

# Self-energy Functional Theory による動的平均場

東北大理 楠瀬博明

## Abstract

M. Potthoff [1,2] によって提唱された自己エネルギー汎関数理論に基づいて、動的平均場の計算を行うために必要な事項を簡単にまとめておく。最も簡単な場合として、half-filled の Hubbard 模型について、相関 1 サイト + バス 1 サイトの代理系を用いた場合を扱う。

## 1. Self-energy Functional Theory (SFT)

まず、一体のグリーン関数  $\hat{G}$  の汎関数として熱力学ポテンシャル

$$\Omega[\hat{G}] = \text{Tr} \ln(-\hat{G}) - \text{Tr} \left( (\hat{G}_0^{-1} - \hat{G}^{-1}) \hat{G} \right) + \Phi[\hat{G}] \quad (1)$$

を考える。ここで、 $\hat{A}$  はサイトやスピンなどすべての添え字と (虚) 時間または振動数についての行列を表す。Tr はこれらすべてに関して取るものとする。Luttinger-Ward の汎関数  $\Phi$  は自己エネルギー  $\Sigma[\hat{G}]$  と、 $\Sigma[\hat{G}] = \beta \delta \Phi / \delta \hat{G}$  のように関係づけられる。 $\Omega$  が  $\hat{G}$  について停留値となるときの Dyson 方程式が得られるため、適当な  $\Phi$  を用いて  $\hat{G}$  に関する停留点を見つけるという一種の変分法を考えることができる。 $\Phi$  として繰り込まれた  $\hat{G}$  を用いた RPA+ ラダールのダイアグラムをとると、いわゆる FLEX 近似となる。

$\hat{G}$  の変分を考えると、どうしてもスケルトン・ダイアグラムを用いた摂動展開による weak-coupling な理論となるため、 $\hat{\Sigma}$  に関する変分法を考えるというのが Potthoff のアイデアである。このために、 $\Phi$  の Legendre 変換  $F[\hat{\Sigma}] = \Phi[\hat{G}(\hat{\Sigma})] - \text{Tr} \left( \hat{\Sigma} \hat{G}(\hat{\Sigma}) \right)$  を考えると

$$\Omega[\hat{\Sigma}] = \text{Tr} \ln \left( -(\hat{G}_0^{-1}(\hat{t}) - \hat{\Sigma})^{-1} \right) + F[\hat{\Sigma}] \quad (2)$$

となり、 $\hat{G} = -\beta \delta F / \delta \hat{\Sigma}$  から、 $\delta \Omega / \delta \hat{\Sigma} = 0$  のとき Dyson 方程式が得られることが示される。

さて、問題は  $F[\hat{\Sigma}]$  をどうやって選ぶか、である。相関が強い系では、自己エネルギーの短距離成分が重要となるので、小さなクラスターを解いて得られる自己エネルギーが、オリジナルな系の自己エネルギーのよい近似となることが期待される。Potthoff は、クラスター問題に含まれる相互作用はオリジナルと同じにしておき、ホッピング  $\hat{t}$  (一体のエネルギー準位も含める) のみ  $\hat{t}'$  と変更した代理系を用いることを提案した。代理系に対する (2) は

$$\Omega[\hat{\Sigma}; \hat{t}'] = \text{Tr} \ln \left( -(\hat{G}_0^{-1}(\hat{t}') - \hat{\Sigma})^{-1} \right) + F[\hat{\Sigma}] \quad (3)$$

と書ける。 $F[\hat{\Sigma}]$  は相互作用と  $\hat{\Sigma}$  のみに顕わに依存し、(2) と (3) で共通であることが重要である。そこで、(2) と (3) から  $F[\hat{\Sigma}]$  を消去すれば

$$\Omega[\hat{\Sigma}] = \Omega[\hat{\Sigma}; \hat{t}'] + \text{Tr} \ln \left( -(\hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma})^{-1} \right) - \text{Tr} \ln \left( -(\hat{G}_0^{-1}(\hat{t}') - \hat{\Sigma})^{-1} \right) \quad (4)$$

を得る。与えられた  $\hat{t}'$  に対して  $\Omega$  を最小にする  $\hat{\Sigma}$  を  $\hat{\Sigma}(\hat{t}')$  と書くことにすれば、停留点での熱力学ポテンシャル  $\Omega(\hat{t}') \equiv \Omega[\hat{\Sigma}(\hat{t}')]$  は

$$\Omega(\hat{t}') = \Omega' + \text{Tr} \ln \left( -(\hat{G}_0^{-1}(\hat{t}) - \hat{\Sigma}')^{-1} \right) - \text{Tr} \ln \left( -\hat{G}' \right) \quad (5)$$

と表される。ここで、代理系の量を  $\hat{\Sigma}' = \hat{\Sigma}(\hat{t}')$ ,  $\Omega' \equiv \Omega[\hat{\Sigma}'; \hat{t}']$ ,  $\hat{G}' \equiv (\hat{G}_0^{-1}(\hat{t}') - \hat{\Sigma}')^{-1}$  とおいた。ここで現れた自己エネルギー  $\hat{\Sigma}(\hat{t}')$  が代理系の自己エネルギーであると見なすところに近似がある。こうして得られたオリジナル系の近似的な  $\Omega(\hat{t}')$  は、代理系の量とオリジナル系のホッピング  $\hat{t}$  のみで書いており計算可能である。ベストな代理系は、ホッピング・パラメータ  $\hat{t}'$  について  $\Omega(\hat{t}')$  を最小化する条件から決定する。

以後、オリジナル系の近似グリーン関数を  $\hat{G} \equiv (\hat{G}_0^{-1}(\hat{t}) - \hat{\Sigma}')^{-1}$  と書くことにする。詳細な導出は文献 [2] に譲り結果のみを示すと、熱力学ポテンシャルは

$$\Omega = -T \sum_k \sum_i \ln(1 + e^{-\omega_i(k)/T}) + \frac{2L}{N_c} \left[ \Omega'_c + T \sum_i \ln(1 + e^{-\omega'_i/T}) \right] \quad (6)$$

と書ける。ここで、 $k$  はオリジナル系の量子数 ( $2L$  個) で、並進対称な系では波数とスピン  $k = (\mathbf{k}, \sigma)$  である。 $\omega_i(k)$  は  $\hat{G}$  のすべての極、 $\omega'_i$  は  $\hat{G}'$  のすべての極を表す。 $N_c$  は代理系の中の相互作用のあるサイトの数である。ただし、 $2L/N_c$  個のすべての代理系は等価であるとした。すなわち、 $\Omega' = 2L\Omega'_c/N_c$  である。従って、与えられた  $\hat{t}'$  に対して代理系を解いて  $\Omega'_c$  と  $\omega'_i$  を求め、それを用いて  $\omega_i(k)$  を求めることができればよい。

## 2. 相関 1 + バス 1 の場合

最も簡単な例として、Hubbard 模型の half-filled (常磁性状態) を想定し、オリジナル系の各サイトを、相関のある (c) サイト一つ ( $N_c = 1$ ) と「伝導電子」サイト (b) 一つの代理系で近似する場合 (局所近似) を考える。この場合、自己エネルギーは  $\hat{\Sigma}' \rightarrow \Sigma(i\omega_n)$  とサイト依存性がない。代理系のハミルトニアンを

$$H'_c = \sum_{\sigma} \epsilon_c c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + \sum_{\sigma} \epsilon_b b_{\sigma}^{\dagger} b_{\sigma} + \sum_{\sigma} (V c_{\sigma}^{\dagger} b_{\sigma} + \text{h.c.}) \quad (7)$$

とする。 $n_{\sigma} = c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma}$ 。half-filled で、電子ホール対称性がある場合には、 $\epsilon_c = 0$ ,  $\epsilon_b = \mu = U/2$  であり、変分パラメータは  $V$  のみとなる。式 (6) の各量は

$$\sum_k \rightarrow 2L \int d\epsilon \rho_0(\epsilon), \quad \rho_0(\epsilon) \equiv \frac{1}{2L} \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k) \quad (8)$$

$$\hat{G}(i\omega_n) \rightarrow (i\omega_n + \mu - \epsilon - \Sigma(i\omega_n))^{-1}, \quad \Rightarrow \omega_i(\epsilon) \quad (9)$$

$$\hat{G}'(i\omega_n) \rightarrow \begin{pmatrix} i\omega_n + \mu - \epsilon_c - \Sigma'(i\omega_n) & -V \\ -V & i\omega_n + \mu - \epsilon_b \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} G'_{cc} & G'_{cb} \\ G'_{bc} & G'_{bb} \end{pmatrix}, \quad \Rightarrow \omega'_i \quad (10)$$

$$\Omega'_c = -T \ln Z', \quad (H' - \mu N')|n\rangle = E'_n|n\rangle, \quad Z' = \sum_n e^{-E'_n/T} \quad (11)$$

となり、以下に示すように求めることができる。 $U = 0$  の状態密度については、例えば半楕円  $\rho_0(\epsilon) = 2\sqrt{1 - (\epsilon/W)^2}/\pi W$  ( $|\epsilon| < W$ ,  $\int d\epsilon \rho_0 = 1$ ) などを用いる。

## 2.1. 代理系の対角化と $G'$

まず、代理系  $H' - \mu N'$  を数値的に対角化 (ハミルトニアン of 行列要素は付録 A を参照のこと。) し、 $E'_n$  および  $|n\rangle = \sum_{\alpha} U_{\alpha n} |\alpha\rangle$  を求める。これを用いて、 $G'$  の  $c$  成分 (スピン  $\sigma$ ) は

$$G'_{cc}(\omega) = \frac{1}{Z'} \sum_{mn} \frac{e^{-E'_m/T} + e^{-E'_n/T}}{\omega - E'_m + E'_n} |\langle m | c_{\sigma}^{\dagger} | n \rangle|^2 \equiv \sum_i \frac{A'_i}{\omega - \omega'_i} \quad (12)$$

より計算できる。ここで、 $\langle m | c_{\sigma}^{\dagger} | n \rangle = \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha m} U_{\beta n} \langle \alpha | c_{\sigma}^{\dagger} | \beta \rangle$  である。 $\hat{G}'$  のすべての極は  $G'_{cc}$  の極  $\omega'_i$  ( $A'_i \neq 0$ ) と同じである。ただし、 $V = 0$  の場合は、 $G'_{cc}$  の極に、 $G'_{bb}$  の極  $\epsilon_b - \mu$  を加える必要がある。この時点で、 $\Omega'_c$  と  $\omega'_i$  が得られる。

## 2.2. 近似自己エネルギー: $\Sigma'$

前節の  $G'_{cc}(\omega)$  より、自己エネルギー  $\Sigma'(\omega)$  を求める。式 (10) より、

$$\Sigma'(\omega) = \omega + \mu - \epsilon_c - \frac{V^2}{\omega + \mu - \epsilon_b} - \frac{1}{G'_{cc}(\omega)} \quad (13)$$

後ほど  $\omega_i$  を求めるときに、自己エネルギーの極  $\eta'_i$  が分かっていると便利である。 $G'_{cc}$  は  $\omega$  について減少関数であるので  $G'_{cc}$  の極  $\omega'_i$  の間に必ず一回ゼロをよぎる。 $\omega'_i$  は既に求まっているので、二分法で簡単に  $\{\omega'_i, \omega'_{i+1}\}$  の区間内にある  $G'_{cc}$  のゼロ点、つまり  $\Sigma'$  の極  $\eta'_i$  を求めることができる。 $\eta'_i$  が求まると

$$\Sigma'(\omega) = \sum_i \frac{B_i}{\omega - \eta'_i}, \quad B_i = \left[ \sum_k \frac{A'_k}{(\eta'_i - \omega'_k)^2} \right]^{-1} \quad (14)$$

と表すことができる。 $V \neq 0$  のとき、式 (13) の第二項と第三項は  $\omega = \epsilon_b - \mu$  でキャンセルするはずであるが、ともに発散する項なので数値誤差のために発散が残る可能性がある。この場合、混成から生じた極であり  $\Sigma'$  の極ではないので取り除く必要がある。

## 2.3. $G$ と $\omega_i$

次に  $G$  の極  $\omega_i$  を求める。 $G$  もまた  $\omega$  の減少関数であるから先ほどと同様に、 $G$  の極は  $G$  のゼロの間に必ず一つある。 $G$  のゼロ点は  $\omega = \pm\infty$  と  $\Sigma'$  の極  $\eta'_i$  がある。よって、与えられた  $\epsilon$  に対して、二分法を用いて  $[-\infty, \eta'_0]$ 、 $\{\eta'_i, \eta'_{i+1}\}$ 、 $[\eta'_{n-1}, \infty]$  の区間で  $\omega + \mu - \epsilon - \Sigma'(\omega) = 0$  となる点  $\omega_i(\epsilon)$  を探せばよい。こうして、 $\omega_i(\epsilon)$  を求めれば、 $G$  は

$$G(\omega; \epsilon) = \sum_i \frac{A_i(\epsilon)}{\omega - \omega_i(\epsilon)}, \quad A_i(\epsilon) = \left[ 1 + \sum_k \frac{B_k}{(\omega_i(\epsilon) - \eta'_k)^2} \right]^{-1} \quad (15)$$

と表せる。状態密度の計算など、実軸上以外の  $\omega$  について  $G$  が必要な場合、上の式より  $G(\omega; \epsilon) = (\omega + \mu - \epsilon - \Sigma(\omega))^{-1}$  を直接用いる方が効率がよい。

以上の手続きによって求めた  $\Omega(\hat{f}')$  の停留点  $\hat{f}'_s$  を探せば、この近似の範囲内でベストな代理系が決まる。各種物理量は停留点  $\hat{f}'_s$  での  $\Omega$  や  $G(\hat{f}, \hat{f}'_s)$  を用いて計算される。

### 3. おわりに

実は、上記の手法は、従来の動的平均場理論において不純物ソルバーを2サイトの不純物 Anderson 模型に取ったものと原理的に同じである。従来の方法では  $\Omega$  をあからさまに求めず、 $\Sigma(\omega)$  をセルフ・コンシステントに決定するが、これは  $\Omega[\Sigma]$  の停留値を与える関数  $\Sigma$  を探す問題と同値である。しかし、この  $\Omega$  の変分原理をあからさまに考える点が非常に重要である。従来の方法では、バスサイトを1サイトで簡略化してよい理由がない。一方、Potthoff の変分原理は、バス  $\infty$  サイトの不純物 Anderson 模型を適当な2サイト模型で近似する (繰り込む) ための指針を与えるのである。不純物 Anderson 模型の繰り込みについて考えると二サイトの不純物模型が必要最小限な要素であることが分かる。ただし、動的な性質を議論するには、ある程度の数の  $G$  の極が必要なので、バスサイトは多い方がよい。最小クラスターは熱力学量の計算に向いていると思われる。

こうして小さなクラスターが正当化されると非常に軽い計算で変分関数  $\Omega(\hat{f}')$  が求まり、変分パラメータ  $\hat{f}'$  が少ないので、その停留点は比較的簡単に求まる。汎関数の停留点を求める従来の手法より、関数の停留点を求める方が易しい。また、クラスターが小さすぎると、従来の手法でセルフコンシステントな解を得るのが困難になることが予想されるが、Potthoff の方法ではそのような困難はない。実際、前節で紹介した最も簡単な計算でも、モット転移の一次転移の振る舞いや有限温度の臨界点などが定量的にもかなり満足できる程度に記述できる [2]。計算にかかる時間は平均的なパソコンでわずか数分である。従来の DMFT で同様の結果を得るには多くの時間を要し、プログラミングも単純ではない。その違いは明らかだろう。

ただし、サイト相関を考慮するにはクラスターを大きく取る必要がある。そうすると従来の計算法より、関数の停留点を探すという点で少し軽いが、その差はわずかとなる。物理的な本質をとらえた、なるべく小さいクラスターをうまく構築できるかがポイントであるが、もちろん難しい問題である。

#### A. 代理系ハミルトニアン $H'_c$ の行列要素

数値対角化する代理系ハミルトニアンは

$$H'_c - \mu N'_c = \sum_{\sigma} \epsilon_c c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + \sum_{\sigma} \epsilon_b b_{\sigma}^{\dagger} b_{\sigma} + \sum_{\sigma} (V c_{\sigma}^{\dagger} b_{\sigma} + \text{h.c.}) - \mu \sum_{\sigma} (c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + b_{\sigma}^{\dagger} b_{\sigma}) \quad (16)$$

No.	$(N'_c, S'_{cz})$	$c$	$b$	$H'_c$				
0	(0, 0)	-	-	0				
1	(1, -1/2)	-	↓	$\epsilon_b - \mu$	$V$			
2		↓	-	$V$		$\epsilon_c - \mu$		
3	(1, +1/2)	-	↑	$\epsilon_b - \mu$	$V$			
4		↑	-	$V$		$\epsilon_c - \mu$		
5	(2, -1)	↓	↓	$\epsilon_c + \epsilon_b - 2\mu$				
6	(2, 0)	-	↑↓	$2\epsilon_b - 2\mu$	$V$	$-V$		0
7		↑	↓	$V$	$\epsilon_b + \epsilon_c - 2\mu$	0		$V$
8		↓	↑	$-V$	0	$\epsilon_b + \epsilon_c - 2\mu$		$-V$
9		↑↓	-	0	$V$	$-V$		$2\epsilon_c + U - 2\mu$
10	(2, +1)	↑	↑	$\epsilon_b + \epsilon_c - 2\mu$				
11	(3, -1/2)	↑↓	↓	$2\epsilon_c + \epsilon_b + U - 3\mu$	$-V$			
12		↓	↑↓	$-V$		$\epsilon_c + 2\epsilon_b - 3\mu$		
13	(3, +1/2)	↑↓	↑	$2\epsilon_c + \epsilon_b + U - 3\mu$	$-V$			
14		↑	↑↓	$-V$		$\epsilon_c + 2\epsilon_b - 3\mu$		
15	(4, 0)	↑↓	↑↓	$2(\epsilon_b + \epsilon_c) + U - 4\mu$				

Table. 1 相関 1+ バス 1 代理系ハミルトニアン of 行列要素

である。元の系が half-filled で電子・正孔対称性を持つとき、代理系も同じ対称性を持つ。その条件は  $\epsilon_c = 0$  および  $\mu = \epsilon_b = U/2$  である。基底とその行列要素を表 1 にまとめる。

## References

- [1] M. Potthoff, Euro. Phys. J. B32 429 (2003).
- [2] M. Potthoff, Euro. Phys. J. B36 335 (2003).