

ダイアグラム展開に基づく連続時間量子モンテカルロ法*

愛媛大学 理学部 楠瀬 博明*¹
東北大学 理学部 大槻 純也*²

(2010年3月24日受理)

概要

近年、多体摂動論に基づく連続時間量子モンテカルロ法のアルゴリズムが提出され、強相関電子系の動的平均場近似における有力な不純物(クラスター)ソルバーとして広く用いられるようになってきた。本稿では、不純物 Anderson 模型を主な題材として、相互作用および混成(運動エネルギー)項に関する展開アルゴリズムを解説する。また、実際にプログラムを作成する際の注意点や計算効率について述べる。電子-格子相互作用系への適用など、最近の発展についても簡単に紹介する。

1 はじめに

いわゆる強相関電子系と呼ばれる分野では、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、通常、自由電子系からの摂動展開が行われる。また、逆の状況では、相互作用のみを厳密に取り入れた無摂動状態からの摂動展開が有用な方法の1つである。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という点で強相関電子系研究の醍醐味でもある。

無摂動系とはかけ離れた領域に対して摂動展開が困難になるのは、摂動次数が上がるにつれてその評価が実際上困難になるからであって、仮に摂動項をすべて評価できるのであれば相転移などが発生しない限りにおいて摂動展開は意味を持つ(特に有限サイズ系では)と考えられる。摂動項を評価こそしないが、有効パラメータにその効果を繰り込んだ Fermi 液体論はその好例である。もちろん、全摂動項をまともに評価することは難しいが、「重み付きサンプリング」の考え方に従って、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が本稿で紹介する「連続時間量子モンテカルロ (Continuous-Time Quantum Monte Carlo: CT-QMC) 法」である。

強相関電子系の量子モンテカルロ法としては、Trotter 分解と離散 Stratonovich-Hubbard 変換を用いた Hirsch-Fye アルゴリズムが広く用いられてきた [1–5]。実は、相互作用展開を用いた CT-QMC 法は Trotter 分割数無限大、すなわち連続虚時間の Hirsch-Fye アルゴリズムと等価であることが示されている [6]。本稿で取り上げる CT-QMC 法は、1998年に Rombouts らにより相互作用の展開としてその原

*¹ E-mail:kusu@phys.sci.ehime-u.ac.jp

*² E-mail:otsuki@cmpt.phys.tohoku.ac.jp

* 本稿は、編集部の方から特にお願いで執筆していただいた記事である。

型が示され [7,8], 見かけは少し異なるがこれと等価な方法*3が 2005 年に Rubtsov らによって Hubbard 模型に適用された [9]. その考え方を Werner らが逆極限の運動エネルギー項展開に焼き直し [10,11], 動的平均場理論 (DMFT) [12] の有力な不純物ソルバーとして提出したことから急速に普及した. その後, 電荷の自由度を消去した交換相互作用模型へと拡張された [13]. 以下では, 展開パラメータの異なる上記 3 つの方法を, U 展開, V 展開, J 展開と呼ぶことにする.

CT-QMC 法では, Trotter 分解による離散化誤差がなく, Hirsch-Fye 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 [14]. 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. Hirsch-Fye 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 [15].

次節では, 不純物 Anderson 模型と Coqblin-Schrieffer 交換模型に対して, 分配関数の摂動展開と連続時間サンプリングのアルゴリズムについて解説する. 3 節では, U , V , J 展開の計算時間比較や負符号問題について考察する. また, 実際に計算を行う際の技術的な注意点についてコメントする. 4 節では, 電子-格子相互作用系への適用など, 最近の発展について簡単に触れる. 付録には, DMFT の概略や行列更新に必要な公式などをまとめた.

2 摂動展開と重み付きサンプリング

2.1 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 [16–19]. 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

$$Z = \text{Tr} \left[e^{-\beta H_0} T_\tau \exp \left(- \int_0^\beta d\tau H_1(\tau) \right) \right], \quad (1)$$

と表される. ここで, $A(\tau) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0}$ は演算子 A の相互作用表示, T_τ は虚時間の時間順序演算子である. 表記を簡潔にするために, H_0 に関する統計平均を

$$\langle A \rangle_0 \equiv \frac{1}{Z_0} \text{Tr} [e^{-\beta H_0} A], \quad Z_0 = \text{Tr} e^{-\beta H_0},$$

k 次元の虚時間積分を

$$\int_k d\tau \equiv \frac{1}{k!} \int_0^\beta d\tau_k \cdots \int_0^\beta d\tau_2 \int_0^\beta d\tau_1,$$

のように表し, 分配関数の摂動項をべき展開すると

$$\frac{Z}{Z_0} = \sum_{k=0}^{\infty} \int_k d\tau P(q_k), \quad P(q_k) = (-1)^k \langle T_\tau H_1(\tau_k) \cdots H_1(\tau_2) H_1(\tau_1) \rangle_0 \equiv \langle \hat{P}(q_k) \rangle_0, \quad (2)$$

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

*3 等価性については [6] 参照.

全ハミルトニアン H に関する演算子 A の統計平均は以下のように表される

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{k=0}^{\infty} \int_k d\tau \langle \hat{P}(q_k) A(q_k) \rangle_0}{\sum_{k=0}^{\infty} \int_k d\tau P(q_k)}. \quad (3)$$

モンテカルロ法では、確率分布 $P(q_k)$ に従う配置 q_k の Markov 連鎖を生成する。このとき、 A の統計平均は N_s をサンプル数として、次のように評価される

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{k=0}^{\infty} \int_k d\tau P(q_k) \frac{\langle \hat{P}(q_k) A(q_k) \rangle_0}{P(q_k)}}{\sum_{k=0}^{\infty} \int_k d\tau P(q_k)} \doteq \frac{1}{N_s} \sum_{\{q_k\}} \frac{\langle \hat{P}(q_k) A(q_k) \rangle_0}{P(q_k)} \equiv \left\langle \frac{\langle \hat{P}(q_k) A(q_k) \rangle_0}{P(q_k)} \right\rangle_{\text{MC}}. \quad (4)$$

摂動次数の統計平均 $\langle k \rangle$ を考えてみよう

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} \int_k d\tau k P(q_k) &= - \int_0^{\beta} d\tau_1 \sum_{k=1}^{\infty} \int_{k-1} d\tau \langle \hat{P}(q_{k-1}) H_1(\tau_1) \rangle_0 \\ &= -\beta \sum_{k=1}^{\infty} \int_{k-1} d\tau \langle \hat{P}(q_{k-1}) H_1(0) \rangle_0 = -\beta \sum_{k=0}^{\infty} \int_k d\tau \langle \hat{P}(q_k) H_1 \rangle_0. \end{aligned}$$

ここで、 $H_1(\tau)$ が周期 β の周期関数であるとして原点が τ_1 になるよう全体を並進移動した。よって、 k と摂動項の統計平均の間に次の関係が成り立つ

$$\langle k \rangle = -\beta \langle H_1 \rangle. \quad (5)$$

k は正値だから、 $\langle H_1 \rangle > 0$ であれば、上の関係を満たすために必ず $P(q_k)$ から負の寄与がある。すなわち、負符号問題が発生する。また、低温で負符号問題がより深刻になることが見て取れる。一方、 $\langle H_1 \rangle < 0$ の場合、負符号が軽減または消失する可能性がある。ただし、この条件は負符号が発生しないための必要条件であって、十分条件ではないことに注意する。

2.2 経路積分表示

経路積分表示についても少し触れておく。まず、Fermi 演算子 \hat{f}_i の固有値と固有関数として、反可換な Grassmann 数 f_i とコヒーレント状態 $|f_i\rangle$ を導入する。すなわち、 $\hat{f}_i |f_i\rangle = f_i |f_i\rangle$ 。コヒーレント状態の経路積分を用いて、分配関数は

$$Z = \int \mathcal{D}f^\dagger \int \mathcal{D}f e^{-S(f^\dagger, f)}, \quad S(f^\dagger, f) = \int d\tau \left[f^\dagger \frac{\partial}{\partial \tau} f + H(f^\dagger, f) \right], \quad (6)$$

と表される。ここで $\int \mathcal{D}f^\dagger \int \mathcal{D}f$ は時間発展における全ての経路にわたる積分を表す。ハミルトニアンを $H = H_0 + H_1$ と分離し、対応する作用をそれぞれ

$$S_0 = \int d\tau \left[f^\dagger \frac{\partial}{\partial \tau} f + H_0(f^\dagger, f) \right], \quad S_1 = \int d\tau H_1(f^\dagger, f),$$

とする。 $\int \mathcal{D}f^\dagger \int \mathcal{D}f \rightarrow \text{Tr}$, および, 作用 S_0 に関する統計平均を

$$\langle A \rangle_0 = \frac{\text{Tr} e^{-S_0} A(f^\dagger, f)}{\text{Tr} e^{-S_0}},$$

のように略記すると, 分配関数の摂動展開や統計平均は, 形式的に式 (2), (3) と全く同じ表式になる。

2.3 不純物 Anderson 模型

以下での説明を具体化するために, 次の不純物 Anderson 模型について考えよう

$$\begin{aligned} H_{\text{IAM}} &= H_c + H_I + H_{\text{hyb}} + H_U, \\ H_c &= \sum_{p\sigma} \epsilon_{p\sigma} c_{p\sigma}^\dagger c_{p\sigma}, \quad H_I = \sum_{\sigma} \epsilon_{f\sigma} n_{\sigma}, \quad H_{\text{hyb}} = V \sum_{\sigma} (c_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + f_{\sigma}^\dagger c_{\sigma}), \\ H_U &= U n_{\uparrow} n_{\downarrow}, \quad n_{\sigma} = f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma}. \end{aligned} \quad (7)$$

H_c , H_I , H_{hyb} , H_U はそれぞれ, c 電子の運動エネルギー, 不純物 f 電子のエネルギー準位, c - f 混成および f 電子間の局所 Coulomb 相互作用を表す。ここでは, 簡単のため混成 V_p の p 依存性を無視し, 実数とした。また, $c_{\sigma} = \sum_p c_{p\sigma} / \sqrt{N_0}$ は局所 c 電子の消滅演算子, N_0 は全格子点数を表す。

多体効果の本質は f 電子にあるので, 分配関数を経路積分を用いて表し, c 電子のトレースを取ると

$$Z = \text{Tr}_c \text{Tr}_f e^{-S(f^\dagger, f; c^\dagger, c)} = \text{Tr}_f e^{-S_f(f^\dagger, f)}, \quad (8)$$

となる。 f 電子に対する有効作用は

$$S_f = - \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger(\tau') \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\tau' - \tau) f_{\sigma}(\tau) + \int_0^\beta d\tau H_U(\tau), \quad (9)$$

であり, 自由な f 電子 Green 関数

$$\mathcal{G}_{\sigma}(\tau) = - \langle T_{\tau} f_{\sigma}(\tau) f_{\sigma}^\dagger \rangle_0 = \left[-\delta(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \epsilon_{f\sigma} \right) - \Delta_{\sigma}(\tau) \right]^{-1}, \quad (10)$$

および相互作用項によって表される。ここで

$$\Delta_{\sigma}(\tau) = V^2 \mathcal{G}_{c\sigma}(\tau), \quad \mathcal{G}_{c\sigma}(\tau) = - \frac{1}{N_0} \sum_p \langle T_{\tau} c_{p\sigma}(\tau) c_{p\sigma}^\dagger \rangle_0, \quad (11)$$

は混成関数で, f 準位の混成によるシフトと幅を表す。DMFT では, $\mathcal{G}_{\sigma}(\tau)$ [または $\mathcal{G}_{c\sigma}(\tau)$] を動的な平均場とみなし自己無撞着に決定する (付録 A)。以上のように, 経路積分では, 不要な自由度を消去したり, τ に依存する動的な粒子系を明示的に扱える点で, より柔軟性がある。

以下では, $f^\dagger (c)$ と $f (c^\dagger)$ に対する時刻はそれぞれプライムの有無で表す。また, 同時刻が現れた場合は $\tau' = \tau + 0$ と約束する。

2.4 U 展開 [6, 9, 14]

2.4.1 分配関数の k 次項

式 (9) 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。 k 次の摂動項は

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

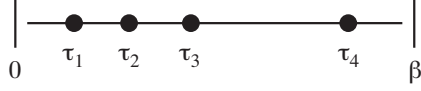


図1 U 展開における配置の例 ($k = 4$).

であるが, S_0 が f^\dagger , f の 2 次形式なので Wick の定理が適用できて

$$P(q_k) = (-U)^k \prod_{\sigma} \det \mathcal{G}_{\sigma}, \quad (12)$$

となる. ここで \mathcal{G}_{σ} は i 行 j 列の要素が

$$(\mathcal{G}_{\sigma})_{ij} = \mathcal{G}_{\sigma}(\tau_i - \tau'_j), \quad (\tau'_j \equiv \tau_j + 0), \quad (13)$$

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 に関する展開であり, 両者の収束半径は異なることに注意されたい.

U 展開では, 式 (5) より

$$\langle k \rangle = -\beta U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle, \quad (14)$$

が成り立つ. 二重占有率は正値であり, $U > 0$ のとき負符号問題が生じる. 一方, $U < 0$ の場合には, 負符号問題がないことが示されている. Rubtsov らは, パラメータ α を用いて $n_{\sigma} \rightarrow n_{\sigma} + \alpha$ とし, さらに $U > 0$ の場合は片方のスピンに対し $n_{\sigma} \rightarrow 1 - n_{\sigma}$ のように, 電子・ホール変換を施すことで, 相互作用項を $S_1 = S_1(\alpha) + \Delta S_1(\alpha)$,

$$S_1(\alpha) = -\frac{U}{2} \int d\tau [(n_{\uparrow}(\tau) + \alpha)(n_{\downarrow}(\tau) - 1 - \alpha) + (n_{\uparrow}(\tau) - 1 - \alpha)(n_{\downarrow}(\tau) + \alpha)], \quad (15)$$

のように変形し, $\Delta S_1(\alpha)$ を S_0 に含めると, $\alpha \gtrsim 0$ で負符号が (格子系でも) 軽減または消去されることを示した [9]. U 展開の CT-QMC 法は Trotter 分割数無限大の Hirsch-Fye 法と等価であることが示されており [6], 両者の負符号問題の程度はこの極限で同じである.

2.4.2 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 1 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

- 追加: $[0, \beta) \rightsquigarrow \tau$ として $H_1(\tau)$ を追加
- 削除: $[1, k] \rightsquigarrow n$ (n 整数) として $H_1(\tau_n)$ を削除

である. ここで, $[a, b) \rightsquigarrow c$ 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 $W_{x \rightarrow y}$ とすると, 詳細釣り合いの条件は

$$\frac{W_{x \rightarrow y}}{W_{y \rightarrow x}} = \frac{P(y)}{P(x)},$$

である。遷移行列を $W_{x \rightarrow y} = W_{\text{prop}}(x \rightarrow y)W_{\text{acc}}(x \rightarrow y)$ 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

$$R(x \rightarrow y) \equiv \frac{W_{\text{acc}}(x \rightarrow y)}{W_{\text{acc}}(y \rightarrow x)} = \frac{W_{\text{prop}}(y \rightarrow x) P(y)}{W_{\text{prop}}(x \rightarrow y) P(x)}, \quad (16)$$

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

たいていの場合、 $W_{\text{prop}}(x \rightarrow y) = W_{\text{prop}}(y \rightarrow x)$ であり、 W_{prop} は $R(x \rightarrow y)$ の表式に現れない。例えば、Ising 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 $x \rightarrow \bar{x}$ と逆過程 $\bar{x} \rightarrow x$ 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

$$W_{\text{prop}}(q_k \rightarrow q_{k+1}) = \frac{d\tau}{\beta}, \quad W_{\text{prop}}(q_{k+1} \rightarrow q_k) = \frac{1}{k+1}, \quad (17)$$

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

$$W_{\text{acc}}(q_k \rightarrow q_{k+1}) = \frac{\beta}{k+1} \frac{P(q_{k+1})}{P(q_k)}, \quad (18)$$

となる。式 (12) 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： $q_k \rightarrow q_{k+1}$

$[0, \beta] \rightsquigarrow \tau$. $H_1(\tau) = U f_{\uparrow}^{\dagger}(\tau') f_{\uparrow}(\tau) f_{\downarrow}^{\dagger}(\tau') f_{\downarrow}(\tau)$ 追加

$$W_{\text{acc}} = -\frac{\beta U}{k+1} \frac{\det \mathcal{G}_{\uparrow}^{\oplus(\tau, \tau')}}{\det \mathcal{G}_{\uparrow}} \frac{\det \mathcal{G}_{\downarrow}^{\oplus(\tau, \tau')}}{\det \mathcal{G}_{\downarrow}}. \quad (19)$$

$\mathcal{G}_{\sigma}^{\oplus(\tau, \tau')}$ は、末尾行に $\mathcal{G}_{\sigma}(\tau - \tau'_j)$ 、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： $q_k \rightarrow q_{k-1}$

$[1, k] \rightsquigarrow n$. $H_1(\tau_n) = U f_{\uparrow}^{\dagger}(\tau'_n) f_{\uparrow}(\tau_n) f_{\downarrow}^{\dagger}(\tau'_n) f_{\downarrow}(\tau_n)$ 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)

$$W_{\text{acc}} = -\frac{k}{\beta U} (-1)^{i_{\uparrow}+j_{\uparrow}+i_{\downarrow}+j_{\downarrow}} \frac{\det \mathcal{G}_{\uparrow}^{\ominus(\tau_n, \tau'_n)}}{\det \mathcal{G}_{\uparrow}} \frac{\det \mathcal{G}_{\downarrow}^{\ominus(\tau_n, \tau'_n)}}{\det \mathcal{G}_{\downarrow}}. \quad (20)$$

$\mathcal{G}_{\sigma}^{\ominus(\tau_m, \tau'_n)}$ 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

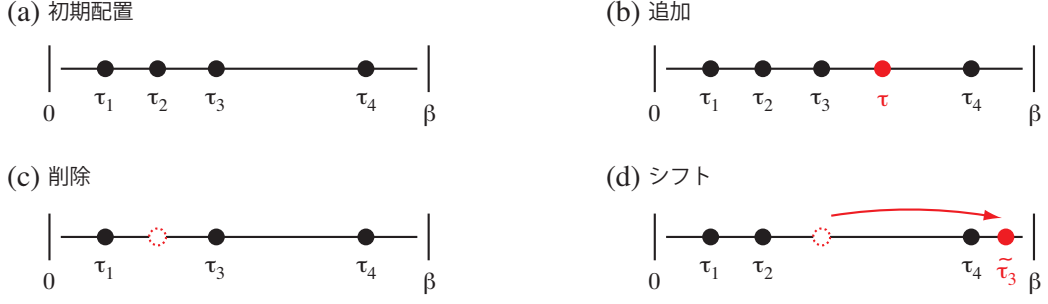


図2 U 展開における更新の例. (a) 初期配置, (b) 追加, (c) 削除, (d) シフト.

- シフト : $\tau_n \rightarrow \tilde{\tau}_n$

$$[1, k] \rightsquigarrow n, [0, \beta] \rightsquigarrow \tilde{\tau}_n. H_1(\tau_n) \rightarrow H_1(\tilde{\tau}_n) = U f_{\uparrow}^{\dagger}(\tilde{\tau}'_n) f_{\uparrow}(\tilde{\tau}_n) f_{\downarrow}^{\dagger}(\tilde{\tau}'_n) f_{\downarrow}(\tilde{\tau}_n) \text{へシフト}$$

$$W_{\text{acc}} = \frac{\det \mathcal{G}_{\uparrow}^{\Rightarrow(\tilde{\tau}_n, \tilde{\tau}'_n)} \det \mathcal{G}_{\downarrow}^{\Rightarrow(\tilde{\tau}_n, \tilde{\tau}'_n)}}{\det \mathcal{G}_{\uparrow} \det \mathcal{G}_{\downarrow}}. \quad (21)$$

$\mathcal{G}_{\sigma}^{\Rightarrow(\tilde{\tau}_m, \tilde{\tau}'_n)}$ 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2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.

2.4.3 Green 関数

f 電子の1粒子 Green 関数は

$$G_{\sigma}(\tau - \tau') = - \langle T_{\tau} f_{\sigma}(\tau) f_{\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle = \left\langle \frac{- \langle \hat{P}_k(q_k) f_{\sigma}(\tau) f_{\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle_0}{P(q_k)} \right\rangle_{\text{MC}}, \quad (22)$$

のように表される. すなわち

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

を測定することでモンテカルロ平均を取れば, 1粒子 Green 関数が求められる. 式(12)の導出と同様にして

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

を得る. 行列式を展開して

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

となる(付録B.1式(76)). これを式(22)に代入すると

$$G_{\sigma}(\tau - \tau') = \mathcal{G}_{\sigma}(\tau - \tau') - \left\langle \sum_{ij} \mathcal{G}_{\sigma}(\tau - \tau'_j) (M_{\sigma})_{ji} \mathcal{G}_{\sigma}(\tau_i - \tau') \right\rangle_{\text{MC}}, \quad (23)$$

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

$$G_\sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_\sigma(i\omega_n) - \mathcal{G}_\sigma(i\omega_n) \left\langle \frac{1}{\beta} \sum_{ij} (M_\sigma)_{ji} e^{i\omega_n(\tau'_j - \tau_i)} \right\rangle_{\text{MC}} \mathcal{G}_\sigma(i\omega_n). \quad (24)$$

ここで, 自由な f 電子に対する不純物散乱の T 行列を

$$t_{f\sigma}(\tau) = -\frac{1}{\beta} \left\langle \sum_{ij} (M_\sigma)_{ji} \delta(\tau, \tau'_j - \tau_i) \right\rangle_{\text{MC}}, \quad \delta(\tau, \tau') = \begin{cases} \delta(\tau - \tau'), & (\tau - \tau' > 0), \\ -\delta(\tau - \tau' + \beta), & (\tau - \tau' < 0), \end{cases} \quad (25)$$

によって導入すると, 式 (24) は

$$G_\sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_\sigma(i\omega_n) + \mathcal{G}_\sigma(i\omega_n) t_{f\sigma}(i\omega_n) \mathcal{G}_\sigma(i\omega_n),$$

となり, 確かに T 行列であることが分かる. ここで, $\delta(\tau, \tau')$ は反周期性を考慮したデルタ関数である. 2 粒子 Green 関数の表式も同様にして求めることができる.

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, Green 関数のモンテカルロ平均も求められる. 行列 M_σ とその行列式の比は, 付録 B の高速アルゴリズムによって $O(k^2)$ 以下のコストで更新できる. 計算コードの確認のためには, まず, 解析的に解ける $V = 0$ の原子極限についてチェックしてみるとよい.

2.5 V 展開 [10, 11, 14]

2.5.1 分配関数の展開

次に, $H_0 = H_c + H_I + H_U \equiv H_c + H_f$, $H_1 = H_{\text{hyb}}$ とし, V に関して展開してみよう. H_c と H_f は可換なので, c 電子と f 電子のトースを独立に取ることができる. このとき, 分配関数の展開において c , f 電子を奇数個含む項は消える. よって, \uparrow, \downarrow スピンがそれぞれ $2k_\uparrow, 2k_\downarrow$ 次の摂動項の和は

$$\begin{aligned} \frac{Z}{Z_c Z_f} &= \sum_{k_\uparrow=0}^{\infty} \sum_{k_\downarrow=0}^{\infty} \int_{2k_\uparrow} d\tau_\uparrow d\tau'_\uparrow \int_{2k_\downarrow} d\tau_\downarrow d\tau'_\downarrow P_c(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}) P_f(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}), \\ P_c(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}) &= V^{2(k_\uparrow+k_\downarrow)} \prod_{\sigma} \langle T_\tau c_\sigma^\dagger(\tau_{k_\sigma\sigma}) c_\sigma(\tau'_{k_\sigma\sigma}) \cdots c_\sigma^\dagger(\tau_{1\sigma}) c_\sigma(\tau'_{1\sigma}) \rangle_c, \\ P_f(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}) &= \left\langle T_\tau \prod_{\sigma} f_\sigma(\tau_{k_\sigma\sigma}) f_\sigma^\dagger(\tau'_{k_\sigma\sigma}) \cdots f_\sigma(\tau_{1\sigma}) f_\sigma^\dagger(\tau'_{1\sigma}) \right\rangle_f \equiv \langle \hat{P}_f(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}) \rangle_f, \end{aligned} \quad (26)$$

となる. 配置は $q_{k_\sigma} = \{\tau_{1\uparrow}, \dots, \tau_{k_\uparrow\uparrow}, \tau_{1\downarrow}, \dots, \tau_{k_\downarrow\downarrow}\}$, $q'_{k_\sigma} = \{\tau'_{1\uparrow}, \dots, \tau'_{k_\uparrow\uparrow}, \tau'_{1\downarrow}, \dots, \tau'_{k_\downarrow\downarrow}\}$ である. ここで, $\langle A \rangle_{c,f} = \text{Tr}(e^{-\beta H_{c,f}} A) / Z_{c,f}$, $Z_{c,f} = \text{Tr} e^{-\beta H_{c,f}}$ とした. H_c は 2 次形式だから, 式 (12) と同様に Wick の定理を用いて

$$P_c(q_k, q'_k) = \det \begin{pmatrix} \Delta_\uparrow & 0 \\ 0 & \Delta_\downarrow \end{pmatrix} = \prod_{\sigma} \det \Delta_\sigma, \quad (\Delta_\sigma)_{ij} = \Delta_\sigma(\tau'_{i\sigma} - \tau_{j\sigma}), \quad (\text{同時刻は } 0+),$$

を得る. Δ_σ は式 (11) の混成関数を要素とした行列である. U 展開と較べて, \mathcal{G}_σ の代わりに Δ_σ の行列式と, $k_\uparrow + k_\downarrow$ 個の (f, f^\dagger) ペアを含むトースの積が各摂動項の確率分布を与える. 混成項 H_{hyb} がス

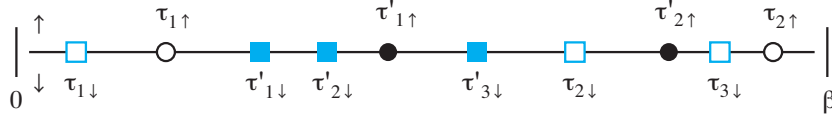


図3 V 展開における配置の例 ($k_{\uparrow} = 2, k_{\downarrow} = 3$). 丸 (空丸), 四角 (空四角) はそれぞれ f_{\uparrow} (f_{\uparrow}^{\dagger}), f_{\downarrow} (f_{\downarrow}^{\dagger}) の時刻を表す.

ピンを保存するので Δ はスピンに関してブロック対角化されている. より一般的な混成項の場合 Δ に非対角項が現れる.

2.5.2 配置の更新

V 展開における配置の例を図3に示す. 配置の更新は, U 展開と同様に各スピン σ に対して追加, 削除, シフトを行えばよい. 更新の例を図4に示す. それぞれの更新手続きは以下の通りである

- 追加: $q_{k_{\sigma}}, q'_{k_{\sigma}} \rightarrow q_{k_{\sigma}+1}, q'_{k_{\sigma}+1}$
 $[0, \beta) \rightsquigarrow \tau, \tau', [c_{\sigma}(\tau'), c_{\sigma}^{\dagger}(\tau)], [f_{\sigma}(\tau), f_{\sigma}^{\dagger}(\tau')]$ 追加

$$W_{\text{acc}} = \frac{\beta^2}{(k_{\sigma} + 1)^2} \frac{\det \Delta_{\sigma}^{\oplus(\tau', \tau)} P_f(q_{k_{\sigma}+1}, q'_{k_{\sigma}+1})}{\det \Delta_{\sigma} P_f(q_{k_{\sigma}}, q'_{k_{\sigma}})}. \quad (27)$$

$$P_f(q_{k_{\sigma}+1}, q'_{k_{\sigma}+1}) = \left\langle \hat{P}_f(q_{k_{\sigma}}, q'_{k_{\sigma}}) f_{\sigma}(\tau) f_{\sigma}^{\dagger}(\tau') \right\rangle_f$$

- 削除: $q_{k_{\sigma}}, q'_{k_{\sigma}} \rightarrow q_{k_{\sigma}-1}, q'_{k_{\sigma}-1}$
 $[1, k] \rightsquigarrow m, n, [c_{\sigma}(\tau'_{n\sigma}), c_{\sigma}^{\dagger}(\tau_{m\sigma})], [f_{\sigma}(\tau_{m\sigma}), f_{\sigma}^{\dagger}(\tau'_{n\sigma})]$ 削除
 Δ_{σ} 行列の $\tau'_{n\sigma}$ に対応する行を i , $\tau_{m\sigma}$ に対応する列を j

$$W_{\text{acc}} = \frac{k_{\sigma}^2}{\beta^2} (-1)^{i+j} \frac{\det \Delta_{\sigma}^{\ominus(\tau'_{n\sigma}, \tau_{m\sigma})} P_f(q_{k_{\sigma}-1}, q'_{k_{\sigma}-1})}{\det \Delta_{\sigma} P_f(q_{k_{\sigma}}, q'_{k_{\sigma}})}. \quad (28)$$

$P_f(q_{k_{\sigma}-1}, q'_{k_{\sigma}-1})$ は $\hat{P}_f(q_{k_{\sigma}}, q'_{k_{\sigma}})$ から $[f_{\sigma}(\tau_{m\sigma}), f_{\sigma}^{\dagger}(\tau'_{n\sigma})]$ を削除したもののトレース

- シフト: $\tau_{m\sigma} \rightarrow \tilde{\tau}_{m\sigma}$
 $[1, k] \rightsquigarrow m, [0, \beta) \rightsquigarrow \tilde{\tau}_{m\sigma}, [c_{\sigma}^{\dagger}(\tau_{m\sigma}), f_{\sigma}(\tau_{m\sigma})] \rightarrow [c_{\sigma}^{\dagger}(\tilde{\tau}_{m\sigma}), f_{\sigma}(\tilde{\tau}_{m\sigma})]$ へ移動

$$W_{\text{acc}} = \frac{\det \Delta_{\sigma}^{\Rightarrow(=\tilde{\tau}_{m\sigma})} P_f(\tilde{q}_{k_{\sigma}}, \tilde{q}'_{k_{\sigma}})}{\det \Delta_{\sigma} P_f(q_{k_{\sigma}}, q'_{k_{\sigma}})}. \quad (29)$$

- シフト': $\tau'_{n\sigma} \rightarrow \tilde{\tau}'_{n\sigma}$
 $[1, k] \rightsquigarrow n, [0, \beta) \rightsquigarrow \tilde{\tau}'_{n\sigma}, [c_{\sigma}(\tau'_{n\sigma}), f_{\sigma}^{\dagger}(\tau'_{n\sigma})] \rightarrow [c_{\sigma}(\tilde{\tau}'_{n\sigma}), f_{\sigma}^{\dagger}(\tilde{\tau}'_{n\sigma})]$ へ移動

$$W_{\text{acc}} = \frac{\det \Delta_{\sigma}^{\Rightarrow(\tilde{\tau}'_{n\sigma}, =)} P_f(q_{k_{\sigma}}, \tilde{q}'_{k_{\sigma}})}{\det \Delta_{\sigma} P_f(q_{k_{\sigma}}, q'_{k_{\sigma}})}. \quad (30)$$

W_{acc} を計算するとき, f 電子トレース P_f の評価が最も計算コストのかかる部分である. トレースの計算は, H_f の固有状態を用いて評価するのが簡潔である. この際, $\{f_{\sigma}, f_{\sigma}^{\dagger}\}$ の積を時間順序に並べる必

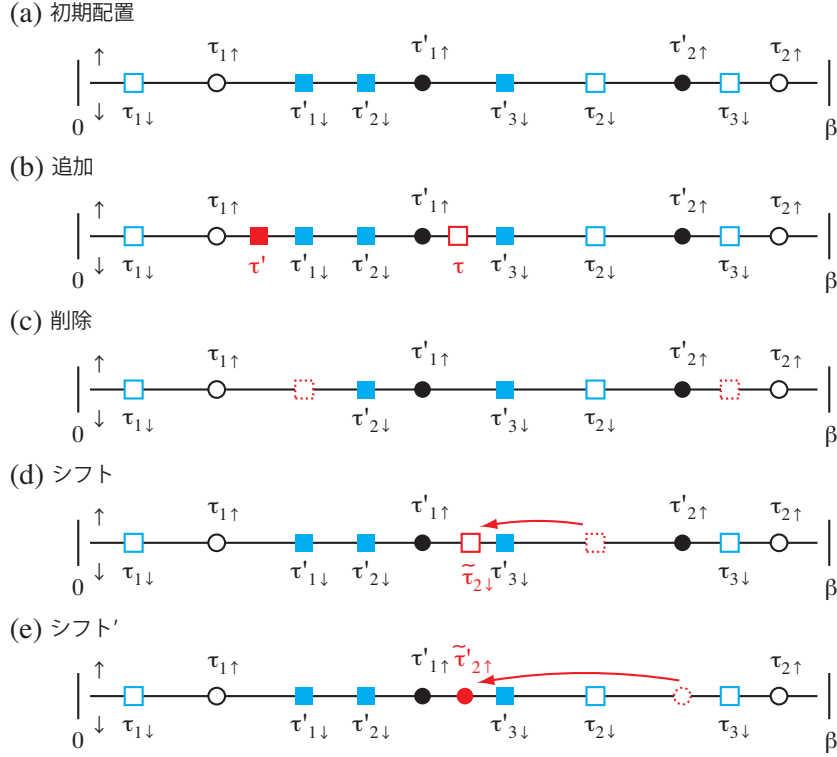


図4 V 展開における更新例. (a) 初期配置, (b) 追加, (c) 削除, (d) シフト, (e) シフト'.

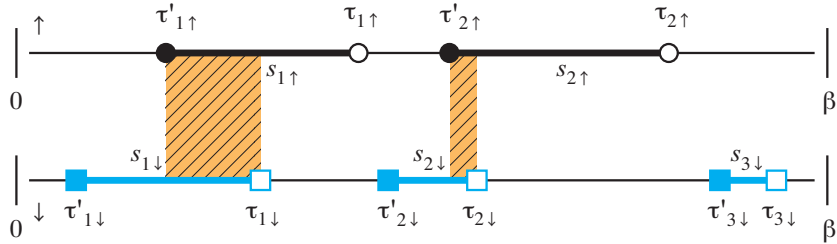


図5 V 展開におけるセグメント表示の例 ($k_{\uparrow} = 2, k_{\downarrow} = 3$). 太線が粒子の存在する時間を表す. 斜線は \uparrow と \downarrow が同時に存在している時間を表す.

要があり、置換に関する符号が生じることに注意する。ただし、 W_{acc} の計算において絶対的な符号は必要なく、配置の更新に対応する相対的な符号変化が分かればよい。 (f, f^\dagger) 演算子配列の量子数保存を考慮して無駄なトレース計算を減らすことで計算コストを下げるができる。また、疎行列に対する厳密対角化で用いられる技法を応用して、トレースの評価コストを下げる方法が提案されており [15]、特に、交換相互作用を含む多軌道系の計算において不可欠な方法になると思われる。

上で述べたトレースを直接評価する方法は、採択率が低く、かつ非常に計算コストが高い。 f 電子のトレースにおいて、不純物 Anderson 模型のように相互作用が密度-密度型で各スピンの f 電子数が保存する場合は、次に述べるセグメント表示を用いることで、計算効率が劇的に改善される。

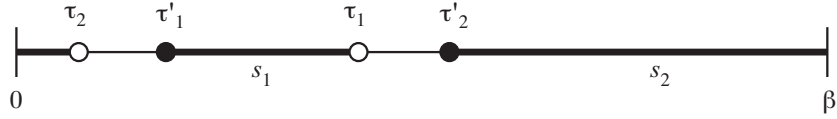


図6 V 展開におけるウィンド状態の例.

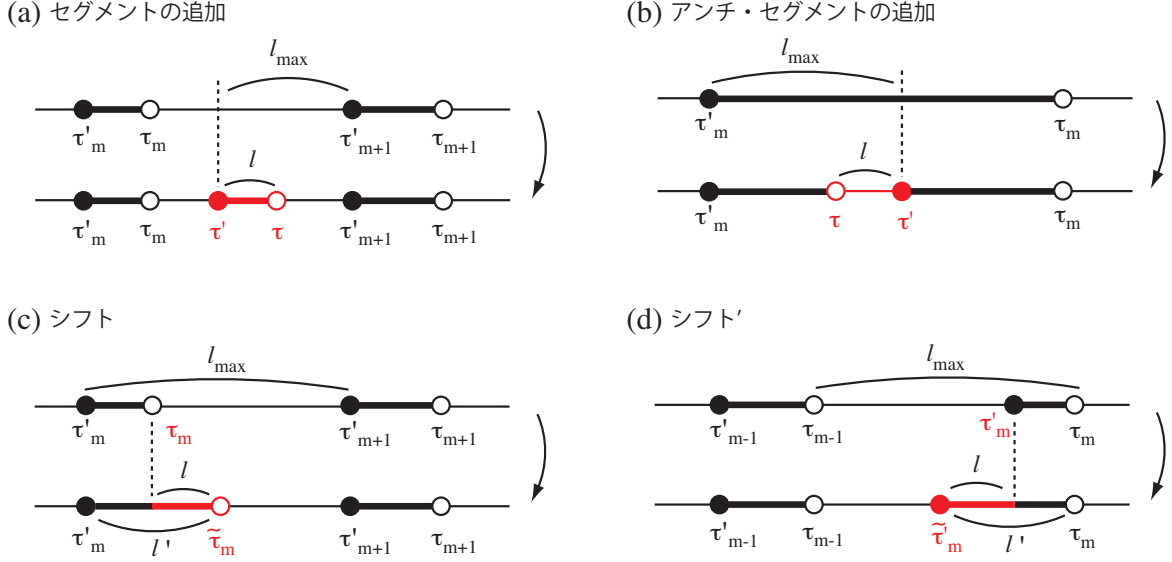


図7 V 展開におけるセグメント更新の例. (a) セグメントの追加, (b) アンチ・セグメントの追加, (c) シフト, (d) シフト'. セグメントとアンチ・セグメントの削除は (a), (b) の逆過程である.

2.5.3 セグメント表示

密度-密度型の相互作用では P_f 中で各スピンの f 電子数が保存するので, 虚時間軸に沿って f_σ^\dagger と f_σ が交互に現れるときだけトレースが値を持つ. 例えば, 図4のような配置に対する f トレースは実はゼロである. 従って, 配置 q_{k_σ} と q'_{k_σ} の代わりに, セグメント $s_{m\sigma} \equiv (\tau'_{m\sigma}, \tau_{m\sigma})$ (σ スピンの f 電子が存在する領域) を用いて, $(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}) \rightarrow \{s_{1\uparrow}, \dots, s_{k_1\uparrow}, s_{1\downarrow}, \dots, s_{k_1\downarrow}\}$ のように表現するのが自然である. セグメント表示を用いると, 各セグメントの長さとして \uparrow, \downarrow スピン間のセグメントの重なりを用いて, P_f を効率よく求めることができる. 図5にセグメント表示の例を示す. また, f 電子が存在する領域が $\tau = 0, \beta$ をまたぐ場合, (f, f^\dagger) の順序が逆転して符号が変わる. これをウィンド状態と呼ぶことにする (図6).

σ スピンに対する追加, 削除, シフト, シフト' の各更新手続きは以下ようになる. 以下の更新は σ について独立なため, スピンの添え字は省く. 移動後の時刻が $[0, \beta)$ の範囲を超えた場合, β だけシフトし, W_{acc} を (-1) 倍する. l_{max}, l, l' の定義は図7を参照のこと. また, 更新による $-\sigma$ スピンとの重なりの変化分を ξ とする

- 追加: $s = (\tau', \tau)$

$[0, \beta) \rightsquigarrow \tau'$ (τ' がセグメント上なら $W_{\text{acc}} = 0$), $\ell_{\text{max}} = \tau'_{m+1} - \tau'$, $[0, \ell_{\text{max}}) \rightsquigarrow \ell$, $\tau = \tau' + \ell$

$$W_{\text{acc}} = \frac{\beta \ell_{\text{max}}}{k+1} \frac{\det \Delta^{\oplus(\tau', \tau)}}{\det \Delta} e^{-(\epsilon_{f\sigma} \ell + U|\xi|)}. \quad (31)$$

- 削除 : $s_m = (\tau'_m, \tau_m)$

$[1, k] \rightsquigarrow m$, $\ell_{\text{max}} = \tau'_{m+1} - \tau'_m$, $\ell = \tau_m - \tau'_m$

行列 Δ の τ'_m に対応する行を i , τ_m に対応する列を j

$$W_{\text{acc}} = \frac{k}{\beta \ell_{\text{max}}} (-1)^{i+j} \frac{\det \Delta^{\ominus(\tau'_m, \tau_m)}}{\det \Delta} e^{\epsilon_{f\sigma} \ell + U|\xi|}. \quad (32)$$

- シフト : $\tilde{s}_m = (\tau'_m, \tilde{\tau}_m)$

$[1, k] \rightsquigarrow m$, $\ell_{\text{max}} = \tau'_{m+1} - \tau'_m$, $[0, \ell_{\text{max}}) \rightsquigarrow \ell'$, $\tilde{\tau}_m = \tau'_m + \ell'$, $\ell = \tilde{\tau}_m - \tau_m$

$$W_{\text{acc}} = \frac{\det \Delta^{\Rightarrow(=\tilde{\tau}_m)}}{\det \Delta} e^{-(\epsilon_{f\sigma} \ell + U|\xi|\text{sgn}(\ell))}. \quad (33)$$

- シフト' : $\tilde{s}'_m = (\tilde{\tau}'_m, \tau_m)$

$[1, k] \rightsquigarrow m$, $\ell_{\text{max}} = \tau_m - \tau_{m-1}$, $[0, \ell_{\text{max}}) \rightsquigarrow \ell'$, $\tilde{\tau}'_m = \tau_m - \ell'$, $\ell = \tau'_m - \tilde{\tau}'_m$

$$W_{\text{acc}} = \frac{\det \Delta^{\Rightarrow(\tilde{\tau}'_m, =)}}{\det \Delta} e^{-(\epsilon_{f\sigma} \ell + U|\xi|\text{sgn}(\ell))}. \quad (34)$$

エルゴード性を満たすためには、上記の更新の他に、セグメントの一部を削除してセグメントを2つに分割するアンチ・セグメントの追加、2つのセグメントを結合して1つにするアンチ・セグメントの削除の更新が必要である (図 7(b))

- 追加 (アンチ・セグメント) : $s = (\tau'_m, \tau)$, $s' = (\tau', \tau_m)$

$[0, \beta) \rightsquigarrow \tau'$ (τ' がセグメント間なら $W_{\text{acc}} = 0$), $\ell_{\text{max}} = \tau' - \tau'_m$, $[0, \ell_{\text{max}}) \rightsquigarrow \ell$, $\tau = \tau' - \ell$

$$W_{\text{acc}} = -\frac{\beta \ell_{\text{max}}}{k+1} \frac{\det \Delta^{\oplus(\tau', \tau)}}{\det \Delta} e^{\epsilon_{f\sigma} \ell + U|\xi|}. \quad (35)$$

- 削除 (アンチ・セグメント) : $s_m = (\tau'_m, \tau_m)$, $s_{m+1} = (\tau'_{m+1}, \tau_{m+1})$

$[1, k] \rightsquigarrow m$, $\ell_{\text{max}} = \tau'_{m+1} - \tau'_m$, $\ell = \tau'_{m+1} - \tau_m$

行列 Δ の τ'_m に対応する行を i , τ_m に対応する列を j

$$W_{\text{acc}} = -\frac{k}{\beta \ell_{\text{max}}} (-1)^{i+j} \frac{\det \Delta^{\ominus(\tau'_m, \tau_m)}}{\det \Delta} e^{-(\epsilon_{f\sigma} \ell + U|\xi|)}. \quad (36)$$

また、 $k_\sigma = 0$ が関与する更新では、確率分布に粒子が全くいない無セグメント状態と $[0, \beta)$ のフル・セグメントがある状態の2配置が含まれるので、これらを独立した配置と考えてサンプルすると計算コードが簡略化される (図 8 参照).

2.5.4 Green 関数

1 粒子 Green 関数を求めるために、 $M_\sigma = \Delta_\sigma^{-1}$ として、配置 $(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma})$ に対して、次の量を考えて見よう

$$G_\sigma(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}; \tau_{j\sigma}, \tau'_{i\sigma}) \equiv -\text{sgn}(\tau_{j\sigma} - \tau'_{i\sigma}) (M_\sigma)_{j,i} P_c(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}) P_f(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}), \quad (37)$$



図8 V 展開における $k_\sigma = 0$ 状態の分割.

ここで, $(\Delta_\sigma)_{ij} = \Delta_\sigma(\tau'_{i\sigma} - \tau_{j\sigma})$. 付録 B.2 式 (78) (行列式の定義) より

$$\begin{aligned} G_\sigma(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}; \tau_{j\sigma}, \tau'_{i\sigma}) &= -\text{sgn}(\tau_{j\sigma} - \tau'_{i\sigma}) (-1)^{i+j} \frac{\det \Delta^{\ominus(i,j)}}{\det \Delta_\sigma} P_c(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}) P_f(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}) \\ &= -P_c(q_{k_\sigma-1}, q'_{k_\sigma-1}) \left\langle \hat{P}_f(q_{k_\sigma-1}, q'_{k_\sigma-1}) f_\sigma(\tau_{j\sigma}) f_\sigma^\dagger(\tau'_{i\sigma}) \right\rangle_f, \end{aligned}$$

となる. 因子 $\text{sgn}(\tau_{j\sigma} - \tau'_{i\sigma}) (-1)^{i+j}$ は, T_τ 積において $f_\sigma(\tau_{j\sigma}) f_\sigma^\dagger(\tau'_{i\sigma})$ を右端に移動するとき現れる符号と打ち消した. 従って, $G_\sigma(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}; \tau_{j\sigma}, \tau'_{i\sigma})$ は演算子 $-f_\sigma(\tau_{j\sigma}) f_\sigma^\dagger(\tau'_{i\sigma})$ の統計平均に対する配置 $(q_{k_\sigma-1}, q'_{k_\sigma-1})$ からの寄与に他ならない. すなわち, 時刻 $\tau = \tau_{j\sigma} - \tau'_{i\sigma}$ での f 電子 Green 関数 $G_f(\tau)$ への寄与である. よって, 全次数のすべての時刻の組み合わせを集めて

$$G_\sigma(\tau) = -\frac{1}{\beta} \left\langle \sum_{ij=1}^{k_\sigma} (M_\sigma)_{j,i} \delta(\tau, \tau_{j\sigma} - \tau'_{i\sigma}) \right\rangle_{\text{MC}}, \quad (38)$$

の関係を得る. ここで, $\delta(\tau, \tau')$ は式 (25) の反周期デルタ関数. これを τ サンプリングと呼ぶ. Fourier 変換すると ω_n サンプリングの表式

$$G_\sigma(i\omega_n) = -\frac{1}{\beta} \left\langle \sum_{ij=1}^{k_\sigma} (M_\sigma)_{j,i} e^{i\omega_n(\tau_j - \tau'_i)} \right\rangle_{\text{MC}}, \quad (39)$$

を得る. 厳密な計算では両者はもちろん同じ結果を与えるが, 有限のサンプルを用いるモンテカルロ計算では, サンプル平均と Fourier 変換の順序によって精度は異なる.

2 粒子 Green 関数も同様にして, 以下のように表される

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\tau', \tau; \eta', \eta) &\equiv \langle T_\tau f_\alpha^\dagger(\tau') f_\beta(\tau) f_\gamma^\dagger(\eta') f_\delta(\eta) \rangle \\ &= \left\langle \sum_{ijmn} \left[(M_\alpha)_{j,i} (M_\gamma)_{n,m} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} - (M_\alpha)_{n,i} (M_\gamma)_{j,m} \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \right] \times \right. \\ &\quad \left. \times \delta(\tau', \tau'_{i\alpha}) \delta(\tau, \tau_{j\beta}) \delta(\eta', \tau_{m\gamma}) \delta(\eta, \tau_{n\delta}) \right\rangle_{\text{MC}}. \quad (40) \end{aligned}$$

U 展開の場合と同様, 実際の計算過程では M_σ と対応する時刻配置 $(q'_{k_\sigma}, q_{k_\sigma})$ およびセグメントとの対応関係をメモリ上に記憶しておけばよい. まずは, 解析的に解けるスピンレス Fermi 粒子系や $U = 0$ の場合について, 計算コードをチェックするとよい.

2.5.5 おもな物理量

セグメント表示では, 配置 $(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma})$ に対して, 時刻 τ での f_σ 電子数 $n_\sigma(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}; \tau)$ を簡単に求めることができる. すなわち, $n_\sigma(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}; \tau)$ はセグメント上で 1, セグメント間でゼロ. これを用いて, 各時刻での粒子数の統計平均は

$$n_\sigma(\tau) = \langle n_\sigma(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}; \tau) \rangle_{\text{MC}}, \quad (41)$$

から求められる。特に f_σ 電子数は

$$n_\sigma = G_\sigma(0-) = n_\sigma(0) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau' n_\sigma(\tau'), \quad (42)$$

である。ここで、 τ に関する並進対称性を用いた。最右辺の表式を用いた方がサンプル数が多くなり精度が上がる。同様に、縦感受率は以下のようなになる

$$\begin{aligned} \chi_{\sigma\sigma'}(\tau) &= \langle n_\sigma(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}; \tau) n_{\sigma'}(q_{k_{\sigma'}}, q'_{k_{\sigma'}}; 0) \rangle_{\text{MC}} \\ &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau' \langle n_\sigma(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}; \tau + \tau') n_{\sigma'}(q_{k_{\sigma'}}, q'_{k_{\sigma'}}; \tau') \rangle_{\text{MC}}. \end{aligned} \quad (43)$$

二重占有率は $d = \chi_{\uparrow\downarrow}(0)$ より求めることができる。

残念ながら、1粒子 Green 関数は $n_\sigma(q_{k_\sigma}, q'_{k_\sigma}; \tau)$ を利用して $\langle -f_\sigma(\tau) f_\sigma^\dagger(0) \rangle$ から求めることはできない。なぜなら、ランダム・ウォークで生成されるサンプルは $P(q_k) \neq 0$ のものに限られるが、Green 関数の評価には $P(q_k, q'_k) = 0$ かつ $\langle \hat{P}(q_k, q'_k) f(\tau) f^\dagger \rangle_0 \neq 0$ となるようなサンプルも必要だからである。

2.6 J 展開 [13]

2.6.1 $SU(N)$ Coqblin-Schrieffer 模型

不純物 Anderson 模型において、 $\epsilon_{f\sigma}$ が Fermi 準位にくらべて十分深く、かつ U も十分大きいとき、 f 電子の平均占有数は $n_{f\sigma} \approx 1/2$ となり電荷の揺らぎは押さえられる。残された f スピン自由度と c 電子との散乱を記述する模型として以下の $SU(N)$ Coqblin-Schrieffer (CS) 模型を考える。ここでは、スピンの他に軌道の自由度も考慮して $\sigma \rightarrow m$ ($m = 1, \dots, N$) と一般化した

$$\begin{aligned} H_{\text{CS}} &= H_c + H_f + H_{\text{ex}}, \\ H_c &= \sum_{pm} \epsilon_{pm} c_{pm}^\dagger c_{pm}, \quad H_f = \sum_m (E_{fm} + \alpha J) X_{mm} \equiv \sum_m \epsilon_{fm} X_{mm}, \\ H_{\text{ex}} &= J \sum_{mm'} (c_m^\dagger c_{m'} - \alpha \delta_{mm'}) X_{m'm}. \end{aligned} \quad (44)$$

ここで、 $X_{m'm} = f_{m'}^\dagger f_m$ および c_m は不純物サイトの c 電子消滅演算子である。ただし、 $\sum_m X_{mm} = 1$ 。

パラメータ α を $\alpha = \theta(J)$ のように選び、 J の正負に応じて H_{ex} で $-cc^\dagger$ か $c^\dagger c$ の順序を用いると、負符号を取り除くことができる (ただし、 $J < 0$ の場合に負符号が発生しないのは $N = 2$ のみ) [20]。この選択は、以下の計算に現れる $\det \mathcal{G}_{cm}$ において、同時刻を $\tau = \text{sgn}(J)0$ で評価することに対応する。

$N = 2$, $E_{fm} = 0$ のとき

$$H_f + H_{\text{ex}} = J \sum_{\sigma\sigma'} c_{\sigma'}^\dagger c_\sigma X_{\sigma'\sigma} = \frac{J}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} [\sigma_{\alpha\beta} \cdot \sigma_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}] c_\alpha^\dagger c_\beta X_{\gamma\delta}, \quad (45)$$

のように近藤模型 (+s 波ポテンシャル散乱) となる。ただし、ポテンシャル散乱項がないと負符号が生じるので注意。

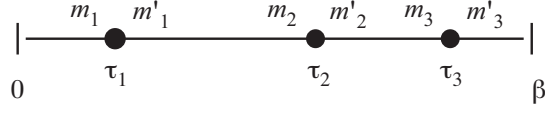


図9 J 展開における配置の例 ($k = 3$). 黒丸の時刻 τ_i で f 状態が $m_i \rightarrow m'_i$, c 状態が $m'_i \rightarrow m_i$ へ遷移する.

2.6.2 分配関数の摂動展開

$H_0 = H_c + H_f$, $H_1 = H_{\text{ex}}$ として, J について展開する. V 展開と比べると, J 展開では時刻によらず常に $\sum_m n_{fm} = \sum_m X_{mm} = 1$ なので, 前節のセグメント表示で $[0, \beta)$ がいずれかの m を持つセグメントで埋め尽くされた状態だけをサンプルすることに対応する.

分配関数の展開は

$$\frac{Z}{Z_c Z_f} = \sum_{k=0}^{\infty} \int_k d\tau P_c(q_k) P_f(q_k),$$

$$P_c(q_k) = (-J)^k \langle T_\tau n(t_k) \cdots n(t_1) \rangle_c, \quad P_f(q_k) = \langle T_\tau X(t_k) \cdots X(t_1) \rangle_f, \quad (46)$$

となる. ここで, 時刻 τ_i での情報を $t_i \equiv (m_i, m'_i, \tau_i)$ とまとめて配置を $q_k = \{t_1, \dots, t_k\}$ と表し, $n(t_i) = c_{m_i}^\dagger(\tau_i) c_{m'_i}(\tau_i)$, $X(t_i) = X_{m'_i m_i}(\tau_i)$ ($\tau_i \equiv \tau_i + \text{sgn}(J)0$) と略記した (時刻のプライムは同時刻の扱いを明確にするため). 配置の例を図9に示す.

c 電子のトレースは Wick の定理を用いて

$$P_c(q_k) = (-J)^k \phi_k \prod_m \det \mathcal{G}_{cm}, \quad (47)$$

となる. ここで, ϕ_k は T_τ 積を各 m ごとに分離するとき生じる置換の符号である. \mathcal{G}_{cm} は, 式(11)に現れた無摂動の局所 c Green 関数, $(\mathcal{G}_{cm})_{ij} = \mathcal{G}_{cm}(\tau'_i - \tau_j)$ を要素にもつ $k_m \times k_m$ の行列である. ただし, $k = \sum_m k_m$. 以下の議論では, ϕ_k の更新による相対符号変化のみが必要で, また, $P_f(q_k)$ 中の時刻は時間順に並んでいるとして一般性を失わない. このとき

$$P_f(q_k) = \frac{1}{Z_f} \prod_{i=1}^k \exp[-(\tau_i - \tau_{i-1})\epsilon_{f m_i}], \quad \tau_0 \equiv \tau_k - \beta, \quad Z_f = \sum_m e^{-\beta \epsilon_{f m}}. \quad (48)$$

また, $m_i = m'_{i-1}$ である.

2.6.3 配置の更新

以下のように, 相互作用の追加, 削除, フリップおよびシフトによって配置を更新する. 更新の例を図10に示す

- 追加: $-J c_{m_i}(\tau') c_{m_i}^\dagger(\tau) X_{m_i m_i}(\tau)$ 追加

$$W_{\text{acc}} = -\frac{\beta J}{k+1} \frac{\det \mathcal{G}_{cm_i}^{\oplus(\tau', \tau)}}{\det \mathcal{G}_{cm_i}}. \quad (49)$$

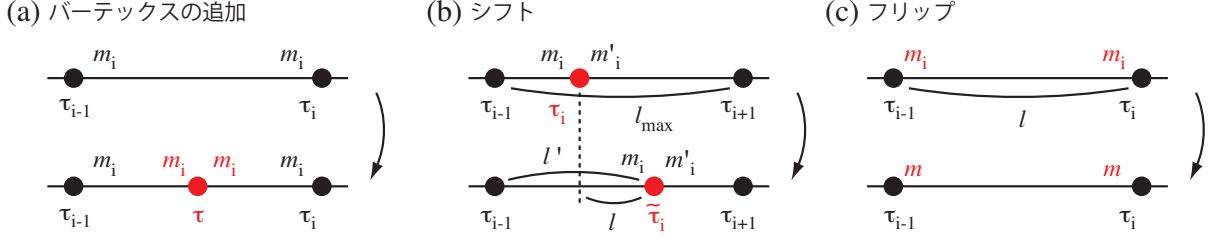


図 10 J 展開における配置更新の例. (a) 追加, (b) シフト, (c) フリップ. 削除は追加の逆過程である.

- 削除 : $-Jc_{m_i}(\tau'_i)c_{m_i}^\dagger(\tau_i)X_{m_i m_i}(\tau_i)$ 削除
 $[1, k] \rightsquigarrow i$, $m_i \neq m'_i$ なら $W_{\text{acc}} = 0$
 行列 \mathcal{G}_{cm_i} の時刻 τ_i に対応する行を i , 列を j

$$W_{\text{acc}} = -\frac{k}{\beta J} (-1)^{i+j} \frac{\det \mathcal{G}_{cm_i}^{\ominus(\tau'_i, \tau_i)}}{\det \mathcal{G}_{cm_i}}. \quad (50)$$

- フリップ : $m_i = m'_{i-1} \rightarrow m$
 $[1, k] \rightsquigarrow i$, $[1, N] \rightsquigarrow m$ ($m = m_i$ なら $W_{\text{acc}} = 0$), $\ell = \tau_i - \tau_{i-1}$
 行列 \mathcal{G}_{cm_i} の時刻 τ_{i-1} に対応する行を i , τ_i に対応する列を j

$$W_{\text{acc}} = (-1)^{i+j} \frac{\det \mathcal{G}_{cm_i}^{\ominus(\tau'_{i-1}, \tau_i)}}{\det \mathcal{G}_{cm_i}} \frac{\det \mathcal{G}_{cm}^{\oplus(\tau'_{i-1}, \tau_i)}}{\det \mathcal{G}_{cm}} e^{-(\epsilon_{fm} - \epsilon_{fm_i})\ell}. \quad (51)$$

- シフト : $-Jc_{m'_i}(\tau'_i)c_{m_i}^\dagger(\tau_i)X_{m'_i m_i}(\tau_i)$ の時刻を $\tilde{\tau}_i$ へシフト
 $[1, k] \rightsquigarrow i$, $\ell_{\text{max}} = \tau_{i+1} - \tau_{i-1}$, $[0, \ell_{\text{max}}] \rightsquigarrow \ell'$, $\tilde{\tau}_i = \tau_{i-1} + \ell'$, $\ell = \tilde{\tau}_i - \tau_i$

$$W_{\text{acc}} = \begin{cases} \frac{\det \mathcal{G}_{cm_i}^{\Rightarrow(=, \tilde{\tau}_i)}}{\det \mathcal{G}_{cm_i}} \frac{\det \mathcal{G}_{cm'_i}^{\Rightarrow(\tilde{\tau}'_i, =)}}{\det \mathcal{G}_{cm'_i}} e^{-(\epsilon_{fm_i} - \epsilon_{fm'_i})\ell}, & (m_i \neq m'_i), \\ \frac{\det \mathcal{G}_{cm_i}^{\Rightarrow(\tilde{\tau}'_i, \tilde{\tau}_i)}}{\det \mathcal{G}_{cm_i}}, & (m_i = m'_i). \end{cases} \quad (52)$$

ただし, $k = 0$ の状態が関与する場合は, 因子 Z_f を考慮する必要がある.

2.6.4 Green 関数と t 行列

2.4.3 節と同様の議論から c 電子の Green 関数は

$$G_{cm}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{cm}(i\omega_n) + \mathcal{G}_{cm}(i\omega_n)t_m(i\omega_n)\mathcal{G}_{cm}(i\omega_n),$$

と表される. ここで, c 電子に対する不純物 T 行列を導入した

$$t_m(\tau) = -\frac{1}{\beta} \left\langle \sum_{ij=1}^{k_m} (M_m)_{ji} \delta(\tau, \tau_j - \tau_i) \right\rangle_{\text{MC}}, \quad M_m = \mathcal{G}_{cm}^{-1}. \quad (53)$$

ここで, τ_i, τ_j は, 行列 \mathcal{G}_{cm} の i 行と j 列に対応する時刻である. また, 2.5.5 節と同様にして, f 電子に関する物理量は f 電子が m の状態にある時間領域 $n_m(q_k; \tau)$ から簡単に求めることができる. 行列 M_m による 2 粒子 Green 関数の扱いに関しては文献 [21] を参照されたい.

実際の計算では、配置 q_k と対応する M_m 行列、時刻の対応関係をメモリ上に記憶しておけばよい。 J 展開では、解析的に求まる非自明な極限がないので、計算コードのチェックは様々な角度から行うしかない。

3 各手法の比較・考察および技術的な注意点

3.1 計算時間の比較

実際の計算で時間のかかる部分は、 M 行列の更新である (例えば式 (31))。 V 展開の計算では、最も時間のかかる部分は f 電子トレースであるが、トレース内で各スピンの f 電子数が保存するとき、セグメントの考え方によって劇的な効率化が可能である。セグメントによる評価が適用できない場合は、この部分のアルゴリズムが計算時間を左右する。この点については次節で触れることにし、この節では V 展開における f 電子トレースはセグメントによって評価されているものとする。

M 行列の更新にかかる時間は、高速更新アルゴリズム (付録 B) を用いた場合、行列のサイズを k として k^2 に比例する (高速更新アルゴリズムを使わない場合は k^3)。したがって、行列のサイズを比較することで、おおまかな計算時間の比較ができる。全サンプルの摂動次数分布 $p(k)$ とスピン成分ごとの摂動次数 (各スピンの行列サイズ) 分布 $p(k_\sigma)$ の典型例を図 11 に示す。このように、多くの場合、1 つの

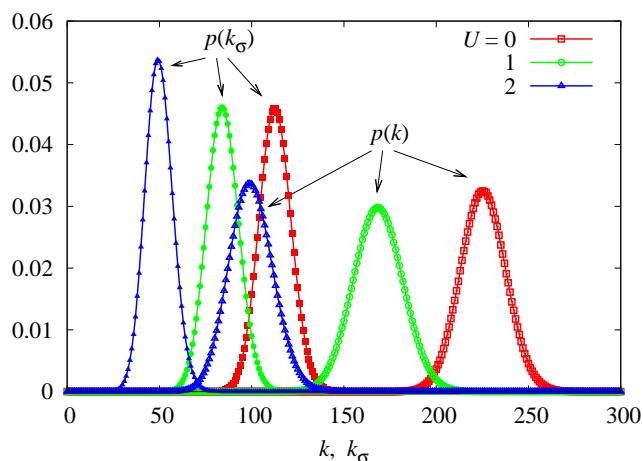


図 11 不純物 Anderson 模型の V 展開における摂動次数分布 $p(k)$ と各スピンの次数分布 $p(k_\sigma)$ の例。伝導バンド幅を $2D = 2$ とし、状態密度は一定値 $\rho = 1/2$, $V^2 = 0.1$, $T = 0.001$, $U = -2\epsilon_f$ 。

ピークを持った分布になる。 $\langle k \rangle = \beta |\langle H_1 \rangle|$ の関係から、 $p(k)$ のピーク位置は β におよそ比例する。スピンごとの分布 $p(k_\sigma)$ は $\langle k \rangle / 2$ 付近にピークを持つことが多い。ただし、スピンの揺らぎが大きい場合、 $p(k_\sigma)$ は 2 ピーク構造になる。

次に、アルゴリズム間の行列サイズを比較する。図 12(a) は、Hubbard 模型の DMFT における有効不純物問題に現れる行列サイズの平均値である。2 つの連続時間アルゴリズムと Hirsch-Fye (行列サイズ = 分割数 L) を比較している。どの方法でも、サイズは β におよそ比例して大きくなる。Hirsch-Fye アルゴリズムでは $\beta t / L = 0.2$ となるように分割数 L を決めているが、この分割数では Trotter 分解によ

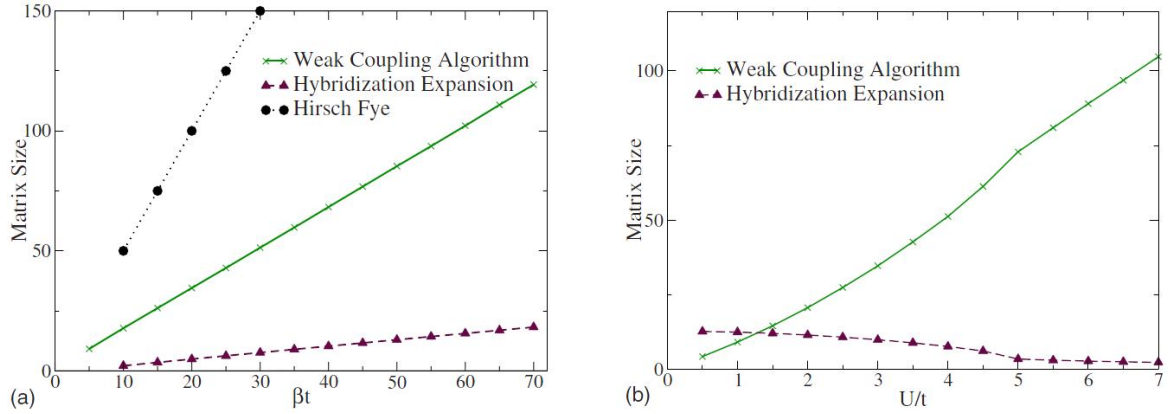


図 12 Hubbard 模型の DMFT における有効不純物問題に現れる行列サイズの平均値比較 [14]. 状態密度は半円型でバンド幅は $4t$. Hirsch-Fye では $\Delta\tau t = \beta t/L = 0.2$ となるように L を決めてい
る. (a) は $U/t = 4$ で温度を変化, (b) は $\beta t = 30$ で U を変化.

る誤差が大きく十分とは言えない. それでも, 連続時間アルゴリズムに比べて大きな行列サイズを必要とすることが分かる. したがって, CT-QMC 法は Hirsch-Fye に比べて, 効率よく精度の高い結果が得られるということが言える.

連続時間アルゴリズムのうち, U 展開と V 展開を比較してみよう. 図 12(b) は温度一定での行列サイズの U 依存性である. $U/t \simeq 5$ の折れ曲がりには Mott 転移による. U 展開では U の増加とともに行列サイズが大きくなるのに対し, V 展開では逆に行列サイズが小さくなる. Hubbard 模型の DMFT では, 有効不純物 Anderson 模型における混成 V は U に依らずバンド幅程度である. $V = \text{一定}$ のとき, U が大きいほど原子極限からの収束が速いことから, 図 12(b) の結果は理解できる. 物理的に最も興味のある Mott 転移付近では V 展開の方が圧倒的にサイズが小さい.

3.2 負符号問題

CT-QMC 法では, V 展開にしる U 展開にしる, 不純物 Anderson 模型において負符号問題は現れない. ただし, 多軌道系で交換相互作用など密度-密度型ではない相互作用がある場合には負符号が現れる. クラスタ不純物問題では, 電子-正孔対称など特別な条件がない限り負符号が現れる.

不純物問題において負の重みが現れないことを, V 展開のセグメント・アルゴリズムを例にとって直感的に理解してみよう. 符号については 1 つの spin 成分について考えれば十分である. 式 (26) で V^6 ($k = 3$) の寄与を模式的に表したものが図 13 である. 図の配置では, c 電子の平均 ($\det \Delta$) から Wick の定理により 6 つの寄与が現れる. 例えば最初の図は $(-V)^6 \mathcal{G}_c(\tau'_1 - \tau_1) \mathcal{G}_c(\tau'_2 - \tau_2) \mathcal{G}_c(\tau'_3 - \tau_3)$ を表し, その寄与は $\tau'_i - \tau_i < 0$ で $\mathcal{G}_c > 0$ より正であることが分かる. 同様の解析をすると, 6 つの寄与のうち最後の図形のみ負であることが分かる. CT-QMC 法では, これらをまとめて $\det \Delta$ として評価するので, 全体として負の寄与が表に現れないのである. なお, 厳密な証明は Hirsch-Fye アルゴリズムの場合 [22] と同様の方法で示せることが指摘されている [23].

クラスタ不純物問題では特別な場合を除き, 負符号問題は避けられない. V 展開をクラスタ不純物問題に適用する場合には, クラスタの固有状態を基底にとると効率がよい [24]. V 展開の方が U 展

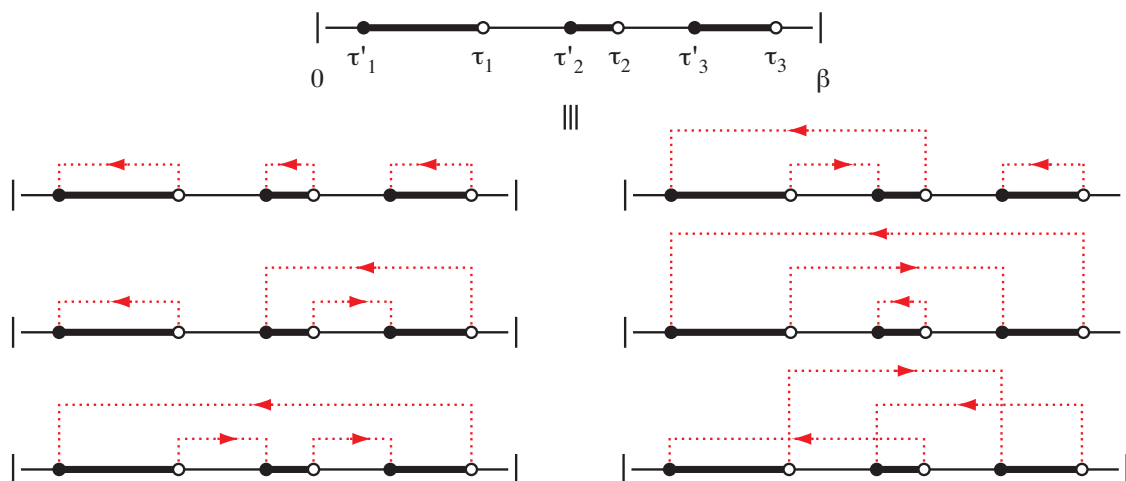


図 13 V 展開の V^6 ($k=3$) の寄与を表す図形. 左向き矢印は $G_c > 0$, 右向き矢印は $G_c < 0$ に対応する.

開に比べて負符号問題は少ないようである. しかし, V 展開ではクラスターのサイズに対して計算コストが指数関数的に増大するため, 大きなクラスターを扱うことは難しい. クラスターを大きくするという目的では, (負符号問題を別にして) U 展開の方が適していると言える.

図 14 は, 各種 U 展開アルゴリズム (U 展開, 補助場 CT-QMC 法 (CT-AUX) [25], Hirsch-Fye) における符号の平均値を比較したものである. 負符号の程度は全ての U 展開アルゴリズムでほぼ同じであることがわかる (Trotter 分割数無限大で厳密に一致する). このように Hirsch-Fye と比較して負符号は軽減されないが, 同程度の計算時間では, サンプル数の多い CT-QMC 法が負符号問題に最も強いと言ってよいだろう.

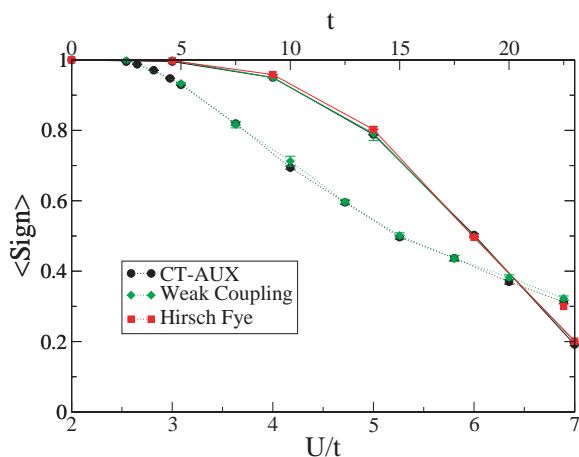


図 14 各種 U 展開アルゴリズムにおける符号の平均値比較 [25]. 実線は次近接ホッピングのある系の U/t 依存性 (下軸), 破線は 8 サイトのクラスター不純物系における t 依存性 (上軸).

3.3 動的物理量のサンプリング

3.3.1 1 粒子 Green 関数

V 展開における 1 粒子 Green 関数の計算では、 τ サンプリング (式 (38)) と ω_n サンプリング (式 (39)), 2 通りの方法がある. 振動数表示の Green 関数 $G(i\omega_n)$ を求める場合であっても τ サンプリングの方が効率よいので, この詳細について述べる.

数値計算では式 (38) のデルタ関数を有限の幅の関数で置き換える必要がある. 最も単純なものは幅 $\Delta\tau = \beta/N$ の箱型である (図 15(a)). そして, $\tau = \tau_j - \tau'_i$ の値が区間 $[\tau_n - \Delta\tau/2, \tau_n + \Delta\tau/2)$ にあるなら, $(M)_{j,i}$ の値を $G(\tau_n)$ に振り分ける.

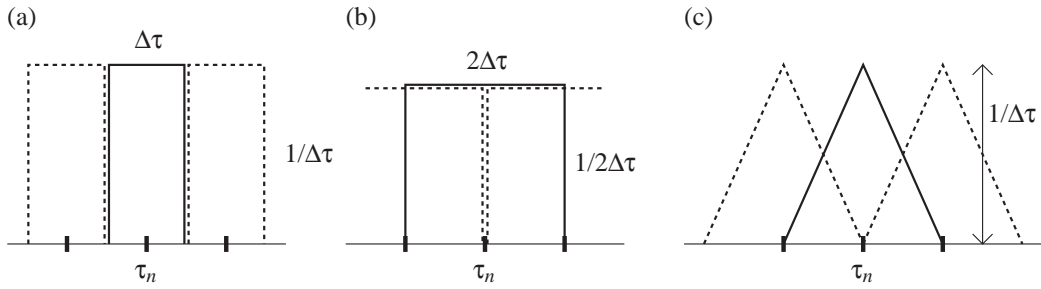


図 15 τ サンプリングにおけるデルタ関数の取り扱い例.

デルタ関数の扱いは他にも考えられる. 図 15(b) のように, 区間 $[\tau_n - \Delta\tau, \tau_n + \Delta\tau)$ を $G(\tau_n)$ に振り分けてもよい. これは隣同士の区間で平均化することに対応する. あるいは, 図 15(c) のように, τ_n からの距離 $|\tau - \tau_n|$ に応じて重みを付けてもよい. これらの方法では, 端の点 $\tau = +0, \beta - 0$ の値が求まらないので, 式 (42) から求めた占有率の平均値 n を使って $G(+0) = n - 1, G(\beta - 0) = -n$ とする.

分割数 N の大小は計算時間にほとんど影響しないので, $\Delta\tau$ を十分細かく取るのがよい. 分割数を多くすると各々の区間のサンプル数が少なくなる分, 誤差棒は大きくなる. しかし, 分割数を増やすことはフーリエ変換して得られる $G(i\omega_n)$ の高振動数側の点を増やすことに対応し, それらの点における誤差の増大は興味あるエネルギー・スケールの物理量にほとんど影響しない. $\Delta\tau$ が十分細かく取れているかは, $G(\tau)$ の $\tau = 0$ あるいは $\tau = \beta$ 付近の減衰曲線を見てチェックするのがよい. 低温, 強相関ほど減衰が急になるので, パラメータを変化させる計算では注意が必要である.

図 16 に 1 粒子 Green 関数の計算例を示す. 式 (38) のデルタ関数は図 15(b) の関数で置き換えている. $\Delta\tau$ は $U = 0$ で $\Delta\tau = \beta/2048$, $U = 4$ で $\Delta\tau = \beta/8192$ とした. 点の間隔は十分細かく, 誤差棒及び点は省略した. 対称条件 $U = -2\epsilon_f$ より $G(\tau) = G(\beta - \tau)$ の関係がある. $U = 0$ の Green 関数は解析的に求まるので, 計算のチェックに利用するとよい. $\Delta\tau$ を $\tau = 0, \beta$ 付近の減衰曲線に合わせて調整しているので, $\tau = \beta/2$ 周辺ではメッシュが細かすぎ, 高周波ノイズが現れていることが見て取れる.

なお, 摂動次数分布 $p(k)$ が低次にピークを持つようなパラメータでは極端にサンプル数が少なくなり, この方法では精度が悪化する. 特に, 高温領域がこの場合にあたることに注意.

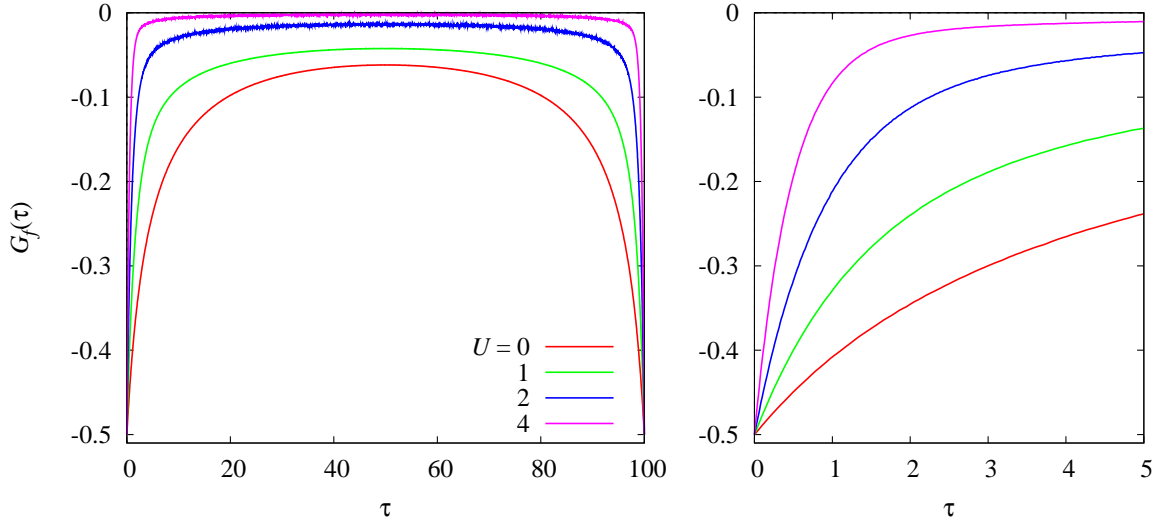


図 16 不純物 Anderson 模型の V 展開における $G_f(\tau)$ の計算例. パラメーターは $T = 0.01$ で, それ以外は図 11 と同じ. U は下から順に 0, 1, 2, 4.

3.3.2 2 体相関関数

2 体相関関数の計算法には, 行列 M から求める方法 (式 (40)) とセグメント配置から求める方法 (V 展開のみ, 式 (43)) がある. セグメントから求める方が精度がよいので, 適用できる場合はその方法を使ったほうがよい. 一方, 行列 M による方法は汎用性がある. 例えば, 帯磁率の縦成分はどちらの方法でも計算できるが, 横帯磁率は行列 M による方法でのみ計算できる.

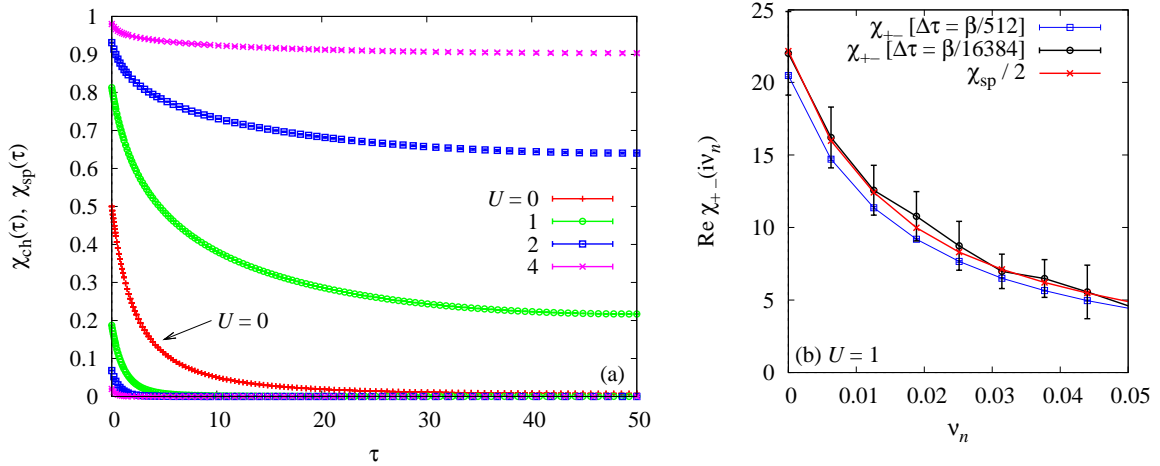


図 17 不純物 Anderson 模型の V 展開における 2 体相関関数の計算例. (a) はセグメントの配置から求めた縦帯磁率 $\chi_{sp}(\tau)$ と電荷感受率 $\chi_{ch}(\tau)$. $U = 0$ で $\chi_{sp}(\tau) = \chi_{ch}(\tau)$ を満たし, $\chi_{sp}(0) \geq 1/2$, $\chi_{ch}(0) \leq 1/2$. (b) は行列 M から求めた横帯磁率 $\chi_{+-}(i\nu_n)$. $\Delta\tau$ の意味は式 (89) を参照. 比較のため, セグメント配置から求めた $\chi_{sp}(i\nu_n)$ もプロットした. パラメーターは (a) $T = 0.01$, (b) $T = 0.001$ で, それ以外は図 11 と同じ.

上記 2 つの方法による帯磁率の計算例を示す. 図 17(a) は V 展開アルゴリズムでセグメント配置から

求めた f 電子の帯磁率 $\chi_{\text{sp}}(\tau) = 2[\chi_{\uparrow\uparrow}(\tau) - \chi_{\uparrow\downarrow}(\tau)]$ と電荷感受率 $\chi_{\text{ch}}(\tau) = 2[\chi_{\uparrow\uparrow}(\tau) + \chi_{\uparrow\downarrow}(\tau)]$ である。 $\chi_{\sigma\sigma'}(\tau) = \chi_{\sigma'\sigma}(\beta - \tau)$ の関係が誤差まで含めて成り立つので、 $[0, \beta/2]$ の区間だけ計算している。 また、 τ のメッシュは $\tau = 0$ 付近で細かく、 $\tau = \beta/2$ 付近で荒く取り、計算時間を節約している。 セグメントによる 2 体相関関数のサンプリングでは、計算時間はメッシュの分割数に比例する。 最も細かい部分の間隔は $U = 0$ で $\beta/1024$ 、 $U = 4$ で $\beta/256$ とした。 $U = 0$ の場合、 $\chi_{\text{sp}}(\tau) = \chi_{\text{ch}}(\tau) = G(\tau)G(\beta - \tau)$ が成り立つので、計算の確認に用いるとよい。

図 17(b) は行列 M を用いて求めた横帯磁率 $\chi_{+-}(i\nu_n)$ である。式 (40) の $\tau' - \tau \rightarrow +0$ 、 $\eta' - \eta \rightarrow +0$ の極限には付録 C の式 (89) を用い、 $\tau - \eta$ に対してはフーリエ変換をして ω_n サンプリングを行った。式 (89) の $\Delta\tau$ として、 $\beta/512$ と $\beta/16384$ の 2 つの場合を示している。スピン空間の等方性から $2\chi_{+-} = \chi_{\text{sp}}$ が成り立つべきであるが、 $\Delta\tau = \beta/512$ の場合には、 $\Delta\tau$ が十分小さくないために $\chi_{+-}(i\nu_n)$ の精度が悪く、系統的なずれが見られる。一方、 $\Delta\tau = \beta/16384$ では系統的な誤差はほぼ無くなっているが、サンプル数が少なくなり統計誤差は大きくなっている。このように、行列 M による方法では、結果を見ながら分割数を調整する必要がある。なお、CS 模型の行列 M を使う方法では極限 $\tau' - \tau \rightarrow +0$ が不要なく、上記の問題は生じない。1 粒子 Green 関数の場合と同様、行列 M を使う方法は低温ほどサンプル数が多く精度がよくなる。

3.3.3 2 粒子 Green 関数

DMFT で 2 体相関関数の波数依存性を求める際には、有効不純物問題の 2 粒子 Green 関数 $\chi(i\omega_n, i\omega_{n'}; i\nu_m)$ が必要になる [12]。2 粒子 Green 関数はセグメント配置から求めることができず、行列 M を用いて式 (40) から計算するしかない。 $\chi(\tau, \tau'; \eta, \eta')$ は、各変数につき区間 $[0, \beta]$ に 2 カ所不連続性があり、 τ サンプリングでは取り扱いが難しい。したがって、 ω_n サンプリングの方が精度がよい。実際には、2 粒子 Green 関数あるいはバーテックス関数は低振動数領域のみ必要となることが多く、必要な振動数成分だけ選んでサンプリングすることで効率をあげることができるという利点もある。また、CS 格子模型に対する 2 粒子 Green 関数の取り扱いについては文献 [21] を参照されたい。

3.4 解析接続

虚時間 Green 関数からスペクトルを得るには数値的に解析接続を行う必要がある。その方法としては Padé 近似 [26] と最大エントロピー法 [27] が広く用いられている。量子モンテカルロ法のデータは統計誤差を含むので、最大エントロピー法を用いるのが一般的である。しかし、精度のよい虚時間データが得られるのであれば、Padé 近似も有効な手段として利用できる。Padé 近似では、虚軸上の離散点 $i\omega_n (n > 0)$ での関数値から近似的な有理関数を構成し、実軸上の値を外挿によって求める。元のデータ点から近いほどよい近似であり、低振動数領域のスペクトルほど精度のよい安定した結果が得られる。

Padé 近似によるスペクトルの計算例を示す。図 18 は SU(8) 対称性を持つ CS 模型の不純物 T 行列の虚部で、各成分に対応する 8 本の線が描いてある。これらは対称性から全て一致すべきものであり、互いに一致しているかどうかによって統計誤差の影響による Padé 近似の良し悪しを判断できる。例では、 $\omega = 0$ 近傍でほぼ 1 本に重なっており、よい精度であることが分かる。一方、共鳴ピークよりも高エネルギー側 $\omega \gtrsim 0.05$ では、ずれが見られる。

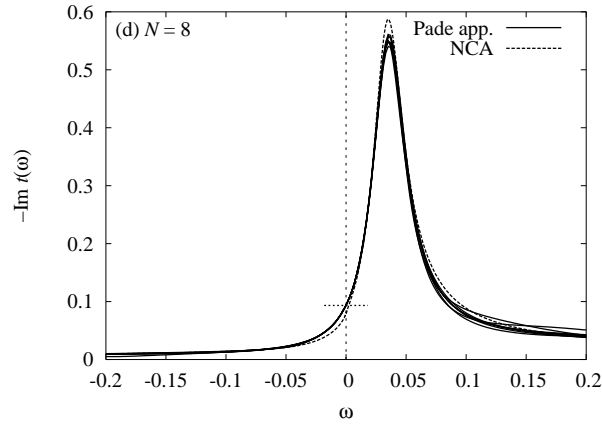


図 18 Padé 近似による SU(8)CS 模型の不純物 T 行列スペクトル [13]. $J = 0.075$ で、伝導バンドのパラメータは図 11 と同じ.

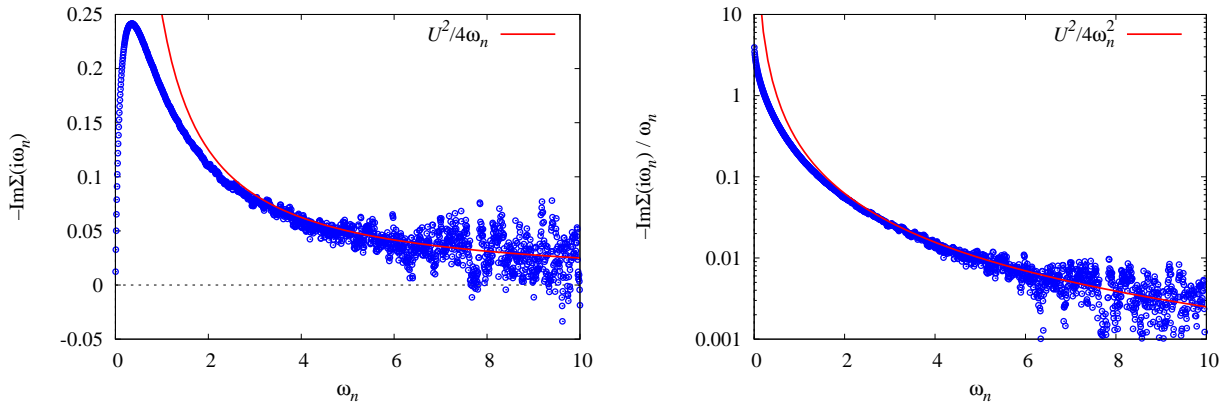


図 19 V 展開による自己エネルギー $\Sigma(i\omega_n)$ の計算例. パラメータは $U = 1$ でそれ以外は図 11 と同じ. 実線は高振動数極限の表式 $\text{Im} \Sigma(i\omega_n) \sim -U^2/4\omega_n$.

図 18 のような簡単なスペクトルであれば Padé 近似でも再現することができるが、複雑なスペクトル構造を持つ場合は、誤差の影響から再現することは難しい. 結局、低エネルギーに限れば Padé 近似も有効だが、スペクトル全体が知りたい場合は MEM を使うのが妥当であろう.

3.5 自己エネルギーの評価について

DMFT では、有効不純物模型の自己エネルギー

$$\Sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}(i\omega_n)^{-1} - G(i\omega_n)^{-1}, \quad (54)$$

が必要になる (付録 A). CT-QMC 法では 1 粒子 Green 関数 $G(i\omega_n)$ が得られるので、それから $\Sigma(i\omega_n)$ を計算することになる. ところが、高振動数では $G(i\omega_n)$ と $\mathcal{G}(i\omega_n)$ はほとんど一致し、 $G(i\omega_n)$ は一定量の誤差を含むので、式 (54) で誤差が拡大されてしまう. 図 19 に V 展開により計算された自己エネルギーの計算例を示す. $\Sigma(i\omega_n)$ の誤差は、高振動数領域で非常に深刻になることが分かる. なお、 U 展開の ω_n サンプリング (式 (24)) に限り、高振動数でも精度のよい自己エネルギーが得られる [14].

これに対する対処法はいくつかあるが、ひとつの手段は気にしないということである。自己エネルギーから Green 関数を計算する場合、必ず $i\omega_n - \Sigma(i\omega_n) = i\omega_n[1 - \Sigma(i\omega_n)/i\omega_n]$ の形で現れる。したがって、Green 関数の計算で重要な量は $\Sigma(i\omega_n)$ そのものではなく $\Sigma(i\omega_n)/i\omega_n$ である。そして、この量は誤差の影響をあまり受けずに十分速く収束する。つまり、Green 関数から自己エネルギーを得る際に誤差が拡大されてしまうが、Green 関数の計算で再び誤差がマスクされるというわけである。ただし、自己無撞着ループの途中で $\Sigma(i\omega_n)$ の解析性が破れたりすると計算が不安定になるので、なるべく $\Sigma(i\omega_n)$ が表に現れないよう方程式を変形する工夫が必要である。

もちろん精度のよい自己エネルギーが得られるのにこしたことはない。高振動数のノイズを取り除く手段としては、モーメント展開による高振動数極限の解析的表式を使うということが考えられる [28]。図 19 の例では、 $\omega_n \gtrsim 5$ においては高振動数の表現を使うのがよさそうに見える。しかし実際には、誤差の程度はサンプル数やパラメーターに依存し、低振動領域の計算データと高振動数領域の解析的表式をどのように接続するかという問題が残る。

3.6 その他の注意点

3.6.1 $\mathcal{G}(\tau)$ の扱い

行列 M の行列要素の計算に、任意の τ における $\Delta(\tau)$ あるいは $\mathcal{G}_c(\tau)$ の値が必要になる (式 (11))。一般に、模型として与えるのは実振動数 ω の関数としての状態密度 $\rho_c(\omega)$ あるいは $\Delta(\omega) = \pi V^2 \rho_c(\omega)$ である。虚時間表示の関数は、 $\mathcal{G}_c(i\omega_n) = \int d\epsilon \rho_c(\epsilon)/(i\omega_n - \epsilon)$ の積分を行った後で、高速フーリエ変換 (FFT) を使って計算するのがよい。なお、 $\mathcal{G}_c(\tau)$ は $\tau = 0, \beta$ で不連続を持つので、FFT を使う場合、 $\mathcal{G}_c(i\omega_n) = 1/i\omega_n + \mathcal{G}'_c(i\omega_n)$ と分離して第 2 項に FFT を用い、第 1 項は $-\text{sgn}(\tau)/2$ となることを利用するなどの工夫が必要である。

また、あらかじめ適当な間隔で $\mathcal{G}_c(\tau)$ を計算しておき、それを内挿して任意の τ での値を求めると効率がよい。区間 $[0, \beta]$ の分割数は、多くしてもほとんど計算時間に影響しないので、1 粒子 Green 関数のサンプリングの場合と同様、十分細かく取るのがよい。DMFT の不純物ソルバーとして使用するときは、1 粒子 Green 関数と同じ分割数が便利である。

3.6.2 局在状態の揺らぎが大きいとき

図 11 の例では、スピンごとの摂動次数分布 $p(k_\sigma)$ は 1 ピーク構造であった。ところが、スピンの揺らぎが大きいときには、 $p(k_\sigma)$ は 2 ピーク構造をとる。すなわち、ランダム・ウォークの各ステップではスピン成分に偏りがあり、優勢なスピン成分のみ摂動次数が大きくなる。低温になると 2 つのピークがほとんど分離してしまい、次数を 1 つ変える単純な局所更新過程ではピーク間を移り変われずエルゴード性が保証されない。

この問題は全スピンを反転させる更新を行うことで解決できる。スピン反転の対称性があるとき、この更新は確率 1 で採択され、単にスピンのラベルを入れ換えるだけでよい。対称性がない場合は、分配関数の比を計算し、それに従って更新する。特に M_σ にスピン依存性があるときは、行列式を定義式通り $O(k_\sigma^3)$ の計算量で計算する必要があり、頻繁にこの更新を行うことは避けた方がよい。

3.6.3 サンプル間の試行数

精度を上げるためには、サンプル数を増やすだけでなく、サンプルの独立性を高めることも重要である。物理量の測定にかかる時間が少ないときは、サンプルの独立性を気にせず頻繁に測定しても問題はない。しかし、測定に時間がかかる場合、特に帯磁率やバーテックスの計算では、なるべく独立なサンプルを測定したほうが効率がよい。適度なサンプル間隔は、更新にかかる時間と測定にかかる時間の兼ね合いで決まる。サンプルの独立性を高めるには配置 q_k が大きく変化していればよいので、サンプル間の試行数を

$$N_{\text{trial}} \sim \langle k \rangle / \text{更新率}, \quad (55)$$

の程度にとるとよい。実際には、1回の操作で配置がどれだけ変化するかにも依存する。例えば V 展開では、セグメントの追加・削除はセグメント1つを変化させるが、シフトはセグメントの片方だけ変化させる。一般に、摂動次数の変化をとまなう更新よりもシフトの方が更新率が高い。したがって、シフトの試行頻度を多くすると、効率よく配置を変化させることができる。

4 いくつかの発展的試み

4.1 局在状態のトレースの評価

セグメントによる方法では、 f 電子のトレース (式 (26)) でゼロになるものを初めから排除し、効率よく計算を行っている。セグメント法が適用できない場合は、このトレースを評価する必要があるが、そのために必要な計算量は f 電子の状態数を n として kn^3 に比例する。状態数 n は軌道数やサイト数とともに指数関数的に増加するので、多軌道系やクラスター不純物では、このトレース計算を効率よく行う工夫が必要である。アルゴリズムとしては、厳密に評価するものと、近似的に評価するものに分けられる。まずは、厳密に評価するアルゴリズムを紹介する。

計算量を減らす最も簡単な方法は、 k 個の演算子をいくつかのグループに分割し、グループごとに演算子の積を保存しておくアルゴリズムである [29]。新たに演算子を加えるときは、その演算子が増えらるグループの行列積のみを計算し直せばよい。分割数を $\sqrt{\langle k \rangle}$ の程度にすると、更新に必要な計算量を $O(k)$ から $O(\sqrt{k})$ に減らすことができる。この考え方を系統的な木構造を用いた最良のものにすると $O(\log k)$ まで計算量を減らすことができる。ただし、その実装はかなり複雑になる。詳細は、文献 [29] を参照してほしい。

以上はトレースを厳密に評価する方法であったが、トレースを近似的に評価することにより高速化を図る方法も考案されている [15]。この方法は Lanczos 法でよく知られた考え方に基礎を置くもので [30–33]、局所ハミルトニアン H_f や混成項 H_{hyb} が疎行列であることに注目する。 H_0 が疎行列であるとき、時間発展 $\exp(-\tau H_0)|v\rangle$ は制限された基底、いわゆる Krylov 部分空間 $\{|v\rangle, H_0|v\rangle, \dots, H_0^p|v\rangle\}$ の中で評価することができる。上記の演算は p に関して十分速く収束するので、少ない基底 $p \ll n$ を用いてトレースを評価することで計算量を減らすことができる。低温になるほどより少ない基底数でよい近似となり、また、不純物問題では軌道数が3以上の場合に効果的なことが示されている。

これらの方法により f 電子トレースの計算コストはかなり改善される。しかし、セグメント法が使え

ない場合には、更新率が極端に低いという問題が残っている。そのため、独立なサンプルを得るためにサンプル間の試行数を増やす必要があり (式 (55)), トレースの計算コストを無視しても、セグメント法と比べ多くの計算時間を要するので並列計算が必須である。

4.2 Holstein-Hubbard 模型 [34, 35]

Holstein-Hubbard 模型は、Hubbard 模型に加えて、各サイトで独立に振動する振動子 (Einstein フォノン) と電子との結合を取り入れた模型である。ハミルトニアンは以下で与えられる

$$H = \sum_p (\epsilon_p - \mu) c_{p\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \lambda \sum_i (b_i^\dagger + b_i) (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1) + \omega_0 \sum_i b_i^\dagger b_i. \quad (56)$$

ここで、 b_i^\dagger , b_i は Einstein フォノンの生成、消滅演算子である。 ω_0 は Einstein フォノンの振動数を表し、第 3 項が電子とフォノンの結合を表す。DMFT の枠組みでは、不純物 Anderson 模型に f 電子とボゾンとの結合を加えた有効不純物問題、すなわち、式 (7) の不純物 Anderson 模型で $H_f = H_I + H_U$ を

$$H_f = -\mu(n_\uparrow + n_\downarrow) + U n_\uparrow n_\downarrow + \lambda(n_\uparrow + n_\downarrow - 1)(b^\dagger + b) + \omega_0 b^\dagger b, \quad (57)$$

と置き換えた模型を解けばよい。

一般に、ボゾン系の数値計算では無限次元 Hilbert 空間の扱いが問題となる。厳密対角化法では、ボゾンの粒子数を制限することで有限の Hilbert 空間を取り扱う。ここでは、 V 展開を基にして、ボゾンの Hilbert 空間を切断せず Hubbard 模型と同程度の計算コストで実行できる方法を紹介する [34]。

まず、Lang-Firsov 変換と呼ばれる正準変換を行い、式 (57) の局所ハミルトニアンから電子とフォノンの結合項を消去する。フォノン変数として、 $X = (b^\dagger + b)/\sqrt{2}$ と $P = (b^\dagger - b)/\sqrt{2}i$ を用いると*4、式 (57) は

$$H_f = -\mu(n_\uparrow + n_\downarrow) + U n_\uparrow n_\downarrow + \frac{\omega_0}{2} [(X + X_0)^2 + P^2] - \frac{\omega_0}{2} X_0^2 - \frac{\omega_0}{2}, \quad (58)$$

と表せる。ここで、 $X_0 = (\sqrt{2}\lambda/\omega_0)(n_\uparrow + n_\downarrow - 1)$ と定義した。 X_0 はフォノンの演算子 X , P と可換であるので、フォノン座標に関する並進操作 $X \rightarrow X - X_0$ を行うことにより、電子とフォノンを分離することができる。この正準変換を行うと、局所ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \tilde{H}_f &= e^{iPX_0} H_f e^{-iPX_0} \\ &= -\tilde{\mu}(n_\uparrow + n_\downarrow) + \tilde{U} n_\uparrow n_\downarrow + \omega_0 b^\dagger b - \frac{\lambda^2}{\omega_0}, \end{aligned} \quad (59)$$

となる。ここで、 $\tilde{\mu} = \mu - \lambda^2/\omega_0$, $\tilde{U} = U - 2\lambda^2/\omega_0$ である。電子間にフォノンを媒介とした有効的な引力が働き Coulomb 斥力 U が小さく繰り込まれたのである。この正準変換は電子の演算子として粒子数 n_\uparrow , n_\downarrow のみを含み、これと可換な H_f の f 電子部分は不変であった。一方、混成項は f_σ^\dagger や f_σ を単独で含み、正準変換によって

$$f_\sigma^\dagger \rightarrow \tilde{f}_\sigma^\dagger = e^{(\lambda/\omega_0)(b^\dagger - b)} f_\sigma^\dagger, \quad f_\sigma \rightarrow \tilde{f}_\sigma = e^{-(\lambda/\omega_0)(b^\dagger - b)} f_\sigma,$$

*4 このように P を定義すると、 $[X, P] = -i$ となってしまうが、文献 [34] の定義に合わせる。

のように変換される。

以上の正準変換によって新しい基底に移ると、 V 展開における各配置 (q_k, q'_k) の重み $P(q_k, q'_k)$ は

$$P(q_k, q'_k) = P_b(q_k, q'_k) \tilde{P}_{\text{IAM}}(q_k, q'_k), \quad (60)$$

のようにフォノン部分と f 電子部分に分離される。スピンの添え字は省略した。ここで、 $\tilde{P}_{\text{IAM}}(q_k, q'_k)$ は繰り返されたパラメーター \tilde{U} , $\tilde{\mu}$ を用いた不純物 Anderson 模型の寄与である。フォノンの寄与は

$$P_b(q_k, q'_k) = \langle e^{s_{2k} A(\tau_{2k})} \dots e^{s_1 A(\tau_1)} \rangle_b,$$

と表される。 s_i は時刻 τ_i の演算子が生成 (消滅) 演算子のとき $+1$ (-1) を取るものとする。 $\langle \dots \rangle_b$ は自由フォノンに関する統計平均を表し、 $A(\tau) = (\lambda/\omega_0)(e^{\omega_0 \tau} b^\dagger - e^{-\omega_0 \tau} b)$ である。

$P_b(q_k, q'_k)$ は解析的に求めることができ

$$P_b(q_k, q'_k) = \exp \left\{ -\frac{\lambda^2/\omega_0^2}{e^{\beta\omega_0} - 1} \left[n(e^{\beta\omega_0} + 1) + \sum_{2k \geq i > j \geq 1} s_i s_j (e^{\omega_0(\beta - \tau_i + \tau_j)} + e^{\omega_0(\tau_i - \tau_j)}) \right] \right\}, \quad (61)$$

となる。以上のようにフォノンの寄与 P_b は、Hilbert 空間を切断することなく評価することができる。また、 P_b は解析的に得られており \tilde{P}_{IAM} に比べて計算時間は無視できることから、非常に効率のよい計算方法であるといえる。

4.3 非平衡系 [36, 37]

非平衡系の摂動展開では実時間表示の Keldysh 形式が広く用いられている [38–41]。この Keldysh 形式の摂動展開に対して CT-QMC 法を適用する試みが行われている。一言で非平衡といっても状況は様々であるが、ここでは相互作用 H_1 が $t < 0$ でゼロ、 $t > 0$ で一定という状況を例に取り、概略を説明する。

時刻 t における物理量 \mathcal{O} の期待値は

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle = \text{Tr} [\rho_0 e^{iHt} \mathcal{O} e^{-iHt}], \quad (62)$$

で与えられる。ここで、 ρ_0 は $t < 0$ の定常状態における密度行列で $\rho_0 = e^{-\beta H_0} / \text{Tr} e^{-\beta H_0}$ により定義される。上式の $e^{\pm iHt}$ の部分を H_1 に関する摂動展開の形で表すと

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle = \text{Tr} \left\{ \rho_0 \left[\tilde{T} \exp \left(i \int_0^t dt' H_1(t') \right) \right] e^{iH_0 t} \mathcal{O} e^{-iH_0 t} \left[T \exp \left(-i \int_0^t dt' H_1(t') \right) \right] \right\}, \quad (63)$$

となる。ここで、 T (\tilde{T}) は (逆) 時間順序演算子、 $H_1(t) = e^{iH_0 t} H_1 e^{-iH_0 t}$ は相互作用表示である。この式で $\mathcal{O} = 1$ としたものが、虚時間形式の分配関数の表式 (1) に対応する。したがって、式 (63) の指数部分を展開することにより、2 節と同様の摂動展開を行うことができる。ただし、指数が 2 箇所にあるので、図 20 のような実時間軸上の閉経路を考える点が虚時間形式とは異なる。 U 展開、 V 展開の両方について Keldysh 形式での定式化がなされている。

以上のように、原理的には虚時間形式と同じように重み付きサンプリングを行うことができる。ただし、この方法の最大の問題点は負符号問題が避けられないことである。閉経路の右向き、左向きのそれぞれ

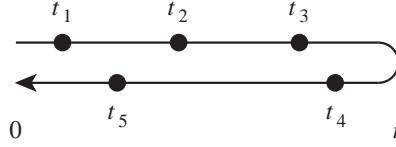


図 20 Keldysh 形式における配置の例.

れについて、摂動の k 次では $(\pm i)^k$ の因子がかかるので (虚時間形式では $(-1)^k$)、負の寄与が必ず現れる。摂動次数は t に比例して増加し、符号の平均値は摂動次数の増加と共に指数関数的に減少する。したがって、長時間の物理量の変化を見ることは困難になる。この困難を軽減するために、摂動次数を減らす工夫がなされている [37].

4.4 熱力学量

CT-QMC 法で熱力学量を計算する方法はいくつかある。ひとつは 1 粒子 Green 関数から求める方法である。内部エネルギーは 1 粒子 Green 関数に適当な因子をかけて松原振動数で和を取るにより求められる [17]. 比熱はそれを温度で微分することにより得られる。温度 T_0 と T_1 におけるエネルギーをそれぞれ E_0 と E_1 、統計誤差を ΔE_0 と ΔE_1 とすると、比熱 C とその統計誤差 ΔC は

$$C = \frac{E_1 - E_0}{T_1 - T_0}, \quad \Delta C = \frac{\sqrt{(\Delta E_0)^2 + (\Delta E_1)^2}}{T_1 - T_0}, \quad (64)$$

により計算される。温度間隔を小さくすると、差分の精度が上がる一方で統計誤差は大きくなる。適当な温度間隔を選ぶのに苦労する方法である。

熱力学量を求める別の方法は、式 (2) の分配関数 Z を直接計算する方法である。分配関数を $Z = \sum_{k=0}^{\infty} Z_k$ と表すとき、 Z_k の相対的な値 $p(k) = Z_k/Z$ は図 11 のように簡単に求められる。 Z_0 は解析的に計算できるので、原理的には、 $p(0)$ が求まれば Z は得られることになる。ところが、図 11 のような分布の場合、 $k=0$ の配置は Markov 連鎖にほとんど現れないので、 $p(0)$ を精度よく求めることは難しい。この問題は Wang-Landau 法と呼ばれる方法によって解決することができる [42]. Wang-Landau 法の基本的な考え方は、因子 g_k を用いて $Z = \sum_{k=0}^{\infty} \tilde{Z}_k g_k$ と表し、 $\tilde{Z}_k = Z_k/g_k$ に従って重み付きサンプリングを行うということである。すなわち、 g_k の導入により、分配関数への寄与が小さい配置をあえて訪れるようにするわけである。 \tilde{Z}_k が k の低次で平坦になるように g_k を調整すれば、 $k=0$ のサンプル数を増やすことができる。 g_k の調整法については文献 [42] を参照されたい。

5 おわりに

不純物 Anderson 模型を中心にダイアグラム展開に基づく連続時間量子モンテカルロ法の定式化とアルゴリズムについて述べてきた。ここでは、煩雑な表記を避けるため最もシンプルな不純物模型の解説に留めたが、特に、セグメント表示を用いた V 展開アルゴリズムは、密度-密度相互作用のみがある多軌道系やクラスター系へ比較的容易に拡張できる。より一般的な交換相互作用を含む模型については、Krylov 部分空間法に基づく f 電子トレースの実用的なアルゴリズムが有望であり、ヨーロッパとアメリカでは数値計算グループを中心とした組織的な計算コードの開発が着実に進められている。

一方、CT-QMC 法は、電子-格子系、非平衡系など電子系だけに留まらない発展を見せている [43]。いうまでもなく摂動展開の概念自体は適用範囲が非常に広く、同じ次数のダイアグラムをうまくまとめて正の確率分布を構成できれば、さまざまな場面での応用が可能であろう。もちろん、この正定値性というのが難しいのではあるが、新しい系への果敢な応用に向けて、本稿がその一助となれば幸いである。

付録 A DMFT の概略

古典系の平均場理論が空間次元無限大で厳密になることに習って、動的な平均場を用いて量子系に一般化したものが DMFT である。平均場理論と同じく DMFT もいろいろな導出法があるが [12]、ここでは自己エネルギーの空間依存性を無視する近似として紹介する [44]。なお、ボソン系への拡張については文献 [45] を参照されたい。

以下の Hubbard 模型を考えよう。

$$H_{\text{Hub}} = \sum_{k\sigma} E_k f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (65)$$

Green 関数は

$$G_\sigma(k, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_k - \Sigma_\sigma(k, i\omega_n)}, \quad (66)$$

である。

まず、自己エネルギーの空間依存性が無視できるとする。すなわち、 $\Sigma_\sigma(k, i\omega_n) \sim \Sigma_\sigma(i\omega_n)$ 。この近似のもとで、式 (66) の空間平均は

$$G_\sigma(i\omega_n) = \left\langle \frac{1}{i\omega_n - \Sigma_\sigma(i\omega_n) - E_k} \right\rangle_k, \quad \langle A \rangle_k \equiv \frac{1}{N_0} \sum_k A(k), \quad (67)$$

である。 $G_\sigma(i\omega_n)$ と $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ から Dyson 方程式を通じてキャビティ $\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n)$ を導入する。すなわち

$$\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n) = [G_\sigma(i\omega_n)^{-1} + \Sigma_\sigma(i\omega_n)]^{-1}. \quad (68)$$

これは、2.3 節で見たように仮想的な不純物 Anderson 模型を考えることに等しい。与えられた $\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n)$ に対して、有効不純物問題を適当なソルバーで解いて

$$\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n) \Rightarrow \Sigma_\sigma(i\omega_n), \quad (69)$$

自己エネルギーを求める。ソルバーによっては、自己エネルギーではなく $G(i\omega_n)$ のみが求められる。この場合は $\Sigma_\sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_\sigma(i\omega_n)^{-1} - G_\sigma(i\omega_n)^{-1}$ を介して自己エネルギーを求めればよい。式 (67), (68), (69) を連立して解けば、平均場 $\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n)$ または $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ が得られ、式 (66) を通じて格子系の Green 関数が求められる。

式 (67) と不純物 Anderson 模型の Green 関数

$$G_\sigma^{\text{IAM}} = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{f\sigma} - V^2 \langle (i\omega_n - \epsilon_{p\sigma})^{-1} \rangle_k - \Sigma_\sigma(i\omega_n)}, \quad (70)$$

において、 $|\omega_n| \rightarrow \infty$ の極限を考えると、 $\Sigma_\sigma(i\omega_n) = \Sigma_\sigma^{(0)} + \Sigma_\sigma^{(1)}/i\omega_n + \dots$ として

$$(67) = \frac{1}{i\omega_n} + \frac{\Sigma_\sigma^{(0)} + \langle E_k \rangle_k}{(i\omega_n)^2} + \frac{\Sigma_\sigma^{(1)} + \langle (\Sigma_\sigma^{(0)} + E_k)^2 \rangle_k}{(i\omega_n)^3} + \dots,$$

$$(70) = \frac{1}{i\omega_n} + \frac{\Sigma_\sigma^{(0)} + \epsilon_{f\sigma}}{(i\omega_n)^2} + \frac{\Sigma_\sigma^{(1)} + V^2 + (\Sigma_\sigma^{(0)} + \epsilon_{f\sigma})^2}{(i\omega_n)^3} + \dots, \quad (71)$$

を得る。両者が等しいから

$$\epsilon_{f\sigma} = \langle E_k \rangle_k, \quad V^2 = \langle E_k^2 \rangle_k - \langle E_k \rangle_k^2, \quad (72)$$

の関係を得る。この関係から、Hubbard 模型の有効不純物問題におけるパラメータ $\epsilon_{f\sigma}$ と V は元の模型のバンド重心とバンド幅程度であることが分かる。また、動的な平均場の情報は $\{\epsilon_{p\sigma}\}$ で表現される。

同様の考え方を Coqblin-Schrieffer 格子模型に適用しよう。

$$H_{\text{CSL}} = \sum_{km} E_k c_{km}^\dagger c_{km} + \sum_{im} E_{fm} X_{i,mm} + J \sum_{imm'} c_{im}^\dagger c_{im'} X_{i,m'm}. \quad (73)$$

c 電子自己エネルギーの空間依存性を無視する近似で、局所 c Green 関数は

$$G_{cm}(i\omega_n) = \left\langle \frac{1}{i\omega_n - \Sigma_{cm}(i\omega_n) - E_k} \right\rangle_k. \quad (74)$$

Dyson 方程式 $\mathcal{G}_{cm}(i\omega_n) = [G_{cm}(i\omega_n)^{-1} + \Sigma_{cm}(i\omega_n)]^{-1}$ によってキャビティを導入し、これに対する有効不純物問題を解いて自己エネルギー $\Sigma_{cm}(i\omega_n)$ を求めればよい。

不純物 Coqblin-Schrieffer 問題では、本稿でも見たように、 c 電子の自己エネルギーよりも T 行列を求める方が直接的である。 T 行列と自己エネルギーの関係

$$\begin{aligned} G_{cm}(i\omega_n) &= \mathcal{G}_{cm}(i\omega_n) + \mathcal{G}_{cm}(i\omega_n) \Sigma_{cm}(i\omega_n) G_{cm}(i\omega_n) \\ &= \mathcal{G}_{cm}(i\omega_n) + \mathcal{G}_{cm}(i\omega_n) t_m(i\omega_n) \mathcal{G}_{cm}(i\omega_n), \end{aligned}$$

より

$$\Sigma_{cm}(i\omega_n) = \frac{t_m(i\omega_n)}{1 + t_m(i\omega_n) \mathcal{G}_{cm}(i\omega_n)}. \quad (75)$$

この関係から、 T 行列を介して c 電子の自己エネルギーが得られる。自己エネルギーが分かれば、格子系の Green 関数も得られる。

付録 B 高速更新アルゴリズム

$k \times k$ の行列を $M = D^{-1}$ とする。行列 D に行と列を追加、削除または行や列の置換を行いたい。その結果得られる行列 D' の行列式とその逆行列 M' を $O(k^2)$ で求める公式をまとめておく [9, 46]。複数行・列にわたる変更の場合、以下を繰り返し用いれば必要な公式が得られる。

B.1 m 行と n 列への追加

D の m 行に $D^{(r)}$ 行ベクトル, n 列に $D^{(c)}$ 列ベクトル, (m, n) に $D^{(d)}$ を追加する. すなわち

$$D^{\oplus(m,n)} = \begin{bmatrix} D_{1,1} & \cdots & D_{1,n-1} & D_1^{(c)} & D_{1,n} & \cdots & D_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{m-1,1} & \cdots & D_{m-1,n-1} & D_{m-1}^{(c)} & D_{m-1,n} & \cdots & D_{m-1,k} \\ D_1^{(r)} & \cdots & D_{n-1}^{(r)} & D^{(d)} & D_n^{(r)} & \cdots & D_k^{(r)} \\ D_{m,1} & \cdots & D_{m,n-1} & D_m^{(c)} & D_{m,n} & \cdots & D_{m,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{k,1} & \cdots & D_{k,n-1} & D_k^{(c)} & D_{k,n} & \cdots & D_{k,k} \end{bmatrix}.$$

行列式の比と追加する行と列を端に移動するとき生じる因子 $(-1)^{m+n}$ をあわせて

$$\lambda^{\oplus(m,n)} \equiv (-1)^{m+n} \frac{\det D^{\oplus(m,n)}}{\det D} = D^{(d)} - \sum_{i,j=1}^k D_i^{(r)} M_{i,j} D_j^{(c)}, \quad (76)$$

である. また, 次のベクトルと行列を導入すると

$$R_j = -\frac{1}{\lambda^{\oplus(m,n)}} \sum_{i=1}^k D_i^{(r)} M_{i,j}, \quad L_i = -\frac{1}{\lambda^{\oplus(m,n)}} \sum_{j=1}^k M_{i,j} D_j^{(c)}, \quad M'_{i,j} = M_{i,j} + \lambda^{\oplus(m,n)} L_i R_j,$$

$D^{\oplus(m,n)}$ の逆行列は次のように表される.

$$M^{\oplus(m,n)} = \begin{bmatrix} M'_{1,1} & \cdots & M'_{1,m-1} & L_1 & M'_{1,m} & \cdots & M'_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M'_{n-1,1} & \cdots & M'_{n-1,m-1} & L_{n-1} & M'_{n-1,m} & \cdots & M'_{n-1,k} \\ R_1 & \cdots & R_{m-1} & \frac{1}{\lambda^{\oplus(m,n)}} & R_m & \cdots & R_k \\ M'_{n,1} & \cdots & M'_{n,m-1} & L_n & M'_{n,m} & \cdots & M'_{n,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M'_{k,1} & \cdots & M'_{k,m-1} & L_k & M'_{k,m} & \cdots & M'_{k,k} \end{bmatrix}. \quad (77)$$

(m, n) ではなく (n, m) に挿入されていることに注意.

B.2 m 行と n 列の削除

D の m 行と n 列を削除する. すなわち

$$D^{\ominus(m,n)} = \begin{bmatrix} D_{1,1} & \cdots & D_{1,n-1} & D_{1,n+1} & \cdots & D_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{m-1,1} & \cdots & D_{m-1,n-1} & D_{m-1,n+1} & \cdots & D_{m-1,k} \\ D_{m+1,1} & \cdots & D_{m+1,n-1} & D_{m+1,n+1} & \cdots & D_{m+1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{k,1} & \cdots & D_{k,n-1} & D_{k,n+1} & \cdots & D_{k,k} \end{bmatrix}.$$

行列式の比は

$$\lambda^{\ominus(m,n)} \equiv (-1)^{m+n} \frac{\det D^{\ominus(m,n)}}{\det D} = M_{n,m} \quad (78)$$

$D^{\ominus(m,n)}$ の逆行列は

$$M_{i,j}^{\ominus(m,n)} = M_{i',j'} - \frac{M_{i',m} M_{n,j'}}{\lambda^{\ominus(m,n)}}, \quad i' = i + \theta(i-n), \quad j' = j + \theta(j-m). \quad (79)$$

ただし, $\theta(x) = 1$ ($x \geq 0$), $\theta(x) = 0$ ($x < 0$).

B.3 m 行の置換

D の m 行を行ベクトル $D^{(r)}$ で置き換えたものを $D^{\Rightarrow(m,=)}$ とする. 行列式の比は

$$\lambda^{\Rightarrow(m,=)} \equiv \frac{\det D^{\Rightarrow(m,=)}}{\det D} = \sum_{i=1}^k D_i^{(r)} M_{i,m}. \quad (80)$$

$$R_j = -\frac{1}{\lambda^{\Rightarrow(m,=)}} \sum_{i=1}^k D_i^{(r)} M_{i,j}, \quad (R_m = -1),$$

として, $D^{\Rightarrow(m,=)}$ の逆行列は

$$M_{i,j}^{\Rightarrow(m,=)} = \frac{M_{i,m}}{\lambda^{\Rightarrow(m,=)}} \delta_{j,m} + M_{i,m} R_j - M_{i,j} R_m. \quad (81)$$

B.4 n 列の置換

D の n 列を列ベクトル $D^{(c)}$ で置き換えたものを $D^{\Rightarrow(=,n)}$ とする. 行列式の比は

$$\lambda^{\Rightarrow(=,n)} \equiv \frac{\det D^{\Rightarrow(=,n)}}{\det D} = \sum_{j=1}^k M_{n,j} D_j^{(c)}. \quad (82)$$

$$L_i = -\frac{1}{\lambda^{\Rightarrow(=,n)}} \sum_{j=1}^k M_{i,j} D_j^{(c)}, \quad (L_n = -1),$$

として, $D^{\Rightarrow(=,n)}$ の逆行列は

$$M_{i,j}^{\Rightarrow(=,n)} = \frac{M_{n,j}}{\lambda^{\Rightarrow(=,n)}} \delta_{i,n} + L_i M_{n,j} - L_n M_{i,j}. \quad (83)$$

B.5 m 行と n 列の同時置換

D の m 行を行ベクトル $D^{(r)}$ で, n 列を列ベクトル $D^{(c)}$ で置き換えたものを $D^{\Rightarrow(m,n)}$ とする. ただし, $D^{(d)} = D_n^{(r)} = D_m^{(c)}$. 行列式の比は

$$\lambda^{\Rightarrow(m,n)} \equiv \frac{\det D^{\Rightarrow(m,n)}}{\det D} = \sum_{i,j=1}^k D_i^{(r)} (M_{i,m} M_{n,j} - M_{i,j} M_{n,m}) D_j^{(c)} + D^{(d)} M_{n,m}. \quad (84)$$

$$L_i = -\frac{1}{\lambda \Rightarrow (m,n)} \sum_{j=1}^k M_{i,j} D_j^{(c)}, \quad R_j = -\frac{1}{\lambda \Rightarrow (m,n)} \sum_{i=1}^k D_i^{(r)} M_{i,j},$$

として, $D \Rightarrow (m,n)$ の逆行列は

$$M_{i,j}^{\Rightarrow (m,n)} = \frac{M_{n,m}}{\lambda \Rightarrow (m,n)} \delta_{i,n} \delta_{j,m} + L_i M_{n,m} - L_n M_{i,m} + M_{n,m} R_j - M_{n,j} R_m. \quad (85)$$

付録 C $\tau = \pm 0$ のサンプリング

V 展開の τ サンプリングでは, $G(\tau = \pm 0)$ の値は別に求めた占有数を利用して精度よく求めることができた. しかし, 物理量によっては別の方法を援用することができない場合もある. この付録では, τ サンプリングのみから $\tau = \pm 0$ の値を求める方法を説明する.

Fermi 粒子の Green 関数で $\tau = 0$ でのとびの大きさが分かっており, さらに $G(\tau) = G(\beta - \tau)$ の関係がある場合には, 精度よく求めることができる. とびの大きさを

$$a = G(\tau = +0) - G(\tau = -0), \quad (86)$$

とする (1 粒子 Green 関数では $a = -1$). このとき, $\tau < 0$ あるいは $\tau > 0$ のどちらかの $G(\tau)$ を a だけシフトすれば, Green 関数の不連続はなくなり, また, $\tau = 0$ での 1 階微分は条件 $G(\tau) = G(\beta - \tau)$ からゼロである. したがって, $G(\tau = \pm 0)$ は区間 $[0, \Delta\tau]$ と $[-\Delta\tau, 0]$ におけるサンプリングから

$$G(\tau = \pm 0) = \frac{1}{2} [G(\Delta\tau/2) + G(-\Delta\tau/2) \pm a], \quad (87)$$

のように求められる. 実際の計算では, 最初から $\tau = 0$ を挟む区間 $[-\Delta\tau, \Delta\tau]$ でサンプリングしてもよい.

$G(\tau) = G(\beta - \tau)$ の関係がなく, とびを取り除いてもなめらかな関数でないときは, 上記の方法では精度が悪い. また, Fermi 粒子 Green 関数の非対角成分や Bose 粒子 Green 関数は, $\tau = 0$ の境界でカスプ状になっており, 上記の方法は使えない. これらの場合, 区間 $[0, \Delta\tau]$ のサンプリングから $\tau = +0$ の値を求めなければならない. そのためのひとつの方法として, 区間を $[0, \Delta\tau/2]$ と $[\Delta\tau/2, \Delta\tau]$ に分割し, それぞれの区間で求めた値から直線外挿することが考えられる. これは図 21(a) の重み $w(\tau)$ でサンプリングすることに相当する. より精度のよい方法は, 重みを連続的に変化させるものである. 重みとして $w(\tau) = a\tau + b$ の形を仮定し, $\int_0^{\Delta\tau} d\tau w(\tau) = 1$ と $\int_0^{\Delta\tau} d\tau \tau w(\tau) = 0$ を課すと

$$w(\tau) = \frac{1}{\Delta\tau} \left[-6 \frac{\tau}{\Delta\tau} + 4 \right], \quad (88)$$

となる (図 21(b)). これらの方法を使うときは, 求めている物理量が区間 $[0, \Delta\tau]$ で直線近似できる程度に $\Delta\tau$ を小さくしなければならない. あまり小さくしすぎると, サンプル数が減り統計誤差が大きくなるので注意が必要である.

以上の方法は, 2 つの変数 τ_1, τ_2 に対して同時に極限を取る場合にも拡張できる. この操作は V 展開で行列 M から 2 体相関関数を計算する際に必要になる (式 (40)). 図 21(a) の 2 変数への拡張は図 22(a) で表される. この重みによるサンプリングは, $\tau_1 = \tau_2$ 上の 2 つの点から直線外挿することに対

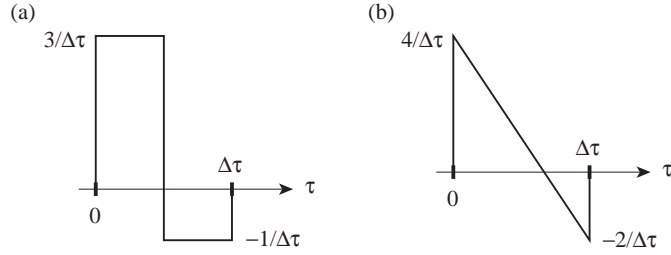


図 21 $\tau = +0$ のサンプリングにおける重み $w(\tau)$ の例.

応する. 式 (88) の方法も 2 変数へ拡張できる. 重みとして $w(\tau_1, \tau_2) = a(\tau_1 + \tau_2) + b$ の形を仮定し, $\int_0^{\Delta\tau} d\tau_1 d\tau_2 w(\tau_1, \tau_2) = 1$ と $\int_0^{\Delta\tau} d\tau_1 d\tau_2 \tau_1 w(\tau_1, \tau_2) = 0$ を課すと

$$w(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{(\Delta\tau)^2} \left[-6 \frac{\tau_1 + \tau_2}{\Delta\tau} + 7 \right], \quad (89)$$

が得られる (図 22(b)). 1 変数の場合と同様に, $\Delta\tau$ を小さくすれば直線近似の精度は上がるが, 一方でサンプル数が減り統計誤差が大きくなるので注意が必要である.

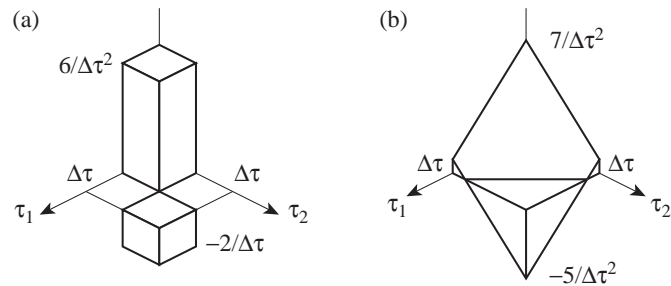


図 22 $\tau_1 = \tau_2 = +0$ のサンプリングにおける重み $w(\tau_1, \tau_2)$ の例.

謝辞

本稿を書くにあたってスイス連邦工科大学の Philipp Werner 氏, コロンビア大学の Emanuel Gull 氏との議論は非常に有益でした. また, 東京大学の加藤雄介氏には本稿の執筆を強く薦めて頂きました. この場を借りて感謝致します. 本稿に関連する研究の一部は, 文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「重い電子系の秩序化」(No. 20102008) を受けて行われました.

参考文献

- [1] J.E. Hirsch and R.M. Fye, Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 2521.
- [2] R.M. Fye and J.E. Hirsch, Phys. Rev. B **38** (1988) 433.
- [3] 羽田野直道, 物性研究 **56** (1991) 459.
- [4] R. Blankenbecler, D.J. Scalapino and R.L. Sugar, Phys. Rev. D **24** (1981) 2278.
- [5] D.J. Scalapino and R.L. Sugar, Phys. Rev. B **24** (1981) 4295.

- [6] K. Mielson, A. Macridin and M. Jarrell, Phys. Rev. E **79** (2009) 057701.
- [7] S. Rombouts, K. Heyde and N. Jachowicz, Phys. Lett. A **242** (1998) 271.
- [8] S.M.A. Rombouts, K. Heyde and N. Jachowicz, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 4155.
- [9] A.N. Rubtsov, V.V. Savkin and A.I. Lichtenstein, Phys. Rev. B **72** (2005) 035122.
- [10] P. Werner, A. Commanac, L. de' Medici, M. Troyer and A.J. Millis, Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 076405.
- [11] P. Werner, A.J. Millis, Phys. Rev. B **74** (2006) 155107.
- [12] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M.J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68** (1996) 13.
- [13] J. Otsuki, H. Kusunose, P. Werner and Y. Kuramoto, J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 114707.
- [14] E. Gull, P. Werner, A. Millis and M. Troyer, Phys. Rev. B **76** (2007) 235123.
- [15] A.M. Läuchli and P. Werner, Phys. Rev. B **80** (2009) 235117.
- [16] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, I.E. Dzyaloshinskii, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Pergamon, 1965)
- [17] A.L. Fetter and J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [18] J.W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley, 1988).
- [19] 永長直人, 物性論における場の量子論 (岩波書店, 1995).
- [20] S. Hoshino, J. Otsuki and Y. Kuramoto, J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 074719.
- [21] J. Otsuki, H. Kusunose and Y. Kuramoto, J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 014702.
- [22] Yoo et al., J. Phys. A: Math. Gen. **38** (2005) 10307.
- [23] P. Werner, 私信.
- [24] K. Haule, Phys. Rev. B **75** (2007) 155113.
- [25] E. Gull, P. Werner, O. Parcollet, and M. Troyer, Europhys. Lett. **82** (2008) 57003.
- [26] H.J. Vidberg and J.W. Serene, J. Low Temp. Phys. **29** (1977) 179.
- [27] M. Jarrell and J.E. Gubernatis, Phys. Rep. **269** (1996) 133.
- [28] M. Potthoff, T. Wegner, and W. Nolting, Phys. Rev. B **55** (1997) 16132.
- [29] E. Gull, Ph.D Thesis (ETH Zürich 2008).
- [30] 戸川隼人, マトリクスの数値計算 (オーム社, 1971).
- [31] 田口善弘, 西森秀稔, 物性研究 **45** (1986) 299.
- [32] 西森秀稔, 物性研究 **56** (1991) 494.
- [33] E.R. Gagliano and C.A. Balseiro, Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 2999.
- [34] P. Werner and A.J. Millis, Phys. Rev. Lett. **99** (2007) 146404.
- [35] F.F. Assaad and T.C. Lang, Phys. Rev. B **76** (2007) 035116.
- [36] P. Werner, T. Oka, and A.J. Millis, Phys. Rev. B **79** (2009) 035320
- [37] P. Werner, T. Oka, M. Eckstein, and A.J. Millis, Phys. Rev. B **81** (2010) 035108.
- [38] L.V. Keldysh, Sov. Phys. JETP **20** (1965) 1018.
- [39] J. Rammer, Rev. Mod. Phys. **58** (1986) 323.
- [40] K.-C. Chou, Z.-B. Su, B.-L. Hao and Y. Lu, Phys. Rep. **118** (1985) 1.
- [41] 藤井達也, 物性研究 **93** (2009) 1.

- [42] G. Li, W. Hanke, A.N. Rubtsov, S. Bäse, and M. Potthoff, *Phys. Rev. B* **80** (2009) 195118.
- [43] E. Gull, A.J. Millis, A.I. Lichtenstein, A.N. Rubtsov, M. Troyer and P. Werner, *Rev. Mod. Phys.*, to be published.
- [44] E. Müller-Hartmann, *Z. Phys. B* **74** (1989) 507.
- [45] K. Byczuk and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **77** (2008) 235106.
- [46] W.T. Vetterling, B.P. Flannery, W.H. Press and S.A. Teukolski, *Numerical Recipes in FORTRAN - The Art of Scientific Computing*, Second Edition (University Press, Cambridge, 1992), chapter 2.7 - Inversion by Partitioning.