動的平均場理論の基礎と応用

愛媛大学 大学院理工学研究科 楠瀬 博明*1

1. 序

1.1. 強相関電子系とは

「動的平均場理論」が役に立つのは主に強相関電子系と呼ばれる分野である.この分野は物性研究の大きな一領域を占めていて,銅酸化物高温超伝導体や有機物質,重い電子系と呼ばれる物質群,鉄やニッケルに代表される強磁性金属などなどがその研究対象である.

強相関電子系では、運動エネルギーと相互作用エネルギーを含むハミルトニアンを取り扱う.相互作用 が運動エネルギーに比して小さいときは、相互作用を自由電子系からの低次の摂動で取り扱えばよいし、 逆に相互作用が大きい場合は、相互作用のみを厳密に取り入れた無摂動状態から摂動を行えばよい.両者 が拮抗する状況はどちらの極限からの展開も難しいが、非自明な現象が期待される(いわゆるアンダーソ ンの"More is different" [1,2,3]) という点で多くの研究者を惹きつけているのである.

例えば、以下のハバード模型を考えてみよう、

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c^{\dagger}_{k\sigma} c_{k\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (n_{i\sigma} = c^{\dagger}_{i\sigma} c_{i\sigma}).$$
(1.1)

この模型は電子相関を考える上で最も基本的な模型である.第1項の運動エネルギーは,電子が結晶全体 に拡がろうとする波動性(遍歴性)を表している.このエネルギーバンドに↑,↓スピンの電子を低いエネル ギーから詰めていくとスピン自由度(エントロピー)は失われる.これがフェルミ縮退した状態である.一 方,第2項は各サイトの電子数を固定化して粒子性とスピン自由度を引き出そうとする相互作用である. 顕在化したスピン自由度は,低温で自発的に整列することで磁気秩序を起こしてエントロピーを放出す る.各サイトの粒子数を固定化する働きは,電子の遍歴性を奪い,特に各サイトに電子が1個あるような 状況(half-filled)では完全に絶縁化する.このように電子相関によって生じる絶縁体をモット絶縁体と呼 ぶ[4].

様々な状況での1粒子状態密度の様子を図1に示す.バンド金属では、フェルミ縮退によってサイトあたりのエントロピーは、フェルミエネルギーを E_F として、 $S/k_BN \sim (k_BT/E_F) \ln 2$ と小さく、バンド絶縁体のエントロピーはゼロである.モット絶縁体では、スピン自由度が顕在化したために $S/k_BN \sim \ln 2$ と大きなエントロピーが残っている。強相関金属では、モット絶縁体とバンド金属の両側面を併せ持っていて、特徴的なエネルギー $E_F^* \ll E_F$ (繰り込まれたフェルミエネルギー)より高温で存在する大きなエントロピーは E_F^*/k_B 以下で急速にエントロピーを失う。小さいエネルギースケール E_F^* で、物性(エントロ

^{*1}首都大での集中講義テキスト.



Fig.1 電子系の状態密度: (a) バンド金属, (b) バンド絶縁体, (c) モット絶縁体, (d) 強相関金属.

ピー)を変化させることができる点も強相関電子系の魅力の1つである.

これらの特徴を本講義で述べる動的平均場理論によって明らかにしていく.

1.2. グリーン関数

動的平均場理論は,主に,1粒子のグリーン関数を扱うので,必要な事柄に限って少し復習してお < [5,6,7,8,9].

温度グリーン関数

以下のように (フェルミ粒子の) 温度 (松原) グリーン関数なるものを定義する ($\beta = 1/k_BT$),

$$G_{\sigma}(\boldsymbol{k},\tau) = -\left\langle T_{\tau} \left(c_{\boldsymbol{k}\sigma}(\tau) c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger}(0) \right) \right\rangle, \tag{1.2}$$

ここで, $A(\tau) = e^{\tau H} A e^{-\tau H}$ は虚時間 ($-\beta < \tau < \beta$)の「ハイゼンベルグ表示」, $\langle \cdots \rangle$ は大正準集合における熱平均を表す. T_{τ} は時間順序演算子であり, $\theta(\tau)$ を階段関数として,

$$T_{\tau}(A(\tau)B) = \theta(\tau)A(\tau)B - \theta(-\tau)BA(\tau) = \begin{cases} A(\tau)B & (\tau > 0), \\ -BA(\tau) & (\tau < 0), \end{cases}$$
(1.3)

のように定義される.ここでは、系に並進対称性がありスピンを保存している場合に議論を限り、 $k \ge \sigma$ が保存しているとしてグリーン関数を σ の添字を付けたkだけの関数とした、 $\tau = -0$ とすれば、 $G_{\sigma}(k, \tau = -0) = \langle c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \rangle \equiv n_{k\sigma} \ge \alpha$ り、スピン σ 、波数kの平均占有数が得られる。以下、スピン空間の回転対称性がある場合 $G_{\uparrow} = G_{\downarrow}$ でありスピンの添字 σ を省略する。

自由粒子の場合に、定義に従ってグリーン関数を求めてみると、

$$G_0(\mathbf{k},\tau) = \begin{cases} -f(-\xi_k)e^{-\xi_k\tau} & (\tau > 0), \\ +f(+\xi_k)e^{-\xi_k\tau} & (\tau < 0), \end{cases}$$
(1.4)

となる. ここで, $f(x) = 1/(e^{\beta x} + 1)$ はフェルミ分布関数, $\xi_k = \epsilon_k - \mu$ とおいた. μ は化学ポテンシャル. $\tau < 0$ の場合のグリーン関数を考えると,定義に従って

$$G(\boldsymbol{k},\tau<0) = \frac{1}{Z} \operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H} c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger} e^{\tau H} c_{\boldsymbol{k}\sigma} e^{-\tau H} \right] = \frac{1}{Z} \operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H} e^{(\tau+\beta)H} c_{\boldsymbol{k}\sigma} e^{-(\tau+\beta)H} c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger} \right] = -G(\boldsymbol{k},\tau+\beta),$$
(1.5)

の関係を得る. ここで, $Z = \text{Tr}e^{-\beta(H-\mu N)}$ は大分配関数. すなわち, $G(k, \tau)$ は周期 β の反周期関数 (周期 2 β の周期関数) である. 自由粒子 (1.4) の場合に成り立っていることを確認してみるとよい.

周期 2 β の周期関数であることが分かったので、振動数 $\omega_m = \pi mT$ (m = 整数)を用いてフーリエ級数 に展開すると、

$$G(\boldsymbol{k},\tau) = T \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_m \tau} G(\boldsymbol{k}, i\omega_m), \qquad (1.6)$$

であり, 展開係数は,

$$\begin{split} G(\boldsymbol{k}, i\omega_m) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau \, e^{i\omega_m \tau} G(\boldsymbol{k}, \tau) = \int_0^{\beta} d\tau \, \frac{1}{2} \left[G(\boldsymbol{k}, \tau) e^{i\omega_m \tau} + G(\boldsymbol{k}, \tau - \beta) e^{i\omega_m (\tau - \beta)} \right] \\ &= \int_0^{\beta} d\tau \, e^{i\omega_m \tau} G(\boldsymbol{k}, \tau) \frac{1}{2} \left[1 - e^{-i\omega_m \beta} \right] = \begin{cases} \int_0^{\beta} d\tau \, e^{i\omega_m \tau} G(\boldsymbol{k}, \tau) & (m = 2n + 1, \, \bar{\alpha} \underline{\mathfrak{B}}), \\ 0 & (m = 2n, \, \bar{\alpha} \underline{\mathfrak{B}}), \end{cases} \end{split}$$
(1.7)

となり,周期 β の反周期性(1.5)よりmが奇数の係数のみが残る.以下,改めて $\omega_n = \pi T(2n+1)$ とし, これをフェルミ粒子の松原振動数と呼ぶ.自由粒子の場合,

$$G_0(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_k}.$$
(1.8)

 $\langle c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \rangle = G_{\sigma}(k, \tau = -0)$ の関係を用い、自由粒子では $\langle c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \rangle = f(\xi_k)$ に注意すれば、

$$T\sum_{n} \frac{1}{i\omega_{n} - x} e^{i\omega_{n}0_{+}} = f(x),$$
(1.9)

の関係が成り立つことが分かる.

フーリエ変換の定義を部分積分すると、(1.5)に注意して、

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n} e^{i\omega_n \tau} G(\mathbf{k}, \tau) \Big|_0^{\beta} - \frac{1}{(i\omega_n)^2} e^{i\omega_n \tau} G'(\mathbf{k}, \tau) \Big|_0^{\beta} + \frac{1}{(i\omega_n)^2} \int_0^{\beta} d\tau \, e^{i\omega_n \tau} G''(\mathbf{k}, \tau) \\ = \frac{G(\mathbf{k}, -0) - G(\mathbf{k}, +0)}{i\omega_n} - \frac{-G'(\mathbf{k}, \beta) - G'(\mathbf{k}, 0)}{(i\omega_n)^2} + \cdots,$$
(1.10)

となり、 $1/(i\omega_n)$ のべき級数展開が形式的に求まる.特に、 $1/(i\omega_n)$ の係数は、グリーン関数の $\tau = 0$ での不連続性と関係していることが分かる.後ほど、

$$G(k, \tau = -0) - G(k, \tau = +0) = 1, \tag{1.11}$$

であることが分かる.

温度グリーン関数は熱力学量を求めるのに役立つ.また、以下に述べる解析接続を用いると実験で観測 される動的スペクトルを得ることもできる.温度グリーン関数は素性のよい滑らかな関数で、ファインマ ンダイアグラムを用いた摂動展開や数値計算に用いるのに都合がよい.

運動方程式と自己エネルギー

ハミルトニアンのうち,相互作用部分を H_{int} とする. $c_{k\sigma}(\tau)$ を τ で微分すると,

$$\frac{\partial}{\partial \tau} c_{k\sigma}(\tau) = [H, c_{k\sigma}(\tau)] = -\xi_k c_{k\sigma} + [H_{\text{int}}, c_{k\sigma}(\tau)], \qquad (1.12)$$

を得る.これをグリーン関数の定義に用い,時間順序演算子に出てくる $\theta(\tau)$ の存在に注意して微分すると,

$$\frac{\partial}{\partial \tau} G(\boldsymbol{k},\tau) = -\xi_{\boldsymbol{k}} G(\boldsymbol{k},\tau) - \left\langle T_{\tau} \left([H_{\text{int}}, c_{\boldsymbol{k}\sigma}(\tau)] c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger} \right) \right\rangle - \delta(\tau) \left\langle \left\{ c_{\boldsymbol{k}\sigma}, c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle, \tag{1.13}$$

を得る. ここで,

$$\left\langle T_{\tau} \left([H_{\text{int}}, c_{k\sigma}(\tau)] c_{k\sigma}^{\dagger} \right) \right\rangle \equiv \int_{0}^{\beta} d\tau' \, \Sigma(k, \tau - \tau') G(k, \tau'), \tag{1.14}$$

とおくと、グリーン関数の運動方程式は、次のように表せる、

$$\int_{0}^{\beta} d\tau' \left[\delta(\tau - \tau') \left(-\frac{\partial}{\partial \tau'} - \xi_k \right) - \Sigma(k, \tau - \tau') \right] G(k, \tau') = \delta(\tau).$$
(1.15)

フーリエ変換すると,

$$[i\omega_n - \xi_k - \Sigma(k, i\omega_n)]G(k, i\omega_n) = 1, \qquad \Rightarrow \qquad G(k, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - [\xi_k + \Sigma(k, i\omega_n)]}, \quad (1.16)$$

を得る. $H_{int} = 0$ のとき明らかに $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = 0$ であり,自由粒子のグリーン関数 (1.8) と見比べると, $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ は自由粒子エネルギー ξ_k の相互作用による補正を表していることが分かる. $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ を自 己エネルギーと呼び,相互作用から生じる情報を全て含んでいる.動的平均場理論では,自己エネルギー が重要な役割を果たす.

スペクトル表示

温度グリーン関数をハミルトニアンの厳密な固有状態と固有値, $H|m\rangle = E_m |m\rangle$ を用いて表すと,

$$G(\boldsymbol{k}, i\omega_{n}) = \frac{1}{Z} \int_{0}^{\beta} d\tau \, e^{-i\omega_{n}\tau} \left[\sum_{mp} e^{-\beta E_{m}} e^{\tau E_{m}} \left\langle m \left| c_{\boldsymbol{k}\sigma} \right| p \right\rangle e^{-\tau E_{p}} \left\langle p \left| c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger} \right| m \right\rangle \right]$$
$$= \frac{1}{Z} \sum_{m,p} \frac{\left| \left\langle m \left| c_{\boldsymbol{k}\sigma} \right| p \right\rangle \right|^{2}}{i\omega_{n} - (E_{p} - E_{m})} \left(e^{-\beta E_{m}} + e^{-\beta E_{p}} \right), \qquad (1.17)$$

あるいは,

$$G(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{A(\boldsymbol{k}, x)}{i\omega_n - x}, \quad A(\boldsymbol{k}, x) = \frac{1}{Z} \sum_{m, p} |\langle m \, | \, c_{\boldsymbol{k}\sigma} \, | \, p \rangle|^2 \left(e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_p} \right) \delta(x - (E_p - E_m)), \tag{1.18}$$

と表してもよい. このような表し方をスペクトル (レーマン) 表示, A(k,x) をウェイトという. A(k,x) が実数であれば, $G(k,i\omega_n)^* = G(k,-i\omega_n)$ の関係が成り立つ. この場合, $\omega_n > 0$ だけ求めれば十分である. スペクトルウェイトを k で和を取ると状態密度 $\rho(\omega)$ が得られる. すなわち,

$$\rho(\omega) = \sum_{k} A(k, \omega). \tag{1.19}$$

前者の式 (1.17) で、 $|\omega_n| \rightarrow \infty$ の極限を考えると、

$$\frac{1}{Z}\sum_{m,p} |\langle m \mid c_{k\sigma} \mid p \rangle|^2 \left(e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_p} \right) = \left\langle \left\{ c_{k\sigma}, c_{k\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle = 1,$$

より, $G(\mathbf{k}, i\omega_n) \rightarrow 1/(i\omega_n)$ であることが分かる. これより, 後者のスペクトル表示 (1.18) からウェイト に関する和則を得る,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx A(k, x) = 1.$$
(1.20)

自由粒子のスペクトルウェイトは、 $A_0(k,x) = \delta(x - \xi_k)$ であり、これを (1.18) に代入すると (1.8) となることが確かめられる.

遅延グリーン関数と解析接続

一方,因果律を満たす遅延グリーン関数を以下のように定義する,

$$G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},t) = -i\left\langle \left\{ c_{\boldsymbol{k}\sigma}(t), c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle \theta(t).$$
(1.21)

ここで, $A(t) = e^{iHt}Ae^{-iHt}$ はハイゼンベルグ表示, 最後の $\theta(t)$ が因果律を表している.

温度グリーン関数のスペクトル表示を導いた手順を繰り返すと,

$$G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{i\omega t} e^{-\delta t} G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{A(\boldsymbol{k},x)}{\omega + i\delta - x},\tag{1.22}$$

を得る. δ は正の無限小量で, $t \to \infty$ での収束因子である. 公式 $1/(x + i\delta) = \mathcal{P}(1/x) - i\pi\delta(x)$ を用いると (\mathcal{P} は主値),

$$A(k, x) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(k, x),$$
 (1.23)

を得る. すなわち,遅延グリーン関数の虚部はスペクトル表示におけるウェイトと関係している. この関係を再度スペクトル表示に代入し実部を取ると,

$$\operatorname{Re} G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\pi} \,\mathcal{P} \frac{\operatorname{Im} G(\boldsymbol{k},x)}{\omega - x},\tag{1.24}$$

なる Kramers-Kronig の関係式が得られ、 $G^{\mathbb{R}}(k,\omega)$ は ω の上半面で解析的であることが分かる.

(1.18) と (1.22) を見比べると、無限個の点 *iω*_n において、

$$G^{\mathbf{R}}(\boldsymbol{k},\omega+i\delta\to i\omega_n) = G(\boldsymbol{k},i\omega_n), \qquad (1.25)$$

の関係があり、 $G^{\mathbb{R}}(\mathbf{k},\omega)$ が上半面で解析的だから、上半面で両者の関数は互いに解析接続できる。実用 上は、温度グリーン関数を求めてから、 $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta (\omega_n > 0)$ として、遅延グリーン関数を求めること が多い、図2に、2つのグリーン関数の解析的性質と解析接続の様子を示す。

 $A(\mathbf{k}, \omega)$ の定義 (1.18) を見ると、pはmよりも粒子数が1個多い状態である。従って、x > 0の領域は「粒子的な励起」 $E_p(N+1) - E_m(N) > 0$ の寄与を、x < 0の領域は「ホール的な励起」 $E_m(N-1) - E_p(N) > 0$ の寄与を合算したものになっている。これらは、それぞれ、角度分解光電子分光 (ARPES) から得られるスペクトル (x < 0) と、角度分解逆光電子分光から得られるスペクトル (x > 0, 逆光電子分光の精度の高い測定は実際には難しい) に対応している。

温度グリーン関数の解析的な表式が得られている場合,実軸上への解析接続は単に $\omega_n > 0$ の領域で $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ の置き換えをするだけである.一方,温度グリーン関数が数値データとして得られている 場合,Padé 近似によって複素関数 $G(\mathbf{k}, i\omega_n)$ を有理多項式補間し,得られた補間式に対して実軸へ解析 接続するか [10],最大エントロピー法を用いて解析接続する [11] 方法が知られている.



Fig. 2 解析的性質と解析接続 (a) 遅延グリーン関数, (b) 温度グリーン関数.

動的带磁率

動的帯磁率は,磁気モーメント演算子の空間フーリエ変換 Μ_αα を用いて (α はベクトルの成分),

$$\chi^{\rm R}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega) = i \int_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{i\omega t} e^{-\delta t} \left\langle \left[M_{\boldsymbol{q}\alpha}(t), M_{-\boldsymbol{q}\beta} \right] \right\rangle \theta(t), \tag{1.26}$$

のように定義される*2.前述の遅延グリーン関数の場合と同様にスペクトル表示すると,

$$\chi^{\mathrm{R}}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{B_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},x)}{\omega + i\delta - x}, \quad B_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},x) = -(1 - e^{-\beta x})S_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},x) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \, \chi^{\mathrm{R}}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega),$$
$$S_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},x) = \frac{1}{Z} \sum_{m,p} \left\langle m \left| M_{q\alpha} \right| p \right\rangle \left\langle p \left| M_{-q\beta} \right| m \right\rangle e^{-\beta E_m} \delta(x - (E_p - E_m)), \quad (1.27)$$

となる. 中性子散乱実験における微分散乱断面積は $S_{\alpha\beta}(q,\omega)$ に比例する量である.

フェルミ粒子の場合と同じく、温度グリーン関数を,

$$\chi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau \, e^{i\omega_n\tau} \left\langle T_\tau \left(M_{\boldsymbol{q}\alpha}(\tau) M_{-\boldsymbol{q}\beta} \right) \right\rangle, \tag{1.28}$$

のように定義する.フェルミ粒子の場合と異なり、 T_{τ} 積において $\tau < 0$ の場合に演算子を交換しても負符号はつかない.また、 $\chi_{\alpha\beta}(q,\tau) = \chi_{\alpha\beta}(q,\tau+\beta)$ を満たす周期 β の周期関数である.このことから、フーリエ成分は $\omega_n = 2\pi Tn$ (ボーズ粒子の松原振動数)の場合だけ残る.スペクトル表示をすれば、この場合も、

$$\chi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{B_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},x)}{i\omega_n - x} = \chi_{\alpha\beta}^{\rm R}(\boldsymbol{q},\omega + i\delta \to i\omega_n), \tag{1.29}$$

の関係が示され、温度グリーン関数から上半面において $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ として解析接続することで $\chi^{\mathbf{R}}_{\alpha\beta}(q,\omega)$ を求めることができる。 $B_{\alpha\beta}(q,x)$ が実数ならば、 $\chi_{\alpha\beta}(q,i\omega_n)^* = \chi_{\alpha\beta}(q,-i\omega_n)$ の関係が成り 立つ. さらに、 $\chi_{\alpha\beta}(q,i\omega_n)$ が実数なら、 $B_{\alpha\beta}(q,x) = -B_{\alpha\beta}(q,-x)$ はxに関する奇関数である。この場 合 x = 0 で $B_{\alpha\beta}(q,0) = 0$.

静的な帯磁率は $\chi^{\mathbf{R}}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega=0) = \chi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},i\omega_n=0)$ だから,解析接続なしに求めることができる.また, フーリエ変換の式で、 $\alpha = \beta, \tau = 0$ とすると,

$$\left\langle \left| M_{\boldsymbol{q}\alpha} \right|^2 \right\rangle = T \sum_n \chi_{\alpha\alpha}(\boldsymbol{q}, i\omega_n),$$
 (1.30)

^{*2}フォノンなどのボーズ粒子のグリーン関数は通常,負符号を付けたものとして定義する.

という磁気モーメントの大きさの2乗に関する和則が得られる.

一般の実数 x に対し、ボーズ粒子の松原振動数に関する和に関して、

$$T\sum_{n} \frac{1}{i\omega_n - x} e^{i\omega_n 0_+} = -n(x), \quad n(x) = \frac{1}{e^{\beta x} - 1},$$
(1.31)

の関係が成り立つ.

2. 強相関電子系と動的平均場理論

2.1. 自己エネルギーの特徴

2サイト問題の解

強相関電子系の自己エネルギーの性質を調べるために,まずは2サイトのハバード模型を考えてみよう [12].

$$H_2 = -t \sum_{\sigma} \left(c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma} \right) + U \left(n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \right).$$

$$(2.1)$$

 $c_{k\sigma} = (c_{1\sigma} + e^{-ika}c_{2\sigma})/\sqrt{2}$ のようにフーリエ変換して「運動量表示」に移ると、

$$H_2 = \sum_{\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + U \left(n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \right), \quad \epsilon_k = -t \cos(ka), \tag{2.2}$$

となる. ただし、2 サイトなので k = 0 (結合軌道)、 $k = \pi/a$ (反結合軌道) のみを取る.

2 サイト問題なので容易に解くことができる。粒子数 N と全スピン S の保存量を用いて厳密な固有状態と固有エネルギーを表1にまとめた。ここで、

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + (4t/U)^2}} = \frac{U/2}{\sqrt{(U/2)^2 + (2t)^2}}.$$
(2.3)

N = 2 (half-filled) の場合,固有エネルギーのU/t 依存性を図3に示す. $U/t \ll 1$ のとき,結合軌道に 電子を2個詰めたものが最低エネルギー状態であり,反結合軌道に移動させたものが励起状態になってい る.一方, $U/t \gg 1$ では,No.4,7の状態が低エネルギーにあり,No.5,6状態が高エネルギーになる.低 エネルギー状態はS = 0, S = 1に依存してエネルギーが異なるので,以下のハイゼンベルグ模型が低エネ

No.	Ν	S	Е	状態
1	0	0	0	0>
2	1	1/2	-t	$ 0\sigma\rangle$
3			+t	$ \pi\sigma\rangle$
4	2	0	$U(1-1/\alpha)/2$	$\sum_{m=1}^{\pm 1} \sqrt{1 - m\alpha} \left(\left 0 \uparrow \right\rangle \left 0 \downarrow \right\rangle + m \left \pi \uparrow \right\rangle \left \pi \downarrow \right\rangle \right) / 2$
5			U	$(0\uparrow\rangle \pi\downarrow\rangle + \pi\uparrow\rangle 0\downarrow\rangle) / \sqrt{2}$
6			$U(1+1/\alpha)/2$	$\sum_{m}^{\pm 1} m \sqrt{1 + m \alpha} \left(\left 0 \uparrow \right\rangle \left 0 \downarrow \right\rangle + m \left \pi \uparrow \right\rangle \left \pi \downarrow \right\rangle \right) / 2$
7	2	1	0	$ \pi\uparrow\rangle 0\uparrow\rangle,(\pi\uparrow\rangle 0\downarrow\rangle- 0\uparrow\rangle \pi\downarrow\rangle)/\sqrt{2}, \pi\downarrow\rangle 0\downarrow\rangle$
8	3	1/2	-t + U	$ 0-\sigma\rangle \pi\sigma\rangle 0\sigma\rangle$
9			+t + U	$ \pi - \sigma\rangle \pi \sigma\rangle 0\sigma\rangle$
10	4	0	2U	$ \pi\uparrow\rangle 0\uparrow\rangle \pi\downarrow\rangle 0\downarrow\rangle$

Table.1 2サイト問題の固有状態と固有エネルギー. $|k\sigma\rangle$ ($k = 0, \pi$). $\alpha = [1 + (4t/U)^2]^{-1/2}$.

ルギーを記述する有効模型になっている,

$$H_{\text{eff}} = J\left(S_1 \cdot S_2 - \frac{1}{4}\right) = J\left[\frac{S(S+1)}{2} - 1\right], \quad J = \frac{4t^2}{U}.$$
 (2.4)

高エネルギー状態は,低エネルギー状態と U だけ離れており,実は下部ハバードバンドと上部ハバードバ ンドにまたがる粒子・ホールペアを励起した状態である.

1粒子グリーン関数と自己エネルギー

温度 T が十分低く基底状態 No. 4 と見なしてよい場合にグリーン関数を求めてみよう. このとき N = 2 で電子ホール対称性があり、 $\mu = U/2$ である. 定義に従って丹念に計算していくと、スペクトルウェイトは、

$$A(k,x) = \sum_{m}^{\pm 1} \frac{\left(\sqrt{1+\alpha} - m\cos(ka)\sqrt{1-\alpha}\right)^2}{4} \delta\left(x - t\cos(ka) - m\sqrt{(U/2)^2 + (2t)^2}\right), \quad (2.5)$$

となる. ここで, m = +1 は粒子的励起, m = -1 はホール的励起の寄与である. よって, グリーン関数は,

$$G(k, i\omega_n) = \frac{\left(\sqrt{1+\alpha} - \cos(ka)\sqrt{1-\alpha}\right)^2/4}{i\omega_n - t\cos(ka) - \sqrt{(U/2)^2 + (2t)^2}} + \frac{\left(\sqrt{1+\alpha} + \cos(ka)\sqrt{1-\alpha}\right)^2/4}{i\omega_n - t\cos(ka) + \sqrt{(U/2)^2 + (2t)^2}},$$
(2.6)

である. $U \gg t$ のとき,スペクトルウェイトは $x \sim \pm U/2 + t \cos(ka)$ に現れ,これらが上部・下部ハバードバンドに対応しているのである.

(1.16) より $\xi_k = -t \cos(ka) - \mu = -t \cos(ka) - U/2$ に注意して自己エネルギーを求めると,

$$\Sigma(k, i\omega_n) = \frac{U}{2} + \frac{U^2}{4} \frac{1}{i\omega_n - 3t\cos(ka)},$$
(2.7)

となる。第1項はハートレー項であり、相互作用の平均場的(長時間平均)な寄与を表す。

 $t \to 0$ で系は1サイトの単なる重ね合わせになり、これを原子極限と呼ぶ. 原子極限で U が大きけれ ば自己エネルギーには強い $i\omega_n$ 依存性があり、この状況は $\omega_n \gg t$ である限りあまり変わらない. 現実の 多サイト系においても、強相関系 $U/t \gg 1$ では自己エネルギーにおいて $i\omega_n$ 依存性が最も強く、この依 存性だけを残して波数 k 依存性を無視するのが動的平均場近似である [13]. ただし、2 次相転移の近傍で



Fig.3 2サイト問題の固有エネルギーの U/t 依存性 (N = 2).

は長距離の揺らぎが発散的に増大するので波数依存性を無視する近似は妥当性を欠く.また,強相関電子 系の異方的超伝導の発現には揺らぎの波数依存性がとくに重要である.そのような問題は,単純な動的平 均場理論の守備範囲外であり,その意味で,動的平均場理論は転移点より十分高温で妥当な「高温近似」 である.

2.2. 動的平均場理論 [14, 15, 16, 17, 18]

まず、イジング模型の平均場理論を簡単に復習してみよう[19].

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j}^{n.n.} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (J > 0).$$

$$(2.8)$$

あるサイト i に着目して、そのサイトでのハミルトニアンは、

$$H_i = -\left(J\sum_j \sigma_j + h\right)\sigma_i \equiv h_i^{\text{eff}}\sigma_i, \qquad (2.9)$$

であり、 h_i^{eff} は *i* スピンにかかる有効磁場を表している。 h_i^{eff} はまわりのスピン変数の状態 { σ_j } に依存 するが、これらをサイトに依存しない平均値 $m = \langle \sigma_j \rangle$ で近似し、その近似の下で求めた *i* サイトの熱平 均 $\langle \sigma_i \rangle$ が仮定した平均値 m に等しいとすると、

$$m = \tanh\left(\beta \langle h_i^{\text{eff}} \rangle\right) = \tanh\left[\beta(zJm+h)\right], \quad (z は配位数),$$
 (2.10)

なる自己無撞着方程式が得られて、これから m を求めればよい、というのが平均場近似であった.

自己エネルギー $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ は1粒子のエネルギーの補正で一種のポテンシャル場であるが、この \mathbf{k} 依存性を無視することは、空間的には一様だが「時間的に」揺らぐ平均場を導入することにあたる.

電子系に対して (2.9) にあたる1サイト問題を扱うため、1 不純物アンダーソン模型を導入する [20]、

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k\sigma} \left[E_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \frac{V}{\sqrt{N_0}} (c_{k\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \text{h.c.}) \right] + \sum_{\sigma} E_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow}, \quad n_{f\sigma} = f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}.$$
(2.11)

ここで,着目する i サイトの電子を便宜上「f」電子と表した. V の k 依存性は無視し実数とした.着目 するサイト以外のサイトの情報は、パラメータ (E_k , V, E_f) に含まれていると考えるのである (図 4 参照).



Fig.4 格子模型から有効不純物模型へのマッピングの概略図.

イジング模型の熱平均 m にあたる量として、サイト i のグリーン関数を求めよう.1 中心問題なので、

波数 k はよい量子数ではない.f 電子と c 電子の各波数からなる行列を用いてグリーン関数は

$$\hat{G}(i\omega_{n}) = \begin{bmatrix} i\omega_{n} - E_{f} - \Sigma_{f}(i\omega_{n}) & -V/\sqrt{N_{0}} & -V/\sqrt{N_{0}} & \cdots \\ -V/\sqrt{N_{0}} & i\omega_{n} - E_{k_{1}} & 0 & 0 & \cdots \\ -V/\sqrt{N_{0}} & 0 & i\omega_{n} - E_{k_{2}} & 0 & \cdots \\ -V/\sqrt{N_{0}} & 0 & 0 & i\omega_{n} - E_{k_{3}} & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} f \ \vec{K} \ \vec{C} \ (k_{1}) \ \vec{K} \ \vec{C} \ (k_{2}) \ \vec{K} \ \vec{C} \ (k_{3}) \ \vec{K} \ \vec{C} \ \vec{C} \ (k_{3}) \ \vec{K} \ \vec{C} \ \vec{C}$$

と表せる. 必要なのは (1,1) 成分の f 電子グリーン関数であり, 逆行列の余因子展開を用いて,

$$G_f(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_f - \Sigma_f(i\omega_n) - \Delta(i\omega_n)}, \quad \Delta(i\omega_n) = \frac{V^2}{N_0} \sum_k \frac{1}{i\omega_n - E_k} \equiv V^2 \left\langle \frac{1}{i\omega_n - E_k} \right\rangle_k, \quad (2.13)$$

と求められる. これより、1 不純物問題の自己エネルギーは、

$$\Sigma_f(i\omega_n) = \mathcal{G}(i\omega_n)^{-1} - \mathcal{G}_f(i\omega_n)^{-1}, \quad \mathcal{G}(i\omega_n)^{-1} = i\omega_n - \mathcal{E}_f - \Delta(i\omega_n), \tag{2.14}$$

と書ける. ここで, $G(i\omega_n)$ は着目する i サイトで相互作用のない有効 1 不純物模型の情報を含んだグ リーン関数 (元の格子系の問題で見れば,着目するサイト i だけ相互作用がない問題を考えた場合に相当 する) でキャビティグリーン関数と呼ばれる. イジング模型の $\langle h_i^{\text{eff}} \rangle$ に相当する量である. 実は,着目す るサイト以外のサイトの情報は, $G(i\omega_n)$ にすべて含まれているので,ハミルトニアン (2.11) にまで還元 してパラメータ (E_k , V_k , E_f) を決めることは必ずしも必要ではない. この動的平均場理論と同等なもの は,80 年代中頃には既に,有効不純物問題にマップするという考え方を経ないで周期 Anderson 模型に 対して倉本によって導かれていた [21,22].

(2.14) によって求めた自己エネルギー $\Sigma_f(i\omega_n)$ が、元の格子系の自己エネルギーで k 依存性を無視したもの $\Sigma(i\omega_n)$ に等しいという、自己無道着な条件を課す.そのとき、格子系のグリーン関数は、

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_k - \Sigma_f(i\omega_n)},$$
(2.15)

と書ける. *i*サイトのグリーン関数は,

$$G_i(i\omega_n) = \langle G(\boldsymbol{k}, i\omega_n) \rangle_{\boldsymbol{k}}, \qquad (2.16)$$

であり、これが $G_f(i\omega_n)$ と等しいとして、(2.14) を再び用いると、 $G(i\omega_n)$ [または H_{eff}] が求まる。与 えられた有効媒質 $G(i\omega_n)$ に対して、1 不純物問題を解いて、 $\Sigma_f(i\omega_n)$ を求め、これが最初に仮定した $\Sigma_f(i\omega_n)$ に等しい自己無撞着な解を求めればよい。

以上の手順をまとめると,

(1)
$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \sim \Sigma_f(i\omega_n).$$

(2) $G_f(i\omega_n) = G_i(i\omega_n) = \left\langle \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_k - \Sigma_f(i\omega_n)} \right\rangle_k.$
(3) $\mathcal{G}(i\omega_n)^{-1} = G_f(i\omega_n)^{-1} + \Sigma_f(i\omega_n).$
(4) $\mathcal{G}(i\omega_n)$ or $H_{\text{eff}} \Rightarrow \Sigma_f(i\omega_n).$
(5) (2) に戻る.

適当な Σ_f(iω_n) から出発して,自己無撞着な解が得られるまで手順 (2)-(5) を繰り返せばよい. これらの 手順の中で,最も難しいステップは (4) の1 不純物多体問題を解くところであり,これまでに近藤問題の 研究において考案された様々な手法が適用できる.

元の格子模型のパラメータ ϵ_k と有効不純物模型のパラメータ E_f および V との関係を見ておこう. (2.13) と (2.16) において $|\omega_n| \rightarrow \infty$ の極限を考えると、 $\Sigma_f(i\omega_n) = \Sigma_0 + \Sigma_1/(i\omega_n) + \cdots$ として、

$$(2.13) = \frac{1}{i\omega_n} + \frac{\Sigma_0 + E_f}{(i\omega_n)^2} + \frac{\Sigma_1 + V^2 + (\Sigma_0 + E_f)^2}{(i\omega_n)^3} + \cdots,$$

$$(2.16) = \frac{1}{i\omega_n} + \frac{\Sigma_0 + \langle \epsilon_k - \mu \rangle_k}{(i\omega_n)^2} + \frac{\Sigma_1 + \left\langle (\Sigma_0 + \epsilon_k - \mu)^2 \right\rangle_k}{(i\omega_n)^3} + \cdots,$$
(2.18)

を得る.両者が等しいから,

$$E_f = \langle \epsilon_k - \mu \rangle_k = \langle \epsilon_k \rangle_k - \mu, \quad V^2 = \left\langle (\epsilon_k - \mu)^2 \right\rangle_k - \left\langle \epsilon_k - \mu \right\rangle_k^2 = \left\langle \epsilon_k^2 \right\rangle_k - \left\langle \epsilon_k \right\rangle_k^2, \tag{2.19}$$

の関係を得る. すなわち,有効不純物模型のエネルギー準位 E_f は格子模型の化学ポテンシャル μ から 測ったバンドの重心,混成強度 V^2 はバンドの k 平均における分散であることが分かる.

初期の頃,動的平均場理論は空間次元無限大の近似と呼ばれていた。自己エネルギーの k 依存性は,空間次元が大きくなるほど弱くなり,無限次元で k 依存性を無視する近似が厳密になるからである。これは,通常の平均場近似で無視した揺らぎの寄与が空間次元の増大と共に小さくなり,無限次元で平均場近似が正当化されることと同等の理由による [19].

(2.16)の k 平均は c 電子の状態密度を用いて,

$$\left\langle \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_k - \Sigma_f(i\omega_n)} \right\rangle_k = \int d\epsilon \frac{\rho_0(\epsilon)}{i\omega_n + \mu - \epsilon - \Sigma_f(i\omega_n)} \equiv K_0(i\omega_n + \mu - \Sigma_f), \quad (2.20)$$

と表すことができる.代表的な状態密度と解析的な表式を以下にまとめておく,

半楕円状態密度 (*d* = ∞ ベーテ格子)

$$\rho_{0}(\epsilon) = \frac{2}{\pi D} \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon}{D}\right)^{2}} \theta(D - |\epsilon|), \quad K_{0}(z) = \frac{2}{D} \left[\frac{z}{D} - i \operatorname{sgn}(z'') \sqrt{1 - \left(\frac{z}{D}\right)^{2}}\right],$$
$$\langle \epsilon_{k} \rangle_{k} = 0, \quad V = \frac{D}{2}, \tag{2.21}$$

ここで, z"はzの虚部を表す. この場合,

$$K_0(z)^{-1} = z - \frac{D^2}{4} K_0(z), \qquad (2.22)$$

の関係が成り立つ.この関係を用いれば、動的平均場ループの (2), (3) の手順が解析的に実行でき、 $E_f = -\mu, \Delta(i\omega_n) = (D^2/4)G_f(i\omega_n)$ の関係が成り立つことが分かる.

• 定数状態密度

$$\rho_0(\epsilon) = \frac{1}{2D} \theta(D-|\epsilon|), \quad K_0(z) = -\frac{1}{2D} \ln\left(\frac{z/D-1}{z/D+1}\right),$$

(2.17)

$$\langle \epsilon_k \rangle_k = 0, \quad V = \frac{D}{\sqrt{3}},$$
 (2.23)

ガウス型状態密度 (*d* = ∞ 超立方格子)

$$\rho_0(\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{\pi}D} e^{-(\epsilon/D)^2}, \quad K_0(z) = -i\frac{\sqrt{\pi}}{D} \operatorname{sgn}(z'') W\left(\operatorname{sgn}(z'')\frac{z}{D}\right),$$
$$\langle \epsilon_k \rangle_k = 0, \quad V = \frac{D}{\sqrt{2}},$$
(2.24)

ここで、 $W(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz)$ はファデーバ関数.

電子ホール対称条件が成り立つ場合, $\rho_0(\epsilon) = \rho_0(-\epsilon)$ であり, $\mu = \Sigma_H (\Sigma(i\omega_n) = \Sigma_H + \widetilde{\Sigma}(i\omega_n))$. このとき $z = i\omega_n - \widetilde{\Sigma}(i\omega_n)$ や $K_0(z)$ は純虚数である.

2.3. アンダーソン格子模型の場合

アンダーソン格子模型,

$$H = \sum_{k\sigma} \left[\epsilon_k c^{\dagger}_{k\sigma} c_{k\sigma} + \epsilon_{fk} f^{\dagger}_{k\sigma} f_{k\sigma} + v (f^{\dagger}_{k\sigma} c_{k\sigma} + c^{\dagger}_{k\sigma} f_{k\sigma}) \right] + U \sum_i n_{fi\uparrow} n_{fi\downarrow}, \tag{2.25}$$

の動的平均場理論の定式化も同じようにできる. 格子のグリーン関数 (c, f) は,

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n)^{-1} = \begin{pmatrix} i\omega_n + \mu - \epsilon_k & -\upsilon \\ -\upsilon & i\omega_n + \mu - \epsilon_{fk} - \Sigma(i\omega_n) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} z_c - \epsilon_k & -\upsilon \\ -\upsilon & z_f - \epsilon_{fk} \end{pmatrix},$$
(2.26)

であり、この局所平均は,

$$G(i\omega_n) = \left\langle \frac{1}{(z_c - \epsilon_k)(z_f - \epsilon_{fk}) - v^2} \begin{pmatrix} z_f - \epsilon_{fk} & v \\ v & z_c - \epsilon_k \end{pmatrix} \right\rangle_k \equiv \begin{pmatrix} G_c(i\omega_n) & G'(i\omega_n) \\ G'(i\omega_n) & G_f(i\omega_n) \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

となる. $G(i\omega_n)$ と $\Sigma(i\omega_n)$ が有効不純物問題の G_f と Σ_f に等しいとすると、キャビティグリーン関数は、

$$\mathcal{G}(i\omega_n)^{-1} = G_f(i\omega_n)^{-1} + \Sigma(i\omega_n), \qquad (2.28)$$

により求められる. 与えられた有効媒質 $G(i\omega_n)$ に対して不純物問題を解いて $\Sigma_f(i\omega_n)$ を得る. これを (2.26) に代入し、自己無撞着な解を求めればよい.

とくに ϵ_{fk} が k に依らない場合, $y_f = z_f - \epsilon_f$ として,

$$G_c(i\omega_n) = K_0 \left(z_c - \frac{v^2}{y_f} \right), \quad G_f(i\omega_n) = \frac{1}{y_f} + \left(\frac{v}{y_f} \right)^2 G_c(i\omega_n), \quad G'(i\omega_n) = \frac{v}{y_f} G_c(i\omega_n), \quad (2.29)$$

であり, $G_{c0}(i\omega_n)^{-1} \equiv G_c(i\omega_n)^{-1} + v^2/y_f$ とおけば,

$$\mathcal{G}_f(i\omega_n)^{-1} = y_f - v^2 G_{c0}(i\omega_n) + \Sigma(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \epsilon_f - v^2 G_{c0}(i\omega_n), \qquad (2.30)$$

となる.よって、 $E_f = \epsilon_f - \mu, \Delta(i\omega_n) = v^2 G_{c0}(i\omega_n)$ の有効不純物問題を解けばよい.

2.4. 不純物ソルバー

代表的な不純物ソルバーには以下のものがある.

- ウィルソンの数値繰り込み群 (NRG).
- 数值対角化 (ED).
- 摂動論 (IPT).
- 量子モンテカルロ法 (Hirsch-Fye QMC).
- 連続時間量子モンテカルロ法 (CT-QMC).
- 非交差近似 (NCA).

それぞれの手法の概略と長所・短所を簡単にまとめておく.

ウィルソンの数値繰り込み群 (NRG)

近藤問題の全貌を解決するためにウィルソンが提案した方法で,繰り込み群の考え方を明確に示す例に もなっている.低エネルギーの有効ハミルトニアンを導出することもでき,温度グリーン関数を用いない ため,解析接続の必要なしにグリーン関数や動的帯磁率などの実振動数 ω スペクトルを求めることも可 能.熱力学量も求めることができ,低エネルギーで非常に精度が高い.ただし,多軌道系になると計算量 が飛躍的に増大する.また,有限温度の計算は難しい.

数值対角化 (ED)

数値的に固有値問題を解く.比較的プログラムが容易.弱相関から強相関まで安定した解が求まる.ただし,有効媒質を少数のサイトで代理するため,サイズ依存性に注意する必要あり.温度グリーン関数, 遅延グリーン関数ともに求められるが,少数系のため動的スペクトルはスパイク状になり,その解釈は難しい.多軌道系になると計算量が飛躍的に増大し,有限温度の計算も難しい.

摂動論 (IPT)

自己エネルギーを2次摂動によって求める.プログラムが容易.電子ホール対称性がある場合は,弱相関,強相関の両極限を再現するため,比較的よい近似になっている.非常に簡単に,温度グリーン関数, 遅延グリーン関数などが求まり,動的スペクトルの全貌が分かりやすいので,さまざまな計算の参照手法 として役立つ.動的帯磁率など2体の応答関数は単純には計算できない.磁場効果など電子ホール対称性 を破る場合の正当性は保証されない.

量子モンテカルロ法 (Hirsch-Fye QMC)

相互作用を離散的な補助場に置き換え,モンテカルロ・サンプリングして求める.プログラムは比較的 容易.一般には負符号が現れるので,十分なサンプル数を測定する必要がある.多軌道系で,交換相互作 用が扱えない.虚時間を離散的に Trotter 分解するので,低温になるほど分割数を大きくする必要があり, 計算量が増大する.そのため,あまり低温の計算はできない.原理的に温度グリーン関数を用いるため, 動的スペクトルを得るには数値的な解析接続が必要.統計誤差を含むため,通常,最大エントロピー法が 用いられる.

連続時間量子モンテカルロ法 (CT-QMC)

多体摂動論に基づき,各摂動項をモンテカルロ・サンプリングして求める.プログラムは少し難しい. 一般には負符号が現れるので,十分なサンプル数を測定する必要がある.多軌道系では計算量が増大する ため,保存量を利用するなどの工夫が必要.かなり低温まで現実的な計算時間で計算できる.原理的に温 度グリーン関数を用いるため,動的スペクトルを得るには数値的な解析接続が必要.統計誤差を含むた め,通常,最大エントロピー法が用いられる.現在,もっとも強力な手法.

非交差近似 (NCA)

逆核 (resolvent) グリーン関数または補助ボーズ粒子 (slave boson) を用い,混成強度に関する摂動によ り自己無撞着な解を求める.保存近似であるが,低温・低振動数領域で動的物理量に異常が現れフェルミ 液体を再現できない.最初 *U* = ∞ で導入された近似だが,有限の *U* の場合に拡張されている.ただし, その場合,バーテックス補正が必要で定式化が難しくなる.実振動数を用いた計算であり,数値的に解析 接続する必要がない.多軌道の場合に拡張が容易で計算量も比較的少ないことから,現実的な多軌道・バ ンド構造を考慮した計算に用いられることが多い.

3. 1 不純物問題と近藤効果

動的平均場理論では,有効媒質(動的な平均場)中で1不純物問題を解き,有効媒質を自己無撞着に決定する.そのため,1不純物問題の物理,すなわち近藤効果を理解しておく必要がある.

「近藤効果」はいろいろな意味で用いられる. もともと 1930 年代はじめに発見された抵抗極小の現 象 [23] に対する 1964 年の近藤の理論的解明 [24] に対して「近藤効果」が用いられるようになった. この 理論は抵抗極小を解明したが,同時に,この現象の背後にある多体効果の重要性を認識させることとなっ た. その後の研究で,基底状態は「近藤一重項」という局所的なフェルミ液体で記述されることが明らか になり [25,26,27,28,29],これを「近藤効果」と呼ぶ場合もある.しかし,アンダーソンがその著書で強 調するように,「近藤効果」のもつ最も重要な意義は,上記 2 つの「近藤効果」を接続する過程にある [2]. 本節では,このような視点から「近藤効果」を説明する.

3.1. アンダーソン模型と局所フェルミ液体

近藤効果の舞台は、少量の磁性不純物を含んだ金属である。このような状況を記述する最も簡単な模型が、(2.11)の1不純物アンダーソン模型である [20].磁性不純物の磁性を担う電子がf電子、まわりのホスト金属がc電子である。以下では、 E_k の代わりに ξ_k と書くことにする。

f 電子のグリーン関数は (2.13) であり、スピン依存性を顕わに書くと、

$$G_{f\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_f - \Sigma_{f\sigma}(i\omega_n) - \Delta(i\omega_n)}, \quad \Delta(i\omega_n) = V^2 \left\langle \frac{1}{i\omega_n - E_k} \right\rangle_k, \tag{3.1}$$

である. 伝導電子のバンド幅が、 ω に比べて十分大きければ、 $\Delta(\omega) \sim -i\Delta_0, \Delta_0 = \pi \rho_c V^2$ となる. U = 0($\Sigma_{f\sigma} = 0$)でも、f 準位は伝導電子との混成により有限の幅 Δ_0 を持つ.

まず、 $U = 0, E_f = 0$ の場合を考えよう. この時、f 準位はフェルミ準位に等しいので、↑と↓スピンの 電子が等確率で存在する.f 電子のスピンを反転させるためには伝導電子と混成することが必要で、スピ ン反転に要する時間のスケールが Δ_0^{-1} である. これより速い時間スケール、エネルギーで言えば $T \gg \Delta_0$ では、↑や↓のスピン状態のスナップショットが見えるだろう. 従って、キュリー帯磁率 $\chi \sim \mu_{\text{eff}}^2/T$ が得 られる. 一方、 Δ_0^{-1} より長い時間スケール、 $T \ll \Delta_0$ 、でみれば、↑と↓スピンは平均化され、スピンは失 われたように見える. この場合パウリ帯磁率 $\chi \sim \mu_{\text{eff}}^2/\Delta_0$ を見ることになる.

U が有限で E_f がフェルミ準位より十分深い位置にあっても、多体効果によって繰り込まれた E_f^* がフェルミ準位近傍に位置する場合が考えられる。前節同様、自己エネルギーを $\omega = 0$ で展開すれば、 $\omega \sim 0$ で

$$G_{f}^{\mathrm{R}}(\omega) = \frac{z}{\omega - E_{f}^{*} + i\Delta^{*}},$$

$$z = \left[1 - \frac{\partial \Sigma_{f}'}{\partial \omega}\right]^{-1}, \quad E_{f}^{*} = z \left[E_{f} + \Sigma_{f}'(0)\right], \quad \Delta^{*} = z \left[\Delta_{0} - \Sigma_{f}''(\omega)\right], \quad (3.2)$$

と表される.繰り込まれたf準位が $E_f^* \sim 0$,スピン反転のエネルギースケールも $\Delta_0 \rightarrow \Delta^* \ll \Delta_0$ と繰り込まれるとき, $\omega, T \ll \Delta^*$ である限り、↑と↓スピンは平均化され、基底状態ではスピン1重項が実現する. Δ^* は後ほど述べる近藤温度 T_K に他ならない.また、1粒子状態密度にはフェルミ準位近傍に鋭い共

鳴ピーク (近藤共鳴) が現れる. 高温で局在スピンが顕在化している状況から局所フェルミ液体へ移行する 過程を理解することが近藤問題の中心課題である.

3.2. 磁気モーメントの発生と揺らぎ

 E_f がフェルミ準位より十分深い位置にあり、 $E_f + U$ がフェルミ準位より十分上にあれば、f 準位を 電子が1つだけ占有した状況が実現する.このことは、V = 0の場合を考えてみれば容易に分かるだ ろう.このような状況の下、局在スピンが発生する条件を平均場近似で調べてみよう.相互作用項を $Un_{f\sigma}n_{f-\sigma} \rightarrow U\langle n_{f-\sigma} \rangle n_{f\sigma}$ とすれば、平均場近似での自己エネルギーは $\Sigma_{f\sigma} = U\langle n_{f-\sigma} \rangle$ となる.グリー ン関数からf電子数を、

$$\left\langle n_{f\sigma}\right\rangle = T\sum_{n} G_{f\sigma}(i\omega_{n})e^{i\omega_{n}0_{+}} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega)\rho_{f\sigma}(\omega), \quad \rho_{f\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\,G_{f\sigma}^{\mathrm{R}}(\omega), \quad (3.3)$$

によって求めると、T=0で平均電子数を決める自己無撞着方程式,

$$\langle n_{f\sigma} \rangle = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left[\frac{E_f + U \langle n_{f-\sigma} \rangle}{\Delta_0} \right],$$
(3.4)

を得る. 簡単のため対称条件 $|E_f| = E_f + U$ の場合を考える. このとき,電子ホール対称性があるので, 平均 f 電子数 $n_f = \langle n_{f\uparrow} \rangle + \langle n_{f\downarrow} \rangle$ は 1 に保たれる. 平均磁気モーメントを $m = (\langle n_{f\uparrow} \rangle - \langle n_{f\downarrow} \rangle)/2$ とすれ ば $\langle n_{f\sigma} \rangle = 1/2 + \sigma m$ であり,自己無撞着方程式は $\tan(\pi m) - Um/\Delta_0 = 0$ となる. Δ_0 はスピンを反転さ せて消失させる役割を, U はスピンを顕在化させる役割を果たすので, $U > U_c = \pi \Delta_0$ で, $m \neq 0$ の解が 安定となり,磁気モーメントが発生することが分かる. この事情は,次の「自由エネルギー」

$$F(m) = -\frac{U_c}{\pi^2} \ln \cos(\pi m) - \frac{U}{2}m^2,$$
(3.5)

を考えると分かりやすい^{*3}. F(m)は、停留点を求める方程式 dF/dm = 0 が自己無撞着方程式となるように定義した. $|m| \ll 1$ として展開すれば

$$F(m)/U_c \sim \frac{1}{2} \left(1 - \frac{U}{U_c}\right) m^2 + \frac{\pi^2}{12} m^4,$$
 (3.6)

となるので、図5に示すように $U > U_c$ で $m \neq 0$ の解が安定化することが分かる.

以上は平均場近似の結果であり、平均値 ⟨n_σ⟩ からの揺らぎを無視している. 揺らぎを無視する近似は、 揺らぎの特徴的な時間 1/T* よりも短い時間スケールで正当化される. つまり、平均場近似は T* より高温 の描像を与えるものと理解される. 高温で発生した局在スピンは、T ≪ T* の温度領域では、揺らいでい るスピンの長時間平均に対応して消失してしまう. このような結果を得るためには、平均場近似を超えて スピンの揺らぎを正しく取り扱う必要がある. このような事情を図 5 に示した.

平均場近似の自己エネルギーは電荷揺らぎの長時間平均によるエネルギーシフトを表す.このとき「繰り込まれた」f 準位は, $E_f^* = E_f + U\langle n_{f-\sigma} \rangle = 0$ となりフェルミ準位に一致する.近藤共鳴準位がフェルミ準位近傍に現れるのはこの理由による.

^{*3}経路積分形式を用いて補助場を導入すれば、フェルミオン自由度を積分して補助場に関するポテンシャルを求めることができる. このポテンシャルが、ここでの「自由エネルギー」に対応する [9].



Fig. 5 局在スピン m と「自由エネルギー」の関係. $U > U_c$ で局在スピンが発生する。発生したスピンは $1/T^*$ の時間スケールでスピンを反転する。

3.3. c-f 交換模型と「元祖」近藤効果

 E_f がフェルミ準位より十分深い位置にあり、 $E_f + U$ がフェルミ準位より十分上にあれば、f 準位を占有する電子数は1に固定して良いだろう。このとき、f 電子のもつ電荷の自由度は凍結され、スピンの自由度だけが問題となる。f 電子数を1に固定したヒルベルト空間における有効ハミルトニアンは V の 2 次摂動から導くことができる [30].計算の詳細は [26] などを参考にしてもらうとして、結果を示すと

$$H = \sum_{k\sigma} E_{k} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k'k} \left[v \sum_{\sigma} c_{k'\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + J s(k', k) \cdot S \right],$$

$$v = \frac{V^{2}}{2} \left[\frac{1}{|E_{f}|} - \frac{1}{|E_{f}|} + \frac{1}{|E_{f}|} \right], \quad J = 2V^{2} \left[\frac{1}{|E_{f}|} + \frac{1}{|E_{f}|} + \frac{1}{|E_{f}|} \right], \quad (3.7)$$

となる. ここで, $\xi_k \in U \Leftrightarrow E_f$ に比べて無視した. *S* は f 電子のスピン演算子, $s(k',k) = \sum_{\sigma'\sigma} c^{\dagger}_{k'\sigma'} c_{k\sigma} \sigma_{\sigma'\sigma}/2$ は伝導電子のスピン演算子である. 対称条件 $|E_f| = E_f + U$ の場合, v = 0, $J = 8V^2/U > 0$ である. この有効模型を (反強磁性的な) c-f 交換模型と呼ぶ.

さて、c-f 交換模型に基づいて、「元祖」近藤効果について説明する。磁性不純物を少量含む金属における電気抵抗の典型的な振る舞いを図 6 に示す。降温とともに電気抵抗は減少し、その後 – ln T 的に増大して低温極限で残留抵抗値 ρ_0 に T^2 的に近づく。高温の T^5 の振る舞いは格子振動による散乱から生じる電気抵抗と理解される。– ln T 的な増大の原因が 30 年間謎であったわけである。

c-f 交換模型を用いて電子の散乱振幅 T(k',k) を計算すると、J について最低次のボルン近似では T(k',k) = Jとなり、温度に依存しない.近藤は、J の 2 次過程 (第 2 ボルン近似) において $-\ln T$ 依存性 を与える散乱過程を見出した [24]. そのような散乱過程の一部を図 7 に示す.それぞれの散乱振幅は

$$T_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = \left\langle \mathbf{k}' \uparrow \left| \sum_{\mathbf{k}''} \frac{\left(\frac{J}{2} S^{-} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}''\downarrow} \right) \left(\frac{J}{2} S^{+} c_{\mathbf{k}''\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right)}{-|E_{\mathbf{k}''}|} \right| \mathbf{k} \uparrow \right\rangle,$$
(3.8a)

$$T_{b}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = \left\langle \mathbf{k}' \uparrow \left| \sum_{\mathbf{k}''} \frac{\left(\frac{J}{2} S^{+} c_{\mathbf{k}'' \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k} \uparrow} \right) \left(\frac{J}{2} S^{-} c_{\mathbf{k}' \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'' \downarrow} \right)}{|E_{\mathbf{k}''}|} \right| \mathbf{k} \uparrow \right\rangle,$$
(3.8b)



Fig.6 電気抵抗極小現象の典型的振る舞い.



Fig. 7 – ln T 依存性を与える散乱の 2 次過程.

となる.両方の寄与を合わせると

$$T_{a+b}(k',k) = \frac{J^2}{4} \left[S^+, S^- \right] \sum_{k''} \frac{\langle c_{k''\downarrow} c_{k''\downarrow}^\dagger \rangle}{|E_{k''}|} = \frac{J^2}{4} \left[S^+, S^- \right] \rho_c \ln\left(\frac{D}{T}\right), \tag{3.9}$$

となり – ln(*T*/*D*) 項が得られる (2*D* は伝導電子のバンド幅). (i) f 電子のスピンが内部自由度を持つ量子 スピンであること, (ii) 散乱の中間過程で他の電子の分布 (フェルミ分布) が関与すること, (iii) フェルミ 準位近傍に温度 *T* 程度で励起される連続的な電子状態があること, によって対数項が生じていることが分 かる. 一般のスピン *S* の場合について, 第 2 ボルン近似での電気抵抗の表式を与えておく [26].

$$\rho(T) = \rho_{\rm B} \left[1 + 2\rho_c J \ln\left(\frac{D}{T}\right) \right], \qquad (3.10)$$

ここで, $\rho_{\rm B} = \rho_s [\rho(\pi \rho_c J/2)^2 S(S+1) はボルン近似による電気抵抗値である. <math>\rho_s = 4\pi/ne^2 k_{\rm F}$ は s 波散 乱から生じる最大の電気抵抗で,ユニタリティ極限の抵抗値と呼ばれる.

第2ボルン近似によって電気抵抗における – ln(T/D) 項の起源は理解された.しかしながら、 $\rho_c J \ll 1$ であっても対数項のために降温とともに2次項の寄与が増大し、Jに関する摂動論は破綻する.第2ボルン近似の結果は、最低次のボルン近似の表式において $J \rightarrow J_{\text{eff}}(T) = J[1 + \rho_c J \ln(D/T)]$ とすれば得られることに注意すれば、近藤温度

$$T_{\rm K} = D \exp[-1/\rho_c J],$$
 (3.11)

と呼ばれる温度で $\rho_c J \ln(D/T) = 1$ となり、高次項の寄与を考慮する必要があることが分かる。アブリコ

ソフは高次項の中で最も発散の強い項だけを考慮して,

$$J_{\rm eff}(T) = \frac{J}{1 - \rho_c J \ln(D/T)},$$
(3.12)

の結果を得た [31]. 有効交換相互作用 $J_{\text{eff}}(T)$ は $T = T_{\text{K}}$ で発散し,局在スピンと伝導電子がスピン 1 重 項を作って消失することを示唆している.このような物理的解釈から芳田らは基底 1 重項の理論を展開した [25,26].それによると,局在スピンは $\ell \sim v_{\text{F}}/T_{\text{K}}$ 程度の広がりを持った伝導電子のスピン偏極によっ て遮蔽されて一重項を形成する.

以上では、J > 0の反強磁性的な交換相互作用を考えた。J < 0の強磁性的な交換相互作用の場合、 $T \rightarrow 0$ で $J_{\text{eff}}(T) \rightarrow 0$ となって、局在スピンは低温極限で自由スピンとして振る舞うという結論が得られる^{*4}.

3.4. スケーリングによる解釈

前節で見たように,最低次の結果において J の代わりに温度に依存する有効相互作用 $J_{\text{eff}}(T)$ を用 いれば,高次摂動の結果が得られる.このような見方を最初に指摘したのはアンダーソンである [32]. これを示すために,いわゆる"poor man's scaling"と呼ばれる方法を紹介しよう.この方法では,伝導 電子のバンド幅を $D \rightarrow D_{\text{eff}} = D - dD$ に変化させた時,散乱の中間状態に現れる高エネルギー過程 $(D - dD < |\xi_k| < D)$ を消去して,バンド幅 D_{eff} の系の有効相互作用を求める.

散乱の T 行列は

$$T(\omega) = J + JG_0 T(\omega), \qquad (3.13)$$

のダイソン方程式を満たす. $G_0 = \sum_n |n\rangle \langle n|/(\omega - E_n)$ は中間状態のグリーン関数である.フェルミ準位 近傍の外部エネルギー $\omega \ll D$ を考え,グリーン関数における中間状態 $|n\rangle$ を低エネルギー状態に制限 (G_0^{low} と表す)した時

$$T(\omega) = J_{\text{eff}}(D_{\text{eff}}) + J_{\text{eff}}(D_{\text{eff}})G_0^{\text{low}}T(\omega)$$
(3.14)

となるように $J_{\text{eff}}(D_{\text{eff}})$ を求める. dDを微小量として、中間状態の電子のエネルギーが $D - dD < |E_k| < D$ のものを G_0^{high} , $|E_k| < D - dD$ のものを G_0^{low} と表せば

$$T(\omega) = J + JG_0T(\omega) = J + JG_0^{\text{low}}T(\omega) + JG_0^{\text{high}}T(\omega)$$

$$= \left[J + JG_0^{\text{high}}J\right] + \left[J + JG_0^{\text{high}}J\right]G_0^{\text{low}}T(\omega) + JG_0^{\text{high}}JG_0^{\text{high}}T(\omega)$$

$$= J_{\text{eff}} + J_{\text{eff}}G_0^{\text{low}}T(\omega) + JG_0^{\text{high}}JG_0^{\text{high}}T(\omega), \quad J_{\text{eff}} \equiv J + JG_0^{\text{high}}J, \quad (3.15)$$

と変形できる. $G_0^{\text{high}} \sim \rho_c dD/D$ であり,最後の項 $(O(dD/D)^2)$ を高次の微小量として無視すれば

$$J_{\rm eff}(D-dD) = J_{\rm eff}(D) + J_{\rm eff}^2(D)\frac{\rho_c dD}{D} \quad \Rightarrow \quad \frac{dJ_{\rm eff}(D)}{d\ln D} = -\rho_c J_{\rm eff}^2(D), \tag{3.16}$$

の微分方程式 (one-loop のスケーリング方程式という) を得る*5. 図 8 に"poor man's scaling"の図解的

^{*4}ただし,温度依存性には 1/ ln(D/T) の弱い異常が残る.

^{*5}ここでの取り扱いは交換相互作用の係数についての議論である.より一般的な取り扱いについては [33,34] を参照されたい.



Fig. 8 "poor man's scaling"の図解的説明.

説明をあげておく. バンド幅 2D の時 $J_{\text{eff}}(D) = J$ の境界条件でこれを解いて、 $D_{\text{eff}} = T$ とすれば

$$J_{\rm eff}(T) = \frac{J}{1 - \rho_c J \ln(D/T)},$$
(3.17)

を得る. この結果は,最強発散項を集めた摂動論の結果 (3.12) と一致する. こうして,温度 T での物理量は,繰り込まれた有効相互作用 J_{eff}(T) を用いて得られるという解釈が可能となる.

 $T_{\rm K}$ 程度の温度領域で、 $\rho_c J \sim 1$ となって J に関する摂動論的な取り扱いは破綻するので、より低温の結果は信用できない.すべての温度領域で正しい結果は、後述するウィルソンによる数値繰り込み群法 (NRG) によって得られた [27,28].各近似による有効相互作用の振る舞いを図9にまとめておく.

3.5. 1粒子スペクトル

フェルミ準位から遠く離れた状態や $T_{\rm K}$ より高温の状態は $\rho_c J_{\rm eff}(T) \ll 1$ であり、最も荒い近似として $V \sim 0$ としよう. このとき、c 電子と f 電子は分離し、f 成分のスペクトルウェイトとグリーン関数は厳密に、

$$A_{\sigma}(x) = \left(1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle\right) \delta(x - E_f) + \langle n_{f-\sigma} \rangle \delta(x - E_f - U), \qquad (3.18)$$

$$G_{f\sigma}^{\rm R}(\omega) = \frac{1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle}{\omega - E_f + i\delta} + \frac{\langle n_{f-\sigma} \rangle}{\omega - (E_f + U) + i\delta'}$$
(3.19)



Fig.9 有効相互作用 $J_{\text{eff}}(T)$ の温度依存性.

と求まる. 自己エネルギーは,

$$\Sigma_{f\sigma}^{\rm R}(\omega) = U\langle n_{f-\sigma}\rangle + \frac{U^2\langle n_{f-\sigma}\rangle(1-\langle n_{f-\sigma}\rangle)}{\omega+i\delta-(E_f+U)+U\langle n_{f-\sigma}\rangle},\tag{3.20}$$

である.ここで,平均f電子数は,

$$\langle n_{f\sigma} \rangle = \frac{e^{-\beta E_f} + e^{-\beta(2E_f + U)}}{1 + 2e^{-\beta E_f} + e^{-\beta(2E_f + U)}},$$
(3.21)

で与えられる.スピン σ の状態密度におけるピークは、 $-\sigma$ スピンの電子がいない場合 $\omega = E_f$ に位置し、 $-\sigma$ スピンの電子がいる時は $\omega = E_f + U$ に位置する.実際には V が有限なので、これらの準位は Δ_0 程度の幅を持つ.

一方, $T \ll T_{\rm K}$ では局所フェルミ液体になっており,このとき自己エネルギーの虚部が ${\rm Im} \Sigma_{f}^{\rm R}(\omega) \propto \omega^{2}$ (T = 0) であることに注意して (3.2) で $\omega = 0$ とすると,

$$\rho_f(\omega=0) = \frac{z\Delta^*/\pi}{E_f^{*2} + \Delta^{*2}} = \frac{\Delta_0/\pi}{(E_f + \Sigma'_f(0))^2 + \Delta_0^2},$$
(3.22)

となり,繰り込み因子 z がキャンセルして, $\rho_f(\omega = 0)$ の値は,U = 0のものと同じ程度になる。特に, 電子ホール対称性がある場合, $E_f + \Sigma'_f(0) = 0$ だから, $\rho_f(0) = 1/\pi \Delta_0$ となって,U = 0の値に一致する。

このように、f 電子の全スペクトルのうち、 $\omega \sim E_f, E_f + U$ のピークは局在描像に由来するもので、その温度依存性は弱い.一方、 $\omega = 0$ 付近のピークは強い温度依存性を持ち、 $T \gg T_K$ では存在しないが、 $T \ll T_K$ になると、急速に成長してT = 0でU = 0と同程度の大きさになる.このピークを近藤共鳴ピー クと呼ぶ.電子ホール対称条件の場合に、f 電子の状態密度とその温度変化を図 10 に示す. $T \ll T_K$ では $\omega \sim 0$ 付近に近藤共鳴ピークが形成される. $T \gg T_K$ では共鳴ピークは消失し、 $\omega \sim E_f \ge E_f + U$ の局所 的な f 状態だけが残る.

3.6. アンダーソン模型から見た近藤効果

アンダーソン模型に基づく局所電子相関の問題 (近藤問題)の概観図を図 11 に示す. アンダーソンは 平均場理論で局在モーメントが発生する条件を求めた. しかし,実際にはスピンは絶えず反転している



Fig. 10 不純物アンダーソン模型における f 電子の1 粒子スペクトルとその温度変化 (電子ホール対称) [35].



Fig. 11 アンダーソン模型からみた近藤問題.

ので $\langle S \rangle = 0$ である.すなわち 0 次元で相転移は起こらない.局在モーメント発生の条件は,むしろ $\langle S^2 \rangle \sim S(S+1)$ となる目安を与えると理解する方がよい. $U/\pi \Delta_0 \gg 1$ では電荷の自由度は凍結し,正準 変換から得られる c-f 交換模型が有効模型となる. $\rho_c J \ll 1$ であるから J に関する低次の摂動論が有効と 思われるが,降温とともにスピンの揺らぎが対数的に増大し,摂動論は T_K 程度のエネルギースケールで 破綻する.非摂動的な取り扱いによってはじめて近藤 1 重項という正しい基底状態に辿り着くことができ る. c-f 交換模型は $T \ll U$ である限りアンダーソン模型の有効模型であるから,両者の模型の基底状態が 一致するのは必然である.また,アンダーソン模型の基底状態は,U に関する断熱接続性が保証されてい るのでフェルミ液体論に基づいて 1 重項となり [26],近藤 1 重項と繋がっているのである. 2 次摂動

4. 不純物ソルバー: IPT と NCA

動的平均場理論では (2.17) の手順に従って自己無撞着方程式を解く. その際,有効不純物模型 (2.11) またはキャビティグリーン関数 (2.14) に対する有効不純物問題を解いて,自己エネルギーを求めなければならない.本節では,もっとも簡単な不純物ソルバーとして,相互作用 U に関する摂動展開と混成 V に関する摂動展開の方法を紹介しよう.

4.1. 2次摂動と IPT [36, 37, 38, 39]



Fig. 12 2 次摂動のファインマンダイアグラム, (a) ハートレー項, (b) 2 次項. 太線は $G_{f\sigma}$, 細線は G_{σ} , 点線は相互作用 U を表す.

U に関する摂動で最も簡単な近似は,自己エネルギーを 2 次摂動で求めるものである.ただし,全くの 自由粒子に関する摂動展開ではなくハートレー項 (図 12(a)) を取り入れた無摂動項から展開する点が重要 である.すなわち,*G*にはハートレー項の寄与を含ませ,

$$\mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n)^{-1} = i\omega_n - E_{f\sigma}^* - \Delta(i\omega_n), \quad E_{f\sigma}^* = E_f + \Sigma_{H\sigma} = E_f + U\langle n_{f-\sigma} \rangle, \tag{4.1}$$

ここで、 $\langle n_{f-\sigma}
angle$ は $G_{f\sigma}(i\omega_n)$ から求まる f 電子数であることに注意.2 次摂動のファインマンダイアグラムは、図 12(b) である.与えられたダイアグラムに対応する表式を求める規則は、

- (1)電子を表す矢印付き実線にフェルミ粒子の松原振動数を、相互作用の点線にボーズ粒子の松原振動 数を割り当てる。各バーテックス(点)では振動数が保存しなければならない。本節では、相互作用 は振動数に依らず、反平行のスピン間だけに働くことに注意。
- (2) ダイアグラム中のすべての独立な振動数についての和 (T ∑) を実行する.
- (3) 振動数 $\omega_{n'}$ の実線に $G(i\omega_{n'})$ を、点線に (-U) を割り当てる.
- (4) フェルミ粒子の閉じたループが奇数個ある場合, (-1)を掛ける.

この規則に従って、2次の自己エネルギーの表式を書き下すと、

$$\Sigma_{f\sigma}^{(2)}(i\omega_n) = -U^2 T^2 \sum_m \mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n + i\epsilon_m) \sum_{n'} \mathcal{G}_{-\sigma}(i\omega_{n'}) \mathcal{G}_{-\sigma}(i\omega_{n'} + i\epsilon_m).$$
(4.2)

フーリエ変換は,

$$\Sigma_{f\sigma}^{(2)}(\tau) = -U^2 \mathcal{G}_{\sigma}(\tau) \mathcal{G}_{-\sigma}(\tau) \mathcal{G}_{-\sigma}(-\tau) = U^2 \mathcal{G}_{\sigma}(\tau) \mathcal{G}_{-\sigma}(\tau) \mathcal{G}_{-\sigma}(\beta - \tau).$$
(4.3)



Fig. 13 対称条件の場合の 2 次の自己エネルギーの典型的振る舞い. (a) $\Sigma(i\omega_n)$, (b) $\Sigma^{\mathbb{R}}(\omega)$.

特に, \mathcal{G}_{σ} がスピン σ によらず,電子ホール対称性がある場合,常に $E_{f}^{*} = E_{f} + U/2 = 0$ であり, $\Sigma_{f}^{(2)}(i\omega_{n})$ は純虚数の奇関数, $\Sigma_{f}^{(2)}(\tau) = U^{2}\mathcal{G}(\tau)^{3}$ となる.

自己エネルギーの表式を解析接続するには、スペクトル表示を用いるのがよい.まず、

$$\begin{split} \chi_0(i\epsilon_m) &= -T \sum_n \mathcal{G}(i\omega_n) \mathcal{G}(i\omega_n + i\epsilon_m) = -T \sum_n \int dx \int dy \, \frac{A_0(x)}{i\omega_n - x} \frac{A_0(y)}{i\omega_n + i\epsilon_m - y} \\ &= -\int dx \int dy \, A_0(x) A_0(y) T \sum_n \left[\frac{1}{i\omega_n - x} - \frac{1}{i\omega_n + i\epsilon_m - y} \right] \frac{1}{i\epsilon_m - y + x} \\ &= -\int dx \int dy \, A_0(x) A_0(y) \frac{f(x) - f(y - i\epsilon_m)}{i\epsilon_m - y + x} = \int dx \int dy \, A_0(x) A_0(y) \frac{f(y) - f(x)}{i\epsilon_m - y + x} (4.4) \end{split}$$

次に,

$$T\sum_{m} \mathcal{G}(i\omega_{n}+i\varepsilon_{m})\frac{1}{i\varepsilon_{m}-y+x} = T\sum_{m} \int dz \frac{A_{0}(z)}{i\omega_{n}+i\varepsilon_{m}-z} \frac{1}{i\varepsilon_{m}-y+x}$$
$$= \int dz A_{0}(z)T\sum_{m} \left[\frac{1}{i\omega_{n}+i\varepsilon_{m}-z} - \frac{1}{i\varepsilon_{m}-y+x}\right]\frac{-1}{i\omega_{n}+y-x-z}$$
$$= \int dz A_{0}(z) \left[-n(z-i\omega_{n})+n(y-x)\right]\frac{-1}{i\omega_{n}+y-x-z} = -\int dz A_{0}(z)\frac{f(z)+n(y-x)}{i\omega_{n}+y-x-z} 4.5$$

以上より,

$$\Sigma_{f}^{(2)}(i\omega_{n}) = -U^{2} \int dx \int dy \int dz A_{0}(x)A_{0}(y)A_{0}(z) \frac{[f(y) - f(x)][f(z) + n(y - x)]}{i\omega_{n} + y - x - z}$$
$$= U^{2} \int dx \int dy \int dz A_{0}(x)A_{0}(y)A_{0}(z) \frac{f(x)f(-y)f(z) + f(-x)f(y)f(-z)}{i\omega_{n} - x + y - z}.$$
 (4.6)

最後の表式で、 $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ とすれば遅延グリーン関数が求まる。また、 $A_0(x) = -\text{Im} \, \mathcal{G}^{\mathbb{R}}(\omega)/\pi$ である。対称条件の場合の自己エネルギーの典型的な振る舞いを図 13 に示した。

IPT と金属絶縁体転移

2 次摂動で求めた自己エネルギーを不純物ソルバーに使って自己無撞着な動的平均場解を求める方法を 反復摂動理論 (IPT: Iterative Perturbation Theory) という.非常に簡便な方法ながら電子ホール対称条件



Fig. 14 モット絶縁体解の混成関数の振る舞い, (a) $\Delta(i\omega_n)$, (b) $\Delta^{\mathbb{R}}(\omega)$.

の場合には非常によい近似となっている。後述するように、良い結果を生む理由は、この条件では2次摂動の自己エネルギーが弱相関と強相関の両極限や高振動数極限を再現することにある。電子ホール対称条件がない場合、IPT はあまり良い結果を与えない。そのため、上述の極限を再現するような改良 (mIPT: modified IPT) が提案されている [40,41,42].

通常の近藤問題では $\Delta^{\mathbf{R}}(0)$ は有限なため, (3.22) および図 10 に示したように $\omega = 0$ にピークをもつ 状態密度 $\rho_f(\omega)$ となり,系は局所フェルミ液体となる.ところが,動的平均場理論では $\mathcal{G}^{\mathbf{R}}(\omega)$ あるい は $\Delta^{\mathbf{R}}(\omega)$ は自己無撞着に決定される動的平均場であり,臨界値 U_c より U が大きいとき $\Delta^{\mathbf{R}}(0) = 0$ とな る解が現れ, $\rho_f(\omega)$ の $\omega = 0$ 近傍のピークが消失する.この解がモット絶縁体の解を表しているのであ る [43,44].このとき, $\Sigma_f^{\mathbf{R}}(\omega)$ は $\omega \to 0$ で発散する.モット絶縁体解の $\Delta(i\omega_n)$ の様子を図 14 に示す.

このように動的平均場理論はモット転移を記述する1つの方法論を与えるのである.しかし,モット転移では自己エネルギーの k 依存性が本質的であるという主張があることや,動的平均場理論で得られる絶縁相ではマクロなスピンエントロピーが残ってしまう欠点があることなどに留意すべきである.

2次摂動と厳密な値との比較

2次摂動が良い結果を与えるのは、2次の自己エネルギーが*U*に関して弱相関領域だけでなく、 $V/U \ll 1$ の原子極限,高振動数極限 $|\omega_n| \to \infty$ において厳密な結果を再現するからである.以下、そのことを見てみよう.

厳密な原子極限 U/V → ∞ での自己エネルギーは既に (3.20) に与えられているので,ここでは,厳密 な自己エネルギーの高振動数極限を求めてみる [42]. グリーン関数のフーリエ変換の表式を部分積分して 高振動数展開すると,

$$G_{f\sigma}(i\omega_{n}) = \int_{0}^{\beta} d\tau \, G_{f\sigma}(\tau) e^{i\omega_{n}\tau} = -\frac{1}{i\omega_{n}} \left(G_{f\sigma}(0_{+}) - G_{f\sigma}(0_{-}) \right) - \frac{1}{i\omega_{n}} \int_{0}^{\beta} d\tau \, G_{f\sigma}^{(1)}(\tau) e^{i\omega_{n}\tau} = \cdots$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{M_{\sigma}^{(k)}}{(i\omega_{n})^{k+1}},$$
(4.7)

のように $i\omega_n$ の逆数展開の表式を得る. ここで、 $G_{f\sigma}(\beta_-) = -G_{f\sigma}(0_-)$ を用いた. また、

$$M_{\sigma}^{(k)} = (-1)^{k+1} \left[\frac{d^{k}}{d\tau^{k}} G_{f\sigma}(\tau) \Big|_{\tau=0_{+}} - \frac{d^{k}}{d\tau^{k}} G_{f\sigma}(\tau) \Big|_{\tau=0_{-}} \right],$$
(4.8)

である.一方,スペクトル表示を x について Taylor 展開して,

$$G_{f\sigma}(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A_{\sigma}(x)}{i\omega_n - x} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(i\omega_n)^{k+1}} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^k A_{\sigma}(x), \quad A_{\sigma}(x) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{f\sigma}^{\mathsf{R}}(x), \quad (4.9)$$

だから、 $M_{\sigma}^{(k)} = \int dx x^k A_{\sigma}(x)$ であることが分かる. $M_{\sigma}^{(k)} \in k$ 次のモーメントという.

 $G_{f\sigma}(\tau)$ の運動方程式から,

$$\frac{d^{k}}{d\tau^{k}}G_{f\sigma}(\tau) = (-1)^{k+1} \left\langle T_{\tau} \left(\mathcal{L}^{k} f_{\sigma}(\tau) f_{\sigma}^{\dagger} \right) \right\rangle, \quad \mathcal{L}A \equiv [A, H],$$
(4.10)

を得る. これを繰り返し適用して, (4.8) からモーメントを求めると,

$$M_{\sigma}^{(k)} = \left\langle \mathcal{L}^{k} f_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} \right\rangle + \left\langle f_{\sigma}^{\dagger} \mathcal{L}^{k} f_{\sigma} \right\rangle = \left\langle \left\{ \mathcal{L}^{k} f_{\sigma}, f_{\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle, \tag{4.11}$$

となる.具体的に低次のモーメントを求めてみると,

$$M_{\sigma}^{(0)} = \left\langle \left\{ f_{\sigma}, f_{\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle = 1,$$

$$M_{\sigma}^{(1)} = \left\langle \left\{ [f_{\sigma}, H], f_{\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle = \left\langle \left\{ E_{f} f_{\sigma} + U f_{\sigma} n_{f-\sigma} + \frac{V}{\sqrt{N_{0}}} \sum_{k} c_{k\sigma}, f_{\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle = E_{f} + U \left\langle n_{f-\sigma} \right\rangle,$$

$$M_{\sigma}^{(2)} = \left\langle \left\{ [[f_{\sigma}, H], H], f_{\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle = E_{f}^{2} + 2U E_{f} \left\langle n_{f-\sigma} \right\rangle + U^{2} \left\langle n_{f-\sigma} \right\rangle + V^{2},$$
(4.12)

である.

自己エネルギーも同様に振動数の逆数で $\Sigma_{f\sigma}(i\omega_n) = \sum_{k=0}^{\infty} C_{\sigma}^{(k)}(i\omega_n)^{-k}$ のように展開し、 $G_{f\sigma}(i\omega_n)$ の表式に代入すると、

$$G_{f\sigma}(i\omega_n) = \left[i\omega_n - E_f - V^2 \left\langle \frac{1}{i\omega_n - \xi_k} \right\rangle_k - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{C_{\sigma}^{(k)}}{(i\omega_n)^k} \right]^{-1}$$

$$\sim \frac{1}{i\omega_n} + \frac{E_f + C_{\sigma}^{(0)}}{(i\omega_n)^2} + \frac{C_{\sigma}^{(1)} - (E_f + C_{\sigma}^{(0)})^2 - V^2}{(i\omega_n)^3} + \dots = \frac{M_{\sigma}^{(0)}}{i\omega_n} + \frac{M_{\sigma}^{(1)}}{(i\omega_n)^2} + \frac{M_{\sigma}^{(2)}}{(i\omega_n)^3} + \dots, \quad (4.13)$$

となるので、係数を比較して、

$$C_{\sigma}^{(0)} = M_{\sigma}^{(1)} - E_{f} = U\left\langle n_{f-\sigma} \right\rangle, \quad C_{\sigma}^{(1)} = M_{\sigma}^{(2)} - \left(M_{\sigma}^{(1)}\right)^{2} - V^{2} = U^{2}\left\langle n_{f-\sigma} \right\rangle \left(1 - \left\langle n_{f-\sigma} \right\rangle \right), \quad (4.14)$$

を得る.以上より、高振動数極限は、

$$\Sigma_{f\sigma}(i\omega_n) = U\left\langle n_{f-\sigma}\right\rangle + U^2 \frac{\left\langle n_{f-\sigma}\right\rangle \left(1 - \left\langle n_{f-\sigma}\right\rangle\right)}{i\omega_n} + \cdots .$$
(4.15)

 $1/(i\omega_n)$ の次数までは、Vによらないことに注意しよう.

以上の準備のもと、2次摂動の原子極限と高振動数極限を厳密なものと比較してみよう.(4.3)の表式を 部分積分すると、

$$\Sigma_{f\sigma}^{(2)}(i\omega_n) = \frac{U^2}{i\omega_n} \left(\mathcal{G}_{\sigma}(\tau) \mathcal{G}_{-\sigma}(\tau) \mathcal{G}_{-\sigma}(\beta - \tau) e^{i\omega_n \tau} \right) \Big|_0^{\beta} + O(i\omega_n)^{-2} = \frac{U^2}{i\omega_n} \left\langle n_{f-\sigma} \right\rangle_0 \left(1 - \left\langle n_{f-\sigma} \right\rangle_0 \right) + O(i\omega_n)^{-2}$$

$$\tag{4.16}$$

となる. ここで $\langle n_{f\sigma} \rangle_0$ は G_{σ} より求まる粒子数であることに注意. 電子ホール対称のとき, $\langle n_{f\sigma} \rangle_0 = \langle n_{f\sigma} \rangle = 1/2$ であり, (4.15) のハートレー項を除いたものと一致する. 一方, 原子極限では $G_{\sigma}(i\omega_n)^{-1} = i\omega_n - E_{f\sigma}^*$ であり, $A_{0\sigma}(x) = \delta(x - E_{f\sigma}^*)$ を (4.6) に代入すると, $\langle n_{f\sigma} \rangle_0 = f(E_{f\sigma}^*)$ に注意して,

$$\Sigma_{f\sigma}^{(2)}(i\omega_n) = U^2 \frac{\langle n_{f-\sigma} \rangle_0 \left(1 - \langle n_{f-\sigma} \rangle_0\right)}{i\omega_n - E_{f\sigma}^*},\tag{4.17}$$

となる. 電子ホール対称のとき, 厳密な表式 (3.20) と一致する.

4.2. NCA [45, 46, 47, 48]

前節とは相補的な展開として混成 V に関する展開を考えよう.ここでは、 $U = \infty$ とし、スピン σ は ±1 だけを取るのではなく一般に N 個の値を取れるものと考えよう. $U = \infty$ としたから、f 電子の取り得 る状態は $|0\rangle$ か $|\sigma\rangle$ のみであり、f¹ 状態は N 重に縮退している.



Fig. 15 NCA における摂動ゴールドストーンダイアグラム, (a) $\Sigma_0(\omega)$, (b) $\Sigma_f(\omega)$, (c) 自己エネル ギーの母関数. 点線は f¹ 状態 $R_{f\sigma}$, 波線は f⁰ 状態 R_0 , 細線は c 電子を表す.

f⁰ 状態のエネルギーを E₀, f¹ 状態のエネルギーを E_f とすると,これらのエネルギーは伝導電子との混成 V によって補正を受ける. V に関する最低次の寄与は図 15 に示すゴールドストーン図形で表されるものであり,その表式はそれぞれ,

$$\Sigma_0(\omega) = V^2 \sum_{k\sigma} f(E_k) R_{f\sigma}^{(0)}(\omega + E_k), \quad R_{f\sigma}^{(0)}(\omega) \equiv \frac{1}{\omega - E_f}, \tag{4.18}$$

$$\Sigma_{\sigma}(\omega) = V^2 \sum_{k} [1 - f(E_k)] R_0^{(0)}(\omega - E_k), \quad R_0^{(0)}(\omega) \equiv \frac{1}{\omega - E_0}, \tag{4.19}$$

である. R⁽⁰⁾(ω) を (最低次の) 逆核 (resolvent) と呼ぶ.

補正を受けた結果,それぞれのエネルギーは $E_0 + \Sigma_0(\omega)$, $E_f + \Sigma_\sigma(\omega)$ になるので, resolvent に自己エ ネルギーの効果を含ませ,

$$\Sigma_{0}(\omega) = V^{2} \sum_{k\sigma} f(E_{k}) R_{f\sigma}(\omega + E_{k}), \quad R_{f\sigma}(\omega) \equiv \frac{1}{\omega - E_{f} - \Sigma_{\sigma}(\omega)},$$

$$\Sigma_{\sigma}(\omega) = V^{2} \sum_{k} [1 - f(E_{k})] R_{0}(\omega - E_{k}), \quad R_{0}(\omega) \equiv \frac{1}{\omega - E_{0} - \Sigma_{0}(\omega)},$$
(4.20)

とした方程式を解いて,自己エネルギーを自己無撞着に決定する.この方法を非交差近似 (NCA: Non-Crossing Approximation) という.これらの自己エネルギーは図 15(c) に示した1つの図形を母関数として点線や波線を切断して得られ,保存近似であることが保証される.この母関数図形の太線に図 15(a),

(b) のダイアグラムを順次挿入したとき得られる一連の図形は,点線と波線から成る1つのループにc電 子線が加わったものになるが,c電子線は決して交わらない.これが NCA の名前の由来である. 混成関数は,

$$\Delta^{\mathrm{R}}(\omega) = V^2 \sum_{k} \frac{1}{\omega + i\delta - E_k} = \int \frac{dx}{\pi} \frac{W(x)}{\omega + i\delta - x}, \quad W(x) = \pi V^2 \sum_{k} \delta(x - E_k) = -\mathrm{Im}\,\Delta^{\mathrm{R}}(\omega),$$
(4.21)

と書けるので、(4.20)を混成スペクトル W(x)を用いて書き換えると、

$$\Sigma_{0}(\omega) = \sum_{\sigma} \int \frac{dx}{\pi} W(x) f(x) R_{f\sigma}(\omega + x),$$

$$\Sigma_{\sigma}(\omega) = \int \frac{dx}{\pi} W(x) [1 - f(x)] R_{0}(\omega - x),$$
(4.22)

となる.動的平均場では有効媒質 W(x)を自己無撞着に決める必要がある.

f電子グリーン関数は定義に従って resolvent を用いて表すことができる.詳細は省いて結果だけを示すと,

$$G_{f\sigma}^{\rm R}(\omega) = \frac{1}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-\beta x} \left[\rho_0(x) R_{f\sigma}(x+\omega+i\delta) - \rho_\sigma(x) R_0(x-\omega-i\delta) \right], \tag{4.23}$$

ここで、 $\rho_0(\omega) = -\text{Im} R_0(\omega)/\pi$, $\rho_\sigma(\omega) = -\text{Im} R_{f\sigma}(\omega)/\pi$ とした.また、f 電子の分配関数は、

$$Z_f = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\pi} e^{-\beta x} \operatorname{Im}\left[R_0(x) + \sum_{\sigma} R_{f\sigma}(x)\right].$$
(4.24)

従って,状態密度は,

$$\rho_{f\sigma}(\omega) = \frac{1 + e^{-\beta\omega}}{Z_f} \int_{-\infty}^{\infty} dx \,\rho_0(x) \rho_\sigma(x+\omega), \tag{4.25}$$

と表される. NCA で計算された f 電子状態密度を図 16 に示す.

NCA は自己無撞着な 1/N 展開になっており [49], $N \gg 1$ の場合に良い結果を与える.しかし,有限の N では低温でフェルミ液体に成らず,小さい N では精度が悪くなるいう欠点がある.しかし, $T_{\rm K}/10$ 程度よりも高温では精度も高く,軌道縮退の多い現実的な系にも容易に適用できるという実用的な近似である.また,Uが有限の場合や N = 2 でも,より精度がよくなるような改良法も提案されている [50].



Fig. 16 NCA による f 電子状態密度 [46],

5. 不純物ソルバー: NRG [27,51]

ウィルソンは、アンダーソンのスケーリングの考え方を発展させて繰り込み群の概念を生み出した [27]. アンダーソンのスケーリングでは、高エネルギーの状態を消去して有効相互作用を導出するが、このよう な状態の消去に加えて状態空間の再規格化を行うことで、繰り込み群変換を定義した.こうして有効相 互作用で表される模型の性質を、繰り込み群変換に対する固定点として整理し、固定点の安定性や固定 点近傍の物理量を relevant 演算子, irrelevant 演算子などで特徴づけることが可能となった.繰り込み 群は初期の頃、2 次相転移の臨界現象の問題に適用されて成功を収め、現代の物理学において欠くことの できない基礎概念の1つとなっている。近藤問題に対してウィルソンが提案した数値繰り込み群 (NRG: Numerical Renormalizaton-Group)の方法は、その具体的な例題になっている。本節では繰り込み群の 考え方の初歩と NRG の具体的内容について説明する.

5.1. 繰り込み群 [2,19,27,52,53]

繰り込み群は、パラメータのセット *K* で特徴付けられるハミルトニアン H(K) に施す操作 *R* の集合で ある。例えば、アンダーソンのスケーリングでは、バンド幅 $D \in D - \delta D$ に縮める操作 *R* を行うと J(D)が $J' = J(D - \delta D)$ に変化した。この操作を一般的に、 $\mathcal{R}_{\alpha}H(K) = H(K')$ または $\mathcal{R}_{\alpha}(K) = K'$ と表そう。 α は操作を特徴付けるラベルで、スケーリングの例では δD である。一般にこの操作は非線形である。一 連の操作、

$$K' = \mathcal{R}_{\alpha}(K), \quad K'' = \mathcal{R}_{\alpha}(K'), \quad K''' = \mathcal{R}_{\alpha}(K''), \cdots,$$
(5.1)

は、パラメータ空間での点列もしくは軌跡を描くだろう。2つの操作は、

$$\mathcal{R}_{\alpha}[\mathcal{R}_{\beta}(K)] = \mathcal{R}_{\alpha+\beta}(K), \qquad (5.2)$$

を満たすように選ぶことができるので,これらの操作は群をなしている.しかし,スケーリングの例のように消去した自由度を元に戻すことはできないので,この群は,逆変換が存在しない群,すなわち半群である.

繰り込み群で非常に重要な概念に,操作を施しても変わらない点,すなわち,

$$\mathcal{R}_{\alpha}(K^*) = K^*, \tag{5.3}$$

を満たす「固定点」がある.繰り込み群操作を施していくと,固定点に近づいていくか遠ざかっていくか の2通りがある.固定点の近くで,

$$\mathcal{R}_{\alpha}(K^* + \delta K) \sim K^* + \mathcal{L}_{\alpha} \delta K, \qquad (5.4)$$

のように線形化する.ここで \mathcal{L}_{α} は線形演算子である.線形演算子の固有値と固有ベクトルを $\lambda_{n}^{*}(\alpha)$, $O_{n}^{*}(\alpha)$ とし、固有ベクトルが完全系をなしていると仮定する.このとき δK は固有ベクトルで以下のよう に展開できる、

$$\delta \mathbf{K} = \sum_{n} \delta K_{n} \mathbf{O}_{n}^{*}(\alpha), \quad \mathcal{L}_{\alpha} \delta \mathbf{K} = \sum_{n} \delta K_{n} \lambda_{n}^{*}(\alpha) \mathbf{O}_{n}^{*}(\alpha).$$
(5.5)

ある固定点の近くで m 回操作を行うと,

$$\mathcal{R}^{m}_{\alpha}(K^{*} + \delta K) \sim K^{*} + \sum_{n} \delta K_{n}(\lambda_{n}^{*})^{m} \mathbf{O}_{n}^{*},$$
(5.6)

となる. 固有値が $\lambda_n^* > 1$ であれば,繰り込み群操作を繰り返すと第 2 項が増大して固定点から離れて いく. 一方,固有値が $\lambda_n^* < 1$ であれば,固定点に近づいていく. $\lambda_n^* > 1$ の固有値をもつ演算子 O_n^* を relevant 演算子, $\lambda_n^* < 1$ の固有値をもつ演算子を irrelevant 演算子という. $\lambda_n^* = 1$ の場合,線形項では 振る舞いが分からず marginal 演算子という.

考える固定点ごとに固有値と固有ベクトル (演算子) は異なる. irrelevant な演算子のみを持つ固定点を 安定な固定点とよび, relevant な演算子が存在すれば不安定な固定点となる. ある固定点から別の固定点 への移り変わりをクロスオーバーという. 近藤問題の例では, $J^* = 0$ は (marginaly) irrelevant な強磁性 的 c-f 交換相互作用という演算子と relevant な反強的 c-f 交換相互作用を持ち,不安定な固定点である, $D \rightarrow 0$ にスケール変換していくと,反強的交換相互作用によって $J^* = \infty$ の安定な固定点へクロスオー バーしていく. 安定な $J^* = \infty$ 固定点の近傍,すなわち低温での物理量の振る舞いは,irrelevant 演算子 によって特徴付けられるのである.

5.2. NRG の定式化

NRG では、不純物問題の c 電子部分に着目して、その基底を繰り込み群操作が実行可能な形に変形し て計算を実行する. 1 中心問題の s 波散乱が問題の本質であり、c 電子のうち不純物と直接相互作用する のは高エネルギー部分、間接的に相互作用するのは低エネルギー部分である. そのため、図 17(a) のよう に、c 電子の基底を組み合わせて不純物サイトに局在したワニエ状態 *a*_{0σ} をとり、それに直交する空間的 拡がりが $\Lambda^{n/2}\xi_F$ 程度の球殻状態 $a_{n\sigma}$ を考える. ここで、 Λ は離散化パラメータ、 ξ_F はフェルミ波数の逆 数程度の長さスケールである. $a_{n\sigma}$ 状態は、バンド幅の半分を D としたとき、化学ポテンシャルから測っ て $D\Lambda^{-n/2}$ 程度のエネルギーを持つ状態に対応していて、拡がった波動関数ほどフェルミエネルギーに対 数的に近づく低エネルギー状態になっている (図 17(b)).



Fig. 17 NRG における c 電子基底, n で指定される離散状態に分割する. (a) 波動関数 n は実空間に おける $\Lambda^{n/2}\xi_F$ 程度の領域に存在, (b) n に対応する対数離散化エネルギー状態.

(2.11)を状態密度を用いて,

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\sigma} \int dE \,\rho_c(E) \left[E \,c_{E\sigma}^{\dagger} c_{E\sigma} + V(c_{E\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \text{h.c.}) \right] + H_{\text{local}}, \tag{5.7}$$

と書く.動的平均場理論で $\Delta^{\mathbf{R}}(\omega)$ が与えられると、状態密度は $\rho_c(\omega) = -\text{Im} \Delta^{\mathbf{R}}(\omega)/\pi V^2$ より求まる. H_{local} はf電子を含む局在部分を表す.

まず, 図 17(b) に従って, c 電子バンドを対数離散化する。各エネルギー区間 [$\Lambda^{-(j+1)}, \Lambda^{-j}$] ($j = 0, 1, \cdots$) を 1 つの演算子で代用しているので、この区間にわたる規格化を考慮すると、

$$c_{E\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\rho_{sj}D}} \Lambda^{j/2} b_{sj\sigma}, \quad (\Lambda^{-(j+1)} < sE < \Lambda^{-j}, \ s = \pm),$$
(5.8)

と離散化すればよい. s は化学ポテンシャルの上 (+) か下 (-) かを表す. ここで,

$$\rho_{sj} \equiv (1 - \Lambda^{-1})\rho_c(\epsilon_{sj}), \quad \epsilon_{sj} \equiv sD_\Lambda \Lambda^{-j}, \quad D_\Lambda \equiv \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2}D$$
(5.9)

のように、平均値エネルギー ϵ_{si} における状態密度を導入した。これを代入すると、c電子の部分は、

$$H_{c} = D_{\Lambda} \sum_{\sigma} \sum_{s}^{\pm} \sum_{j=0}^{\infty} s \Lambda^{-j} b_{k\sigma}^{\dagger} b_{k\sigma}, \quad k \equiv (s, j).$$
(5.10)

f電子と直接混成する局在したワニエ軌道 $a_{0\sigma}$ を,

$$a_{0\sigma} \equiv \int dE \,\rho_0(E) c_{E\sigma} = \sum_k u_{0k} b_{k\sigma}, \quad u_{0k} = \sqrt{\rho_k D} \Lambda^{-j/2}, \tag{5.11}$$

によって定義しよう.状態 a0g に直交する状態 ang を次々に生成して, c 電子部分のハミルトニアンを,

$$H_{c} = D_{\Lambda} \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \left[\epsilon_{n} \Lambda^{1/2} a_{n\sigma}^{\dagger} a_{n\sigma} + \xi_{n} (a_{n\sigma}^{\dagger} a_{n+1\sigma} + \text{h.c.}) \right],$$
(5.12)

の半1次元鎖のように表してみる.ユニタリー行列を用いて、 $a_{n\sigma} = \sum_k u_{nk} b_{k\sigma}$ とおき、これを半1次元 鎖ハミルトニアン (5.12) に代入して、元のハミルトニアン (5.10) と見比べると、以下の漸化式を得る、

$$\epsilon_{n} = \sum_{k} s \Lambda^{(n-1-2j)/2} u_{nk}^{2}, \quad \xi_{n}^{2} = \sum_{k} \left(s \Lambda^{(n-2j)/2} u_{nk} - \epsilon_{n} \Lambda^{1/2} u_{nk} - \xi_{n-1} \Lambda^{1/2} u_{n-1k} \right)^{2},$$
$$u_{n+1k} = \frac{1}{\xi_{n}} \left(s \Lambda^{(n-2j)/2} u_{nk} - \epsilon_{n} \Lambda^{1/2} u_{nk} - \xi_{n-1} \Lambda^{1/2} u_{n-1k} \right). \tag{5.13}$$

(5.11) および ξ₋₁ = 0 を初項とする漸化式よりハミルトニアンの係数が得られる^{*6}. 定数状態密度では,

$$\epsilon_n = 0, \quad \xi_n = (1 - \Lambda^{-(n+1)})(1 - \Lambda^{-(2n+1)})^{-1/2}(1 - \Lambda^{-(2n+3)})^{-1/2}, \quad u_{0k} = \sqrt{(1 - \Lambda^{-1})/2}\Lambda^{-j/2}.$$
 (5.14)

以上の結果をまとめると,

$$H = D_{\Lambda} \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \left[\epsilon_n \Lambda^{1/2} a_{n\sigma}^{\dagger} a_{n\sigma} + \xi_n (a_{n\sigma}^{\dagger} a_{n+1\sigma} + \text{h.c.}) \right] + V \sum_{\sigma} (a_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \text{h.c}) + H_{\text{local}}.$$
 (5.15)

このハミルトニアンは c 電子部分が n とともに $\Lambda^{-n/2}$ のように小さくなっていくので、半1次元鎖を有限サイズ N で切断し、拡大因子を掛けて、

$$H_N \equiv \Lambda^{(N-1)/2} \left\{ D_\Lambda \left[\sum_{n=0}^N \Lambda^{-(n-1)/2} \epsilon_n a_{n\sigma}^{\dagger} a_{n\sigma} + \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \xi_n (a_{n\sigma}^{\dagger} a_{n+1\sigma} + \text{h.c.}) \right] + V \sum_{\sigma} (a_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \text{h.c}) + H_{\text{local}} \right\}$$

$$(5.16)$$

としたものを考えよう.このとき、ハミルトニアンの低エネルギー部分は同程度の大きさになり、

$$H_{N+1} = \Lambda^{1/2} H_N + \sum_{\sigma} \epsilon_{N+1} a_{N+1\sigma}^{\dagger} a_{N+1\sigma} + \xi_N (a_{N\sigma}^{\dagger} a_{N+1\sigma} + \text{h.c.}), \quad (N \ge 0),$$
(5.17)

の漸化式を満たす.この関係式は,各ステップで Λ^{-1/2} 倍の小さなエネルギースケール (Λ^{1/2} 倍の大きな 空間スケール) を系に取り入れて,系のエネルギーを Λ^{1/2} 倍に拡大する繰り込み群操作の具体的な手続き を与えているのである.

5.3. 数値対角化と物理量

漸化式 (5.17) を解くには,数値対角化の順次行っていけばよい.ステップ N が増えるにつれて,低エ ネルギーの微細な構造が明らかになっていくのである.

ハミルトニアン H_N の厳密な固有状態と固有値を $|G,r\rangle_N$ と $E_N(G,r)$ としよう. ここで, G は保存量 を表し, r は同じ保存量の状態を区別するラベルである. N + 1 の固有状態は,エネルギー E_N , $a_{N\sigma}^{\dagger}$ の行 列要素 $M_{\sigma N}(G,r;G',r') = \langle G,r|a_{N\sigma}^{\dagger}|G',r'\rangle$ から以下のように漸化的に求めることができる.

(1) N+1系の基底を作る: $|G,r;k\rangle_B = \{a_{N+1\sigma}^{\dagger}\}_k |G_k,r\rangle$.

^{*6}実際の計算では漸化式を解いていくと数値誤差が蓄積して直交性が破れるので、シュミットの規格直交化を行うとよい.

- (2) 行列要素 M_{oN}(G,r;G',r') を用いて (1) の基底から保存量ごとのブロックハミルトニアンを求める.
- (3) ブロックハミルトニアンを対角化して,固有値 $E_{N+1}(G, \alpha)$ とユニタリー行列 $U_{N+1}(\alpha; r, k)$ を 得る.
- (4) 繰り込みのステップが進むと、全状態を計算機に記憶させることは不可能になるので、低エネル ギーの状態を 10³ ほど残し、高エネルギー状態は捨てる.この際、エネルギー的に縮退している状 態の一部を捨てると対称性が破れたりするので、捨てる状態のエネルギーが残す状態と有意に離れ ていることを確認する必要がある.
- (5) ユニタリー行列 $U_{N+1}(\alpha; r, k)$ を用いて,新しい行列要素 $M_{\sigma N+1}(G, r; G', r')$ を求める.

これらの操作を繰り返すと低エネルギーの構造がクローズアップされていく。局所磁化などを求めるに は、 f_{σ}^{\dagger} の行列要素を $a_{N\sigma}^{\dagger}$ と同様の手順で漸化的に求めていけばよい。系が固定点に近づくとエネルギー スキームは繰り込みステップ N にほとんど依存しなくなる。

繰り込み変換によって順に低エネルギー状態が得られることを用いると,各種熱力学量の不純物からの 寄与などを求めることができる.例えば,不純物の帯磁率への寄与は,

$$\chi_{\rm imp}(T) = \frac{(g_J \mu_B)^2}{T} \lim_{N \to \infty} \left[\frac{\operatorname{Tr} J_{zN}^2 e^{-\beta_N H_N}}{Z_N} - \frac{\operatorname{Tr} J_{zN}^2 e^{-\beta_N H_N^{(0)}}}{Z_N^{(0)}} \right], \quad Z_N = \operatorname{Tr} e^{-\beta_N H_N}, \tag{5.18}$$

で与えられる. ここで, J_{zN} は N サイト系のトータル角運動量の z 成分,第2項は c 電子の寄与を差し引 くためのもので, $H_N^{(0)}$ は不純物がない自由粒子系のハミルトニアンを表す. H_N は元のハミルトニアンを 拡大したものなので温度の逆数は $\beta_N = \Lambda^{-(N-1)/2}/T$ である. N サイト系の最も自然なエネルギースケー ル $K_N \equiv D\Lambda^{-(N-1)/2}$ を温度 $T = K_N$ に選ぶと,利用可能な状態を用いた最適な熱平均値を得ることがで きる.

同様に、グリーン関数や不純物の動的帯磁率などの動的物理量も以下のようにして求められる。例えば、T = 0でのf電子帯磁率 $\chi_{imp}(\omega)$ の虚部はスペクトル表示を用いて、

$$\operatorname{Im} \chi_{\operatorname{imp}}(\omega) = \frac{\pi}{Z_N} \sum_m |\langle g | J_{0z} | m \rangle|^2 \delta(\omega - (E_m - E_g)), \quad (\omega > 0),$$
(5.19)

と書ける. ここで, g は基底状態, m はエネルギー E_m の励起状態, J_{0z} は f 電子スピンを表す. 実際の計算では, デルタ関数をガウス関数で,

$$\delta(\omega - (E_m - E_0)) \to D_m(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi\eta\omega}} \exp\left[-(\ln(\omega/(E_m - E_0)) - \eta^2/2)^2/\eta^2\right],$$
 (5.20)

と表す. η はガウス関数の幅. 和は残した状態すべてにわたって取り,エネルギーは $\omega = K_N$ と選べばよい. グリーン関数なども同様の手続きで求めることができる. 有限温度の場合も $\omega \sim T \sim K_N$ とすれば計算可能だが, $\omega < T$ の領域は捨ててしまった励起状態間の寄与も無視できないため計算結果の精度は落ちる.

NRG を用いて求めた熱力学量や電気抵抗の温度依存性を図 18 に示す.近藤温度 $T_{\rm K}$ を境にして降温とともに磁気モーメントは消失していく.電気抵抗は – $\ln(T/D)$ の増大ののち T^2 的にユリタリティ極限の残留抵抗値に近づく.局在スピンの持つエントロピーの消失によって,比熱は $T_{\rm K}/3$ あたりにピークをもつ.また,f電子グリーン関数の計算結果を図 19 に示した.



Fig. 18 c-f 交換模型のさまざまな物理量の温度依存性.



Fig. 19 NRG で求めたアンダーソン模型 T = 0の状態密度. $E_f = -U/2, E_f/\Delta = -4, -3, -2$ の場合を示す [54].

5.4. 近藤模型における固定点の解析例

ウィルソンは NRG を用いて,近藤模型の低エネルギー状態を精度よく求め,固定点近傍の性質を議論 した.繰り込み変換を進めていくと,低エネルギー状態は固定点の状態に近づいていく.すなわち,低エ ネルギー状態の行列要素に関して,

$$\lim_{N \to \infty} \langle \alpha_N | H_N | \beta_N \rangle = \langle \alpha^* | H^* | \beta^* \rangle, \tag{5.21}$$

が成り立つ.ここで、*は固定点の量を表す.固定点のハミルトニアンと状態は、別の有効ハミルトニアンと有効基底を導入して、

$$\langle \alpha^* | H^* | \beta^* \rangle = \langle \alpha^*_{\text{eff}} | H^*_{\text{eff}} | \beta^*_{\text{eff}} \rangle, \qquad (5.22)$$

のように表すことができる。有効模型を導入することで固定点近傍の性質を簡潔にあらわすことができる のである。

固定点近傍を記述する有効ハミルトニアンを,

$$H_N^{\text{eff}} = H_{\text{eff}}^* + H_N^{\text{irr}}, \qquad (5.23)$$

のように固定点部分と irrelevant 部分の和として表そう. irrelevant 部分は,固定点近傍の物理量の振る 舞いを決定する.



Fig. 20 $\Lambda = 2$ and J = 0.05 の場合の励起エネルギーの繰り込みステップ依存性.

以下,近藤模型において上記の考え方を確認してみよう.NRG で用いる近藤模型は D = 1 として,

$$H_N = \Lambda^{(N-1)/2} \left[\sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} (a_{n\sigma}^{\dagger} a_{n+1,\sigma} + a_{n+1,\sigma}^{\dagger} a_{n\sigma}) + J \sum_{\sigma'\sigma} a_{0\sigma'}^{\dagger} \sigma_{\sigma'\sigma} a_{0\sigma} \cdot S \right].$$
(5.24)

 $\Lambda = 2, J = 0.05$ の場合の低エネルギーの繰り込みステップによる変化を図 20 に示す.

有限系の計算なので、N が偶数と奇数で異なるエネルギースキームが現れる。各実線は同じ量子数 (half-filled から測った粒子数 Q, 全スピン S) の状態を結んだものである。低エネルギー状態の量子数と 固定点でのエネルギーを表 2 にまとめておく. N < 10 あたりでは、有効相互作用 $J_{\text{eff}}(N)$ が小さく、低エ ネルギー状態は J に関する摂動によって記述できる。 $N \sim 30$ あたりで、系は弱結合から強結合ヘクロス オーバーして、N > 40 以降で強結合の固定点に近づいていく。基底状態の波動関数は、 $\ell = v_F/T_K$ 程度 の拡がりをもつ、いわゆる近藤クラウドになっている。繰り込み群の視点からみると、 ℓ 程度より内側に ある高エネルギーの c 電子は不純物スピンを遮蔽するのに使われ、それより外側の低エネルギーの c 電子 は f 電子スピンが失われたほぼ自由な状態になっているのである。すなわち、固定点の励起エネルギーは、

Q	S	励起エネルギー (N:偶数)	Q	S	励起エネルギー (N:奇数)
0	0	0	0	1/2	0
±1	1/2	0.6555	±1	0	0
0	0	1.311	0	1/2	1.297
0	1	1.311	0	1/2	1.297
±2	0	1.311	±1	0	1.297
±1	1/2	1.967	±1	1	1.297
±1	1/2	1.976	±2	1/2	1.297

Table. 2 固定点近傍の低エネルギー状態. half-filled から測った粒子数 Q, 全スピン S.

以下の有効ハミルトニアンを用いて記述することができる,

$$H_{\rm eff}^{*} = \Lambda^{(N-1)/2} \left[\sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} (a_{n\sigma}^{*\dagger} a_{n+1,\sigma}^{*} + a_{n+1,\sigma}^{*\dagger} a_{n\sigma}^{*}) + J^{*} \sum_{\sigma'\sigma} a_{0\sigma'}^{*\dagger} \sigma_{\sigma'\sigma} a_{0\sigma}^{*} \cdot S \right],$$
(5.25)

ここで、J* = ∞ として、結局、自由な粒子系、

$$H_{\rm eff}^* = \Lambda^{(N-1)/2} \left[\sum_{\sigma} \sum_{n=1}^{N-1} \Lambda^{-n/2} (a_{n\sigma}^{*\dagger} a_{n+1,\sigma}^* + a_{n+1,\sigma}^{*\dagger} a_{n\sigma}^*) \right],$$
(5.26)

に帰着する.n = 0成分が失われたことに注意する.有効基底 $a_{n\sigma}^*$ は元の粒子ではなく準粒子状態を記述していると見なすべきである.自由粒子系なので容易に対角化することができ,

$$H_{\text{eff}}^{*} = \begin{cases} \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N/2} \eta_{i}(g_{i\sigma}^{\dagger}g_{i\sigma} + h_{i\sigma}^{\dagger}h_{i\sigma}) & (N : \text{even}), \\ \sum_{\sigma} \left[\eta_{0}'g_{0}^{\dagger}g_{0} + \sum_{i=1}^{(N-1)/2} \eta_{i}'(g_{i\sigma}^{\dagger}g_{i\sigma} + h_{i\sigma}^{\dagger}h_{i\sigma}) \right] & (N : \text{odd}). \end{cases}$$
(5.27)

となる. ここで, $g_{i\sigma}^{\dagger}$ は, スピン σ , エネルギー η_i または η'_i の準粒子を生成する演算子である. $h_{i\sigma}^{\dagger}$ は, ホールの生成演算子. 励起エネルギーは離散化パラメータ Λ に依存し, $\Lambda = 2$ の場合,

$$\eta_1 = 0.6555, \ \eta_2 = 1.976, \ \dots, \ \eta_i = \Lambda^{i-1},$$
(5.28)

$$\eta'_0 = 0, \quad \eta'_1 = 1.297, \quad \eta'_2 = 2.827, \quad \dots, \quad \eta'_i = \Lambda^{i-1/2},$$
(5.29)

であり、 $\{a_{n\sigma}^*\}$ と $\{g_{i\sigma}, h_{i\sigma}\}$ の関係は、N が偶数の場合、

$$a_{1\sigma}^* = \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_{i=1}^{N/2} \alpha_i (g_{i\sigma} + h_{i\sigma}^{\dagger}), \quad a_{2\sigma}^* = \Lambda^{-3(N-1)/4} \sum_{i=1}^{N/2} \gamma_i (g_{i\sigma} - h_{i\sigma}^{\dagger}), \quad \dots,$$
(5.30)

$$\alpha_1 = 0.588, \ \alpha_2 = 0.629, \ \dots, \ \alpha_i = \alpha \Lambda^{(i-1)/2} \quad \alpha = 0.4307,$$
(5.31)

$$\gamma_1 = 0.386, \ \gamma_2 = 1.243, \ \dots, \ \gamma_i = \gamma \Lambda^{3(i-1)/2} \quad \gamma = 0.4307.$$
 (5.32)

NRG で求めた固定点の励起エネルギーは、表3のように準粒子の励起状態として理解できる.

状態 (偶数)	Q	S	Ε	状態 (奇数)	Q	S	Ε
0>	0	0	0	$ \sigma_0\rangle$	0	1/2	0
$g^{\dagger}_{1\sigma} 0 angle,h^{\dagger}_{1\sigma} 0 angle$	±1	1/2	η_1	$g^{\dagger}_{0ar{\sigma_0}} \sigma_0 angle$	±1	0	0
$(g_{1\uparrow}^{\dagger}h_{1\downarrow}^{\dagger}-g_{1\downarrow}^{\dagger}h_{1\uparrow}^{\dagger}) 0\rangle/\sqrt{2}$	0	0	$2\eta_1$	$g_{1\sigma}^{\dagger}g_{0\sigma_{0}} \sigma_{0} angle$	0	1/2	η_1'
$g_{1\uparrow}^{\dagger}h_{1\uparrow}^{\dagger} 0 angle,g_{1\downarrow}^{\dagger}h_{1\downarrow}^{\dagger} 0 angle,\ldots$	0	1	$2\eta_1$	$h_{1\sigma}^{\dagger}g_{0\sigma_{0}} \sigma_{0} angle$	0	1/2	η_1'
$g^{\dagger}_{1\uparrow}g^{\dagger}_{1\downarrow} 0 angle$, $h^{\dagger}_{1\uparrow}h^{\dagger}_{1\downarrow} 0 angle$	±2	0	$2\eta_1$	$(g_{1\uparrow}^{\dagger} \downarrow\rangle - g_{1\downarrow}^{\dagger} \uparrow\rangle)/\sqrt{2},\ldots$	±1	0	η_1'
$g_{1\uparrow}^{\dagger}g_{1\downarrow}^{\dagger}h_{1\sigma}^{\dagger} 0 angle, g_{1\sigma}^{\dagger}h_{1\uparrow}^{\dagger}h_{1\downarrow}^{\dagger} 0 angle$	±1	1/2	$3\eta_1$	$g_{1\uparrow}^{\dagger} \uparrow angle, g_{1\downarrow}^{\dagger} \downarrow angle, h_{1\uparrow}^{\dagger} \uparrow angle,\cdots$	±1	1	η_1'
$g_{2\sigma}^{\dagger} 0 angle,h_{2\sigma}^{\dagger} 0 angle$	±1	1/2	η_2	$g^{\dagger}_{1\sigma}g^{\dagger}_{0ar{\sigma_0}} \sigma_0 angle$, $h^{\dagger}_{1\sigma}g_{0\sigma_0} \sigma_0 angle$	±2	1/2	η_1'

Table.3 固定点における低エネルギー状態の準粒子励起による記述.

固定点付近の有効ハミルトニアンは,固定点の基底を組み合わせた $\Lambda^{-(N-1)}$ に比例する主要な irrelevant 演算子を用いて,

$$H_{N}^{\rm irr} = \Lambda^{(N-1)/2} \left[\lambda \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^{*\dagger} a_{2\sigma}^{*} + a_{2\sigma}^{*\dagger} a_{1\sigma}^{*}) + \eta \left\{ \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^{*\dagger} a_{1\sigma}^{*} - 1/2) \right\}^{2} \right] \propto \Lambda^{-(N-1)/2}, \tag{5.33}$$

のように表される. 第1項は,新しい「不純物サイト」からの「混成項」,第2項は「オンサイト斥 力」である. すなわち,固定点近傍の有効ハミルトニアンは,弱く相互作用する「不純物アンダーソ ン模型」になっている. ここで,係数 λ, η は得られた低エネルギースキームのフィッティングから決 まる. ウィルソンの結果を引用すると, $\Lambda = 2$, $J/D_{\Lambda} = 0.048$, N = 132のフィッティング結果から, $\lambda = -7.015 \times 10^{-4} \times \Lambda^{N/2}/2\sqrt{2}\alpha_1\gamma_1$,および, $\eta = 13.850 \times 10^{-4} \times \Lambda^{N/2}/2\sqrt{2}\alpha_1^4$ であり,その比 η/λ は Λ にはよるが,Jによらず, $\Lambda = 2$ の場合,-3.749である. 比がJによらないことは,系に存在するエ ネルギースケールが $T_{\rm K}$ ただ1つであることの現れである.

f電子不純物による磁化率 χ_{imp} と比熱 C_{imp} の温度依存性は、(5.33) に関する 1 次の摂動から、

$$T\chi_{\rm imp} = -Tg^2 \mu_{\rm B}^2 \frac{\alpha\gamma}{\ln 2} \lambda \left(1 - \frac{\alpha^3/\gamma}{\ln 2} \frac{\eta}{\lambda} \right), \qquad (5.34)$$

$$C_{\rm imp} = -\frac{2\pi^2}{3} k_{\rm B}^2 T \frac{2\alpha\gamma}{\ln 2} \lambda, \qquad (5.35)$$

であり、そのウィルソン比は、

$$R = \frac{T\chi_{\rm imp}}{C_{\rm imp}} = \frac{3g^2\mu_{\rm B}^2}{2\pi^2k_{\rm B}^2}\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\alpha^3/\gamma}{\ln 2}\frac{\eta}{\lambda}\right) = \frac{3g^2\mu_{\rm B}^2}{2\pi^2k_{\rm B}^2} \times 1.002 \approx \frac{3g^2\mu_{\rm B}^2}{2\pi^2k_{\rm B}^2},\tag{5.36}$$

と求められ、この値は自由粒子系の値のちょうど2倍になっている.これは、(5.33)の斥力項から生じる ストーナー因子 (1 + F_0^a : F_0^a はランダウパラメータ)によって磁化率が増大することによる [26].

6. 不純物ソルバー: QMC

疑似乱数を用いて統計平均をランダムサンプリングする量子モンテカルロ法による不純物ソルバーの代表格, Hirsch-Fye (HF-QMC)の方法と現在最も強力な手法である連続時間量子モンテカルロ法 (CT-QMC: Continuous-Time Quantum Monte Carlo)を簡単に紹介する.

6.1. モンテカルロ法の基礎 [55,56,57,58,59]

イジング模型を題材にモンテカルロ法について簡単に復習しよう.イジング模型では、1つの原子あた りスピンの向きは2通りあるので、配置の総数は2^Nである.N=100としても、2¹⁰⁰~10³⁰と膨大な数 になり、統計平均において全配置の和を実行するのは不可能である.そこで、すべての配置の中からラン ダムに配置 (サンプル)を抽出して和を近似するのが、モンテカルロ法である.

重み付きサンプリング

イジング模型で許される配置の多くは高いエネルギーを持っていて,高エネルギーの配置の重みは指数 関数的に小さく,熱平均にほとんど寄与しない.そのため一様なランダムサンプリングでは,信頼できる 熱平均を得るのに膨大なサンプル数が必要となり現実的でない.そこで,スピン配置を全くの無作為では なくボルツマン分布に比例する確率で生成抽出しようというのが重み付きサンプリングの考え方である.

マルコフ連鎖とエルゴード性

適当なスピン配置 *σ*₁ から出発し,あるサイト*i*のスピン*σ_i* を反転して異なるスピン配置 *σ*₂,*σ*₃,… の ように次々と更新していく.このように,直前のスピン配置のみに依存して生成される配置の集合を,マ ルコフ連鎖といい,各ステップをマルコフステップという.マルコフ連鎖を生成する際,後述する適切な 条件を設けると,ボルツマン分布に比例した分布をもつマルコフ連鎖とすることができる.すべてのスピ ン配置は,任意のスピン状態から決められた更新手続きを有限回繰り返すことで到達できなければならな い.この条件をエルゴード性という.イジング模型の場合,局所的にスピンを反転していけばエルゴード 性が満たされることは明らかだろう.

マスター方程式と詳細つり合い

どのような条件でマルコフ連鎖を生成すれば、ボルツマン分布に従うサンプルの集合となるだろうか. まず、配置 σ の出現確率が時間変化する、すなわち $P(\sigma,t)$ として分布の時間変化を考えよう. 配置が σ から σ' に遷移する単位時間あたりの遷移確率を $T(\sigma \rightarrow \sigma')$ とする. このとき σ に遷移してくる確率と σ から遷移していく確率が、分布の時間変化を決めるから、

$$\frac{d}{dt}P(\sigma,t) = \sum_{\sigma'} P(\sigma',t)T(\sigma'\to\sigma) - \sum_{\sigma'} P(\sigma,t)T(\sigma\to\sigma'),$$
(6.1)

が成り立つ. この方程式をマスター方程式という.

分布が時間によらず一定(熱平衡分布)となるためには、右辺がゼロとなればよい. すなわち、

$$\sum_{\sigma'} P(\sigma', t) T(\sigma' \to \sigma) = \sum_{\sigma'} P(\sigma, t) T(\sigma \to \sigma'), \tag{6.2}$$

を満たせば、 $P(\sigma, t)$ は時間によらない分布となる.この条件を満たす解は無数にあるが、特別な解として、

$$P(\sigma',t)T(\sigma'\to\sigma) = P(\sigma,t)T(\sigma\to\sigma'), \qquad \Rightarrow \qquad \frac{T(\sigma\to\sigma')}{T(\sigma'\to\sigma)} = \frac{P(\sigma')}{P(\sigma)}, \tag{6.3}$$

がある.この条件を詳細つり合いの条件という.この条件を満たす遷移確率 T は一意に決まらないが,詳 細つり合いを満たすどのような遷移確率を用いても,同じ熱平衡分布 P(σ)が得られる.具体的な条件は, 次項目で述べる.

あるスピン配置 σ₁ から出発し,詳細つり合いの条件を満たすように σ₂, σ₃,… とマルコフ連鎖を生成 していくと,十分な回数を経た後,マルコフ連鎖が満たす分布はボルツマン分布になる.平衡分布に到達 するまでのマルコフステップを「熱平衡化 (thermalization)」という.熱平衡に達した後のマルコフ連鎖 はボルツマン分布を満たすサンプルなので,これらのサンプルの寄与を単純に加えれば熱平均が得られ る.すなわち,熱平衡化に要するステップ数を N とすれば,

$$\langle A \rangle = \sum_{\sigma} A(\sigma) P(\sigma) \implies \langle A \rangle_{\rm MC} = \frac{1}{M} \sum_{i=N}^{N+M} A(\sigma_i)$$
 (6.4)

により熱平均が求まる.

メトロポリス法,熱浴法

あるスピン配置 σ から別のスピン配置 σ' へ遷移する確率 $T(\sigma \rightarrow \sigma')$ の取り方について,代表的な 2 つの方法がある.

メトロポリス法

$$T(\sigma \to \sigma') = \min\left[\frac{P(\sigma')}{P(\sigma)}, 1\right]$$
 (6.5)

熱浴法

$$T(\sigma \to \sigma') = P(\sigma'), \quad \text{\ddagger th$} \quad \frac{P(\sigma')}{P(\sigma) + P(\sigma')} \tag{6.6}$$

これらはどちらも詳細つり合いの条件を満たしている.配置の変更が局所的な場合,遷移確率は簡単に計 算できる.

遷移確率が決まれば、この確率で $\sigma \to \sigma'$ へ配置を変更すればよい. 具体的には、試行サンプル σ' と 遷移確率 $T(\sigma \to \sigma')$ を求めた上、[0,1] の範囲で一様乱数 r を発生させて $r < T(\sigma \to \sigma')$ ならば、新し いスピン配置として σ' を採用し、そうでなければ、現在のスピン配置 σ を新しいスピン配置とする.

計算精度

モンテカルロを用いた数値計算では、平均値と分散を計算して計算の精度を確認する必要がある。以 下、サンプルの番号は「熱平衡化」が終わった後から数えることにする。 • 平均值

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} A_i \tag{6.7}$$

分散

$$\sigma^{2} = \frac{1}{M-1} \sum_{i=1}^{M} (A_{i} - \langle A \rangle)^{2}$$
(6.8)

分母は M ではなく M − 1 である点に注意. 平均値が誤差を含むデータでなく,あらかじめ分かる 場合は M − 1 ではなく M になる. いずれにせよ M は十分大きく取るので 1 の違いは問題になら ないはずである.

• 標準偏差

$$\sigma = \sqrt{\sigma^2} \tag{6.9}$$

分散または標準偏差を計算精度の目安にする.

採択率とサンプリング頻度

新しい配置を試みた回数のうち実際に更新された割合を採択率という.採択率は計算効率の目安を与え る.採択率が低い場合,サンプルの多くは似通った配置であり独立性が低い.この場合は,スピン配置を 更新する方法を採択率が上がるように工夫する必要がある.また,採択率が低いときは,マルコフ連鎖に おける連続したサンプルの独立性が低いので,毎回サンプルを抽出するのではなく間引きして熱平均を取 る必要がある.

6.2. **HF-QMC**

HF-QMC のアルゴリズム [60,61] について説明しよう.まず,有効不純物のハミルトニアン (2.11)の 相互作用を,

$$Un_{f\uparrow}n_{f\downarrow} = -\frac{U}{2}(n_{f\uparrow} - n_{f\downarrow})^2 + \frac{U}{2}\sum_{\sigma} n_{f\sigma} \equiv H_{\rm int} + \frac{U}{2}\sum_{\sigma} n_{f\sigma}, \qquad (6.10)$$

のように変形し、第2項は自由系 H_0 に吸収する. すなわち、キャビティグリーン関数を $G(i\omega_n)^{-1} \rightarrow G(i\omega_n)^{-1} - U/2$ とする.

この2体の相互作用を離散的な補助場を介した1粒子問題に帰着させる点が HF アルゴリズムのポイントである. そのために以下の恒等式 (離散ストラトノビッチ-ハバード変換)を用いる,

$$\exp[\alpha(n_{f\uparrow} - n_{f\downarrow})^2] = \frac{1}{2} \sum_{\mu}^{\pm 1} \exp[\lambda \mu (n_{f\uparrow} - n_{f\downarrow})], \quad \lambda = \cosh^{-1}(e^{\alpha}).$$
(6.11)

この恒等式は, f 電子の基底 $|0\rangle$, $|\sigma\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$ を作用させれば容易に確かめられる. 補助場 μ は f 電子にかかる (揺らぐ) 分子場の役割を果たす.

この恒等式を利用するために経路積分法を用いよう.分配関数は経路積分を用いて,

$$Z = \operatorname{Tr}_{c} \operatorname{Tr}_{f} e^{-S(f^{\mathsf{T}}, f; c^{\mathsf{T}}, c)} = \operatorname{Tr}_{f} e^{-S_{f}(f^{\mathsf{T}}, f)},$$
(6.12)

のように書ける.c電子は自由粒子なので最右辺でc電子のトレースを実行した.その結果として,f電子に対する有効作用が得られる,

$$S_f = -\int_0^\beta d\tau, d\tau' \sum_\sigma f_\sigma^\dagger(\tau') \mathcal{G}_\sigma^{-1}(\tau'-\tau) f_\sigma(\tau) + \int_0^\beta d\tau H_{\rm int}(\tau).$$
(6.13)

第1項は、f電子が時々 c電子バンドを徘徊するなどして時刻 τ から τ' まで時間発展した寄与を表す.

数値計算に適した形にするために, 虚時間を $\tau_i = \Delta \tau i$ ($i = 1, 2, \dots L, \Delta \tau = \beta/L$) と L 個に離散化して 鈴木トロッター分解しよう. キャビティグリーン関数を,

$$\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\tau) = -\frac{\partial}{\partial \tau} - h_{\sigma}(\tau), \qquad (6.14)$$

と分割し,各時刻の $\Delta \tau H_{int}(\tau_i)$ 項にストラトノビッチ-ハバード変換 (6.11) を適用すると, $\Delta \tau \partial f_{\sigma}(\tau_i)/\partial \tau = f_{\sigma}(\tau_i) - f_{\sigma}(\tau_{i-1})$ の関係に注意して,

$$Z = \operatorname{Tr}_{f} \operatorname{Tr}_{\boldsymbol{\mu}} e^{-S_{f}(f^{\dagger}, f; \boldsymbol{\mu})}, \quad S_{f}(f^{\dagger}, f; \boldsymbol{\mu}) = -\sum_{i,j} f_{\sigma}^{\dagger}(\tau_{i}) [G_{\sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu})]_{ij} f_{\sigma}(\tau_{j}),$$
$$-[G_{\sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu})]_{ij} = \delta_{i,j} - (1 - \Delta \tau h_{\sigma}(\tau_{i}) + \lambda \sigma \mu_{i}) \delta(i, j+1),$$
(6.15)

を得る. ここで、フェルミ粒子の反周期性を表すために、反周期デルタ関数を導入した、

$$\delta(i, j+1) = \begin{cases} +1 & i = j+1, \ i = 2, 3, \cdots, L, \\ -1 & i = 1, j = L, \\ 0 & その他. \end{cases}$$
(6.16)

また, $\lambda = \cosh^{-1}[\exp(\Delta \tau U/2)]$ であり,補助場の組を $\mu \equiv \{\mu_i\}$ と表記した.作用 $S_f(f^{\dagger}, f; \mu)$ は補助 場に依存した自由粒子系になっていることが分かる.有限の $\Delta \tau$ では, (6.15)の $-G_{\sigma}^{-1}(\mu)$ の表式ではな く,括弧内を指数の肩に載せたものの方が精度が高く [57,58],

$$- [G_{\sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu})]_{ij} = \delta_{i,j} - e^{-\Delta \tau h_{\sigma}(\tau_i)} e^{V_{\sigma}(\boldsymbol{\mu}_i)} \delta(i,j+1), \quad V_{\sigma}(\boldsymbol{\mu}_i) \equiv \lambda \sigma \, \boldsymbol{\mu}_i, \tag{6.17}$$

の表式を HF-QMC では用いる. $G_{\sigma}(\mu)$ は与えられた補助場 μ の下でのグリーン関数である. V = 0 の とき, $G_{\sigma}(\mu)$ は離散化したキャビティグリーン関数になる,

$$-\left[\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}\right]_{ij} = \delta_{i,j} - e^{-\Delta\tau h_{\sigma}(\tau_i)}\delta(i,j+1).$$
(6.18)

補助場を導入したことで、f電子に関するトレースも容易に実行できる,

$$Z = \operatorname{Tr}_{\boldsymbol{\mu}} \operatorname{det}[G_{\uparrow}(\boldsymbol{\mu})]^{-1} \operatorname{det}[G_{\downarrow}(\boldsymbol{\mu})]^{-1}.$$
(6.19)

したがって、補助場の配置μが出現する確率を、

$$P(\mu) = \frac{1}{Z} \det[G_{\uparrow}(\mu)]^{-1} \det[G_{\downarrow}(\mu)]^{-1}, \qquad (6.20)$$

とし、統計平均を $\langle \cdots \rangle_{\mu} = \operatorname{Tr}_{\mu} P(\mu)(\cdots)$ と表すことにする。相互作用の効果を含んだグリーン関数は、

$$G_{\sigma}(\tau_k) = \left\langle [G_{\sigma}(\boldsymbol{\mu})]_{i+k,j} \right\rangle_{\boldsymbol{\mu}}, \qquad (6.21)$$



Fig. 21 half-filled のハバード模型 (半楕円) に対する HF-QMC と厳密対角化によって求めた $-G(\tau)$ の比較. $\sqrt{2}U/D = 3$, $\beta D/\sqrt{2} = 32$. 上から $\Delta \tau = 1$, 1/2, 1/4. 一番下の曲線は厳密対角化によるも の [14].

から求められる.

次に,補助場の配置更新について考える. (6.17)の両辺に e^{-V_o} をかけると,

$$-e^{-V_{\sigma}(\mu_{i})}[G_{\sigma}^{-1}(\mu)]_{ij} = e^{-V_{\sigma}(\mu_{i})}\delta_{i,j} - e^{-\Delta\tau h_{\sigma}(\tau_{i})}\delta(i,j+1),$$
(6.22)

だから、配置を $\mu \rightarrow \mu'$ のように変更すると対角要素のみが変更を受け、行列表示で、

$$-e^{-V'}G'^{-1} = -e^{-V}G^{-1} + e^{-V'} - e^{-V},$$
(6.23)

が成り立つ. ここで、添字は省略して μ' に関する量にはプライムをつけ、 e^{-V} は $e^{-V(\mu_i)}$ を要素とする対 角行列とした. この関係を整理すれば、

$$G' = \left[1 + (1+G)(e^{V'-V} - 1)\right]^{-1}G,$$
(6.24)

となる. この式が, 配置更新 $\mu \to \mu'$ に対するグリーン関数の更新方法を与える. ある時刻 k の補助場 μ_k のみ更新した場合,

$$G'_{ij} = G_{ij} - \frac{(\delta_{ik} + G_{ik}) \left(e^{V'_k - V_k} - 1 \right) G_{kj}}{1 + (1 + G_{kk}) \left(e^{V'_k - V_k} - 1 \right)},$$
(6.25)

である. また、初期配置を V とすれば、対応するグリーン関数は (6.24) で V = 0, V' = V として、

$$G = \left[1 + (1 + \mathcal{G})(e^{V} - 1)\right]^{-1} \mathcal{G}.$$
 (6.26)

メトロポリス法で必要な遷移確率は,

$$R = \frac{P(\mu')}{P(\mu)} = \frac{[\det G_{\uparrow}']^{-1} [\det G_{\downarrow}']^{-1}}{[\det G_{\uparrow}]^{-1} [\det G_{\downarrow}]^{-1}} = \prod_{\sigma} \det \left[1 + (1 + G_{\sigma})(e^{V_{\sigma}' - V_{\sigma}} - 1) \right],$$
(6.27)

で与えられる。特に時刻 k のみの更新の場合,

$$R_k = 1 + (1 + G_{kk}) \left(e^{V'_k - V_k} - 1 \right), \tag{6.28}$$

である.全ての補助場に対して走査を行ったときを1モンテカルロステップと呼ぶ.

トロッター分割数 L が小さい場合,補助場の配置に関する和を厳密に実行できる.全ての配置は,1つの時刻の補助場だけを次々に変更することで得られるので,上記の局所更新アルゴリズムを用いることができる.

HF-QMC を用いて求めた $-G(\tau)$ の例を図 21 に示す.

6.3. CT-QMC [62, 63]

CT-QMC 法は、多体摂動論に基づいて摂動項を形式的に展開し、モンテカルロ法で有意な摂動項を選 択的に評価しようとする方法である。実は、相互作用展開を用いた CT-QMC 法はトロッター分割数無限 大、すなわち連続虚時間の HF-QMC と等価であることが示されている [64]. 相互作用 U に関する展開 を U 展開、混成 V に関する展開を V 展開、近藤模型のような制限されたヒルベルト空間における相互作 用で展開する方法を J 展開と呼ぶ. 低次の摂動展開に留めたものが、IPT や NCA である. CT-QMC 法 では、トロッター分解による離散化誤差がなく、HF アルゴリズムに比べて数十から数百分の一の低温ま で実用的な計算時間で精度よく計算できる [62]. 特に、強相関電子系で問題となる低温、中・強相関領域 では、CT-QMC 法の方が圧倒的に効率がよい. HF では、多軌道系における交換項やペア・ホッピング項 を適切に処理するための補助場がないが、CT-QMC 法ではこれらの困難も克服されつつある [65]. ここ では、アルゴリズムの概略を U 展開を例に用いて紹介する.

分配関数の展開

まず、分配関数を標準的な多体摂動論に従って展開する [5,6,7,8,9]. ハミルトニアンを $H = H_0 + H_1$ のように無摂動項と摂動項に分けると、分配関数は、

$$Z = \operatorname{Tr}\left[e^{-\beta H_0} T_{\tau} \exp\left(-\int_0^\beta d\tau H_1(\tau)\right)\right],\tag{6.29}$$

と表される.表記を簡潔にするために、H0に関する統計平均を,

$$\langle A \rangle_0 \equiv \frac{1}{Z_0} \operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H_0} A \right], \quad Z_0 = \operatorname{Tr} e^{-\beta H_0},$$
(6.30)

k 次元の虚時間積分を,

$$\int_{k} d\tau = \frac{1}{k!} \int_{0}^{\beta} d\tau_{k} \cdots \int_{0}^{\beta} d\tau_{2} \int_{0}^{\beta} d\tau_{1}, \qquad (6.31)$$

のように表し、分配関数の摂動項をべき展開すると、

$$\frac{Z}{Z_0} = \sum_{k=0}^{\infty} \int_k d\tau P(q_k), \quad P(q_k) = (-1)^k \langle T_\tau H_1(\tau_k) \cdots H_1(\tau_2) H_1(\tau_1) \rangle_0 \equiv \left\langle \hat{P}(q_k) \right\rangle_0, \quad (6.32)$$

となる. $q_k = \{\tau_1, \tau_2, \cdots, \tau_k\}$ は k 個の虚時間の配置を表す.

ランダムウォークによって確率分布 $P(q_k)$ に従う配置 q_k のマルコフ連鎖を生成したとすると、A の統計平均は以下のモンテカルロ平均によって求められる、

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{k=0}^{\infty} \int_{k} d\tau P(q_{k}) \frac{\left\langle \hat{P}(q_{k}) A(q_{k}) \right\rangle_{0}}{P(q_{k})}}{\sum_{k=0}^{\infty} \int_{k} d\tau P(q_{k})} \implies \left\langle \frac{\left\langle \hat{P}(q_{k}) A(q_{k}) \right\rangle_{0}}{P(q_{k})} \right\rangle_{\mathrm{MC}}.$$
(6.33)

分配関数の k 次項

(6.13) の第1項と第2項をそれぞれ無摂動項 S_0 と摂動項 S_1 としよう ($H_{int} = Un_{f\uparrow}n_{f\downarrow}$). k 次の摂動 項は,

$$P(q_k) = (-U)^k \left\langle T_{\tau} n_{f\uparrow}(\tau_k) n_{f\downarrow}(\tau_k) \cdots n_{f\uparrow}(\tau_2) n_{f\downarrow}(\tau_2) n_{f\uparrow}(\tau_1) n_{f\downarrow}(\tau_1) \right\rangle_0,$$
(6.34)

であるが、 S_0 が f^{\dagger} 、f の 2 次形式なのでヴィックの定理が適用できて

$$P(q_k) = (-U)^k \prod_{\sigma} \det \mathcal{G}_{\sigma},$$
(6.35)

となる. ここで G_{σ} は i 行 j 列の要素が

$$(\mathcal{G}_{\sigma})_{ij} = \mathcal{G}_{\sigma}(\tau_i - \tau'_j), \quad \left(\tau'_j \equiv \tau_j + 0\right), \tag{6.36}$$

の $k \times k$ 行列であり,行は消滅演算子 f_{σ} の時刻,列は生成演算子 f_{σ}^{\dagger} の時刻を表す.通常,ダイアグラム を用いた摂動展開では連結ダイアグラムからの寄与だけを考えるが,ここでの摂動展開は文字通りのUに 関する展開である. U 展開の CT-QMC 法はトロッター分割数無限大の HF 法と等価であることが示され ており [64],両者の負符号問題の程度はこの極限で同じである.

配置の更新

分配関数の $\sum_k \int d\tau$ を重み付きサンプリングによって評価するために, 配置 q_k の更新手続きを考えよう. 配置 q_k の例を図 22 に示す.エルゴード性を満たすために最低限必要な配置の更新は,



Fig. 22 U 展開における配置の例 (k = 4).

追加: [0, β) 、 τ として H₁(τ) を追加

削除: [1, k] → n (n 整数) として H₁(τ_n) を削除

である. ここで, [*a*,*b*) ~ *c* は範囲 [*a*,*b*) から一様乱数 *c* を生成することを表す.

一般に, 配置 x の確率分布を P(x), 配置 x から配置 y への遷移行列を $T(x \rightarrow y)$ とすると, 詳細釣り 合いの条件は,

$$\frac{T(x \to y)}{T(y \to x)} = \frac{P(y)}{P(x)},\tag{6.37}$$

である. 遷移行列を $T(x \rightarrow y) = W_{\text{prop}}(x \rightarrow y) W_{\text{acc}}(x \rightarrow y)$ のように試行確率と採択確率の積に分離すると,詳細釣り合いの条件は,

$$R(x \to y) \equiv \frac{W_{\rm acc}(x \to y)}{W_{\rm acc}(y \to x)} = \frac{W_{\rm prop}(y \to x)}{W_{\rm prop}(x \to y)} \frac{P(y)}{P(x)},\tag{6.38}$$

と書ける.メトロポリス法では, $W_{acc}(x \to y) = \min[1, R(x \to y)]$ の確率で配置更新 $x \to y$ の試行が 採択される,とする.すなわち, $[0, 1) \rightsquigarrow r$ に対し, $r < R(x \to y)$ のときに $x \to y$ の配置更新を行えば よい.以後は $R(x \to y)$ を $W_{acc}(x \to y)$ と書くことにする.

たいていの場合, $W_{\text{prop}}(x \to y) = W_{\text{prop}}(y \to x)$ であり, W_{prop} は $R(x \to y)$ の表式に現れない. 例 えば, イジング模型の1スピン・フリップでは, N サイトのうちの1つのスピンを反転する過程 $x \to \bar{x}$ と逆過程 $\bar{x} \to x$ の試行確率はともに 1/N である. ところが, 摂動次数を1つ増やす過程と減らす過程で は, これらの試行確率は異なり,

$$W_{\text{prop}}(q_k \to q_{k+1}) = \frac{d\tau}{\beta}, \quad W_{\text{prop}}(q_{k+1} \to q_k) = \frac{1}{k+1}, \tag{6.39}$$

である. これらは、 H_1 を付け加える時刻を選ぶ確率が $d\tau/\beta$ 、取り除く時刻を k + 1 個の中から選ぶ確率 が 1/(k + 1) であることに対応する. また、配置の確率分布が $(d\tau)^k$ に比例することを考慮すると、追加 過程の採択確率は、

$$W_{\rm acc}(q_k \to q_{k+1}) = \frac{\beta}{k+1} \frac{P(q_{k+1})}{P(q_k)},$$
(6.40)

となる. (6.35) より $P(q_k) \propto U^k$ だから、 W_{acc} は無次元の量である.

各更新の具体的な手続きを見てみよう。時刻のプライムは同時刻の扱いを明確にするために付けた

• 追加: $q_k \rightarrow q_{k+1}$ [$0, \beta$) $\rightsquigarrow \tau$. $H_1(\tau) = Uf_{\uparrow}^{\dagger}(\tau')f_{\downarrow}(\tau)f_{\downarrow}^{\dagger}(\tau')f_{\downarrow}(\tau)$ 追加

$$W_{\rm acc} = -\frac{\beta U}{k+1} \frac{\det \mathcal{G}_{\uparrow}^{\oplus(\tau,\tau')}}{\det \mathcal{G}_{\uparrow}} \frac{\det \mathcal{G}_{\downarrow}^{\oplus(\tau,\tau')}}{\det \mathcal{G}_{\downarrow}}.$$
(6.41)

 $\mathcal{G}_{\sigma}^{\oplus(\tau,\tau')}$ は,末尾行に $\mathcal{G}_{\sigma}(\tau-\tau'_{i})$,末尾列に $\mathcal{G}_{\sigma}(\tau_{i}-\tau')$,末尾要素に $\mathcal{G}_{\sigma}(\tau-\tau')$ を追加した行列

• 削除: $q_k \rightarrow q_{k-1}$

 $[1,k] \rightsquigarrow n. H_1(\tau_n) = U f^{\dagger}_{\uparrow}(\tau'_n) f_{\uparrow}(\tau_n) f^{\dagger}_{\downarrow}(\tau'_n) f_{\downarrow}(\tau_n)$ 削除 行列 \mathcal{G}_{σ} の時刻 τ_n に対応する行を i_{σ} , 時刻 τ'_n に対応する列を j_{σ} (常に $i_{\sigma} = j_{\sigma}$ となるはず)

$$W_{\rm acc} = -\frac{k}{\beta U} (-1)^{i_{\uparrow} + j_{\uparrow} + i_{\downarrow} + j_{\downarrow}} \frac{\det \mathcal{G}_{\uparrow}^{\Theta(\tau_n, \tau'_n)}}{\det \mathcal{G}_{\uparrow}} \frac{\det \mathcal{G}_{\downarrow}^{\Theta(\tau_n, \tau'_n)}}{\det \mathcal{G}_{\downarrow}}.$$
(6.42)

 $\mathcal{G}_{\sigma}^{\Theta(\tau_m,\tau_n)}$ は τ_m に対応する行と τ_n に対応する列を削除した行列

エルゴード性の観点からは必要ないが、非常に実効性の高い更新過程として、 $[1,k] \rightsquigarrow n$, $[0,\beta) \rightsquigarrow \tilde{\tau}_n$ に対し相互作用の時刻を $\tau_n \rightarrow \tilde{\tau}_n$ へ変更するシフトがある



Fig. 23 U 展開における更新の例. (a) 初期配置, (b) 追加, (c) 削除, (d) シフト.



• $\forall \mathcal{T} \vdash : \tau_n \to \tilde{\tau}_n$ $[1,k] \rightsquigarrow n, \quad [0,\beta) \rightsquigarrow \tilde{\tau}_n. \quad H_1(\tau_n) \to H_1(\tilde{\tau}_n) = Uf_{\uparrow}^{\dagger}(\tilde{\tau}'_n)f_{\downarrow}(\tilde{\tau}_n)f_{\downarrow}(\tilde{\tau}_n) \land \forall \mathcal{T} \vdash$

$$W_{\rm acc} = \frac{\det \mathcal{G}_{\uparrow}^{\Rightarrow(\tilde{\tau}_n,\tilde{\tau}_n')}}{\det \mathcal{G}_{\uparrow}} \frac{\det \mathcal{G}_{\downarrow}^{\Rightarrow(\tilde{\tau}_n,\tilde{\tau}_n')}}{\det \mathcal{G}_{\downarrow}}.$$
(6.43)

 $\mathcal{G}_{\sigma}^{\Rightarrow(\tilde{\tau}_{m},\tilde{\tau}_{n}')}$ は τ_{m} に対応する行を $\mathcal{G}_{\sigma}(\tilde{\tau}_{m}-\tau'_{j})$ で、 τ_{n} に対応する列を $\mathcal{G}_{\sigma}(\tau_{i}-\tilde{\tau}'_{n})$ で置き換えた 行列

これらの更新を図 23 に示す.以上の 3 つの更新を用いて, ランダム・ウォークを行えばよい.シフト更 新の比率を大きくすると特に効率的である.

グリーン関数

f 電子の1粒子グリーン関数は,

$$G_{\sigma}(\tau - \tau') = -\left\langle T_{\tau}f_{\sigma}(\tau)f_{\sigma}^{\dagger}(\tau')\right\rangle = \left\langle \frac{-\left\langle \hat{P}_{k}(q_{k})f_{\sigma}(\tau)f_{\sigma}^{\dagger}(\tau')\right\rangle_{0}}{P(q_{k})}\right\rangle_{\mathrm{MC}},\tag{6.44}$$

のように表される. すなわち,

$$G_{\sigma}(q_k;\tau,\tau') = -\frac{\left\langle \hat{P}(q_k) f_{\sigma}(\tau) f_{\sigma}^{\dagger}(\tau') \right\rangle_0}{P(q_k)}, \tag{6.45}$$

を測定することでモンテカルロ平均を取れば、1 粒子グリーン関数が求められる。(6.35)の導出と同様に して、

$$G_{\sigma}(q_k;\tau,\tau') = \frac{\det \mathcal{G}_{\sigma}^{\oplus(\tau,\tau')}}{\det \mathcal{G}_{\sigma}}, \quad \mathcal{G}_{\sigma}^{\oplus(\tau,\tau')} = \begin{pmatrix} (\mathcal{G}_{\sigma})_{ij} & \mathcal{G}_{\sigma}(\tau_i - \tau') \\ \mathcal{G}_{\sigma}(\tau - \tau'_j) & \mathcal{G}_{\sigma}(\tau - \tau') \end{pmatrix}, \tag{6.46}$$

を得る. 行列式を展開して,

$$G_{\sigma}(q_k;\tau,\tau') = \frac{\det \mathcal{G}_{\sigma}^{\oplus(\tau,\tau')}}{\det \mathcal{G}_{\sigma}} = \mathcal{G}_{\sigma}(\tau-\tau') - \sum_{ij} \mathcal{G}_{\sigma}(\tau-\tau'_j) \left(\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}\right)_{ji} \mathcal{G}_{\sigma}(\tau_i-\tau'), \quad (6.47)$$

となる. これを (6.44) に代入すると

$$G_{\sigma}(\tau - \tau') = \mathcal{G}_{\sigma}(\tau - \tau') - \left\langle \sum_{ij} \mathcal{G}_{\sigma}(\tau - \tau'_{j}) (M_{\sigma})_{ji} \mathcal{G}_{\sigma}(\tau_{i} - \tau') \right\rangle_{\mathrm{MC}}, \qquad (6.48)$$

を得る. $M_{\sigma} = G_{\sigma}^{-1}$ とおいた. 松原振動数へフーリエ変換した表式は,

$$G_{\sigma}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n) \left\langle \frac{1}{\beta} \sum_{ij} (M_{\sigma})_{ji} e^{i\omega_n(\tau'_j - \tau_i)} \right\rangle_{\mathrm{MC}} \mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n).$$
(6.49)

実際の計算過程では、 M_{σ} 行列と対応する時刻の配置 q_k をメモリ上に記憶しておけば、 W_{acc} の計算や 配置の更新が行え、グリーン関数のモンテカルロ平均も求められる。V 展開や J 展開も考え方は同じであ るが、V 展開の場合は f 電子演算子の積のトレースが必要になりプログラムは少し複雑になる。一方、J 展開の定式化は非常にシンプルである。

CT-QMC を用いて求めた不純物アンダーソン模型の V 展開における摂動次数分布 p(k) と各スピンの 摂動次数分布 $p(k_{\sigma})$ の例を図 24 に示す. U が大きくなると,より大きな摂動次数のサンプル数が多くな ることが見て取れる. 摂動次数は、サンプリングに用いるグリーン関数行列のサイズだから、強相関また は低温になるほど計算時間が増大する. V 展開における $G_f(\tau)$ の計算例を図 25 に示す. U が大きくなる ほど、 $G_f(\tau)$ は急激に変化する曲線となる. U = 4 のように強相関領域かつ低温であっても非常に滑らか な曲線が得られているのが分かるだろう. これを解析接続して求めた状態密度は既に図 10 に示した. ハ バード模型の動的平均場理論における有効不純物問題に現れる行列サイズの平均値の比較を図 26 に示す、 V 展開が最も効率よく低温強相関領域を扱える.



Fig. 26 ハバード模型の有効不純物問題に現れる行列サイズの比較 [62]. 状態密度は半円型でバンド 幅は 4t. HF-QMC では $\Delta \tau t = \beta t/L = 0.2$ となるように *L* を決めている. (a) U/t = 4, (b) $\beta t = 30$.

7. 動的平均場理論の応用

本節では動的平均場理論の成果と拡張・応用の試みについて概観する.

7.1. モット転移

動的平均場理論の大きな成果の1つはモット転移の記述である. T = 0 での NRG によるモット転移 の例を図 27 に示す. U の増大とともに準粒子ピークの幅が小さくなり, $U = U_c$ で幅が消失して絶縁化 する. 状態密度の幅の逆数は有効質量 m^* と関係しているので, m^* が発散して絶縁化したと考えてもよ い [44].

動的平均場理論を用いて得られた 2 次元正方格子ハバード模型の *U-T* 相図を図 28 に示す. 横軸は (下部) 臨界斥力 *U*_{MIT} = 9.35*t* でスケールした斥力. モット転移は 1 次転移であり, *T/t* < 0.1 で金属と絶縁



Fig. 27 $d = \infty$ ハバード模型におけるモット転移 (NRG). ベーテ格子 ($U_c = 2.94D$) と超立方格子 ($U_c = 2.90D$)の結果 [66].



Fig. 28 2 次元ハバード模型の相図. $U_r = (U - U_{\text{MIT}})/U_{\text{MIT}}, U_{\text{MIT}} = 9.35t$ [62].

体の共存相が現れる。臨界終点より高温では、有限温度効果のために準粒子ピークは大部分消失していて、金属と絶縁体の区別は明白ではなくなる。前述したように、動的平均場理論では混成関数 $\Delta^{R}(\omega = 0)$ の有無が金属と絶縁体を特徴づけている。

半楕円状態密度で half-filled の場合に U_c の値を見積もってみよう [67]. この状態密度の場合,

$$\Delta^{\mathrm{R}}(\omega) = \frac{D^2}{4} G^{\mathrm{R}}(\omega), \qquad (7.1)$$

の関係 (2.22) が成り立つ. 金属側から U_c に近づいたとき,混成関数は $\omega = 0$ 近傍で幅の狭いピーク $\Delta^{R}(\omega) \sim V^{*2}/\omega$ のように近似できると考えられる. この状況は,f 電子と1サイトのc電子が V^* で混成 している状況と同じであり、この2サイト問題を解くと、

$$G_f^{\rm R}(\omega) = \frac{a}{\omega - E^*} + \frac{a}{\omega + E^*}, \quad E^* = \frac{6V^{*2}}{U}, \quad a = \frac{18V^{*2}}{U^2}, \quad (\omega \sim 0), \tag{7.2}$$

となる. $U \rightarrow U_c$ で $V^* \rightarrow 0$ すなわち $E^* \rightarrow 0$ の状況を考えているので, (7.1) に $G_f^{R} = 2a/\omega$ を代入すると,

$$\frac{V^{*2}}{\omega} = \frac{D^2}{4} \frac{2a}{\omega}, \qquad \Rightarrow \qquad U_c = 3D, \tag{7.3}$$

を得る. この結果は NRG の結果と大変よい一致を示している. 他の状態密度でも *U_c* は大体バンド幅の 1.5 倍程度である.



Fig. 29 2 重占有率の U 依存性. 実線は IPT の結果で下から上に行くにつれて温度が高い. 細線は気体・液体転移理論によるフィット. 丸印は HF-QMC による結果 [68].

コトリアらは,臨界終点近傍のユニバーサリティが液体・気体系の臨界終点ののもの (磁場中イジング 模型のユニバーサリティクラス) と同じであり [19],秩序変数の (平均密度から測った) 密度に当たる量が, 各サイトの2重占有率 $d = \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ であることを動的平均場計算を利用して示した [68]. これらの対応関 係は古くからカステラーニらによって示唆されていたものである [69].秩序変数を η とし,臨界終点近傍 でのランダウ自由エネルギー $\mathcal F$ が以下で与えられるとする,

$$\mathcal{F} = -h \,\eta + \frac{p}{2}\eta^2 + \frac{c}{4}\eta^4,\tag{7.4}$$

ここで、*c* は定数、 $h = h_1(U - U_c) + h_2(T - T_c), p = p_1(U - U_c) + p_2(T - T_c)$ である。 $\partial \mathcal{F} / \partial \eta = 0$ より、平衡状態での状態方程式は、

$$p \eta + c \eta^3 = h, \tag{7.5}$$

となる. $U = U_c$ で最も特異的な部分だけを残すと,

$$\eta(U_c, T) \sim \text{sgn}\left(\frac{h_2}{c}\right) \left|\frac{h_2}{c}\right|^{1/3} \text{sgn}(T - T_c)|T - T_c|^{1/3},$$
(7.6)

のように特異的な振る舞いをする。秩序変数 η と 2 重占有率 d が臨界終点近傍で,

$$d - d_c = c_1 \eta + \cdots, \tag{7.7}$$

の関係にあるとすると、dの感受率が以下のように $U = U_c$ で発散することが分かる、

$$\chi = \frac{\partial d}{\partial U} = \frac{c_1}{3} \operatorname{sgn}\left(\frac{h_1}{c}\right) \left|\frac{h_1}{c}\right|^{1/3} |U - U_c|^{-2/3}.$$
(7.8)

2 重占有率と磁化は 〈 $(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^{2}$ 〉= 1 – 2*d* の関係にあるので,磁化率も特異的な振る舞いを示すことになる. 図 29 に,動的平均場理論で求めた 2 重占有率の *U* 依存性を示す.臨界点近傍で,IPT と HF-QMC で求めたデータはよくスケールしていて,気体・液体転移の理論 (平均場) でうまくフィットできている.



Fig. 30 (V_{1-x}M_x)₂O₃ (M=Cr, Ti) の相図 [14].

これを受けて、典型的なモット転移物質である ($V_{1-x}Cr_x$)₂O₃ の臨界現象が調べられた. この物質の相図を図 30 に示す. 電気伝導度, 圧力, 温度の間に,

$$\eta = h^{1/\delta} f_{\pm} \left(\frac{h}{|t|^{\beta \delta}} \right), \quad \eta = \frac{\sigma_{\text{metal}} - \sigma_c}{\sigma_c}, \quad t = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad h = \frac{p - p_c}{p_c}, \tag{7.9}$$

のスケーリングがよく成り立ち (図 31 右),臨界指数は 3 次元イジングのもの ($\beta = 0.33, \gamma = 1.2, \delta = 4.8$. MF では $\beta = 1/2, \gamma = 1, \delta = 3$) に近いことが確かめられた (図 31 左). ここで,臨界指数の定義は, $\eta = (T_c - T)^{\beta}, \partial \eta / \partial h|_{h=0} = (T - Tc)^{-\gamma}, \eta|_{t=0} = h^{1/\delta}$ である.一方,2次元有機物質 κ -BEDT-Cl の臨界 現象では,やはりスケーリングはよく成り立つものの 3 次元や2 次元イジングの臨界指数とは異なる値が 得られている [71]. これらの違いが,近傍にある磁気秩序の (量子) 臨界性からくる可能性や電気伝導度と 秩序変数が単純な線形関係ではない可能性などが議論されている.



Fig. 31 (V_{1-x}Cr_x)₂O₃におけるモット転移の臨界的性質とスケーリング [70].

7.2. 秩序状態

動的平均場理論は通常の平均場理論と同様にして秩序状態の議論にも適用できる.代表的な例として反 強磁性とs波超伝導について考えよう.

反強磁性秩序

ハバード模型に無限小交替磁場 hs を z 軸にかけた場合,

$$H = \sum_{\sigma} \sum_{k}^{\text{MBZ}} \left[\epsilon_{k} \left(c_{Ak\sigma}^{\dagger} c_{Bk\sigma} + c_{Bk\sigma}^{\dagger} c_{Ak\sigma} \right) - \sigma h_{s} \left(c_{Ak\sigma}^{\dagger} c_{Ak\sigma} - c_{Bk\sigma}^{\dagger} c_{Bk\sigma} \right) \right], \tag{7.10}$$

であり、このとき、格子のグリーン関数は (A, B) サイト表示で、

$$G_{\sigma}(\boldsymbol{k},i\omega_{n})^{-1} = \begin{pmatrix} i\omega_{n} + \mu + \sigma h_{s} - \Sigma_{A\sigma}(i\omega_{n}) & -\epsilon_{\boldsymbol{k}} \\ -\epsilon_{\boldsymbol{k}} & i\omega_{n} + \mu - \sigma h_{s} - \Sigma_{B\sigma}(i\omega_{n}) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \zeta_{A\sigma} & -\epsilon_{\boldsymbol{k}} \\ -\epsilon_{\boldsymbol{k}} & \zeta_{B\sigma} \end{pmatrix}, \quad (7.11)$$

である. 局所近似では、 $\Sigma_{AB\sigma}(i\omega_n) = 0$ に注意. k平均を取った局所グリーン関数は、

$$G_{A\sigma}(i\omega_n) = \frac{2}{N} \sum_{k}^{\text{MBZ}} \frac{\zeta_{B\sigma}}{\zeta_{A\sigma}\zeta_{B\sigma} - \epsilon_k^2},$$

$$G_{B\sigma}(i\omega_n) = \frac{2}{N} \sum_{k}^{\text{MBZ}} \frac{\zeta_{A\sigma}}{\zeta_{A\sigma}\zeta_{B\sigma} - \epsilon_k^2},$$

$$G_{AB\sigma}(i\omega_n) = G_{BA\sigma}(i\omega_n) = 0,$$
(7.12)

である. 対称性から $G_{A\sigma}(i\omega_n) = G_{B-\sigma}(i\omega_n), \Sigma_{A\sigma}(i\omega_n) = \Sigma_{B-\sigma}(i\omega_n)$ が成り立つ. 従って, 例えば $\sigma = \uparrow$ 成分のみ議論すればよい. $\alpha = A, B$ それぞれの副格子でキャビティグリーン関数を,

$$\mathcal{G}_{\alpha\sigma}(i\omega_n)^{-1} = G_{\alpha\sigma}(i\omega_n)^{-1} + \Sigma_{\alpha\sigma}(i\omega_n)^{-1}, \quad (\alpha = A, B),$$
(7.13)

のように導入し、各副格子でそれぞれ有効不純物問題を解いて、 $\mathcal{G}_{\alpha\sigma}(i\omega_n) \rightarrow \Sigma_{\alpha\sigma}(i\omega_n)$ を求め、これを 格子のグリーン関数に代入して自己無撞着な解を探せばよい. 交替磁化 m_s は、

$$m_{s} = \frac{2}{N} \sum_{k}^{\text{MBZ}} \sum_{\sigma} \sigma \left\langle c_{Ak\sigma}^{\dagger} c_{Ak\sigma} \right\rangle = T \sum_{n} \sum_{\sigma} \sigma G_{A\sigma}(i\omega_{n}) e^{i\omega_{n}0_{+}}, \tag{7.14}$$

より評価できる、反強磁性が発生すると自己無撞着な解の交替磁化が有限になる、



Fig. 32 U/D = 1.5の反強磁性状態の局所グリーン関数 $G_{A\uparrow}$ (実線), $G_{A\downarrow}$ (点線). 左上がベーテ格 子, 左下が次近接ホッピングを導入してフラストレーションを入れた場合. (右図) *T-U* 相図. 実線は HF-QMC によるネール温度, 点線は IPT, 細線は平均場近似の結果 [14].

反強磁性状態の計算例を図 32 に示す. 平均場の場合, T_N は U とともに増大するだけであるが, 動的 平均場理論で取り扱うと, 強相関領域で, $J \sim t^2/U$ のスケールが導入されるため, T_N が減少する結果 が得られる. ただし, IPT は U の効果が弱く, HF-QMC の結果を全体的に弱相関側へシフトした曲線に なる.

s 波超伝導

超伝導ギャップ Δ_s を粒子ホール空間の非対角自己エネルギーと見なせば,局所近似の範囲では s 波の 状態のみ議論できる.異方的超伝導を議論するには次節のクラスター近似などを用いる必要がある.

s 波 1 重項の問題を扱うために、 $\Psi_k^\dagger = (c_{k\uparrow}^\dagger, c_{-k\downarrow})$ の南部表示を用いる.格子系のグリーン関数は南部表示で、

$$\begin{pmatrix} G(i\omega_n) & -F(i\omega_n) \\ -F(i\omega_n)^* & -G(i\omega_n)^* \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} i\omega_n + \mu - \epsilon_k - \Sigma(i\omega_n) & -\Delta_s(i\omega_n) \\ -\Delta_s(i\omega_n)^* & -[i\omega_n + \mu - \epsilon_k - \Sigma(i\omega_n)]^* \end{pmatrix}$$

$$\equiv \begin{pmatrix} z - \epsilon_k & -\Delta_s(i\omega_n) \\ -\Delta_s(i\omega_n)^* & -(z - \epsilon_k)^* \end{pmatrix},$$
(7.15)

と表される. ここで超伝導のギャップ関数 Δ_s は ω_n 依存性がありクーパーペアの時間依存性を含んでいる. また, $\Delta_s(i\omega_n)^* = \Delta_s(-i\omega_n) = \Delta_s(i\omega_n)$ の関係が成り立つ. 電子ホール対称性があれば, $\Sigma(i\omega_n)$ は純虚数の奇関数である. **k** 平均を取ると, 局所グリーン関数は,

$$G(i\omega_n) = \left\langle \frac{z^* - \epsilon_k}{|z - \epsilon_k|^2 + |\Delta_s(i\omega_n)|^2} \right\rangle_k, \quad F(i\omega_n) = \Delta_s(i\omega_n) \left\langle \frac{1}{|z - \epsilon_k|^2 + |\Delta_s(i\omega_n)|^2} \right\rangle_k, \tag{7.16}$$

また、 $F(i\omega_n)^* = F(-i\omega_n) = F(i\omega_n)$ の関係が成り立つ。キャビティグリーン関数も南部表示を用いて、

$$\begin{pmatrix} \mathcal{G}(i\omega_n) & -\mathcal{F}(i\omega_n) \\ -\mathcal{F}(i\omega_n)^* & -\mathcal{G}(i\omega_n)^* \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} G(i\omega_n) & -F(i\omega_n) \\ -F(i\omega_n)^* & -G(i\omega_n)^* \end{pmatrix}^{-1} + \begin{pmatrix} \Sigma(i\omega_n) & \Delta_s(i\omega_n) \\ \Delta_s(i\omega_n)^* & -\Sigma(i\omega_n)^* \end{pmatrix},$$
(7.17)

と求められる. これらのキャビティグリーン関数から有効不純物問題を解いて、 $\Sigma(i\omega_n)$ および $\Delta_s(i\omega_n)$ を求め、これを格子のグリーン関数代入して自己無撞着な解を求めればよい. 一連の方程式の非対角項の自己無撞着条件がギャップ方程式に他ならない.

7.3. ランダム系 [72,73,74,75,76,77]

サイトごとにランダムな1体ポテンシャル Ei が加わったハバード模型を考えよう,

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_i H_{\text{int}}^{(i)}, \quad H_{\text{int}}^{(i)} = \sum_{\sigma} E_i n_{\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \tag{7.18}$$

ここで、ランダムポテンシャルは確率分布 $P(E_i)$ に従って分布しているとする。ランダムポテンシャルがあるため系に並進対称性は無く、自己エネルギー $\Sigma_i(i\omega_n)$ はサイト i に依存する.

あるランダム平均を取った結果,近似的に系の並進対称性を回復したとし,そのときランダム平均の効 果も含んだ自己エネルギー $\overline{\Sigma}(i\omega_n)$ を考えよう.この自己エネルギーを多体効果を含んだコヒーレントポ テンシャル(またはコヒーレント自己エネルギー)と呼ぶ.ここでも局所近似を採用し, $\overline{\Sigma}(i\omega_n)$ はkに依 らないとする.ランダム平均を取った格子系のグリーン関数は,

$$\overline{G}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_k - \overline{\Sigma}(i\omega_n)},$$
(7.19)

である.この k 平均を取って局所グリーン関数は,

$$\overline{G}(i\omega_n) = \left\langle \overline{G}(k, i\omega_n) \right\rangle_k, \tag{7.20}$$

となる.これがランダム平均を取った後の有効不純物問題の局所グリーン関数 $\overline{G}_f(i\omega_n)$ に等しいとすると、その有効媒質としてコヒーレントキャビティグリーン関数を以下のように導入できる、

$$\overline{\mathcal{G}}(i\omega_n)^{-1} = \overline{\mathcal{G}}(i\omega_n)^{-1} + \overline{\Sigma}(i\omega_n).$$
(7.21)

有効媒質が \overline{G} で与えられたとき,*i*に依存した相互作用 $H_{int}^{(i)}$ に対する有効不純物問題を解くと,*i*に依存 した自己エネルギー $\Sigma_{fi}(i\omega_n)$ が求まる.局所グリーン関数は,

$$G_{fi}(i\omega_n) = \left[\overline{\mathcal{G}}(i\omega_n)^{-1} - \Sigma_{fi}(i\omega_n)\right]^{-1}.$$
(7.22)

共通の有効媒質に対する相互作用の異なる複数の不純物問題を考え、そのサンプル平均を考えるという訳 である.すなわち、局所グリーン関数のランダム平均は、

$$\overline{G}_f(i\omega_n) = \sum_i P(E_i)G_{fi}(i\omega_n),$$
(7.23)

であり、ランダム平均自己エネルギーが $\overline{\Sigma}_f(i\omega_n) = \overline{G}(i\omega_n)^{-1} - \overline{G}(i\omega_n)^{-1}$ より求まる. これが、格子 系のコヒーレント自己エネルギー $\overline{\Sigma}(i\omega_n)$ に等しいとし、(7.19) に代入して自己無撞着に解けばよい. 以 上の一連の手続きは、ランダム系の理論として知られるコヒーレントポテンシャル近似 (CPA: Coherent Potential Approximation) を多体効果を含めた形で拡張したものになっている.

(7.23) のランダム平均の代わりに、別のランダム平均として状態密度を介した、

$$\overline{G}_{f}(i\omega_{n}) = \int dx \, \frac{\overline{\rho}_{f}(x)}{i\omega_{n} - x}, \quad \overline{\rho}_{f}(\omega) = \exp\left[\sum_{i} P(E_{i}) \ln \rho_{fi}(\omega)\right], \quad \rho_{fi}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{fi}^{R}(\omega), \quad (7.24)$$

という方法も提案されており, 典型媒質理論 (TMT: Typical-Medium Theory) と呼ばれアンダーソン局 在の議論に用いられている [78,79,80,81].

7.4. 非局所近似への拡張

短距離相関 [82,83]

動的平均場理論では自己エネルギーの k 依存性を無視し、1 サイトの有効不純物問題にマップしていた. 短距離の相関を含めるように拡張する上で、まず思いつくのが、有効不純物問題を $N_c = L^d$ 個の格子点からなるクラスターにすることである。このとき、単位格子定数は L 倍になりブリルアンゾーンの大きさは $1/N_c$ になる。その外側の k 点はクラスター内の短距離の状態を表している。そこで、もとのブリルアン ゾーンを N_c 個に分割して、それぞれのセルの代表点を K とする (図 33)。各セルの k 点は、k = K + pと表される。



Fig. 33 格子のクラスターへの分割 (左) とブリルアンゾーンの分割 (右). 白丸がそれぞれのセルでの 代表波数ベクトル K.

自己エネルギーの波数依存性を各セルの代表点 K での値で近似すると $\Sigma(k, i\omega_n) \sim \Sigma(K, i\omega_n)$, 格子の

グリーン関数は,

$$G(\mathbf{K} + \mathbf{p}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{K} + \mathbf{p}} - \Sigma(\mathbf{K}, i\omega_n)},$$
(7.25)

である. 各セル内の波数でグリーン関数の和を取ったものを,

$$G(\mathbf{K}, i\omega_n) = \frac{N_c}{N} \sum_{\mathbf{p}}^{\epsilon \mathbf{K}} G(\mathbf{K} + \mathbf{p}, i\omega_n), \qquad (7.26)$$

とする.後は1不純物問題の場合と同様に、 $G(K, i\omega_n)$ からダイソン方程式によって、キャビティグリー ン関数を $G^{-1}(K, i\omega_n) = G^{-1}(K, i\omega_n) + \Sigma(K, i\omega_n)$ によって求め、 $G^{-1}(K, i\omega_n)$ に対する有効クラスター 問題を解いて自己エネルギー $\Sigma(K, i\omega_n)$ を自己無撞着に求めればよい.この方法を動的クラスター近似 (DCA: Dynamical Cluster Approximation) といい、理論の解析性が保証されるという利点がある.格 子の周期性は破らないが、グリーン関数の波数依存性が不連続になるという欠点がある.この拡張では短 距離の相関が考慮されるため、反強磁性転移の近傍で準粒子ピークが抑えられたり、s 波以外の超伝導の 議論が可能になるなどの成果が得られている.

長距離相関 [84,85,86,87]

2 次の (量子) 相転移点近傍では,短距離相関だけではなく長距離の相関が重要になる.長距離の揺らぎ によって,量子臨界点近傍の物理量に特異な温度依存性が表れるのが,その一例である.長距離相関を取 り込む 1 つの試みとして,動的平均場理論で得られた自己エネルギーに,発達した長距離揺らぎの影響を 系統的に補正として取り入れる方法があり,局所バーテックス近似 (LΓA: Local Vertex Approximation, バーテックスは通常 Γ と表すので)と呼ばれている.自己エネルギーの厳密な表式を局所的な自己エネル ギーと非局所的な自己エネルギーに分割し,非局所的な自己エネルギー部分をパルケ近似などの方法を用 いて長距離相互作用の揺らぎを取り込んだ自己エネルギーで代用する.クラスター近似より軽量な方法 で,短距離から長距離までの揺らぎが,格子の周期性を破ったり波数の不連続性を引き起こすことなく取 り込まれるという利点がある.さらに,磁気モーメントの和則を満たすようにバーテックスを定数シフト すれば,転移温度が揺らぎによって正しく抑えられ,マーミン・ワーグナーの定理を満たすような計算結 果が得られるという利点もある.

7.5. 第一原理計算との融合 [88,89]

現実の物質の特徴を取り入れた強相関電子系の計算を行うために,第一原理計算と動的平均場理論を組 み合わせた計算スキームの開発が続けられている。現在,実用的に用いられているスキーム (LDA+DMFT) を紹介する.

(1) LDA: バンド計算で一般的に用いられる局所密度近似 (LDA) でコーン・シャム方程式を解いて,

$$(h_{k}^{\text{LDA}})_{\alpha\beta} = \left\langle \chi_{k\alpha} \left| -\nabla^{2} + V_{\text{eff}}[\rho] \right| \chi_{k\beta} \right\rangle, \quad (O_{k})_{\alpha\beta} = \left\langle \chi_{k\alpha} \left| \chi_{k\beta} \right\rangle, \tag{7.27}$$

LDA 部分のハミルトニアン (h_k^{LDA}) と重なり積分 (O_k) の軌道 (α, β) に関する行列要素が得られる.

(2) DMFT: 動的平均場理論 (行列の関係式) を解いて,

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left[(i\omega_n + \mu)O_{\mathbf{k}} - h_{\mathbf{k}}^{\text{LDA}} - (\mathcal{M}_{\text{int}}(i\omega_n) - \mathcal{M}_{\text{DC}}) \right]^{-1},$$

$$G_{\text{loc}}(i\omega_n) = \langle G(\mathbf{k}, i\omega_n) \rangle_{\mathbf{k}},$$

$$\mathcal{G}^{-1} = G_{\text{loc}}^{-1} + \mathcal{M}_{\text{int}},$$

$$\pi純物ソルバ - \Rightarrow \mathcal{M}_{\text{int}}(\mathcal{G}, U),$$
(7.28)

局所自己エネルギー M_{int} と格子のグリーン関数 $G(k, i\omega_n)$ を得る. ここで、 M_{DC} は LDA の交換 相関ポテンシャルと DMFT の H_{int} から生じる 2 重に取り込んだ部分を差し引く項.

(3) 局所密度を求める,

$$\rho(\mathbf{r}) = \left\langle T \sum_{n} \sum_{\alpha\beta} \chi_{\mathbf{k}\alpha}^*(\mathbf{r}) G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\omega_n) \chi_{\mathbf{k}\beta}(\mathbf{r}) e^{i\omega_n 0_+} \right\rangle_{\mathbf{k}},$$
(7.29)

(4) (1) に戻る.

ラッティンジャーとワードの理論に従い,これらのスキームを導くような $G_{loc}(i\omega_n)$ と $\rho(\mathbf{r})$ の近似的 な自由エネルギー汎関数 $\Gamma[G_{loc}, \rho]$ を構築することが可能である. $\Gamma[G_{loc}, \rho]$ の停留値条件から LDA と DMFT の方程式が得られるので,これらの方程式を解いて求めた結果は得られる範囲で最も自由エネル ギーの低い解となることが保証される. バンド計算の方法としては強結合描像に適した LMTO 法が用い られている場合が多い. 最近では,バンド計算の結果から最大限に局在したワニエ関数を構成し [90,91], それに対して多体効果を取り入れる方法も実行されている.



Fig. 34 LaOFeAs における LDA と LDA+DMFT の比較. DMFT では密度-密度斥力のみ考慮 [62].

定式化は素直なものであるが,実際の計算では数値計算上の様々な工夫が必要である.また,DC 項を どう扱うか,相互作用 (象徴的に U と表した) をどう評価するかなどの原理的な問題も残っている.DC 項の取り扱いとして,最も単純に密度に比例したポテンシャルを差し引くなどの方法が提案されている. LDA は比較的高エネルギー (長距離のクーロン遮蔽) の状態を決定し,DMFT はより低エネルギーの状



Fig. 35 BaFe₂As₂ におけるスペクトルウェイト $A(\mathbf{k}, \omega)$ の計算例. 灰色部は ARPES から得られた 強度データ [62].

態を決めるという階層構造の視点に立つと、LDA で求めた波動関数を用いて、相互作用を見積もるとい う方法が考えられ、ダウンフォールディングと呼ばれている [89]. 高エネルギー状態を繰り込んで低エ ネルギーでの有効相互作用を見積もる訳であるが、この場合、一般に相互作用には遅延効果 (ω 依存性) が生じるので、DMFT の解法を遅延効果を含む相互作用の場合に拡張する必要がある [92]. このように、 LDA+DMFT の方法は、まだまだ発展途上の段階にある. 最近話題の鉄系物質に適用した例を図 34,35 に示した.

第一原理計算と動的平均場理論を融合する試みは、おもに海外のグループで大規模かつ組織的に行われ ており日本は後塵を拝している.今後の奮起に期待したい.

References

- [1] P.W. Anderson: Science 177 (1972) 393.
- [2] P.W. Anderson: Basic Notions of Condensed Matter Physics (Benjamin 1984) Chap. 5.
- [3] ラフリン: 「物理学の未来」 (日経 BP 社, 2006).
- [4] モット:「金属と非金属の物理」 (丸善, 1996).
- [5] A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov and I.E. Dzyaloshinskii: *Method of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover, 1965).
- [6] A.L. Fetter and J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [7] J.W. Negele and H. Orland, Quatum Many-Particle Systems (Addison-Wesley, 1988).
- [8] 永長直人: 「物性論における場の量子論」 (岩波書店, 1995).
- [9] 永長直人: 「電子相関における場の量子論」 (岩波書店, 1998).
- [10] H.J. Vidberg and J.W. Serene, J. Low Temp. Phys. 29 (1977) 179.
- [11] M. Jarrell and J.E. Gubernatis, Phys. Rep. 269 (1996) 133.
- [12] 高田康民: 「多体問題特論」 (朝倉書店, 2009) 2,3 章.
- [13] E. Müller-Hartmann, Z. Phys. B 74 (1989) 507.
- [14] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M.J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. 68 (1996) 13.
- [15] A. Georges: cond-mat/0403123.
- [16] G. Kotliar and D. Vollhardt: Phys. Today 57 (2004) 53.
- [17] 倉本義夫, 酒井治: 「固体物理」(1994) 777.
- [18] 酒井治, 倉本義夫: 「日本物理学会誌」 50 (1995) 615.
- [19] 西森秀稔:「相転移・臨界現象の統計物理学」(培風館, 2005).
- [20] P.W. Anderson: Phys. Rev. 124 (1961) 41.
- [21] Y. Kuramoto: Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations, Eds. T. Kasuya and T. Saso (Springer, 1985) p.152.
- [22] C.-I. Kim, Y. Kuramoto and T. Kasuya: J. Phys. Soc. Jpn. 59 (1990) 2414.
- [23] W.J. de Haas, J. de Boer and G.J. van den Berg: Physica 1 (1933/34) 1115.
- [24] J. Kondo: Prog. Theor. Phys. 32 (1964) 37.
- [25] K. Yosida: Phys. Rev. 147 (1966) 223; Prog. Theor. Phys. 36 (1966) 875.
- [26] 芳田奎: 「磁性」 (岩波, 1991).
- [27] K. Wilson: Rev. Mod. Phys. 47 (1975) 773.
- [28] H.R. Krishna-Murthy, J.W. Wilkins and K.G. Wilson: Phys. Rev. B21 (1980) 1003; 21 (1980) 1044.
- [29] P. Nozières: J. Low Temp. Phys. 17 (1974) 31.
- [30] J.R. Schrieffer and P.A. Wolff: Phys. Rev. 149 (1966) 491.
- [31] A.A. Abrikosov: Physics 2 (1965) 5.
- [32] P.W. Anderson: J. Phys. C3 (1970) 2436.

- [33] P. Nozières: J. Physique **39** (1978) 1117.
- [34] H. Kusunose and Y. Kuramoto: Phys. Rev. B 59 (1999) 1902.
- [35] 大槻純也:「重い電子系の近藤効果と磁気秩序」(重い電子系 秋の学校テキスト) (2009).
- [36] K. Yosida and K. Yamada: Prog. Theor. Phys. 46 (1970) 244.
- [37] K. Yosida and K. Yamada: Prog. Theor. Phys. 53 (1975) 1286.
- [38] K. Yamada: Prog. Theor. Phys. 53 (1975) 970.
- [39] A. Georges and G. Kotliar: Phys. Rev. B45 (1992) 6479.
- [40] H. Kajueter and G. Kotliar: Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 131.
- [41] H. Kajueter, G. Kotliar and G. Moeller: Phys. Rev. B53 (1996) 16214.
- [42] M. Potthoff, T. Wegner, and W. Nolting, Phys. Rev. B 55 (1997) 16132.
- [43] A. Georges and W. Krauth: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 1240.
- [44] W.F. Brinkman and T.M. Rice: 2 (1970) 4302.
- [45] Y. Kuramoto: Z. Phys. B53 (1983) 37.
- [46] H. Kojima, Y. Kuramoto and M. Tachiki: Z. Phys. B54 (1984) 293.
- [47] Y. Kuramoto and H. Kojima: Z. Phys. B57 (1984) 95.
- [48] Y. Kuramoto: Z. Phys. B65 (1986) 29.
- [49] N.E. Bickers: Rev. Mod. Phys. 59 (1987) 845.
- [50] J. Otsuki and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. 75 (2006) 064707.
- [51] R. Bulla, T. Costi and Th. Pruschke: Rev. Mod. Phys. 80 (2008) 395.
- [52] A.C. Hewson: The Kondo Problem to Heavy $7 \pm N \equiv ons$ (Cambridge 1993) Chaps. 4, 6.
- [53] S.-K. Ma: Modern Theory of Critical Phenomena (Addison-Wesley, 1976) Chap. 5.
- [54] T.A. Costi, A.C. Hewson and V. Zlatić: J. Phys.: Condens. Matter 6 (1994) 2519.
- [55] ティッセン: 「計算物理学」 (シュプリンガーフェアラーク東京, 2003).
- [56] 羽田野直道:「物性研究」 56 (1991) 459.
- [57] R. Blankenbecler, D.J. Scalapino and R.L. Sugar: Phys. Rev. D24 (1981) 2278.
- [58] D.J. Scalapino and R.L. Sugar, Phys. Rev. B 24 (1981) 4295.
- [59] W. von der Linden: Phys. Rep. 220 (1992) 53.
- [60] J.E. Hirsch and R.M. Fye, Phys. Rev. Lett. 56 (1986) 2521.
- [61] R.M. Fye and J.E. Hirsch, Phys. Rev. B 38 (1988) 433.
- [62] E. Gull, P. Werner, A. Millis and M. Troyer, Phys. Rev. B 76 (2007) 235123.
- [63] 楠瀬博明, 大槻純也: 「物性研究」 94 (2010) 404.
- [64] K. Mikelsons, A. Macridin and M. Jarrell, Phys. Rev. E 79 (2009) 057701.
- [65] A.M. Läuchli and P. Werner, Phys. Rev. B 80 (2009) 235117.
- [66] R. Bulla: Phys. Rev. Lett. 83 (1999) 136.
- [67] R. Bulla and Potthoff: Eur. Phys. J. B13 (2000) 257.
- [68] G. Kotliar, E. Lange and M.J. Rozenberg: Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 5180.
- [69] C. Castellani, C.R. Natoli and J. Ranninger: Phys. Rev. B18 (1978) 4967.

- [70] P. Limelette, A. Georges, D. Jérome, P. Wzietek, P. Metcalf and J.M. Honig: Science 302 (2003) 89.
- [71] F. Kagawa, K. Miyagawa and K. Kanoda: Nature 436 (2005) 534.
- [72] A. Yoshimori and H. Kasai: Solid State Commun. 58 (1986) 259.
- [73] R. Shiina: J. Phys. Soc. Jpn. 64 (1995) 702.
- [74] T. Mutou: Phys. Rev. B64 (2001) 245102.
- [75] T. Mutou: Phys. Rev. B64 (2001) 165103.
- [76] R.J. Elliott, J.A. Krumhansl and P.L. Leath: Rev. Mod. Phys. 46 (1974) 465.
- [77] F. Yonezawa and K. Morigaki: Prog. Theor. Phys. 53 Suppl. (1973) 1.
- [78] D. Tanasković, V. Dobrosavljević, E. Abrahams and G. Kotliar: Phys. Rev. Lett. 91 (2003) 066603.
- [79] K. Byczuk, W. Hofstetter and D. Vollhardt: Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 056404.
- [80] K. Byczuk, W. Hofstetter and D. Vollhardt: arXiv:1002.3696.
- [81] M.C.O. Aguiar, V. Dobrosavljević, E. Abrahams and G. Kotliar: Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 156402.
- [82] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke and M.H. Hettler: Rev. Mod. Phys. 77 (2005) 1027.
- [83] 倉本義夫,清水幸弘:「固体物理」 39 (2004) 417.
- [84] H. Kusunose: J. Phys. Soc. Jpn. 75 (2006) 054713.
- [85] A. Toschi, A.A. Katanin and K. Held: Phys. Rev. B75 (2007) 045118.
- [86] C. Slezak, M. Jarrell, Th. Maier and J. Deisz: cond-mat/0603421.
- [87] A.A. Katanin, A. Toschi and K. Held: Phys. Rev. B80 (2009) 075104.
- [88] G. Kotliar, S.Y. Savrasov, K. Haule, V.S. Oudovenko, O. Parcollet and C.A. Marianetti: Rev. Mod. Phys. 78 (2006) 865.
- [89] M. Imada and T. Miyake: J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010) 112001.
- [90] N. Marzari and D. Vanderbilt: Phys. Rev. B56 (1997) 12847.
- [91] I. Souza, N. Marzari and D. Vanderbilt: Phys. Rev. B65 (2001) 035109.
- [92] P. Werner and A.J. Millis: Phys. Rev. Lett. 104 (2010) 146401.