathbf{p}, \mathbf{k})}{k^2 - p^2 + i\eta} \quad (78)$$

の複素共役を (76) に代入すると

$$\begin{aligned} \chi_0(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) & = (\epsilon - p'^2 + i\eta) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})}{\epsilon - k^2 + i\eta} \left[(2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{k}) + \frac{\tilde{f}^*(\mathbf{p}', \mathbf{k})}{k^2 - p'^2 - i\eta} \right] \\ & = \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}) + (\epsilon - p'^2 + i\eta) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})\tilde{f}^*(\mathbf{p}', \mathbf{k})}{(\epsilon - k^2 + i\eta)(k^2 - p'^2 - i\eta)} \\ & = \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}) + (\epsilon - p'^2 + i\eta) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) \left[\frac{1}{\epsilon - k^2 + i\eta} + \frac{1}{k^2 - p'^2 - i\eta} \right] \frac{\tilde{f}^*(\mathbf{p}', \mathbf{k})}{\epsilon - p'^2} \\ & = \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p}) + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) \left[\frac{1}{\epsilon - k^2 + i\eta} + \frac{1}{k^2 - p'^2 - i\eta} \right] \tilde{f}^*(\mathbf{p}', \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (79)$$

を得る。最後に、 Γ_0 を (72) とのアナロジーで

$$\begin{aligned} \Gamma_0(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) & \equiv \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} U_0(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P) \\ & = \frac{\hbar^2}{m} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P) \end{aligned} \quad (80)$$

を定義する。これと散乱振幅の定義

$$\tilde{f}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \equiv \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \quad (81)$$

を用いれば、 Γ_0 の積分表現

$$\begin{aligned} \frac{m}{\hbar^2} \Gamma_0(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) &= \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \\ &\quad \times \left[\frac{1}{\epsilon - k^2 + i\eta} + \frac{1}{k^2 - p'^2 - i\eta} \right] \tilde{f}^*(\mathbf{p}', \mathbf{k}) \\ &= \tilde{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \left(\frac{1}{\epsilon - k^2 + i\eta} + \frac{1}{k^2 - p'^2 - i\eta} \right) \tilde{f}^*(\mathbf{p}', \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (82)$$

を得る。ここで、 $\epsilon = p'^2$ とおくと上式は

$$\frac{m}{\hbar^2} \Gamma_0(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) = \tilde{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \quad (83)$$

となる。

ここで、 N が一般の場合に戻る。(71) は (73) を使うと

$$\chi(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) - \frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{p})}{\epsilon - p^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{p})} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q}) \chi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (84)$$

だから、少し、書き換えて

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) &- \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q}) \frac{\chi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P)}{\epsilon - p^2 + i\eta} \\ &= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') + \left[\frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{p})}{\epsilon - p^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{p})} - \frac{1}{\epsilon - p^2 + i\eta} \right] \Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) \end{aligned} \quad (85)$$

となる。この式と (74) を比較すると、(85) の左辺は、 χ_0 の逆演算子になっている。これは普通の Green 関数の手法より χ は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left\{ (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{k}) \chi_0(\mathbf{p}, \mathbf{k}, P) + \chi_0(\mathbf{p}, \mathbf{k}, P) \left[\frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{k})}{\epsilon - k^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{k})} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{\epsilon - k^2 + i\eta} \right] \frac{m}{\hbar^2} \Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{k}, P) \right\} \\ &= \chi_0(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) \\ &\quad + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \chi_0(\mathbf{p}, \mathbf{k}, P) \left[\frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{k})}{\epsilon - k^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{k})} - \frac{1}{\epsilon - k^2 + i\eta} \right] \frac{m}{\hbar^2} \Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{k}, P) \end{aligned} \quad (86)$$

上式と、(80) より

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P) &= \chi_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{p}', P) + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \chi_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{k}, P) \\ &\quad \times \left[\frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{p})}{\epsilon - k^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{k})} - \frac{1}{\epsilon - k^2 + i\eta} \right] \frac{m}{\hbar^2} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{p}', P) \\ \Rightarrow \Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) &= \Gamma_0(\mathbf{p}, \mathbf{p}', P) + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \Gamma_0(\mathbf{p}, \mathbf{k}, P) \\ &\quad \times \left[\frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{p})}{\epsilon - k^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{k})} - \frac{1}{\epsilon - k^2 + i\eta} \right] \frac{m}{\hbar^2} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{p}', P) \end{aligned} \quad (87)$$

を得る。

ここで、(87) を $k_F a \ll 1$ のとき、すなわち、低密度のとき展開する。(55) より Self-energy は

$$\hbar\Sigma^*(p) = -2i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) \Gamma(pk; pk) + i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) \Gamma(kp; pk) \quad (88)$$

であるが、新たな変数

$$\mathbf{q} \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{p} - \mathbf{k}), \quad \mathbf{P} \equiv \mathbf{p} + \mathbf{k}, \quad P_0 \equiv p_0 + k_0 \quad (89)$$

を定義すると (72) より

$$\hbar\Sigma^*(p) = -2i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P) + i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) \Gamma(-\mathbf{q}, \mathbf{q}, P) \quad (90)$$

となる。 Γ を $k_F a$ の 2 次まで展開することにする。S 波散乱長を a とすると S 波散乱の phase shift は

$$\delta_0 \simeq -ka + O((ka)^3) \quad (91)$$

となる。 l 番目の部分波については、 $\delta_l \simeq O((ka)^{2l+1})$ となる。散乱振幅は

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \\ &\simeq \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} (1 + i\delta_l) \delta_l P_l(\cos \theta) \simeq \frac{\delta_0}{k} + \frac{i\delta_0^2}{k} = -a + ika^2 \end{aligned} \quad (92)$$

と展開できる。この極限下では、散乱振幅は S 波散乱長にしか依存しない。剛体球の場合、 a は剛体球の直径である。また、

$$\tilde{f}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \simeq 4\pi a - 4\pi i a^2 k \quad (93)$$

である。(82)、(93) より

$$\begin{aligned} \frac{m}{\hbar^2} \Gamma_0(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P) &= 4\pi a - 4\pi i a^2 q + \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} (4\pi a - 4\pi i a^2 q) \\ &\quad \times \left[\frac{1}{\epsilon - k'^2 + i\eta} + \frac{1}{k'^2 - q^2 - i\eta} \right] (4\pi a - 4\pi i a^2 q) \\ &\simeq 4\pi a - 4\pi i q a^2 + (4\pi a)^2 \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{\epsilon - k'^2 + i\eta} + \frac{1}{k'^2 - q^2 - i\eta} \right) \\ &= 4\pi a + (4\pi a)^2 \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{\epsilon - k'^2 + i\eta} + \text{P} \frac{1}{k'^2 - q^2} \right) \end{aligned} \quad (94)$$

となる。(87) と合わせると

$$\begin{aligned} \frac{m}{\hbar^2} \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P) &= 4\pi a + (4\pi a)^2 \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{\epsilon - k'^2 + i\eta} + \text{P} \frac{1}{k'^2 - q^2} \right) \\ &\quad + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} [4\pi a + O(a^2)] \left[\frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{k})}{\epsilon - k^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{k})} - \frac{1}{\epsilon - k^2 + i\eta} \right] \\ &= 4\pi a + (4\pi a)^2 \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \left[\frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{k}')}{\epsilon - k'^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{k}')} + \text{P} \frac{1}{k'^2 - q^2} \right] \end{aligned} \quad (95)$$

を得る。また、上式より $\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P) = \Gamma(-\mathbf{q}, \mathbf{q}, P)$ であるから、(90) は

$$\hbar\Sigma^*(p) = -i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{q}, P) \quad (96)$$

と書ける。ただし、これは a^2 の order までしか有効でない。(95) より Self-energy を a で展開すると

$$\hbar\Sigma^*(p) = \hbar\Sigma_{(1)}^*(p) + \hbar\Sigma_{(2)}^*(p) \quad (97)$$

$$\hbar\Sigma_{(1)}^*(p) = -i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) \frac{4\pi a \hbar^2}{m} e^{ik_0 \eta'} \quad (98)$$

$$\hbar\Sigma_{(2)}^*(p) = -i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^{(0)}(k) e^{ik_0 \eta'} \frac{(4\pi a \hbar)^2}{m} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \left[\frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{k}')}{\epsilon - k'^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{k}')} + \text{P} \frac{1}{k'^2 - q^2} \right] \quad (99)$$

となる。ただし、下つき添え字の (\dots) は摂動の次数を表すのではなく、 a の次数を表している。ここで、 $\hbar\Sigma_{(1)}^*$ を上半平面で積分すると

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma_{(1)}^*(p) &= -i \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{4\pi a \hbar^2}{m} e^{ik_0 \eta'} \left[\frac{\theta(k - k_F)}{k_0 - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F - k)}{k_0 - \omega_k - i\eta} \right] \\ &= -i \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \int \frac{dk_0}{2\pi} e^{ik_0 \eta'} \left[\frac{\theta(k - k_F)}{k_0 - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F - k)}{k_0 - \omega_k - i\eta} \right] \\ &= -i \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi a \hbar^2}{m} i\theta(k_F - k) \\ &= \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \frac{2k_F}{3\pi} a \end{aligned} \quad (100)$$

となる。 $\hbar\Sigma_{(2)}^*$ は $\epsilon = \frac{mP_0}{\hbar} - \frac{1}{4}\mathbf{P}^2 = \frac{mP_0}{\hbar} + \frac{mk_0}{\hbar} - \frac{1}{4}\mathbf{P}^2$ より

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma_{(2)}^*(p) &= -i \frac{16\pi^2 a^2 \hbar^2}{m} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} e^{ik_0 \eta'} \left[\frac{\theta(k - k_F)}{k_0 - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F - k)}{k_0 - \omega_k - i\eta} \right] \\ &\quad \times \left[\frac{N(\mathbf{P}, \mathbf{k}')}{\epsilon - k'^2 + i\eta N(\mathbf{P}, \mathbf{k}')} + \text{P} \frac{1}{k'^2 - q^2} \right] \\ &= \frac{16\pi^2 a^2 \hbar^2}{m} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \left\{ -\frac{\hbar}{m} \frac{\theta(k - k_F)\theta(k_F - |\mathbf{P}/2 + \mathbf{k}'|)\theta(k_F - |\mathbf{P}/2 - \mathbf{k}'|)}{-P_0 + \frac{\hbar P^2}{4m} + \frac{\hbar k'^2}{m} - \frac{\hbar k^2}{2m} + 2i\eta} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar}{m} \frac{\theta(k_F - k)\theta(|\mathbf{P}/2 + \mathbf{k}'| - k_F)\theta(|\mathbf{P}/2 - \mathbf{k}'| - k_F)}{P_0 - \frac{\hbar P^2}{4m} - \frac{\hbar k'^2}{m} + \frac{\hbar k^2}{2m} + 2i\eta} - \text{P} \frac{\theta(k_F - k)}{q^2 - k'^2} \right\} \\ &= \frac{16\pi^2 a^2 \hbar^2}{m} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \left[-\frac{\hbar}{m} \frac{\theta(k - k_F)\theta(k_F - |\mathbf{P}/2 + \mathbf{k}'|)\theta(k_F - |\mathbf{P}/2 - \mathbf{k}'|)}{\frac{mP_0}{\hbar} - \frac{1}{2}p^2 + q^2 - k^2 + i\eta} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar}{m} \frac{\theta(k_F - k)\theta(|\mathbf{P}/2 + \mathbf{k}'| - k_F)\theta(|\mathbf{P}/2 - \mathbf{k}'| - k_F)}{\frac{mP_0}{\hbar} - \frac{P^2}{2} + q^2 - k'^2 - i\eta} - \text{P} \frac{\theta(k_F - k)}{q^2 - k'^2} \right] \end{aligned} \quad (101)$$

となる。ここで、上半平面で積分した。また、 $\frac{\hbar k^2}{2m} - \frac{\hbar P^2}{4m} = \frac{\hbar q^2}{m} - \frac{\hbar p^2}{2m}$ を用いた。

1.6 遮蔽効果の計算

縮退した電子ガスの電荷 Ze を持った不純物に対する応答を見る。この不純物を作る外場を

$$\varphi^{ex}(\mathbf{x}, t) = \frac{Ze}{x} \quad (102)$$

とする。この Fourier 変換は

$$\begin{aligned} \varphi^{ex}(\mathbf{q}, \omega) &= \int d\mathbf{x} \int dt e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\omega t} \frac{Ze}{x} \\ &= 2\pi\delta(\omega) 2\pi \int_0^\infty dx x^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{Ze e^{iqx \cos\theta}}{x} \\ &= 4\pi^2\delta(\omega) Ze \int_0^\infty dx x \left[\frac{-1}{iqx} e^{iqx \cos\theta} \right]_0^\pi \\ &= \frac{8\pi^2 Ze \delta(\omega)}{q} \int_0^\infty dx \sin qx \\ &= \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{8\pi^2 Ze \delta(\omega)}{q} \text{Im} \int_0^\infty dx e^{(iq-\eta)x} \\ &= \frac{8\pi^2 Ze}{q^2} \delta(\omega) \end{aligned} \quad (103)$$

となる。これより線形応答は

$$\begin{aligned} \delta\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle &= \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} e^{iqx} \delta\langle \hat{n}(\mathbf{q}, \omega) \rangle \\ &= \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} e^{iqx} \frac{1}{\hbar} D^R(\mathbf{q}, \omega) (-e) \frac{8\pi^2 Ze}{q^2} \delta(\omega) \\ &= - \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} D^R(\mathbf{q}, 0) \frac{4\pi Ze^2}{\hbar q^2} \\ &= - \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \Pi^R(\mathbf{q}, 0) \frac{4\pi Ze^2}{q^2} \\ &= - \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \Pi^R(\mathbf{q}, 0) ZU_0(\mathbf{q}, 0) \\ &= -Z \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} [\Pi^*(\mathbf{q}, 0) U(\mathbf{q}, 0)]^R \\ &= -Z \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \left[\frac{1}{\kappa^R(\mathbf{q}, 0)} - 1 \right] \end{aligned} \quad (104)$$

となる。途中で

$$D^R \equiv \hbar \Pi^R, \quad U_0(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2}, \quad \kappa^R \equiv (1 - U\Pi^*) \quad (105)$$

を用いた。 $\kappa^R(\mathbf{q}, 0)$ は (167)、(168) と

$$\text{Re}D(\mathbf{q}, \omega) = \text{Re}D^R(\mathbf{q}, \omega) \quad (106)$$

$$\text{Im}D(\mathbf{q}, \omega) \text{sgn}(\omega) = \text{Im}D^R(\mathbf{q}, \omega) \quad (107)$$

を用いれば

$$\kappa_r^R(q, 0) = 1 + \frac{2\alpha r_s}{\pi q^2} \left[1 - \frac{1}{q} \left(1 - \frac{q^2}{4} \right) \ln \left| \frac{1 - \frac{q}{2}}{1 + \frac{q}{2}} \right| \right] \quad (108)$$

$$\alpha \equiv \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad V \equiv \frac{4\pi r_0^3}{3} N, \quad a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad r_s \equiv \frac{r_0}{a_0} \quad (109)$$

となる。ここで、関数 $g(x)$ を次式で定義する。

$$g(x) \equiv \frac{1}{2} - \frac{1}{2x} \left(1 - \frac{x^2}{4} \right) \ln \left| \frac{1 - \frac{x}{2}}{1 + \frac{x}{2}} \right| \quad (110)$$

これは $x \ll 1$ で

$$g(x) \simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{2x} \left(1 - \frac{x^2}{4} \right) \left(-\frac{x}{2} - \frac{x}{2} \right) = 1 + O(x^2) \quad (111)$$

であり、 $|x - 2| \ll 1$ すなわち、 $x \simeq 2$ で

$$\begin{aligned} g(x) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2x} \left[\frac{(x-2)(x+2)}{4} \right] \ln \left| \frac{x-2}{x+2} \right| \\ &\simeq \frac{1}{2} + \frac{1}{4}(x-2) \ln \left| \frac{x-2}{4} \right| \end{aligned} \quad (112)$$

$x \gg 1$ で

$$\begin{aligned} g(x) &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2x} \left(1 - \frac{x^2}{4} \right) \ln \left| \frac{1 - \frac{x}{2}}{1 + \frac{x}{2}} \right| \\ &\simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{2x} \left(1 - \frac{x^2}{4} \right) \left[-\frac{2}{x} - \frac{2}{x^2} - \frac{8}{3x^3} - \frac{2}{x} + \frac{2}{x^2} - \frac{8}{3x^3} \right] \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2x} \left(1 - \frac{x^2}{4} \right) \left[\frac{4}{x^2} - \frac{16}{3x^3} \right] \simeq \frac{4}{3x^2} \end{aligned} \quad (113)$$

となる。(108) より $\delta\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle$ は

$$\delta\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle = Z \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \frac{\frac{4\alpha r_s}{\pi} g\left(\frac{q}{k_F}\right)}{\left(\frac{q}{k_F}\right)^2 + \frac{4\alpha r_s}{\pi} g\left(\frac{q}{k_F}\right)} \quad (114)$$

となる。全誘導電荷は δQ_r は上式を積分して

$$\begin{aligned} \delta Q_r &= \int d\mathbf{x} \delta\langle \hat{\rho}(\mathbf{x}, t) \rangle_r \\ &= -Ze \int d\mathbf{q} \int \frac{d\mathbf{x}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \frac{\frac{4\alpha r_s}{\pi} g\left(\frac{q}{k_F}\right)}{\left(\frac{q}{k_F}\right)^2 + \frac{4\alpha r_s}{\pi} g\left(\frac{q}{k_F}\right)} \\ &= -Ze \int d\mathbf{q} \delta(\mathbf{q}) \frac{\frac{4\alpha r_s}{\pi} g\left(\frac{q}{k_F}\right)}{\left(\frac{q}{k_F}\right)^2 + \frac{4\alpha r_s}{\pi} g\left(\frac{q}{k_F}\right)} = -Ze \end{aligned} \quad (115)$$

となる。途中で $g(0) = 1$ を用いた。Thomas-Fermi 波数

$$q_{TF} \equiv \left(\frac{4\alpha r_s}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} k_F = \left(\frac{4k_F}{a_0\pi} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{6\pi n e^2}{\epsilon_F^0} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (116)$$

を用いると (114) は

$$\begin{aligned} \delta\langle\hat{\rho}(\mathbf{x})\rangle_r &= -e\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x})\rangle_r \\ &= -Ze \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \frac{q_{TF}^2 g(\frac{q}{k_F})}{q^2 + q_{TF}^2 g(\frac{q}{k_F})} \\ &= \frac{-Ze}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dq q^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{iqx \cos\theta} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \frac{q_{TF}^2 g(\frac{q}{k_F})}{q^2 + q_{TF}^2 g(\frac{q}{k_F})} \\ &= -\frac{Ze}{2\pi^2 x} \int_0^\infty dq q \sin qx \frac{q_{TF}^2 g(\frac{q}{k_F})}{q^2 + q_{TF}^2 g(\frac{q}{k_F})} \end{aligned} \quad (117)$$

となる。

1.7 電子ガス関連の計算

2体の相互作用ポテンシャル $V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ の期待値は

$$\begin{aligned}
 \langle V \rangle &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') (-1) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \left[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') - \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\langle \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \rangle - \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \rangle \right].
 \end{aligned} \tag{118}$$

ここで、 $\hat{n}(\mathbf{x}) \equiv \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})$, $\tilde{n}(\mathbf{x}) \equiv \hat{n}(\mathbf{x}) - \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle$ を用いて

$$\begin{aligned}
 \langle V \rangle &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle] \\
 &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [\langle \tilde{n}(\mathbf{x}) \tilde{n}(\mathbf{x}') \rangle + \langle \tilde{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \\
 &\quad + \langle \tilde{n}(\mathbf{x}') \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle + \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle] \\
 &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [\langle \tilde{n}(\mathbf{x}) \tilde{n}(\mathbf{x}') \rangle + \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle - \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \\
 &\quad + \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle + \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle - \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle] \\
 &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [\langle \tilde{n}(\mathbf{x}) \tilde{n}(\mathbf{x}') \rangle + \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle] \tag{119}
 \end{aligned}$$

となる。ここで、本質的なのは第1項の $\langle \tilde{n}(\mathbf{x}) \tilde{n}(\mathbf{x}') \rangle$ である。これを計算するために相関関数

$$iD(x, x') \equiv \frac{\langle \Psi_0 | T [\tilde{n}_H(x) \tilde{n}_H(x')] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \tag{120}$$

を定義する。これより

$$\begin{aligned}
 iD(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t) &= \frac{\langle \Psi_0 | T [e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \tilde{n}(\mathbf{x}) e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \tilde{n}(\mathbf{x}') e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \\
 &= \frac{\langle \Psi_0 | T [e^{\frac{iEt}{\hbar}} \tilde{n}(\mathbf{x}) \tilde{n}(\mathbf{x}') e^{-\frac{iEt}{\hbar}}] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \\
 &= \langle \tilde{n}(\mathbf{x}) \tilde{n}(\mathbf{x}') \rangle
 \end{aligned} \tag{121}$$

となる。また、相互作用がない系での相関関数を

$$iD^{(0)}(x, x') \equiv \langle \varphi_0 | T [\tilde{n}_I(x) \tilde{n}_I(x')] | \varphi_0 \rangle \tag{122}$$

と定義すれば (119) は

$$\begin{aligned}
 \langle V \rangle &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[iD^{(0)}(\mathbf{x}'t, \mathbf{x}t) + \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \right] \\
 &\quad + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[iD(\mathbf{x}'t, \mathbf{x}t) - iD^{(0)}(\mathbf{x}'t, \mathbf{x}t) \right]
 \end{aligned} \tag{123}$$

と書ける。また、

$$\begin{aligned}
iD^{(0)}(x, x') &= \langle \varphi_0 | T[\hat{n}_I(x)\hat{n}_I(x')] | \varphi_0 \rangle \\
&= \langle \varphi_0 | T[\hat{n}_I(x)\hat{n}_I(x')] | \varphi_0 \rangle - \langle \varphi_0 | \hat{n}_I(x) | \varphi_0 \rangle \langle \hat{n}_I(x') \rangle \\
&\quad - \langle \varphi_0 | \hat{n}_I(x') | \varphi_0 \rangle \langle \hat{n}_I(x) \rangle + \langle \hat{n}_I(x) \rangle \langle \hat{n}_I(x') \rangle \\
&= \langle \varphi_0 | T[\hat{n}_I(x)\hat{n}_I(x')] | \varphi_0 \rangle - \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle
\end{aligned} \tag{124}$$

であるが、特に $t = t'$ のとき

$$\begin{aligned}
iD^{(0)}(\mathbf{x}'t, \mathbf{x}t) &= \langle \varphi_0 | \hat{n}(\mathbf{x}')\hat{n}(\mathbf{x}) | \varphi_0 \rangle - \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \\
&= \langle \varphi_0 | \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}) | \varphi_0 \rangle - \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \\
&= \langle \varphi_0 | \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}')[-\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}') + \delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}) | \varphi_0 \rangle - \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \\
&= \langle \varphi_0 | \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}) | \varphi_0 \rangle + \delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \varphi_0 | \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}) | \varphi_0 \rangle \\
&\quad - \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle
\end{aligned} \tag{125}$$

となるから (123) は

$$\langle V \rangle = \langle \varphi_0 | \hat{V} | \varphi_0 \rangle + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[iD(\mathbf{x}'t, \mathbf{x}t) - iD^{(0)}(\mathbf{x}'t, \mathbf{x}t) \right] \tag{126}$$

と変形できる。これより、基底状態のエネルギーは

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle &= \langle \varphi_0 | \hat{H} | \varphi_0 \rangle + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[iD(\mathbf{x}'t, \mathbf{x}t) - iD^{(0)}(\mathbf{x}'t, \mathbf{x}t) \right] \\
&\equiv \langle \varphi_0 | \hat{H} | \varphi_0 \rangle + E_{\text{corr}}
\end{aligned} \tag{127}$$

となる。第2項目を相関エネルギーと呼ぶ。一様系では $D(x, x)$ は $x - x'$ のみの関数となるから Fourier 変換は

$$D^\lambda(x, x') = D^\lambda(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4q e^{iq(x-x')} D^\lambda(\mathbf{q}, \omega) \tag{128}$$

となる。ここで、 E_{corr} に代入して

$$\begin{aligned}
E_{\text{corr}} &= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^4} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \int d^4q e^{iq(x-x')} \lambda V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[iD^\lambda(\mathbf{q}, \omega) - iD^0(\mathbf{q}, \omega) \right] \\
&= \frac{1}{2} \frac{V}{(2\pi)^4} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^4q \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{iq(x-x')} \lambda V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[iD^\lambda(\mathbf{q}, \omega) - iD^0(\mathbf{q}, \omega) \right] \\
&= \frac{1}{2} \frac{V}{(2\pi)^4} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^4q \lambda V(\mathbf{q}) \left[iD^\lambda(\mathbf{q}, \omega) - iD^0(\mathbf{q}, \omega) \right]
\end{aligned} \tag{129}$$

E_{corr} の運動量表示を得る。ここで、(124) より

$$\begin{aligned}
iD^{(0)}(x, x') &= \langle \varphi_0 | T[\hat{n}_I(x)\hat{n}_I(x')] | \varphi_0 \rangle - \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \\
&= \langle \varphi_0 | T[\hat{\psi}_\alpha^\dagger(x)\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^\dagger(x')\hat{\psi}_\beta(x')] | \varphi_0 \rangle - \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \\
&= iG_{\alpha\alpha}^{(0)}(x, x_+) iG_{\beta\beta}^{(0)}(x', x'_+) - iG_{\alpha\beta}^{(0)}(x, x') iG_{\beta\alpha}^{(0)}(x', x) - \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \langle \hat{n}(\mathbf{x}') \rangle \\
&= (2s + 1) G^{(0)}(x, x') G^{(0)}(x', x)
\end{aligned} \tag{130}$$

となる。ここで、有効相互作用 $U(x, x')$ を定義する。 $U_0(x, x') = V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t')$ であることに注意すると

$$U(x, x') \equiv U_0(x, x') - \frac{i}{\hbar} \int d^4x_1 \int d^4x'_1 U_0(x, x_1) G^{(0)}(x_1, x'_1) \times G^{(0)}(x'_1, x_1) U_0(x'_1, x') + \dots \quad (131)$$

これより、分極部分 $\Pi^{(0)}(x, x')$ 、 $\Pi(x, x')$ を以下のように定義する。

$$\hbar\Pi^{(0)}(x, x') \equiv -iG_{\alpha\beta}^{(0)}(x, x')G_{\beta\alpha}^{(0)}(x', x) = D^{(0)}(x, x') \quad (132)$$

$$\hbar\Pi(x, x') \equiv D(x, x') \quad (133)$$

よって、有効相互作用は以下のように書ける。

$$U(x, x') \equiv U_0(x, x') + \int d^4x_1 \int d^4x'_1 U_0(x, x_1) \Pi^{(0)}(x_1, x'_1) U_0(x'_1, x') + \dots \quad (134)$$

proper な分極部分 $\Pi^*(x, x')$ を使えば

$$\int d^4x_1 U_0(x, x_1) \Pi(x_1, x') = \int d^4x_1 U(x, x_1) \Pi^*(x_1, x') \quad (135)$$

と書ける。これは Π の展開を有効相互作用に押し付けた形になっている。また、運動量表示では

$$U_0(q)\Pi(q) = U(q)\Pi^*(q) \quad (136)$$

である。これを用いると相関エネルギーは

$$\begin{aligned} E_{\text{corr}} &= \frac{i\hbar V}{2(2\pi)^4} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^4q [\lambda U_0(q)\Pi^\lambda(q) - \lambda U_0(q)\Pi^0(q)] \\ &= \frac{i\hbar V}{2(2\pi)^4} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^4q [U^\lambda(q)\Pi^{\lambda}(q) - \lambda U_0(q)\Pi^0(q)] \end{aligned} \quad (137)$$

となる。

次に Ring 近似を導入する。Ring 近似とは有効相互作用を

$$\begin{aligned} U_r(q) &= U_0(q) + U_0(q)\Pi^{(0)}(q)U_0(q) + \dots \\ &= \frac{U_0(q)}{1 - \Pi^{(0)}(q)U_0(q)} \end{aligned} \quad (138)$$

とすることである。この近似により n 次の項は $[U_0(q)\Pi^{(0)}]^n$ となるから、相関エネルギーは

$$\begin{aligned} E_r &= \frac{i\hbar V}{2(2\pi)^4} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^4q \sum_{n=2}^{\infty} [\lambda U_0(q)\Pi^{(0)}(q)]^n \\ &= \frac{i\hbar V}{2(2\pi)^4} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^4q \frac{[\lambda U_0(q)\Pi^{(0)}(q)]^2}{1 - \lambda U_0(q)\Pi^{(0)}(q)} \end{aligned} \quad (139)$$

となる。

この相関エネルギーを計算するには $\Pi^{(0)}$ を計算しなければならない。相互作用が無いスピン 1/2 の Fermion を考えると $\Pi^{(0)}(x, x')$ は定義より

$$\Pi^{(0)}(x, x') = -\frac{2i}{\hbar} G^{(0)}(x, x') G^{(0)}(x', x) \quad (140)$$

である。これの運動量表示を考える。

$$\begin{aligned} \Pi^{(0)}(k) &= \int d^4(x - x') e^{ik(x-x')} \Pi^{(0)}(x, x') \\ &= -\frac{2i}{\hbar} \int d^4(x - x') e^{ik(x-x')} \int \frac{d^4 k_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 k_2}{(2\pi)^4} e^{i(k_1 - k_2)(x-x')} G^{(0)}(k_1) G^{(0)}(k_2) \\ &= -\frac{2i}{\hbar} \int \frac{d^4 k_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 k_2}{(2\pi)^4} \int d^4(x - x') e^{i(k+k_1-k_2)(x-x')} G^{(0)}(k_1) G^{(0)}(k_2) \\ &= -\frac{2i}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4 k_1 \int d^4 k_2 \delta(k + k_1 - k_2) G^{(0)}(k_1) G^{(0)}(k_2) \\ &= -\frac{2i}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4 k_1 G^{(0)}(k_1) G^{(0)}(k + k_1) \\ \Pi^{(0)}(q) &= -\frac{2i}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4 k G^{(0)}(k) G^{(0)}(k + q) \end{aligned} \quad (141)$$

ここで、自由粒子の Green 関数の運動量表示は

$$G^{(0)}(k) = \frac{\theta(k - k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F - k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \quad (142)$$

である。ただし、 $\omega_k \equiv \frac{\hbar k^2}{2m}$ である。これより、

$$\begin{aligned} G^{(0)}(k) G^{(0)}(k + q) &= \left[\frac{\theta(k - k_F)}{\omega - \omega_k + i\eta} + \frac{\theta(k_F - k)}{\omega - \omega_k - i\eta} \right] \\ &\quad \times \left[\frac{\theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)}{\omega + q_0 - \omega_{k+q} + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{\omega + q_0 - \omega_{k+q} - i\eta} \right] \end{aligned} \quad (143)$$

となる。これを展開して、

$$\begin{aligned} G^{(0)}(k) G^{(0)}(k + q) &= \frac{\theta(k - k_F) \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)}{(\omega - \omega_k + i\eta)(\omega + q_0 - \omega_{k+q} + i\eta)} \\ &\quad + \frac{\theta(k - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{(\omega - \omega_k + i\eta)(\omega + q_0 - \omega_{k+q} - i\eta)} \\ &\quad + \frac{\theta(k_F - k) \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)}{(\omega - \omega_k - i\eta)(\omega + q_0 - \omega_{k+q} + i\eta)} \\ &\quad + \frac{\theta(k_F - k) \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{(\omega - \omega_k - i\eta)(\omega + q_0 - \omega_{k+q} - i\eta)} \end{aligned} \quad (144)$$

この式を $\int d\omega$ で積分する。各項とも極を2つ持つが、極の虚数部分の符号が2つとも同じ項、すなわち第1、第4項が cancel する。第2項は下半平面、第3項が上半平面で複素積分すると (ω は k の第4成分)

$$\begin{aligned} \int d\omega G^{(0)}(k) G^{(0)}(k + q) &= 2\pi i \left[\frac{\theta(k_F - k) \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)}{(q_0 + \omega_k - \omega_{k+q} + i\eta)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\theta(k - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{(q_0 + \omega_k - \omega_{k+q} - i\eta)} \right] \end{aligned} \quad (145)$$

を得る。ゆえに

$$\begin{aligned} \Pi^{(0)}(q) = \frac{2}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} & \left[\frac{\theta(k_F - k)\theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)}{(q_0 + \omega_k - \omega_{k+q} + i\eta)} \right. \\ & \left. - \frac{\theta(k - k_F)\theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{(q_0 + \omega_k - \omega_{k+q} - i\eta)} \right] \end{aligned} \quad (146)$$

第2項で $\mathbf{k}' \equiv -\mathbf{k} - \mathbf{q}$ とおくと、 $\theta(k - k_F)\theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) = \theta(|\mathbf{k}' + \mathbf{q}| - k_F)\theta(k_F - k')$ となるから

$$\begin{aligned} \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, q_0) = \frac{2}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \theta(k_F - k)\theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F) & \left[\frac{1}{q_0 + \omega_k - \omega_{k+q} + i\eta} \right. \\ & \left. - \frac{1}{q_0 + \omega_{k+q} - \omega_k - i\eta} \right] \end{aligned} \quad (147)$$

上式括弧内は $q_0 \rightarrow -q_0$ の変換に対して不変だから q_0 に関して偶関数である。新たな変数 $\omega_{qk} \equiv \omega_{k+q} - \omega_k$ を定義すると

$$\begin{aligned} \omega_{qk} &= \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 + 2\mathbf{q} \cdot \mathbf{k} + q^2 - k^2) \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \left(\mathbf{q} \cdot \mathbf{k} + \frac{q^2}{2} \right) \end{aligned} \quad (148)$$

と表せる。また、 ω を実数とするとき、主値積分の公式

$$\frac{1}{\omega \pm i\eta} = P \frac{1}{\omega} \mp i\pi\delta(\omega) \quad (149)$$

$$\text{Re} \left[\frac{1}{\omega \pm i\eta} \right] = P \frac{1}{\omega} \quad (150)$$

と、ステップ関数の公式

$$\theta(x) = 1 - \theta(-x) \quad (151)$$

を用いると、

$$\begin{aligned} \text{Re}\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, q_0) &= \frac{2}{\hbar} P \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(k_F - k) [1 - \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)] \left[\frac{1}{q_0 - \omega_{qk}} - \frac{1}{q_0 + \omega_{qk}} \right] \\ &= \frac{2}{\hbar} P \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(k_F - k) [1 - \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)] \left[\frac{2\omega_{qk}}{q_0^2 - \omega_{qk}^2} \right] \end{aligned} \quad (152)$$

となる。また、 $\theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)$ が含まれる項は、 $\mathbf{k} \leftarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}$ の入れ替えで不変であるが、 ω_{qk} は $-\omega_{qk}$ となるので、この項は積分すると0になる。よって、

$$\text{Re}\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, q_0) = \frac{2}{\hbar} P \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(k_F - k) \left[\frac{1}{q_0 - \frac{\hbar}{m} \left(\mathbf{q} \cdot \mathbf{k} + \frac{q^2}{2} \right)} - \frac{1}{q_0 + \frac{\hbar}{m} \left(\mathbf{q} \cdot \mathbf{k} + \frac{q^2}{2} \right)} \right] \quad (153)$$

となる。ここで、新たな変数を

$$\nu \equiv \hbar q_0 \frac{m}{\hbar^2 k_F^2} \quad (154)$$

と定義し、波数を Fermi 波数を単位にして表すことにする。すなわち、 $k \equiv k'/k_F$ であるが、この k' を改めて、 k と書くことにする。これより

$$\begin{aligned} \text{Re}\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, q_0) &= \frac{2}{\hbar} P \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} k_F^3 \theta(k_F - k' k_F) \left[\frac{1}{\frac{\hbar k_F^2 \nu}{m} - \frac{\hbar k_F^2}{m} \left(q' k' \cos \theta + \frac{q'^2}{2} \right)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\frac{\hbar k_F^2 \nu}{m} + \frac{\hbar k_F^2}{m} \left(q' k' \cos \theta + \frac{q'^2}{2} \right)} \right] \\ &= \frac{2m k_F}{\hbar^2} P \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(1 - k_F) \left[\frac{1}{\nu - qk \cos \theta - \frac{q^2}{2}} - \frac{1}{\nu + qk \cos \theta + \frac{q^2}{2}} \right] \end{aligned} \quad (155)$$

となる。この積分は

$$\begin{aligned} &\int d\mathbf{k} \theta(1 - k_F) \left[\frac{1}{\nu - qk \cos \theta - \frac{q^2}{2}} - \frac{1}{\nu + qk \cos \theta + \frac{q^2}{2}} \right] \\ &= \int_0^1 dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left[\frac{1}{\nu - qk \cos \theta - \frac{q^2}{2}} - \frac{1}{\nu + qk \cos \theta + \frac{q^2}{2}} \right] \\ &= 2\pi \int_0^1 dk k^2 \left[\frac{1}{qk} \ln \left(\nu - qk \cos \theta - \frac{q^2}{2} \right) + \frac{1}{qk} \ln \left(\nu + qk \cos \theta + \frac{q^2}{2} \right) \right]_0^\pi \\ &= \frac{2\pi}{q} \int_0^1 dk k \left[\ln \left(\nu + qk - \frac{q^2}{2} \right) + \ln \left(\nu - qk + \frac{q^2}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. - \ln \left(\nu - qk - \frac{q^2}{2} \right) - \ln \left(\nu + qk + \frac{q^2}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (156)$$

となるが、ここで、公式

$$\int_0^1 dx x \ln(ax + b) = \frac{1}{2} \ln(a + b) - \frac{1}{4} + \frac{b}{2a} - \frac{b^2}{2a^2} \ln \left(\frac{a + b}{b} \right) \quad (157)$$

を用いると

$$\begin{aligned}
(156) &= \frac{2\pi}{q} \left\{ \frac{1}{2} \ln \left[\frac{(q + \nu - q^2/2)(-q + \nu + q^2/2)}{(-q + \nu - q^2/2)(q + \nu + q^2/2)} \right] - q \right. \\
&\quad \left. + \frac{(\nu - q^2/2)^2}{2q^2} \ln \left(\frac{-q + \nu - q^2/2}{q + \nu - q^2/2} \right) - \frac{(\nu + q^2/2)^2}{2q^2} \ln \left(\frac{-q + \nu + q^2/2}{q + \nu + q^2/2} \right) \right\} \\
&= \frac{2\pi}{q} \left\{ -q + \frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{\nu}{q} + \frac{q}{2} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{1 - \frac{\nu}{q} - \frac{q}{2}}{1 + \frac{\nu}{q} + \frac{q}{2}} \right| + \frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{\nu}{q} - \frac{q}{2} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{1 + \frac{\nu}{q} - \frac{q}{2}}{1 - \frac{\nu}{q} + \frac{q}{2}} \right| \right\}
\end{aligned} \tag{158}$$

となる。ゆえに、

$$\begin{aligned}
\text{Re}\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, q_0) &= \frac{2mk_F}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi^2} \left\{ -1 + \frac{1}{2q} \left[1 - \left(\frac{\nu}{q} - \frac{q}{2} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{1 + (\nu/q - q/2)}{1 - (\nu/q - q/2)} \right| \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2q} \left[1 - \left(\frac{\nu}{q} + \frac{q}{2} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{1 + (\nu/q + q/2)}{1 - (\nu/q + q/2)} \right| \right\}
\end{aligned} \tag{159}$$

を得る。

同様に、 $\Pi^{(0)}$ の虚部も計算できる。

$$\text{Im} \left[\frac{1}{\omega \pm i\eta} \right] = \mp \pi \delta(\omega) \tag{160}$$

より

$$\begin{aligned}
\text{Im}\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, q_0) &= \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(k_F - k) \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F) [-\pi \delta(q_0 - \omega_{qk}) - \pi \delta(q_0 + \omega_{qk})] \\
&= -\frac{1}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \theta(k_F - k) \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F) [\delta(q_0 - \omega_{qk}) + \delta(q_0 + \omega_{qk})]
\end{aligned} \tag{161}$$

となる。ここで、 $q_0 > 0$ のみを考えれば十分である。なぜなら、ステップ関数から $k < k_F < |\mathbf{k} + \mathbf{q}|$ であるから、 $\omega_{qk} = \frac{\hbar}{2m} [(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 - k^2] > 0$ となり、デルタ関数の2項が q_0 の符号にかかわらず、同じ寄与を与えるからである。実部と同じ変数変換をすると、

$$\text{Im}\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu) = -\frac{m}{(2\pi\hbar)^2} \int d\mathbf{k} \theta(1 - k) \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - 1) \delta(\nu - \mathbf{q} \cdot \mathbf{k} - q^2/2), \quad (\nu > 0) \tag{162}$$

を得る。ここで、上式のデルタ関数とステップ関数に着目すると積分領域は

$$\frac{\nu}{q} = \frac{q}{2} + \hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{k} \tag{163}$$

を満たす平面であり、かつ半径1の球と(163)が表す平面が交わる領域である。これを図8に示す。この積分領域は3つの場合に分けられる。

- (i) $q > 2$ 、 $q - \frac{q^2}{2} \leq \nu \leq \frac{q^2}{2} + q$ のとき

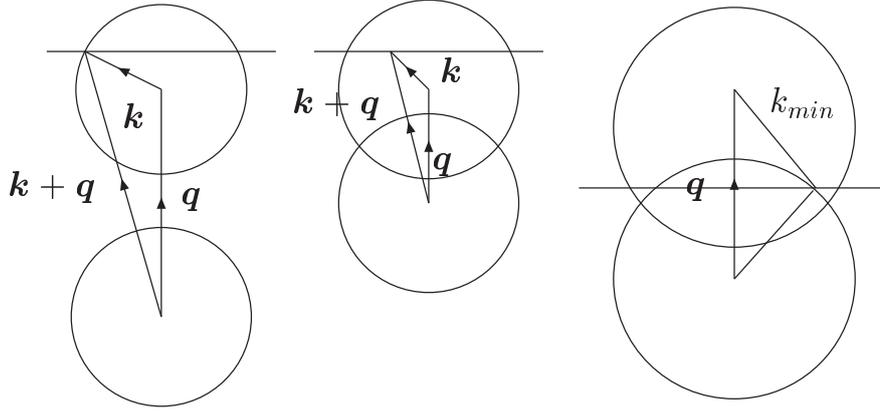


図8 $\text{Im}\Pi$ の積分領域。左から、 $q > 2$, $\frac{q^2}{2} - q \leq \nu \leq \frac{q^2}{2} + q$, $q < 2$, $q - \frac{q^2}{2} \leq \nu \leq \frac{q^2}{2} + q$, $q < 2$, $0 \leq \nu \leq q - \frac{q^2}{2}$ のときの積分領域を表す。ただし、球の半径は全て1である。

このときは図の2つの球は交わらない。2つ目の条件は上の球と、平面が交わるための条件である。このとき積分は

$$\begin{aligned} \text{Im}\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu) &= -\frac{m}{(2\pi\hbar)^2} 2\pi \int_{\nu/q - q/2}^1 dk k^2 \int_{-1}^1 d\theta \frac{1}{qk} \delta\left(\frac{\nu}{qk} - \frac{q}{2k} - t\right) \\ &= -\frac{mk_F}{4\pi\hbar^2 q} \left[1 - \left(\frac{\nu}{q} - \frac{q}{2}\right)^2\right] \end{aligned} \quad (164)$$

となる。

(ii) $q < 2$, $-\frac{q^2}{2} + q \leq \nu \leq \frac{q^2}{2} + q$ のとき

このとき、2つの球は交わる。ただし、 k の積分範囲が (i) と変わらないので、積分すると (i) と同じになる。

(iii) $q < 2$, $0 \leq \nu \leq -\frac{q^2}{2} + q$ のとき

このとき、 k の取り得る範囲が (i)、(ii) とは違う。 k_{min} は図より

$$k_{min}^2 = \left(\frac{q}{2} - \frac{\nu}{q}\right)^2 + \left[1 - \left(\frac{q}{2} + \frac{\nu}{q}\right)^2\right] = 1 - 2\nu \quad (165)$$

だから、

$$\begin{aligned} \text{Im}\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu) &= -\frac{m}{(2\pi\hbar)^2} 2\pi \int_{\sqrt{1-2\nu}}^1 dk k^2 \int_{-1}^1 d\theta \frac{1}{qk} \delta\left(\frac{\nu}{qk} - \frac{q}{2k} - t\right) \\ &= -\frac{mk_F}{4\pi\hbar^2 q} 2\nu \end{aligned} \quad (166)$$

となる。

ここで、 $\Pi^{(0)}$ の $q \rightarrow 0, \nu \rightarrow 0$ の極限を3パターンに分けて計算する。まずは、 q を固定して、 ν

を 0 にするときは

$$\text{Im}\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, 0) = 0 \quad (167)$$

$$\text{Re}\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, 0) = \frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2} \left[-1 + \frac{1}{q} \left(1 - \frac{q^2}{4} \right) \ln \left| \frac{1 - \frac{q}{2}}{1 + \frac{q}{2}} \right| \right] \quad (168)$$

となる。 ν を固定して、 \mathbf{q} を 0 にするときは

$$\text{Im}\Pi^{(0)}(0, \nu) = 0 \quad (169)$$

であるが、 \ln の Taylor 展開

$$\begin{aligned} \ln \left| \frac{1+x}{1-y} \right| &= x+y - \frac{1}{2}(x+y)(x-y) + \frac{1}{3}(x+y)(x^2-xy-y^2) \\ &\quad - \frac{1}{4}(x+y)(x-y)(x^2+y^2) + \frac{1}{5}(x^5+y^5) + \dots \end{aligned} \quad (170)$$

を使うと、(159) の対数部分は

$$\ln \left| \frac{1+\nu/q - q/2}{1-\nu/q + q/2} \right| = \ln \left| \frac{1 + \left(\frac{q}{\nu} - \frac{q^2}{2\nu} \right)}{1 - \left(\frac{q}{\nu} - \frac{q^2}{2\nu} \right)} \right| \simeq 2\frac{q}{\nu} + \frac{q^3}{\nu^2} + \frac{2q^3}{3\nu^3} + \frac{q^5}{2\nu^3} + \frac{q^5}{\nu^4} + \frac{2q^5}{5\nu^5} \quad (171)$$

$$\ln \left| \frac{1+\nu/q + q/2}{1-\nu/q - q/2} \right| = \ln \left| \frac{1 + \left(\frac{q}{\nu} + \frac{q^2}{2\nu} \right)}{1 - \left(\frac{q}{\nu} + \frac{q^2}{2\nu} \right)} \right| \simeq 2\frac{q}{\nu} - \frac{q^3}{\nu^2} + \frac{2q^3}{3\nu^3} + \frac{q^5}{2\nu^3} - \frac{q^5}{\nu^4} + \frac{2q^5}{5\nu^5} \quad (172)$$

となる。ゆえに (159) の $\{\dots\}$ 内は

$$\begin{aligned} \{\dots\} &\simeq -1 + \frac{1}{2q} \left[1 - \left(\frac{\nu}{q} - \frac{q}{2} \right)^2 \right] \left[2\frac{q}{\nu} + \frac{q^3}{\nu^2} + \frac{2q^3}{3\nu^3} + \frac{q^5}{2\nu^3} + \frac{q^5}{\nu^4} + \frac{2q^5}{5\nu^5} \right] \\ &\quad - \frac{1}{2q} \left[1 - \left(\frac{\nu}{q} + \frac{q}{2} \right)^2 \right] \left[2\frac{q}{\nu} - \frac{q^3}{\nu^2} + \frac{2q^3}{3\nu^3} + \frac{q^5}{2\nu^3} - \frac{q^5}{\nu^4} + \frac{2q^5}{5\nu^5} \right] \\ &= \frac{2q^2}{3\nu^2} + O(q^4) \end{aligned} \quad (173)$$

となる。よって、

$$\text{Re}\Pi^{(0)}(0, \nu) = \frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2} \frac{2q^2}{3\nu^2} \quad (174)$$

を得る。 $x \equiv \nu/q$ を固定して q を 0 にすると $0 \leq x \leq 1$ のときは (166), $x > 1$ のときは (162) より

$$\text{Im}\Pi^{(0)}(q, qx) = \begin{cases} -\frac{mk_F}{\hbar^2} \frac{x}{2\pi}, & (0 \leq x \leq 1) \\ 0, & (x > 1) \end{cases} \quad (175)$$

となる。実部は (159) より

$$\begin{aligned}
\text{Re}\Pi^{(0)}(q, qx) &= \frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2} \left\{ -1 + \frac{1}{2q} \left[1 - \left(x - \frac{q}{2} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{1+x-q/2}{1-x+q/2} \right| \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2q} \left[1 - \left(x + \frac{q}{2} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{1+x+q/2}{1-x-q/2} \right| \right\} \\
&= \frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2} \left\{ -1 + \frac{1}{2q} \left[1 - x^2 + qx - \frac{q^2}{4} \right] \ln \left| \frac{(1+x)(1-\frac{q}{2(1+x)})}{(1-x)(1+\frac{q}{2(1-x)})} \right| \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2q} \left[1 - x^2 - qx - \frac{q^2}{4} \right] \ln \left| \frac{(1+x)(1+\frac{q}{2(1+x)})}{(1-x)(1-\frac{q}{2(1-x)})} \right| \right\} \\
&\simeq \frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2} \left\{ -1 + \frac{1}{2q} \left[1 - x^2 - \frac{q^2}{4} \right] \left[-\frac{q}{2(1+x)} - \frac{q}{2(1-x)} - \frac{q}{2(1-x)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{q}{2(1+x)} \right] + \frac{x}{2} \left[2 \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| - \frac{q}{2(1+x)} + \frac{q}{2(1+x)} - \frac{q}{2(1-x)} + \frac{q}{2(1-x)} \right] \right\} \\
&= \frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2} \left[-1 + \frac{1}{2q} \left(1 - x^2 - \frac{q^2}{4} \right) \frac{-2q}{1-x^2} + x \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right] \\
&= \frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2} \left(-2 + x \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right) \tag{176}
\end{aligned}$$

となる。

1.8 プラズマ振動の計算

プラズマ振動を Π を用いて議論する。有効相互作用と誘電率の関係は

$$\frac{U(q)}{U_0(q)} = \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} = 1 + U_0(\mathbf{q})\Pi(\mathbf{q}, \omega) \quad (177)$$

であった。リング近似で、誘電率は ν を固定して $q \rightarrow 0$ の極限で

$$\kappa_r(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{4\alpha r_s}{3\pi\nu^2} \quad (178)$$

となる。次の関係式

$$\alpha \equiv \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad V \equiv \frac{4\pi r_0^3}{3}N, \quad a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad r_s \equiv \frac{r_0}{a_0} \quad (179)$$

を用いて誘電率は

$$\begin{aligned} \kappa_r(\mathbf{q}, \omega) &= 1 - \frac{4}{3\pi} \frac{\hbar^4 k_F^4}{\hbar^2 q_0^2 m^2} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{r_0}{a_0} \\ &= 1 - \frac{4}{3\pi} \frac{\hbar^2 k_F^4}{q_0^2 m^2} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{me^2}{\hbar^2} \left(\frac{V}{N} \frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \\ &= 1 - \frac{4}{3\pi} \frac{\hbar^2}{q_0^2 m^2} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{me^2}{\hbar^2} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{4}{3}} r_0^{-3} \\ &= 1 - \frac{4}{3\pi} \frac{e^2}{q_0^2 m} \left(\frac{9\pi}{4}\right) \frac{4\pi N}{3V} \\ &= 1 - \frac{4\pi ne^2}{q_0^2 m} \end{aligned} \quad (180)$$

と書ける。これが0になる振動数は

$$\Omega_p^2 = \frac{4\pi ne^2}{m} \quad (181)$$

であり、これは古典的プラズマ振動と一致する。

ここで、プラズマ振動を線形応答理論を用いて解析する。摂動として

$$\varphi^{ex}(\mathbf{x}, t) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \varphi_0 \delta(t) \quad (182)$$

を考える。この Fourier 変換は

$$\begin{aligned} \varphi^{ex}(\mathbf{k}, \omega) &= \int dt \int d\mathbf{x} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \varphi_0 \delta(0) \\ &= \varphi_0 (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (183)$$

である。これより粒子数密度の線形応答は

$$\begin{aligned}
\delta\langle\hat{n}(\mathbf{x}, t)\rangle &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\omega t} \Pi^R(\mathbf{k}, \omega) (-e) \varphi^{ex}(\mathbf{k}, \omega) \\
&= \frac{-e}{(2\pi)^4} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} (2\pi)^3 \varphi_0 \int d\omega e^{-i\omega t} \Pi^R(\mathbf{q}, \omega) \\
&= -e\varphi \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} U_0^{-1}(\mathbf{q}) \left[(\kappa^R(\mathbf{q}, \omega))^{-1} - 1 \right]
\end{aligned} \tag{184}$$

となる。ここで、誘電率をリング近似したものは

$$\kappa_r^R(\mathbf{q}, \omega) = 1 - V(\mathbf{q})\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \omega) \tag{185}$$

である。また、分極部分は

$$\begin{aligned}
\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \omega) &= \text{Re}\Pi^0(\mathbf{q}, \omega) + i\text{sgn}(\omega)\text{Im}\Pi^0(\mathbf{q}, \omega) \\
&= \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[P \frac{n_k^0(1 - n_{k+q}^0)}{\omega + \omega_k - \omega_{k+q}} - i\pi n_k^0(1 - n_{k+q}^0)\delta(\omega + \omega_k - \omega_{k+q}) \right] \\
&\quad - \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[P \frac{n_{k+q}^0(1 - n_k^0)}{\omega + \omega_k - \omega_{k+q}} - i\pi n_{k+q}^0(1 - n_k^0)\delta(\omega + \omega_k - \omega_{k+q}) \right] \\
&= \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{n_k^0(1 - n_{k+q}^0)}{\omega + \omega_k - \omega_{k+q} + i\eta} - \frac{n_{k+q}^0(1 - n_k^0)}{\omega + \omega_k - \omega_{k+q} + i\eta} \right] \\
&= \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{n_k^0 - n_{k+q}^0}{\omega + \omega_k - \omega_{k+q} + i\eta} \right]
\end{aligned} \tag{186}$$

となる。ここで、2つ目のイコールでステップ関数により第1項で $\omega_k - \omega_{k+q} < 0$ 、第2項で $\omega_k - \omega_{k+q} > 0$ となるから第1項で $\omega > 0$ でないとデルタ関数が0になり、第2項で $\omega < 0$ でないとデルタ関数が0となることに注意。

集団モードの振動数と寿命は (184) の極で決まる。極は $\omega = \Omega_q - i\gamma_q$ とすると $\kappa_r = 0$ より

$$1 = V(\mathbf{q})\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \Omega_q - i\gamma_q) \tag{187}$$

$\gamma_q \ll \Omega_q$ のとき上の方程式は実部と虚部を分離できて

$$\begin{aligned}
1 &= V(\mathbf{q}) \left[\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \Omega_q) - i\gamma_q \left. \frac{\partial \Pi^{0R}(\mathbf{q}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\Omega_q} \right] \\
1 &= V(\mathbf{q}) \left[\text{Re}\Pi^0(\mathbf{q}, \Omega_q) + i\text{sgn}(\Omega_q)\text{Im}\Pi^0(\mathbf{q}, \Omega_q) \right. \\
&\quad \left. - i\gamma_q \left. \frac{\partial \text{Re}\Pi^0(\mathbf{q}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\Omega_q} + \gamma_q \text{sgn}(\Omega_q) \left. \frac{\partial \text{Im}\Pi^0(\mathbf{q}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\Omega_q} \right] \\
\Rightarrow \text{(実部)} : 1 &= V(\mathbf{q})\text{Re}\Pi^0(\mathbf{q}, \Omega_q)
\end{aligned} \tag{188}$$

$$\text{(虚部)} : \gamma_q = \text{sgn}(\Omega_q)\text{Im}\Pi^0(\mathbf{q}, \Omega_q) \left[\left. \frac{\partial \text{Re}\Pi^0(\mathbf{q}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\Omega_q} \right]^{-1} \tag{189}$$

となる。ここで、十分小さい q に対して (186) を展開する。そのために (186) を変形すると

$$\begin{aligned}
\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{n_k^0}{\omega + \omega_k - \omega_{k+q} + i\eta} \right] - \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{n_{k+q}^0}{\omega + \omega_k - \omega_{k+q} + i\eta} \right] \\
&= \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[\frac{n_k^0}{\omega + \omega_k - \omega_{k+q} + i\eta} \right] - \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \left[\frac{n_{k'}^0}{\omega + \omega_{k'-q} - \omega_{k'} + i\eta} \right] \\
&= \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} n_k^0 \left[\frac{1}{\omega - \left(\frac{\hbar\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right) + i\eta} - \frac{1}{\omega - \left(\frac{\hbar\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}}{m} - \frac{\hbar q^2}{2m} \right) + i\eta} \right] \\
&= \frac{2q^2}{m} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} n_k^0 \left[\frac{1}{\left(\omega - \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}}{m} + i\eta \right)^2 - \left(\frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2} \right] \tag{190}
\end{aligned}$$

となる。この式の虚部を主値積分の公式を用いて計算すると

$$\text{Im}\Pi^{0R}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} n_k^0 \left[-\pi\delta\left(\omega - \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m}\right) + \pi\delta\left(\omega - \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}}{m} - \frac{\hbar q^2}{2m}\right) \right] \tag{191}$$

となるが、第1項、第2項ともに $|\omega| > \frac{\hbar k_F q}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m}$ であればデルタ関数の引数が0にならず、虚部が0となる。

1.9 ボーズ粒子系の相互作用ポテンシャル

ボーズ粒子系の生成消滅演算子は

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) \equiv \sum_k \hat{a}_k \varphi_k(\mathbf{x}), \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \equiv \sum_k \hat{a}_k^\dagger \varphi_k^*(\mathbf{x}) \quad (192)$$

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'} \quad (193)$$

である。ここで、 φ として自由粒子の固有関数

$$\varphi_k(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (194)$$

を選ぶ。基底状態 ($k=0$) に着目し、新たな演算子 ξ を

$$\hat{\xi}_0 \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} \hat{a}_0, \quad \hat{\xi}_0^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} \hat{a}_0^\dagger \quad (195)$$

を定義すると、これらの間の交換関係は

$$[\hat{\xi}_0, \hat{\xi}_0^\dagger] = \frac{1}{V} [\hat{a}_0, \hat{a}_0^\dagger] = \frac{1}{V} \quad (196)$$

となる。これは熱力学極限の下で 0 になる。ゆえに、 $\hat{\xi}_0$ を熱力学極限の下で c 数として扱うという近似をする。 $\hat{\xi}_0$ を使って場の演算子を書くと

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \hat{\xi}_0 + \sum_k' \hat{a}_k \varphi_k(\mathbf{x}) \equiv \sqrt{n_0} + \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \quad (197)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) = \hat{\xi}_0^\dagger + \sum_k' \hat{a}_k^\dagger \varphi_k^*(\mathbf{x}) \equiv \sqrt{n_0} + \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \quad (198)$$

となる。ただし、 $n_0 \equiv N_0/V$ である。これらを用いて、2体の相互作用ポテンシャルを書くと

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}) \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\xi}_0 \hat{\xi}_0 + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\xi}_0 \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\xi}_0 + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\xi}_0 \hat{\xi}_0 + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\xi}_0 \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\xi}_0 + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\xi}_0 \hat{\xi}_0 + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\xi}_0 \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\xi}_0 + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\xi}_0^\dagger \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\xi}_0 \hat{\xi}_0 + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\xi}_0 \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\xi}_0 + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (199)$$

となる。(199)で $\hat{\varphi}$ か $\hat{\varphi}^\dagger$ が1つしか含まれない項は $\hat{\xi}_0$ をc数として扱う限りは、例えば第2項は

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) &= \sum_k' \hat{a}_k \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2})} \\ &= \sum_k' \hat{a}_k \int d\mathbf{R} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}/2} \\ &= \sum_k' \hat{a}_k \delta_{\mathbf{k},0} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}/2} = 0 \end{aligned} \quad (200)$$

となる。ゆえに、 $\hat{\varphi}$ か $\hat{\varphi}^\dagger$ が1つしか含まれない項は、全て0である。これより

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{n_0^2}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ &\quad + \frac{n_0}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &\quad + \frac{n_0}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \\ &\quad + n_0 \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &\quad + n_0 \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &\quad + \sqrt{n_0} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &\quad + \sqrt{n_0} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &\equiv E_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3 + \hat{V}_4 + \hat{V}_5 + \hat{V}_6 + \hat{V}_7 \end{aligned} \quad (201)$$

となる。 \hat{K}' を

$$\hat{K}' \equiv \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) [T - \mu] \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^7 \hat{V}_j \quad (202)$$

とすると、Heisenberg表示の場の演算子は

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_K(\mathbf{x}t) &= e^{\frac{i\hat{K}'t}{\hbar}} \hat{\xi}_0 e^{-\frac{i\hat{K}'t}{\hbar}} + e^{\frac{i\hat{K}'t}{\hbar}} \hat{\varphi}(\mathbf{x}) e^{-\frac{i\hat{K}'t}{\hbar}} \\ &= \sqrt{n_0} + \hat{\varphi}_K(x) \end{aligned} \quad (203)$$

となる。Heisenberg表示の場の演算子は方程式

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\varphi}_K(x)}{\partial t} = [\hat{\varphi}_K(x), \hat{K}'] \quad (204)$$

を満たす。この右辺は

$$[\hat{\varphi}_K(x), \hat{K}'] = e^{\frac{i\hat{K}'t}{\hbar}} [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{K}'] e^{-\frac{i\hat{K}'t}{\hbar}} \quad (205)$$

だから、1項ずつ計算すると

$$\begin{aligned}
& [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \int d\mathbf{x}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}') [T - \mu] \hat{\psi}(\mathbf{x}')] \\
&= \int d\mathbf{x}' [T - \mu] [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}')] \\
&= \int d\mathbf{x}' [T - \mu] \{ \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}') [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}(\mathbf{x}')] + [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}')] \hat{\varphi}(\mathbf{x}') \} \\
&= [T - \mu] \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \tag{206}
\end{aligned}$$

$$[\hat{\varphi}(\mathbf{x}), E_0] = 0 \tag{207}$$

$$[\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{V}_1] = \frac{n_0}{2} \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1)] = 0 \tag{208}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{V}_2] &= \frac{n_0}{2} \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_2)] \\
&= \frac{n_0}{2} \left[\int d\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_1) + \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \right] \tag{209}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{V}_3] &= n_0 \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1)] \\
&= n_0 \int d\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1) \tag{210}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{V}_4] &= n_0 \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1)] \\
&= n_0 \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \tag{211}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{V}_5] &= \sqrt{n_0} \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1)] \\
&= \sqrt{n_0} \left[\int d\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \right] \tag{212}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{V}_6] &= \sqrt{n_0} \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1)] \\
&= \sqrt{n_0} \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \tag{213}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{V}_7] &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_1)] \\
&= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}_1 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}_2) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \tag{214}
\end{aligned}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned}
\int d\mathbf{x} \hat{\varphi}_K^\dagger(x) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - T + \mu \right] \hat{\varphi}_K(x) &= \int d\mathbf{x} \hat{\varphi}_K^\dagger(x) \left\{ [\hat{\varphi}_K(x), \hat{K}'] - (T - \mu) \hat{\varphi}_K(x) \right\} \\
&= 2\hat{V}_2 + \hat{V}_3 + \hat{V}_4 + 2\hat{V}_5 + \hat{V}_6 + 2\hat{V}_7 \tag{215}
\end{aligned}$$

となる。

1.10 ボーズ粒子系の Feynman ルール (座標表示)

1. ξ_0, ξ_0^\dagger 1 つにつき $n_0^{\frac{1}{2}}$ を付ける。
2. $\left(\frac{i}{\hbar}\right)^n (-i)^C$ を係数とする。ただし、 C は n_0 のべき、すなわち n_0^C と書いたときの C である。
3. 1 つの粒子線に $G^{(0)}$ 、相互作用線に \bar{V} を対応させる。
4. 内部変数について積分。

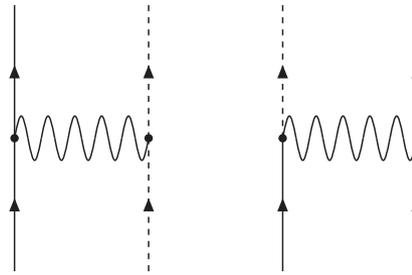


図9 ボーズ粒子系の1次のダイアグラム。左が \hat{V}_4 、右が \hat{V}_3 のダイアグラムである。

図9の右の図のGreen関数は

$$G'^{(1)}(1, 1') = \frac{n_0}{\hbar} \int d2 \int d2' \bar{V}(2 - 2') G^{(0)}(1, 2') G^{(0)}(2, 1') \quad (216)$$

であり、左の図は

$$G'^{(1)}(1, 1') = \frac{n_0}{\hbar} \int d2 \int d2' \bar{V}(2 - 2') G^{(0)}(1, 2) G^{(0)}(2, 1') \quad (217)$$

である。

1.11 ボーズ粒子系の Feynman ルール (運動量表示)

1. ξ_0, ξ_0^\dagger 1 つにつき $n_0^{\frac{1}{2}}$ を付ける。
2. $\left(\frac{i}{\hbar}\right)^n (-i)^C (2\pi)^{4(C-n)}$ を係数とする。ただし、 C は n_0 のべき、すなわち n_0^C と書いたときの C である。
3. 1 つの粒子線に $G^{(0)}$ 、相互作用線に V を対応させる。
4. 各頂点で運動量を保存させる。
5. 内部変数について積分。

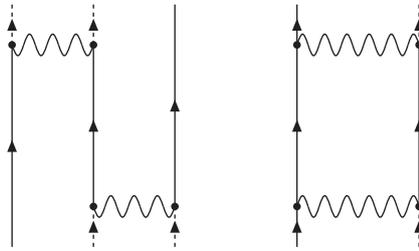


図 10 ボーズ粒子系の 2 次のダイアグラム。

図 10 の左のダイアグラムは

$$G^{(2)}(p) = \frac{n_0^2}{\hbar^2} G^{(0)}(p) V(\mathbf{p}) G^{(0)}(-p) V(\mathbf{p}) G^{(0)}(p) \quad (218)$$

であり、右のダイアグラムは

$$G^{(2)}(p) = \frac{in_0}{\hbar^2} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} G^{(0)}(p) V(\mathbf{q}) G^{(0)}(p - q) G^{(0)}(q) V(-\mathbf{q}) G^{(0)}(p) \quad (219)$$

1.12 ボーズ粒子系の Dyson 方程式

ボーズ粒子系の Dyson 方程式は運動量表示で

$$\mathbf{G}'(p) = \mathbf{G}^{(0)}(p) + \mathbf{G}^{(0)}(p)\boldsymbol{\Sigma}^*(p)\mathbf{G}'(p) \quad (220)$$

である。ただし、

$$\mathbf{G}'(p) \equiv \begin{bmatrix} G'(p) & G'_{12}(p) \\ G'_{21}(p) & G'(-p) \end{bmatrix} \quad (221)$$

$$\mathbf{G}^{(0)}(p) \equiv \begin{bmatrix} G^{(0)}(p) & 0 \\ 0 & G^{(0)}(-p) \end{bmatrix} \quad (222)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}^*(p) \equiv \begin{bmatrix} \Sigma_{11}^*(p) & \Sigma_{12}^*(p) \\ \Sigma_{21}^*(p) & \Sigma_{11}^*(-p) \end{bmatrix} \quad (223)$$

である。これらより、 $G'(p)$ 等の具体系を求めてみる。(220) より E を単位行列として、

$$\begin{aligned} [E - \mathbf{G}^{(0)}(p)\boldsymbol{\Sigma}^*(p)] \mathbf{G}'(p) &= \mathbf{G}^{(0)}(p) \\ \mathbf{G}'(p) &= [E - \mathbf{G}^{(0)}(p)\boldsymbol{\Sigma}^*(p)]^{-1} \mathbf{G}^{(0)}(p) \end{aligned} \quad (224)$$

ここで、

$$E - \mathbf{G}^{(0)}(p)\boldsymbol{\Sigma}^*(p) = \begin{bmatrix} 1 - G^{(0)}(p)\Sigma_{11}^*(p) & -G^{(0)}(p)\Sigma_{12}^*(p) \\ -G^{(0)}(-p)\Sigma_{21}^*(p) & 1 - G^{(0)}(-p)\Sigma_{11}^*(-p) \end{bmatrix} \quad (225)$$

$$\begin{aligned} \det [E - \mathbf{G}^{(0)}(p)\boldsymbol{\Sigma}^*(p)] &= 1 - G^{(0)}(p)\Sigma_{11}^*(p) - G^{(0)}(-p)\Sigma_{11}^*(-p) + G^{(0)}(p)G^{(0)}(-p) \\ &\quad \times \Sigma_{11}^*(p)\Sigma_{11}^*(-p) - G^{(0)}(p)G^{(0)}(-p)\Sigma_{12}^*(p)\Sigma_{21}^*(p) \\ &\equiv Q \end{aligned} \quad (226)$$

なので、 $E - \mathbf{G}^{(0)}(p)\boldsymbol{\Sigma}^*(p)$ の逆行列は

$$[E - \mathbf{G}^{(0)}(p)\boldsymbol{\Sigma}^*(p)]^{-1} = \frac{1}{Q} \begin{bmatrix} 1 - G^{(0)}(-p)\Sigma_{11}^*(-p) & G^{(0)}(p)\Sigma_{12}^*(p) \\ G^{(0)}(-p)\Sigma_{21}^*(p) & 1 - G^{(0)}(p)\Sigma_{11}^*(p) \end{bmatrix} \quad (227)$$

となる。これより

$$\mathbf{G}'(p) = \frac{1}{Q} \begin{bmatrix} G^{(0)}(p) - G^{(0)}(p)G^{(0)}(-p)\Sigma_{11}^*(-p) & G^{(0)}(p)G^{(0)}(-p)\Sigma_{12}^*(p) \\ G^{(0)}(p)G^{(0)}(-p)\Sigma_{21}^*(p) & G^{(0)}(-p) - G^{(0)}(p)G^{(0)}(-p)\Sigma_{11}^*(p) \end{bmatrix} \quad (228)$$

となるから、以下の量

$$D(p) \equiv [p_0 - A(p)]^2 - [\omega_p - \mu/\hbar + S(p)]^2 + \Sigma_{12}^*(p)\Sigma_{21}^*(p) \quad (229)$$

$$S(p) \equiv \frac{1}{2} [\Sigma_{11}^*(p) + \Sigma_{11}^*(-p)] \quad (230)$$

$$A(p) \equiv \frac{1}{2} [\Sigma_{11}^*(p) - \Sigma_{11}^*(-p)] \quad (231)$$

$$G^{(0)}(p) = \frac{1}{p_0 - \omega_p + \mu/\hbar + i\eta} \quad (232)$$

を用いると

$$\begin{aligned}
G'(p) &= \left[G^{(0)}(p) - G^{(0)}(p)G^{(0)}(-p)\Sigma_{11}^*(-p) \right] / \left[1 - G^{(0)}(p)\Sigma_{11}^*(p) - G^{(0)}(-p)\Sigma_{11}^*(-p) \right. \\
&\quad \left. + G^{(0)}(p)G^{(0)}(-p)\Sigma_{11}^*(p)\Sigma_{11}^*(-p) - G^{(0)}(p)G^{(0)}(-p)\Sigma_{12}^*(p)\Sigma_{21}^*(p) \right] \\
&= \left[G^{(0)-1}(-p) - \Sigma_{11}^*(-p) \right] / \left[G^{(0)-1}(p)G^{(0)-1}(-p) - G^{(0)-1}(-p)\Sigma_{11}^*(p) \right. \\
&\quad \left. - G^{(0)-1}(p)\Sigma_{11}^*(-p) + \Sigma_{11}^*(p)\Sigma_{11}^*(-p) - \Sigma_{12}^*(p)\Sigma_{21}^*(p) \right] \\
&= [-p_0 - \omega_p + \mu/\hbar - S(p) + A(p)] / \{ (p_0 - \omega_p + \mu/\hbar)(-p_0 - \omega_p + \mu/\hbar) \\
&\quad - G^{(0)-1}(-p) [S(p) + A(p)] - G^{(0)-1}(p) [S(p) - A(p)] \\
&\quad + [S(p) + A(p)] [S(p) - A(p)] - \Sigma_{12}^*(p)\Sigma_{21}^*(p) \} \\
&= [p_0 + \omega_p - \mu/\hbar + S(p) - A(p)] / \{ -(p_0 - \omega_p + \mu/\hbar)(p_0 - \omega_p + \mu/\hbar) \\
&\quad + (p_0 - \omega_p + \mu/\hbar) [S(p) + A(p)] + (p_0 - \omega_p + \mu/\hbar) [S(p) - A(p)] \\
&\quad - S^2(p) + A^2(p) + \Sigma_{12}^*(p)\Sigma_{21}^*(p) \} \\
&= [p_0 + \omega_p - \mu/\hbar + S(p) - A(p)] / \{ -(-\omega_p + \mu/\hbar)^2 + p_0^2 + 2(-\omega_p + \mu/\hbar)S(p) \\
&\quad - 2p_0A(p) - S^2(p) + A^2(p) + \Sigma_{12}^*(p)\Sigma_{21}^*(p) \} \\
&= \frac{p_0 + \omega_p - \mu/\hbar + S(p) - A(p)}{[p_0 - A(p)]^2 - [S(p) + \omega_p - \mu/\hbar]^2 + \Sigma_{12}^*(p)\Sigma_{21}^*(p)} \\
&= \frac{p_0 + \omega_p - \mu/\hbar + S(p) - A(p)}{D(p)} \tag{233}
\end{aligned}$$

となる。同様にして

$$G'_{12}(p) = -\frac{\Sigma_{12}^*(p)}{D(p)}, \quad G'_{21}(p) = -\frac{\Sigma_{21}^*(p)}{D(p)} \tag{234}$$

を得る。

1.13 温度 Green 関数を用いた様々な物理量の期待値

第 2 量子化演算子 \hat{A}

$$\hat{A} = \int d\mathbf{x} \sum_{\alpha\beta} \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}) A_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \quad (235)$$

の期待値は密度行列を用いて

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{A}] \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} A_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} A_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')e^{-\frac{\tau\hat{K}}{\hbar}} e^{\frac{\tau\hat{K}}{\hbar}} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})e^{-\frac{\tau\hat{K}}{\hbar}} e^{\frac{\tau\hat{K}}{\hbar}}] \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} A_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) \text{Tr}[\hat{\rho}e^{\frac{\tau\hat{K}}{\hbar}} \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')e^{-\frac{\tau\hat{K}}{\hbar}} e^{\frac{\tau\hat{K}}{\hbar}} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})e^{-\frac{\tau\hat{K}}{\hbar}}] \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} A_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}'\tau')\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}\tau)] \\ &= \mp \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} A_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') \\ &= \mp \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \text{tr}[A(\mathbf{x})G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')] \end{aligned} \quad (236)$$

と書ける。ただし、密度行列と温度 Green 関数

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta\hat{K}}, \quad Z \equiv \text{Tr}[e^{-\beta\hat{K}}] \quad (237)$$

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = -\langle T_\tau \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}\tau) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}'\tau') \rangle \quad (238)$$

と、Tr の巡回不変性を用いた。

相互作用ポテンシャルの場合は、スピンの依存しないとすると

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} \hat{\psi}_{\beta'}(\mathbf{x}') \hat{\psi}_{\alpha'}(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (239)$$

と書ける。この期待値を 1 粒子温度 Green 関数を用いて表す。Heisenberg 表示の演算子は

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau) = [\hat{K}, \hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)] \quad (240)$$

を満たすから、これに、 $\hat{K} = \hat{T} - \mu\hat{N}$ を用いて交換関係の部分を計算すると

$$\begin{aligned} [\hat{K}, \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] &= \sum_{\beta} \int d\mathbf{x}' [\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') T(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] - \mu \sum_{\beta} \int d\mathbf{x}' [\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\beta\beta'} \int d\mathbf{x}' \int d\mathbf{x}'' [\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\psi}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{x}'') V(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \hat{\psi}_{\beta'}(\mathbf{x}'') \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] \end{aligned} \quad (241)$$

となる。第1項の交換関係は

$$\begin{aligned}
[\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')T(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}'), \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] &= T(\mathbf{x}')[\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}'), \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] \\
&= T(\mathbf{x}') \left\{ \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')[\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}'), \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] + \sigma[\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}'), \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})]\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \right\} \\
&= -\sigma^2 T(\mathbf{x}')[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')]\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \\
&= -T(\mathbf{x}')\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \tag{242}
\end{aligned}$$

と計算でき、第2項もこれから T を除いたものに等しくなる。第3項の交換関係は

$$\begin{aligned}
[\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')\hat{\psi}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_{\beta'}(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}'), \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] &= \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')[\hat{\psi}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_{\beta'}(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}'), \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] \\
&\quad + \sigma[\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}'), \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})]\hat{\psi}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_{\beta'}(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \\
&= \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') \left\{ \hat{\psi}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{x}'')[\hat{\psi}_{\beta'}(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}'), \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] \right. \\
&\quad \left. + \sigma[\hat{\psi}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{x}''), \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})]\hat{\psi}_{\beta'}(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \right\} \\
&\quad - \sigma^2[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')]\hat{\psi}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_{\beta'}(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \\
&= -\delta_{\alpha\beta'}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'')\hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')\hat{\psi}_{\beta'}(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \\
&\quad - \delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\hat{\psi}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_{\beta'}(\mathbf{x}'')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \tag{243}
\end{aligned}$$

となる。ゆえに、(241) は

$$[\hat{K}, \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})] = -T(\mathbf{x})\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) + \mu\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) - \sum_\beta \int d\mathbf{x}' \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}')V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}')\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \tag{244}$$

となる。ここで、温度 Green 関数を微分すると

$$\begin{aligned}
\lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') \right] &= \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \text{Tr} \left[\hat{T}_\tau \hat{\rho} \hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau) \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau') \right] \\
&= \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \text{Tr} \left[\hat{T}_\tau \hat{\rho} \hbar \frac{\partial \hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)}{\partial \tau} \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau') \right] \\
&= \sigma \text{Tr} \left[\hat{T}_\tau \hat{\rho} \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau^+) \hbar \frac{\partial \hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau)}{\partial \tau} \right] \\
&= \sigma \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau^+) \left[\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu \right] \hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau) - \hat{\rho} \sum_\gamma \int d\mathbf{x}'' \right. \\
&\quad \left. \times \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'\tau^+) \hat{\psi}_{K\gamma}^\dagger(\mathbf{x}''\tau) V(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \hat{\psi}_{K\gamma}(\mathbf{x}''\tau) \hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}\tau) \right\} \tag{245}
\end{aligned}$$

が得られる。この両辺を $\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}$ の極限をとり、 α, β について和をとり、 \mathbf{x} で積分すると最後の項は $\langle \hat{V} \rangle$ と一致するので

$$\langle \hat{V} \rangle = \frac{\sigma}{2} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu \right] \text{tr} G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') \tag{246}$$

を得る。これより、エネルギーは

$$\begin{aligned}
E &= \langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} + \hat{V} \rangle = \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{V} \rangle \\
&= \sigma \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \text{tr} G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') + \langle \hat{V} \rangle \\
&= \frac{\sigma}{2} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu \right] \text{tr} G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')
\end{aligned} \tag{247}$$

と求まる。

次に熱力学ポテンシャルを求める。Coupling Constant λ を導入すると Hamiltonian は

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1, \quad \hat{K}(\lambda) = \hat{K}_0 + \lambda \hat{K}_1 \tag{248}$$

$$\hat{K}_0 = \hat{H}_0 - \mu \hat{N}, \quad \hat{K}_1 = \hat{H}_1 \tag{249}$$

と書ける。大分配関数は

$$Z_{G\lambda} = e^{-\beta\Omega_\lambda} = \text{Tr}[e^{-\beta\hat{K}(\lambda)}] \tag{250}$$

だから、熱力学ポテンシャルを λ で微分したものは

$$\frac{\partial \Omega_\lambda}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[-\frac{1}{\beta} \ln Z_{G\lambda} \right] = -\frac{1}{\beta} Z_{G\lambda}^{-1} \frac{\partial Z_{G\lambda}}{\partial \lambda} \tag{251}$$

である。ここで、大分配関数を展開すると

$$\begin{aligned}
Z_{G\lambda} &= \text{Tr} e^{-\beta\hat{K}(\lambda)} \\
&= \text{Tr} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} (\hat{K}_0 + \lambda \hat{K}_1)^n \right] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr} (\hat{K}_0 + \lambda \hat{K}_1)^n
\end{aligned} \tag{252}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Z_{G\lambda}}{\partial \lambda} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr} \left[n (\hat{K}_0 + \lambda \hat{K}_1)^{n-1} \hat{K}_1 \right] \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{(n-1)!} \text{Tr} \left[(\hat{K}_0 + \lambda \hat{K}_1)^{n-1} \hat{K}_1 \right] \\
&= -\beta \text{Tr} \left[e^{-\beta\hat{K}(\lambda)} \hat{K}_1 \right] \\
&= -\frac{\beta}{\lambda} \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta\hat{K}(\lambda)} \hat{K}_1 \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta\hat{K}(\lambda)} \right]} \text{Tr} \left[e^{-\beta\hat{K}(\lambda)} \right] \\
&= -\frac{\beta}{\lambda} e^{-\beta\Omega_\lambda} \langle \lambda \hat{K}_1 \rangle_\lambda
\end{aligned} \tag{253}$$

を得る。以上より

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Omega_\lambda}{\partial \lambda} &= -\frac{1}{\beta} Z_{G\lambda}^{-1} \frac{\partial Z_{G\lambda}}{\partial \lambda} \\
&= \frac{1}{\lambda} \langle \lambda \hat{K}_1 \rangle_\lambda
\end{aligned} \tag{254}$$

となり、これを積分すると

$$\begin{aligned}
 \Omega(T, V, \mu) &= \Omega_0(T, V, \mu) + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \lambda \hat{K}_1 \rangle_\lambda \\
 &= \Omega_0(T, V, \mu) + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \frac{\sigma}{2} \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu \right] \text{tr} G_\lambda(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau')
 \end{aligned}
 \tag{255}$$

を得る。ここで、 $\hat{K}_1 = \hat{H}_1$ であることを用いた。

1.14 温度 Green 関数のファインマンルール (運動量表示)

1. $2n + 1$ 本の粒子線と n 本の相互作用線からなるトポロジー的に異なる図形をすべて描く。
2. 各頂点で波数ベクトルと周波数を保存させる。
3. 粒子線には

$$G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_m) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{i\omega_m - (\epsilon_k^0 - \mu)/\hbar} \quad (256)$$

を対応させる。

4. 相互作用線には

$$\bar{V}(\mathbf{k}, \omega_m) = V(\mathbf{k}) \quad (257)$$

を対応させる。

5. $[-\beta\hbar^2(2\pi)^3]^{-n} (-1)^F$ を係数とする。ただし、 F は Fermion ループの数である。
6. スピンについてと、独立な内部変数について積分、もしくは和をとる。
7. 1つの粒子線が閉じていたり、同じ相互作用線につながっている場合、 $e^{i\omega_m\eta}$ をつける。

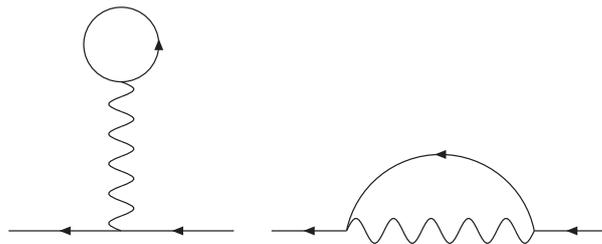


図 11 1次のダイアグラム。

図のダイアグラムからの寄与ををルールに則って具体的に書くと

$$G^{(1)}(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{1}{\beta\hbar^2} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\eta} G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n) \sigma(2s+1) V(0) \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} G^{(0)}(\mathbf{k}', \omega_{n'}) G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n) \\ - \frac{1}{\beta\hbar^2} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\eta} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n) V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') G^{(0)}(\mathbf{k}', \omega_{n'}) G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n) \quad (258)$$

となる。

1.15 有限温度における Hartree-Fock 近似

Hartree-Fock 近似で用いるダイアグラムは絶対零度のと看と同じで図 12 である。このときの

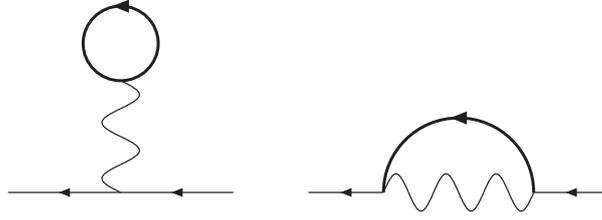


図 12 Hartree-Fock 近似で用いるダイアグラム。ただし、太線部は非摂動 Green 関数 $G^{(0)}$ を Green 関数 G に置き換えている。

Green 関数は Self-Energy と Dyson 方程式を用いて

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) &= \sigma(2s+1)\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) (\beta\hbar)^{-1} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\eta} G(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2, \omega_{n'}) \\ &\quad - V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) (\beta\hbar)^{-1} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\eta} G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) \end{aligned} \quad (259)$$

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) = G^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) + \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}'_1 G^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \omega_n) \Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) G(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}', \omega_n) \quad (260)$$

と書ける。ただし、非摂動 Green 関数は

$$G^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) = \sum_j \frac{\varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j^0(\mathbf{x}')^*}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j^0 - \mu)} \quad (261)$$

である。 φ_j^0 は \hat{K}_0 の固有関数、 ϵ_j^0 は非摂動のエネルギー固有値である。

Hartree-Fock 近似では温度 Green 関数を

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) = \sum_j \frac{\varphi_j(\mathbf{x})\varphi_j^*(\mathbf{x}')}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j - \mu)} \quad (262)$$

と仮定する。ここで、 φ_j は今考えている相互作用まで取り込んだ系の固有関数で、 ϵ_j は全系のエネルギー固有値である。ここで、以下の線型演算子を定義する。

$$\mathcal{L}_1 \equiv i\hbar\omega_n + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \mu - U(\mathbf{x}_1) = i\hbar\omega_n - \hat{K}_0 \quad (263)$$

これを $\hbar^{-1}G^{(0)}$ にかけると

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1 \frac{1}{\hbar} G^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) &= \left[i\omega_n - \frac{\hat{K}_0}{\hbar} \right] G^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) \\ &= \sum_j \frac{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j^0 - \mu)}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j^0 - \mu)} \varphi_j^0(\mathbf{x})\varphi_j^0(\mathbf{x}')^* \\ &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \end{aligned} \quad (264)$$

となる。途中で φ^0 が完全系をなすことを用いた。この計算により \mathcal{L}_1 の逆演算子が $\hbar^{-1}G^{(0)}$ と求まった。

ここで、Dyson 方程式 (260) の左から $\hbar^{-1}\mathcal{L}_1$ をかけると

$$\begin{aligned}\hbar^{-1}\mathcal{L}_1G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{x}'_1 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \Sigma^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1) G(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}', \omega_n) \\ \hbar^{-1} \left[i\hbar\omega_n - \hat{K}_0 \right] G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \int d\mathbf{x}'_1 \Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}'_1) G(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}', \omega_n) \\ \left[i\omega_n - \frac{\hat{K}_0}{\hbar} \right] \sum_j \frac{\varphi_j(\mathbf{x}) \varphi_j^*(\mathbf{x}')}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j - \mu)} &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \int d\mathbf{x}' \Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \sum_j \frac{\varphi_j(\mathbf{x}') \varphi_j^*(\mathbf{x}')}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j - \mu)}\end{aligned}\quad (265)$$

となる。この両辺に $\varphi_k(\mathbf{x}')$ をかけ、 \mathbf{x}' で積分すると

$$\begin{aligned}\left[i\omega_n - \frac{\hat{K}_0}{\hbar} \right] \frac{\varphi_k(\mathbf{x})}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)} - \int d\mathbf{x}'_1 \Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}'_1) \frac{\varphi_k(\mathbf{x}'_1)}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)} &= \varphi_k(\mathbf{x}) \\ \left[i\hbar\omega_n + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu - U(\mathbf{x}) \right] \varphi_k(\mathbf{x}) - \int d\mathbf{x}'_1 \hbar \Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}'_1) \varphi_k(\mathbf{x}'_1) &= [i\hbar\omega_n - (\epsilon_k - \mu)] \varphi_k(\mathbf{x}) \\ \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\mathbf{x}) \right] \varphi_k(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x}' \hbar \Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_k(\mathbf{x}') &= \epsilon_k \varphi_k(\mathbf{x})\end{aligned}\quad (266)$$

を得る。この表式は絶対零度のとおりと同じである。

次に、Hartree-Fock 近似での粒子数と、エネルギーを求める。まず、粒子数密度の平均値の厳密な表式は

$$\begin{aligned}\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle &= \sigma \text{tr} G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}\tau^+) \\ &= \sigma(2s+1)(\beta\hbar)^{-1} \sum_n e^{i\omega_n \eta} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}, \omega_n)\end{aligned}\quad (267)$$

である。これに Hartree-Fock 近似での Green 関数の表式 (262) を代入して

$$\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle = \sigma(2s+1)(\beta\hbar)^{-1} \sum_{n,j} \frac{\varphi_j(\mathbf{x}) \varphi_j^*(\mathbf{x}')}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j - \mu)} e^{i\omega_n \eta}\quad (268)$$

ここで、次の関係式

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_n \frac{e^{i\omega_n \eta}}{i\omega_n - x} = \sigma \frac{\beta\hbar}{e^{\beta\hbar x} + \sigma}\quad (269)$$

を用いると

$$\begin{aligned}\langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle &= \sigma(2s+1) \sum_j \frac{\sigma |\varphi_j(\mathbf{x})|^2}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} + \sigma} \\ &\equiv (2s+1) \sum_j |\varphi_j(\mathbf{x})|^2 n_j\end{aligned}\quad (270)$$

を得る。これを \mathbf{x} で積分すれば平均粒子数

$$N(T, V, \mu) = (2s+1) \sum_j n_j\quad (271)$$

を得る。これは N がわかっているとき、 $\mu(T, V, N)$ を決める式になっている。

次にエネルギーを求める。厳密な表式は (247) より

$$\begin{aligned} E &= \frac{\sigma}{2} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu \right] \text{tr} G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') \\ &= \frac{\sigma}{2} (2s+1) \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} (\beta\hbar)^{-1} \sum_n e^{i\omega_n \eta} \left[i\hbar\omega_n - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu \right] G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) \end{aligned} \quad (272)$$

である。ただし、

$$G(\mathbf{x}\tau, \mathbf{x}'\tau') = (\beta\hbar)^{-1} \sum_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) \quad (273)$$

である。これに (262) を代入すると

$$\begin{aligned} E(T, V, \mu) &= \frac{\sigma}{2} (2s+1) \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} (\beta\hbar)^{-1} \sum_n e^{i\omega_n \eta} \left[i\hbar\omega_n - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \mu \right] \sum_j \frac{\varphi_j(\mathbf{x})\varphi_j^*(\mathbf{x}')}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j - \mu)} \\ &= \frac{\sigma}{2} (2s+1) \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} (\beta\hbar)^{-1} \sum_n e^{i\omega_n \eta} \left\{ [i\hbar\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j - \mu) + 2\epsilon_j] G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega_n) \right. \\ &\quad \left. - \sum_j \int d\mathbf{x}'' \frac{\varphi_j^*(\mathbf{x}')\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}'')\varphi_j(\mathbf{x}'')}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j - \mu)} \right\} \\ &= \frac{\sigma}{2} (2s+1) \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} (\beta\hbar)^{-1} \sum_n e^{i\omega_n \eta} \left\{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + 2 \sum_j \epsilon_j \frac{\varphi_j(\mathbf{x})\varphi_j^*(\mathbf{x}')}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j - \mu)} \right. \\ &\quad \left. - \sum_j \int d\mathbf{x}'' \frac{\varphi_j^*(\mathbf{x}')\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}'')\varphi_j(\mathbf{x}'')}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_j - \mu)} \right\} \\ &= \frac{\sigma}{2} (2s+1) \int d\mathbf{x} \left\{ \sum_j \left[\frac{2\sigma\epsilon_j\varphi_j(\mathbf{x})\varphi_j^*(\mathbf{x})}{e^{\beta(\epsilon_j-\mu)} + \sigma} \right] - \sum_j \int d\mathbf{x}'' \frac{\varphi_j^*(\mathbf{x})\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}'')\varphi_j(\mathbf{x}'')}{e^{\beta(\epsilon_j-\mu)} + \sigma} \right\} \\ &= (2s+1) \left\{ \sum_j \int d\mathbf{x} \epsilon_j n_j |\varphi_j(\mathbf{x})|^2 - \frac{1}{2} \sum_j \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \varphi_j^*(\mathbf{x})\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\varphi_j(\mathbf{x}') n_j \right\} \\ &= (2s+1) \sum_j \epsilon_j n_j - \frac{1}{2} (2s+1) \sum_j \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \varphi_j^*(\mathbf{x})\hbar\Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\varphi_j(\mathbf{x}') n_j \end{aligned} \quad (274)$$

を得る。ここで、(266) と (269) と φ_j の完全系と

$$\sum_n e^{i\omega_n \eta} = 0 \quad (275)$$

を用いた。(274)に(259)を代入すると第2項目は

$$\begin{aligned}
(\text{第2項目}) &= \sum_j \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \varphi_j^*(\mathbf{x}) \hbar \Sigma^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_j(\mathbf{x}') n_j \\
&= \sum_j \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \varphi_j^*(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}') n_j \left\{ (2s+1) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \int d\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \right. \\
&\quad \left. \times \sum_k |\varphi_k(\mathbf{x}_2)|^2 n_k + \sigma V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}') \sum_k \varphi_k(\mathbf{x}) \varphi_k^*(\mathbf{x}') n_k \right\} \\
&= \sum_{j,k} \left\{ (2s+1) \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}_2 \varphi_j^*(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) n_j n_k V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \varphi_k^*(\mathbf{x}_2) \varphi_k(\mathbf{x}_2) \right. \\
&\quad \left. + \sigma \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}_1 \varphi_j^*(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}') n_j n_k V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \varphi_k(\mathbf{x}) \varphi_k^*(\mathbf{x}') \right\} \\
&= \sum_{j,k} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [(2s+1) |\varphi_j(\mathbf{x})|^2 |\varphi_k(\mathbf{x}')|^2 \\
&\quad + \sigma \varphi_j^*(\mathbf{x}) \varphi_k(\mathbf{x}) \varphi_k^*(\mathbf{x}') \varphi_j(\mathbf{x})] n_j n_k
\end{aligned} \tag{276}$$

となる。

ここで、特に $U(\mathbf{x}) = 0$ のときを考える。このとき φ_j として自由粒子の固有関数を用いればよいので Self-Energy は $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$ のみの関数になる。さらに、エネルギー固有値も簡単になる。これを見るために(266)の両辺に $\varphi_k^*(\mathbf{x})$ をかけ、 \mathbf{x} で積分する。 φ は自由粒子の固有関数として

$$\begin{aligned}
\int d\mathbf{x} \frac{1}{V} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{1}{V} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hbar \Sigma^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'} &= \int d\mathbf{x} \frac{1}{V} \epsilon_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\
\Rightarrow \epsilon_k^0 + \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \hbar \Sigma^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= \epsilon_k \\
\Rightarrow \epsilon_k = \epsilon_k^0 + \hbar \Sigma^*(\mathbf{k}) &
\end{aligned} \tag{277}$$

となる。

1.16 低温における不完全 Fermi 気体

温度 Green 関数の Dyson 方程式は

$$G(\mathbf{k}, \omega_n, T) = G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n) + G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n) \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T) G(\mathbf{k}, \omega_n, T) \quad (278)$$

である。これより、温度 Green 関数の逆関数は

$$\left[\frac{1 - G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n) \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T)}{G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n)} \right] G(\mathbf{k}, \omega_n, T) = 1$$

$$G(\mathbf{k}, \omega_n, T)^{-1} = G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n)^{-1} - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T) \quad (279)$$

$$G(\mathbf{k}, \omega_n, 0)^{-1} = G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n)^{-1} - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, 0) \quad (280)$$

と求まる。この2式を引き、両辺左から $G(0)$ 、右から $G(T)$ をかけると

$$G(\mathbf{k}, \omega_n, T) = G(\mathbf{k}, \omega_n, 0) + G(\mathbf{k}, \omega_n, 0) [\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T) - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, 0)] G(\mathbf{k}, \omega_n, T) \quad (281)$$

を得る。十分低温では第2項の $G(T)$ を $G(0)$ として

$$G(\mathbf{k}, \omega_n, T) \simeq G(\mathbf{k}, \omega_n, 0) + G(\mathbf{k}, \omega_n, 0) [\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T) - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, 0)] G(\mathbf{k}, \omega_n, 0) \quad (282)$$

を用いる。

以下では、Hartree-Fock 近似を用いてスピン $\frac{1}{2}$ の Fermion 系の解析を行う。Self-Energy は運動量表示での Feynman ルールより

$$\hbar \Sigma^*(\mathbf{k}, T) = (\beta \hbar)^{-1} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'} \eta} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] G(\mathbf{q}, \omega_{n'}, T) \quad (283)$$

となる。これに (282) を代入し

$$\hbar \Sigma^*(\mathbf{k}, T) = (\beta \hbar)^{-1} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'} \eta} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})]$$

$$\times \left\{ G(\mathbf{k}, \omega_n, 0) + [G(\mathbf{k}, \omega_n, 0)]^2 [\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T) - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, 0)] \right\} \quad (284)$$

を得る。

今、十分低温なので次の置き換えをする。

$$(\beta \hbar)^{-1} \sum_{n'} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_{n'} \quad (285)$$

ただし、この置き換えは十分な注意を要する。まず、この置き換える前に和を評価すると

$$(\beta \hbar)^{-1} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'} \eta} [G(\mathbf{k}, \omega_{n'}, 0)]^2 = (\beta \hbar)^{-1} \sum_{n'} [i\omega_{n'} - \hbar^{-1}(\epsilon - \mu)]^{-2}$$

$$= \hbar \frac{\partial}{\partial \epsilon_k} \left\{ (\beta \hbar)^{-1} \sum_{n'} [i\omega_{n'} - \hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)]^{-1} \right\}$$

$$= \hbar \frac{\partial n_k(T)}{\partial \epsilon_k} \quad (286)$$

となる。ただし、(269) を用い、 $n_k(T)$ を

$$n_k(T) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1} \quad (287)$$

で定義した。 $T \rightarrow 0$ の極限を考えると $n_k(T) \rightarrow \theta(\mu - \epsilon_k)$ となるから (286) は $-\hbar\delta(\mu - \epsilon_k)$ となる。次に積分に置き換えた式を評価すると

$$(\beta\hbar)^{-1} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\eta} [G(\mathbf{k}, \omega_{n'}, 0)]^2 \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i\omega\eta}}{[i\omega - \hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)]^2} \quad (288)$$

となる。これは $\omega = -i\hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)$ に 2 位の極を持つ。よって、留数は

$$\begin{aligned} \text{Res}(\omega) &= \frac{d}{d\omega} \left\{ \frac{[\omega + i\hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)]^2}{i^2 [\omega + i\hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)]^2} e^{i\omega\eta} \right\} \Big|_{\omega = -i\hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)} \\ &= -i\eta e^{\eta\hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)} \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (289)$$

となる。また、この積分は $\epsilon_k = \mu$ で発散する。[3]

ここで、(284) に (269) と (288) を使うと

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, T) &= \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] n_q(T) \\ &\quad + \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [\hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, 0)] \frac{\partial n_q(T)}{\partial \epsilon_q} \\ &\simeq \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] n_q(T) \\ &\quad + \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] [\hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, 0)] \frac{\partial n_q(0)}{\partial \epsilon_q} \end{aligned} \quad (290)$$

となる。この式で $T = 0$ のとき

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0) &= \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] n_q(0) \\ &= \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \theta(\mu - \epsilon_q) \end{aligned} \quad (291)$$

を得る。上 2 式の差をとれば

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0) &= \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \\ &\quad \times \left\{ n_q(T) - n_q(0) + \hbar \frac{\partial n_q(0)}{\partial \epsilon_q} [\hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, 0)] \right\} \end{aligned} \quad (292)$$

となる。これより、 $K(T, V, \mu)$ を求める。(282) と同じ近似で

$$\begin{aligned} K(T, V, \mu) &= \frac{V}{2} (\beta\hbar)^{-1} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_n e^{i\omega_n\eta} [i\hbar\omega_n + \epsilon_k^0 - \mu] \text{tr}G(\mathbf{k}, \omega_n, T) \\ &= \frac{V}{2} (\beta\hbar)^{-1} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_n e^{i\omega_n\eta} [i\hbar\omega_n + \epsilon_k^0 - \mu] \\ &\quad \times \left\{ G(\mathbf{k}, \omega_n, 0) + [G(\mathbf{k}, \omega_n, 0)]^2 [\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, T) - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega_n, 0)] \right\} \end{aligned} \quad (293)$$

となる。上式第1項は

$$\begin{aligned}
(\beta\hbar)^{-1} \sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta}(i\hbar\omega_n + \epsilon_k^0 - \mu)}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu) - \Sigma^*(\mathbf{k}, 0)} &= \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n\eta} \left[1 + \frac{2\hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu) + \Sigma^*(\mathbf{k}, 0)}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu) - \Sigma^*(\mathbf{k}, 0)} \right] \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n\eta} \left[\frac{2\hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu) - \Sigma^*(\mathbf{k}, 0)}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu) - \Sigma^*(\mathbf{k}, 0)} \right] \\
&= [2(\epsilon_k - \mu) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] n_k(T) \tag{294}
\end{aligned}$$

となる。ただし、 $\sum_n e^{i\omega_n\eta} = 0$ と $\epsilon_k \equiv \epsilon_k^0 + \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)$ と (269) を用いた。第2項は

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\beta\hbar} \sum_n e^{i\omega_n\eta}(i\hbar\omega_n + \epsilon_k^0 - \mu) [G(\mathbf{k}, \omega_n, T)]^2 &= \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta}(i\hbar\omega_n + \epsilon_k^0 - \mu)}{[i\hbar\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu) - \Sigma^*(\mathbf{k}, 0)]^2} \\
&= \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta} [i\hbar\omega_n + \epsilon_k - \mu - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)]}{[i\hbar\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)]^2} \\
&= \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta} [i\hbar\omega_n - (\epsilon_k - \mu)]}{[i\hbar\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)]^2} \\
&+ \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta} [2(\epsilon_k - \mu) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)]}{[i\hbar\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)]^2} \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)} \\
&+ \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta} [2(\epsilon_k - \mu) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)]}{[i\hbar\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k - \mu)]^2} \\
&= \hbar n_k(T) + [2(\epsilon_k - \mu) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] \hbar \frac{\partial n_k(T)}{\partial \epsilon_k} \tag{295}
\end{aligned}$$

となる。ここで、再び (269) と (286) を用いた。以上より

$$\begin{aligned}
K(T, V, \mu) - K(0, V, \mu) &= V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} (\beta\hbar)^{-1} \sum_n e^{i\omega_n \eta} (i\hbar\omega_n + \epsilon_k^0 - \mu) G(\mathbf{k}, \omega_n, 0) \\
&\quad + V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} (\beta\hbar)^{-1} \sum_n e^{i\omega_n \eta} (i\hbar\omega_n + \epsilon_k^0 - \mu) [G(\mathbf{k}, \omega_n, 0)]^2 \\
&= V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} [2(\epsilon_k - \mu) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] n_k(T) \\
&\quad + V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left\{ \hbar n_k(T) + [2(\epsilon_k - \mu) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] \hbar \frac{\partial n_k(T)}{\partial \epsilon_k} \right\} \\
&\quad \times [\Sigma^*(\mathbf{k}, T) - \Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] \\
&\quad - V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} [2(\epsilon_k - \mu) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] n_k(0) \\
&\simeq V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} 2(\epsilon_k - \mu) [n_k(T) - n_k(0)] \\
&\quad + V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} 2(\epsilon_k - \mu) \frac{\partial n_k(0)}{\partial \epsilon_k} [\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] \\
&\quad + V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} n_k(0) [\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] - V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0) \\
&\quad \times \left\{ n_k(T) - n_k(0) + \frac{\partial n_k(0)}{\partial \epsilon_k} [\hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{k}, 0)] \right\} \quad (296)
\end{aligned}$$

となる。最右辺第2項は $(\epsilon_k - \mu) \frac{\partial n_k(0)}{\partial \epsilon_k} = -(\epsilon_k - \mu) \delta(\mu - \epsilon_k)$ より0になり、第3項は (292) を代入すると

$$\begin{aligned}
(\text{第3項}) &= V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} n_k(0) \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \\
&\quad \times \left\{ n_q(T) - n_q(0) + \frac{\partial n_q(T)}{\partial \epsilon_q} [\hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, 0)] \right\} \\
&= V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(\mu - \epsilon_k) \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [2V(0) - V(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \\
&\quad \times \left\{ n_q(T) - n_q(0) + \frac{\partial n_q(T)}{\partial \epsilon_q} [\hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, 0)] \right\} \\
&= V \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, 0) \left\{ n_q(T) - n_q(0) + \frac{\partial n_q(T)}{\partial \epsilon_q} [\hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, T) - \hbar\Sigma^*(\mathbf{q}, 0)] \right\} \quad (297)
\end{aligned}$$

となる。ここで、(291) を用いた。積分変数を \mathbf{k} に変えれば第4項と一致するので第3項と第4項は cancel する。ゆえに

$$K(T, V, \mu) - K(0, V, \mu) = V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} 2(\epsilon_k - \mu) [n_k(T) - n_k(0)] \quad (298)$$

となる。

1.17 Ring 近似 (有限温度)

有限温度での電子ガス模型を考える。熱力学ポテンシャルは

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0(T, V, \mu) + V \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\eta} \hbar \Sigma^{*\lambda}(\mathbf{k}, \omega_n) G^\lambda(\mathbf{k}, \omega_n) \quad (299)$$

で与えられる。電子ガス模型なのでポテンシャル $V(\mathbf{q})$ の $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ からの寄与は無い。2次の Self-energy のうち Ring 近似で用いるのは

$$\begin{aligned} \Sigma_{2r}^*(\mathbf{k}, \omega_n) &= \frac{-2}{\beta^2 \hbar^4} \sum_{\omega_1, \nu} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V^2(\mathbf{p}) \\ &\quad \times G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega_1) G^{(0)}(\mathbf{q} + \mathbf{p}, \omega_1 - \nu) G^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_n - \nu) \end{aligned} \quad (300)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{2b}^*(\mathbf{k}, \omega_n) &= \frac{-1}{\beta^2 \hbar^4} \sum_{\omega_1, \nu} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V(\mathbf{q}) V(\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{p}) \\ &\quad \times G^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_n - \nu) G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega_1) G^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega_1 + \nu) \end{aligned} \quad (301)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{2c}^*(\mathbf{k}, \omega_n) &= \frac{-1}{\beta^2 \hbar^4} \sum_{\omega_1, \nu} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) V(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \\ &\quad \times G^{(0)}(\mathbf{q}, \omega_1) G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega_2) e^{i\omega_2\eta} G^{(0)}(\mathbf{q}, \omega_1) \end{aligned} \quad (302)$$

の3つである。これらを (299) に代入する。まずは (301) を代入して

$$\begin{aligned} \Omega_{2b}(T, V, \mu) &= V \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n, \omega_1, \nu} e^{i\omega_n\eta} \frac{-1}{\beta^3 \hbar^4} \lambda V(\mathbf{q}) \lambda V(\mathbf{k} - \mathbf{p} - \mathbf{q}) \\ &\quad \times \frac{1}{i\omega_n - i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - \mu)} \frac{1}{i\omega_1 - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{p}}^0 - \mu)} \\ &\quad \times \frac{1}{i\omega_1 + i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0 - \mu)} \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu)} \\ &= -\frac{V}{2\beta^3 \hbar^4} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n, \omega_1, \nu} e^{i\omega_n\eta} V(\mathbf{q}) V(\mathbf{k} + \mathbf{p} + \mathbf{q}) \\ &\quad \times \frac{1}{i\omega_n - i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 - \mu)} \frac{1}{i\omega_1 - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{p}}^0 - \mu)} \\ &\quad \times \frac{1}{i\omega_n + i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0 - \mu)} \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu)} \\ &= -\frac{V}{2\beta^3 \hbar^4} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n, \omega_1, \nu} e^{i\omega_n\eta} e^{i\omega_1\eta} V(\mathbf{q}) V(\mathbf{k} + \mathbf{p} + \mathbf{q}) \\ &\quad \times \left[\frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu)} - \frac{1}{i\omega_n - i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 - \mu)} \right] \frac{1}{-i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 - \epsilon_{\mathbf{k}}^0)} \\ &\quad \times \left[\frac{1}{i\omega_1 - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{p}}^0 - \mu)} - \frac{1}{i\omega_1 + i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0 - \mu)} \right] \frac{1}{i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0 - \epsilon_{\mathbf{p}}^0)} \end{aligned} \quad (303)$$

となる。1つ目の等号から2つ目の等号へは $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$, $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$ の変数変換を行った。 ν と ω はそれぞれ偶数、奇数を表すことに注意して公式

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{\omega_n} \frac{e^{i\omega_n \eta}}{i\omega_n - x} = \begin{cases} \frac{\beta \hbar}{e^{\beta \hbar x} + 1} & (\text{奇数のとき}) \\ -\frac{\beta \hbar}{e^{\beta \hbar x} - 1} & (\text{偶数のとき}) \end{cases} \quad (304)$$

を用いれば

$$\begin{aligned} \Omega_{2b}(T, V, \mu) &= -\frac{V}{2\beta^3 \hbar^4} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\nu} e^{i\nu \eta} V(\mathbf{q}) V(\mathbf{k} + \mathbf{p} + \mathbf{q}) \\ &\quad \times (\beta \hbar)^2 (n_k^0 - n_{k+q}^0)(n_p^0 - n_{p+q}^0) \left[\frac{1}{i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \epsilon_{k+q}^0)} \frac{1}{i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} \right] \\ &= -\frac{V}{2\beta \hbar^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\nu} e^{i\nu \eta} V(\mathbf{q}) V(\mathbf{k} + \mathbf{p} + \mathbf{q}) \\ &\quad \times \frac{(n_k^0 - n_{k+q}^0)(n_p^0 - n_{p+q}^0)}{\hbar^{-1}(\epsilon_p^0 + \epsilon_k^0 - \epsilon_{k+q}^0 - \epsilon_{p+q}^0)} \left[\frac{1}{i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \epsilon_{k+q}^0)} - \frac{1}{i\nu - \hbar^{-1}(\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} \right] \\ &= -\frac{V}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V(\mathbf{q}) V(\mathbf{k} + \mathbf{p} + \mathbf{q}) \\ &\quad \times \frac{(n_k^0 - n_{k+q}^0)(n_p^0 - n_{p+q}^0)}{(\epsilon_p^0 + \epsilon_k^0 - \epsilon_{k+q}^0 - \epsilon_{p+q}^0)} \left[\frac{-1}{e^{\beta(\epsilon_k^0 - \epsilon_{k+q}^0)} - 1} + \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} - 1} \right] \\ &= -\frac{V}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{V(\mathbf{q}) V(\mathbf{k} + \mathbf{p} + \mathbf{q})}{\epsilon_{k+q}^0 + \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0 - \epsilon_k^0} \\ &\quad \times (n_k^0 - n_{k+q}^0)(n_p^0 - n_{p+q}^0) \left[\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k^0 - \epsilon_{k+q}^0)} - 1} - \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} - 1} \right] \end{aligned} \quad (305)$$

となる。ここで、自由 Fermi 気体の分布関数 $n_k^0 \equiv 1/(e^{\beta(\epsilon_k^0 - \mu)} + 1)$ を用いた。これより

$$e^{\beta(\epsilon_k^0 - \mu)} = \frac{1 - n_k^0}{n_k^0} \quad (306)$$

であるから、この式を (305) の最右辺に使うと

$$\begin{aligned} [\dots] &= \frac{1}{\frac{1-n_k^0}{n_k^0} \frac{n_{k+q}^0}{1-n_{k+q}^0} - 1} - \frac{1}{\frac{1-n_{p+q}^0}{n_{p+q}^0} \frac{n_p^0}{1-n_p^0} - 1} \\ &= \frac{n_k^0(1-n_{k+q}^0)}{n_{k+q}^0 - n_k^0} + \frac{n_{p+q}^0(1-n_p^0)}{n_{p+q}^0 - n_p^0} \end{aligned} \quad (307)$$

となる。これより

$$\begin{aligned} (n_k^0 - n_{k+q}^0)(n_p^0 - n_{p+q}^0) [\dots] &= -n_k^0(1-n_{k+q}^0)(n_p^0 - n_{p+q}^0) - n_{p+q}^0(1-n_p^0)(n_k^0 - n_{k+q}^0) \\ &= -n_k^0 n_p^0 (1-n_{k+q}^0)(1-n_{p+q}^0) + n_{p+q}^0 n_{k+q}^0 (1-n_p^0)(1-n_k^0) \end{aligned} \quad (308)$$

を得る。ここで、(308) の第 2 項で $-\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{p} + \mathbf{q}$, $-\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}$ という積分変数の置き換えを行い、積分変数を適当にそろえると第 2 項は第 1 項と一致する。ゆえに

$$\Omega_{2b}(T, V, \mu) = V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{V(\mathbf{q})V(\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{p})}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 + \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0 - \epsilon_{\mathbf{k}}^0 - \epsilon_{\mathbf{p}}^0} n_{\mathbf{k}}^0 n_{\mathbf{p}}^0 (1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0) (1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0) \quad (309)$$

を得る。次に (302) からの寄与を求めると、

$$\begin{aligned} \Omega_{2c}(T, V, \mu) &= V \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n, \omega_1, \omega_2} e^{i\omega_n \eta} e^{i\omega_2 \eta} \lambda V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \lambda V(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \\ &\quad \times \frac{-1}{\beta^3 \hbar^4} \left[\frac{1}{i\omega_1 - \hbar^{-1}(\epsilon_q^0 - \mu)} \right]^2 \frac{1}{i\omega_2 - \hbar^{-1}(\epsilon_p^0 - \mu)} \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(\epsilon_k^0 - \mu)} \\ &= \frac{-V}{2\beta^3 \hbar^4} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_1} e^{i\omega_1 \eta} V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) V(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \\ &\quad \times (\beta \hbar)^2 n_{\mathbf{k}}^0 n_{\mathbf{p}}^0 \hbar \frac{\partial}{\partial \epsilon_q^0} \frac{1}{i\omega_1 - \hbar^{-1}(\epsilon_q^0 - \mu)} \\ &= \frac{-V}{2\beta \hbar} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} n_{\mathbf{k}}^0 n_{\mathbf{p}}^0 \frac{\partial}{\partial \epsilon_p^0} \beta \hbar n_q^0 \\ &= \frac{-V}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} n_{\mathbf{k}}^0 n_{\mathbf{p}}^0 n_q^0 (1 - n_q^0) \end{aligned} \quad (310)$$

となる。

次に、Ring 項からの寄与を求めると、これを求めるために有効相互作用を

$$V_r(\mathbf{q}, \nu_n) \equiv \bar{V}_0(\mathbf{q}, \nu_n) + \bar{V}_0(\mathbf{q}, \nu_n) \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n) \bar{V}_r(\mathbf{q}, \nu_n) \quad (311)$$

で定義する。これは簡単に解けて

$$V_r(\mathbf{q}, \nu_n) = V(\mathbf{q}) \left[1 - V(\mathbf{q}) \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n) \right]^{-1} \quad (312)$$

となる。ここで、図 13 より有効相互作用は

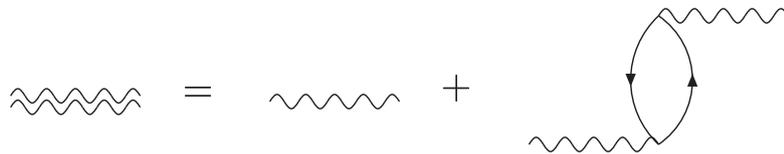


図 13 有効相互作用のダイアグラム。

$$V_r(\mathbf{q}, \nu_n) = V(\mathbf{q}, \nu_n) + [V(\mathbf{q}, \nu_n)]^2 \frac{2}{\beta \hbar^2} \sum_{\omega_1} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega_1) G^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega_1 + \nu_n) + \dots \quad (313)$$

と書ける。この式と (311) を比べると分極部分は

$$\begin{aligned}
\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu) &= \frac{2}{\beta\hbar^2} \sum_{\omega_1} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega_1) G^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega_1 + \nu_n) \\
&= \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\omega_1} \left[\frac{1}{i\omega_1 - \hbar^{-1}(\epsilon_p^0 - \mu)} \frac{1}{i\omega_1 + i\nu_n - \hbar^{-1}(\epsilon_{p+q}^0 - \mu)} \right] \\
&= \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \frac{1}{i\nu_n - \hbar^{-1}(\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} \sum_{\omega_1} \\
&\quad \times e^{i\omega_1\eta} \left[\frac{1}{i\omega_1 - \hbar^{-1}(\epsilon_p^0 - \mu)} - \frac{1}{i\omega_1 + i\nu_n - \hbar^{-1}(\epsilon_{p+q}^0 - \mu)} \right] \\
&= -\frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{n_{p+q}^0 - n_p^0}{i\nu_n - \hbar^{-1}(\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} \tag{314}
\end{aligned}$$

となる。ここで、(304) を用いた。Ring 近似で用いるダイアグラムは $V_r - V_0$ で表せるので Ring 近似での Self-Energy は

$$\begin{aligned}
\Sigma_r^*(\mathbf{k}, \omega_n) &= -\frac{1}{\beta\hbar^2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\nu_n} [V_r(\mathbf{q}, \nu_n) - V_r(\mathbf{q}, \nu_n)] G^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_n - \nu_n) \\
&= -\frac{1}{\beta\hbar^2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\nu_n} \frac{[V(\mathbf{q})]^2 \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)}{1 - V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)} G^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_n - \nu_n) \tag{315}
\end{aligned}$$

と求まる。これより熱力学ポテンシャルは

$$\begin{aligned}
\Omega_r(T, V, \mu) &= \frac{V}{\beta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\eta} \Sigma_r^{\lambda}(\mathbf{k}, \omega_n) G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n) \\
&= \frac{V}{\beta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \sum_{\omega_n, \nu_n} \left(\frac{-1}{\beta\hbar^2} \right) e^{i\omega_n\eta} \frac{\lambda^2 [V(\mathbf{q})]^2 \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)}{1 - \lambda V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)} \\
&\quad \times G^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_n - \nu_n) G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n) \\
&= -V \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\nu_n} \frac{\lambda^2 [V(\mathbf{q})]^2 \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)}{1 - \lambda V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)} \\
&\quad \times \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\eta} G^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_n - \nu_n) G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega_n) \tag{316}
\end{aligned}$$

となる。(316) の最右辺の 2 つ目の積分は $\frac{1}{2}\hbar\Pi^{(0)}$ に等しい事を用いると

$$\begin{aligned}
\Omega_r(T, V, \mu) &= -\frac{V\hbar}{2} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\nu_n} \frac{\lambda^2 [V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)]^2}{1 - \lambda V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)} \\
&= \frac{-V}{2\beta} \sum_{\nu_n} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)] \int_0^1 d\lambda \frac{\lambda V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)}{1 - \lambda V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)} \\
&= \frac{-V}{2\beta} \sum_{\nu_n} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)] \int_0^1 d\lambda \left[-1 + \frac{1}{1 - \lambda V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)} \right] \\
&= \frac{V}{2\beta} \sum_{\nu_n} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left\{ \ln [1 - V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)] + V(\mathbf{q})\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n) \right\} \tag{317}
\end{aligned}$$

を得る。ここで、 $\Pi^{(0)}$ が ν に関して偶関数であることを証明する。

$$\begin{aligned}
\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n) &= -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{n_{p+q}^0 - n_p^0}{i\hbar\nu_n - (\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} \\
&= -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{n_{p+q}^0 - n_p^0 + n_{p+q}^0 n_p^0 - n_{p+q}^0 n_p^0}{i\hbar\nu_n - (\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} \\
&= -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{n_{p+q}^0(1 - n_p^0) - n_p^0(1 - n_{p+q}^0)}{i\hbar\nu_n - (\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} \\
&= -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \left[\frac{n_{p+q}^0(1 - n_p^0)}{i\hbar\nu_n - (\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} - \frac{n_p^0(1 - n_{p+q}^0)}{i\hbar\nu_n - (\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} \right] \\
&= -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} n_p^0(1 - n_{p+q}^0) \left[\frac{2(\epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0)}{(i\hbar\nu_n)^2 - (\epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0)^2} \right] \\
&= \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, -\nu_n)
\end{aligned} \tag{318}$$

より証明できた。

1.18 実時間 Green 関数

実時間 Green 関数は以下で定義される。

$$i\bar{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \equiv \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_G \hat{T} [\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}t) \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')] \right\} \quad (319)$$

同様に、遅延 Green 関数と先進 Green 関数は

$$i\bar{G}_{\alpha\beta}^R(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \equiv \theta(t-t') \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_G [\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}t), \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')]_\sigma \right\} \quad (320)$$

$$i\bar{G}_{\alpha\beta}^A(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \equiv -\theta(t'-t) \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_G [\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}t), \hat{\psi}_{K\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')]_\sigma \right\} \quad (321)$$

で定義される。ここで、 σ は Fermion 系なら反交換関係をとることを表している。 \bar{G} 、 \bar{G}^R 、 \bar{G}^A の Fourier 変換はそれぞれ

$$\begin{aligned} \bar{G}(\mathbf{k}, \omega) &= (2s+1)^{-1} e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)] |\langle m | \hat{\psi}_\alpha | n \rangle|^2 \\ &\times \left\{ P \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)} (1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}) \right. \\ &\quad \left. - i\pi \delta[\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)] (1 + \sigma e^{\beta(K_n - K_m)}) \right\} \end{aligned} \quad (322)$$

$$\begin{aligned} \bar{G}^R(\mathbf{k}, \omega) &= (2s+1)^{-1} e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)] |\langle m | \hat{\psi}_\alpha | n \rangle|^2 \\ &\times (1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}) [\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m) + i\eta]^{-1} \end{aligned} \quad (323)$$

$$\begin{aligned} \bar{G}^A(\mathbf{k}, \omega) &= (2s+1)^{-1} e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)] |\langle m | \hat{\psi}_\alpha | n \rangle|^2 \\ &\times (1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}) [\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m) - i\eta]^{-1} \end{aligned} \quad (324)$$

で与えられる。さらにスペクトル関数を

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{k}, \omega) &\equiv (2s+1)^{-1} e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)] \\ &\times 2\pi \delta[\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)] (1 - \sigma e^{-\beta\hbar\omega}) |\langle m | \hat{\psi}_\alpha | n \rangle|^2 \end{aligned} \quad (325)$$

で定義する。これと (323)、(324) を比較すれば

$$\bar{G}^R(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta} \quad (326)$$

$$\bar{G}^A(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' - i\eta} \quad (327)$$

を得る。さらに、主値積分の公式を用いると

$$\text{Im} \bar{G}^R(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{2} \rho(\mathbf{k}, \omega) \quad (328)$$

$$\text{Im} \bar{G}^A(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2} \rho(\mathbf{k}, \omega) \quad (329)$$

を得る。さらに、以下の計算により、実時間 Green 関数と遅延 Green 関数、先進 Green 関数の関係式が求まる。

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \rho(\mathbf{k}, \omega') \left\{ P \frac{1}{\omega - \omega'} - i\pi \left[\tanh \frac{\beta}{2} \hbar \omega \right]^{-\sigma} \delta(\omega - \omega') \right\} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} (2s+1)^{-1} e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)] 2\pi \delta[\omega' - \hbar^{-1}(K_n - K_m)] \\
&\quad \times (1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega'}) |\langle m | \hat{\psi}_\alpha | n \rangle|^2 \left\{ P \frac{1}{\omega - \omega'} - i\pi \left[\tanh \frac{\beta}{2} \hbar \omega \right]^{-\sigma} \delta(\omega - \omega') \right\} \\
&= (2s+1)^{-1} e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)] (1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}) |\langle m | \hat{\psi}_\alpha | n \rangle|^2 \\
&\quad \times \left\{ P \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)} - i\pi \left[\tanh \frac{\beta}{2} \hbar \omega \right]^{-\sigma} \delta(\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)) \right\} \\
&= (2s+1)^{-1} e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)] |\langle m | \hat{\psi}_\alpha | n \rangle|^2 \\
&\quad \times \left[P \frac{(1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)})}{\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)} - i\pi (1 + \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}) \delta(\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)) \right] \\
&= \bar{G}(\mathbf{k}, \omega) \tag{330}
\end{aligned}$$

また、

$$\begin{aligned}
& [1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega}]^{-1} \bar{G}^R(\mathbf{k}, \omega) + [1 - \sigma e^{\beta \hbar \omega}]^{-1} \bar{G}^A(\mathbf{k}, \omega) \\
&= (2s+1)^{-1} e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)] |\langle m | \hat{\psi}_\alpha | n \rangle|^2 (1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}) \\
&\quad \times \{ [1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega}]^{-1} [\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m) + i\eta]^{-1} + [1 - \sigma e^{\beta \hbar \omega}]^{-1} [\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m) - i\eta]^{-1} \} \\
&= (2s+1)^{-1} e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)] |\langle m | \hat{\psi}_\alpha | n \rangle|^2 \\
&\quad \times \left\{ \frac{1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}}{1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega}} \left[P \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)} - i\pi \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(K_n - K_m)] \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}}{1 - \sigma e^{\beta \hbar \omega}} \left[P \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)} + i\pi \delta[\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)] \right] \right\} \\
&= (2s+1)^{-1} e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta K_m} (2\pi)^3 \delta[\mathbf{k} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m)] |\langle m | \hat{\psi}_\alpha | n \rangle|^2 \\
&\quad \times \left\{ [1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}] \left[\frac{1}{1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega}} + \frac{1}{1 - \sigma e^{\beta \hbar \omega}} \right] P \frac{1}{\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)} \right. \\
&\quad \left. - i\pi \delta[\omega - \hbar^{-1}(K_n - K_m)] \left[\frac{1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}}{1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega}} - \frac{1 - \sigma e^{-\beta(K_n - K_m)}}{1 - \sigma e^{\beta \hbar \omega}} \right] \right\} \tag{331}
\end{aligned}$$

であるが、ここで、

$$\frac{1}{1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega}} + \frac{1}{1 - \sigma e^{\beta \hbar \omega}} = \frac{1 - \sigma e^{\beta \hbar \omega} + 1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - \sigma e^{\beta \hbar \omega} - \sigma e^{-\beta \hbar \omega} + 1} = 1 \tag{332}$$

$$\frac{1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega}} - \frac{1 - \sigma e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - \sigma e^{\beta \hbar \omega}} = \frac{-\sigma(e^{\beta \hbar \omega} - e^{-\beta \hbar \omega})}{1 - \sigma e^{\beta \hbar \omega}} = 1 + \sigma e^{-\beta \hbar \omega} \tag{333}$$

が成り立つから

$$\bar{G}(\mathbf{k}, \omega) = [1 - \sigma e^{-\beta\hbar\omega}]^{-1} \bar{G}^R(\mathbf{k}, \omega) + [1 - \sigma e^{\beta\hbar\omega}]^{-1} \bar{G}^A(\mathbf{k}, \omega) \quad (334)$$

を得る。次に、以下の積分を実行すると

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} i\bar{G}^R(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega\eta} &= i\bar{G}^R(\mathbf{k}, \eta) = \int d\mathbf{x} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} i\bar{G}^R(\mathbf{x}, \eta) \\ &= (2s+1)^{-1} \int d\mathbf{x} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_G [\hat{\psi}_{K\alpha}(\mathbf{x}0), \hat{\psi}_{K\alpha}^\dagger(0)] \right\} \\ &= \int d\mathbf{x} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \delta(\mathbf{x}) \text{Tr} \hat{\rho}_G \\ &= 1 \end{aligned} \quad (335)$$

であるが、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} i\bar{G}^R(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega\eta} &= i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\rho(\mathbf{k}, \omega') e^{-i\omega\eta}}{\omega - \omega' + i\eta} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \rho(\mathbf{k}, \omega') \end{aligned} \quad (336)$$

となるから結局、総和則

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \rho(\mathbf{k}, \omega) = 1 \quad (337)$$

を得る。

1.19 有限温度の線型応答

線型応答では、遅延相関関数

$$iD^R(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_G [\hat{O}_H(\mathbf{x}t), \hat{O}_H(\mathbf{x}'t')] \right\} \theta(t-t') \quad (338)$$

を用いる。ここでは、 \hat{O} として、密度の平均値からのずれ

$$\tilde{n}(\mathbf{x}) = \hat{n}(\mathbf{x}) - \langle \hat{n}(\mathbf{x}) \rangle \quad (339)$$

を用いた相関関数

$$iD^R(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_G [\tilde{n}_K(\mathbf{x}t), \tilde{n}_K(\mathbf{x}'t')] \right\} \theta(t-t') \quad (340)$$

の計算を行う。まずは、 iD^R の Fourier 変換を求める。一様系を仮定すると

$$\begin{aligned} D^R(\mathbf{q}, \omega) &= \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \int d(t - t') e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} e^{-i\omega(t-t')} (-i) \\ &\quad \times \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_G [\tilde{n}_K(\mathbf{x}t), \tilde{n}_K(\mathbf{x}'t')] \right\} \theta(t-t') \\ &= \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \int d(t - t') (-i) e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} e^{-i\omega(t-t')} \theta(t-t') \\ &\quad \times \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_G \left[e^{\frac{i\hat{K}t}{\hbar}} \tilde{n}(\mathbf{x}) e^{-\frac{i\hat{K}t}{\hbar}}, e^{\frac{i\hat{K}t'}{\hbar}} \tilde{n}(\mathbf{x}') e^{-\frac{i\hat{K}t'}{\hbar}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (341)$$

となるが、 Tr の部分は

$$\begin{aligned} &\text{Tr} \{ \dots \} \\ &= e^{\beta\Omega} \sum_{m,l} \left[e^{-\beta K_m} e^{\frac{iK_m t}{\hbar}} e^{\frac{i\mathbf{P}_m \cdot \mathbf{x}}{\hbar}} \langle m | \tilde{n} | l \rangle e^{-\frac{i\mathbf{P}_l \cdot \mathbf{x}}{\hbar}} e^{-\frac{iK_l t}{\hbar}} e^{\frac{iK_l t'}{\hbar}} e^{\frac{i\mathbf{P}_l \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}} \langle l | \tilde{n} | m \rangle e^{-\frac{i\mathbf{P}_m \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}} e^{-\frac{iK_m t'}{\hbar}} \right. \\ &\quad \left. - e^{-\beta K_l} e^{\frac{iK_l t'}{\hbar}} e^{\frac{i\mathbf{P}_l \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}} \langle l | \tilde{n} | m \rangle e^{-\frac{i\mathbf{P}_m \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}} e^{-\frac{iK_m t'}{\hbar}} e^{\frac{iK_m t}{\hbar}} e^{\frac{i\mathbf{P}_m \cdot \mathbf{x}}{\hbar}} \langle m | \tilde{n} | l \rangle e^{-\frac{i\mathbf{P}_l \cdot \mathbf{x}}{\hbar}} e^{-\frac{iK_l t}{\hbar}} \right] \\ &= e^{\beta\Omega} \sum_{m,l} e^{-\beta K_l} |\langle l | \tilde{n} | m \rangle|^2 \left[\left(e^{-\beta(K_m - K_l)} - 1 \right) e^{-\frac{i(K_l - K_m)(t-t')}{\hbar}} e^{-\frac{i(\mathbf{P}_l - \mathbf{P}_m) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{\hbar}} \right] \end{aligned} \quad (342)$$

となるから

$$D^R(\mathbf{q}, \omega) = e^{\beta\Omega} \sum_{m,l} e^{-\beta K_l} |\langle l | \tilde{n} | m \rangle|^2 (2\pi)^3 \delta[\mathbf{q} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_m - \mathbf{P}_l)] \frac{1 - e^{-\beta(K_m - K_l)}}{\omega - \hbar^{-1}(K_m - K_l) + i\eta}$$

を得る。ここで、

$$\begin{aligned} \hbar\Delta(\mathbf{q}, \omega) &\equiv e^{\beta\Omega} \sum_{m,l} e^{-\beta K_l} |\langle l | \tilde{n} | m \rangle|^2 (2\pi)^3 \delta[\mathbf{q} - \hbar^{-1}(\mathbf{P}_m - \mathbf{P}_l)] (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \\ &\quad \times 2\pi\delta[\omega - \hbar^{-1}(K_m - K_l)] \end{aligned} \quad (343)$$

を定義すると D^R の Fourier 変換は

$$D^R(\mathbf{q}, \omega) = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Delta(\mathbf{q}, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta} \quad (344)$$

と書ける。

1.20 電子ガスの遮蔽効果 (有限温度)

外場として

$$\hat{H}_H^{ex}(t) = - \int d\mathbf{x} \hat{n}_H(\mathbf{x}t) e\varphi^{ex}(\mathbf{x}t) \quad (345)$$

を選ぶ。これより、線型応答は

$$\delta\langle \hat{n}(\mathbf{q}, \omega) \rangle = -\frac{1}{\hbar} D^R(\mathbf{q}, \omega) e\varphi^{ex}(\mathbf{q}, \omega) = -\Pi^R(\mathbf{q}, \omega) e\varphi^{ex}(\mathbf{q}, \omega) \quad (346)$$

となる。ここで、有限温度での分極部分 $\Pi^*(\mathbf{q}, \nu_n)$ は以下の関数

$$F(\mathbf{q}, z) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Delta^*(\mathbf{q}, \omega')}{z - \omega'} \quad (347)$$

を用いれば

$$\Pi^*(\mathbf{q}, \nu_n) = F(\mathbf{q}, i\nu_n) \quad (348)$$

と書ける。ここで、 $\Pi^*(\mathbf{q}, \omega)$ を $\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$ と近似をする。(314) より

$$F^{(0)}(\mathbf{q}, z) = -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{n_{p+q}^0 - n_p^0}{\hbar z - (\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} \quad (349)$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} F^{(0)}(\mathbf{q}, \omega + i\eta) &= -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{n_{p+q}^0 - n_p^0}{\hbar\omega + i\eta - (\epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0)} \\ &= -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} n_{p+\frac{1}{2}q}^0 \left[\frac{1}{\hbar\omega + i\eta - \frac{\hbar^2 \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}}{m}} - \frac{1}{\hbar\omega + i\eta + \frac{\hbar^2 \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}}{m}} \right] \end{aligned} \quad (350)$$

となる。ただし、1項目では $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2}$ 、2項目では $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p} - \frac{\mathbf{q}}{2}$ の置き換えを行った。以下では古典極限を考える。すなわち分布関数を

$$n_p^0 = e^{\beta\mu} e^{-\frac{\beta\hbar^2 p^2}{2m}} \quad (351)$$

と置いて計算する。円柱座標 $\mathbf{p} = \mathbf{p}_\perp + \hat{\mathbf{q}}p_\parallel$ を用いると ($\hat{\mathbf{q}}$ は z 軸方向の単位ベクトルとする。)

$$\begin{aligned} F^{(0)}(\mathbf{q}, \omega + i\eta) &= -2e^{\beta\mu} \int \frac{d^2 p_\perp}{(2\pi)^2} \int \frac{dp_\parallel}{2\pi} \exp \left[-\frac{\beta\hbar^2}{2m} \left(p_\perp^2 + \left(p_\parallel + \frac{q}{2} \right)^2 \right) \right] \\ &\quad \times \left[\frac{1}{\hbar\omega + i\eta - \frac{\hbar^2 p_\parallel q}{m}} - \frac{1}{\hbar\omega + i\eta + \frac{\hbar^2 p_\parallel q}{m}} \right] \\ &= \frac{-2e^{\beta\mu}}{\lambda^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_\parallel}{2\pi} \exp \left[-\frac{\beta(p_\parallel + \frac{q}{2})^2 \hbar^2}{2m} \right] \\ &\quad \times \left[\frac{1}{\hbar\omega + i\eta - \frac{\hbar^2 p_\parallel q}{m}} - \frac{1}{\hbar\omega + i\eta + \frac{\hbar^2 p_\parallel q}{m}} \right] \end{aligned} \quad (352)$$

となる。ただし、

$$\int \frac{dp_{\perp}}{(2\pi)^2} e^{-\frac{\beta \hbar^2 p_{\perp}^2}{2m}} = \int_0^{\infty} \frac{dp_{\perp}}{2\pi} p_{\perp} e^{-\frac{\beta \hbar^2 p_{\perp}^2}{2m}} = \frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \equiv \frac{1}{\lambda^2} \quad (353)$$

を用いた。主値積分の公式を用いると

$$\begin{aligned} F^{(0)}(\mathbf{q}, \omega + i\eta) &= -2e^{\beta\mu} \lambda^{-2} \int \frac{dp}{2\pi} \exp\left[-\frac{\beta(p + \frac{q}{2})^2 \hbar^2}{2m}\right] \left\{ P \left[\frac{1}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 pq}{m}} - \frac{1}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 pq}{m}} \right] \right. \\ &\quad \left. - i\pi \left[\delta\left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 pq}{m}\right) - \delta\left(\hbar\omega + \frac{\hbar^2 pq}{m}\right) \right] \right\} \\ &\equiv F_1^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) + iF_2^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) \end{aligned} \quad (354)$$

と実部と虚部に分けられる。化学ポテンシャルの古典極限は

$$e^{\beta\mu} \simeq \frac{n\lambda^3}{2} \left[1 - \sqrt{\pi} \left(\frac{e^2 n^{\frac{1}{3}}}{k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (355)$$

で与えられるから $e^{\beta\mu} \simeq \frac{n\lambda^3}{2}$ と近似すると、 $F_2^{(0)}$ は

$$\begin{aligned} F_2^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) &= n\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left[-\frac{\beta(p + \frac{q}{2})^2 \hbar^2}{2m}\right] \\ &\quad \times \frac{1}{2} \left\{ \delta\left[\frac{\hbar^2 q}{m} \left(p - \hbar\omega \frac{m}{\hbar^2 q}\right)\right] - \delta\left[\frac{\hbar^2 q}{m} \left(p + \hbar\omega \frac{m}{\hbar^2 q}\right)\right] \right\} \\ &= \frac{n\lambda m}{2\hbar^2 q} \left\{ \exp\left[-\frac{\beta\left(\frac{m\omega}{\hbar q} + \frac{q}{2}\right)^2 \hbar^2}{2m}\right] - \exp\left[-\frac{\beta\left(-\frac{m\omega}{\hbar q} + \frac{q}{2}\right)^2 \hbar^2}{2m}\right] \right\} \\ &= \frac{n\lambda m}{2\hbar^2 q} \left\{ \exp\left[-\frac{\beta\hbar^2}{2m} \left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2 q^2} + \frac{m\omega}{\hbar} + \frac{q^2}{2}\right)\right] \right. \\ &\quad \left. - \exp\left[-\frac{\beta\hbar^2}{2m} \left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2 q^2} - \frac{m\omega}{\hbar} + \frac{q^2}{2}\right)\right] \right\} \\ &= \frac{n}{2} \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{m}{\hbar^2 q} \exp\left[-\frac{\beta m\omega^2}{2q^2} - \frac{\beta\hbar^2 q^2}{8m}\right] \left[e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega} - e^{\frac{1}{2}\beta\hbar\omega} \right] \\ &= -\frac{n\beta\omega}{q} \left(\frac{\pi}{2}\beta m\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\beta m\omega^2}{2q^2} - \frac{\beta\hbar^2 q^2}{8m}\right] \frac{\sinh\frac{\beta}{2}\hbar\omega}{\frac{\beta}{2}\hbar\omega} \end{aligned} \quad (356)$$

となる。これより、 $F_2^{(0)}$ は ω の奇関数で、 $\omega = 0$ で 0 である。一方、実部は、初頭関数では表せないが $e^{\beta\mu} \simeq \frac{n\lambda^3}{2}$ の近似をし、かつ

$$\Phi(x) \equiv \pi^{-\frac{1}{2}} P \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{e^{-y^2}}{x-y} \quad (357)$$

を導入すると

$$\begin{aligned}
F_1^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) &= -n\lambda P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \exp \left[-\frac{\beta \left(p + \frac{q}{2}\right)^2 \hbar^2}{2m} \right] \left[\frac{1}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 pq}{m}} - \frac{1}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 pq}{m}} \right] \\
&= -n \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m} \right)^{\frac{1}{2}} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \sqrt{\frac{2m}{\beta\hbar^2}} e^{-y^2} \\
&\quad \times \left[\frac{1}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 q}{m} \left(\sqrt{\frac{2m}{\beta\hbar^2}} y - \frac{q}{2} \right)} - \frac{1}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q}{m} \left(\sqrt{\frac{2m}{\beta\hbar^2}} y - \frac{q}{2} \right)} \right] \\
&= -\frac{n}{\sqrt{\pi}} P \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} \left[\frac{1}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \sqrt{\frac{2\hbar^2 q^2}{m\beta}} y} - \frac{1}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \sqrt{\frac{2\hbar^2 q^2}{m\beta}} y} \right] \\
&= -\frac{n}{\hbar q} \sqrt{\frac{m\beta}{2\pi}} P \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} \left[\frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\beta m} \left(\frac{\omega}{q} + \frac{\hbar q}{2m} \right) - y} - \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\beta m} \left(\frac{\omega}{q} - \frac{\hbar q}{2m} \right) + y} \right] \tag{358}
\end{aligned}$$

となるが、第2項で $y \rightarrow -y$ とすると

$$\begin{aligned}
F_1^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{n}{\hbar q} \sqrt{\frac{m\beta}{2\pi}} P \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} \left[\frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\beta m} \left(\frac{\omega}{q} + \frac{\hbar q}{2m} \right) - y} - \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\beta m} \left(\frac{\omega}{q} - \frac{\hbar q}{2m} \right) - y} \right] \\
&= -\frac{n}{\hbar q} \sqrt{\frac{m\beta}{2}} \left\{ \Phi \left[\sqrt{\frac{1}{2}m\beta} \left(\frac{\omega}{q} + \frac{\hbar q}{2m} \right) \right] - \Phi \left[\sqrt{\frac{1}{2}m\beta} \left(\frac{\omega}{q} - \frac{\hbar q}{2m} \right) \right] \right\} \tag{359}
\end{aligned}$$

を得る。

1.21 プラズマ振動 (有限温度)

外場として

$$\varphi^{ex}(\mathbf{x}t) = \varphi_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \delta(t) \quad (360)$$

を仮定する。これによる誘導電荷は以下の2式

$$\delta\langle\hat{n}(\mathbf{q},\omega)\rangle = -\Pi^R(\mathbf{q},\omega)e\varphi^{ex}(\mathbf{q},\omega) = \frac{-F(\mathbf{q},\omega+i\eta)}{1-V(\mathbf{q})F(\mathbf{q},\omega+i\eta)}e\varphi^{ex}(\mathbf{q},\omega) \quad (361)$$

$$\varphi^{ex}(\mathbf{q},\omega) = \int d\mathbf{x} \int dt e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{i\omega t} \varphi_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \delta(t) = (2\pi)^3 \varphi_0 \delta(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \quad (362)$$

を用いて

$$\begin{aligned} \delta\langle\hat{n}(\mathbf{x}t)\rangle &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\omega t} \frac{-F(\mathbf{k},\omega+i\eta)}{1-V(\mathbf{k})F(\mathbf{k},\omega+i\eta)} e(2\pi)^3 \varphi_0 \delta(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \\ &= -e\varphi_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \frac{F_1(\mathbf{q},\omega) + iF_2(\mathbf{q},\omega)}{1-V(\mathbf{q})F_1(\mathbf{q},\omega) - iV(\mathbf{q})F_2(\mathbf{q},\omega)} \end{aligned} \quad (363)$$

となる。遅延相関関数の極が振動数を決めるので、振動数を $\Omega_q - i\gamma_q$ とおくと

$$1 - V(q)F_1(q, \Omega_q - i\gamma_q) - iV(q)F_2(q, \Omega_q - i\gamma_q) = 0 \quad (364)$$

である。ここで、 $\Pi^*(\mathbf{q}, \nu_n)$ を $\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)$ で近似する。これは古典極限に対応する。 γ_q が十分小さいとして展開すると

$$\begin{aligned} 1 &= V(q) \left[F_1^{(0)}(q, \Omega_q) - i\gamma_q \left. \frac{\partial F_1^{(0)}(q, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\Omega_q} \right] + iV(q) \left[F_2^{(0)}(q, \Omega_q) - i\gamma_q \left. \frac{\partial F_2^{(0)}(q, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\Omega_q} \right] \\ \Rightarrow 1 &= V(q)F_1^{(0)}(q, \Omega_q), \quad \gamma_q = F_2^{(0)}(q, \Omega_q) \left[\left. \frac{\partial F_1^{(0)}(q, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\Omega_q} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (365)$$

を得る。これは $q \ll q_D$ のときよい近似となっている。これを以下で示す。

$x \gg 1$ のとき (357) で定義した Φ は

$$\Phi(x) \simeq \frac{1}{x} \left(1 + \frac{1}{2x} + \dots \right) \quad (366)$$

と展開できた。これより (359) は q が小さいとき

$$\begin{aligned} F_1^{(0)}(q, \omega) &= -\frac{n}{\hbar q} \sqrt{\frac{m\beta}{2\pi}} \left\{ \Phi \left[\sqrt{\frac{1}{2}m\beta} \left(\frac{\omega}{q} + \frac{\hbar q}{2m} \right) \right] - \Phi \left[\sqrt{\frac{1}{2}m\beta} \left(\frac{\omega}{q} - \frac{\hbar q}{2m} \right) \right] \right\} \\ &\equiv -\frac{n}{\hbar q} \sqrt{\frac{m\beta}{2}} [\Phi(x) - \Phi(y)] \end{aligned} \quad (367)$$

とすると (366) より

$$\begin{aligned}\Phi(x) - \Phi(y) &\simeq \frac{1}{x} + \frac{1}{2x^3} - \frac{1}{y} - \frac{1}{2y^3} \\ &= \frac{y-x}{xy} \left[1 + \frac{x^2 + xy + y^2}{2x^3y^2} \right]\end{aligned}\quad (368)$$

だから、

$$\begin{aligned}F^{(0)}(q, \omega) &\simeq -\frac{n}{\hbar q} \frac{-\frac{\hbar q}{m} \frac{1}{2} \beta m}{\frac{1}{2} \beta m \left(\frac{\omega^2}{q^2} - \frac{\hbar^2 q^2}{4m^2} \right)} \left\{ 1 + \frac{\left[\left(\frac{\omega}{q} + \frac{\hbar q}{2m} \right)^2 + \left(\frac{\omega}{q} - \frac{\hbar q}{2m} \right)^2 + \frac{\omega^2}{q^2} - \frac{\hbar^2 q^2}{4m^2} \right]}{2 \left(\frac{1}{2} \beta m \right)^2 \left(\frac{\omega^2}{q^2} - \frac{\hbar^2 q^2}{4m^2} \right)^2} \frac{1}{2} \beta m \right\} \\ &= \frac{nq^2}{m\omega^2} \left(1 - \frac{\hbar^2 q^4}{4m^2 \omega^2} \right)^{-1} \left[1 + \frac{q^4}{\beta m \omega^4} \left(1 - \frac{\hbar^2 q^4}{4m^2 \omega^2} \right)^{-2} \left[3 \frac{\omega^2}{q^2} + \frac{\hbar^2 q^2}{4m^2} \right] \right] \\ &\simeq \frac{nq^2}{m\omega^2} \left(1 + \frac{\hbar^2 q^4}{4m^2 \omega^2} \right) \left[1 + \frac{q^4}{\beta m \omega^4} \left(1 + \frac{\hbar^2 q^4}{2m^2 \omega^2} \right) \left(3 \frac{\omega^2}{q^2} + \frac{\hbar^2 q^2}{4m^2} \right) \right] \\ &\simeq \frac{nq^2}{m\omega^2} \left(1 + \frac{3q^2}{\beta m \omega^2} + \dots \right)\end{aligned}\quad (369)$$

となる。(365) より

$$1 = \frac{4\pi n e^2}{m \Omega_q^2} \left(1 + \frac{3q^2}{\beta m \Omega_q^2} \right)\quad (370)$$

となる。ここで、

$$\Omega_{pl}^2 \equiv \frac{4\pi n e^2}{m}, \quad q_D^2 \equiv \frac{4\pi n e^2}{k_B T}\quad (371)$$

より

$$\begin{aligned}\Omega_q^2 &= \Omega_{pl}^2 \left(1 + \frac{3q^2}{\beta m \Omega_q^2} \right) \simeq \Omega_{pl}^2 \left(1 + \frac{3q^2}{\beta m \Omega_{pl}^2} \right) = \Omega_{pl}^2 \left[1 + 3 \left(\frac{q}{q_D} \right)^2 \right] \\ \Omega_q &\simeq \pm \Omega_{pl} \left[1 + \frac{3}{2} \left(\frac{q}{q_D} \right)^2 \right]\end{aligned}\quad (372)$$

となる。ここで、 $q \ll q_D$ 、 $T \rightarrow \infty$ として $F_2^{(0)}$ は

$$\begin{aligned}F^{(0)}(q, \omega) &= -\frac{n\beta\omega}{q} \left(\frac{\pi}{2} \beta m \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{\beta m \omega^2}{2q^2} - \frac{\beta \hbar^2 q^2}{8m} \right] \frac{\sinh \frac{\beta}{2} \hbar \omega}{\frac{\beta}{2} \hbar \omega} \\ &\simeq -\frac{n\beta\omega}{q} \left(\frac{\pi}{2} \beta m \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{\beta m \omega^2}{2q^2} \right]\end{aligned}\quad (373)$$

と近似できるから γ_q は

$$\begin{aligned}\gamma_q &\simeq -\frac{n\beta}{q} (\pm \Omega_q) \left(\frac{\pi}{2} \beta m \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\beta m \Omega_q^2}{2q^2}} \left[-2 \frac{nq^2}{m(\pm \Omega_{pl})^3} \right]^{-1} \\ &= \Omega_{pl} \left(\frac{\pi}{8} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{q_D}{q} \right)^3 e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{q_D}{q} \right)^2}\end{aligned}\quad (374)$$

となる。

1.22 Bogoliubov 変換 (Bose 粒子系)

Hamiltonian が

$$\hat{H} = \sum_k \hbar\omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{g}{2V} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \quad (375)$$

である Bose 系を考える。ただし、相互作用は剛体球ポテンシャルの擬ポテンシャル [2] である。ここで、摂動の 1 次では

$$g = \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \quad (376)$$

であることが示せる。運動量 0 の状態は熱力学極限下では

$$\hat{a}_0, \hat{a}_0^\dagger \rightarrow \sqrt{N_0} \quad (377)$$

と置き換えられる。これより、相互作用 Hamiltonian は

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{g}{2V} \left[\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \right] \quad (378)$$

となる。第 2 項は $k \neq 0$ についての和である。第 2 項を全て書き下すと

$$\begin{aligned} (\text{第 2 項}) &= \sum_{k_2 k_3 k_4} ' \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} \delta_{k_2, k_3+k_4} + \sum_{k_1 k_3 k_4} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} \delta_{k_1, k_3+k_4} \\ &+ \sum_{k_1 k_2 k_4} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_{k_4} \delta_{k_1+k_2, k_4} + \sum_{k_1 k_2 k_3} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_0 \delta_{k_1+k_2, k_3} \\ &+ \sum_{k_3 k_4} ' \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} \delta_{0, k_3+k_4} + \sum_{k_2 k_4} ' \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_{k_4} \delta_{k_2, k_4} \\ &+ \sum_{k_2 k_3} ' \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_0 \delta_{k_2, k_3} + \sum_{k_1 k_4} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_{k_4} \delta_{k_1, k_4} \\ &+ \sum_{k_1 k_3} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_0 \delta_{k_1, k_3} + \sum_{k_1 k_2} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 \delta_{k_1+k_2, 0} \\ &+ \sum_{k_4} ' \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_{k_4} \delta_{0, k_4} + \sum_{k_3} ' \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_0 \delta_{0, k_3} \\ &+ \sum_{k_2} ' \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 \delta_{k_2, 0} + \sum_{k_1} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 \delta_{k_1, 0} \end{aligned} \quad (379)$$

となる。ただし、最後の 4 項はクロネッカーデルタにより 0 になる。ここで、 N_0 と N_0^2 の order の項のみ残すことにすると、

$$\begin{aligned} (\text{第 2 項}) &= \sum_{k_3 k_4} ' \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} \delta_{0, k_3+k_4} + \sum_{k_2 k_4} ' \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_{k_4} \delta_{k_2, k_4} \\ &+ \sum_{k_2 k_3} ' \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_0 \delta_{k_2, k_3} + \sum_{k_1 k_4} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_{k_4} \delta_{k_1, k_4} \\ &+ \sum_{k_1 k_3} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_0 \delta_{k_1, k_3} + \sum_{k_1 k_2} ' \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 \delta_{k_1+k_2, 0} \end{aligned} \quad (380)$$

であるから、相互作用 Hamiltonian は

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{int}} &= \frac{g}{2V} \left\{ \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \sum_k' \left[2 \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_{-k} \right] \right\} \\ &= \frac{g}{2V} \left[N_0^2 + 2N_0 \sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k}) + N_0 \sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger + \hat{a}_k \hat{a}_{-k}) \right] \quad (381)\end{aligned}$$

となる。ここで粒子数演算子

$$\hat{N} \equiv N_0 + \frac{1}{2} \sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k}) \quad (382)$$

を定義し、 $N - N_0 \ll N$ を仮定する。この仮定により $(\sum_k' \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k)^2$ のような項は無視すると、Hamiltonian は

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_k' \epsilon_k^0 \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{g}{2V} \left[N - \frac{1}{2} \sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k}) \right]^2 \\ &\quad + \frac{g}{2V} \left\{ 2 \left[N - \frac{1}{2} \sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k}) \right] \sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k}) \right\} \\ &\quad + \frac{g}{2V} \left[N - \frac{1}{2} \sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k}) \right] \left[\sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger + \hat{a}_k \hat{a}_{-k}) \right] \\ &\simeq \frac{1}{2} V g n^2 + \sum_k' \epsilon_k^0 \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - \frac{g}{2} n \sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k}) \\ &\quad + g n \sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k}) + \frac{1}{2} g n \sum_k' (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger + \hat{a}_k \hat{a}_{-k}) \\ &= \frac{1}{2} V g n^2 + \frac{1}{2} \sum_k' \left[(\epsilon_k^0 + n g) (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k}) + g n (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger + \hat{a}_k \hat{a}_{-k}) \right] \quad (383)\end{aligned}$$

となる。ここで、以下のような新しい演算子を考える。

$$\hat{a}_k \equiv u_k \hat{\alpha}_k - v_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \quad (384)$$

$$\hat{a}_k^\dagger \equiv u_k \hat{\alpha}_k^\dagger - v_k \hat{\alpha}_{-k} \quad (385)$$

ここで、 u_k, v_k は実数で、 $u_k = u_{-k}, v_k = v_{-k}$ であるとする。また、 $\hat{\alpha}$ は交換関係

$$[\hat{\alpha}_k, \hat{\alpha}_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}, \quad [\hat{\alpha}_k, \hat{\alpha}_{k'}] = [\hat{\alpha}_k^\dagger, \hat{\alpha}_{k'}^\dagger] = 0 \quad (386)$$

を満たすとする。この条件を課すと

$$\begin{aligned}[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] &= (u_k \hat{\alpha}_k - v_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger)(u_{k'} \hat{\alpha}_{k'}^\dagger - v_{k'} \hat{\alpha}_{-k'}) - (u_{k'} \hat{\alpha}_{k'}^\dagger - v_{k'} \hat{\alpha}_{-k'}) (u_k \hat{\alpha}_k - v_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger) \\ &= u_k u_{k'} \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_{k'}^\dagger - u_k v_{k'} \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_{-k'} - v_k u_{k'} \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_{k'}^\dagger + v_k v_{k'} \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_{-k'} \\ &\quad - u_k u_{k'} \hat{\alpha}_{k'}^\dagger \hat{\alpha}_k + u_k v_{k'} \hat{\alpha}_{-k'} \hat{\alpha}_k + v_k u_{k'} \hat{\alpha}_{k'}^\dagger \hat{\alpha}_{-k}^\dagger - v_k v_{k'} \hat{\alpha}_{-k'} \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \\ &= (u_k u_{k'} - v_k v_{k'}) \delta_{k,k'} \quad (387)\end{aligned}$$

となる。これは $\delta_{k,k'}$ に等しくなければならないから

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \quad (388)$$

を得る。よって、この変換を Hamiltonian に施すと

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2}Vgn^2 + \frac{1}{2} \sum_k' \left\{ (\epsilon_k^0 + ng) \left[(u_k \hat{\alpha}_k^\dagger - v_k \hat{\alpha}_{-k})(u_k \hat{\alpha}_k - v_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (u_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger - v_k \hat{\alpha}_k)(u_k \hat{\alpha}_{-k} - v_k \hat{\alpha}_k^\dagger) \right] + gn \left[(u_k \hat{\alpha}_k^\dagger - v_k \hat{\alpha}_{-k})(u_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger - v_k \hat{\alpha}_k) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (u_k \hat{\alpha}_k - v_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger)(u_k \hat{\alpha}_{-k} - v_k \hat{\alpha}_k^\dagger) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2}Vgn^2 + \frac{1}{2} \sum_k' \left\{ (\epsilon_k^0 + ng) \left[u_k^2 \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k - u_k v_k \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_{-k}^\dagger - u_k v_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_k + v_k^2 \hat{\alpha}_{-k} \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + u_k^2 \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_{-k} - u_k v_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_k^\dagger - u_k v_k \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_{-k} + v_k^2 \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k \right] \right. \\ &\quad \left. + gn \left[u_k^2 \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_{-k}^\dagger - u_k v_k \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k - u_k v_k \hat{\alpha}_{-k} \hat{\alpha}_{-k}^\dagger + v_k^2 \hat{\alpha}_{-k} \hat{\alpha}_k \right] \right. \\ &\quad \left. + u_k^2 \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_{-k} - u_k v_k \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_k^\dagger - u_k v_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_{-k} + v_k^2 \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_k^\dagger \right\} \\ &= \frac{1}{2}Vgn^2 + \sum_k' [(\epsilon_k^0 + ng)(u_k^2 + v_k^2) - u_k v_k ng] \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_k' [(\epsilon_k^0 + ng)(u_k^2 + v_k^2) - 2u_k v_k ng] (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_{-k}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_k' [ng(u_k^2 + v_k^2) - 2u_k v_k (\epsilon_k^0 + ng)] (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_{-k}^\dagger + \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_{-k}) \end{aligned} \quad (389)$$

となる。この第4項を除けば Hamiltonian は対角的になっている。よって、第4項を0にするための条件は

$$ng(u_k^2 + v_k^2) = 2u_k v_k (\epsilon_k^0 + ng) \quad (390)$$

である。また、(388)の制約により

$$u_k \equiv \cosh \varphi_k, \quad v_k \equiv \sinh \varphi_k \quad (391)$$

と置ける。ただし、 φ_k は実数である。これより、(390)は

$$\begin{aligned} ng(\cosh^2 \varphi_k + \sinh^2 \varphi_k) &= 2 \cosh \varphi_k \sinh \varphi_k (\epsilon_k^0 + ng) \\ ng(\coth \varphi_k + \tanh \varphi_k) &= 2(\epsilon_k^0 + ng) \end{aligned} \quad (392)$$

となるが、

$$2 \frac{1}{\frac{1}{\tanh \varphi_k} + \tanh \varphi_k} = \tanh 2\varphi_k \quad (393)$$

となるから、

$$\tanh 2\varphi_k = \frac{ng}{\epsilon_k^0 + ng} \quad (394)$$

を得る。(392) と $u_k^2 = 1 + v_k^2$ より

$$\begin{aligned}
(u_k^2 + v_k^2)^2 &= 4u_k^2 v_k^2 \left(\frac{\epsilon_k^0 + ng}{ng} \right)^2 \equiv 4u_k^2 v_k^2 A^2 \\
(1 + 2v_k^2)^2 &= 4(1 + v_k^2)v_k^2 A^2 \\
\Rightarrow v_k^4 + v_k^2 - \frac{1}{4(A^2 - 1)} &= 0 \\
v_k^2 &= \frac{1}{2} \left[-1 + \sqrt{1 + \frac{1}{A^2 - 1}} \right] = \frac{1}{2} [E_k^{-1}(\epsilon_k^0 + ng) - 1]
\end{aligned} \tag{395}$$

となる。ただし、

$$E_k \equiv \sqrt{(\epsilon_k^0 + ng)^2 - (ng)^2} \tag{396}$$

である。これより、Hamiltonian は

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2} Vgn^2 + \sum_k' \left\{ (\epsilon_k^0 + ng) \frac{1}{2} [E_k^{-1}(\epsilon_k^0 + ng) - 1] - \frac{(ng)^2}{2(\epsilon_k^0 + ng)} (1 + 2v_k^2) \right\} \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_k' \left\{ \left[(\epsilon_k^0 + ng)(1 + 2v_k^2) - \frac{(ng)^2}{(\epsilon_k^0 + ng)} (1 + 2v_k^2) \right] (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_{-k}) \right\} \\
&= \frac{1}{2} Vgn^2 + \sum_k' \left[\frac{(\epsilon_k^0 + ng)^2}{2E_k} - \frac{\epsilon_k^0 + ng}{2} - \frac{(ng)^2}{2(\epsilon_k^0 + ng)} \frac{\epsilon_k^0 + ng}{E_k} \right] \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_k' \left\{ \frac{1}{E_k} \left[\epsilon_k^0 + ng - \frac{(ng)^2}{\epsilon_k^0 + ng} \right] \frac{\epsilon_k^0 + ng}{E_k} (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_{-k}) \right\} \\
&= \frac{1}{2} Vgn^2 + \frac{1}{2} \sum_k' \left\{ \frac{1}{E_k} [(\epsilon_k^0 + ng)^2 - (\epsilon_k^0 + ng)E_k - (ng)^2] \right\} \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_k' \left\{ [(\epsilon_k^0 + ng)^2 - (ng)^2] E_k^{-1} (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_{-k}) \right\} \\
&= \frac{1}{2} Vgn^2 + \frac{1}{2} \sum_k' (E_k - \epsilon_k^0 - ng) + \frac{1}{2} \sum_k' E_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_{-k})
\end{aligned} \tag{397}$$

となる。

この Hamiltonian の基底状態を

$$\hat{\alpha}_k |\mathbf{0}\rangle = 0 \tag{398}$$

で定義する。これより、基底状態のエネルギーは

$$E = \langle \mathbf{0} | \hat{H} | \mathbf{0} \rangle = \frac{1}{2} Vgn^2 + \frac{1}{2} \sum_k' (E_k - \epsilon_k^0 - ng) \tag{399}$$

である。また、基底状態の分布関数は

$$\begin{aligned}
n_k &= \langle \mathbf{0} | \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k | \mathbf{0} \rangle \\
&= \langle \mathbf{0} | u_k^2 \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k - u_k v_k \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_{-k}^\dagger - u_k v_k \hat{\alpha}_{-k} \hat{\alpha}_k + v_k^2 \hat{\alpha}_{-k} \hat{\alpha}_{-k}^\dagger | \mathbf{0} \rangle \\
&= v_k^2 \langle \mathbf{0} | \hat{\alpha}_{-k} \hat{\alpha}_{-k}^\dagger | \mathbf{0} \rangle = v_k^2
\end{aligned} \tag{400}$$

である。この分布関数を、 $\mathbf{k} = 0$ を除いて足し挙げると $N - N_0$ が得られるから

$$\begin{aligned}
\frac{N - N_0}{N} &= \frac{1}{N} \sum_k' v_k^2 = \frac{1}{n} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} v_k^2 = \frac{1}{n} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{\epsilon_k^0 + ng}{E_k} - 1 \right) \\
&= \frac{4\pi}{16\pi^3 n} \int_0^\infty dk k^2 \left[\frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + ng}{\sqrt{(\epsilon_k^0 + ng)^2 - (ng)^2}} - 1 \right] \\
&= \frac{1}{4\pi^2 n} \int_0^\infty dy y^2 \left[\frac{1 + y^2}{\sqrt{y^4 + 2y^2}} - 1 \right] \\
&= 4\sqrt{\frac{2na^3}{\pi}} \int_0^\infty dy y^2 \left[\frac{1 + y^2}{\sqrt{y^4 + 2y^2}} - 1 \right] \tag{401}
\end{aligned}$$

となる。ここで、 $y^2 \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2mng}$ と置いた。積分は以下のように実行できる。

$$\begin{aligned}
I &\equiv \int_0^\infty dy y^2 \left[y \frac{y^2 + 1}{\sqrt{y^2 + 2}} - 1 \right] \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^N dy \left[y \sqrt{y^2 + 2} - \frac{y}{\sqrt{y^2 + 2}} - y^2 \right] \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{3} (y^2 + 2)^{\frac{3}{2}} - \sqrt{y^2 + 2} - \frac{1}{3} y^3 \right]_0^N \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{N^3}{3} \left(1 + \frac{2}{N^2} \right)^{\frac{3}{2}} - N \left(1 + \frac{2}{N^2} \right)^{\frac{1}{2}} - \frac{N^3}{3} - \frac{2\sqrt{2}}{3} + \sqrt{2} \right] \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{N^3}{3} \left[1 + \frac{3}{N^2} + \frac{3}{4} \frac{2}{N^4} + O(N^{-6}) \right] \right. \\
&\quad \left. - N \left[1 + \frac{1}{N^2} - \frac{1}{4} \frac{1}{N^4} + O(N^{-6}) \right] - \frac{N^3}{3} + \frac{\sqrt{2}}{3} \right\} \\
&= \frac{\sqrt{2}}{3} \tag{402}
\end{aligned}$$

よって、

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{8}{3} \left(\frac{na^3}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{403}$$

を得る。ここで、基底状態のエネルギーを

$$\begin{aligned}
E &= \frac{1}{2} V g n^2 + \frac{1}{2} \sum_k' (E_k - \epsilon_k^0 - ng) \\
&= \frac{1}{2} V g n^2 - \frac{1}{2} (ng)^2 \sum_k' \frac{m}{\hbar^2 k^2} + \frac{1}{2} \sum_k' \left(E_k - \epsilon_k^0 - ng + \frac{m}{\hbar^2 k^2} n^2 g^2 \right) \tag{404}
\end{aligned}$$

と書くと

$$\begin{aligned}
\frac{E}{N} &= \frac{1}{2} ng - \frac{(ng)^2}{2N} \frac{m}{\hbar^2} V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2} + \frac{ngV}{2N} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{E_k}{ng} - \frac{\epsilon_k^0}{ng} - 1 + \frac{ng}{2\epsilon_k^0} \right) \\
&= \frac{n}{2} \left[g - \frac{mg^2}{\hbar^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2} \right] + \frac{g}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{E_k}{ng} - \frac{\epsilon_k^0}{ng} - 1 + \frac{ng}{2\epsilon_k^0} \right) \tag{405}
\end{aligned}$$

となるが、第1項は $\frac{4\pi a\hbar^2 n}{m}$ に等しくなり、第2項は $y^2 \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2mng}$ の変数変換をすると

$$\begin{aligned}\frac{E}{N} &= \frac{2\pi a\hbar^2 n}{m} + \frac{\sqrt{(2mng)^3}}{4\pi^2\hbar^3} g \int_0^\infty dy y^2 \left[y\sqrt{y^2+2} - y^2 - 1 + \frac{1}{2y^2} \right] \\ &= \frac{2\pi a\hbar^2 n}{m} \left[1 + 8\sqrt{\frac{2na^3}{\pi}} \int_0^\infty dy \left(y^3\sqrt{y^2+2} - y^4 - y^2 + \frac{1}{2} \right) \right]\end{aligned}\quad (406)$$

となる。積分は

$$\begin{aligned}I &\equiv \int_0^\infty dy \left(y^3\sqrt{y^2+2} - y^4 - y^2 + \frac{1}{2} \right) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^N dy \left(y^3\sqrt{y^2+2} - y^4 - y^2 + \frac{1}{2} \right) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \left[\frac{y^2}{3} (y^2+2)^{\frac{3}{2}} \right]_0^N - \frac{2}{3} \int_0^N dy y (y^2+2)^{\frac{3}{2}} - \frac{N^5}{5} - \frac{N^3}{3} + \frac{N}{2} \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{N^2}{3} (N^2+2)^{\frac{3}{2}} - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{5} (y^2+2)^{\frac{5}{2}} \right]_0^N - \frac{N^5}{5} - \frac{N^3}{3} + \frac{N}{2} \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{N^5}{3} \left(1 + \frac{2}{N^2} \right)^{\frac{3}{2}} - \frac{2N^5}{15} \left(1 + \frac{2}{N^2} \right)^{\frac{5}{2}} + \frac{8\sqrt{2}}{15} - \frac{N^5}{5} - \frac{N^3}{3} + \frac{N}{2} \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{N^5}{3} \left[1 + \frac{3}{N^2} + \frac{3}{2} \frac{1}{N^4} + O(N^{-6}) \right] - \frac{2N^5}{15} \left[1 + \frac{5}{N^2} + \frac{15}{2} \frac{1}{N^4} + O(N^{-6}) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{8\sqrt{2}}{15} - \frac{N^5}{5} - \frac{N^3}{3} + \frac{N}{2} \right\} \\ &= \frac{8\sqrt{2}}{15}\end{aligned}\quad (407)$$

と計算できるから、

$$\frac{E}{N} = \frac{2\pi a\hbar^2 n}{m} \left[1 + \frac{128}{15} \left(\frac{na^3}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right]\quad (408)$$

を得る。

1.23 Bogoliubov 変換 (Fermi 粒子系)

Bogoliubov 変換

$$\hat{\alpha}_k = u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \quad (409)$$

$$\hat{\beta}_{-k} = u_k \hat{a}_{-k\downarrow} + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \quad (410)$$

を考える。ここで、 u_k, v_k は実数である。 $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ は

$$\{\hat{\alpha}_k, \hat{\alpha}_{k'}^\dagger\} = \{\hat{\beta}_k, \hat{\beta}_{k'}^\dagger\} = \delta_{k,k'} \quad (411)$$

を満たすとする。元の演算子の反交換関係は

$$\{\hat{a}_{k\lambda}, \hat{a}_{k'\lambda'}^\dagger\} = \delta_{k,k'} \delta_{\lambda,\lambda'} \quad (412)$$

なので、

$$\begin{aligned} \{\hat{a}_{k\lambda}, \hat{a}_{k'\lambda'}^\dagger\} &= (u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger)(u_{k'} \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger - v_{k'} \hat{a}_{-k'\downarrow}) + (u_{k'} \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger - v_{k'} \hat{a}_{-k'\downarrow})(u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger) \\ &= u_k u_{k'} \{\hat{a}_{k\uparrow}, \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger\} - u_k v_{k'} \{\hat{a}_{k\uparrow}, \hat{a}_{-k'\downarrow}\} - u_{k'} v_k \{\hat{a}_{k\downarrow}^\dagger, \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger\} + v_k v_{k'} \{\hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger, \hat{a}_{-k'\downarrow}\} \\ &= u_k u_{k'} \delta_{k,k'} + v_k v_{k'} \delta_{-k,-k'} \end{aligned} \quad (413)$$

が (412) となるためには

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (414)$$

でなければならない。これより、 \hat{a} を $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ で表すと

$$\hat{a}_{k\uparrow} = u_k \hat{\alpha}_k + v_k \hat{\beta}_{-k}^\dagger \quad (415)$$

$$\hat{a}_{-k\downarrow} = u_k \hat{\beta}_{-k} - v_k \hat{\alpha}_k^\dagger \quad (416)$$

となる。

ここで、 $T=0$ での熱力学ポテンシャルは、 $\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N}$ の期待値に等しいから、まず、 \hat{K} を書き下すと

$$\begin{aligned} \hat{K} &= \hat{H} - \mu \hat{N} \\ &= \sum_{k\lambda} (\epsilon_k^0 - \mu) \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k\lambda} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1+k_2=k_3+k_4 \\ \lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}} \langle k_1\lambda_1 k_2\lambda_2 | V | k_3\lambda_3 k_4\lambda_4 \rangle \hat{a}_{k_1\lambda_1}^\dagger \hat{a}_{k_2\lambda_2}^\dagger \hat{a}_{k_4\lambda_4} \hat{a}_{k_3\lambda_3} \end{aligned} \quad (417)$$

ただし、引力ポテンシャルを仮定しているので、ポテンシャルの符号が $-$ になり、 $V > 0$ である。ここで、Wick の定理より、

$$\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow} = \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}] + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow} \quad (418)$$

となる。ここで、 \hat{N} 積は $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ についてである。真空を

$$\hat{\alpha}_k |\mathbf{0}\rangle = \hat{\beta}_k |\mathbf{0}\rangle = 0 \quad (419)$$

で定義する。これより、(418) の真空期待値は

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow} &= \langle \mathbf{0} | (u_k \hat{\alpha}_k^\dagger + v_k \hat{\beta}_{-k}) (u_{k'} \hat{\alpha}_{k'} + v_{k'} \hat{\beta}_{-k}') | \mathbf{0} \rangle \\
&= \langle \mathbf{0} | v_k v_{k'} \hat{\beta}_{-k} \hat{\beta}_{-k}'^\dagger | \mathbf{0} \rangle \\
&= v_k^2 \delta_{k,k'}
\end{aligned} \tag{420}$$

となる。同様にして

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow} &= \langle \mathbf{0} | (u_k \hat{\beta}_{-k}^\dagger - v_k \hat{\alpha}_k) (u_{k'} \hat{\beta}_{-k'} - v_{k'} \hat{\alpha}_{k'}) | \mathbf{0} \rangle \\
&= \langle \mathbf{0} | v_k v_{k'} (\delta_{k,k'} - \hat{\alpha}_{k'}^\dagger \hat{\alpha}_k) | \mathbf{0} \rangle \\
&= v_k^2 \delta_{k,k'}
\end{aligned} \tag{421}$$

を得る。これより、(417) 第1項は

$$\begin{aligned}
(\text{第1項}) &= \sum_k (\epsilon_k^0 - \mu) (\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow} + \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}) \\
&= \sum_k (\epsilon_k^0 - \mu) \left[2v_k^2 + \hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}) + \hat{N}(\hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}) \right] \\
&= \sum_k (\epsilon_k^0 - \mu) \left[2v_k^2 + \hat{N}(u_k \hat{\alpha}_k^\dagger + v_k \hat{\beta}_{-k}) (u_k \hat{\alpha}_k + v_k \hat{\beta}_{-k}^\dagger) \right. \\
&\quad \left. + \hat{N}(u_k \hat{\beta}_{-k}^\dagger - v_k \hat{\alpha}_k) (u_k \hat{\beta}_{-k} - v_k \hat{\alpha}_k^\dagger) \right] \\
&= \sum_k (\epsilon_k^0 - \mu) \left[2v_k^2 + u_k^2 \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + u_k v_k \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger + u_k v_k \hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k - v_k^2 \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k} \right. \\
&\quad \left. + u_k^2 \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k} - u_k v_k \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_k^\dagger - u_k v_k \hat{\alpha}_k \hat{\beta}_{-k} - v_k^2 \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k \right] \\
&= \sum_k (\epsilon_k^0 - \mu) \left[2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2) (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) + 2u_k v_k (\hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger) \right] \tag{422}
\end{aligned}$$

となる。簡単のためポテンシャルはスピンの依存しないと仮定する。すなわち、

$$\langle k_1 \lambda_1 k_2 \lambda_2 | V | k_3 \lambda_3 k_4 \lambda_4 \rangle = \delta_{\lambda_1, \lambda_3} \delta_{\lambda_2, \lambda_4} \langle k_1 k_2 | V | k_3 k_4 \rangle \tag{423}$$

である。これより、

$$\langle k_1 k_2 | V | k_3 k_4 \rangle = \frac{1}{V^2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{y} e^{-i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x} + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{y})} V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) e^{i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{x} + \mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{y}} \tag{424}$$

となる。ここで、 $V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = V(-\mathbf{x}, -\mathbf{y})$ を仮定すると、対称性

$$\begin{aligned}
\langle k_1 k_2 | V | k_3 k_4 \rangle &= \langle k_2 k_1 | V | k_4 k_3 \rangle = \langle -k_3 - k_4 | V | -k_1 - k_2 \rangle \\
&= \langle -k_1 - k_2 | V | -k_3 - k_4 \rangle
\end{aligned} \tag{425}$$

を得る。これと、(417) より、ポテンシャルは

$$\begin{aligned}
\hat{V} &= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1+k_2=k_3+k_4 \\ \lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}} \delta_{\lambda_1,\lambda_3} \delta_{\lambda_2,\lambda_4} \langle k_1 k_2 | V | k_3 k_4 \rangle \hat{a}_{k_1\lambda_1}^\dagger \hat{a}_{k_2\lambda_2}^\dagger \hat{a}_{k_4\lambda_4} \hat{a}_{k_3\lambda_3} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{k,k',q \\ \lambda_1\lambda_2}} \langle k k' | V | k+q, k'-q \rangle \hat{a}_{k\lambda_1}^\dagger \hat{a}_{k'\lambda_2}^\dagger \hat{a}_{k'-q\lambda_2} \hat{a}_{k+q\lambda_1} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{k,k',q} \langle k k' | V | k+q, k'-q \rangle \left[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \hat{a}_{k+q\uparrow} + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\downarrow} \right. \\
&\quad \left. + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow} + \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \hat{a}_{k+q\downarrow} \right] \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{k,k',q} \left\{ \langle k k' | V | k+q, k'-q \rangle \left[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \hat{a}_{k+q\uparrow} + \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'+q\downarrow} \hat{a}_{-k-q\downarrow} \right] \right. \\
&\quad \left. - \left[\langle k k' | V | k+q, k'-q \rangle \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow} + \langle k' k | V | k'-q, k+q \rangle \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\downarrow} \hat{a}_{k'-q\uparrow} \right] \right\} \\
&\equiv \hat{V}_a - \sum_{k,k',q} \langle k k' | V | k+q, k'-q \rangle \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow} \\
&= \hat{V}_a - \sum_{k,k',q} \langle k-k' | V | k+q, -k'-q \rangle \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow} \\
&\equiv \hat{V}_a + \hat{V}_b
\end{aligned} \tag{426}$$

となる。ここで、 \hat{V}_a に着目する。Wick の定理より、

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \hat{a}_{k+q\uparrow} &= \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \hat{a}_{k+q\uparrow}] - \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \hat{N}[\hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow}] \\
&\quad + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow} \hat{N}[\hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow}] + \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow}] \\
&\quad - \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow} \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow}] - \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow} \\
&\quad + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow} \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \\
&= \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \hat{a}_{k+q\uparrow}] - \delta_{k,k'-q} v_k^2 \hat{N}[\hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow}] \\
&\quad + \delta_{k,k+q} v_k^2 \hat{N}[\hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow}] + \delta_{k',k'-q} v_{k'}^2 \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow}] \\
&\quad - \delta_{k',k+q} v_k^2 \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow}] - \delta_{k,k'-q} \delta_{k',k+q} v_k^2 v_{k'}^2 \\
&\quad + \delta_{k,k+q} \delta_{k',k'-q} v_{k'}^2 v_k^2 \\
&= \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'-q\uparrow} \hat{a}_{k+q\uparrow}] - \delta_{k',k+q} v_k^2 \hat{N}[\hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}] \\
&\quad + \delta_{q,0} v_k^2 \hat{N}[\hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'}] + \delta_{q,0} v_{k'}^2 \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}] \\
&\quad - \delta_{k',k+q} v_k^2 \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}] - \delta_{k',k+q} v_k^2 v_{k'}^2 + \delta_{q,0} v_{k'}^2 v_k^2
\end{aligned} \tag{427}$$

となるから、 \hat{V}_a は

$$\begin{aligned}
\hat{V}_a &= \hat{N}(\hat{V}_a) - \frac{1}{2} \sum_{k,k',q} \langle kk' | V | k+q, k'-q \rangle \left\{ \delta_{k',k+q} \left[-v_k^2 \hat{N}(\hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}) - v_{k'}^2 \hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - v_k^2 v_{k'}^2 \right] + \delta_{q,0} \left[v_k^2 \hat{N}(\hat{a}_{k'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k'\uparrow}) + v_{k'}^2 \hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}) + v_k^2 v_{k'}^2 \right] + [\hat{\alpha}_k \leftrightarrow \hat{\beta}_{-k}, v \leftrightarrow -v] \right\} \\
&= \hat{N}(\hat{V}_a) - \frac{1}{2} \sum_{k,k'} (\langle kk' | V | kk' \rangle - \langle kk' | V | k'k \rangle) \left\{ v_k^2 v_{k'}^2 + 2v_{k'}^2 \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}] \right. \\
&\quad \left. + [\hat{\alpha}_k \leftrightarrow \hat{\beta}_{-k}, v \leftrightarrow -v] \right\} \tag{428}
\end{aligned}$$

となるが、(422) の N 積の評価により

$$\begin{aligned}
\hat{V}_a &= \hat{N}(\hat{V}_a) - \sum_{k,k'} (\langle kk' | V | kk' \rangle - \langle kk' | V | k'k \rangle) \left[v_k v_{k'}^2 + v_{k'}^2 (u_k^2 - v_k^2) (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) \right. \\
&\quad \left. + 2v_{k'}^2 u_k v_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger + \hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k) \right] \tag{429}
\end{aligned}$$

を得る。 \hat{V}_b の評価には、以下の contraction が必要である。

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger &= \langle \mathbf{0} | (u_k \hat{\alpha}_k^\dagger + v_k \hat{\beta}_{-k}) (u_{k'} \hat{\beta}_{-k'}^\dagger - v_{k'} \hat{\alpha}_{k'}) | \mathbf{0} \rangle \\
&= u_k v_{k'} \delta_{k,k'} \tag{430}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k'\uparrow} &= \langle \mathbf{0} | (u_k \hat{\beta}_k - v_k \hat{\alpha}_k) (u_{k'} \hat{\alpha}_{-k'} + v_{k'} \hat{\beta}_{-k'}^\dagger) | \mathbf{0} \rangle \\
&= u_k v_{k'} \delta_{k,k'} \tag{431}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow} &= \langle \mathbf{0} | (u_k \hat{\alpha}_k^\dagger + v_k \hat{\beta}_{-k}) (u_{k'} \hat{\beta}_{-k'} - v_{k'} \hat{\alpha}_{k'}^\dagger) | \mathbf{0} \rangle \\
&= 0 \tag{432}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k'\uparrow} &= \langle \mathbf{0} | (u_k \hat{\beta}_{-k}^\dagger - v_k \hat{\alpha}_k) (u_{k'} \hat{\alpha}_{k'} + v_{k'} \hat{\beta}_{-k'}^\dagger) | \mathbf{0} \rangle \\
&= 0 \tag{433}
\end{aligned}$$

よって、 \hat{V}_b 中の演算子は Wick の定理より、

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow} &= \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow}] + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger \hat{N}[\hat{a}_{-k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow}] \\
&\quad + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow} \hat{N}[\hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'-q\downarrow}] + \hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'-q\downarrow} \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow}] \\
&\quad + \hat{a}_{-k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow} \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger] + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k'-q\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow} \\
&\quad + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow} \hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'-q\downarrow} \\
&= \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow}] + u_k v_{k'} \delta_{k,k'} \hat{N}[\hat{a}_{-k'-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow}] \\
&\quad + v_k^2 \delta_{q,0} \hat{N}[\hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'-q\downarrow}] + v_{k'}^2 \delta_{q,0} \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k+q\uparrow}] \\
&\quad + \delta_{k,k'} u_{k+q} v_{k+q} \hat{N}[\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger] + \delta_{k,k'} u_k v_k u_{k+q} v_{k+q} + \delta_{q,0} v_k^2 v_{k'}^2 \tag{434}
\end{aligned}$$

となるから、 \hat{V}_b は

$$\begin{aligned}
\hat{V}_b &= \hat{N}(\hat{V}_b) - \sum_{k,k'} \langle k-k' | V | k-k' \rangle \left[v_{k'}^2 \hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}) + v_k^2 \hat{N}(\hat{a}_{-k'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k'\downarrow}) \right. \\
&\quad \left. + v_k^2 v_{k'}^2 \right] - \sum_{k,q} \langle k-k | V | k+q, -k-q \rangle \left[u_k v_k \hat{N}(\hat{a}_{-k-q\downarrow} \hat{a}_{k+q\uparrow}) \right. \\
&\quad \left. + u_{k+q} v_{k+q} \hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger) + u_k v_k u_{k+q} v_{k+q} \right] \\
&= \hat{N}(\hat{V}_b) - \sum_{k,k'} \langle k-k' | V | k-k' \rangle v_{k'}^2 \left[v_k^2 + \hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}) + \hat{N}(\hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}) \right] \\
&\quad - \sum_{k,k'} \langle k-k | V | k+q, -k-q \rangle \left[u_k v_k \hat{N}(\hat{a}_{-k'\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow}) + u_{k'} v_{k'} \hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger) \right. \\
&\quad \left. + v_k u_k v_{k'} u_{k'} \right] \\
&= \hat{N}(\hat{V}_b) - \sum_{k,k'} \langle k-k' | V | k-k' \rangle v_{k'}^2 \left[v_k^2 + \hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}) + \hat{N}(\hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}) \right] \\
&\quad - \sum_{k,k'} \langle k-k | V | k+q, -k-q \rangle u_{k'} v_{k'} \left[u_k v_k + \hat{N}(\hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow}) + \hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger) \right. \\
&\quad \left. + u_k v_k u_{k'} v_{k'} \right] \quad (435)
\end{aligned}$$

ここで、上式中の N 積は

$$\hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}) + \hat{N}(\hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}) = (u_k^2 - v_k^2)(\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) + 2u_k v_k (\hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger) \quad (436)$$

$$\begin{aligned}
\hat{N}(\hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow}) + \hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger) &= \hat{N}[(u_k \hat{\beta}_{-k} - v_k \hat{\alpha}_k)(u_k \hat{\alpha}_k + v_k \hat{\beta}_{-k}^\dagger)] \\
&\quad + \hat{N}[(u_k \hat{\alpha}_k^\dagger + v_k \hat{\beta}_{-k}^\dagger)(u_k \hat{\beta}_{-k} - v_k \hat{\alpha}_k)] \\
&= (u_k^2 - v_k^2)(\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) - 2u_k v_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) \quad (437)
\end{aligned}$$

と計算できるから

$$\begin{aligned}
\hat{V}_b &= \hat{N}(\hat{V}_b) - \sum_{k,k'} \langle k-k' | V | k-k' \rangle v_{k'}^2 \left[v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) \right. \\
&\quad \left. + 2u_k v_k (\hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger) - \sum_{k,k'} \langle k-k | V | k'-k' \rangle u_{k'} v_{k'} \right. \\
&\quad \left. \times \left[u_k v_k + (u_k^2 - v_k^2)(\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger + \hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k) - 2u_k v_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}) \right] \right] \\
&= \hat{N}(\hat{V}_b) - \sum_{k,k'} (u_k v_k u_{k'} v_{k'} \langle k-k | V | k'-k' \rangle + v_k^2 v_{k'}^2 \langle k-k' | V | k-k' \rangle) \\
&\quad - \sum_{k,k'} \left\{ (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) [(u_k^2 - v_k^2) v_{k'}^2 \langle k-k' | V | k-k' \rangle \right. \\
&\quad \left. - 2u_k v_k u_{k'} v_{k'} \langle k-k | V | k'-k' \rangle] \right\} - \sum_{k,k'} \left\{ (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger + \hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k) [(u_k^2 - v_k^2) \right. \\
&\quad \left. \times u_{k'} v_{k'} \langle k-k | V | k'-k' \rangle + 2u_k v_k v_{k'}^2 \langle k-k' | V | k-k' \rangle] \right\} \quad (438)
\end{aligned}$$

となる。これより、 $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$ は以下のようになる。

$$\begin{aligned}
\hat{K} &= \sum_k (\epsilon_k^0 - \mu) \left[2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) + 2u_k v_k (\hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger) \right] \\
&\quad + \hat{N}(\hat{V}_a) - \sum_{k,k'} (\langle kk'|V|kk'\rangle - \langle kk'|V|k'k\rangle) [v_k^2 v_{k'}^2 + v_{k'}^2 (u_k^2 - v_k^2) \\
&\quad \times (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) + v_{k'}^2 (2u_k v_k) (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger + \hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k)] \\
&\quad + \hat{N}(\hat{V}_b) - \sum_{k,k'} (u_k v_k u_{k'} v_{k'} \langle k-k|V|k'-k'\rangle + v_k^2 v_{k'}^2 \langle k-k'|V|k-k'\rangle) \\
&\quad - \sum_{k,k'} \left\{ (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) [(u_k^2 - v_k^2) v_{k'}^2 \langle k-k'|V|k-k'\rangle - 2u_k v_k u_{k'} v_{k'} \right. \\
&\quad \times \langle k-k|V|k'-k'\rangle] \left. \right\} - \sum_{k,k'} \left\{ (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger + \hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k) [(u_k^2 - v_k^2) u_{k'} v_{k'} \langle k-k|V|k'-k'\rangle \right. \\
&\quad \left. + 2u_k v_k v_{k'}^2 \langle k-k'|V|k-k'\rangle] \right\} \\
&= 2 \sum_k (\epsilon_k^0 - \mu) v_k^2 - \sum_{k,k'} [\langle kk'|V|kk'\rangle - \langle kk'|V|k'k\rangle + \langle k-k'|V|k-k'\rangle] v_k^2 v_{k'}^2 \\
&\quad - \sum_{k,k'} \langle k-k|V|k'-k'\rangle u_k v_k u_{k'} v_{k'} \\
&\quad + \sum_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) \left\{ \left[\epsilon_k^0 - \mu - \sum_{k'} (\langle kk'|V|kk'\rangle - \langle kk'|V|k'k\rangle + \langle k-k'|V|k-k'\rangle) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \times v_{k'}^2 (u_k^2 - v_k^2) + 2u_k v_k \sum_{k'} \langle k-k|V|k'-k'\rangle u_{k'} v_{k'} \right] \right\} \\
&\quad + \sum_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger + \hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k) \left\{ 2 \left[\epsilon_k^0 - \mu - \sum_{k'} (\langle kk'|V|kk'\rangle - \langle kk'|V|k'k\rangle + \langle k-k'|V|k-k'\rangle) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \times v_{k'}^2 \right] u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'} \langle k-k|V|k'-k'\rangle u_{k'} v_{k'} \right\} + \hat{N}(\hat{V}_a + \hat{V}_b) \\
&\equiv U + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{N}(\hat{V}) \tag{439}
\end{aligned}$$

ここで、ポテンシャルの部分を簡略に表示するために

$$\langle kk'|\bar{V}|kk'\rangle \equiv \langle kk'|V|kk'\rangle - \langle kk'|V|k'k\rangle + \langle k-k'|V|k-k'\rangle \tag{440}$$

を定義し、新しい1粒子エネルギーを

$$\epsilon_k \equiv \epsilon_k^0 - \sum_{k'} \langle kk'|\bar{V}|kk'\rangle v_{k'}^2 \tag{441}$$

で定義する。さらに、エネルギーを化学ポテンシャルから測るとすると

$$\xi_k \equiv \epsilon_k - \mu \tag{442}$$

である。最後にエネルギーギャップを

$$\Delta_k \equiv \sum_{k'} \langle k-k|V|k'-k'\rangle u_{k'} v_{k'} \tag{443}$$

と定義する。これらを用いると U, \hat{H}_1, \hat{H}_2 は

$$U = 2 \sum_k \xi_k v_k^2 + \sum_{k,k'} v_k^2 v_{k'}^2 \langle kk' | \bar{V} | kk' \rangle - \sum_k u_k v_k \Delta_k \quad (444)$$

$$\hat{H}_1 = \sum_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) [(u_k^2 - v_k^2) \xi_k + 2u_k v_k \Delta_k] \quad (445)$$

$$\hat{H}_2 = \sum_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger + \hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k) [2u_k v_k \xi_k - (u_k^2 - v_k^2) \Delta_k] \quad (446)$$

と書ける。以上は近似を用いていない厳密な結果である。

u_k, v_k に関する条件は、(414) だけであつた。ここで、Hamiltonian を対角化するために、 \hat{H}_2 を消す条件

$$2\xi_k u_k v_k = (u_k^2 - v_k^2) \Delta_k \quad (447)$$

を加える。この条件は

$$u_k \equiv \cos \chi_k, \quad v_k \equiv \sin \chi_k \quad (448)$$

とすれば

$$\tan 2\chi_k = \frac{\Delta_k}{\xi_k} \quad (449)$$

と書ける。 $E_k \equiv \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}$ を定義すれば

$$1 + \tan^2 2\chi_k = \frac{\Delta_k^2}{\xi_k^2} + 1$$

$$\Rightarrow \cos^2 2\chi_k = \frac{\xi_k^2}{\Delta_k^2 + \xi_k^2}$$

$$\cos 2\chi_k = \pm \xi_k E_k^{-1} = u_k^2 - v_k^2 \quad (450)$$

$$\sin 2\chi_k = \pm \Delta_k E_k^{-1} = 2u_k v_k \quad (451)$$

となる。よって、 \hat{H}_1 は

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \sum_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) (\pm \xi_k^2 E_k^{-1} \pm \Delta_k^2 E_k^{-1}) \\ &= \pm \sum_k E_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) \end{aligned} \quad (452)$$

と書ける。この形から、符号は + を採用しなければならない。これより、

$$u_k v_k = \frac{\Delta_k}{2E_k} \quad (453)$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right) \quad (454)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right) \quad (455)$$

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} \langle k - k' | V | k' - k \rangle \frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}} \quad (456)$$

となる。(456)はBCSのギャップ方程式である。絶対零度の熱力学ポテンシャル \hat{K} は $U + \hat{H}_1 + \hat{N}(\hat{V})$ であるが、 U は c 数であり、 \hat{H}_1 は対角化されていて、準粒子の粒子数演算子が含まれている。そして、 $\hat{N}(\hat{V})$ の基底状態の期待値は

$$\langle \mathbf{0} | \hat{N}(\hat{V}) | \mathbf{0} \rangle = 0 \quad (457)$$

である。 $\hat{N}(\hat{V})$ を無視する近似は、良い近似になっている場合が多い。よって、

$$\hat{K}_0 = U + \hat{H}_1 = U + \sum_k E_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_k^\dagger \hat{\beta}_k) \quad (458)$$

を得る。ここで、基底状態の平均粒子数は

$$\begin{aligned} N &= \sum_{k\lambda} \langle \mathbf{0} | \hat{a}_{k\lambda} \hat{a}_{k\lambda} | \mathbf{0} \rangle \\ &= 2 \sum_k v_k^2 = \sum_k \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right) \end{aligned} \quad (459)$$

であり、全運動量演算子は

$$\begin{aligned} \hat{P} &= \sum_{k\lambda} \hbar \mathbf{k} \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k\lambda} = \sum_k \hbar \mathbf{k} (\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow} - \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}) \\ &= \sum_k \hbar \mathbf{k} \left[\hat{N}(\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow}) + \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow} - \hat{N}(\hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}) - \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow} \right] \\ &= \sum_k \hbar \mathbf{k} (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_k^\dagger \hat{\beta}_k) \end{aligned} \quad (460)$$

となる。この形から

$$[\hat{K}_0, \hat{P}] = 0 \quad (461)$$

がわかるので、 $|\mathbf{0}\rangle$ は \hat{K}_0 と \hat{P} の同時固有状態である。

ここで、ギャップ方程式の解を求める。(456)は自明な解

$$\Delta_k = 0 \quad (k : \text{任意}) \quad (462)$$

を持つ。このとき、

$$E_k = |\xi_k| \quad (463)$$

$$u_k v_k = 0 \quad (464)$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{|\xi_k|} \right) = \theta(\epsilon_k - \mu) \quad (465)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{|\xi_k|} \right) = \theta(\mu - \epsilon_k) \quad (466)$$

となる。

次に非自明解を求める。これは超伝導解と呼ばれる。ここで、ポテンシャルに以下のような仮定をする。

$$\langle k-k | V | l-l \rangle = \frac{g}{V} \theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|) \theta(\hbar\omega_D - |\xi_l|) \quad (467)$$

ここで、 ω_D は積分を収束させるための Cut-off である。これにより、ギャップ方程式が解くことができる。(467) の仮定により、 Δ_k は値を持つ領域では一定値になる。ゆえに、 $\Delta_k \rightarrow \Delta$ と置くとギャップ方程式は

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_l \frac{g}{V} \theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|) \theta(\hbar\omega_D - |\xi_l|) \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_l^2}} \quad (468)$$

となるが、

$$\Delta_k \equiv \Delta \theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|) \quad (469)$$

とおくと

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{g}{2V} \sum_k \theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|) (\Delta^2 + \xi_k^2)^{\frac{1}{2}} \\ 1 &= \frac{g}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|) (\Delta^2 + \xi_k^2)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (470)$$

となる。ここで、 $\hbar\omega_D \ll \mu$ のとき

$$\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{2\pi^2} k^2 dk \simeq N(0) d\xi \quad (471)$$

$$N(0) \equiv \frac{1}{2\pi^2} \left[k^2 \frac{d\mathbf{k}}{d\epsilon_k} \right]_{\epsilon_k=\mu} \quad (472)$$

と近似する。 $N(0)$ はフェルミ面での 1 スピンあたりの状態密度を表す。これより

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{gN(0)}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} = gN(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} \\ &= gN(0) \left[\ln \xi + \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \right]_0^{\hbar\omega_D} \\ &= gN(0) \ln \frac{\hbar\omega_D + \sqrt{\hbar^2\omega_D^2 + \Delta^2}}{\Delta} = gN(0) \ln \left\{ \frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \left[1 + \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_D} \right)^2} \right] \right\} \\ &\simeq gN(0) \ln \frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \left[1 + 1 + \frac{\Delta^2}{2(\hbar\omega_D)^2} \right] \simeq gN(0) \ln \frac{2\hbar\omega_D}{\Delta} \end{aligned} \quad (473)$$

となる。ただし、 $\hbar\omega_D \gg \Delta$ とした。よって、エネルギーギャップ

$$\Delta = 2\hbar\omega_D \exp \left[-\frac{1}{gN(0)} \right] \quad (474)$$

を得る。以上より u_k^2 と v_k^2 は

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \right) \\ v_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \right) \end{aligned} \quad (475)$$

となる。

ここで、通常状態と、超伝導状態を比較する。粒子数については

$$\begin{aligned}
N_s - N_n &= 2 \sum_k (v_k^2|_s - v_k^2|_n) \\
&= \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} - 1 + \frac{\xi_k}{|\xi_k|} \right) \\
&= \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \xi_k \left(\frac{1}{|\xi|} - \frac{1}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \right) \\
&\simeq VN(0) \int d\xi \left[\frac{1}{|\xi|} - \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \right] \\
&= 0
\end{aligned} \tag{476}$$

となり、変わりはない。基底状態のエネルギーは

$$\begin{aligned}
E_s - E_n &= U_s(\mu_s) - U_n(\mu_n) + (\mu_s - \mu_n)N \\
&= U_s(\mu_n) + \delta\mu_n \left(\frac{\partial U_s}{\partial \mu} \right)_{\mu_n} - U_n(\mu_s) + \delta\mu_n N + O(\delta\mu_n^2) \\
&\simeq U_s(\mu_n) - U_n(\mu_n)
\end{aligned} \tag{477}$$

となるが、フェルミ面近くで

$$\langle kk' | \bar{V} | kk' \rangle \equiv \frac{g}{V} \tag{478}$$

と仮定すれば (444)、(455)、(466) より、

$$\begin{aligned}
E_s - E_n &= 2 \sum_k \xi_k (v_k^2|_s - v_k^2|_n) - \sum_k u_k v_k \Delta|_s + \frac{g}{V} \sum_{k,k'} (v_k^2 v_{k'}^2|_s - v_k^2 v_{k'}^2|_n) \\
&= \sum_k \left[\frac{\xi_k^2}{|\xi_k|} - \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \right] - \frac{1}{2} \sum_k \frac{\Delta^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \\
&\quad + \frac{g}{4V} \sum_{k,k'} \left\{ \left[1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \right] \left[1 - \frac{\xi_{k'}}{\sqrt{\xi_{k'}^2 + \Delta^2}} \right] - \left(1 - \frac{\xi_k}{|\xi_k|} \right) \left(1 - \frac{\xi_{k'}}{|\xi_{k'}|} \right) \right\} \\
&\simeq VN(0) \int d\xi \left[\frac{\xi^2}{|\xi|} - \frac{\xi^2}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} - \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \right] \\
&\quad + \frac{g}{4V} [N(0)]^2 \int d\xi \int d\xi' \left[1 - \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} - \frac{\xi'}{\sqrt{\xi'^2 + \Delta^2}} + \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \frac{\xi'}{\sqrt{\xi'^2 + \Delta^2}} \right. \\
&\quad \quad \quad \left. - 1 + \frac{\xi}{|\xi|} + \frac{\xi'}{|\xi'|} - \frac{\xi}{|\xi|} \frac{\xi'}{|\xi'|} \right] \\
&= 2VN(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \left[\xi - \frac{\xi^2}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} - \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \right] + \frac{gV[N(0)]^2}{4} \int d\xi \int d\xi' \\
&\quad \times \left[1 - \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} - \frac{\xi'}{\sqrt{\xi'^2 + \Delta^2}} + \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \frac{\xi'}{\sqrt{\xi'^2 + \Delta^2}} - 1 + \frac{\xi}{|\xi|} + \frac{\xi'}{|\xi'|} - \frac{\xi}{|\xi|} \frac{\xi'}{|\xi'|} \right]
\end{aligned}$$

となるが、第2項は奇関数なので0となる。よって、

$$\begin{aligned}
E_s - E_n &= 2VN(0) \left[\frac{\xi^2}{2} - \frac{1}{2} \left(\xi \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} - \Delta^2 \ln |\xi + \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}| \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\Delta^2}{2} \ln |\xi + \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}| \right]_0^{\hbar\omega_D} \\
&= 2VN(0) \left[\frac{1}{2}(\hbar\omega_D)^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega_D \sqrt{(\hbar\omega_D)^2 + \Delta^2} \right] \\
&\simeq VN(0) \left\{ (\hbar\omega_D)^2 - (\hbar\omega_D)^2 \left[1 + \frac{\Delta^2}{2(\hbar\omega_D)^2} + \dots \right] \right\} \\
&= -\frac{V}{2}N(0)\Delta^2 = \Omega_s - \Omega_n
\end{aligned} \tag{479}$$

となる。

1.24 相互作用が無い Phonon 系

一様、等方な弾性体を仮定する。さらに、横波は無いと仮定し、断熱体積弾性率

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_S \quad (480)$$

は与えられているものとする。この物理量は、弾性体の体積変化のしやすさを表し、弾性率が低いほど体積変化がしやすい。この場合は、バネ定数を念頭に置けばよい。

質量密度の変化 $\delta\rho_m$ は波動方程式

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \delta\rho_m = 0 \quad (481)$$

に従う。ここで、

$$c^2 = \frac{B}{\rho_{m0}} = \frac{B}{Mn_0} \quad (482)$$

は、縦波の音速で、

$$\rho_{m0} \equiv Mn_0 \quad (483)$$

は Background の質量密度である。平衡位置からのずれを $\mathbf{d}(\mathbf{x})$ とすると、体積要素 dV は $\mathbf{d}(\mathbf{x})$ の 1 次までで

$$dV' = dx' dy' dz' = dV(1 + \nabla \cdot \mathbf{d}) \quad (484)$$

と変わる。これより、密度の変化は同じ order で

$$\begin{aligned} \frac{\delta\rho_m}{\rho_{m0}} &= \frac{M\delta n}{Mn_0} = \frac{\delta n}{n_0} = \frac{n - n_0}{n_0} = \frac{n}{n_0} - 1 = \frac{\frac{dN}{dV'}}{\frac{dN}{dV}} - 1 = \frac{dV}{dV'} - 1 \\ &= \frac{1}{1 + \nabla \cdot \mathbf{d}} - 1 \simeq -\nabla \cdot \mathbf{d} \end{aligned} \quad (485)$$

となる。以上より、

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho_m &= -\rho_{m0} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \nabla \cdot \mathbf{d} \\ \nabla^2 \delta\rho_m &= -\rho_{m0} \nabla \cdot (\nabla^2 \mathbf{d}) \\ \Rightarrow \nabla \cdot \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{d}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{d} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (486)$$

を得る。ここで、連続体中で横波と渦が無いとき、 \mathbf{d} は以下の条件

$$\oint_{\text{any path}} \mathbf{d} \cdot d\mathbf{l} = 0 \quad (487)$$

を満たす。これは、一般にベクトル場は発散が無い項と、回転がない項との和で書けるからである。(487) より

$$\nabla \times \mathbf{d} = \mathbf{0} \quad (488)$$

である。ゆえに、

$$\nabla \times \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{d}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{d} \right) = 0 \quad (489)$$

も成り立つ。あるベクトルの発散と回転が0のとき、そのベクトルは恒等的に0であるから、 \mathbf{d} は

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{d}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{d} \right) = 0 \quad (490)$$

を満たす。この方程式を与える Lagrangian は

$$L_0 = \int d\mathbf{x} \left[\frac{\rho_{m0}}{2} \left(\frac{\partial d_i}{\partial t} \right)^2 - \frac{B}{2} \left(\frac{\partial d_i}{\partial x_j} \right)^2 \right] \quad (491)$$

である。ここで、場の運動量 $\boldsymbol{\pi}$ を

$$\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}, t) \equiv \rho_{m0} \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial t} \quad (492)$$

で定義すると、Hamiltonian は

$$\begin{aligned} H_0 &= \int d\mathbf{x} \boldsymbol{\pi} \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial t} - L_0 \\ &= \int d\mathbf{x} \left[\frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2\rho_{m0}} + \frac{B}{2} \left(\frac{\partial d_i}{\partial x_j} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (493)$$

となるが、 $\nabla \times \mathbf{d}$ と部分積分2回を用いると

$$H_0 = \int d\mathbf{x} \left[\frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2\rho_{m0}} + \frac{B}{2} (\nabla \cdot \mathbf{d})^2 \right] \quad (494)$$

が得られる。ここで、 $\mathbf{d}, \boldsymbol{\pi}$ は

$$\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}, t) = -\sqrt{Mn_0} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2V}} \frac{\mathbf{k}}{k} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right) \quad (495)$$

$$\mathbf{d}(\mathbf{x}, t) = \frac{-i}{\sqrt{Mn_0}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}} V}} \frac{\mathbf{k}}{k} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} - \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right) \quad (496)$$

$$\omega_{\mathbf{k}} = ck \quad (497)$$

となる。これらより、Hamiltonian は

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \quad (498)$$

となる。

1.25 電子-格子相互作用

Phonon を考える前に、電子ガス模型の Hamiltonian を載せておく。

$$\hat{H} \equiv \hat{H}_{el} + \hat{H}_{b-b} + \hat{H}_{el-b} \quad (499)$$

$$\hat{H}_{el} \equiv \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^{-\mu|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (500)$$

$$\hat{H}_{b-b} \equiv \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{n(\mathbf{x})n(\mathbf{x}')e^{-\mu|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (501)$$

$$\hat{H}_{el-b} \equiv -e^2 \sum_{i=1}^N \int d\mathbf{x} \frac{n(\mathbf{x})e^{-\mu|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|} \quad (502)$$

これらは、上から、電子-電子相互作用、背景-背景相互作用、電子-背景相互作用を表す。

ここから phonon を考える。(502) より、電子と背景の相互作用 Hamiltonian は

$$\hat{H}_{el-b} = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{\hat{\rho}_{el}(\mathbf{x})\hat{\rho}_b(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (503)$$

である。ここで、上と違うのは、背景の電荷密度が一様ではない点である。 ρ_b を一様な密度、そこからの変化 $\delta\hat{\rho}_b$ とすると、

$$\hat{\rho}_b = \rho_0 + \delta\hat{\rho}_b \quad (504)$$

$$\delta\hat{\rho}_b = ze\delta n = -zen_0 \nabla \cdot \mathbf{d} \quad (505)$$

となる。ただし、 z はイオンの価数である。これを (503) に代入すると

$$\hat{H}_{el-b} = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{\hat{\rho}_{el}(\mathbf{x})\rho_0}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} + \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{\hat{\rho}_{el}(\mathbf{x})\delta\hat{\rho}_b(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (506)$$

$$\equiv \hat{H}_{el-b}^0 + \hat{H}_{el-ph} \quad (507)$$

となる。ここで、第1項は (502) と同じである。第2項が電子-格子相互作用を表す。ここで、場の演算子は Schrödinger 表現で

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_{k\lambda} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \eta_{\lambda} \hat{a}_{k\lambda} \quad (508)$$

$$\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{x}) = \frac{-i}{\sqrt{Mn_0}} \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k V}} \frac{\mathbf{k}}{k} \left(\hat{c}_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \hat{c}_k^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right) \theta(\omega_D - \omega) \quad (509)$$

である。これらを (507) に代入すると

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{el-ph} &= \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{-e}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \hat{\psi}_\lambda^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_{\lambda'}(\mathbf{x}) \frac{-i}{\sqrt{Mn_0}} \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_q V}} \frac{\mathbf{q}}{q} \\
&\quad \times (-zen_0) \cdot \left[i\mathbf{q} \hat{c}_q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} + i\mathbf{q} \hat{c}_q^\dagger e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \right] \theta(\omega_D - \omega_q) \\
&= \sum_{k\lambda k'\lambda'} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{-e}{V|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \eta_\lambda^\dagger \eta_{\lambda'} \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_{\lambda'} (-zen_0) \theta(\omega_D - \omega) \\
&\quad \times \frac{1}{c\sqrt{Mn_0}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_q}{2V}} \left[\hat{c}_q e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x} + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} + \hat{c}_q^\dagger e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x} + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \right] \\
&= \sum_{k\lambda k'\lambda'} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{ze^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \sqrt{\frac{n_0}{M}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_q}{2V}} \frac{\hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k'\lambda}}{cV} \\
&\quad \times \left[\hat{c}_q e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x} + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} + \hat{c}_q^\dagger e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x} - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \right] \theta(\omega_D - \omega_q) \tag{510}
\end{aligned}$$

となるが、ここで、 $\mathbf{R} \equiv (\mathbf{x} + \mathbf{x}')/2$, $\mathbf{r} \equiv \mathbf{x} - \mathbf{x}'$ とおくと上式の積分部分は

$$\begin{aligned}
(\text{積分部分}) &= \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{R} \frac{1}{r} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}/2)} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r}/2)} \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k'\lambda} \hat{c}_q \\
&\quad + \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{R} \frac{1}{r} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}/2)} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r}/2)} \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k'\lambda} \hat{c}_q^\dagger \\
&= V \int d\mathbf{r} \frac{1}{r} \exp \left[i \left(\frac{\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}}{2} \right) \cdot \mathbf{r} \right] \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}) \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k'\lambda} \hat{c}_q \\
&\quad + V \int d\mathbf{r} \frac{1}{r} \exp \left[i \left(\frac{\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q}}{2} \right) \cdot \mathbf{r} \right] \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k'\lambda} \hat{c}_q^\dagger \\
&= V \int d\mathbf{r} \frac{1}{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \hat{a}_{k'+q\lambda}^\dagger \hat{a}_{k'\lambda} \hat{c}_q + V \int d\mathbf{r} \frac{1}{r} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k+q\lambda} \hat{c}_q^\dagger \tag{511}
\end{aligned}$$

さらに、

$$\begin{aligned}
\int d\mathbf{r} \frac{1}{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} &= 2\pi \int_0^\infty dr r \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{-iqr \cos \theta} \\
&= 2\pi \int_0^\infty dr r \left[\frac{1}{iqr} e^{-iqr \cos \theta} \right]_0^\pi \\
&= \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr \sin qr \\
&= \frac{4\pi}{q} \text{Im} \int_0^\infty dr e^{iqr - \mu r} \\
&= \frac{4\pi}{q^2} \tag{512}
\end{aligned}$$

だから

$$(\text{積分部分}) = \frac{4\pi}{q^2} \left[\hat{a}_{k'+q\lambda}^\dagger \hat{a}_{k'\lambda} \hat{c}_q + \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k+q\lambda} \hat{c}_q^\dagger \right] \tag{513}$$

となるから、Hamiltonian は

$$\hat{H}_{el-ph} = \sum_{k\lambda q} \frac{ze^2}{c} \sqrt{\frac{n_0}{M}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_q}{2V}} \frac{4\pi}{q^2} \theta(\omega_D - \omega_q) \left[\hat{a}_{k+q\lambda}^\dagger \hat{a}_{k\lambda} \hat{c}_q + \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k+q\lambda} \hat{c}_q^\dagger \right] \tag{514}$$

となる。ここで、有効相互作用について考える。Coulomb ポテンシャルの Fourier 変換は

$$U_0^c(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \quad (515)$$

で与えられる。ゆえに、electron-phonon 相互作用は U_0^c に比例する。また、以前に議論したように、電子ガスでは U_0^c の代わりに、有効相互作用 $U^c(q) = U_0^c(q)/\kappa(q)$ を用いた。リング近似による有効相互作用は

$$U_r^c(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + q_{TF}^2} \quad (|q| \ll k_F) \quad (516)$$

である。ここで、

$$q_{TF}^2 = \frac{4\alpha r_s}{\pi} k_F^2 = \frac{4}{\pi} \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{1}{3}} r_s k_F^2 = \frac{4k_F}{\pi a_0}, \quad \frac{4\pi}{q_{TF}^2} = \frac{\pi^2}{k_F} a_0 \quad (517)$$

であるから、 q_{TF}^{-2} は格子間隔と同じ order である。よって、cut-off ω_D/c と同じ order であるから有効相互作用を

$$U_r^c(\mathbf{q}) \simeq \frac{4\pi e^2}{q_{TF}^2} \quad (518)$$

と近似する。すなわち、 U_0^c を U_r^c で置き換えた後、上で行った近似をする。これにより electron-phonon 相互作用のハミルトニアンは以下のように書ける。

$$\hat{H}_{el-ph} = \gamma \int d\mathbf{x} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \quad (519)$$

$$\gamma \equiv \frac{ze^2}{c} \frac{4\pi}{q_{TF}^2} \left(\frac{n_0}{M} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (520)$$

$$\delta \hat{n}(\mathbf{x}) = -n_0 \nabla \cdot \mathbf{d}(\mathbf{x}) \equiv -\frac{1}{c} \left(\frac{n_0}{M} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \quad (521)$$

これは、以下のように計算できる。

$$\begin{aligned} \gamma \int d\mathbf{x} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) &= \frac{ze^2}{c} \frac{4\pi}{q_{TF}^2} \left(\frac{n_0}{M} \right)^{\frac{1}{2}} c \left(\frac{M}{n_0} \right)^{\frac{1}{2}} \int d\mathbf{x} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \\ &= \frac{4\pi ze^2 n_0}{cq_{TF}^2} \int d\mathbf{x} \sum_{k\alpha k'q} \frac{1}{V} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \eta_\alpha^\dagger \eta_\alpha \hat{a}_{k\alpha}^\dagger \hat{a}_{k'\alpha} \\ &\quad \times \frac{1}{\sqrt{Mn_0}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_q}{2V}} (\hat{c}_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} + \hat{c}_q^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}) \theta(\omega_D - \omega_q) \\ &= \frac{4\pi ze^2}{cq_{TF}^2} \sqrt{\frac{n_0}{M}} \sum_{k\alpha k'q} \int d\mathbf{x} \frac{1}{V} \sqrt{\frac{\hbar\omega_q}{2V}} \hat{a}_{k\alpha}^\dagger \hat{a}_{k'\alpha} \theta(\omega_D - \omega_q) \\ &\quad \times (\hat{c}_q e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}} + \hat{c}_q^\dagger e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}}) \\ &= \frac{4\pi ze^2}{cq_{TF}^2} \sqrt{\frac{n_0}{M}} \sum_{k\alpha q} \sqrt{\frac{\hbar\omega_q}{2V}} (\hat{a}_{k+q\alpha}^\dagger \hat{a}_{k\alpha} \hat{c}_q + \hat{a}_{k\alpha}^\dagger \hat{a}_{k+q\alpha} \hat{c}_q^\dagger) \quad (522) \end{aligned}$$

これは、確かに (514) を上で述べた近似をしたものになっている。

ここで、背景の相互作用 Hamiltonian は (504) を用いて、

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{b-b} &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{\hat{\rho}_b(\mathbf{x})\hat{\rho}_b(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\
&= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{\rho_0\rho_0}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} + \frac{z^2 e^2}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{\delta\hat{n}(\mathbf{x})\delta\hat{n}(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\
&\equiv \hat{H}_b^0 + \frac{z^2 e^2}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{\delta\hat{n}(\mathbf{x})\delta\hat{n}(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}
\end{aligned} \tag{523}$$

となる。この最右辺第 1 項は \hat{H}_{el} に含まれている。第 2 項は電子ガスでは、長距離では遮蔽され、短距離ではこの効果は B に含まれる。よって、この項は無視する。

以上より得た Hamiltonian は

$$\hat{H} = \hat{H}_{el-gas} + \hat{H}_{ph} + \gamma \int d\mathbf{x} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \tag{524}$$

である。

1.26 Phonon の Green 関数のファインマンルール (絶対零度)

1. トポロジ的に異なる図形をすべて描く。ただし、基本 vertex 部分は以下の図のようなものである。
2. 摂動の次数に応じて $-i\gamma/\hbar$ をつける。
3. 電子線には $i(2\pi)^{-4}G_{\alpha\beta}^0(q)$ を対応させる。ここで、

$$G_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{q}, q_0) = \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{\theta(|\mathbf{q}| - k_F)}{q_0 - \epsilon_q/\hbar + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{q}|)}{q_0 - \epsilon_q/\hbar - i\eta} \right] \quad (525)$$

である。さらに、スピンについて和をとる。

4. Phonon 線には $i(2\pi)^4 D^{(0)}(q)$ を対応させる。ここで、 $D^{(0)}(q)$ は以下で定義される。

$$\begin{aligned} iD^{(0)}(x - x') &\equiv \langle 0 | \hat{T}[\hat{\phi}_I(x)\hat{\phi}_I(x')] | 0 \rangle \\ &= \begin{cases} \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2V} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')-i\omega_k(t-t')} \theta(\omega_D - \omega_k) & (t > t') \\ \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2V} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')+i\omega_k(t-t')} \theta(\omega_D - \omega_k) & (t' > t) \end{cases} \end{aligned} \quad (526)$$

$$iD^{(0)}(x - x') \equiv \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} e^{iq(x-x')} iD^{(0)}(q) \quad (527)$$

$$\begin{aligned} D^{(0)}(q) &= \frac{1}{2} \hbar\omega_q \left(\frac{1}{q_0 - \omega_q + i\eta} - \frac{1}{q_0 + \omega_q - i\eta} \right) \theta(\omega_D - \omega_q) \\ &= \frac{\hbar\omega_q^2}{q_0^2 - (\omega_q - i\eta)^2} \theta(\omega_D - \omega_q) \end{aligned} \quad (528)$$

5. 振動数と波数ベクトルを各頂点で保存させる。
6. すべての内線について積分。
7. フェルミオンループの数に応じて $(-1)^F$ をつける。
8. 図 15 のような図形はすべて無視する。

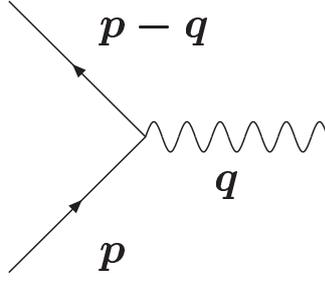


図 14 基本 vertex 部分のダイアグラム

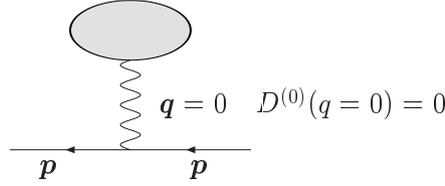


図 15 Phonon の場合無視するダイアグラム

ここで、(528) を導出する。

$$\begin{aligned}
D^{(0)}(q) &= \int d^4(x-x') e^{-iq(x-x')} D^{(0)}(x-x') \\
&= \int d^4(x-x') \left[\theta(t-t') \sum_k e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')-i(\omega_k-q_0)(t-t')} \theta(\omega_D - \omega_k) \frac{\hbar\omega_k}{2Vi} \right. \\
&\quad \left. + \theta(t'-t) \sum_k e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')+i(\omega_k+q_0)(t-t')} \theta(\omega_D - \omega_k) \frac{\hbar\omega_k}{2Vi} \right] \\
&= \int_0^\infty d(t-t') \sum_k V \frac{\hbar\omega_k}{2Vi} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \theta(\omega_D - \omega_k) e^{-i(\omega_k-q_0)(t-t')-\eta(t-t')} \\
&\quad + \int_{-\infty}^0 d(t-t') \sum_k V \frac{\hbar\omega_k}{2Vi} \delta(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \theta(\omega_D - \omega_k) e^{i(\omega_k+q_0)(t-t')+\eta(t-t')} \\
&= \frac{1}{i} \left[\frac{1}{2} \hbar\omega_q \theta(\omega_D - \omega_q) \frac{-1}{-i(\omega_q - q_0) - \eta} + \frac{1}{2} \hbar\omega_q \theta(\omega_D - \omega_q) \frac{1}{i(\omega_q + q_0) + \eta} \right] \\
&= \frac{1}{2} \hbar\omega_q \left(\frac{1}{q_0 - \omega_q + i\eta} - \frac{1}{q_0 + \omega_q - i\eta} \right) \tag{529}
\end{aligned}$$

ここで、phonon 交換のダイアグラムと、スピンに独立なポテンシャルのダイアグラムは 1 対 1 に対応する。すなわち、

$$U_0(\mathbf{q}, q_0) \equiv \gamma^2 \hbar^{-1} D^{(0)}(q) = \gamma^2 \frac{\omega_q^2}{q_0^2 - (\omega_q - i\eta)^2} \theta(\omega_D - \omega_q) \tag{530}$$

である。ここで、最低次でさえポテンシャルは振動数に依存する。静的極限で

$$U_0(\mathbf{q}, 0) = -\gamma^2 \theta(\omega_D - \omega_q) \equiv \int d\mathbf{x} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} V_{eq}(\mathbf{x}) \tag{531}$$

となる。 ω_D/c と k_F 比較により、ほとんどの場合 cut-off は無視できる。全ての \mathbf{q} に対し、

$U_0(\mathbf{q}, 0) = -\gamma^2$ と仮定するとこれに対応するポテンシャルは

$$V_{eq}(\mathbf{x}) = -\gamma^2 \delta(\mathbf{x}) \quad (532)$$

となる。

Proper な phonon の self-energy Π^* を以下で導入する。

$$G = G^{(0)} + G^{(0)} \Sigma^* G \quad (533)$$

$$D = D^{(0)} + \gamma^2 \hbar^{-1} D^{(0)} \Pi^* D \quad (534)$$

Π^* は (530) の有効ポテンシャルである。ここで、vertex 部分を 2つの電子線と 1つの phonon 線につながっている部分と定義する。vertex 部分では運動量が保存している。proper な vertex 部分は vertex の外線のところに、self-energy がないものとして定義される。任意のダイアグラムにおいて、電子の self-energy と phonon の self-energy (polarization part) と vertex 部分を除いて、残ったものは既約のダイアグラム、または、skelton ダイアグラムと呼ばれる。全てのダイアグラムは、1つの skelton ダイアグラムからできていて、電子の Green 関数 G 、phonon の Green 関数 D 、proper な vertex part を skelton ダイアグラムに挿入すると得られる。例として、 Σ^* と Π^* は以下の図に示すように、self-energy 補正、または、vertex 補正を加えれば得られる。

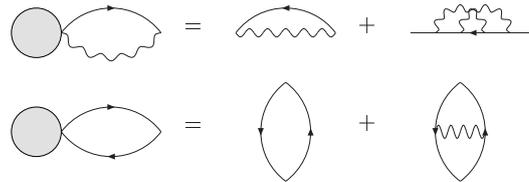


図 16 self-energy 補正、または vertex 補正をしたダイアグラム。上は電子の self-energy、下は分極部分を表す。

1.27 Migdal の定理

Migdal の定理とは、vertex 部分が³

$$\Gamma = \gamma \left\{ 1 + O \left[\left(\frac{m}{M} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right\} \quad (535)$$

となるという定理である。ここで、 m/M は電子の質量と、イオンの質量の比である。以下では、この定理を 1 つ目の vertex 補正まで示す。

一つ目の vertex 補正 $\Gamma^{(2)}$ は図 とファインマンルールより

$$\begin{aligned} \Gamma^{(2)}(p+q, p) &= \int d^4l G^{(0)}(p-l) G^{(0)}(p+q-l) D^{(0)}(l) i^2 (2\pi)^{-8} i (2\pi)^4 (i\gamma/\hbar)^2 \\ &= \int \frac{d^4l}{(2\pi)^4} i \frac{\gamma^2}{\hbar^2} \left[\frac{\theta(|\mathbf{p}-\mathbf{l}|-k_F)}{p_0-l_0-\epsilon_{p-l}/\hbar+i\eta} + \frac{\theta(k_F-|\mathbf{p}-\mathbf{l}|)}{p_0-l_0-\epsilon_{p-l}/\hbar-i\eta} \right] \\ &\quad \times \left[\frac{\theta(|\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l}|-k_F)}{p_0+q_0-l_0-\epsilon_{p-l}/\hbar+i\eta} + \frac{\theta(k_F-|\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l}|)}{p_0+q_0-l_0-\epsilon_{p-l}/\hbar-i\eta} \right] \frac{\hbar\omega_l^2\theta(\omega_D-\omega_l)}{l_0^2-(\omega_l-i\eta)^2} \\ &= i \frac{\gamma^2}{\hbar^2} \int \frac{d^4l}{(2\pi)^4} \frac{\hbar\omega_l^2\theta(\omega_D-\omega_l)}{l_0^2-(\omega_l-i\eta)^2} \frac{1}{p_0-l_0-\epsilon_{p-l}/\hbar+i\eta S(\mathbf{p}-\mathbf{l})} \\ &\quad \times \frac{1}{p_0+q_0-l_0-\epsilon_{p-l}/\hbar+i\eta S(\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l})} \end{aligned} \quad (536)$$

ただし、 S を

$$S(\mathbf{q}) \equiv \begin{cases} +1 & |\mathbf{q}| > 1 \\ -1 & |\mathbf{q}| < 1 \end{cases} \quad (537)$$

と定義した。ここで、 $\mathbf{l} \rightarrow \mathbf{l}k_F$, $l_0 \rightarrow l_0\epsilon_F^0/\hbar$ と置き換える。これは波数を k_F 、振動数を ϵ_F^0/\hbar を

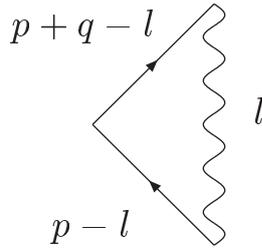


図 17 proper な vertex 部分の 2 次のダイアグラム

単位にして計ることになる。

$$\begin{aligned} \Gamma^{(2)}(p+q, p) &= i \frac{\gamma^2}{\hbar^2} \int \frac{d^4l}{(2\pi)^4} k_F^3 \frac{\epsilon_F^0}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{\epsilon_F^0} \right)^2 \left(\frac{\epsilon_F^0}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar\omega_l^2\theta(\omega_D-\omega_l)}{l_0^2-(\omega_l-i\eta)^2} \left(\frac{\hbar}{\epsilon_F^0} \right)^2 \\ &\quad \times \frac{1}{[p_0-l_0-\epsilon_{p-l}+i\eta S(\mathbf{p}-\mathbf{l})][p_0+q_0-l_0-\epsilon_{p+q-l}+i\eta S(\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l})]} \\ &= \frac{i\gamma^2 k_F^3}{\epsilon_F^0} \int \frac{d^4l}{(2\pi)^4} \frac{\omega_l^2}{l_0^2-(\omega_l-i\eta)^2} \frac{1}{[p_0-l_0-\epsilon_{p-l}+i\eta S(\mathbf{p}-\mathbf{l})]} \\ &\quad \times \frac{1}{[p_0+q_0-l_0-\epsilon_{p+q-l}+i\eta S(\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{l})]} \end{aligned} \quad (538)$$

同様にして、phonon の振動数はこの単位系で

$$\begin{aligned}\omega_l = c|l| &\rightarrow \omega_l \frac{\epsilon_F^2}{\hbar} = \sqrt{\frac{B}{Mn_0}} k_F |l| \\ &\rightarrow \omega_l = \sqrt{\frac{2m}{M}} \sqrt{\frac{B}{n_0 \epsilon_k^0}} |l|\end{aligned}\quad (539)$$

となり、波数の最大値 $l_{\max} = \omega_D/c$ は

$$\begin{aligned}l_{\max} = (18\pi^2 n_0)^{\frac{1}{3}} &\rightarrow k_F l_{\max} = (18\pi^2 n_0)^{\frac{1}{3}} \\ &\rightarrow l_{\max} = \left(\frac{18\pi^2 n_0}{3\pi^2 z n_0}\right)^{\frac{1}{3}} \\ &= \left(\frac{6}{z}\right)^{\frac{1}{3}}\end{aligned}\quad (540)$$

となる。次に、(538) を直接積分する。ただし、複素 l_0 空間で積分する。積分路は次のように被積分関数を変形したとき

$$\begin{aligned}& \text{(被積分関数)} \\ &= \frac{\omega_l}{2} \left[\frac{1}{l_0 - (\omega_l - i\eta)} - \frac{1}{l_0 + (\omega_l - i\eta)} \right] \frac{1}{q_0 + \epsilon_{p-l} - \epsilon_{p+q-l} + i\eta[S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) - S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]} \\ &\times \left[\frac{-1}{l_0 - (p_0 - \epsilon_{p-l} + i\eta S(\mathbf{p} - \mathbf{l}))} + \frac{1}{l_0 - (p_0 + q_0 - l_0 + i\eta S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}))} \right]\end{aligned}\quad (541)$$

$\frac{1}{l_0 - (\omega_l - i\eta)}$ を含む項については上半平面、 $\frac{1}{l_0 + (\omega_l - i\eta)}$ を含む項については下半平面とする。留数定理を用いると

$$\begin{aligned}& \Gamma^{(2)}(p+q, p) \\ &= \frac{i\gamma^2 k_F^3}{\epsilon_F^0} \int \frac{d\mathbf{l}}{(2\pi)^3} \int \frac{dl_0}{2\pi} \frac{\omega_l}{2} \left[\frac{1}{l_0 - (\omega_l - i\eta)} - \frac{1}{l_0 + (\omega_l - i\eta)} \right] \\ &\times \frac{\theta(\omega_D - \omega_l)}{q_0 + \epsilon_{p-l} - \epsilon_{p+q-l} + i\eta[S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) - S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]} \\ &\times \left[\frac{-1}{l_0 - (p_0 - \epsilon_{p-l} + i\eta S(\mathbf{p} - \mathbf{l}))} + \frac{1}{l_0 - (p_0 + q_0 - l_0 + i\eta S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}))} \right] \\ &= \frac{-\gamma^2 k_F^3}{2\epsilon_F^0} \int \frac{d\mathbf{l}}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\omega_l \theta(\omega_D - \omega_l)}{q_0 + \epsilon_{p-l} - \epsilon_{p+q-l} + i\eta[S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) - S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]} \right. \\ &\times \left[\frac{-[1 + S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]/2}{p_0 - \epsilon_{p-l} + i\eta S(\mathbf{p} - \mathbf{l}) - (\omega_l - i\eta)} + \frac{[1 + S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l})]/2}{p_0 + q_0 - \epsilon_{p+q-l} + i\eta S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) - (\omega_l - i\eta)} \right. \\ &\left. \left. + \frac{-[1 - S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]/2}{p_0 - \epsilon_{p-l} + i\eta S(\mathbf{p} - \mathbf{l}) + (\omega_l - i\eta)} + \frac{[1 - S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l})]/2}{p_0 + q_0 - \epsilon_{p+q-l} + i\eta S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) + (\omega_l - i\eta)} \right] \right\}\end{aligned}\quad (542)$$

となる。ただし、 S の符号によって、極の位置が上半平面か下半平面かわるので、それを考慮す

るために、因子 $\pm[1 \pm S]/2$ をつけた。さらに計算すると

$$\begin{aligned}
& \Gamma^{(2)}(p+q, p) \\
&= \frac{\gamma^2 k_F^3}{2\epsilon_F^0} \int \frac{dl}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\omega_l \theta(\omega_D - \omega_l)}{q_0 + \epsilon_{p-l} - \epsilon_{p+q-l} + i\eta[S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) - S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]} \right. \\
&\quad \times \left[\frac{[1 + S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]/2}{p_0 - \epsilon_{p-l} - \omega_l + i\eta(S(\mathbf{p} - \mathbf{l}) + 1)} - \frac{[1 + S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l})]/2}{p_0 + q_0 - \epsilon_{p+q-l} - \omega_l + i\eta(S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) + 1)} \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{[1 - S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]/2}{p_0 - \epsilon_{p-l} + \omega_l + i\eta(S(\mathbf{p} - \mathbf{l}) - 1)} - \frac{[1 - S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l})]/2}{p_0 + q_0 - \epsilon_{p+q-l} + \omega_l + i\eta(S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) - 1)} \right] \right\} \\
&= \frac{\gamma^2 k_F^3}{2\epsilon_F^0} \int \frac{dl}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\omega_l \theta(\omega_D - \omega_l)}{q_0 + \epsilon_{p-l} - \epsilon_{p+q-l} + i\eta[S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) - S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]} \right. \\
&\quad \times \left[\frac{1}{p_0 - \epsilon_{p-l} - \omega_l S(\mathbf{p} - \mathbf{l}) + 2i\eta S(\mathbf{p} - \mathbf{l})} \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{p_0 + q_0 - \epsilon_{p+q-l} - \omega_l S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) + 2i\eta S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l})} \right] \right\} \\
&= \frac{\gamma^2 k_F^3}{2\epsilon_F^0} \int \frac{dl}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\omega_l \theta(\omega_D - \omega_l)}{q_0 + \epsilon_{p-l} - \epsilon_{p+q-l} + i\eta[S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) - S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]} \right. \\
&\quad \times \left[\frac{1}{p_0 - \epsilon_{p-l} - (\omega_l - i\eta)S(\mathbf{p} - \mathbf{l})} - \frac{1}{p_0 + q_0 - \epsilon_{p+q-l} - (\omega_l - i\eta)S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l})} \right] \right\} \quad (543)
\end{aligned}$$

となる。ここで、 $\{\dots\}$ 内を $f(\omega_l)$ と書くと上式は

$$\Gamma^{(2)}(p+q, p) = \frac{\gamma^2 k_F^3}{2\epsilon_F^0} \int \frac{dl}{(2\pi)^3} \omega_l \theta(\omega_D - \omega_l) \{f(0) + [f(\omega_l) - f(0)]\} \quad (544)$$

と書ける。ただし、 $f(0)$ を含む積分の収束を仮定したので、 $(\frac{m}{M})^{\frac{1}{2}}$ が小さい極限は $f(\omega_l) - f(0)$ を無視することにより得られる。これは以下の計算によりわかる。 ω_l が十分小さいとして Taylor 展開すると

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{p_0 - \epsilon_{p-l} - (\omega_l - i\eta)S(\mathbf{p} - \mathbf{l})} - \frac{1}{p_0 + q_0 - \epsilon_{p+q-l} - (\omega_l - i\eta)S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l})} \\
&= \frac{1}{p_0 - \epsilon_{p-l} + i\eta S(\mathbf{p} - \mathbf{l})} - \frac{1}{p_0 + q_0 - \epsilon_{p+q-l} + i\eta S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l})} + O(\omega_l) \quad (545)
\end{aligned}$$

となるから、

$$\begin{aligned}
\Gamma^{(2)}(p+q, p) &\simeq \frac{\gamma^2 k_F^3}{2\epsilon_F^0} \int \frac{dl}{(2\pi)^3} \frac{\omega_l \theta(\omega_D - \omega_l)}{q_0 + \epsilon_{p-l} - \epsilon_{p+q-l} + i\eta[S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l}) - S(\mathbf{p} - \mathbf{l})]} \\
&\quad \times \left[\frac{1}{p_0 - \epsilon_{p-l} + i\eta S(\mathbf{p} - \mathbf{l})} - \frac{1}{p_0 + q_0 - \epsilon_{p+q-l} + i\eta S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l})} \right] \\
&= \frac{\gamma^2 k_F^3}{2\epsilon_F^0} \sqrt{\frac{2m}{M}} \sqrt{\frac{B}{n_0 \epsilon_F^0}} \int \frac{dl}{(2\pi)^3} \\
&\quad \times \frac{1}{p_0 - \epsilon_{p-l} + i\eta S(\mathbf{p} - \mathbf{l})} \frac{1}{p_0 + q_0 - \epsilon_{p+q-l} + i\eta S(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{l})} \quad (546)
\end{aligned}$$

を得る。

参考文献

- [1] A. L. Fetter and J. D. WaLecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover, 1971).
- [2] 中嶋貞雄編, 岩波講座 現代物理学の基礎 8 物性 II (岩波書店, 1972 年).
- [3] J. M. Luttinger and J. C. Ward, *Phys. Rev.* **118** 1417 (1960).