

TPSC (Two-Particle Self-Consistent) 近似

H. Kusunose

Abstract

Hubbard 模型に対する TPSC (Two-Particle Self-Consistent) 近似の計算プログラム作成における技術的なメモ。

1. 計算手順

Step 1 二体相関関数と contact バーテックスの決定

与えられた電子密度 n に対して試行グリーン関数を

$$G_0(k) = \frac{1}{i\omega_n + \tilde{\mu}_0 - \epsilon_k} \quad (1)$$

とする。化学ポテンシャルは $\tilde{\mu}_0 = \mu_0 - U_{\text{ch}}n/2$ で与えられ、

$$n = \sum_k G_0(k) \quad (2)$$

を満たすように $\tilde{\mu}_0$ を決める。試行グリーン関数 $G_0(k)$ と適当な $U_{\text{ch}}, U_{\text{sp}}$ を用いて、電荷とスピンの感受率を

$$\chi_{\text{ch}}(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 + U_{\text{ch}}\chi_0(q)}, \quad \chi_{\text{sp}}(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 - U_{\text{sp}}\chi_0(q)} \quad (3)$$

のように求める。 $U_{\text{ch}}, U_{\text{sp}}$ は、局所モーメント和則

$$n + 2d - n^2 = 2 \sum_q \chi_{\text{ch}}(q), \quad n - 2d = 2 \sum_q \chi_{\text{sp}}(q) \quad (4)$$

を満たすように決定する。ここで、二重占有率 $d = \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ であり、TPSC 近似では金森遮蔽効果を考慮して

$$d = \frac{U_{\text{sp}}}{U} n_{\uparrow}n_{\downarrow} + \left(1 - \frac{U_{\text{sp}}}{U}\right) (n_{\uparrow} + n_{\downarrow} - 1)\theta(n_{\uparrow} + n_{\downarrow} - 1) = \frac{U_{\text{sp}}}{U} \frac{n^2}{4} + \left(1 - \frac{U_{\text{sp}}}{U}\right) (n - 1)\theta(n - 1) \quad (5)$$

と評価する。

$$f_1(\tilde{\mu}_0) = \sum_k G_0(k, \tilde{\mu}_0) - n \quad (6)$$

として、 $f_1(\tilde{\mu}_0) = 0$ より $\tilde{\mu}_0$ を決定する。次に、

$$f_2(U_{\text{sp}}) = 2 \sum_q \chi_{\text{sq}}(q) + 2d - n \quad (7)$$

とにおいて $f_2(U_{\text{sp}}) = 0$ より U_{sp} が求まる。最後に、

$$f_3(U_{\text{ch}}) = n(1 - n) + 2d - 2 \sum_q \chi_{\text{ch}}(q) \quad (8)$$

として $f_3(U_{\text{ch}}) = 0$ より U_{ch} を決定する。 f_1, f_2, f_3 はすべて単調増加関数である。以上の手続きにより $\mu_0, U_{\text{ch}}, U_{\text{sp}}$ および $\chi_{\text{ch}}(q), \chi_{\text{sp}}(q), G_0(k)$ が求まる。電子ホール対称性がある場合には、 $\tilde{\mu}_0 = 0, n = 1$ であるので、 $f_2 = 0$ と $f_3 = 0$ を解けばよい。

Step 2 揺らぎによる自己エネルギーの補正

Step 1 で求めた量から自己エネルギー (Hartree 項を除いたもの) を更新する：

$$\tilde{\Sigma}_1(k) = \frac{U}{2} \sum_q \left[U_{\text{ch}} \chi_{\text{ch}}(q) + U_{\text{sp}} \chi_{\text{sp}}(q) \right] G_0(k + q) \quad (9)$$

この自己エネルギーを用いて、対応する化学ポテンシャル $\tilde{\mu}_1$ ($\tilde{\mu}_1 = \mu_1 - Un/2$) を

$$G_1(k) = \frac{1}{i\omega_n + \tilde{\mu}_1 - \epsilon_k - \tilde{\Sigma}_1(k)}, \quad n = \sum_k G_1(k) \quad (10)$$

より決定する。

Step 3 超伝導転移点の決定

Step 2 で求めたグリーン関数は電荷とスピンの揺らぎを考慮したものである。この揺らぎを媒介とする超伝導転移点を決定するには、粒子-粒子チャンネルの Bethe-Salpeter 方程式

$$\Gamma_{s,tz}(k, k'; 0) = \tilde{\Gamma}_{s,tz}^{(12)}(k, k'; 0) - \sum_p \tilde{\Gamma}_{s,tz}^{(12)}(k, p; 0) G_1(p) G_1(-p) \Gamma_{s,tz}(p, k'; 0) \quad (11)$$

を解いて、一重項または三重項の有効相互作用が発散する点を求めればよい。既約バーテックスは、Step 1 で求めた揺らぎと contact バーテックスを用いて

$$\tilde{\Gamma}_s^{(12)}(k, k'; 0) = U - \frac{U}{2} \left[U_{\text{ch}} \chi_{\text{ch}}(k' - k) - 3U_{\text{sp}} \chi_{\text{sp}}(k' - k) \right]_{\text{even}}, \quad (12a)$$

$$\tilde{\Gamma}_{tz}^{(12)}(k, k'; 0) = -\frac{U}{2} \left[U_{\text{ch}} \chi_{\text{ch}}(k' - k) + U_{\text{sp}} \chi_{\text{sp}}(k' - k) \right]_{\text{odd}} \quad (12b)$$

と表される。ここで、even (odd) は $k \rightarrow -k$ に関して対称 (反対称) 部分を取り出すという意味である。

転移点近傍では、(11) の第一項は第二項に比べて無視できる。そうすれば、両辺に含まれる k は積分方程式におけるパラメータと見なして良い。そこで、異常自己エネルギーを $\Sigma_a(k) = -\sum_p \Gamma(k, p; 0) F(p)$ のように導入すれば、

$$\lambda \Sigma_a(k) = -\sum_p \tilde{\Gamma}_{s,tz}^{(12)}(k, p; 0) |G_1(p)|^2 \Sigma_a(p) \quad (13)$$

という固有値問題に帰着する。最大固有値が $\lambda = 1$ となる点が転移点である。線形化された Bethe-Salpeter 方程式は、異常自己エネルギーの代わりに異常グリーン関数 $\phi(p) = |G_1(p)|^2 \Sigma_a(p)$ を導入すれば

$$\lambda \phi(k) = -|G_1(k)|^2 \sum_p \tilde{\Gamma}_{s,tz}^{(12)}(k, p; 0) \phi(p) \quad (14)$$

と書き直すことができる。この方程式は、 $k \rightarrow -k$ に対して even または odd の $\phi(k)$ を仮定すれば、畳込みの形をしているので、高速 Fourier 変換 (FFT) を用いて簡単に解くことができる。異常グリーン関数は $|\omega| \rightarrow \infty$ で $\phi(\omega) \sim 1/\omega^2$ と振る舞うため、後者の表式の方が FFT を用いた数値計算に適している。

References

- [1] Y.M. Vilk and A.-M.S. Tremblay, J. Phys. I **7** 1309 (1997).
- [2] B. Kyung, J.-S. Landry and A.-M.S. Tremblay, Phys. Rev. B **68** 174502 (2003).