講演番号31

汎関数くり込み群に基づく超流動系の密度汎関数理論

横田猛[1], 加須屋春樹[2], 吉田賢市[3], 国広悌二[2]
T. Yokota, H. Kasuya, K. Yoshida, and T. Kunihiro, arXiv:2008.05919
[1]東京大学 物性研究所, [2]京都大学 基礎物理学研究所, [3]京都大学 理学研究科

粒子数密度というたったひとつの尺度で量子多体系が記述されうることを保証する密度汎関数理論においても、見たい現象に応じて複数の尺度を持つことは効果的である。実際、超流動性などの自発的対称性の破れを伴う現象は、密度汎関数理論において粒子数密度の他に秩序変数に対応するペア密度などの新たな尺度を陽に含めることで、効率的に記述されてきた。構成粒子間の相互作用から第一原理的に密度汎関数理論を構成する試みの1つに、汎関数くり込み群に基づく密度汎関数理論（FRG-DFT）がある。FRG-DFTにおいてこれまで、自発的対称性の破れを伴う現象がどのように記述されるかはわかっていなかった。今回我々は、非局所ペア密度場を陽に考慮することにより、FRG-DFTを局所性や対称性に仮定を置かない一般のペアリングを伴う超流動系の記述可能な枠組みに拡張し、密度とペア密度に対するエネルギー汎関数を決めるフロー方程式およびKohn-Shamポテンシャルの厳密な表式を導出する。

1.超流動系に対する有効作用

Fukuda, Kotani, Suzuki, Yokojima, PTP92, 833 (1994).
Inagaki, Fukuda, PRB46, 10931 (1992).

ペア密度という尺度の導入

Non-relativistic fermion ψ with the action

$\xi = (\tau, \boldsymbol{x}, a)$ τ: imaginary time, $\boldsymbol{x}$: spatial coordinate, a: internal dof.

$$S[\psi,\psi^*] = \int_\xi \psi^*(\xi_\epsilon)\left(\partial_\tau - \frac{\Delta}{2} + \mathcal{V}(\xi)\right)\psi(\xi) + \frac{1}{2}\int_{\xi\xi'} \mathcal{U}(\xi,\xi')\psi^*(\xi_\epsilon)\psi^*(\xi'_\epsilon)\psi(\xi')\psi(\xi)$$

$\int_\xi = \Sigma_a \int_0^\beta d\tau \int d\boldsymbol{x}$

$\xi_\epsilon = (\tau+\epsilon, \boldsymbol{x}, a)$ ϵ: positive infinitesimal determining time-ordering; External potential; Two-body interaction

Particle-number and (nonlocal) pairing density fields: $\{\hat\rho_i(\cdot)\}_{i=\rho,\kappa,\kappa^*} = \{\psi^*(\xi_\epsilon)\psi(\xi), \psi(\xi)\psi(\xi'), \psi^*(\xi'_\epsilon)\psi^*(\xi_\epsilon)\}$

External sources: $\{J^i(\cdot)\}_{i=\rho,\kappa,\kappa^*} = \{J^\rho(\xi), J^\kappa(\xi,\xi'), J^{\kappa^*}(\xi,\xi')\}$

$$W\left[\vec J = (J^\rho, J^\kappa, J^{\kappa^*})\right] = \ln Z\left[\vec J\right] = \ln \int \mathcal{D}\psi\mathcal{D}\psi^* e^{-S[\psi,\psi^*] + \int_\xi J^\rho(\xi)\hat\rho_\rho(\xi) + \int_{\xi\xi'} J^\kappa(\xi,\xi')\hat\rho_\kappa(\xi,\xi') + \int_{\xi\xi'} J^{\kappa^*}(\xi,\xi')\hat\rho_{\kappa^*}(\xi,\xi')}$$

Legendre trans. ➡

Effective action: $$\Gamma[\vec\rho = (\rho,\kappa,\kappa^*)] = \sup_{\vec J}\left\{\int \vec J(\cdot)\cdot\vec\rho(\cdot) - W\left[\vec J\right]\right\}$$

$\int \vec J(\cdot)\cdot\vec\rho(\cdot) = \int_\xi J^\rho(\xi)\rho(\xi) + \int_{\xi\xi'} J^\kappa(\xi,\xi')\kappa(\xi,\xi') + \int_{\xi\xi'} J^{\kappa^*}(\xi,\xi')\kappa^*(\xi,\xi')$

2.超流動系の密度汎関数理論

Γ[ρ]は有限温度の超流動系に対するHohenberg-Kohnの定理を満たす

● Variational principle

δ, δ': infinitesimal

Quantum EOM under artificial external fields (generalized chemical potentials) $\{\mu^i(\cdot)\}_{i=\rho,\kappa,\kappa^*} = \{\mu_a, \delta, \delta'\}$

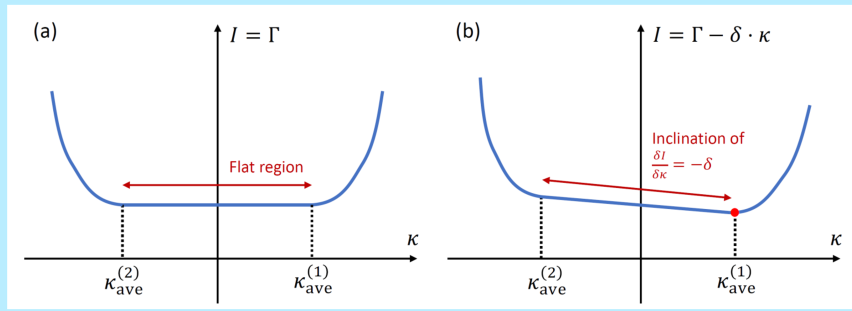
$$\frac{\delta}{\delta\rho_i}\left\{\Gamma[\vec\rho] - \int\vec\mu(\cdot)\cdot\vec\rho(\cdot)\right\} = 0 \quad ➡ \quad \rho_{\mathrm{ave},i}(\cdot) = \frac{1}{Z[\vec\mu]}\int \mathcal{D}\psi\mathcal{D}\psi^*\hat\rho_i(\cdot)e^{-S[\psi,\psi^*] + \int\vec\mu(1)\cdot\vec{\hat\rho}(1)}$$

$\int\vec\mu(\cdot)\cdot\vec\rho(\cdot) = \Sigma_a\mu_a\int_{X=(\tau,\boldsymbol{x})}\rho(\xi) + \delta\int_{\xi\xi'}\kappa(\xi,\xi') + \delta'\int_{\xi\xi'}\kappa^*(\xi,\xi')$

equilibrium densities with a given chemical potentials $\vec\mu$

● One-to-one map between the external fields and the equilibrium densities

- Linear dependence on $\mathcal{V}$: $\Gamma[\vec\rho] = \int_\xi \mathcal{V}(\xi)\rho(\xi) + \Gamma|_{\mathcal{V}=0}[\vec\rho]$.
- $\mathrm{I}[\vec\rho] = \Gamma[\vec\rho] - \int\vec\mu(\cdot)\cdot\vec\rho(\cdot)$ is strictly convex thanks to δ.



➡ $(\mathcal{V}(\xi), 0, 0) - \vec\mu \xleftrightarrow{\text{one to one}} \vec\rho_{\mathrm{ave}}$

Helmholtz free-energy density functional: $$F_{\mathrm{H}}[\vec\rho] = \frac{\Gamma[\vec\rho]}{\beta}$$

In fact,

$$\frac{\Gamma[\vec\rho_{\mathrm{ave}}]}{\beta} \xrightarrow{\mu\to(\mu_a,0,0)} \frac{1}{\beta}\int_\xi \mu_a\rho_{\mathrm{ave}}(\xi) - \frac{1}{\beta}\ln Z[\vec\mu = (\mu_a,0,0)]$$: Helmholtz free energy

Chemical potential × average particle # + Grand potential $\Omega[\vec\mu]$ ➡ EDF: $E[\vec\rho] = \lim_{\beta\to\infty}\frac{\Gamma[\vec\rho]}{\beta}$

3.有効作用に対するフロー方程式

Polonyi, Sailer, PRB66, 155113 (2002).
Yokota, Yoshida, Kunihiro, PRC99, 024302 (2019).

現実の系と相互作用のない系をつなぐ

Flow parameter $\lambda \in [0:1]$ $\quad \mathcal{U}_{\lambda=1}(\xi,\xi') = \mathcal{U}(\xi,\xi'), \quad \mathcal{U}_{\lambda=0}(\xi,\xi') = 0$

$$S_\lambda[\psi,\psi^*] = \int_\xi \psi^*(\xi_\epsilon)\left(\partial_\tau - \frac{\Delta}{2} + \mathcal{V}(\xi)\right)\psi(\xi) + \frac{1}{2}\int_{\xi\xi'}\mathcal{U}_\lambda(\xi,\xi')\psi^*(\xi_\epsilon)\psi^*(\xi'_\epsilon)\psi(\xi')\psi(\xi)$$

➡ $W_\lambda\left[\vec J\right] = \ln\int\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\psi^* e^{-S_\lambda[\psi,\psi^*] + \int\vec J(\cdot)\cdot\vec{\hat\rho}(\cdot)}$ ➡ $\Gamma_\lambda[\vec\rho] = \sup_{\vec J}\left\{\int\vec J(\cdot)\cdot\vec\rho(\cdot) - W_\lambda\left[\vec J\right]\right\}$

Flow equation for $\Gamma_\lambda[\vec\rho]$:

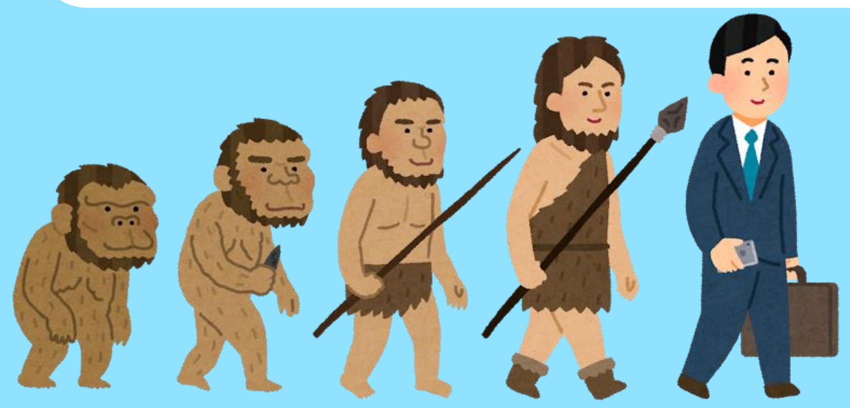
$$\partial_\lambda\Gamma_\lambda[\vec\rho] = \frac{1}{2}\int_{\xi_1\xi_2}\partial_\lambda\mathcal{U}_\lambda(\xi_1,\xi_2)\left\{\rho(\xi_1)\rho(\xi_2) + \kappa(\xi_1,\xi_2)\kappa^*(\xi_1,\xi_2) + G^{(2)}_{\mathrm{xc},\lambda}[\vec\rho](\xi_1,\xi_2)\right\}$$

Hartree / Pairing / Exchange-correlation

Exact and closed equation for $\Gamma_\lambda[\vec\rho]$!

$G^{(2)}_{\mathrm{xc},\lambda}[\vec\rho](\xi_1,\xi_2) = G^{(2)}_{\mathrm{x}}[\vec\rho](\xi_1,\xi_2) + G^{(2)}_{\mathrm{c},\lambda}[\vec\rho](\xi_1,\xi_2)$,

$G^{(2)}_{\mathrm{c},\lambda}[\vec\rho](\xi_1,\xi_2) = \left(\frac{\delta\Gamma_\lambda}{\delta\vec\rho\delta\vec\rho}\right)^{-1}_{\rho\rho}[\vec\rho](\xi_{1\epsilon},\xi_2) - \left(\frac{\delta\Gamma_{\lambda=0}}{\delta\vec\rho\delta\vec\rho}\right)^{-1}_{\rho\rho}[\vec\rho](\xi_{1\epsilon},\xi_2)$, $G^{(2)}_{\mathrm{x}}[\vec\rho](\xi_1,\xi_2) = \left(\frac{\delta\Gamma_{\lambda=0}}{\delta\vec\rho\delta\vec\rho}\right)^{-1}_{\rho\rho}[\vec\rho](\xi_{1\epsilon},\xi_2) - \kappa(\xi_1,\xi_2)\kappa^*(\xi_1,\xi_2) - \rho(\xi_1)\delta_{a_1a_2}\delta(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)$



4.Kohn-Shamポテンシャル

フローの出発点 ＝Kohn-Shamの参照系

$$\mathcal{V}^i_{\mathrm{KS}}[\vec\rho] := \frac{\delta}{\delta\rho_i}\left(\Gamma_{\lambda=1}[\vec\rho] - \Gamma_{\lambda=0}|_{\mathcal{V}=0}[\vec\rho]\right) \quad ➡ \quad \text{Kohn-Sham eq.} \quad \frac{\delta\Gamma_{\lambda=0}|_{\mathcal{V}=0}[\vec\rho_{\mathrm{ave}}]}{\delta\rho_i} + \mathcal{V}^i_{\mathrm{KS}}[\vec\rho_{\mathrm{ave}}] = \mu^i$$

➡ $$\rho_{\mathrm{ave},i}(\cdot) = \frac{1}{Z_{\lambda=0}|_{\mathcal{V}=0}\left[\vec\mu - \vec{\mathcal{V}}_{\mathrm{KS}}[\vec\rho_{\mathrm{ave}}]\right]}\int\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\psi^*\hat\rho_i(\cdot)e^{-S_{\lambda=0}|_{\mathcal{V}=0}[\psi,\psi^*] + \int(\vec\mu - \vec{\mathcal{V}}_{\mathrm{KS}}[\vec\rho_{\mathrm{ave}}])(1)\cdot\vec{\hat\rho}(1)}$$

Exact Kohn-Sham potential

$\mathcal{V}^i_{\mathrm{KS}}[\vec\rho](\xi \text{ or } (\xi,\xi'))$

$$= \delta_{i\rho}\left[\mathcal{V}(\xi) + \int_{\xi_1}\mathcal{U}_{\lambda=1}(\xi,\xi_1)\rho(\xi_1)\right] + \frac{\delta_{i\kappa}}{2}\mathcal{U}_{\lambda=1}(\xi,\xi')\kappa^*(\xi,\xi') + \frac{\delta_{i\kappa^*}}{2}\mathcal{U}_{\lambda=1}(\xi,\xi')\kappa(\xi,\xi')$$

$$+\frac{1}{2}\int_0^1 d\lambda\int_{\xi_1\xi_2}\partial_\lambda\mathcal{U}_\lambda(\xi_1,\xi_2)\frac{\delta G^{(2)}_{\mathrm{xc},\lambda}[\vec\rho](\xi_1,\xi_2)}{\delta\rho_i(\xi \text{ or } (\xi,\xi'))}$$

cf. Valiev, Fernando, arXiv:9702247 (1997).

FRG-DFTの枠組みの本領は、相関項を系統的に改善する際に発揮される。今後は、先行研究[1,2]でFRG-DFTにおいても威力を発揮している頂点展開などの系統的手法を用いることにより、超流動におけるQRPAを越えた相関の取り入れを目指す。

[1]Yokota, Yoshida, Kunihiro, PTEP2019 ,011D01. [2]Yokota, Naito, PRB99, 115106 (2019).

5.Reduction to the BCS theory

この箱の外に近似なし

● Neglect of the correlation: $G^{(2)}_{\mathrm{xc},\lambda}[\vec\rho] \approx G^{(2)}_{\mathrm{x}}[\vec\rho]$

$$F_H[\vec\rho] \approx \frac{\Gamma_{\lambda=0}|_{\mathcal{V}=0}[\vec\rho]}{\beta} + \frac{1}{\beta}\int_\xi\mathcal{V}(\xi)\rho(\xi)$$
$$+\frac{1}{2\beta}\int_{\xi_1\xi_2}\mathcal{U}(\xi_1,\xi_2)[\rho(\xi_1)\rho(\xi_2) - \rho(\xi_1,\xi_2)\rho(\xi_2,\xi_1) + \kappa(\xi_1,\xi_2)\kappa^*(\xi_1,\xi_2)]$$

$\rho(\xi_1,\xi_2) := \langle\psi^*(\xi_{1\epsilon})\psi(\xi_2)\rangle_{\vec\rho} = \frac{1}{Z[\delta\Gamma_{\lambda=0}[\vec\rho]/\delta\vec\rho]}\int\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\psi^*\psi^*(\xi_{1\epsilon})\psi(\xi_2)e^{-S_{\lambda=0}[\psi,\psi^*] + \int\delta\Gamma_{\lambda=0}[\vec\rho]/\delta\vec\rho(\cdot)\cdot\vec{\hat\rho}(\cdot)}$

● Short-range interaction in the weak coupling: $\mathcal{U}(\xi_1,\xi_2)\rho(\xi_1,\xi_2) \approx \mathcal{U}(\xi_1,\xi_2)\delta_{a_1a_2}\rho(\xi_1)$

$\mathcal{V}^i_{\mathrm{KS}}[\vec\rho](\xi \text{ or } (\xi,\xi'))$

$$\approx \delta_{i\rho}\left[\mathcal{V}(\xi) + \int_{\xi_1}(1-\delta_{aa_1})\mathcal{U}_{\lambda=1}(\xi,\xi_1)\rho(\xi_1)\right] + \frac{\delta_{i\kappa}}{2}\mathcal{U}_{\lambda=1}(\xi,\xi')\kappa^*(\xi,\xi') + \frac{\delta_{i\kappa^*}}{2}\mathcal{U}_{\lambda=1}(\xi,\xi')\kappa(\xi,\xi')$$

● Homogeneous system: $\mathcal{V}(\xi) = 0, \quad \mathcal{U}(\xi,\xi') = \delta(\tau-\tau')U(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$

$\rho^\uparrow_{\mathrm{ave}} = \rho^\downarrow_{\mathrm{ave}} =: \rho_{\mathrm{ave}}/2$, $\quad \kappa^{\uparrow\downarrow}_{\mathrm{ave}}(\tau,\boldsymbol{x}) = -\kappa^{\downarrow\uparrow}_{\mathrm{ave}}(\tau,\boldsymbol{x}) =: \kappa^s_{\mathrm{ave}}(\tau,\boldsymbol{x})$,

$\mathcal{V}^\rho_{\mathrm{KS},\uparrow}[\rho_{\mathrm{ave}}] = \mathcal{V}^\rho_{\mathrm{KS},\downarrow}[\rho_{\mathrm{ave}}] =: \mathcal{V}^\rho_{\mathrm{KS}}$, $\quad \mathcal{V}^\kappa_{\mathrm{KS},\uparrow\downarrow}[\rho_{\mathrm{ave}}](\tau,\boldsymbol{x}) = -\mathcal{V}^\kappa_{\mathrm{KS},\downarrow\uparrow}[\rho_{\mathrm{ave}}](\tau,\boldsymbol{x}) =: \mathcal{V}^{\kappa,S}_{\mathrm{KS}}(\tau,\boldsymbol{x})$.

For $\hat\rho(X) = \sum_{s=\uparrow\downarrow}\psi^*_s(X_\epsilon)\psi_s(X)$ (total particle-number density) and $\hat\kappa^s(X,X') = \frac{1}{2}(\psi_\uparrow(X)\psi_\downarrow(X') - \psi_\downarrow(X)\psi_\uparrow(X'))$ (spin-singlet pairing density),

$$Z_0\left[\vec J\right] = \int\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\psi^* e^{-S_{\lambda=0}[\psi,\psi^*] + J_\rho\int_X\hat\rho(X) + \int_{XX'}J_{\kappa^s}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\delta(\tau-\tau')\hat\kappa^s(X,X') + \int_{XX'}J_{\kappa^s}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')^*\delta(\tau-\tau')\hat\kappa^{s*}(X,X')}$$

$$= \int\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\psi^*\exp\left\{-\int_P\left(\bar\psi_\uparrow^*(P)\ \bar\psi_\downarrow(-P)\right)\begin{bmatrix}\frac{1-e^{i\omega_n\epsilon}}{\epsilon} + \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2} - J_\rho\right)e^{i\omega_n\epsilon} & 2\bar J_{\kappa^s}(\boldsymbol{p})^* \\ 2\bar J_{\kappa^s}(\boldsymbol{p}) & -\frac{1-e^{i\omega_n\epsilon}}{\epsilon} - \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2} - J_\rho\right)e^{-i\omega_n\epsilon}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}\bar\psi_\uparrow(P) \\ \bar\psi_\downarrow^*(-P)\end{pmatrix}\right\}$$

where $P = (\omega_n, \boldsymbol{p})$ with $\omega_n = (2n+1)/\beta$: Matsubara frequency, and $\int_P = \beta^{-1}\Sigma_{\omega_n}\int d\boldsymbol{p}/(2\pi)^3$.

➢ Equilibrium densities $\quad \int_{\boldsymbol{p}} = \int d\boldsymbol{p}/(2\pi)^3$, $\varepsilon(\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{p}^2/2 + \mathcal{V}^\rho_{\mathrm{KS}} - \mu$, $E(\boldsymbol{p}) = \sqrt{\varepsilon(\boldsymbol{p})^2 + |2\bar{\mathcal{V}}^{\kappa,S}_{\mathrm{KS}}(\boldsymbol{p})|^2}$

$$\rho_{\mathrm{ave}} = \int_{\boldsymbol{p}}\left(1 - \frac{\varepsilon(\boldsymbol{p})}{E(\boldsymbol{p})}\tanh\frac{\beta E(\boldsymbol{p})}{2}\right), \quad \kappa^s_{\mathrm{ave}}(0) = \int_{\boldsymbol{p}}\left(\frac{-\bar{\mathcal{V}}^{\kappa,S}_{\mathrm{KS}}(\boldsymbol{p})^*}{E(\boldsymbol{p})}\tanh\frac{\beta E(\boldsymbol{p})}{2}\right)$$

➢ Gap equation

$$\begin{cases}\bar{\mathcal{V}}^{\kappa,S}_{\mathrm{KS}}(\boldsymbol{p}) = -\int_{\boldsymbol{q}}\bar U(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{p})\dfrac{\bar{\mathcal{V}}^{\kappa,S}_{\mathrm{KS}}(\boldsymbol{q})}{2\sqrt{\varepsilon(\boldsymbol{q})^2 + |2\bar{\mathcal{V}}^{\kappa,S}_{\mathrm{KS}}(\boldsymbol{q})|^2}}\tanh\dfrac{\beta\sqrt{\varepsilon(\boldsymbol{q})^2 + |2\bar{\mathcal{V}}^{\kappa,S}_{\mathrm{KS}}(\boldsymbol{q})|^2}}{2} \\ \varepsilon(\boldsymbol{p}) = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2} + \dfrac{1}{2}\bar U(\boldsymbol{0})\rho_{\mathrm{ave}} - \mu\end{cases}$$

➡ Energy gap in the BCS theory: $\Delta(\boldsymbol{p}) = -2\bar{\mathcal{V}}^{\kappa,S}_{\mathrm{KS}}(\boldsymbol{p})^*$