

Hubbard 模型の有効作用と動的平均場理論

永井佑紀

平成 20 年 4 月 24 日

DMFT (動的平均場理論: Dynamical mean-field theory) を理解するためのノート。このノートでは、「動的平均場」という意味を理解するために Hubbard 模型の有効作用について考える。動的平均場を理解するため、Ising 模型の平均場理論とその有効ハミルトニアンについて考える。

このノートは A. Georges *et al.* Rev. Mod. Phys. 68 13 (1996). の 3-A に基づいて書いている¹。また、2008 年度に行ったこの論文の輪読によって理解したことを中心にまとめている。この方法は cavity method と呼ばれる。

1 Hubbard 模型の経路積分表示

ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

である。Hubbard 模型の性質に関しては以前のノート²で述べたのでここでは詳しく論じない。この模型は、第一項がサイト間ホッピングを表し遍歴性を担い、第二項がクーロン相互作用を表し局在性を担う。

1.1 Hubbard 模型のラグランジアンと作用と状態和

以前のノートと同様に³ラグランジアンと作用を求めよう。以前と同様な手順により、ラグランジアン \mathcal{L} はグラスマン数 c, c^\dagger を用いて

$$\mathcal{L} = \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) \partial_\tau c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{j\sigma}(\tau) - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{i\sigma}(\tau) + U \sum_i n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \quad (2)$$

と書ける。また、作用 S は

$$S = \int_0^\beta \left(\sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) \partial_\tau c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{j\sigma}(\tau) - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{i\sigma}(\tau) + U \sum_i n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \right) \quad (3)$$

と書ける。よって、状態和 Z はグラスマン数の汎関数積分により

$$Z = \int \prod_i \mathcal{D}c_{i\sigma}^\dagger \mathcal{D}c_{i\sigma} e^{-S} \quad (4)$$

と書ける。

¹したがってこの論文を片手に読んだほうがわかりやすいと思う。

²ノート「Hubbard モデルを用いた t-J モデルと Heisenberg モデルの導出」。

³ノート「経路積分表示での Anderson 模型の Hartree-Fock 近似」参照。

2 Ising 模型平均場理論と有効ハミルトニアン

前節で得られた状態和はクーロン相互作用項が各サイトにあるためにそのままでは計算することができない。そこで、Ising 模型の平均場近似の考え方を導入してみることにする。この節では Ising 模型平均場理論をおさらいし、平均場近似を状態和から眺めることをする。

2.1 Ising 模型の平均場近似のおさらい

Ising 模型のハミルトニアンは

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (5)$$

である。ここで、 S_i は $+1$ か -1 をとり、 j は i の最近接を取るものとする。この Ising 模型を解析するさいに行う簡単な方法として、平均場近似がある。これは、ハミルトニアンのあるサイト i に関連する部分 H_i

$$H_i = -S_i \sum_j^{(i)} J_{ij} S_j - h S_i \quad (6)$$

を考え、サイト i に隣接するスピンの大きさをその平均値 m で置き換え

$$H_i = -S_i z J m - h S_i \quad (7)$$

とする近似である。ここで、系には並進対称性があるとし $J_{ij} = J$ とおいた。また、 z は隣接サイトの数であり $z = 2d$ である (d は次元の大きさ)。この近似を行うとハミルトニアンは

$$H_{\text{eff}} = -(z J m + h) \sum_i S_i \equiv -h_{\text{eff}} \sum_i S_i \quad (8)$$

となり、有効磁場 h_{eff} を感じる自由粒子の問題に帰着する。

磁場中の自由粒子の問題は簡単に解析することができ、熱平衡時の S_i の平均値 $\langle S_i \rangle$ は

$$\langle S_i \rangle = \tanh(\beta h_{\text{eff}}) \quad (9)$$

となる。また、系に並進対称性があるので、サイト i の平均値もサイト j の平均値も等しくならなければならない、 $m = \langle S_i \rangle$ が満たされなければならない。よって、 m が満たすべき方程式は

$$m = \tanh(\beta(z J m + h)) \quad (10)$$

となる。これが平均場方程式である。

以上が Ising 模型での平均場近似である。平均場近似は、ゆらぎの効果を無視している近似だと言われる。ゆらぎの効果というものは次元が低くなればなるほど強く、実際次元 Ising 模型の平均場近似は正しい結果を与えない。ゆらぎの効果は次元が高くなると弱くなっていくので、平均場理論は空間次元無限大のときに厳密な理論になっている。一方、無限次元 $d \rightarrow \infty$ の系では、隣接サイト数 z は無限個 $z \rightarrow \infty$ ある。無限次元の系でも Ising 模型がきちんと定義されるためには、カップリング定数 J が $J = J^*/z$ のようにスケールされなくてはならない。

2.2 Ising 模型の状態和と有効ハミルトニアン

次に、Ising 模型の状態和と平均場近似との関係を見るために、状態和から有効ハミルトニアンを導出する。Ising 模型の状態和は

$$Z = \sum_{S_i} e^{-\beta H} \quad (11)$$

である。ここで、あるサイト o に着目し、ハミルトニアンを

$$H = H^{(o)} + H_o + \Delta H \quad (12)$$

$$H^{(o)} = - \sum_{i \neq o, j \neq o} J_{ij} S_i S_j - h \sum_{i \neq o} S_i \quad (13)$$

$$H_o = -h S_o \quad (14)$$

$$\Delta H = - \sum_j J_{oj} S_o S_j \equiv - \sum_i^{z(o)} \eta_i S_j \quad (15)$$

$$\eta_i = J_{oi} S_o \quad (16)$$

と分ける。ここで $H^{(o)}$ はサイト o においてスピンの抜けた系のハミルトニアンであり、サイト o とその隣接サイト間のボンドを抜いた系のハミルトニアンとも言うことができる。また $\sum_i^{(o)}$ はサイト o の隣接サイト i の和のみを取る記号と定義した。同様に $\prod_i^{(o)}$ はサイト o の隣接サイト i の積のみを取る記号と定義しておく。

2.2.1 前の ver. での導出方法

(この節のやり方は数学的に厳密ではなかった。より厳密なやり方がわかったので削除した。)

2.2.2 より数学的に厳密なやり方

上の節は少しうやむやしたところがあったので、別の方法で考えることにする⁴。

求めたい有効ハミルトニアンは

$$e^{-\beta H_{\text{eff}}} = \sum_{S_i, i \neq 0} e^{-\beta H_o} e^{-\beta H^{(o)}} e^{-\beta \Delta H} \quad (17)$$

である。ここで、

$$Z = \sum_{S_i, i \neq 0} e^{-\beta H_o} e^{-\beta H^{(o)}} e^{-\beta \Delta H} \quad (18)$$

とおくと、

$$H_{\text{eff}} = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (19)$$

と書けるので、 $\ln Z$ を求めれば有効ハミルトニアンが得られることになる。まず、

$$\ln Z = -\beta H_o + \ln \sum_{S_i, i \neq 0} e^{-\beta H^{(o)}} e^{\beta \sum \eta_i S_i} \quad (20)$$

と書き直してみる。すると、 $\ln Z$ は $\ln Z\{\eta_i\}$ という η_1, \dots, η_z の関数であることがわかる。よって、これらを変数と見て原点まわりで多変数のテイラー展開をすると、

$$\ln Z\{\eta_i\} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial^n \ln Z}{\partial \eta_{i_1} \partial \eta_{i_2} \dots \partial \eta_{i_n}} \right]_{\eta_i=0} \eta_{i_1} \dots \eta_{i_n} \quad (21)$$

と書ける。また、

$$\langle S_{i_1} S_{i_2} \dots S_{i_n} \rangle_c^{(o)} \equiv \frac{1}{\beta^n} \left[\frac{\partial^n \ln Z}{\partial \eta_{i_1} \partial \eta_{i_2} \dots \partial \eta_{i_n}} \right]_{\eta_i=0} \quad (22)$$

という量を定義すると、

$$\ln Z\{\eta_i\} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \frac{\beta^n}{n!} \eta_{i_1} \dots \eta_{i_n} \langle S_{i_1} S_{i_2} \dots S_{i_n} \rangle_c^{(o)} \quad (23)$$

⁴これは 08 年 4 月 22 日の論議で理解したことである。

となり、有効ハミルトニアンは

$$H_{\text{eff}} = \text{const.} - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \frac{\beta^{n-1}}{n!} \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_n} \langle S_{i_1} S_{i_2} \cdots S_{i_n} \rangle_c^{(o)} \quad (24)$$

と書ける⁵。

これで、有効ハミルトニアンが求まった。しかし、定義した $\langle S_{i_1} S_{i_2} \cdots S_{i_n} \rangle_c^{(o)}$ がどのような量なのかを理解していなければ、有効ハミルトニアンを導出したとはいいがたい。そこで、 $\langle S_{i_1} S_{i_2} \cdots S_{i_n} \rangle_c^{(o)}$ が何を表すのかを見るために、最初の数項の計算を行ってみる。

$n = 1$ のとき、

$$\langle S_{i_1} S_{i_2} \cdots S_{i_n} \rangle_c^{(o)} = \langle S_{i_1} \rangle_c^{(o)} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \eta_{i_1}} \Big|_{\eta_{i_1}=0} \quad (25)$$

である。これは

$$\langle S_{i_1} \rangle_c^{(o)} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \eta_{i_1}} \Big|_{\eta_{i_1}=0} \quad (26)$$

$$= \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{Z} \sum_{i_1 \neq o} \beta S_{i_1} e^{-\beta H^{(o)} + \sum_{i_1} \eta_{i_1} S_{i_1}} \right]_{\eta_{i_1}=0} \quad (27)$$

$$= \frac{1}{Z^{(o)}} \sum_{i_1 \neq o} S_{i_1} e^{-\beta H^{(o)}} \quad (28)$$

$$= \frac{\text{tr} \left(S_{i_1} e^{-\beta H^{(o)}} \right)}{\text{tr} \left(e^{-\beta H^{(o)}} \right)} \quad (29)$$

となるので、サイト o だけ抜き取った系での S_{i_1} の期待値である。

$n = 2$ のときは、

$$\langle S_{i_1} S_{i_2} \rangle_c^{(o)} = \frac{1}{\beta^2} \left[\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \eta_{i_1} \partial \eta_{i_2}} \right]_{\eta_{i_1}=\eta_{i_2}=0} \quad (30)$$

$$= \frac{1}{\beta^2} \left[\frac{\partial}{\partial \eta_{i_1}} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \eta_{i_2}} \right) \right]_{\eta_{i_1}=\eta_{i_2}=0} \quad (31)$$

$$= \frac{1}{\beta^2} \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \eta_{i_1} \partial \eta_{i_2}} - \frac{\frac{\partial Z}{\partial \eta_{i_1}}}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \eta_{i_2}} \right]_{\eta_{i_1}=\eta_{i_2}=0} \quad (32)$$

$$= \langle S_{i_1} S_{i_2} \rangle^{(o)} - \langle S_{i_1} \rangle^{(o)} \langle S_{i_2} \rangle^{(o)} \quad (33)$$

となる。これらを眺めると、 $\langle S_{i_1} S_{i_2} \cdots S_{i_n} \rangle_c^{(o)}$ の添え字の c は「キュムラント」であることがわかる。もしくは場の理論の言い方でいうと「connected」となる。

2.3 有効ハミルトニアンと平均場近似

次に、得られた有効ハミルトニアン (24) と平均場近似の有効ハミルトニアン (8) との関係を考える。

以前の節において、 $J = J^*/z$ とスケールされるということを述べた。よって、式 (24) での η も $\eta \sim 1/z$ という関係がある。このことを考慮して式 (24) の和の各項を眺めてみる。 $n = 1$ は

$$\sum_{i_1}^z \eta_{i_1} \langle S_{i_1} \rangle^{(o)} = z J \langle S \rangle^{(o)} = J^* \langle S \rangle^{(o)} \quad (34)$$

となる。これは $z \rightarrow \infty$ でも生き残る項である。

⁵定数はすべてまとめて和の外にだした。

$n = 2$ でも同様にオーダーの見積もりを行えばよいのだが、いくつか不明な点がある。まず、 $\eta_{i_1}\eta_{i_2}$ の項から $1/z^2$ が出てくる。次に隣接サイトの数であるが、もし隣接サイトが z 個でそれが二つであれば、 $z \times z$ となり z^2 になってしまい、オーダーは $1/z^2 \times z^2 = O(1)$ となって $z \rightarrow \infty$ でも残ってしまう。よって、 \sum_{i_1, i_2} が z^2 のオーダーより小さくならなければならない⁶。このノートでは示すことができないので、はっきりと $n = 2$ の項が消えることを言えない。わかり次第加筆する、ということにして、天下りの的に $n = 2$ 以降は消えたことにする。

以上から、空間次元無限大の系 ($z \rightarrow \infty$) の有効ハミルトニアン H_{eff}^{∞} は

$$H_{\text{eff}}^{\infty} = -h_{\text{eff}} S_o \quad (35)$$

$$h_{\text{eff}} = h + \sum_i^{(o)} J_{oi} \langle S_i \rangle^{(o)} \quad (36)$$

となる。ここで、 $\langle S_i \rangle^{(o)}$ はサイト o がひとつだけ抜けている系での磁化である。この抜けているサイトの影響は局所的なものであり、オーダー $1/z$ 程度である。よって次元が大きい場合、ひとつのサイトが抜けた影響は無視することができる

$$\langle S_i \rangle^{(o)} = \langle S_i \rangle = m \quad (37)$$

となる⁷。

これで、有効磁場を感じる一粒子の問題に帰着することができた。これは前節の平均場近似そのものである。

3 Hubbard 模型の有効作用

基本的な流れは Ising 模型で有効ハミルトニアンを出した流れと一緒にある⁸。

3.1 有効作用の導出

さきほどと同じように導出する。今回の目的は

$$\frac{1}{Z_{\text{eff}}} e^{-S_{\text{eff}}[c_{o\sigma}^{\dagger}, c_{o\sigma}]} \equiv \frac{1}{Z} \int \prod_{i \neq o, \sigma} \mathcal{D}c_{i\sigma}^{\dagger} \mathcal{D}c_{i\sigma} e^{-S} = e^{-S_o} \frac{Z^{(o)}}{Z} \quad (38)$$

で定義される有効作用 S_{eff} を求めることにある。ここで、

$$S = S^{(o)} + S_o + \Delta S \quad (39)$$

$$S^{(o)} = \int_0^{\beta} \left(\sum_{i \neq o\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger}(\tau) (\partial_{\tau} - \mu) c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij \neq o\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger}(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + U \sum_{i \neq o} n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \right) \quad (40)$$

$$S_o = \int_0^{\beta} d\tau \left(\sum_{\sigma} c_{o\sigma}^{\dagger} (\partial - \mu) c_{o\sigma} + U n_{o\uparrow} n_{o\downarrow} \right) \quad (41)$$

$$\Delta S = - \int_0^{\beta} d\tau \sum_{i\sigma} t_{io} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{o\sigma} + c_{o\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) = - \int_0^{\beta} d\tau \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} \eta_i + \eta_i^{\dagger} c_{i\sigma}) \quad (42)$$

$$\eta_i \equiv t_{io} c_{o\sigma} \quad (43)$$

$$Z^{(o)} \equiv \int \prod_{i \neq o, \sigma} \mathcal{D}c_{i\sigma}^{\dagger} \mathcal{D}c_{i\sigma} e^{-S^{(o)} - \Delta S} \quad (44)$$

とした。

⁶ダブルカウンティングが生じるからかもしれないが、違うかもしれない。

⁷隣接サイトが z 本ある場合と、サイト o へつながる一本が抜けた $z - 1$ 本ある場合を比べると、 $z \rightarrow \infty$ では両方変わらなくなる。

⁸前節を修正したのでこちらも大幅な修正を行った。

上式から有効作用は

$$S_{\text{eff}} = -\ln \frac{Z^{\text{eff}} Z^{(o)} e^{-S_o}}{Z} = -\ln Z^{(o)} - \ln Z_{\text{eff}} + \ln Z + S_o \quad (45)$$

と書ける。右辺の S_o 以外の三項のうち、 $c_{o\sigma}^\dagger, c_{o\sigma}$ が含まれるのは $\ln Z^{(o)}$ だけなので、これに着目すればよい。Ising 模型のときは $\ln Z^{(o)}$ は η の関数であったが、今回は $\ln Z^{(o)}$ は $\eta(\tau)$ の汎関数である。しかし、基本的に同じように $\ln Z^{(o)}$ を展開すればよい。つまり、形式的には微分かわりに汎関数微分を使って⁹多変数のテイラー展開を行えばよい。

展開したあとの τ 積分の範囲に注意しながら計算すると、

$$\begin{aligned} \ln Z^{(o)} &= -\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_n} \frac{1}{(2n!)} \int_0^\beta \int_0^\beta \cdots \int_0^\beta \eta_{i_1}^\dagger \cdots \eta_{i_n}^\dagger \\ &\quad \times G_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_n}(\tau_{i_1} \cdots \tau_{i_n}, \tau_{j_1} \cdots \tau_{j_n}) \eta_{j_1} \cdots \eta_{j_n} d\tau_{i_1} \cdots d\tau_{i_n} d\tau_{j_1} \cdots d\tau_{j_n} \\ &= -\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_n} \int_0^\beta d\tau_{i_1} \int_0^{\tau_{i_1}} d\tau_{i_2} \cdots \int_0^{\tau_{i_{n-1}}} d\tau_{i_n} \\ &\quad \times \int_0^\beta d\tau_{j_1} \int_0^{\tau_{j_1}} d\tau_{j_2} \cdots \int_0^{\tau_{j_{n-1}}} d\tau_{j_n} \eta_{i_1}^\dagger \cdots \eta_{i_n}^\dagger \\ &\quad \times G_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_n}^{(o)}(\tau_{i_1} \cdots \tau_{i_n}, \tau_{j_1} \cdots \tau_{j_n}) \eta_{j_1} \cdots \eta_{j_n} \end{aligned} \quad (46)$$

$$G_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_n}^{(o)}(\tau_{i_1} \cdots \tau_{i_n}, \tau_{j_1} \cdots \tau_{j_n}) \equiv -\langle T[c_{i_1} \cdots c_{i_n} c_{j_1}^\dagger \cdots c_{j_n}^\dagger] \rangle \quad (47)$$

となる¹⁰。ここで、 $\langle cc \rangle$ が値を持つような凝縮相については考えていないので η_i と η_i^\dagger は必ず同じ数だけ出てきて、その数はあわせて $2n$ 個である。また、Green 関数 $G^{(o)}$ はサイト o だけ取り除いた系での Green 関数である。これは、 $\eta_i = 0$ のまわりで無限級数で展開したことによる。

よって、有効作用 S_{eff} は

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}} &= \text{const.} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_n} \int_0^\beta d\tau_{i_1} \int_0^{\tau_{i_1}} d\tau_{i_2} \cdots \int_0^{\tau_{i_{n-1}}} d\tau_{i_n} \\ &\quad \times \int_0^\beta d\tau_{j_1} \int_0^{\tau_{j_1}} d\tau_{j_2} \cdots \int_0^{\tau_{j_{n-1}}} d\tau_{j_n} \eta_{i_1}^\dagger \cdots \eta_{i_n}^\dagger \\ &\quad \times G_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_n}^{(o)}(\tau_{i_1} \cdots \tau_{i_n}, \tau_{j_1} \cdots \tau_{j_n}) \eta_{j_1} \cdots \eta_{j_n} + S_o \end{aligned} \quad (48)$$

となる。この有効作用の次元依存性を見ることによって、 $d \rightarrow \infty$ において生き残る項がどれかを考えなければならない。したがって、その前に、ホッピング t の d 依存性を次の節で考えることにする。

3.2 ホッピングの次元依存性

無限次元の極限を取る前に、ホッピング t の次元依存性を考えよう。格子定数を 1 として、 $U = 0$ の単純超立方格子の強束縛模型を考える。このとき、エネルギー分散関係は

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{\alpha=1}^d \cos k_\alpha \quad (49)$$

となる。このとき、電子の状態密度は

$$\rho_0(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (50)$$

⁹数学的厳密さについては問わない

¹⁰積分範囲を変更することによって $2n!$ を消す方法はノート「相互作用表示と時間発展演算子」参照。

で与えられる¹¹。関数 $\delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}})$ をフーリエ変換すると

$$\rho_0(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda\epsilon} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\lambda\epsilon_{\mathbf{k}}} \quad (51)$$

となる。 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ が三角関数であり一周期にわたって積分するとゼロになることを用いると、指数関数の展開には偶数次しか出てこないことがわかり、適当に計算すると¹²

$$\rho_0(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda\epsilon} (1 - \lambda^2 t^2 d + \dots) \quad (52)$$

となる。以上から、 $d \rightarrow \infty$ で状態密度が定義されるためには $t \sim 1/\sqrt{d}$ でなければならないことがわかる。

3.3 有効作用

以上から、 $d \rightarrow \infty$ での有効作用を求めたい。その為には、式(48)の各項がどのような d 依存性を持っているかを知る必要がある。 d 依存性を持つのは η_i と Green 関数である。よって、 n 点 Green 関数の d 依存性がわかればよいということになる。

まず、 $n = 1$ のときを考える。サイト o が抜けた”cavity”の Green 関数なので、二次元単純正方格子の場合は i から j への伝播は図.1 のようになる。 i と j のサイトは必ずサイト o の隣接であるとする(最近接ホッピングしか考えない)。 i から j へは二回ホッピングしないとたどり着けないので $t^2 \sim 1/d$ のオーダーである。また、 i と j の選び方のオーダーはそれぞれ d であり、 η, η^\dagger はひとつずつあるので、全体のオーダーは

$$d^2 \times (d^{-1/2})^2 \times (d^{-1/2})^2 \sim O(1) \quad (53)$$

となり、 $d \rightarrow \infty$ でも残る。

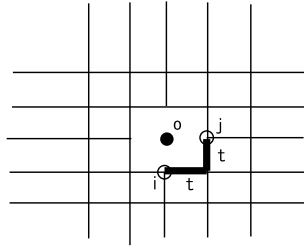


図 1: cavity の Green 関数。 i から j へと伝播する。

次に $n = 2$ の場合であるが、 i, j, k, l の選び方はそれぞれ d であるから d^4 のオーダー、 η と η^\dagger の数は合わせて 4 個、Green 関数からの寄与は図.2 のように 2×3 回の飛び移りの寄与が必要なので t^6 である。ここで、Green 関数は connected である、という条件があるので、二つの粒子は必ずどこかで相互作用をしないとしない¹³。よって $i \rightarrow k \rightarrow l$ や $j \rightarrow l \rightarrow k$ という経路が必要であり、重複する $k-l$ 間を除けば 3×2 回の飛び移りが必要になるのである。よってオーダーは

$$d^4 \times (d^{-1/2})^4 \times (d^{-1/2})^6 \sim \frac{1}{d} \quad (54)$$

となり、 $d \rightarrow \infty$ ではこの項は寄与しない。

以上から一般の n の場合もおおざっぱにオーダーを見積もることができて

$$d^{2n} \times (d^{-1/2})^{2n} \times ((d^{-1/2})^2)^{2n-1} \sim d^{1-n} \quad (55)$$

¹¹相互作用がないのでこのように状態密度が定義できる。

¹²積分するだけである。

¹³一本の線を切って二つに分けることのできないファインマンダイアグラムを connected と呼ぶので、connected であれば四つの点は必ず線で結ばれている。

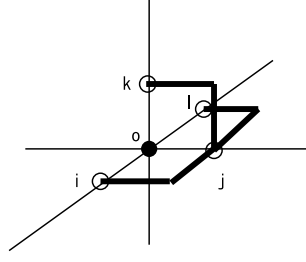


図 2: cavity の Green 関数。ある点からほかの点に伝播するにはやはり二回の飛び移りが必要。

となり、 $n > 1$ であれば $d \rightarrow \infty$ で寄与が消えることがわかる。

よって、 $d \rightarrow \infty$ における定数項を除いた有効作用 S_{eff} は

$$S_{\text{eff}} = S_o + \sum_{i,j} \int_0^\beta d\tau_i \int_0^\beta d\tau_j \eta_i^\dagger G_{i,j}^{(o)}(\tau_i, \tau_j) \eta_j \quad (56)$$

$$= \int_0^\beta d\tau \left(\sum_\sigma c_{o\sigma}^\dagger (\partial - \mu) c_{o\sigma} + U n_{o\uparrow} n_{o\downarrow} \right) + \sum_{i,j\sigma} \int_0^\beta d\tau_i \int_0^\beta d\tau_j t_{oi} t_{jo} c_{o\sigma}^\dagger(\tau_i) G_{i,j}^{(o)}(\tau_i, \tau_j) c_{o\sigma}(\tau_j) \quad (57)$$

$$= \sum_\sigma \left(c_{o\sigma}^\dagger (-i\omega_n - \mu) c_{o\sigma} + \sum_{i,j} t_{oi} t_{jo} c_{o\sigma}^\dagger G_{i,j}^{(o)}(i\omega_n) c_{o\sigma}(\tau_j) \right) + U n_{o\uparrow} n_{o\downarrow} \quad (58)$$

$$= \sum_\sigma c_{o\sigma}^\dagger (-\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)) c_{o\sigma} + U n_{o\uparrow} n_{o\downarrow} \quad (59)$$

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) \equiv i\omega_n + \mu - \sum_{i,j} t_{oi} t_{jo} G_{i,j}^{(o)}(i\omega_n) \quad (60)$$

となる。これで、Hubbard モデルがサイト o で相互作用する 0 次元の不純物に帰着された。

ここで注意しなければならないのは、 \mathcal{G}_0 に含まれる Green 関数 $G^{(o)}$ は”cavity” Green 関数である、ということである。Ising 模型のときは、 $d \rightarrow \infty$ における磁化はサイト o が抜けても抜けても一致するという状況があった。しかし、今回の $G^{(o)}$ もサイト o が含まれた $G^{(o)}$ と一致するかどうか、は自明ではない。次節以降で $G^{(o)}$ と G の関係を見ていく。

4 ”cavity” Green 関数と full Green 関数との関係

ここまでで、Hubbard モデルの有効作用が式 (58) のように書かれることがわかった。あとは、cavity Green 関数と通常の Green 関数 (full Green 関数) がどのように関係付けられるかを見ていけばよい。

4.1 Bethe lattice の場合

Bethe lattice と呼ばれる格子の場合、式 (60) は非常に簡単になる。Bethe lattice とは図.3 のような格子である。この格子はツリー状につながっており、異なる枝は伸びていった先では絶対に繋がらない。Bethe 格子において、サイト o とその隣接サイト i と j を考える。二次元単純正方格子の図.1 のときのように、サイト o を取り除いた Bethe 格子は図.4 である。このときサイト o が取り除かれているため、 i から j には飛び移ることができない。よって cavity Green 関数 $G_{ij}^{(o)}$ は $i \neq j$ のとき 0 である。可能なのは i から i への飛び移りだけである。また、 $d \rightarrow \infty$ であれば、あるサイト i の隣接サイトは無数にあるので、サイト o が取り除かれた影響は無視できる。以上から、Bethe lattice のときは

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - zt^2 G(i\omega_n) \quad (61)$$

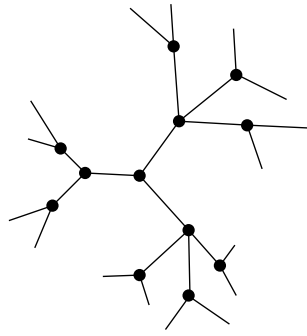


図 3: $z = 3$ の Bethe lattice。ある格子の隣接格子は必ず z 個ある。

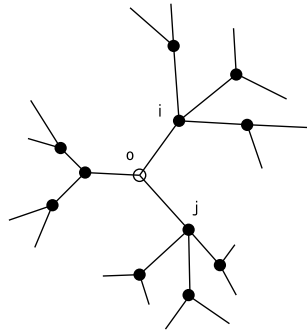


図 4: サイト o を取り除いたときの $z = 3$ の Bethe lattice。 i から j へは行けない。

となる¹⁴。

4.2 一般的な格子の場合

次に、Bethe lattice のような特別な格子ではないときの cavity Green 関数と通常の Green 関数の関係を考える。ここでいう「通常の」とは「サイト o が取り除かれていない」という意味である。この Green 関数 G_{ij} は i から j

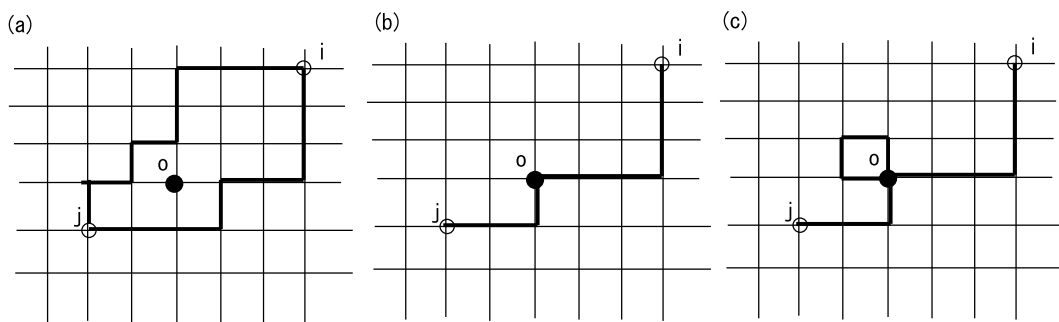


図 5: (a): $G_{ij}^{(o)}$ の経路。(b): $G_{ij}^{(o)}$ 以外の G_{ij} の経路。(c): サイト o を二回通る経路。

への伝播を表している。 i から j への伝播には、「サイト o を通る経路」と「サイト o を通らない経路」が存在する。また、ダブルカウンティングをしないためには「サイト o を二回以上通る経路」というのは存在してはいけ

¹⁴並進対称性があれば t はサイトに依らない。

ない (図.5 参照)。以上から通常の Green 関数は

$$G_{ij}(i\omega_n) = G_{ij}^{(o)} + G_{io}G_{oo}^{-1}G_{oj} \quad (62)$$

と書ける。よって、

$$G_{ij}^{(o)}(i\omega_n) = G_{ij} - \frac{G_{io}G_{oj}}{G_{oo}} \quad (63)$$

となる。ここで、 i から j へいたる経路は無数にあり遠回りしてもよいように思える。しかし、 $d \rightarrow \infty$ においては i から j への格子上の最短距離¹⁵以外の経路は無駄にホッピングをしていることになるので 0 になってしまう。

よって、

$$\sum_{i,j} t_{oi}t_{jo}G_{i,j}^{(o)}(i\omega_n) = \sum_{ij} t_{io}t_{jo}G_{ij} - \left(\sum_i t_{io}G_{io}\right)^2/G_{oo} \quad (64)$$

となる。このままでも cavity Green 関数が full Green 関数と関係付けられたので一件落着かもしれないが、フーリエ変換をすることによりもっと理論の骨組みがはつきりと見えてくる。よって次の節では「動的平均場理論 (DMFT)」の近似の精神について考えることにする。

5 動的平均場理論

5.1 近似の精神

動的平均場理論の近似は、「自己エネルギーの波数依存性を無視する」というところに本質がある。波数依存性を無視する、ということは、実空間において各サイトの自己エネルギーがすべて等しいとする、ということである。 $d \rightarrow \infty$ においては、自己エネルギー Σ は k に依存しないということを示すことができる¹⁶。よって、 $d \rightarrow \infty$ の近似では常に $\Sigma(\mathbf{k}) = \Sigma$ という条件を使えるということになる。

Dyson 方程式から、ある無摂動 Green 関数 $G^0(\mathbf{k}, i\omega_n)$ と真の Green 関数 $G(\mathbf{k}, i\omega_n)$ との間には

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n)} \quad (65)$$

という関係がある。ここで $\epsilon_{\mathbf{k}}$ は摂動のないときのエネルギー分散である。

上式から、サイト表示の Green 関数 $G_{ij}(i\omega_n)$ は

$$G_{ij}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n)} \quad (66)$$

となる。ここで R_i はサイト i における位置ベクトルとする。この表式を式 (64) に用いるとよい。

5.2 自己無撞着方程式

式 (66) を式 (64) に代入する。ホッピング t_{ij} のフーリエ変換が

$$\epsilon_{\mathbf{k}} \equiv \sum_{ij} t_{ij} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (67)$$

¹⁵ 格子上で最短距離を行く場合の距離を「マンハッタンディスタンス」と呼ぶ、らしい。

¹⁶ ここでは触れない。

で書けることに注意すれば式 (64) は

$$G_{i,j}^{(o)}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^2}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n)} - \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n)} \right)^2 / \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n)} \quad (68)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\epsilon^2}{i\omega_n + \mu - \epsilon - \Sigma(i\omega_n)} - \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\epsilon}{i\omega_n + \mu - \epsilon - \Sigma(i\omega_n)} \right)^2 / \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon - \Sigma(i\omega_n)} \quad (69)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\epsilon^2}{\zeta - \epsilon} - \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\epsilon}{\zeta - \epsilon} \right)^2 / \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{1}{\zeta - \epsilon} \quad (70)$$

となる。ここで $\rho(\epsilon)$ は無摂動状態における状態密度であり、 $\zeta = i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n)$ である。また、

$$t_{oo} = \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\epsilon) \epsilon d\epsilon = 0 \quad (71)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon \rho(\epsilon) \epsilon^2}{\zeta - \epsilon} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\epsilon^2}{\zeta - \epsilon} + \frac{\zeta - \epsilon}{\zeta - \epsilon} \epsilon \right) \rho(\epsilon) d\epsilon \quad (72)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\zeta}{\zeta - \epsilon} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon \quad (73)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon \rho(\epsilon)}{\zeta - \epsilon} d\epsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\zeta}{\zeta - \epsilon} - \frac{\zeta - \epsilon}{\zeta - \epsilon} \right) \rho(\epsilon) d\epsilon \quad (74)$$

$$= \zeta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\epsilon)}{\zeta - \epsilon} d\epsilon - 1 \quad (75)$$

$$\tilde{D}(\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{1}{\zeta - \epsilon} \quad (76)$$

を用いれば

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\epsilon^2}{\zeta - \epsilon} - \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{\epsilon}{\zeta - \epsilon} \right)^2 / \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{1}{\zeta - \epsilon} = \zeta - 1 / \tilde{D}(\zeta) \quad (77)$$

となる。

以上から、式 (60) は

$$\mathcal{G}_0^{-1} = i\omega_n + \mu - (\zeta - 1 / \tilde{D}(\zeta)) \quad (78)$$

$$= \Sigma + 1 / \tilde{D}(i\omega_n + \mu - \epsilon) \quad (79)$$

と書ける。ここで、式 (??) と式 (66) と $\tilde{D}(i\omega_n + \mu - \epsilon)$ を見比べれば、 $\tilde{D}(i\omega_n + \mu - \epsilon) = G_{oo}$ であることがわかるので、

$$\Sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - G_{oo}^{-1}(i\omega_n) \quad (80)$$

であることがわかる。この式は Σ に関する自己無撞着な方程式である。この方程式を満たす Σ を見つけてくると、それは動的平均場近似による解となる。

5.3 自己無撞着な方程式の解き方

式 (80) を解くにはどのようにすればよいかについて述べる。

得られた有効作用 S_{eff} は

$$S_{\text{eff}} = - \sum_{\sigma} c_{o\sigma}^{\dagger} (\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)) c_{o\sigma} + U n_{o\uparrow} n_{o\downarrow} \quad (81)$$

である。この有効作用は、 \mathcal{G}_0 を無摂動 Green 関数とする Anderson 模型の有効作用と等しい¹⁷。よって、この一サイトしかない Anderson 模型をエネルギー依存性も含めてきちんと解くと自己エネルギー Σ が得られる。この Σ を用いてサイト表示の Green 関数 G_{oo} は

$$G_{oo}(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \epsilon} \quad (82)$$

と書けるので、積分して得られた結果を式 (80) の右辺に代入して、 Σ と等しくなればその Σ は解である。

実際には、得られた Anderson 模型を解いて得られた Σ と G_{oo} を用いて

$$\mathcal{G}_0(i\omega_n) = \frac{1}{\Sigma(i\omega_n) + G_{oo}^{-1}(i\omega_n)} \quad (83)$$

とし、また Anderson 模型を解く、ということを繰り返せばよい。つまり、 \mathcal{G}_0 を変数とする

$$\mathcal{G}_0 = F(\mathcal{G}_0) \quad (84)$$

という非線形方程式の解を求めればよい。これが動的平均場理論である。

参考文献

- A. Georges *et al.* Rev. Mod. Phys. **68** 13 (1996).
- 長岡洋介「統計力学」
- 佐宗哲郎「動的分子場理論」2003 年度物性若手夏の学校テキスト
- 永長直人「物性論における場の量子論」
- 永長直人「電子相関における場の量子論」

¹⁷ ノート「経路積分表示での Anderson 模型の Hartree-Fock 近似」参照。