

汎関数くりこみ群に基づいた密度汎関数理論 による二次元一様電子系の解析

横田 猛

高エネルギー加速器研究機構

共同研究者

内藤 智也

東京大学理学系研究科, 理研仁科センター

TY, Naito, Phys. Rev. B **99**, 115106 (2019)

熱場の量子論とその応用, 京大基研, 2019年9月2日

汎関数くりこみ群に基づいた密度汎関数理論

量子多体系の手法を発展させた
特に密度汎関数理論 (DFT) の文脈で

密度汎関数理論 (DFT) とは?

原理的には、シュレーディンガー方程式を解けば多体問題は解ける

$\hat{H}\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = E\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ 相互作用系では、粒子数が N 大きいと解くのは困難

別のアプローチ...DFT!

Hohenberg, Kohn, PR (1964)

Kohn, Sham, PRA (1965)

エネルギー密度汎関数(EDF)が存在 $E[\rho] = \underbrace{F[\rho]}_{\text{相互作用のみから決定}} + \int d\mathbf{x} \underbrace{V(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x})}_{\text{外場}}$ 変分方程式 $\frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{x})} - \mu = 0 \rightarrow E_{\text{gs}}, \rho_{\text{gs}}(\mathbf{x})$

EDFの変分方程式は簡便に解く方法がある

Kohn-Sham method

変分方程式 \Leftrightarrow 自由シュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{\text{KS}}[\rho](x) \right) \phi_i(x) = \epsilon_i \phi_i(x)$$



$F[\rho]$

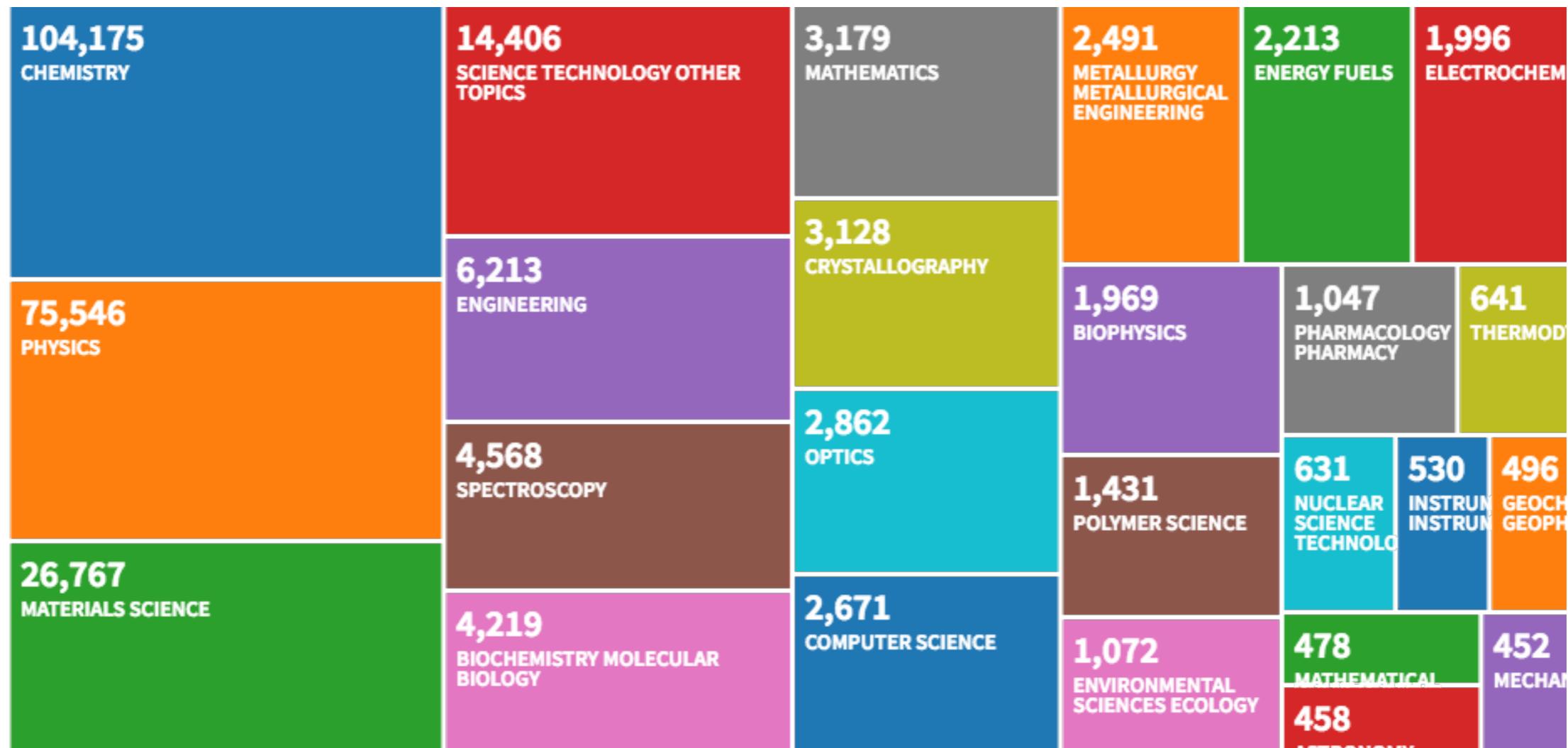
さえ決めれば、大きい粒子数でもエネルギー、密度がより少ないコストで計算できる!

密度汎関数理論



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)

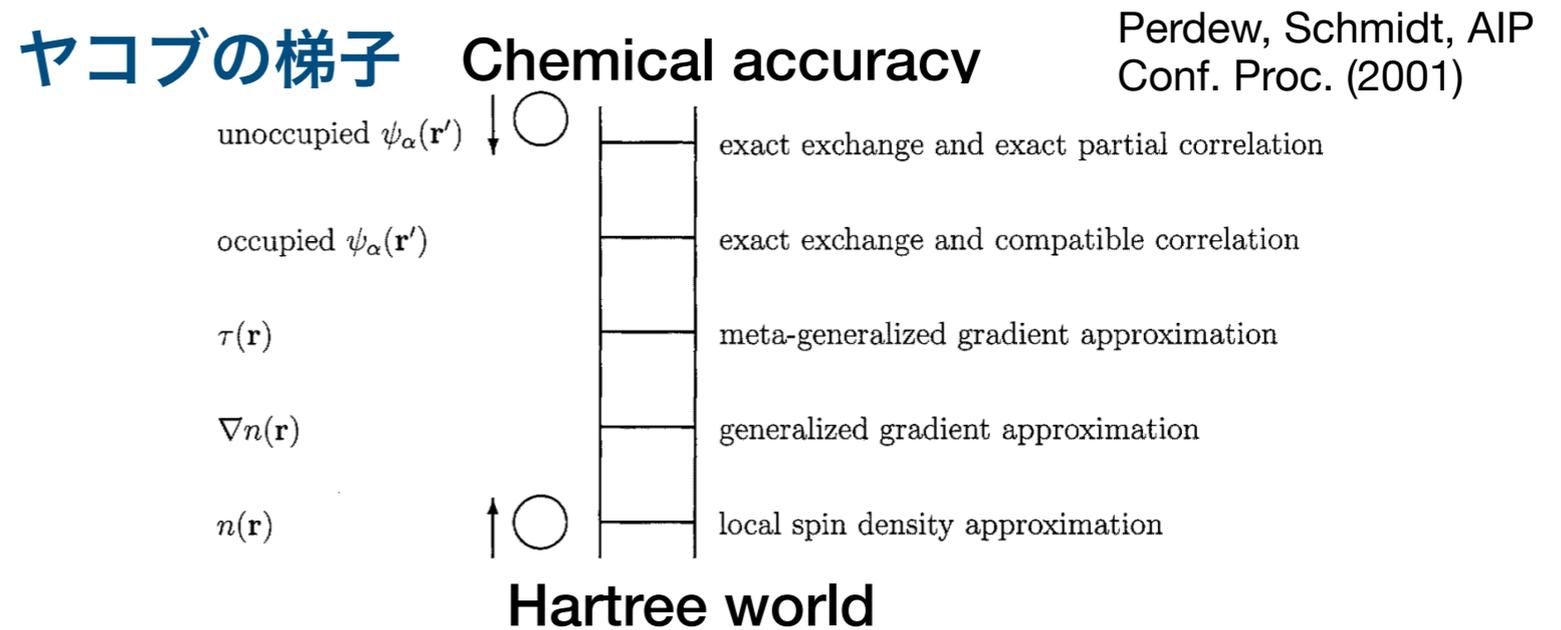
幅広い分野(物性, 原子核含む)で使われている

DFTの基礎的問題

エネルギー密度汎関数 (EDF) $E[\rho] = F[\rho] + \int d\mathbf{x} V(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x})$

$F[\rho]$ はどう決める?

(parameter fitting など) 経験的な
アプローチは数多くされている



微視的ハミルトニアンに基づいた非経験的, 系統的方法は?

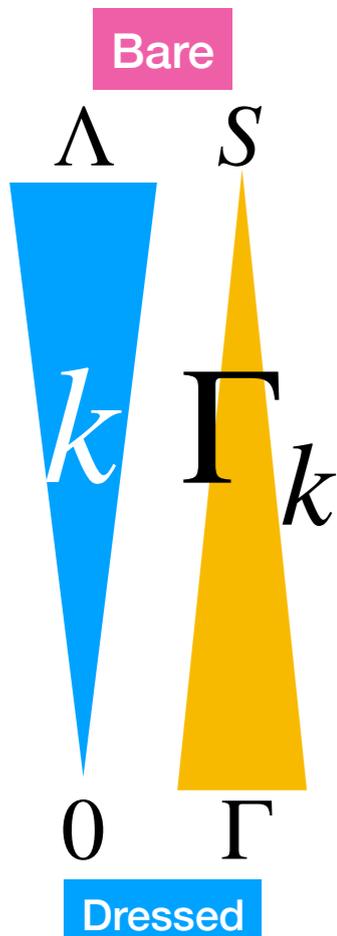
$$\hat{H} \xrightarrow{?} F[\rho]$$

汎関数くりこみ群に基づいた密度汎関数理論 (FRG-DFT)

汎関数くりこみ群 (FRG)

- 汎関数の偏微分方程式を用いてくりこみ群を厳密に定式化
- 有効作用に基づく定式化が発展 (Wetterich流)

Wegner, Houghton (1973)
Wilson, Kogut (1974)
Polchinski (1984)
Wetterich, PLB (1993)



(Wetterich) Flow equation

$$\partial_k \Gamma_k[\Phi] = \frac{1}{2} \int_{X, X'} \partial_k R_k(X - X') \left(\frac{\delta^2 \Gamma_k[\Phi]}{\delta \Phi \delta \Phi} + R_k \right)^{-1} (X, X')$$

- $\Gamma_k[\Phi]$: 有効作用 (平均有効作用)
- R_k : レギュレーター (k 以下の運動量スケールのモードを抑制)
- k : 運動量スケール

頂点展開, 微分展開など, 非摂動的, 系統的方法が発展!!

このFRGの方法を取り入れられないか?



汎関数くりこみ群に基づいた密度汎関数理論 (FRG-DFT)

密度に対する有効作用 $\Gamma[\rho]$

フェルミオン ψ 、作用 $S[\psi^\dagger, \psi]$ の非相対論系を考える

相対論系への拡張も可能

$$S[\psi^\dagger, \psi] = \int_X \psi^\dagger(X_\epsilon) \left(\partial_\tau - \frac{\Delta}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \psi(X) + \frac{1}{2} \int_{X, X'} \psi^\dagger(X_\epsilon) \psi^\dagger(X'_\epsilon) \underline{U_{2b}(X - X')} \psi(X') \psi(X)$$

$X_\epsilon = (\tau + \epsilon, \mathbf{x})$ $U_{2b}(X - X') = \delta(\tau - \tau') U(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$

ϵ : 時間順序を決めるための正の無限小(normal ordering)

TY, Yoshida, Kunihiro, PRC(2019)

$$\left(\hat{H} = \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\Delta}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}') U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}') \hat{\psi}(\mathbf{x}) \right)$$

密度場 $\rho_\psi(X) = \psi^\dagger(X_\epsilon) \psi(X)$ に対する有効作用

$$W[J] = \ln Z[J] = \int D\psi D\psi^\dagger e^{-S[\psi^\dagger, \psi] + \int_X J(X) \rho_\psi(X)}$$

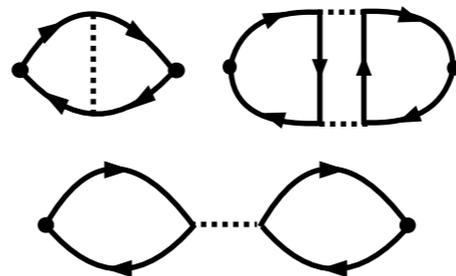
Legendre trans.



$$\Gamma[\rho] = \sup_J \left(\int_X J(X) \rho(X) - W[J] \right)$$

• $\Gamma[\rho]$ はすべての密度相関関数の情報を持っている

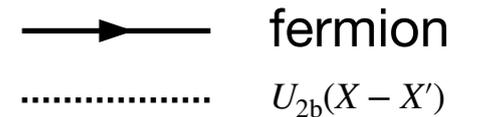
2-particle point irreducible (2PPI)
ダイアグラムの生成汎関数



2PPI

2本のフェルミオン線を同じ点から離しても分けられない

Not 2PPI



有効作用としてのEDF

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

$$\Gamma[\rho] = \sup_J \left(\int_X J(X)\rho(X) - W[J] \right)$$

- $\Gamma[\rho]$ はEDFとしての性質を備えている (Hohenberg-Kohnの定理)

- 変分方程式 (量子EOM)

$$\frac{\delta\Gamma[\rho]}{\delta\rho(X)} - \mu = 0$$



$$\rho(X) = \frac{1}{Z[\mu]} \int D\psi D\psi^\dagger \rho_\psi(X) e^{-S[\psi^\dagger, \psi] + \mu \int_X \rho_\psi(X')} = \rho_{\text{gs}}(X)$$

$$\Gamma[\rho_{\text{gs}}] = \mu \int_X \rho_{\text{gs}}(X) - W[\mu] = \beta F_{\text{Helm}}$$



$$E_{\text{gs}} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \Gamma[\rho_{\text{gs}}] / \beta$$

- $V(\mathbf{x})$ に対して線形に依存

Shift of $V \Leftrightarrow$ Shift of J



$$\Gamma[\rho] = \int_X V(\mathbf{x})\rho(X) + (\mathbf{V}\text{-independent terms})$$

$$E[\rho] = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\Gamma[\rho]}{\beta}$$

Calculation of EDF $E[\rho] \Leftrightarrow$ Calculation of $\Gamma[\rho]$!!

汎関数くりこみ群に基づいた密度汎関数理論 (FRG-DFT)

Polonyi, Sailer, PRB (2002), Schwenk, Polonyi (2004)

$$S_\lambda[\psi^\dagger, \psi] = \int_X \psi^\dagger(X_\epsilon) \left(i\partial_\tau - \frac{\Delta}{2m} + V(x) \right) \psi(X) + \frac{1}{2} \int_{X, X'} \psi^\dagger(X_\epsilon) \psi^\dagger(X'_\epsilon) \underbrace{R_\lambda(X - X') U_{2b}(X - X')}_{\text{Regulator}} \psi(X') \psi(X)$$

Regulator

$$R_{\lambda=1}(X - X') = 1 \quad \text{Fully-interacting system}$$

$$R_{\lambda=0}(X - X') = 0 \quad \text{Free system}$$

FRG-DFT Flow equation

$$\partial_\lambda \Gamma_\lambda[\rho] = \frac{1}{2} \int_{X, X'} \partial_\lambda R_\lambda(X - X') U_{2b}(X - X') \left(\underbrace{\rho(X_\epsilon) \rho(X')}_{\text{Hartree}} + \left(\frac{\delta^2 \Gamma_\lambda[\rho]}{\delta \rho \delta \rho} \right)^{-1} \underbrace{(X_\epsilon, X') - \rho(X') \delta(x - x')}_{\text{Ex.+Corr.}} \right)$$

Hartree

Ex.+Corr.

$\lambda=1$ まで解くとEDFが得られる!!

- $R_\lambda(X, X') = \lambda$ ととると断熱接続で知られる以下の結果を再現

$$E_{xc} = -\frac{1}{2} \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left\{ \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty \chi_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; iu) du + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}) \right\}$$

density-density correlation function

Harris, Jones, PLA (1974)

Langreth, Perdew, SSC (1975)

- さらにエネルギーだけでなく、**すべての相関関数のフロー方程式**が得られる

➡ EDFの系統的導出!

FRG-DFTの年表

2002	○	定式化の提案	Polonyi, Sailer, PRB (2002); Schwenk, Polonyi
2013	○	(0+0), (0+1)次元非調和振動子	Kemler, Braun, JPG (2013)
2017	○	(1+1)次元有限核子系	Kemler, Pospiech, Braun, JPG (2017)
	○	(1+1)次元接触相互作用 (有限系)	Kemler, Ph.D. thesis (2017)
2018	○	Kohn-Sham FRG ((0+0)次元非調和振動子)	Liang, Niu, Hatsuda, PLB (2018)

我々の仕事以前

- 低次元の Toy Model
- 有限系
- 基底状態のみ

FRG-DFTの年表 (our contribution)

2019

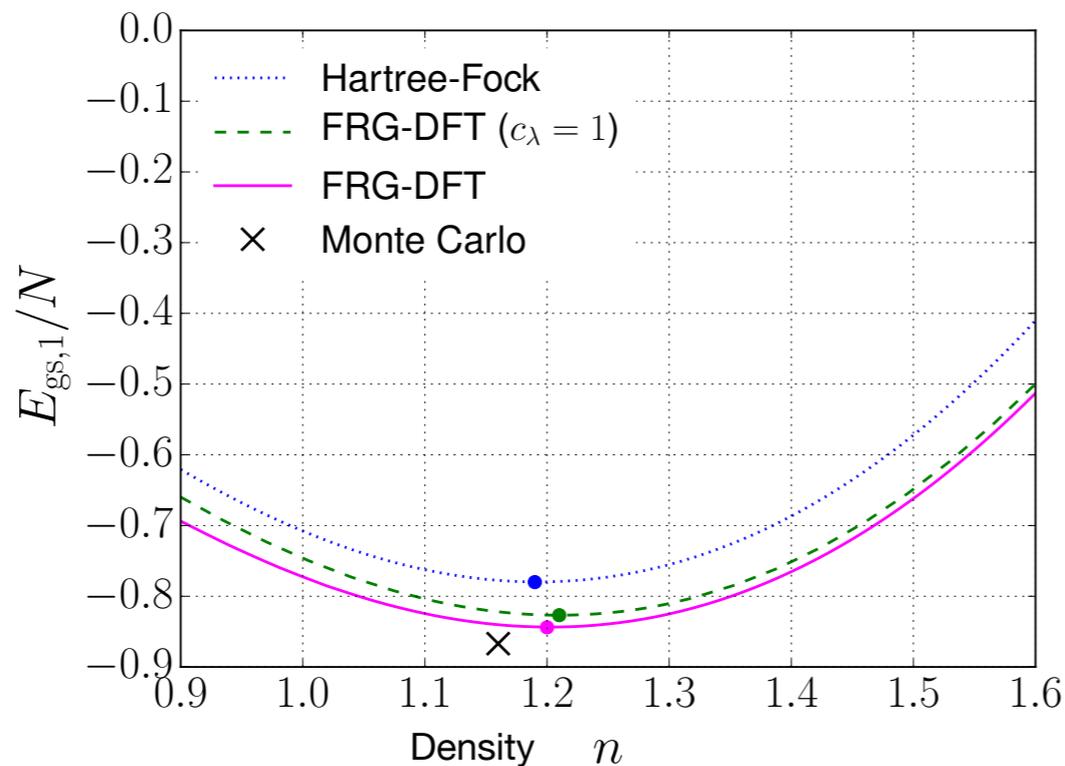
(1+1)次元無限核物質の基底状態

TY, Yoshida, Kunihiro, PRC (2019)

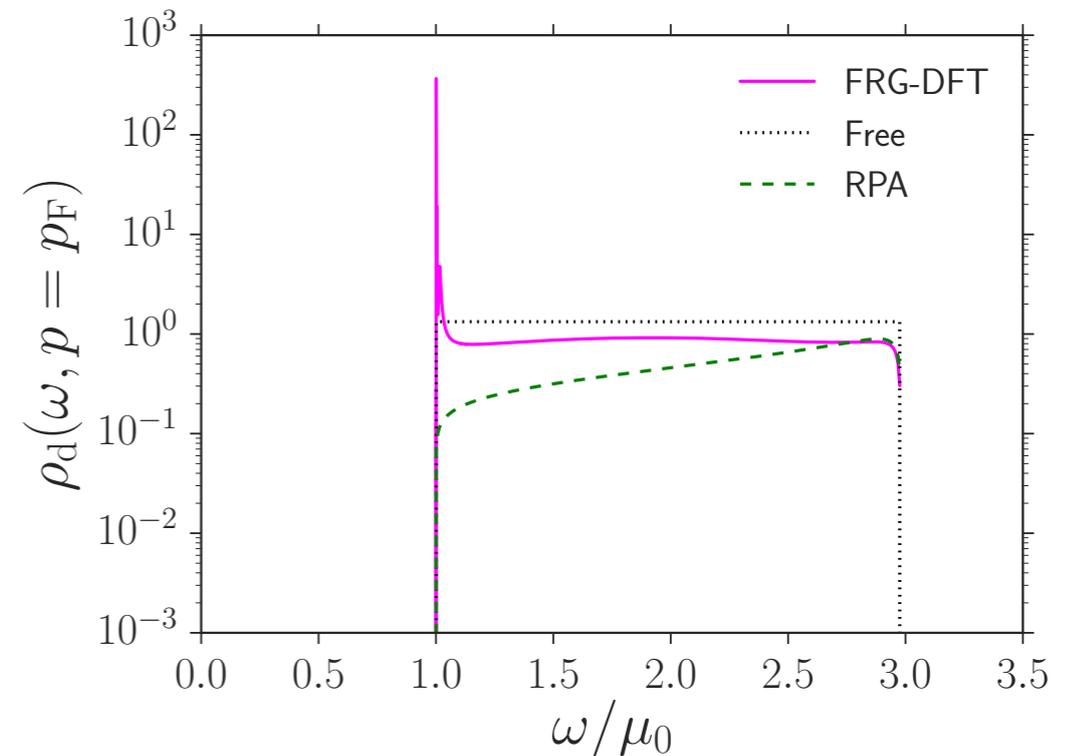
(1+1)次元無限核物質の励起状態

TY, Yoshida, Kunihiro, PTEP (2019)

無限系に定式化、一次元系で基底、励起状態を解析



FRG-DFTによる
基底エネルギー(状態方程式)



FRG-DFTによる
密度・密度スペクトル関数

FRG-DFTの年表 (our contribution)

2019

(1+1)次元無限核物質の基底状態

TY, Yoshida, Kunihiro, PRC (2019)

(1+1)次元無限核物質の励起状態

TY, Yoshida, Kunihiro, PTEP (2019)

(2+1)次元一様電子ガス (2DHEG, 無偏極)

TY, Naito, PRB (2019)

今日の話題

任意のスピン偏極のある2DHEG

TY, Naito, in progress

- 2次元系以上の系への初の適用
- 内部自由度に偏りがある系への初の適用
- 長距離力への初の適用

2次元電子系

2D layer に閉じ込められた電子

半導体ヘテロ接合, MOSFET
グラフェン
液体ヘリウム表面
...

量子ホール効果などの物理の舞台!



2次元一様電子系

シンプルだが電子相関の研究に重要

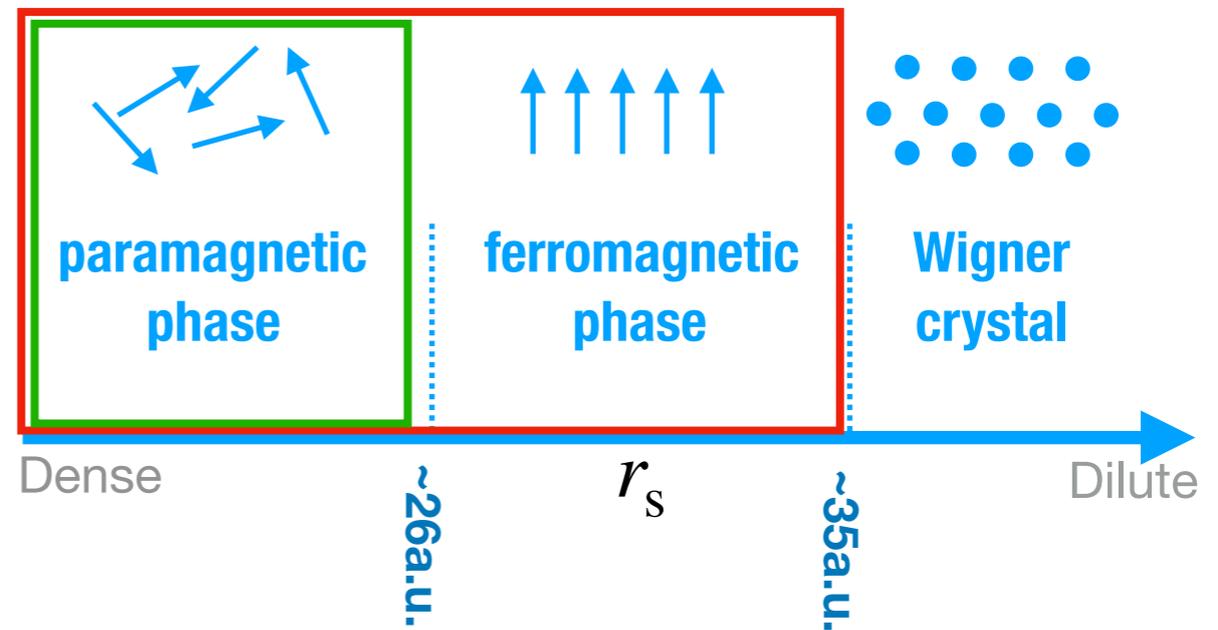
豊かな相構造

多くの理論的研究

モンテ・カルロ,
多体摂動論 ...

3次元系より計算軽いと期待

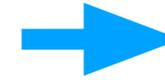
TY, Naito, PRB (2019)



モンテカルロの予言 Tanatar, Ceperley, PRB (1988)
Attaccalite, et. al., PRL (2002)

セットアップ

一様系を考える (DFTの言葉では局所密度近似 (LDA) 汎関数の導出)



EDF構築の
第一ステップ

ハートリー原子単位系 $m_e = e = \hbar = 1/(4\pi\epsilon_0) = 1$

electron mass
elementary charge
Coulomb's constant

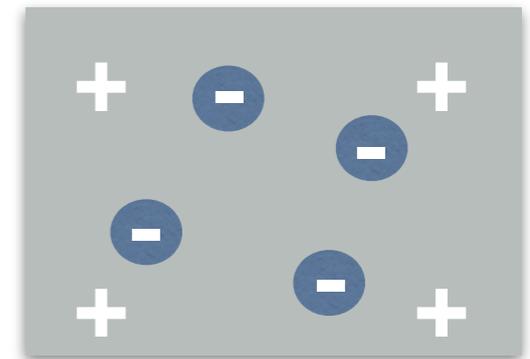
$$S_\lambda[\psi^\dagger, \psi] = S_{\text{el},\lambda}[\psi^\dagger, \psi] + S_{\text{el-i},\lambda}[\psi^\dagger, \psi] + S_{\text{i},\lambda}[\psi^\dagger, \psi]$$

$$S_{\text{el},\lambda}[\psi^\dagger, \psi] = \sum_s \int_X \psi_s^\dagger(X_e) \left(\partial_\tau - \frac{1}{2} \Delta \right) \psi_s(X) + \frac{1}{2} \sum_{s,s'} \int_{X,X'} \psi_s^\dagger(X_e) \psi_{s'}^\dagger(X_e) U_{2\text{b},\lambda}(X, X') \psi_{s'}(X') \psi_s(X)$$

$$S_{\text{el-i},\lambda}[\psi^\dagger, \psi] = -n \sum_s \int_{X,X'} U_{2\text{b},\lambda}(X, X') \psi_s^\dagger(X_e) \psi_s(X)$$

$$S_{\text{i},\lambda}[\psi^\dagger, \psi] = -\frac{n^2}{2} \int_{X,X'} U_{2\text{b},\lambda}(X, X')$$

$$U_{2\text{b},\lambda}(X, X') = R_\lambda(X - X') \frac{\delta(\tau - \tau')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = \frac{\lambda \delta(\tau - \tau')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$$



n : density of electrons and background ions

粒子数密度 $n = n_\uparrow + n_\downarrow$, スピン偏極 $\zeta = (n_\uparrow - n_\downarrow)/n$ を固定した(λ 依存させない)解析

➡ λ -依存する化学ポテンシャルが必要 TY, Yoshida, Kunihiro, PRC (2019)

変分方程式 $\frac{\delta \Gamma_\lambda}{\delta \rho_s(X)} [\rho_\uparrow = n_\uparrow, \rho_\downarrow = n_\downarrow] = \underline{\mu_{s,\lambda}}$

Wigner-Seitz radius $r_s = 1/\sqrt{\pi n}$
 Initial chemical potential $\mu_{s,\lambda=0} = \pi n_s$

近似

以下、簡単のため $\zeta = 0$ の場合を述べる ($\mu_\lambda = \mu_{\uparrow,\lambda} = \mu_{\downarrow,\lambda}$)

$$\partial_\lambda \Gamma_\lambda[\rho] = \frac{1}{2} \int_{X, X'} U_{2b}(X - X') \left((\rho(X_\epsilon) - \underbrace{n}_{\text{background ion}})(\rho(X') - \underbrace{n}_{\text{background ion}}) + \left(\frac{\delta^2 \Gamma_\lambda}{\delta \rho \delta \rho} \right)^{-1} (X_\epsilon, X') - \rho(X') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right)$$

汎関数の微分方程式なので解くのが難しい...

近似が必要

頂点展開 ($\rho(X) = n$ 周りでのテイラー展開)

$$\Gamma_\lambda[\rho] = \Gamma_\lambda[n] + \mu_\lambda \int_{X_1} (\rho(X_1) - n) + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{k!} \int_{X_1} \cdots \int_{X_k} \Gamma_\lambda^{(k)}[n](X_1, \dots, X_k) \prod_{i=1}^k (\rho(X_i) - n)$$

$$\text{0th} \quad \partial_\lambda \Gamma_\lambda[n] = \frac{1}{2} \int_{X, X'} U_{2b}(X, X') \left(\Gamma_\lambda^{(2)-1}[n](X, X') - n \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right)$$

$$\text{1st} \quad \partial_\lambda \Gamma_\lambda^{(1)}[n](X) = -\frac{1}{2} \int_{X_1, X_2, X_3, X_4} \dot{U}_{2b,\lambda}(X_4 - X_1) \Gamma_\lambda^{(2)-1}[n](X_1, X_2) \Gamma_\lambda^{(3)}[n](X_2, X_3, X) \Gamma_\lambda^{(2)-1}[n](X_3, X_4) - \frac{1}{2} U(0)$$

⋮

Coupled differential equations

$$\Gamma_\lambda^{(k)}[n](X_1, \dots, X_k) := \frac{\delta^k \Gamma_\lambda[n]}{\delta \rho(X_1) \cdots \delta \rho(X_k)}$$

フロー方程式

便利のため、 $\Gamma_\lambda^{(k)}[n](X_1, \dots, X_k)$ の代わりに
 密度相関関数 $G_\lambda^{(n)}(X_1, \dots, X_n) = \frac{\delta^n W_\lambda[\mu_\lambda]}{\delta J(X_1) \dots \delta J(X_n)}$ のフロー方程式にする

TY, Yoshida, Kunihiro, PRC (2019)

運動量表示を使う

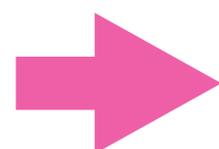
0th
$$\partial_\lambda \frac{E_{\text{gs},\lambda}}{N} = \frac{1}{2n} \int_{\mathbf{p}} \tilde{U}(\mathbf{p}) \left(\int_{\omega} \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) - n \right)$$

1st
$$\partial_\lambda \mu_\lambda = \frac{1}{2\tilde{G}_\lambda^{(2)}(0)} \int_P \tilde{U}(\mathbf{p}) \tilde{G}_\lambda^{(3)}(P, -P) - \frac{1}{2} U(0)$$

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

⋮

無限個の結合した微分方程式...

 **Truncation!**

$$p = (\omega, \mathbf{p}) \quad \int_P = \int_{\omega} \int_{\mathbf{p}} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2}$$

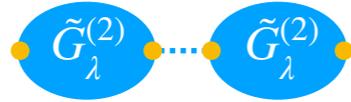
$\tilde{G}_\lambda^{(k)}(P_1, \dots, P_{k-1})$: Fourier trans. of $G_\lambda^{(n)}(X_1, \dots, X_n)$

$\tilde{U}_\lambda(\mathbf{p})$: Fourier trans. of $U_\lambda(\mathbf{x})$

2次の展開の結果

Flow eq.

$$\partial_\lambda \frac{E_{\text{gs},\lambda}}{N} = \frac{1}{2n} \int_{\mathbf{p}} \tilde{U}(\mathbf{p}) \left(\int_{\omega} \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) - n \right)$$



Direct term

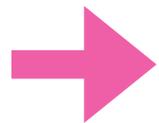
xc term

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

$=: C_\lambda(P) \approx C_0(P)$ Ignore λ -dependence

Solution

$$\tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) = \frac{\tilde{G}_0^{(2)}(P) + \sqrt{C_0(P)/\tilde{U}(\mathbf{p})} \tanh \left(\lambda \sqrt{\tilde{U}(\mathbf{p}) C_0(P)} \right)}{1 + \sqrt{\tilde{U}(\mathbf{p})/C_0(P)} \tilde{G}_0^{(2)}(P) \tanh \left(\lambda \sqrt{\tilde{U}(\mathbf{p}) C_0(P)} \right)}$$



$$\frac{E_{\text{gs},\lambda=1}}{N} = \frac{E_{\text{gs},\lambda=0}}{N} \quad \text{Kinetic } 1/(2r_s^2)$$

$$+ \frac{1}{2n} \int_{\mathbf{p}} \tilde{U}(\mathbf{p}) \left(\int_{\omega} \tilde{G}_0^{(2)}(P) - n \right) \quad \text{Exchange } -4\sqrt{2}/(3\pi r_s)$$

$$+ \frac{1}{2n} \int_P \left(\ln \left[\cosh \left(\sqrt{\tilde{U}(\mathbf{p}) C_0(P)} \right) + \sqrt{\frac{\tilde{U}(\mathbf{p})}{C_0(P)}} \tilde{G}_0^{(2)}(P) \sinh \left(\sqrt{\tilde{U}(\mathbf{p}) C_0(P)} \right) \right] - \tilde{U}(\mathbf{p}) \tilde{G}_0^{(2)}(P) \right)$$

Correlation E_{corr}/N

高密度極限 ($r_s \rightarrow 0$)

$$\frac{E_{\text{corr}}}{N} = \frac{1}{2n} \int_P \left(\ln \left[\cosh \left(\sqrt{\tilde{U}(\mathbf{p})C_0(P)} \right) + \sqrt{\frac{\tilde{U}(\mathbf{p})}{C_0(P)}} \tilde{G}_0^{(2)}(P) \sinh \left(\sqrt{\tilde{U}(\mathbf{p})C_0(P)} \right) \right] - \tilde{U}(\mathbf{p})\tilde{G}_0^{(2)}(P) \right)$$

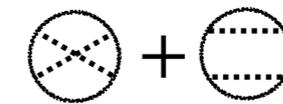
$C_0, \tilde{G}_0^{(2)}$ の r_s に対する依存性: $C_0(\omega, \mathbf{p}; r_s) = r_s C_0(r_s^2 \omega, r_s \mathbf{p}; 1)$ Wigner-Seitz radius
 $\tilde{G}_0^{(2)}(\omega, \mathbf{p}; r_s) = \tilde{G}_0^{(2)}(r_s^2 \omega, r_s \mathbf{p}; 1)$ $r_s = 1/\sqrt{\pi n}$

よって

$$\frac{E_{\text{corr}}}{N} = \frac{1}{2n} \int_P \left(\ln \left[1 + \tilde{U}(\mathbf{p})\tilde{G}_0^{(2)}(\omega, \mathbf{p}) \right] - \tilde{U}(\mathbf{p})\tilde{G}_0^{(2)}(\omega, \mathbf{p}) \right) + \frac{1}{4n} \int_P \tilde{U}(\mathbf{p})C_0(\omega, \mathbf{p}) + \mathcal{O}(r_s)$$



RPA



2nd-order ex.

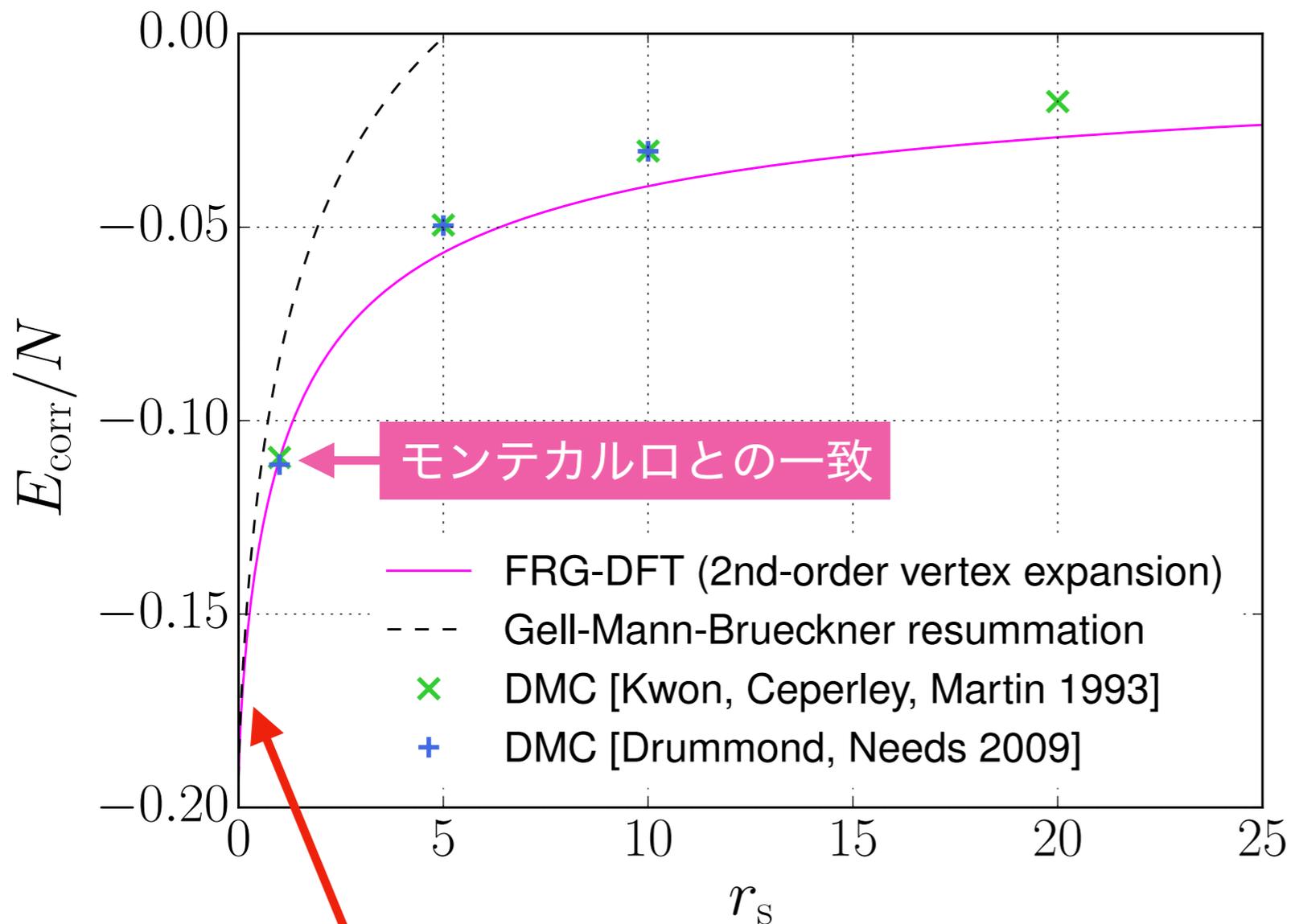
Gell-Mann-Brueckner (GB) resum.!!

Gell-Mann, Brueckner, PR (1957)
Rajagopal, Kimball, PRB (1977)

- GB resum. による高密度極限 ($r_s \rightarrow 0$) の厳密な結果を再現!!
- GB resum. では取り入れられていない r_s の高次項も含まれる。

➡ **少なくとも高密度では良い近似!!**

Result at $\zeta = 0$



高密度極限での厳密な結果を再現!!

FRG-DFTは高密度で厳密な結果、
モンテカルロの結果と一致!!

TY, Naito, PRB (2019)

相関エネルギー

$$\frac{E_{gs}}{N} = \underbrace{\frac{1}{2r_s^2}}_{\text{Kinetic}} - \underbrace{\frac{4\sqrt{2}}{3\pi}}_{\text{Exchange}} \frac{1}{r_s} + \underbrace{\frac{E_{corr}}{N}}_{\text{Correlation}}$$

Wigner-Seitz 半径

$$n = \frac{1}{\pi r_s^2}$$

金属中での典型的なスケール:
 $r_s \leq 10 \text{ a.u.}$

拡散モンテカルロ法 (DMC) の

結果は以下の論文

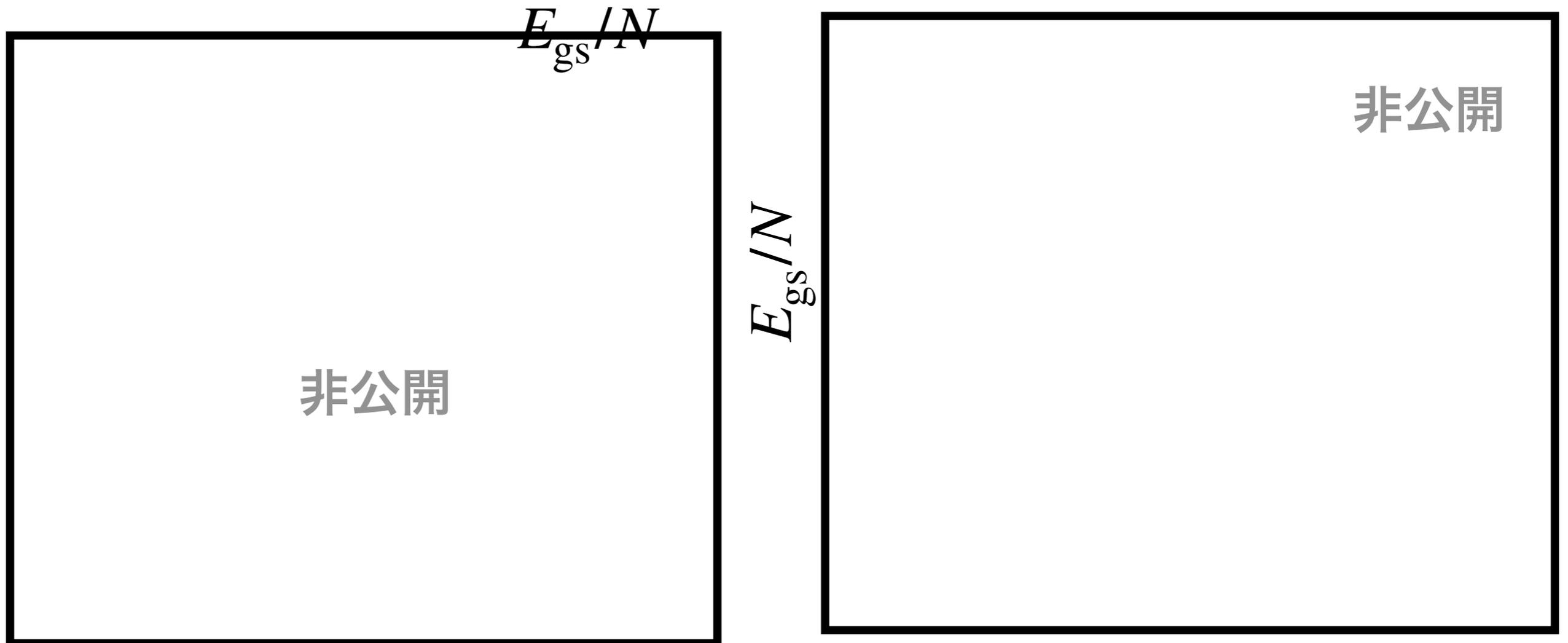
Kwon, Ceperley, Martin, PRB (1993)
Drummond, Needs, PRB (2009)

任意のスピン偏極がある系 (preliminary)

普通, EDFのスピン偏極 ζ 依存性は適当に仮定されている。

しかし、任意の ζ でFRG-DFTの計算を達成し、**フィッティングなし**で依存性を導いた!!

TY, Naito, in progress



近似の精度を上げるためのアイデア

$$\partial_\lambda \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) = -\tilde{U}(\mathbf{p})\tilde{G}_\lambda^{(2)}(P)^2 - \frac{1}{2} \int_{P'} \tilde{U}(\mathbf{p}') \left(\tilde{G}_\lambda^{(4)}(P', -P', P) - \frac{\tilde{G}_\lambda^{(3)}(P', -P')\tilde{G}_\lambda^{(3)}(P, -P)}{\tilde{G}_\lambda^{(2)}(0)} \right) \quad =: C_\lambda(P)$$

$\zeta \rightarrow 1$ となり電子が同一のスピンを持つと、パウリ排他律の効果大きいだろう

しかし、 $C_\lambda(P) \approx C_0(P)$ という近似はパウリ排他律からのある条件を壊す!

Strategy

パウリブロッキングを考慮した近似

Kemler, Pospiech, Braun, JPG (2017)

簡単のため $\zeta=1$ を考える。

(TY, Yoshida, Kunihiro, PRC (2019)

でもすでに取り入れた)

二粒子分布関数

$$f_{2,\lambda}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int_P e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) + n^2 - n\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rightarrow 0, (\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') \quad \text{Pauli blocking!}$$

$$\rightarrow \partial_\lambda \int_P \tilde{G}_\lambda^{(2)}(P) = 0 \quad \rightarrow \int_P C_\lambda(P) = \int_P \tilde{U}(\mathbf{p})\tilde{G}_\lambda^{(2)}(P)^2$$

この条件を保つために、 $C_0(P)$ を以下のように近似する

$$C_\lambda(P) \approx c_\lambda C_0(P) \quad c_\lambda = \frac{\int_P \tilde{U}(\mathbf{p})\tilde{G}_\lambda^{(2)}(P)^2}{\int_P C_0(P)}$$

numerical calculation in progress...

まとめ

汎関数くりこみ群に基づいた密度汎関数理論 (FRG-DFT) を発展させた

2019

(1+1)次元無限核物質の基底状態

TY, Yoshida, Kunihiro, PRC (2019)

(1+1)次元無限核物質の励起状態

TY, Yoshida, Kunihiro, PTEP (2019)

(2+1)次元一様電子ガス (2DHEG, 無偏極)

TY, Naito, PRB (2019)

任意のスピン偏極のある2DHEG

TY, Naito, in progress

- 2次元系以上の系への初の適用
- 内部自由度に偏りがある系への初の適用
- 長距離力への初の適用

展望

偏極した2次元電子ガスでの精度の向上

(パウリブロッキングの効果の取り入れ) TY, Naito, in progress

3次元電子ガス

クーロンの場合はおそらく2Dと同様の計算コスト

有限温度DFT

超流動系

TY, Kasuya, Yoshida, Kunihiro, in progress

非一様系