反復摂動法 (IPT) による簡易動的平均場近似

東北大理 楠瀬博明

Abstract

局所多体効果を扱う有用な手法として動的平均場近似 (DMFT) がある。DMFT の計算を実行するためには有効媒質中の局所多体問題を解く必要がある。局所多体問題の解法として最も簡便な方法の一つである反復摂動法 (IPT) を、ハバード模型の場合についてまとめておく。

1. 反復摂動法とは

有効不純物 Anderson 模型を

$$H = \sum_{k\sigma} \left[\epsilon_{k\sigma} c^{\dagger}_{k\sigma} c_{k\sigma} + \left(V c^{\dagger}_{k\sigma} f_{k\sigma} + \text{h.c.} \right) \right] + \left(\epsilon_{f\sigma} - \frac{U}{2} \right) f^{\dagger}_{k\sigma} f_{k\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow}, \quad n_{\sigma} = f^{\dagger}_{\sigma} f_{\sigma} \tag{1}$$

とする。ここで、Zeeman 項を想定して $\epsilon_{k\sigma} = \epsilon_{k} - h_{\sigma}$ とした。この模型の最も簡便な解法として反復摂動法 (Iterative Perturbation Theory; IPT) がある。この方法は、電子正孔対称性がある場合に、相互作用 U についての摂動の収束が非常に早いこと [1] と $U \to \infty$ で原子極限を記述できることに着目して、不純物問題の自己エネルギーを Hartree 解についての 2 次摂動を用いて評価する方法である [2,3]。

その後、電子正孔対称性がない場合にも、適当なパラメータを用いた内挿型の自己エネルギーを仮定して、高振動数極限、原子極限、低振動数極限を再現するようにパラメータを決める方法が提案され、修正 IPT(mIPT) と呼ばれている [4,5]。電子正孔対称性がある場合、修正 IPT はオリジナルの IPT に帰着する。さらに、自己エネルギーだけではなく 2 体相関関数を求める方法も提案されている [6]。

まず、mIPT の解法を説明してから、2 体相関関数を求める方法について述べる。以下の表記はすべて虚時間形式である。

2. (修正)IPT の定式化

2.1. 一粒子グリーン関数

$U = 0$ のグリーン関数は

$$\mathcal{G}^{-1}_{\sigma}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \epsilon_{f\sigma} - V^2 G_{c0\sigma}(i\omega_n) \tag{2}$$

である。ここで、$G_{c0\sigma}(i\omega_n) = (1/N) \sum_{k} (i\omega_n + \mu - \epsilon_{k} + h_{\sigma})^{-1}$。動的平均場近似では、$G_{c0\sigma}(i\omega_n)$、従って、$\mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n)$ は自己無撞着に決まる量で、このグリーン関数を特に cavity グリーン関数と呼ぶ。修正 IPT

では、電荷揺らぎの長時間平均を考慮して f 準位 $\epsilon_{f\sigma}$ を $\epsilon_{f\sigma}+U\delta n_\sigma$ とずらしたゼロ次グリーン関数

$$\overline{\mathcal{G}}_\sigma^{-1}(i\omega_n)=\mathcal{G}^{-1}(i\omega_n)-U\delta n_\sigma \tag{3}$$

を考え、$\overline{\mathcal{G}}_\sigma$ に関する二次の自己エネルギー $\Sigma^{(2)}_{f\sigma}(i\omega_n)$ に基づく内挿型自己エネルギー $\Sigma_{f\sigma}(i\omega_n)$ を用いる。

$\overline{\mathcal{G}}_\sigma$ に関する二次の自己エネルギーは

$$\Sigma^{(2)}_{f\sigma}(i\omega_n)=U^2T\sum_m\overline{\mathcal{G}}_\sigma(i\omega_n+i\epsilon_m)\overline{\chi}_{0-\sigma}(i\epsilon_m)=-U^2\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}\overline{\mathcal{G}}_\sigma(\tau)\overline{\mathcal{G}}_{-\sigma}(\tau)\overline{\mathcal{G}}_{-\sigma}(-\tau) \tag{4}$$

であり、これを用いて内挿型自己エネルギーを

$$\Sigma_{f\sigma}(i\omega_n)=U\left(n_{-\sigma}-\frac{1}{2}\right)+\frac{A_\sigma\Sigma^{(2)}_{f\sigma}(i\omega_n)}{1-(B_\sigma/U)\Sigma^{(2)}_{f\sigma}(i\omega_n)} \tag{5}$$

とする。ここで、多体効果を含めたグリーン関数を

$$G^{-1}_{f\sigma}(i\omega_n)=\mathcal{G}^{-1}_\sigma(i\omega_n)-\Sigma_{f\sigma}(i\omega_n) \tag{6}$$

とし ($\overline{\mathcal{G}}_\sigma$ ではなく $\mathcal{G}_\sigma$ であることに注意)、n_σ は $G_{f\sigma}$ から求まる粒子数密度 $n_\sigma=T\sum_n G_{f\sigma}(i\omega_n)e^{i\omega_n 0_+}$ である。また、$\overline{\chi}_{0\sigma}(i\epsilon_m)=-T\sum_n\overline{\mathcal{G}}_\sigma(i\omega_n+\epsilon_n)\overline{\mathcal{G}}_\sigma(i\omega_n)$ とした。

パラメータ A_σ, B_σ は高振動数極限、原子極限を満たすように決定する。高振動数極限での厳密な $\Sigma_{f\sigma}(i\omega_n)$ の表式は

$$\Sigma_{f\sigma}(i\omega_n)\to U\left(n_{-\sigma}-\frac{1}{2}\right)+\frac{U^2n_{-\sigma}(1-n_{-\sigma})}{i\omega_n},\quad (|\omega_n|\to\infty) \tag{7}$$

である。一方、内挿型自己エネルギーの高振動数極限の表式は

$$\Sigma^{(2)}_{f\sigma}(i\omega_n)\to\frac{U^2n^0_{-\sigma}(1-n^0_{-\sigma})}{i\omega_n},\quad \Sigma_{f\sigma}(i\omega_n)\to U\left(n_{-\sigma}-\frac{1}{2}\right)+A_\sigma\Sigma^{(2)}_{f\sigma}(i\omega_n) \tag{8}$$

となるので、両者を比較して

$$A_\sigma=\frac{U^2n_{-\sigma}(1-n_{-\sigma})}{i\omega_n}\cdot\frac{1}{\Sigma^{(2)}_{f\sigma}(i\omega_n)}=\frac{n_{-\sigma}(1-n_{-\sigma})}{n^0_{-\sigma}(1-n^0_{-\sigma})} \tag{9}$$

を得る。ここで、$n^0_\sigma=T\sum_n\overline{\mathcal{G}}_\sigma(i\omega_n)e^{i\omega_n 0_+}$ とした。

原子極限での厳密な表式は

$$\Sigma_{f\sigma}(i\omega_n)\to U\left(n_{-\sigma}-\frac{1}{2}\right)+\frac{U^2n_{-\sigma}(1-n_{-\sigma})}{i\omega_n+\mu-(\epsilon_{f\sigma}+U)+Un_{-\sigma}},\quad (V=0) \tag{10}$$

であり、内挿型自己エネルギーの原子極限の表式は

$$\begin{aligned}\Sigma^{(2)}_{f\sigma}(i\omega_n)&\to\frac{U^2n^0_{-\sigma}(1-n^0_{-\sigma})}{i\omega_n+\mu-\epsilon_{f\sigma}-U\delta n_\sigma},\\ \Sigma_{f\sigma}(i\omega_n)&\to U\left(n_{-\sigma}-\frac{1}{2}\right)+\frac{A_\sigma U^2n^0_{-\sigma}(1-n^0_{-\sigma})}{i\omega_n+\mu-\epsilon_{f\sigma}-U\delta n_\sigma-B_\sigma Un^0_{-\sigma}(1-n^0_{-\sigma})}\end{aligned} \tag{11}$$

となる。両者を比較して

$$B_\sigma = \frac{1/2 - n_{-\sigma} - \delta n_\sigma}{n^0_{-\sigma}(1 - n^0_{-\sigma})} \tag{12}$$

を得る。

パラメータ δn_σ を決定するためには、もう一つ条件が必要である。3 つの条件が提案されており、その優劣が議論されている [5]。

(i) $\delta n_\sigma = 0$

(ii) $n_\sigma = n^0_\sigma$

(iii) $\mathrm{Tr}\left[\frac{\partial\Sigma_\sigma(z)}{\partial z}G_\sigma(z)\right] = 0$, or $\int_{-\infty}^{\infty} f(\omega)\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left(\frac{\partial\Sigma_\sigma(\omega)}{\partial\omega}G_\sigma(\omega)\right)\right] = 0$, $\Sigma_\sigma(z) = \Sigma_{f\sigma}(z) + V^2 G_{c0\sigma}(z)$

(i) は f 準位のシフトを Hartree 項だけに限るものであるが、あまり良い結果を与えない。(ii), (iii) は、ほぼ同じ結果を与える。前者は取り扱いが簡単で使いやすいが、物理的な根拠がない。(iii) は $T = 0$ のとき、ラッティンジャー和則 (フリーデル和則) に帰着する関係式であるが、有限温度の場合の取り扱いが面倒である。half-filled に近い場合、条件 (ii) を用いた結果は、条件 (iii) を用いたものによく一致することが経験的に知られている [5]。あまりシビアな精度が要求されないのであれば、(ii) が最も便利な条件であろう。また、電子正孔対称性がある場合、$n_\sigma = n^0_\sigma = 1/2$、$\delta n_\sigma = 0$、すなわち、$A_\sigma = 1$、$B_\sigma = 0$ であり、シフトは Hartree 項となってオリジナルの 2 次摂動を用いる IPT に帰着する。

条件 (ii) を用いると、$A_\sigma = 1, B_\sigma = (1/2 - n^0_{-\sigma} - \delta n_\sigma)/(n^0_{-\sigma}(1 - n^0_{-\sigma}))$ となり、δn_σ に関する非線形方程式を解く問題に簡略化される。この非線形方程式は次のようにすれば簡単に解ける。まず、初期条件として、対称条件 $\delta n_\sigma = 0$ を用いる。δn_σ が与えられると n^0_σ は簡単に計算できるので、(2.4) 式で $n_{-\sigma} \to n^0_{-\sigma}$ として、自己エネルギーを求める。この自己エネルギーを用いてグリーン関数を計算し、粒子数 n_σ を求める。経験的に $\mathrm{sgn}(\delta n^{(\mathrm{new})}_\sigma - \delta n^{(\mathrm{old})}_\sigma) = \mathrm{sgn}(n^0_\sigma - n_\sigma)$ が成り立つので、$\delta n^{(\mathrm{new})}_\sigma = \delta n^{(\mathrm{old})}_\sigma + \epsilon_\sigma$ とすれば、$\epsilon_\sigma = a(n^0_\sigma - n_\sigma), a > 0$ である。$a \sim 0.1$ として δn_σ を更新し、上記の手順を $|n_\sigma - n^0_\sigma|$ が必要精度となるまで繰り返せばよい。

2.2. 2 体相関関数

磁場がない場合 σ 依存性はなく、自己エネルギーおよび 2 体相関関数におけるバーテックス関数の波数依存性を無視する近似では

$$\Sigma_f(i\omega_n) = \frac{U}{2}(n-1) + \frac{U}{2}T\sum_m \left[\chi_{\mathrm{sp}}(i\omega_n; i\epsilon_m) - \chi_{\mathrm{ch}}(i\omega_n; i\epsilon_m)\right]\frac{G_f(i\omega_n + i\epsilon_m)}{-G_f(\omega_n)G_f(i\omega_n + i\epsilon_m)} \tag{13}$$

の関係が成り立つ [6]。ここで、$\chi_\alpha(i\omega_n; i\epsilon_m) = T\sum_{n'}\chi_\alpha(i\omega_n, i\omega'_n; i\epsilon_m)$ である。この式と (2.3), (2.4) 式を見比べると

$$\chi_{\mathrm{sp}}(i\epsilon_m) - \chi_{\mathrm{ch}}(i\epsilon_m) = -\overline{\chi}_0(i\epsilon_m)T\sum_n K(i\omega_n)\frac{1}{2}\left[\overline{\mathcal{G}}(i\omega_n + i\epsilon_m) + \overline{\mathcal{G}}(i\omega_n - i\epsilon_m)\right] \tag{14}$$

の関係を得る。ここで、$n = n_\uparrow + n_\downarrow$, $K(i\omega_n) = 2UAG_f(i\omega_n)/[1 - (B/U)\Sigma^{(2)}_f(i\omega_n)]$ とおいた。また、$\chi_\alpha(i\epsilon_m) = T\sum_n \chi_\alpha(i\omega_n; i\epsilon_m)$ である。右辺は IPT で求めることのできる量だけから計算できる。

強相関系では電荷の揺らぎは小さいので、電荷感受率を

$$\chi_{\rm ch}(i\epsilon_m) = \frac{\chi_0(i\epsilon_m)}{1+U_{\rm ch}\chi_0(i\epsilon_m)} \tag{15}$$

と仮定しよう。ここで、$\chi_0(\epsilon_m) = -T\sum_n G_{f\sigma}(i\omega_n)G_{f\sigma}(i\omega_n+i\epsilon_m)$ である。パラメータ $U_{\rm ch}$ は局所モーメント和則を満たすように決める。すなわち

$$T\sum_m \chi_{\rm ch}(i\epsilon_m) = d + \frac{n}{2}(1-n) \tag{16}$$

二重占有率 d は

$$d = n_\uparrow n_\downarrow + \frac{T}{2U}\sum_{n\sigma}\left[\Sigma_{f\sigma}(i\omega_n) - Un_{-\sigma}\right]G_{f\sigma}(i\omega_n) \tag{17}$$

より求まる。こうして、電荷感受率を求めれば (2.13) を用いて $\chi_{\rm sp}(i\epsilon_m)$ を IPT の範囲内で求めることができる。

References

[1] K. Yamada, Prog. Theor. Phys. **53** 970 (1975).

[2] A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. B **45** 6479 (1992).

[3] M. J. Rozenberg, G. Kotliar and X. Y. Zhang, Phys. Rev. B **49** 10181 (1994).

[4] H. Kajueter and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **77** 131 (1996); H. Kajueter, G. Kotliar and G. Moeller, Phys. Rev. B **53** 16214 (1996).

[5] M. Potthoff, T. Wegner and W. Nolting, Phys. Rev. B **55** 16132 (1997).

[6] H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. **75** 054713 (2006).