

汎関数くりこみ群に基づいた密度汎関数理論による 一次元核物質の基底・励起状態の微視的記述

横田 猛¹, 吉田 賢市¹, 国広 悌二²

¹京都大学 理学研究科 原子核理論研究室

²京都大学 基礎物理学研究所

arXiv:1803.07439



熱場の量子論とその応用, 2018年8月28日, 理化学研究所和光キャンパス

Contents

- DFT-RGの導入

- 密度汎関数理論(DFT)
- DFT-RG

- 1次元核物質への適用

- 基底状態 – 核物質状態方程式
- 励起状態 – 密度-密度スペクトル関数

Contents

- DFT-RGの導入

- 密度汎関数理論(DFT)

- DFT-RG

- 1次元核物質への適用

- 基底状態 – 核物質状態方程式

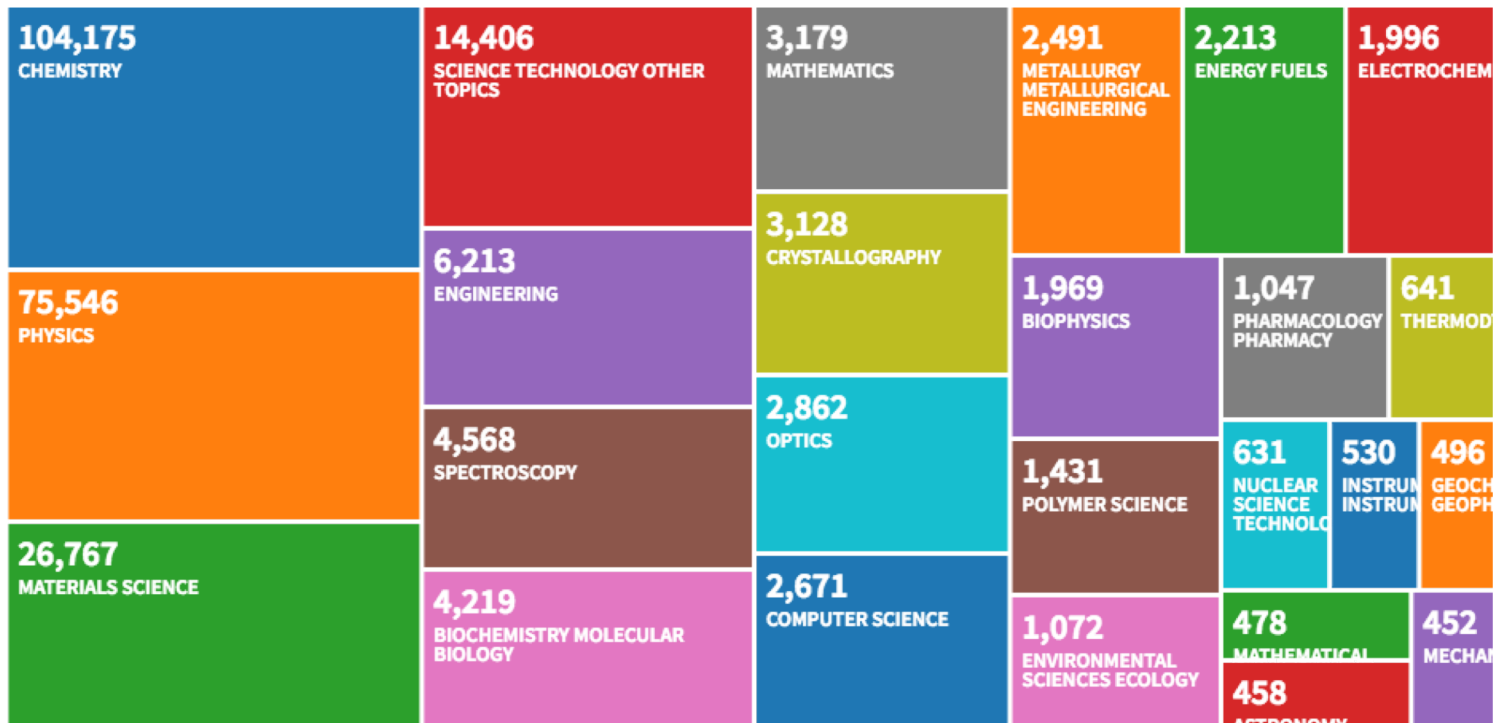
- 励起状態 – 密度-密度スペクトル関数

密度汎関数理論 (DFT)

- 量子多体系の主流な解析法の一つ
原子核系、物性、量子化学…



W. Kohn
Nobel Prize in Chemistry(1998)



“density functional theory”に関する論文数と分野
(2018 April 26, Web of Scienceより)

DFTの基礎 – Hohenberg-Kohnの定理

Hohenberg, Kohn, PR136 (1964)

ハミルトニアン $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}$ (kinetic + interaction + external)

First thm.

外場 $\hat{V}$, 基底状態の波動関数 Ψ_{gs} , 密度 ρ_{gs} の間に一対一対応

$$\rho_{gs} \Leftrightarrow \Psi_{gs} \Leftrightarrow \hat{V} \quad (\text{簡単のため}\Psi_{gs}\text{に縮退がない場合})$$

Second thm.

エネルギー密度汎関数(EDF) $E[\rho]$ が存在。EDFの最小点は基底状態エネルギー E_{gs} と密度 ρ_{gs} を与える。

$$E_{gs} = \min_{\rho} E[\rho] = E[\rho_{gs}] \quad \text{EDF}$$

➡ **DFT:** EDFから ρ_{gs} が得られる。原理的には ρ_{gs} から系のあらゆる性質が分かる。

● 励起状態への拡張: 時間依存DFT (TDDFT)

"作用"密度汎関数 $A[\rho(t, x)]$ に対する停留点条件

$$\delta A[\rho(t, x)] / \delta \rho(t, x) = 0 \quad \text{Runge, Gross, PRL52 (1984)}$$

DFTの威力

N 粒子系を考える

Schrödinger equation

vs

DFT

N 粒子波動関数: $\Psi(x_1, \dots, x_N)$

局所密度: $\rho(\underline{x})$
座標一つのみ!

N 体シュレーディンガー方程式

$$\hat{H}\Psi(x_1, \dots, x_N) = E\Psi(x_1, \dots, x_N)$$

停留点条件

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(x)} = 0$$

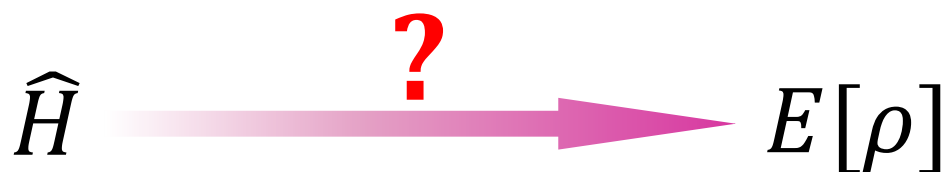
多くの変数 $x_1, \dots, x_N$ に依存.
大きい N では解くのはほぼ不可能.

**N が大きくても方程式
の変数は x のみ!**

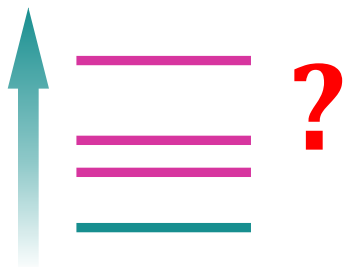
▶ 多粒子系の解析にDFTは威力を発揮.

DFTの基礎的問題

- EDFを導くことはできるのか？
EDFを微視的なハミルトニアンから系統的に導けるか？



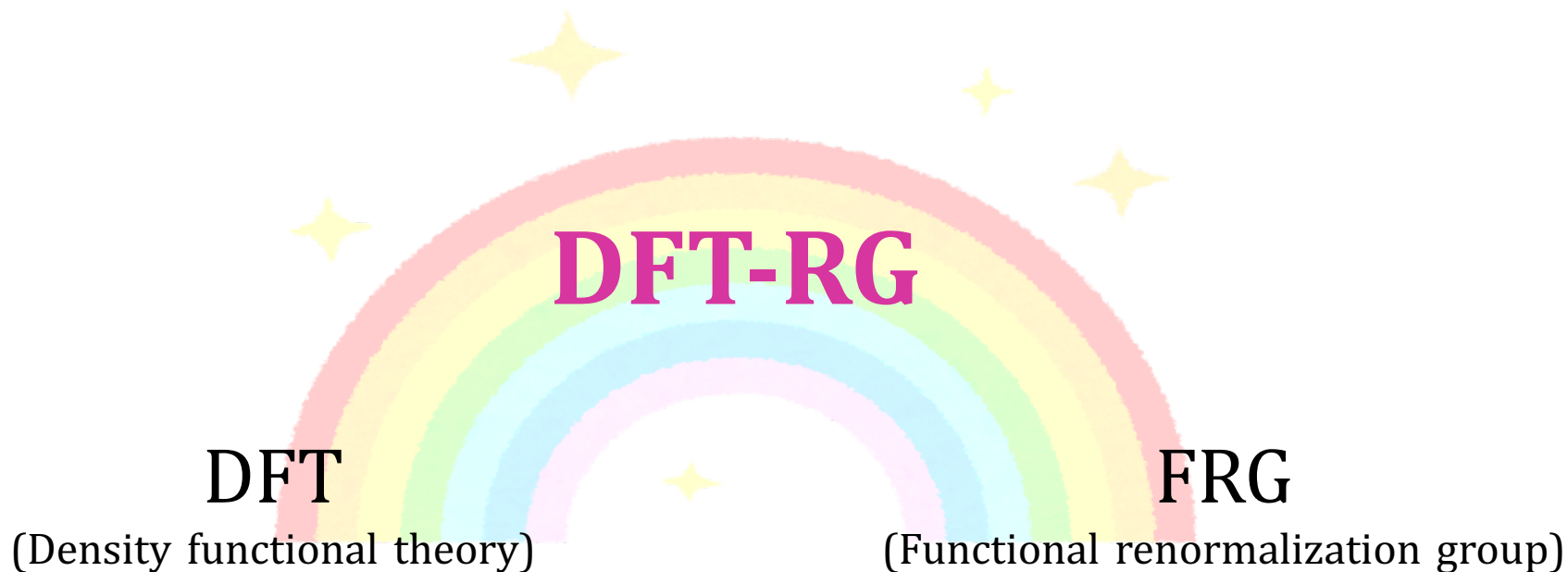
- 励起状態の情報を取り出すには？



線形応答理論に基づいたTDDFTはうまくいっている。
しかし、励起状態を取り出すための線形応答理論を超えた枠組みは
確立していない。

➡ これらの問題を解決する新たな理論的枠組みは？

DFT-RG



DFTの問題に取り組むための新たな枠組み

2PPI有効作用としてのEDF

Fukuda, Kotani, Suzuki, Yokojima, PTP92 (1994)
Valiev, Fernando, arXiv:9702247 (1997)

作用 $S[\psi^*, \psi]$ で記述されるスピンレスフェルミオン ψ を考える。
便宜上有限温度虚時間形式を用いる。

鍵となる量: 密度場 $\rho(\tau, x) = \psi^*(\tau, x)\psi(\tau, x)$

► 2-particle point irreducible (2PPI) formalism

Verschelde, Coppens, PLB287 (1992)

密度場 $\rho(\tau, x) = \psi^*(\tau, x)\psi(\tau, x)$ に対する相関関数の生成汎関数

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \exp \left(-S[\psi^*, \psi] + \int_{\chi} J(\chi) \rho(\chi) \right), \quad \chi := (\tau, x), \quad \int_{\chi} := \int_0^{\beta} d\tau \int dx$$

2PPI有効作用: $\Gamma[\rho] = \sup_J \left(\int_{\chi} J(\chi) \rho(\chi) - W[J] \right), \quad W[J] = \ln Z[J]$

➡ **EDF:** $E[\rho] = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \Gamma[\rho] / \beta$

- (基底状態) 粒子数有限の下での停留点条件
 $\delta\Gamma[\rho] / \delta\rho(\tau, x) - \mu = 0$ (μ :化学ポテンシャル)
から基底状態のエネルギーと密度が得られる。
- (励起状態) 密度密度スペクトル関数のような量の計算が可能。

DFT-RGのアイデア

J. Polonyi, K. Sailer, PRB (2002); A. Schwenk, J. Polonyi (2004)

自由粒子系から相互作用系への変化を考える.

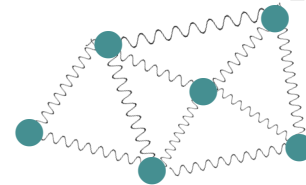
λ -依存作用:

$$S_\lambda = S_{\text{free}} + \lambda S_{\text{int}}$$

λ -依存2PPI有効作用:

$$\Gamma_\lambda[\rho]$$

$$\Gamma_{\lambda=0}[\rho] = \Gamma_{\text{free}}[\rho] \xrightarrow{\lambda \rightarrow 1} \Gamma_{\lambda=1}[\rho] = \Gamma[\rho]$$



次の作用を考える (非相対論的スピンレス系. 粒子質量は1)

$$S_\lambda[\psi^*, \psi] = \int_\chi \psi^*(\chi) \left(\partial_\tau - \frac{1}{2} \partial_x^2 \right) \psi(\chi) + \frac{\lambda}{2} \int_{\chi, \chi'} \psi^*(\chi) \psi^*(\chi') U_{2b}(\chi, \chi') \psi(\chi') \psi(\chi)$$

$\Gamma_\lambda[\rho]$ に対するフロー方程式:

Kemler, Pospiech, Braun, JPG
(2017)

$$\partial_\lambda \Gamma_\lambda[\rho] = \frac{1}{2} \int_{\chi_1, \chi_2} U_{2b}(\chi_1, \chi_2) \left(\rho(\chi_1) \rho(\chi_2) + \left(\frac{\delta^2 \Gamma_\lambda[\rho]}{\delta \rho \delta \rho} \right)^{-1} (\chi_1, \chi_2) - \rho(\chi_2) \delta(\chi_2 - \chi_1) \right)$$

- 右辺の括弧内第一項はハートリー項。
- 第三項は正準交換関係から生じる。

2PPIフロー方程式

A. Schwenk, J. Polonyi (2004)

S. Kemler, M. Pospiech, J. Braun, JPG (2017)

$$S_{\text{int}}[\psi^*, \psi] = \frac{1}{2} \int_{\chi, \chi'} \psi^*(\chi) \psi^*(\chi') U_{2b}(\chi, \chi') \psi(\chi') \psi(\chi) \quad \chi = (\tau, x)$$

$$W_\lambda[J] = \ln Z_\lambda[J] = \ln \int \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi e^{-S_{\text{free}}[\psi^*, \psi] - \lambda S_{\text{int}}[\psi^*, \psi] + \int_\chi J(\chi) \psi^*(\chi) \psi(\chi)}$$

$$\Gamma_\lambda[\rho] = \sup_J \left[\int_\chi J(\chi) \rho(\chi) - W_\lambda[J] \right]$$

∂_λ

$$\left[\frac{\delta^2 \Gamma_\lambda[\rho]}{\delta \rho \delta \rho} \right]^{-1} = \langle \psi^* \psi(\chi') \psi^* \psi(\chi) \rangle - \langle \psi^* \psi(\chi') \rangle \langle \psi^* \psi(\chi) \rangle$$

$$\langle \psi^* \psi(\chi) \rangle = \frac{\delta W[J]}{\delta J(\chi)} \quad \langle \dots \rangle = \frac{1}{Z[J]} \int \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \dots e^{-S_{\text{free}}[\psi^*, \psi] - \lambda S_{\text{int}}[\psi^*, \psi] + \int_\chi (J(\chi) + \frac{1}{2} \lambda U_{2b}(0)) \psi^*(\chi) \psi(\chi)}$$

正準交換関係

$$\begin{aligned} & \langle \psi^*(t+0, x) \psi^*(t+0, x') \psi(t, x') \psi(t, x) \rangle \\ &= \langle \psi^*(t+0, x) \psi(t+0, x) \psi^*(t, x') \psi(t, x') \rangle - \delta(x - x') \langle \psi^*(t+0, x) \psi(t, x) \rangle \end{aligned}$$

$$\partial_\lambda \Gamma_\lambda[\rho] = \frac{1}{2} \int_{\chi_1, \chi_2} U_{2b}(\chi_1, \chi_2) \left(\rho(\chi_1) \rho(\chi_2) + \left(\frac{\delta^2 \Gamma_\lambda[\rho]}{\delta \rho \delta \rho} \right)^{-1} (\chi_1, \chi_2) - \rho(\chi_2) \delta(x_2 - x_1) \right)$$

DFT-RGは“DFTの問題”を解決できるか?

- EDFを導くことはできるのか?

EDFを微視的なハミルトニアンから系統的に導けるか?



- ▶ DFT-RGの出発点は微視的作用(ハミルトニアン).
FRGで発展した手法を用いてEDFを系統的に構築できる可能性

- Vertex expansion (Taylor expansion around ground state density)
- Differential expansion (Expansion by ∂_μ)

- 励起状態の情報を取り出すには?



- ▶ スペクトル関数のような実時間についての量を計算できる!
近年FRGでスペクトル関数の計算手法が発達

Spectral function in FRG

Kamikado, Strodthoff, Smekal, Wambach, EPJC (2014)

Tripolt, Strodthoff, Smekal, Wambach, PRD (2014); Tripolt, Smekal, Wambach, PRD (2014)

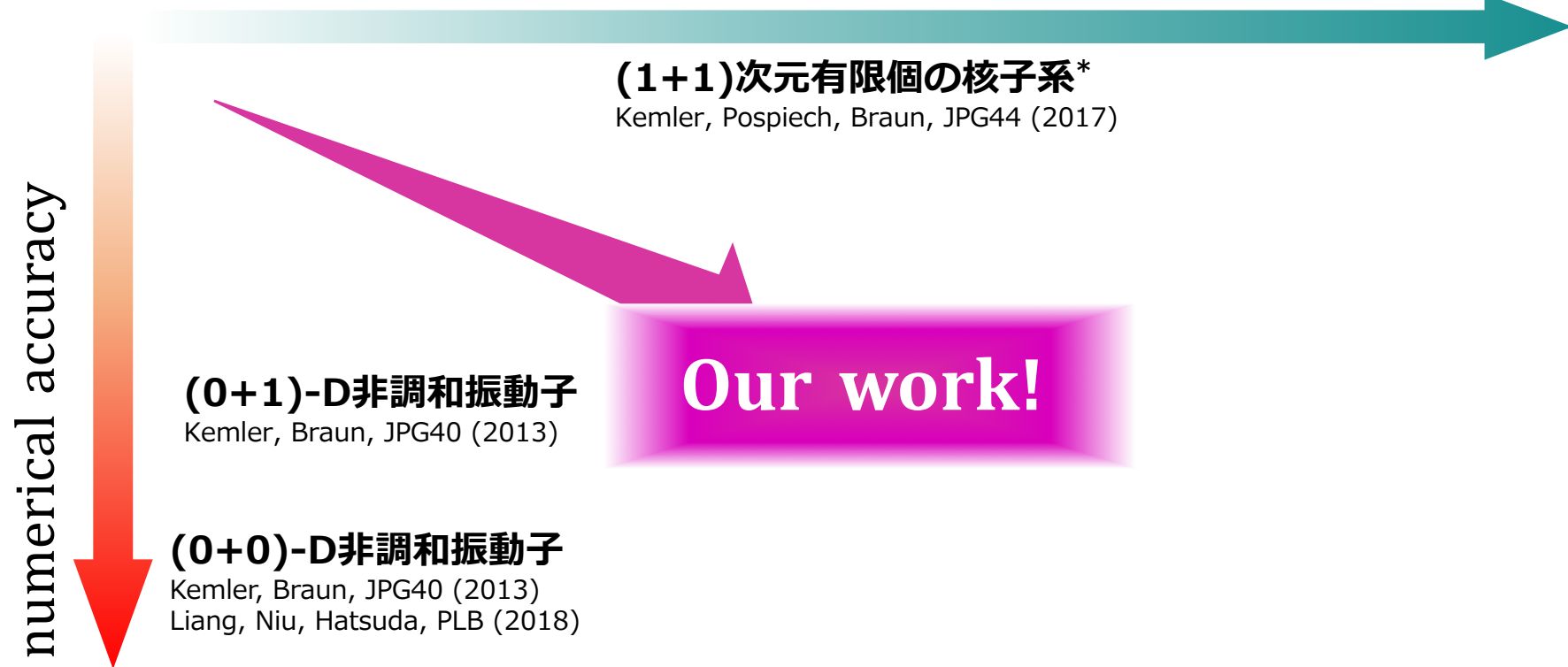
T. Y., Kunihiro, Morita, PTEP (2016); T. Y., Kunihiro, Morita, PRD96 (2017)

...

DFT-RGの現状 – DFT-RGは実用的か？

基底状態

physical reality



* (1+1)次元有限粒子数のスピンレス核子系。有限サイズの箱中。二次の頂点展開。

- ただし、2粒子系で厳密解と結果が大きく異なる。
- モンテ・カルロ(MC)法とも束縛エネルギーについて30%の違い。

DFT-RGの現状 – DFT-RGは実用的か？

基底状態

physical reality

励起状態

numerical accuracy

(1+1)次元有限個の核子系*

Kemler, Pospiech, Braun, JPG44 (2017)

(0+1)-D非調和振動子

Kemler, Braun, JPG40 (2013)

(0+0)-D非調和振動子

Kemler, Braun, JPG40 (2013)

Liang, Niu, Hatsuda, PLB (2018)

Our work!

* (1+1)次元有限粒子数のスピンレス核子系。有限サイズの箱中。二次の頂点展開。

- ただし、2粒子系で厳密解と結果が大きく異なる。
- モンテ・カルロ(MC)法とも束縛エネルギーについて30%の違い。

Contents

- DFT-RGの導入

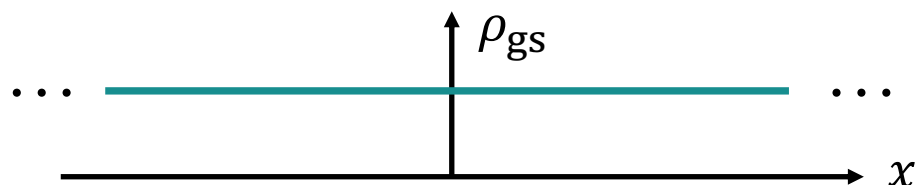
- 密度汎関数理論(DFT)
- DFT-RG

- 1次元核物質への適用

- 基底状態 – 核物質状態方程式
- 励起状態 – 密度-密度スペクトル関数

セットアップ

- ▶ (1+1)次元一様スピンレス核物質
(有限密度・無限粒子数)



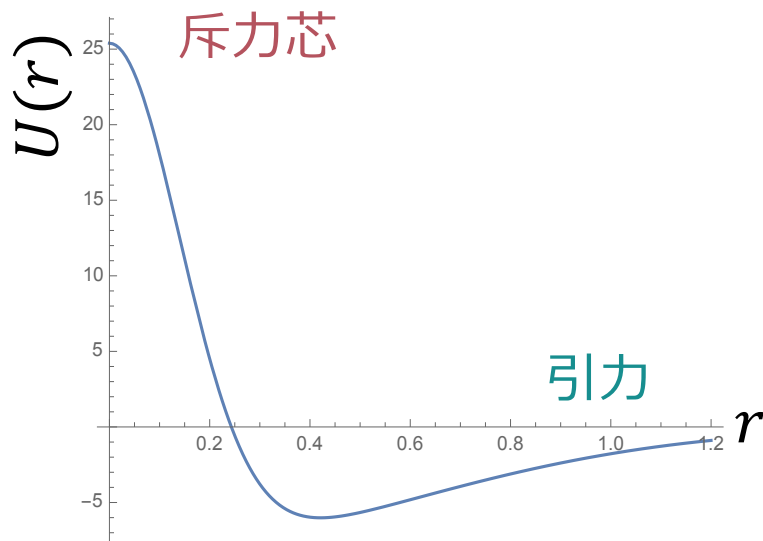
- DFTでは、局所密度近似(LDA)に対応するセットアップ。
EDFを構成するための重要な最初のステップ。
- ▶ 基底状態の解析: 状態方程式(基底エネルギーの密度依存性)、
飽和エネルギー
- ▶ 励起状態の解析: 密度・密度スペクトル関数

(1+1)次元スピレス核物質

Alexandrou, Myczkowski, Negele, PRC (1989)

$$S_\lambda[\psi^*, \psi] = \int_\chi \psi^*(\chi) \left(\partial_\tau - \frac{1}{2} \partial_x^2 \right) \psi(\chi) + \frac{\lambda}{2} \int_{\chi, \chi'} \psi^*(\chi) \psi^*(\chi') U_{2b}(\chi, \chi') \psi(\chi') \psi(\chi)$$

$$U_{2b}(\chi, \chi') = \delta(\tau - \tau') U(x - x')$$



$$U(r) = \frac{g}{\sigma_1 \sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{\sigma_1^2}} - \frac{g}{\sigma_2 \sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{\sigma_2^2}}$$

$g = 12, \sigma_1 = 0.2, \sigma_2 = 0.8$
粒子質量が1となるような単位系

- ベンチマークの比較対象: MC法による飽和エネルギー
 - 粒子数12までの結合エネルギーの結果から無限系に外挿して導かれた。
 - 飽和密度は計算されたものではなく、仮定している。

Contents

- DFT-RGの導入

- 密度汎関数理論(DFT)

- DFT-RG

- 1次元核物質への適用

- 基底状態 – 核物質状態方程式

- 励起状態 – 密度-密度スペクトル関数

二次の頂点展開(2VE)とフローする化学ポテンシャル μ_λ

$$\partial_\lambda \Gamma_\lambda[\rho] = \frac{1}{2} \int_{\chi_1, \chi_2} U_{2b}(\chi_1, \chi_2) \left(\rho(\chi_1) \rho(\chi_2) + \left(\frac{\delta^2 \Gamma_\lambda[\rho]}{\delta \rho \delta \rho} \right)^{-1} (\chi_1, \chi_2) - \rho(\chi_2) \delta(x_2 - x_1) \right)$$

↓ 頂点展開($\rho_{gs,\lambda}$ 周りでのテイラー展開), フーリエ表示

0th (1粒子あたりのエネルギー)

$$\partial_\lambda \bar{E}_{gs,\lambda} = \frac{\rho_{gs,0}}{2} \tilde{U}(0) + \frac{1}{2\rho_{gs,0}} \int_p \tilde{U}(p) \left(\int_\omega \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) - \rho_{gs,0} \right)$$

1st ($\rho_{gs,\lambda}$)

$$\partial_\lambda \rho_{gs,\lambda} = -\frac{1}{2} \int_P \tilde{U}(p) \tilde{G}_\lambda^{(3)}(P, -P) + \tilde{G}_\lambda^{(2)}(0) \left(\partial_\lambda \mu_\lambda - \tilde{U}(0) \rho_{gs,\lambda} + \frac{1}{2} U(0) \right)$$

λ -依存化学ポテンシャル μ_λ を導入.

$\partial_\lambda \rho_{gs,\lambda} = 0$ となるように μ_λ を選ぶ。(一様系では可能)

2nd (密度二点相関関数)

$$\partial_\lambda \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) = -\tilde{U}(p) \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P)^2 - \frac{1}{2} \int_{P'} \tilde{U}(p') \tilde{G}_\lambda^{(4)}(P', -P', P) + \int_{P'} \frac{\tilde{U}(p') \tilde{G}_\lambda^{(3)}(P', -P') \tilde{G}_\lambda^{(3)}(P, -P)}{2\tilde{G}_\lambda^{(2)}(0)}$$

$\tilde{G}_\lambda^{(n)}$: 連結密度相関関数 $(\delta^n W_\lambda / \delta J(\chi_1) \cdots \delta J(\chi_n))|_{J=\mu_\lambda}$ のフーリエ変換

近似と初期条件

$$\partial_\lambda \bar{E}_{\text{gs},\lambda} = \frac{\rho_{\text{gs},0}}{2} \tilde{U}(0) + \frac{1}{2\rho_{\text{gs},0}} \int_p \tilde{U}(p) \left(\int_\omega \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) - \rho_{\text{gs},0} \right)$$

$$\partial_\lambda \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) = -\tilde{U}(p) \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P)^2 - \frac{1}{2} \int_{P'} \tilde{U}(p') \tilde{G}_\lambda^{(4)}(P', -P', P) + \int_{P'} \frac{\tilde{U}(p') \tilde{G}_\lambda^{(3)}(P', -P') \tilde{G}_\lambda^{(3)}(P, -P)}{2\tilde{G}_\lambda^{(2)}(0)}$$

3次以上のフロアは無視 $\partial_\lambda G^{(n \geq 3)} \approx 0$

近似

Kemler, Pospiech, Braun, JPG (2017)

$$-\frac{1}{2} \int_{P'} \tilde{U}(p') \tilde{G}_\lambda^{(4)}(P', -P', P) + \int_{P'} \frac{\tilde{U}(p') \tilde{G}_\lambda^{(3)}(P', -P') \tilde{G}_\lambda^{(3)}(P, -P)}{2\tilde{G}_\lambda^{(2)}(0)}$$

$$\approx c_\lambda \left(-\frac{1}{2} \int_{P'} \tilde{U}(p') \tilde{G}_0^{(4)}(P', -P', P) + \int_{P'} \frac{\tilde{U}(p') \tilde{G}_0^{(3)}(P', -P') \tilde{G}_0^{(3)}(P, -P)}{2\tilde{G}_0^{(2)}(0)} \right)$$

- c_λ はパウリの排他律の効果から決定:
二粒子分布関数 $f_{2,\lambda}(x, x')$ に対する制限

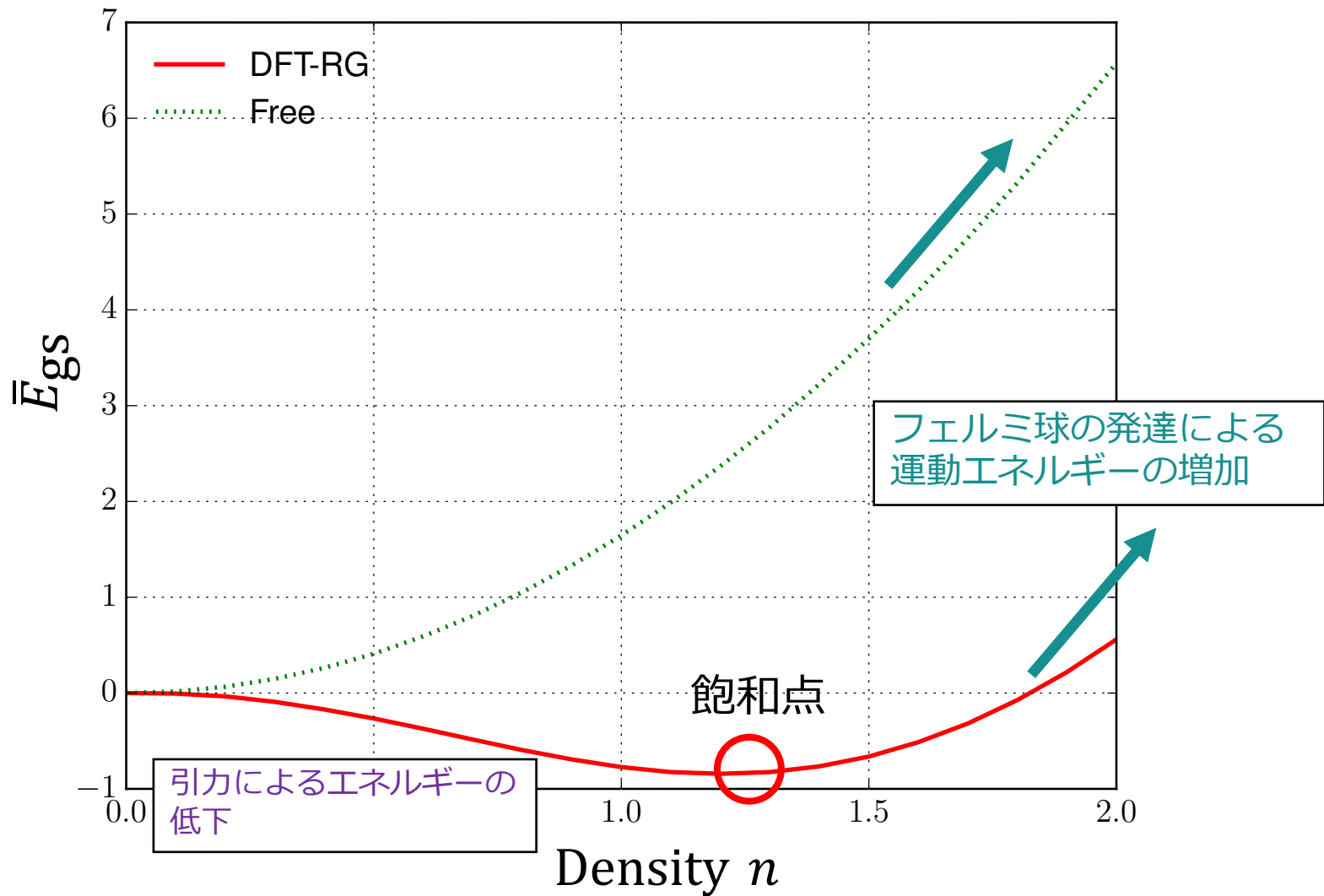
$$\lim_{x \rightarrow x'} f_{2,\lambda}(x, x') = \lim_{x \rightarrow x'} \left(G_\lambda^{(2)}(0, x, 0, x') + \rho_{\text{gs},\lambda}(x) \rho_{\text{gs},\lambda}(x') - \delta(x - x') \rho_{\text{gs},\lambda}(x) \right) = 0$$

初期条件

$$\rho_{\text{gs},0} = n \quad \bar{E}_{\text{gs},0} = (\pi n)^2 / 6 \quad \tilde{G}_{\lambda=0}^{(2)}$$

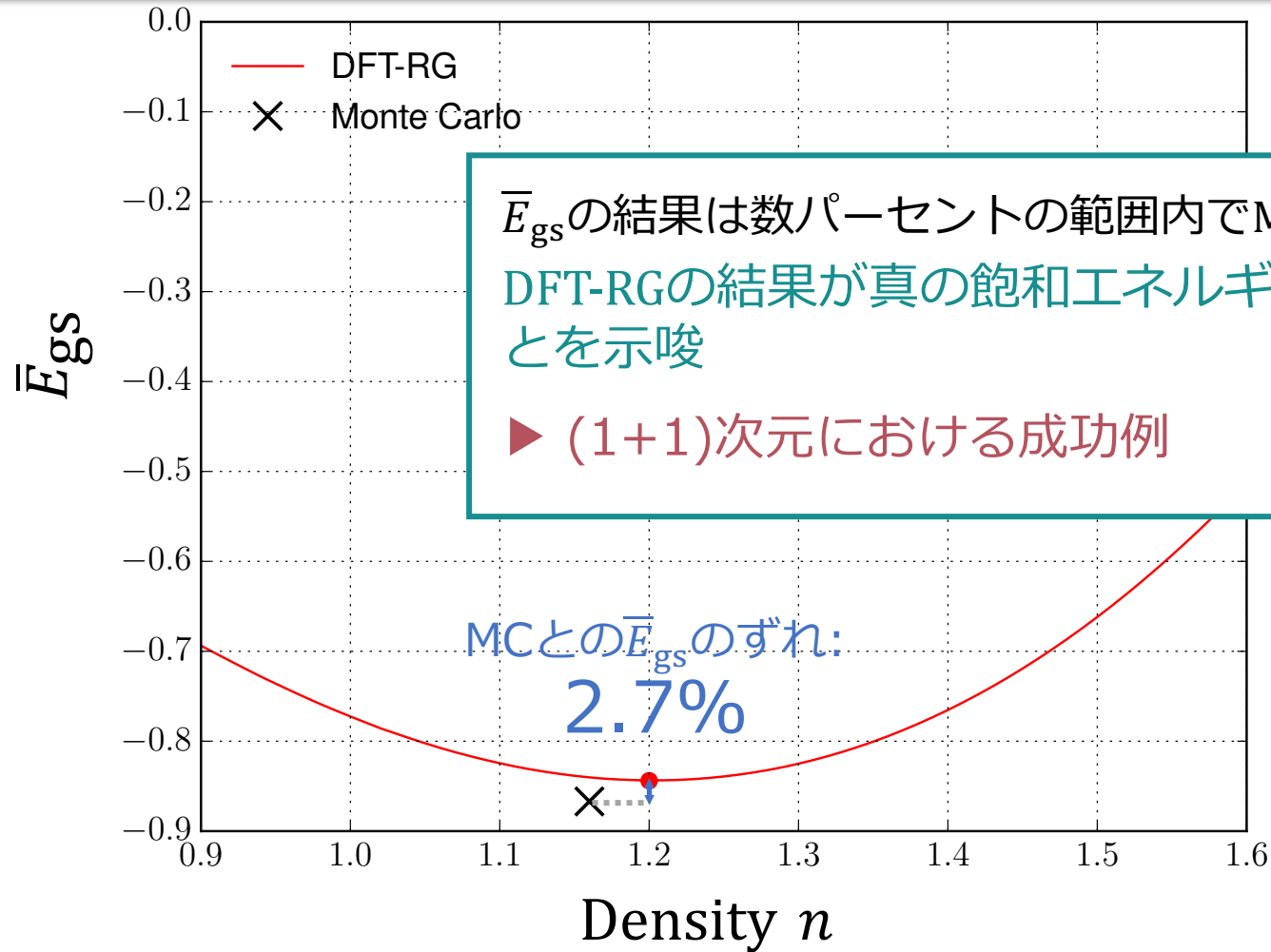
- n はフロア中常に系の粒子密度

EOSの結果



DFT-RG(2VE)と自由な系の一粒子あたりのエネルギー

飽和点付近でのEOS



DFT-RG(2VE)とMCによる一粒子あたりのエネルギー

- MCでの密度 $n = 1.16$ は仮定されたものであることに注意

Contents

- DFT-RGの導入

- 密度汎関数理論(DFT)

- DFT-RG

- 1次元核物質への適用

- 基底状態 – 核物質状態方程式

- 励起状態 – 密度-密度スペクトル関数

DFT-RGでの励起状態の解析

有効作用 $\Gamma[\rho]$ は密度相関関数の情報を含む。

密度二点相関関数とそのスペクトル関数 $\rho_d(\omega, p)$ の計算を試みた。

➡ DFT-RGによる初めての励起状態の解析!

密度・密度スペクトル関数の計算手法

密度・密度スペクトル関数

$$\rho_d(\omega, p) = -2\text{Im}\tilde{G}_{R,\lambda=1}^{(2)}(\omega, p)$$

$\tilde{G}_{R,\lambda}^{(2)}(\omega, p)$ は遅延密度相関関数。虚時間相関関数からの解析接続で得られる。

$$\tilde{G}_{R,\lambda}^{(2)}(\omega, p) = -\tilde{G}_{\lambda}^{(2)}(-iz, p) \Big|_{z \rightarrow \omega + i\epsilon}$$

zの上半面で正則となるように解析接続

一般には,このような解析接続は数値計算上難しい問題となる.

しかし、我々の近似では、このような解析接続はフロー方程式の段階で簡単に行える.

FRGにおける例: Kamikado, Strodthoff, Smekal, Wambach, EPJC (2014)

$$\partial_\lambda \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) = -\tilde{U}(p)\tilde{G}_\lambda^{(2)}(P)^2 - \frac{c_\lambda}{2} \int_{P'} \tilde{U}(p')\tilde{G}_0^{(4)}(P', -P', P) + c_\lambda \int_{P'} \frac{\tilde{U}(p')\tilde{G}_0^{(3)}(P', -P')\tilde{G}_0^{(3)}(P, -P)}{2\tilde{G}_0^{(2)}(0)}$$

周波数積分をした後の P^0 に対する解析的な形が分かる

$\tilde{G}_{R,\lambda}^{(2)}$ のフロー方程式:

➡ $iP^0 \rightarrow \omega + i\epsilon$ の置き換えをするだけ!

$$\partial_\lambda \tilde{G}_{R,\lambda}^{(2)}(\omega, p) = -\tilde{U}(p)\tilde{G}_{R,\lambda}^{(2)}(\omega, p)^2 - \left(\frac{c_\lambda}{2} \int_{P'} \tilde{U}(p')\tilde{G}_0^{(4)}(P', -P', P) + c_\lambda \int_{P'} \frac{\tilde{U}(p')\tilde{G}_0^{(3)}(P', -P')\tilde{G}_0^{(3)}(P, -P)}{2\tilde{G}_0^{(2)}(0)} \right) \Big|_{P^0 \rightarrow -i(\omega + i\epsilon)}$$



Diagram illustrating the first term of the flow equation: two $\tilde{G}^{(2)}$ bubbles connected by a wavy line labeled $\tilde{U}$.



Diagram illustrating the second term of the flow equation: three diagrams representing the integral terms, each involving $\tilde{G}_0^{(4)}$ or $\tilde{G}_0^{(3)}$ and $\tilde{G}_0^{(2)}$.

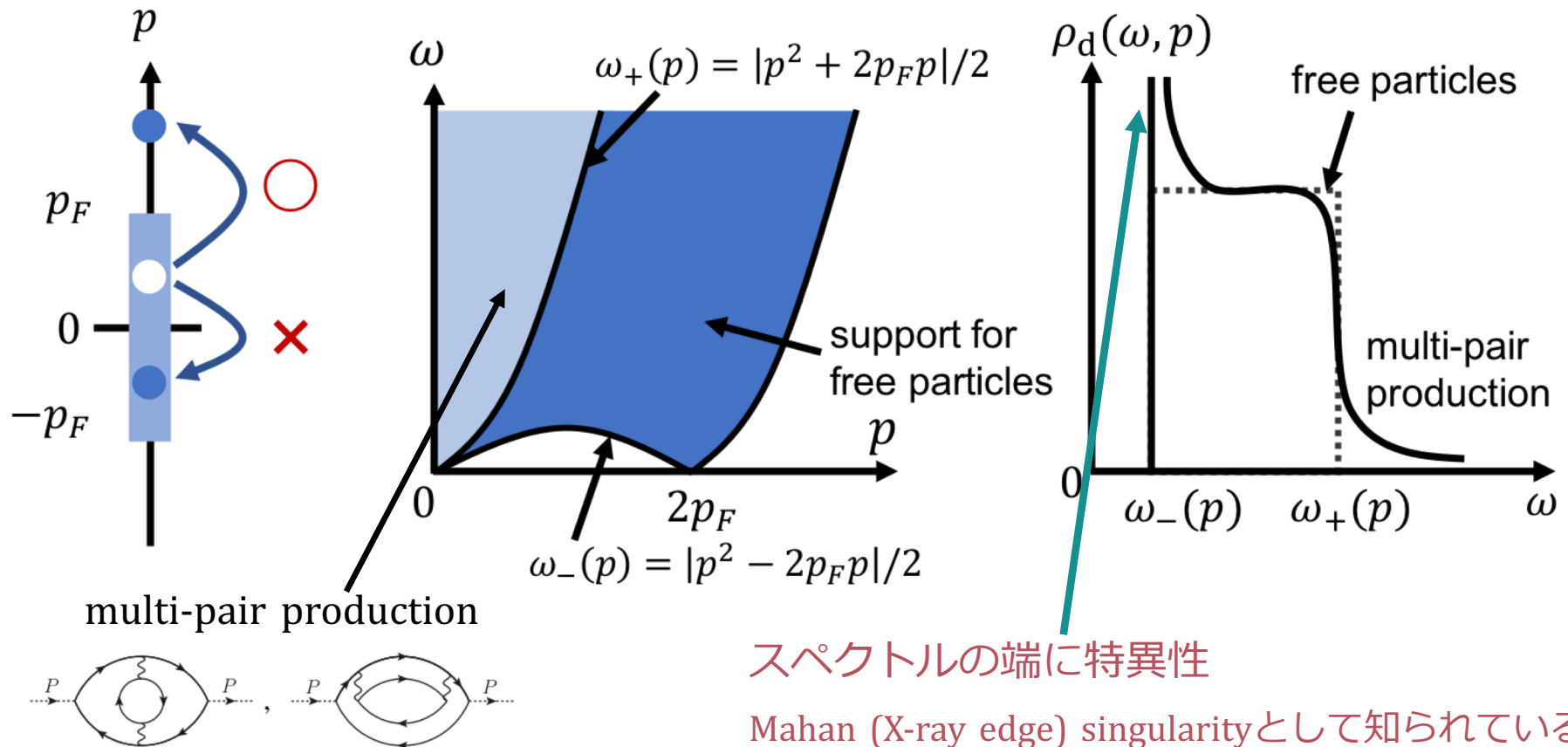
(1+1)次元フェルミオン系での ρ_d

Pustilnik, Khodas, Kamenev, Glazman, PRL96 (2006)

Teber, PRB76 (2007)

A. Imambekov, T. L. Schmidt, L. I. Glazman, RMP (2012)

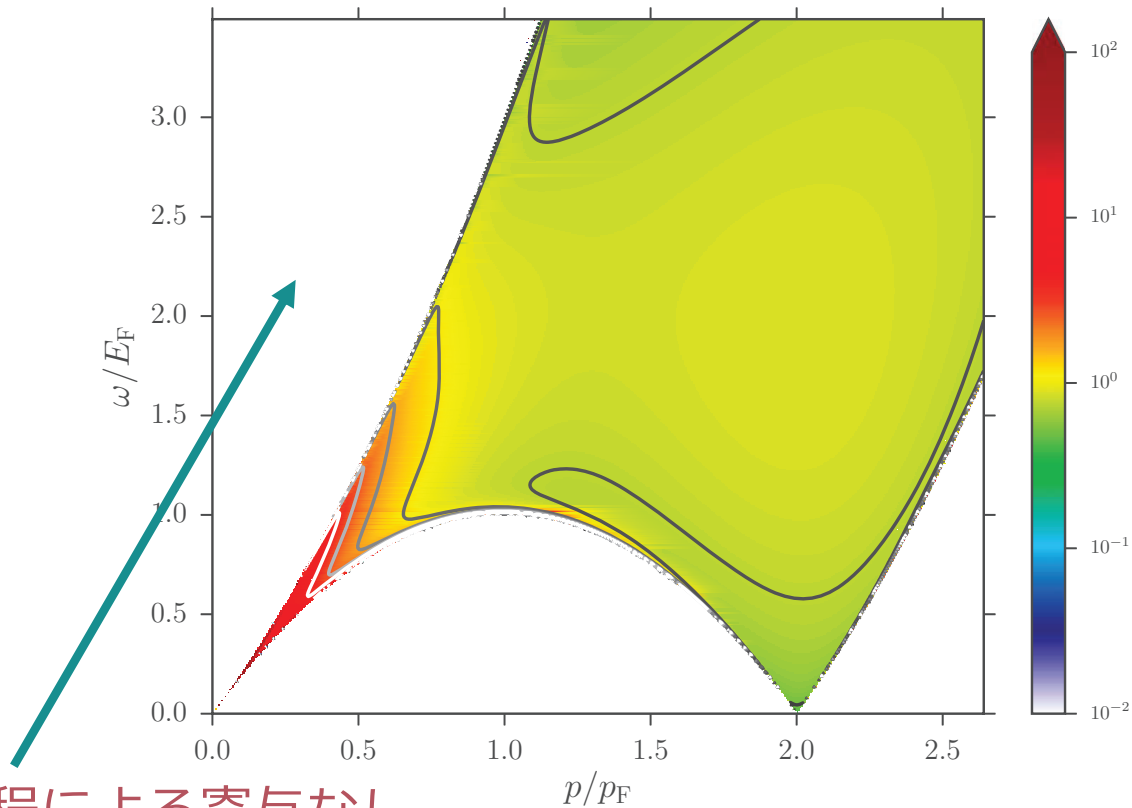
非線形朝永・ラッティンジャー流体のボソン化法などによる解析からの示唆



Nozieres, De Dominicis, PR178 (1969); Mahan (1981)

ρ_d の結果 - (ω, p) 上での等高線図

飽和密度での計算

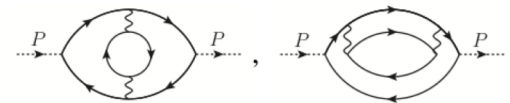


multi-pair過程による寄与なし

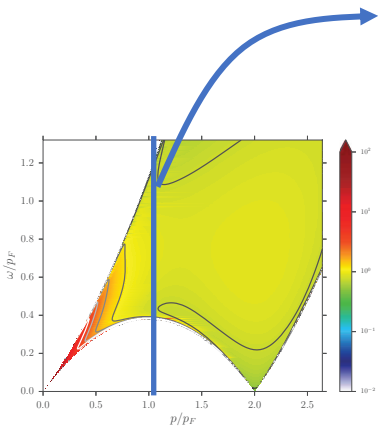
$$+ c_\lambda \text{ (diagram with wavy line)} + c_\lambda \text{ (diagram with two wavy lines)} + c_\lambda \text{ (diagram with three wavy lines)} + \dots$$

$G^{(4)}$ part

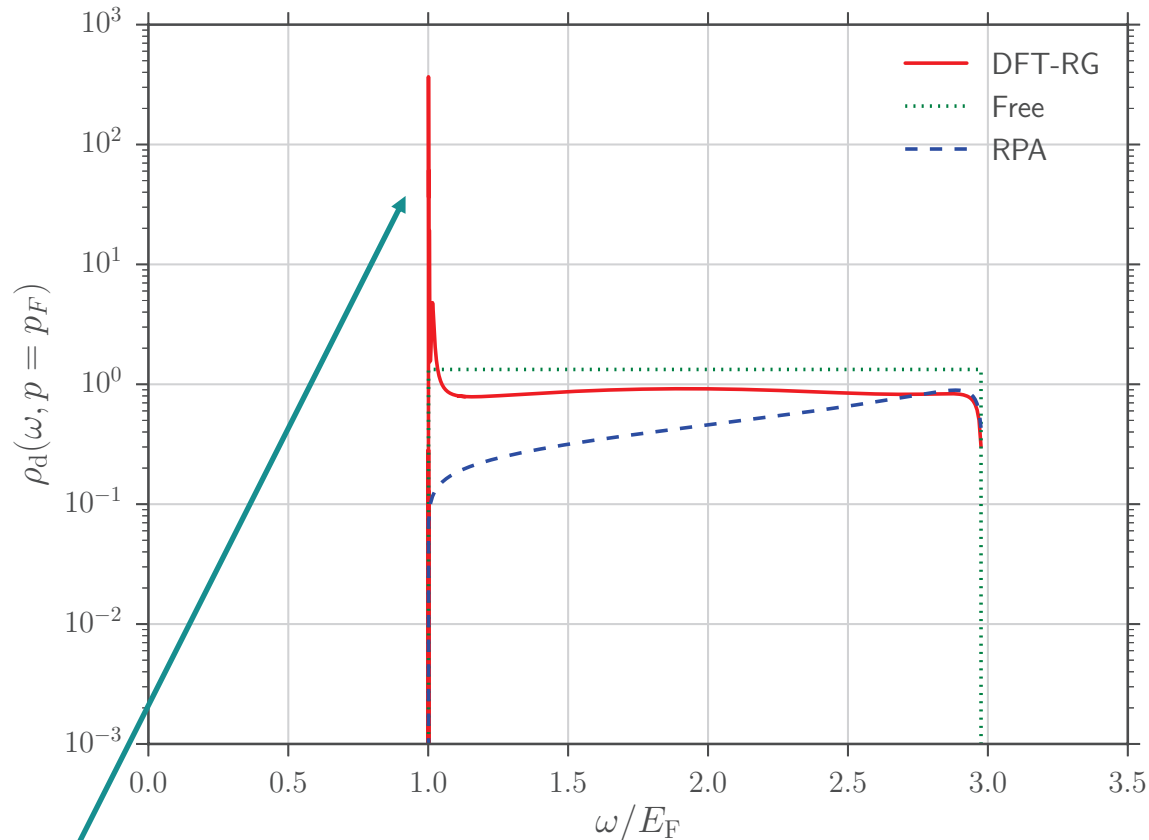
以下のような寄与
は含まれていない



ρ_d の結果 - p 固定の場合



DFT-RG(2VE), RPA,
自由粒子での
スペクトル関数



$\omega = \omega_-(p)$ での特異性

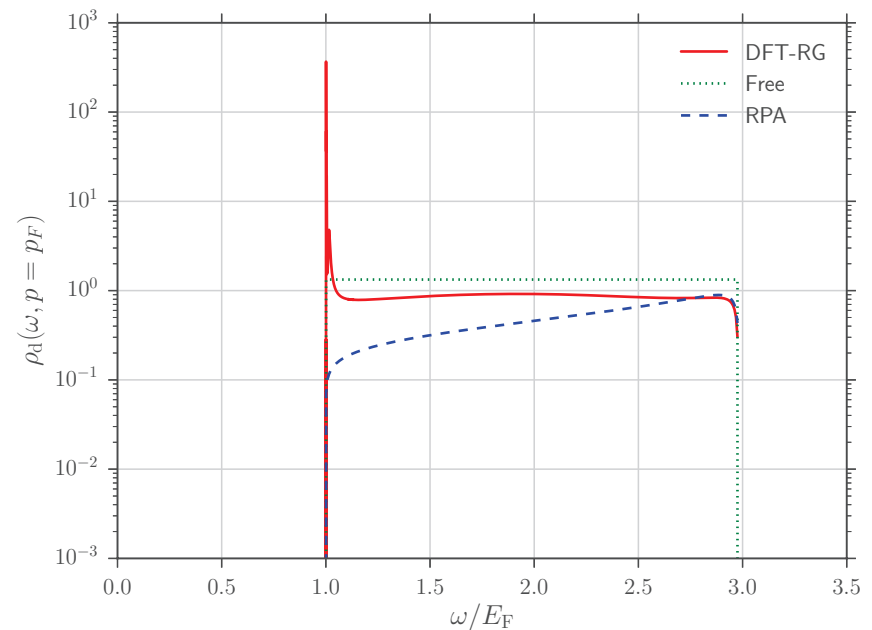
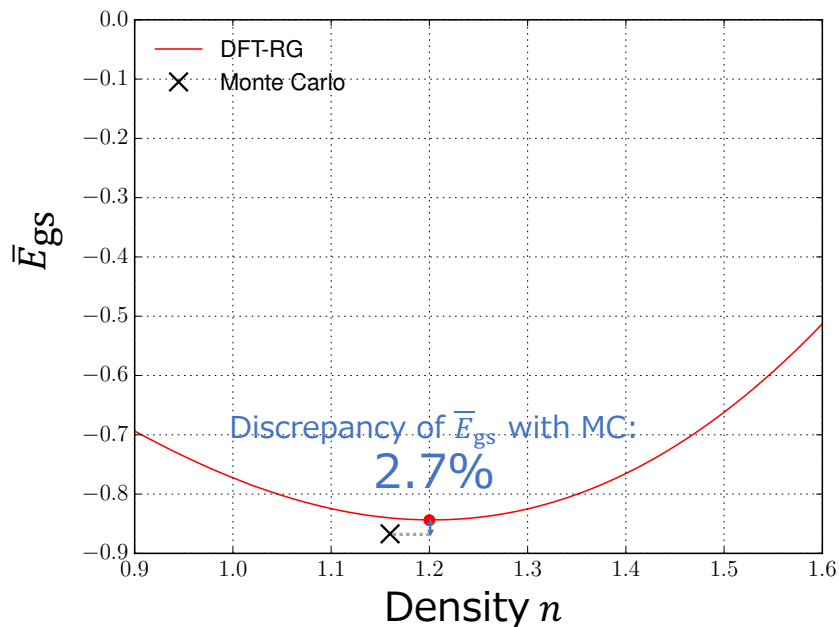
$$\partial_\lambda \tilde{G}_{R,\lambda}^{(2)}(P) \approx \text{diagram with } \tilde{G}^{(2)} \text{ and } \tilde{U} \text{ bubbles} + c_\lambda \text{diagram with } \tilde{G}^{(2)} \text{ and } \tilde{U} \text{ bubbles} + c_\lambda \text{diagram with } \tilde{G}^{(2)} \text{ and } \tilde{U} \text{ bubbles} + \dots$$

$\tilde{G}^{(3,4)}$ からの寄与はRPAでは
無視される

まとめ

(1+1)次元連続核物質におけるDFT-RGの**基底状態**と**励起状態**の解析の初めての成功例。

► DFT-RGは実用的!

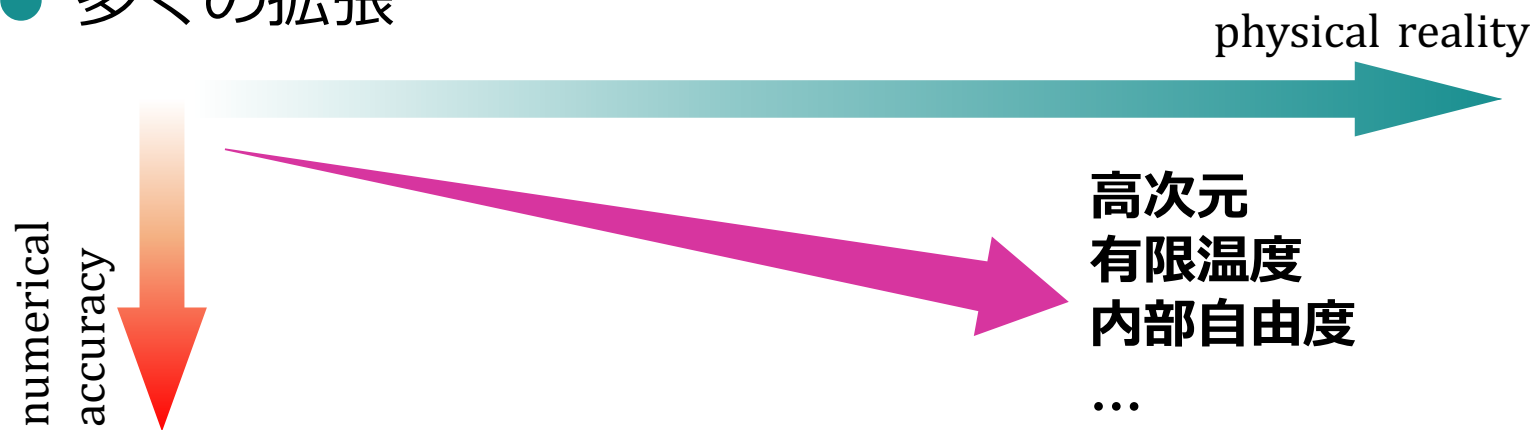


展望

- スペクトル関数についてのさらなる解析

- multi-pair productionを取り入れるには?
- 特異性の定量的解析について。

- 多くの拡張



- フェルミオン対のような密度以外の演算子の導入 → **超流動**
- 核物質, 冷却原子系, 電子系...

Back up

How to determine c_λ

$$\begin{aligned} f_{2,\lambda}(x_1, x_2) &= \langle \rho_\psi(0, x_1) \rho_\psi(0, x_2) \rangle_{\rho_{\text{gs},\lambda}} - \delta(x_1 - x_2) \langle \rho_\psi(0, x_1) \rangle_{\rho_{\text{gs},\lambda}} \\ &= G_\lambda^{(2)}(0, x_1, 0, x_2) + \rho_{\text{gs},\lambda}(x_1) \rho_{\text{gs},\lambda}(x_2) - \delta(x_1 - x_2) \rho_{\text{gs},\lambda}(x_1), \end{aligned}$$

Pauli blocking

$$\begin{aligned} \lim_{x_1 \rightarrow x_2} G_\lambda^{(2)}(0, x_1, 0, x_2) &= \lim_{x_1 \rightarrow x_2} \left(\delta(x_1 - x_2) \rho_{\text{gs},\lambda}(x_1) - \rho_{\text{gs},\lambda}(x_1) \rho_{\text{gs},\lambda}(x_2) \right). \\ &= \int_P \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) \end{aligned}$$

not λ -dependence in our case

$$\Rightarrow \int_P \partial_\lambda \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) = 0$$

Flow equation

$$\int_P \tilde{U}(P) \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P)^2 + \frac{1}{2} \int_{P,P'} \tilde{U}(P') \tilde{G}_\lambda^{(4)}(P', -P', P) = 0,$$

$$\tilde{G}_\lambda^{(4)}(P', -P', P) \approx c_\lambda \tilde{G}_0^{(4)}(P', -P', P), \quad c_\lambda = - \frac{2 \int_P \tilde{U}(P) \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P)^2}{\int_{P,P'} \tilde{U}(P') \tilde{G}_0^{(4)}(P', -P', P)}.$$

Effective action formalism for DFT-RG

- Generating function of the connected correlation functions

$$W[J] = \ln Z[J] = \ln \int \mathcal{D}\Phi e^{-S[\Phi] + J_{i_1, \dots, i_n} \mathcal{O}(\Phi_{i_1}, \dots, \Phi_{i_n})} \quad \Phi_i: \text{Fields}$$

i_a : Indices of coordinate and internal degree of freedom

- Effective action (EA)**

$$\Gamma[\mathcal{O}] = \sup_J [J \cdot \mathcal{O} - W[J]] \quad \bullet \text{ Quantum EOM} \quad \frac{\delta \Gamma[\mathcal{O}]}{\delta \mathcal{O}_{i_1, \dots, i_n}} = 0$$

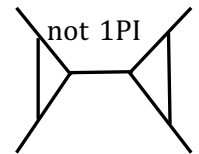
Determines the behavior of the expectation value of $\mathcal{O}$

- Some types of EA depending on the choice of $\mathcal{O}$

- 1PI (1 particle irreducible)

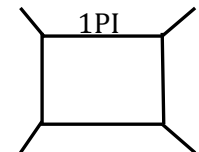
$$\mathcal{O}(\Phi_i) = \Phi_i$$

Γ : Generating function of 1PI diagrams



- nPI (n particles irreducible)

$$\mathcal{O}_{i_1, \dots, i_n} = \Phi_{i_1} \Phi_{i_2} \cdots \Phi_{i_n} \quad \Gamma: \text{Generating function of nPI diagrams}$$



- 2PPI (2 particles point irreducible)

$$\mathcal{O}(\Phi_i(x), \Phi_j(x)) = \Phi_i(x) \Phi_j(x)$$

H. Verschelde, M. Coppens, PLB (1992)

Action

$$S_\lambda[\psi^*, \psi] = \int_\chi^\beta \psi^*(\chi) \left(\partial_\tau - \frac{1}{2} \partial_x^2 \right) \psi(\chi) \\ + \frac{\lambda}{2} \int_{\chi, \chi'}^\beta \psi^*(\chi) \psi^*(\chi') U_{2b}(\chi, \chi') \psi(\chi') \psi(\chi)$$



Spinless fermion field

$$\chi = (\tau, x) \quad \int_\chi^\beta = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau \int dx \quad U_{2b}(\chi, \chi') = \delta(\tau - \tau') U(x - x')$$

$$\int dx_i G_{\lambda}^{(n)}(\chi_1, \cdots, \chi_n) = 0 \quad (i \in \{1, \cdots, n\})$$

Idea of DFT-RG

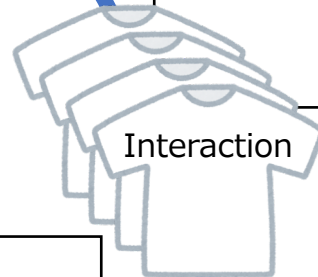
Add effect of interaction to free 2PPI EA gradually

J. Polonyi, K. Sailer, PRB (2002), A. Schwenk, J. Polonyi (2004)

$\Gamma_{\text{free}}[\rho]$
 $\lambda = 0$
(Free limit)

2PPI flow eq. S. Kemler, M. Pospiech, J. Braun, JPG (2017)

$$\partial_{\lambda} \Gamma_{\lambda}[\rho] = \frac{1}{2} \int_{\chi_1, \chi_2}^{\beta} U_{2b}(\chi_1, \chi_2) (\rho(\chi_1) \rho(\chi_2) + \left(\frac{\delta^2 \Gamma_{\lambda}[\rho]}{\delta \rho \delta \rho} \right)^{-1} (\chi_1, \chi_2) - \rho(\chi_2) \delta(\chi_2 - \chi_1))$$



Regulated action

$$S_{\lambda} = S_{\text{free}} + \lambda S_{\text{int}}$$

$\lambda \rightarrow 1$

$\Gamma[\rho]$
 $\lambda = 1$

U_{2b} : two-body interaction

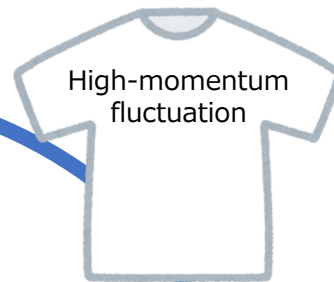
FRG (conventional (1PI) case)

Add fluctuations to bare EA gradually and get the EA

C. Wetterich, PLB (1993)

$$\Gamma_{\text{bare}}^{1\text{PI}}[\Phi] (= S)$$

$k = \Lambda$
(Large UV scale)



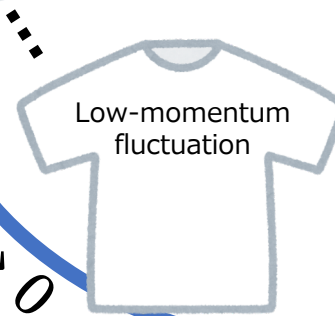
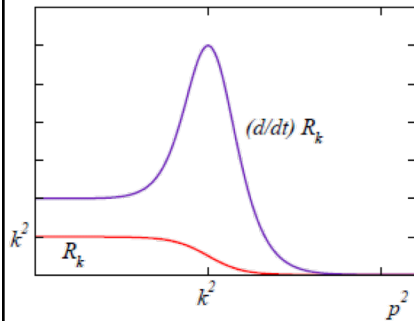
1PI flow eq.

$$\partial_k \Gamma_k^{1\text{PI}}[\Phi] = \frac{1}{2} \text{STr} \left[\frac{\partial_k R_k}{\Gamma_k^{1\text{PI}(2)}[\Phi] + R_k} \right]$$

Regulated action

$$S_k = S + \frac{1}{2} \Phi \cdot R_k \cdot \Phi$$

Regulator term
(suppress fluctuations with
momentum $\lesssim k$)



$k \rightarrow 0$

$$\Gamma^{1\text{PI}}[\Phi]$$

$k = 0$
(IR scale)

$\Gamma^{1\text{PI}}$: EA, S : bare action, Φ : fieldsm, k : momentum scale
 $\Gamma_k^{1\text{PI}}$: effective average action, R_k : regulator