

長距離相関効果を考慮した動的平均場法の拡張理論 —強相関電子系の遍歴・局在双対性と超伝導—

東北大学大学院理学研究科 大槻純也
明治大学理工学部 楠瀬博明

1 はじめに

遷移金属化合物や希土類化合物、アクチナイド化合物などの d 電子系や f 電子系では、大きい角運動量に由来する軌道縮退とそれら電子の間に働く強いクーロン斥力により、モット転移や重い電子状態、また様々な超伝導や磁性、軌道秩序が起こる。このような強相関電子系の理論研究においては、平均場近似を超えた多体効果の扱いが重要となる。

動的平均場理論はモット絶縁体や重い電子状態の記述において成功を取めている近似理論であり、その他にも数多くの系に応用されている^{*1}。例を挙げると、光学格子中の冷却原子や人口超格子などの空間的に不均一な系 [8]、非平衡系 [9, 10] などがある。また、近年では第一原理計算と組み合わせることで物質の詳細を考慮した多体電子状態計算にも応用されており、更なる発展が期待される [11–14]。このように動的平均場理論は非常に実用性の高い近似理論である一方、空間相関を無視するという近似のために記述できない現象ももちろんある。その代表例が d 波などの異方的なペア対称性を持つ非従来型の超伝導である。

モット絶縁体や重い電子状態の研究で有用な動的平均場理論を拡張し、非従来型超伝導等を扱えるようにする試みは動的平均場理論が広まった初期の頃から数多くなされている。その代表例はいわゆるクラスター動的平均場法で、銅酸化物超伝導体における d 波超伝導や低ドーブ域の電子状態の研究に盛ん

に応用されている。この理論が短距離相関を考慮する狙いがあるのに対して、それとは対照的に長距離相関を考慮した拡張理論が比較的最近になってから考案されている [15–19]。本稿で紹介するデュアルフェルミオン法 [17, 20] はそのうちのひとつで、動的平均場近似を出発点として有効的な残留相互作用を摂動論により取り込む処方箋を与える。この摂動論は局所相関効果を既に取り込んだ状態を出発点としており、その意味で微視的理論に基づいた「準粒子展開」ということができる。

重い電子系の超伝導の議論において、この拡張理論の有用性が最も顕著に現れる。その記述には、重い準粒子状態の形成に本質的な局所相関と超伝導を誘起する長距離の磁気揺らぎの両方を考慮する必要があるからである。これまでの理論はそのどちらか一方を重点的に扱うものであった。デュアルフェルミオン法ではそれらを統一的かつ系統的に取り扱うことができ、「本当の意味」での重い電子超伝導の微視的な計算が可能になる。

重い電子系の基本的模型である近藤格子模型にデュアルフェルミオン法を適用することで、反強磁性量子臨界点近傍において、 d 波超伝導とは異なる非自明なペア対称性を持つ超伝導が実現することが明らかにされた [21]。この結果は、 f 電子の遍歴・局在双対性によるものであり、これまでの超伝導理論では考慮されていない要素を含んでいる。これに関する計算結果を本稿の後半で紹介する。

以下の節では、まず第 2 節で各種理論の位置付けについて述べた後、第 3 節と第 4 節で、動的平均場理論とその拡張理論に関してそれぞれ解説をする。ハバード模型と近藤格子模型に適用した数値計算結果

^{*1} 動的平均場理論関連の文献は数多く存在するが、ここでは総説や書籍として [1–4]、読み物として [5, 6]、日本語の解説として [7] を挙げておく。

を第 5 節, 第 6 節で紹介する. 前半の手法解説と後半の数値結果は独立した構成になっているので, 興味に応じて好きなところから読み始めていただきたい.

2 理論の位置付け: 化合物の多体電子状態計算にむけて

動的平均場法とその拡張理論の解説に入る前に, 大局的な視点からそれら理論の位置付けについて述べておこう. 動的平均場近似の応用は単なるモデル計算に留まらない. 第一原理計算との組み合わせによる化合物の多体電子状態計算が近年著しい発展を見せている. いわゆる DFT+DMFT 法である [11–14]. これにより, それまで互いに相容れなかった強相関係のモデル計算と第一原理計算とが融合されつつある. この理論は, これまで寿命を無限大としていた一粒子状態に有限の寿命を与えるだけでなく, 強相関係に特徴的なスペクトル空間における強度の再配分も考慮されるので, バンド計算そのものの適用範囲を大きく広げる可能性を秘めている.

バンド構造は一粒子励起から計算されるが, 磁気秩序や超伝導転移に関する情報は二粒子相関 $\chi(i\nu, \mathbf{q})$ の静的極限によって議論される. 第一原理計算により得られたバンド構造を $\chi(i\nu, \mathbf{q})$ の計算に用いる方法は, 近年の超伝導の理論研究においては標準的になっている. 超伝導の性質はフェルミ面の構造に敏感であり, 化合物のバンド構造を考慮に入れることが実験との比較において必須となるためである. この計算法が鉄系超伝導体の発見当初から主要な役割を演じたことは記憶に新しい. また, その研究で確立した方法論は, f 電子系の多極子秩序の研究にも応用され始めている [22].

本稿で紹介するデュアルフェルミオン法は上記の 2 つの異なる理論的枠組みの橋渡しをすることを目的としている. すなわち, 物質の詳細と多体効果を考慮した多体電子状態を元にして磁性や超伝導の計算を行うという壮大な理論体系の一角を担おうとしている. この視点からの各種理論の位置付けを第 1 図にまとめた. デュアルフェルミオン法の現段階での応用はモデル計算に限定されているが, それは強相関化合物における磁性や超伝導の第一原理計算にむ

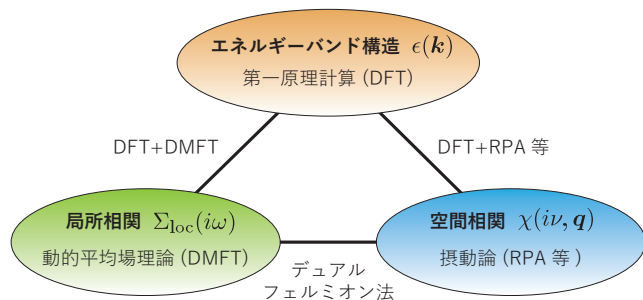


図 1 各種理論の位置付け.

けた重要なワンステップであることをここで強調しておきたい.

3 動的平均場理論の周辺

3.1 動的平均場理論の概略

この節では, 動的平均場理論について最小限の解説をする. 専門外の読者でも読み進められるように数式を必要最小限にとどめ, 元の格子模型がどのような有効模型に置き換えられるかのみに注目する. 詳細については冒頭で挙げた文献を参照してほしい.

モデルハミルトニアンとして

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_i \mathcal{H}_i^{(\text{int})} \quad (1)$$

を考える. ここで, i, j は格子点のインデックス, σ はスピンの z 成分, t_{ij} は跳び移り積分の行列要素, $c_{i\sigma}^\dagger$ と $c_{j\sigma}$ はそれぞれ生成演算子と消滅演算子を表す. 第 2 項の $\mathcal{H}_i^{(\text{int})}$ は局所的な相互作用を表す. 本稿で扱うのは単一バンドのハバード模型と近藤格子模型であるが, デュアルフェルミオン法を用いる際には軌道自由度があってもよいし, ホルスタイン模型のように局所フォノンとの結合があっても問題ない. ただし, 相互作用は局所的なものに限る.

相互作用 $\mathcal{H}_i^{(\text{int})}$ の効果を取り込んだグリーン関数 $G(i\omega, \mathbf{k})$ を求めること, あるいは同じことであるが, その自己エネルギー部分 $\Sigma(i\omega, \mathbf{k})$ を求めることがゴールである. 動的平均場理論では自己エネルギーの波数依存性を無視し, $\Sigma(i\omega, \mathbf{k}) \approx \Sigma_{\text{loc}}(i\omega)$ と局所的な量で近似する. この近似の元でのグリーン関

数は

$$G^{(\text{DMFT})}(i\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{i\omega + \mu - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\text{loc}}(i\omega)} \quad (2)$$

で与えられる．ここで， ω はフェルミオンに対する松原振動数， $\mathbf{k}$ は波数ベクトルである．これは非常に大胆な近似であるが，あとで述べるように，振動数依存性が本質的な役割を果たすモットギャップや重い電子状態の記述に対しては良い近似になっている．この近似の範囲で自由エネルギーが極小となる最適な $\Sigma_{\text{loc}}(i\omega)$ を決定する処方箋を与えるのが動的平均場理論である．

動的平均場理論や次節のデュアルフェルミオン法においては分配関数の経路積分表示を用いるのが便利である．経路積分表示では自由度の消去や新たな自由度の導入が容易にできるというのがその理由であるが，ここでは単に（有効）模型とグリーン関数との対応を見るためにこの表示を用いる．(1) 式のハミルトニアンに対応する作用 $\mathcal{S}$ は，生成・消滅演算子に対応するグラスマン数を c^*, c として

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = & - \sum_{ij\sigma\omega} c_{i\sigma}^*(i\omega)(i\omega + \mu - t)_{ij}c_{j\sigma}(i\omega) \\ & + \sum_i \int d\tau \mathcal{H}_i^{(\text{int})}(\tau) \end{aligned} \quad (3)$$

と表される．第 1 項の括弧の中身が相互作用のない場合の松原グリーン関数 $G_0^{-1}(i\omega, \mathbf{k}) = i\omega + \mu - \epsilon(\mathbf{k})$ のフーリエ変換になっていることに注目してほしい．この模型を第 2 図 (a) のように表現することにする．

自己エネルギーの局所近似と対応して，作用を各格子点の寄与の和 $\mathcal{S} \approx \sum_i \mathcal{S}_i^{(\text{imp})}$ と近似する．ここで，格子点 i の寄与 $\mathcal{S}_i^{(\text{imp})}$ は

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_i^{(\text{imp})} = & - \sum_{\sigma\omega} c_{i\sigma}^*(i\omega)[i\omega + \mu - \Delta(i\omega)]_{ii}c_{i\sigma}(i\omega) \\ & + \int d\tau \mathcal{H}_i^{(\text{int})}(\tau) \end{aligned} \quad (4)$$

で与えられる．これを元の作用 $\mathcal{S}$ と比較すると，電子の運動を表す t_{ij} が動的な局所ポテンシャル $\Delta(i\omega)$ で置き換えられていることが分かる．これは注目する格子点 i 以外における多体効果を局所的な平均場に押し込めたことになる．ただし，ポテンシャル $\Delta(i\omega)$ が振動数依存性を持つことから，この局所近

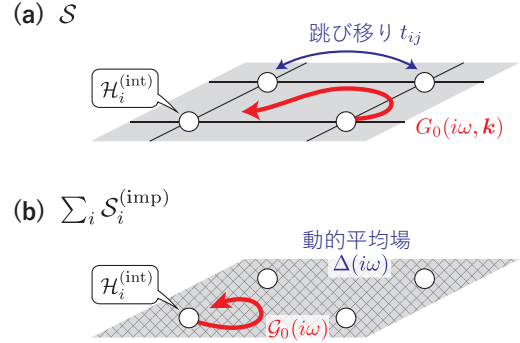


図 2 動的平均場理論の概念図．(a) 元の格子模型．各格子点の電子は跳び移り積分 t_{ij} で結ばれ，それぞれの格子点で $\mathcal{H}_i^{(\text{int})}$ に従い相互作用をする．(b) 局所近似による有効不純物模型．各格子点が動的平均場 $\Delta(i\omega)$ の中に独立に存在する．

似は動的平均場近似と呼ばれる．第 2 図 (b) はこの有効模型を表現したものである．自己無撞着条件を満たすように $\Delta(i\omega)$ を調整すると，この有効模型における自己エネルギーが，元の格子模型の局所自己エネルギー $\Sigma_{\text{loc}}(i\omega)$ の最適解となる^{*2}．

(4) 式の作用は磁性不純物の近藤問題に関連して研究されたアンダーソン模型の作用と同型である．これは第 1 項の括弧内が相互作用のないアンダーソン模型におけるグリーン関数 $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu - \Delta(i\omega)$ と同じ形を持つことから分かる．この模型は多体問題であるため解析的には解けないが，元の模型よりは遥かに簡単になっている．この有効模型を解く数値計算手法は現在までに数多く考案されており，数値的に厳密な解を得ることが可能である．標準的な手法は，有限温度では連続時間量子モンテカルロ法 (CTQMC 法) [23, 24]，絶対零度では数値繰り込み群法 [25, 26] である．

ここで動的平均場理論における局所近似の物理的側面について述べておこう．この近似で実際に解くアンダーソン模型の基底状態は局所フェルミ液体であることが知られており， Σ_{loc} は実軸上の振動数 $\omega = 0$ 付近で $\text{Im } \Sigma_{\text{loc}}(\omega) \propto \omega^2$ の依存性を持つ^{*3}．

^{*2} 自己無撞着条件は $\langle G^{(\text{DMFT})}(i\omega, \mathbf{k}) \rangle_{\mathbf{k}} = g(i\omega)$ で与えられる．ここで，左辺の括弧は波数に関する平均を， $g(i\omega)$ は有効不純物模型のグリーン関数を表す．

^{*3} これには $\Delta(\omega)$ が低エネルギーで特異性を持たないという前提がある．モット絶縁体では $\Delta(\omega)$ が低エネルギーで

これを元の格子模型に戻って考えると、局所相関を取り込んだフェルミ液体状態を記述していることになる。一方、ハバードギャップは $\text{Im} \Sigma_{\text{loc}}(\omega)$ のピーク構造により記述される。このように自己エネルギーの振動数依存性から低エネルギーのフェルミ液体状態（遍歴状態）のみならず高エネルギーのインコヒーレント状態（局在状態）も記述することができ、実際、自己無撞着に求めた $\Sigma_{\text{loc}}(i\omega)$ はこれらのどちらか、あるいは両者の性質を併せ持ったような関数形を示す。他方、自己エネルギーの波数依存性を無視しているために、空間相関に関しては（静的な）平均場近似のレベルでしか考慮されていないことは先にも述べたとおりである。

3.2 動的平均場近似を超える試み

動的平均場近似を元にして空間相関を考慮する拡張理論は大きく分けて2つのグループに分けられる。ひとつめは、いわゆるクラスター動的平均場法 [6, 27] である。自己無撞着条件や媒質の取り方の違い等により、動的クラスター近似 (DCA) [28]、セラー動的平均場理論 (CDMFT)、自己エネルギー汎関数理論 (SFT) [29] に基づいた変分クラスター近似 (VCA) [30] などがある。このように多くの別法が存在するが、格子模型を動的平均場中の数個の格子点で置き換えるという基本的な考え方は共通している。この動的平均場中のクラスター問題を数値計算で解くことにより、局所相関に加えてクラスター内の短距離相関が考慮される。例えば、クラスターとして4つ以上の格子点を含むように取ると d 波超伝導を記述することが可能となる。ただし、結果はクラスターのサイズに依存し、長距離の揺らぎが考慮されていないために秩序を過大評価する傾向にある [31]。

一方、本稿で紹介するのは、格子系のダイアグラム展開などと組み合わせることにより空間相関を取り込む拡張理論である [15–19]。クラスター動的平均場理論を「実空間の拡張理論」とすると、こちらは「波数空間の拡張理論」と呼ぶことができる。物理的には前者が短距離相関を取り込む近似であるのに対し、

後者は長距離相関を取り込む狙いがある。強相関系の電子状態は局在的なインコヒーレント状態と遍歴的なコヒーレント状態の両方の性質を併せ持っているという特徴がある。別の言葉で言うと、実空間に局在した状態と波数空間に局在した状態の両方の側面を備えている。したがって、実空間の局在状態を出発点とする動的平均場理論に弱相関理論の要素を加える波数空間の拡張理論が強相関系の記述に有効なアプローチであることが期待される。また、反強磁性等の（量子）臨界点の近傍で重要となる長距離相関を考慮する拡張としても自然な流れである。

波数空間の拡張理論では、動的平均場近似で得られた解を使って、再度、格子模型を何らかの近似で解く。その際、相互作用を二重に勘定してしまわないような配慮が必要になる。上記の文献ではそのための様々な工夫がなされているが、中でもデュアルフェルミオン法 [17] は二重数えを回避しつつ、系統的に空間相関を取り込む一般的な枠組みを与える拡張性の高い理論である。

4 デュアルフェルミオン法

この節ではデュアルフェルミオン法と呼ばれる動的平均場法の拡張理論について、考え方を中心に解説をする。読みやすさを優先するため、本文中では一切の数式を省き、必要最小限の式のみを脚注に記載している。そのため、正確性は多少犠牲になることをご容赦願いたい。定式化の詳細は文献 [17, 20] を参照されたい。

4.1 補助フェルミオン変換

動的平均場近似の拡張理論を構築するには、動的平均場近似がどのように導出されるかを理解することが重要である。導出法には様々あり、導出法ごとに拡張理論があるといってもよい。デュアルフェルミオン法ではどのような条件下で動的平均場近似に帰着するのかに着目して読み進めていただきたい。第3図 (a) に改めて模型を図示しておく。

デュアルフェルミオン法では、電子の格子点間の跳び移り（(1) 式の右辺第1項）を媒介する補助粒子を導入する。補助粒子といえば、通常はクーロン相互作用のようなボゾン演算子の積（フェルミオン演

$\Delta(\omega) \propto 1/\omega$ のように発散し、それにより局所フェルミ液体とは異なる解が得られる。

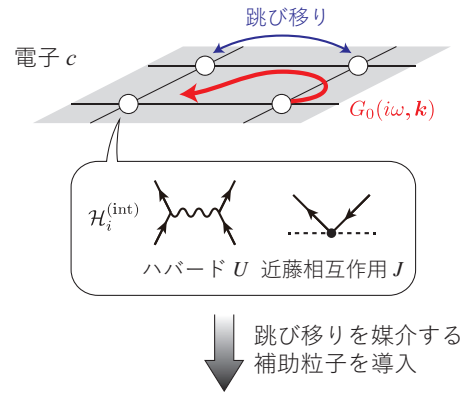
算子 4 つの積) を分解する際に導入するのが一般的である^{*4}。この場合、補助粒子はボゾンで記述される。一方、電子の運動エネルギーはフェルミオン演算子の二次形式なので、それを媒介する補助粒子もフェルミオンである。これをデュアルフェルミオンと呼んでいる。以下では電子を c 、デュアルフェルミオンを d で表す。

この変換により c の直接の跳び移りがなくなり、局所的になることが重要な点である [第 3 図 (b)]。すなわち、 c は d と各格子点において混成し、 d が格子点間を移動する。この c 変数に関する局所性のため、 c の自由度を各格子点において形式的に積分することができる。これが動的平均場理論で有効不純物問題を解くことと対応している^{*5}。実際には解析的に積分することはできないので、何らかの数値計算手法を援用してグリーン関数などの物理量を数値的に計算する。

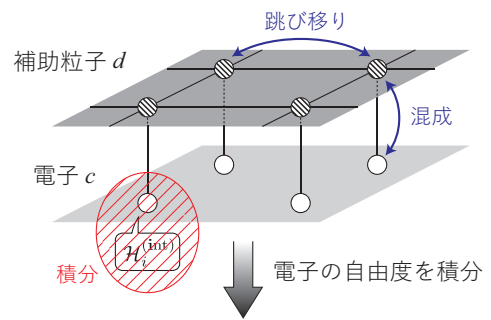
以上の操作により c 変数を消去した結果、 d 変数のみの有効格子模型が得られる [第 3 図 (c)]。この有効模型は $\mathcal{H}_i^{(\text{int})}$ の効果を取り込んだ結果得られたものであり、その意味で d 粒子は局所相関をまとった「準粒子」の役割をする^{*6}。実際、 d 粒子の残留相互作用を含まない裸のグリーン関数 $\tilde{G}_0(i\omega, \mathbf{k})$ は (2) 式で与えられる動的平均場近似の格子グリーン関数 $G^{(\text{DMFT})}(i\omega, \mathbf{k})$ を含み、モットギャップや重い電子状態の特徴を既に備えている^{*7}。

準粒子間の「残留相互作用」の役割をするのは、有効不純物模型における 4 点バーテックス $\gamma^{(4)}$ である。この有効相互作用もグリーン関数 $\tilde{G}_0$ と同様に $\mathcal{H}_i^{(\text{int})}$ の局所的なプロセスをすべて含んだものである。このことを反映して、 $\gamma^{(4)}(i\omega, i\omega'; i\nu)$ は 3 つの

(a) 元の格子模型



(b) 補助粒子による表現



(c) 補助粒子のみの格子模型

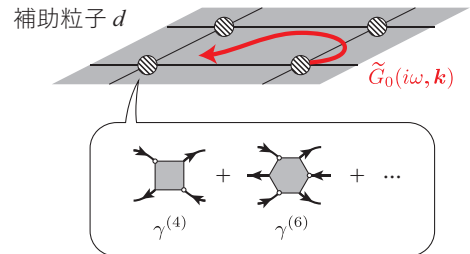


図 3 デュアルフェルミオン法の概念図. (a) 元の格子模型 (第 2 図 (a) と同じ). (b) 補助粒子による表現. 補助粒子 d が電子 c の跳び移りを媒介する. (c) 補助粒子のみの格子模型. 元の格子模型と比べて、グリーン関数 G_0 が $\tilde{G}_0$ に、相互作用 $\mathcal{H}_i^{(\text{int})}$ が $\gamma^{(4)} + \gamma^{(6)} + \dots$ に置き換わった。

^{*4} 例えば、ハバード模型におけるストラトノビッチ・ハバード変換 [32] がある。

^{*5} 実際には、動的平均場理論を再現するように動的平均場 $\Delta(i\omega)$ を導入する必要がある。詳細は文献 [17, 20] を参照されたい。

^{*6} 通常の準粒子は低エネルギーのコヒーレント部分を指す用語であるが、本稿では局所相関効果を取り込むことで生じるインコヒーレント部分も含んだスペクトル全体を指す意味で用いる。

^{*7} $\tilde{G}_0$ は $\tilde{G}_0(i\omega, \mathbf{k}) = G^{(\text{DMFT})}(i\omega, \mathbf{k}) - g(i\omega)$ で定義される。

振動数に依存する動的な相互作用になっている。なお、 d 粒子間の相互作用には上記の二体相互作用だけではなく三体以上の相互作用 $\gamma^{(6)}$, $\gamma^{(8)}$, $\dots$ も現れる。これは、電子 c に関する積分がガウス積分ではないために、4 次以上のキュムラントが残ることによる。

4.2 摂動展開

以上の手順により，元の電子 c の格子模型 [第 3 図 (a)] が補助フェルミオン d の有効格子模型 [第 3 図 (c)] に変換された．ここまでは厳密な変換であることを強調しておく．繰り返しになるが，この変換のメリットは，有効不純物模型を数値的に解くことにより局所相関を厳密に考慮している点にある．局所相関の情報は d 粒子の裸のグリーン関数 $\tilde{G}_0(i\omega, \mathbf{k})$ と有効相互作用 γ に取り込まれている．一方，その代償は有効相互作用が振動数依存性を持つことと二体相互作用だけでなく多体の相互作用が現れることである．

以下では，この有効格子模型に近似を適用するが，その前に，いくつかのコメントを述べておこう．(i) 相互作用 γ の効果を含んだ d 粒子のグリーン関数 $\tilde{G}(i\omega, \mathbf{k})$ と元の電子のグリーン関数 $G(i\omega, \mathbf{k})$ とは厳密な関係式で結ばれている^{*8}．(ii) この関係式において， $\tilde{G}$ を相互作用 γ の効果を含まない裸のグリーン関数 $\tilde{G}_0$ で置き換えると， G の表式は動的平均場近似におけるグリーン関数 $G^{(\text{DMFT})}$ ((2) 式) に帰着する．このことは， d 粒子の自己エネルギー $\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k})$ が動的平均場近似に対する補正を与えることを意味する．もしくは，より象徴的に

$$\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k}) = 0 \Leftrightarrow \text{動的平均場近似} \quad (5)$$

と表すこともできる．(iii) $\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k})$ に対し通常のファインマンダイアグラムの方法を適用することができる．ダイアグラムを構成する要素は $\tilde{G}_0$ (あるいは $\tilde{G}$) と γ である．これらの量は元の相互作用 $\mathcal{H}_i^{(\text{int})}$ に関する局所的なプロセスを全て含んだものであるが，それらから構成されるダイアグラムでは $\mathcal{H}_i^{(\text{int})}$ に関する二重数えが自動的に排除されるようになっている^{*9}．そのため，二重数えの心配をすることなく，空間相関を系統的に取り込むことができる．

^{*8} 厳密な関係式は $G(i\omega, \mathbf{k})^{-1} = g'(i\omega, \mathbf{k})^{-1} + \Delta(i\omega) - \epsilon(\mathbf{k})$ で与えられる．ここで， $g'(i\omega, \mathbf{k}) = g(i\omega) + g(i\omega)\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k})g(i\omega)$ である．この式から $\tilde{\Sigma}$ が g に対して T 行列のような役割をしていることが分かる．

^{*9} これは $\tilde{G}_0$ の定義式において局所的な寄与が除かれているためであるが，それが定式化において自然と導かれるのがこの方法の良い点である．

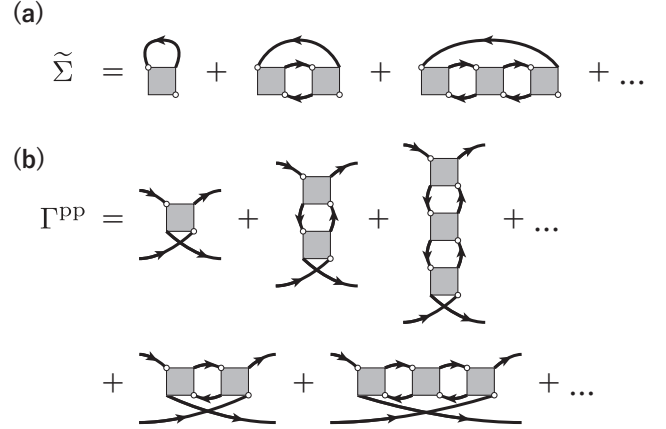


図 4 梯子近似による骨格ダイアグラム．(a) デュアルフェルミオンの自己エネルギー $\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k})$ ，(b) 超伝導感受率の既約バーテックス $\Gamma^{\text{PP}}(i\omega, \mathbf{k}, i\omega', \mathbf{k}'; i\nu, \mathbf{q})$ ．実線と四角はそれぞれグリーン関数 $\tilde{G}(i\omega, \mathbf{k})$ と局所バーテックス $\gamma^{(4)}(i\omega, i\omega'; i\nu)$ を表す．

ここから有効格子模型に対し 2 つの近似を適用する．まず最初に， d 粒子間の三体以上の相互作用を無視する．この近似は， γ に関する展開を動的平均場近似が厳密になる空間次元 $D = \infty$ からの展開と見たときに， $1/D$ に関して主要な補正項の中に二体相互作用しか現れないことから正当化される [20]．また，主要な補正が二体相互作用によって与えられ，三体以上の相互作用の影響は小さいことが数値計算によって確かめられている [33]．

そこで，三体以上の相互作用を無視し，二体相互作用 $\gamma^{(4)}$ のみを持つ有効格子模型に対して摂動論を適用する． $\gamma^{(4)}$ に関する適当なダイアグラム和を計算するのがふたつめの近似である．この近似は，今考えている有効模型では強相関効果が既に $\tilde{G}_0(i\omega, \mathbf{k})$ に取り込まれているために残留相互作用 $\gamma^{(4)}$ の効果は摂動的に扱ってよい，という考えに基づいている．磁気相転移等の量子臨界点近傍では電子・正孔対の揺らぎが発散的に増大するので，第 4 図 (a) で表される梯子型のダイアグラムが自己エネルギー $\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k})$ の主要項となる [20, 33]．なお，摂動論におけるベイム・カダノフの保存近似の考えから， $\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k})$ を構成するグリーン関数として $\tilde{G}_0$ ではなく $\tilde{G}$ を用いている．この近似における超伝導揺らぎの既約バーテッ

クス Γ^{PP} は第 4 図 (b) で与えられる。

4.3 実際の計算

ここで、(有効) 模型間の関係をまとめておこう (第 5 図)。デュアルフェルミオン法では元の模型を 2 つの有効模型に置き換えて解く。その際、有効不純物模型で相互作用 $\mathcal{H}_i^{(\text{int})}$ を、有効格子模型で運動エネルギー $\epsilon(\mathbf{k})$ を考慮する。前者の有効模型は実空間表示、後者は波数空間表示であることに注目してほしい。このように実空間と波数空間を行き来することで、強相関系に特有の局在と遍歴の両方の性質を考慮している。

実際に数値計算を行う際の手順は以下のようになる (第 5 図)。まず、 $\Delta(i\omega)$ として適当な関数形を初期値として仮定し、相互作用 $\mathcal{H}_i^{(\text{int})}$ と合わせて有効不純物模型を定義する。動的平均場近似の場合と同様に数値計算法を用いてこの有効不純物模型を解く。ただし、一粒子グリーン関数 (あるいは自己エネルギー $\Sigma_{\text{loc}}(i\omega)$) だけでなく、二粒子グリーン関数 (あるいはバーテックス $\gamma^{(4)}(i\omega, i\omega'; i\nu)$) も計算する点が動的平均場近似と異なる。これらの量により補助粒子 d で書かれた有効格子模型が定義される。 d 粒子のグリーン関数 $\tilde{G}_0(i\omega, \mathbf{k})$ は元の模型の運動エネルギー $\epsilon(\mathbf{k})$ を反映した波数依存性を持つ。相互作用 $\gamma^{(4)}$ の効果を摂動論などの近似法により評価し、 d 粒子の自己エネルギー $\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k})$ を計算する。ここで、第 4 図 (a) のような骨格ダイアグラムの場合には、 $\tilde{G}$ と $\tilde{\Sigma}$ も自己無撞着に解く。その後 $\Delta(i\omega)$ を更新し、自己無撞着条件が満たされるまで上記の手順を繰り返す^{*10}。既に述べたように、元の格子模型のグリーン関数 $G(i\omega, \mathbf{k})$ は $\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k})$ (または $\tilde{G}(i\omega, \mathbf{k})$) から厳密な関係式によって得られる。元の格子模型の感受率などの二体の物理量についても、同様の関係式によって変換することができる [34]。

以下の節では、デュアルフェルミオン法を 2 次元正方格子上的ハバード模型と近藤格子模型に適用した計算例を順に紹介する。なお、それらの計算で

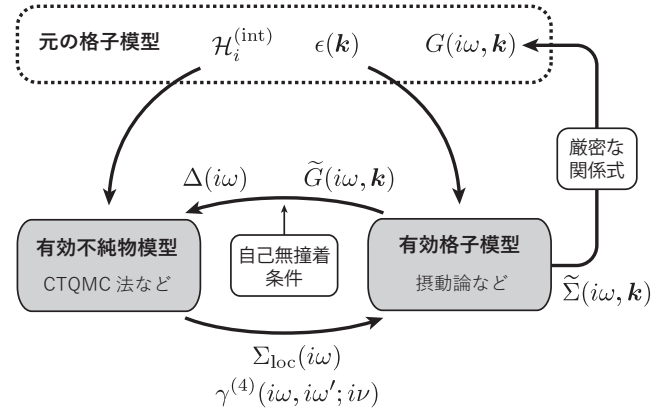


図 5 計算手順の流れ図。2 つの有効模型を数値的に自己無撞着に解く。矢印は模型間の入出力の関係を表す。

は、特に断りのない限り、連続時間量子モンテカルロ法 [23, 24] を使って有効不純物問題を解き、 $\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k})$ としては第 4 図 (a) に示した梯子型の骨格ダイアグラムを考慮している。

5 応用例 1 : ハバード模型

正方格子上のハバード模型は、銅酸化物高温超伝導体との関連から広く興味をもたれており、長年の研究の積み重ねがある強相関模型である。よって、新しい近似手法をまずこの模型に適用し、その近似の妥当性や実用性を検証することが広く行われている。ハバード模型の相互作用は

$$\mathcal{H}_i^{(\text{int})} = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (6)$$

で与えられる。運動エネルギー項は近接格子点のホッピングのみを考慮した $\epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$ とし、 $t = 1$ をエネルギーの単位とする。

5.1 自己エネルギー

まずは自己エネルギー $\Sigma(i\omega, \mathbf{k})$ の振る舞いから見ていこう。第 6 図はハーフフィルドの電子密度についてフェルミ準位上における Σ の虚部の波数依存性を図示したものである。補助粒子 d の自己エネルギー $\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k})$ としては、2 次のダイアグラム (第 4 図 (a) の第 2 項) まで取り入れた計算結果である。弱相関の金属領域では、 $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ まわりで大きい値を示す [第 6 図 (a)]。これはファン・ホーブ特

^{*10} 自己無撞着条件は $\langle \tilde{G}(i\omega, \mathbf{k}) \rangle_{\mathbf{k}} = 0$ で与えられる。この条件は $\tilde{\Sigma}(i\omega, \mathbf{k}) = 0$ のときに動的平均場理論の自己無撞着条件と一致する。また、この条件はハートリー項 (第 4 図 (a) の第 1 項) の寄与をゼロにするという物理的意味もある。

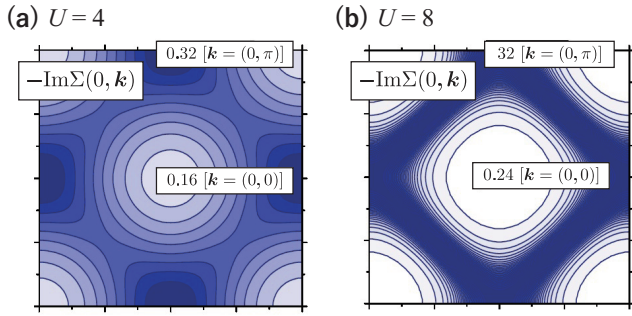


図 6 フェルミ準位における自己エネルギー $\Sigma(0, \mathbf{k})$ の虚部の波数依存性. (a) 弱相関領域の金属相と (b) 強相関領域のモット絶縁体相における結果. 文献 [17] より.

異性を反映しており，弱相関理論の結果と定性的に同じである．一方，強相関領域では $(\pi, 0)$ と $(0, \pi)$ を結ぶフェルミ面上全体で $\text{Im} \Sigma$ が大きな値をとる [第 6 図 (b)]．これは $\Sigma \sim 1/i\omega$ で表される発散を捉えたもので，モット絶縁体の特徴である．動的平均場近似でも Σ は同様の発散を示すが， Σ の波数依存性がないためにすべての波数で発散する．以上の結果から，デュアルフェルミオン法による自己エネルギーはフェルミ面の構造 ($\mathbf{k}$ 依存性) と強相関効果 (ω 依存性) の両方の特徴を兼ね備えていることが確認できる．

5.2 反強磁性

次に二粒子相関を見てみよう．これ以降の結果はすべて第 4 図の梯子近似によるものである．本節のハバード模型ではハーフフィルドの時，完全なネスティングのために強い反強磁性揺らぎを示す．しかし，2次元系では強い反強磁性揺らぎのために，長距離秩序状態は不安定となり，結果として有限温度での相転移が起こらないことが知られている [35]．これは厳密な定理であるが，それを満たすような近似理論を構成するのは容易なことではなく，この定理を満たしているかが主要な揺らぎを正しく取り込んでいるかどうかの良い指標となる．

第 7 図は反強磁性帯磁率 χ_{AFM} の逆数の温度依存性である．比較のため動的平均場近似の結果も示している．動的平均場近似の結果はキュリー・ワイス則 $1/\chi_{\text{AFM}} \propto T - T_{\text{AFM}}$ に従い有限温度で反強磁性転

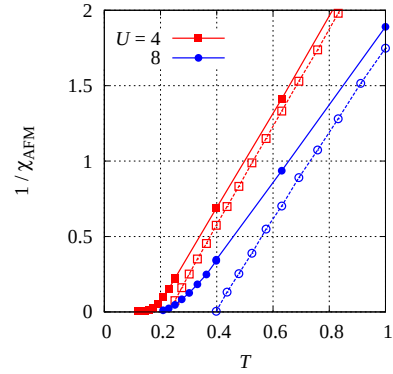


図 7 反強磁性帯磁率の温度依存性．実線がデュアルフェルミオン法による結果，点線が動的平均場近似による結果である．文献 [20] より．

移を示すのに対し，デュアルフェルミオン法では低温で揺らぎが抑えられているのが分かる．低温部分のより詳細な解析から， χ_{AFM} が $T = 0$ に向かって指数関数的に発散する振る舞いが確認されている [20]．また，解析が比較的容易な Falicov-Kimball 模型において相転移の臨界指数が調べられており，厳密な値と一致する結果が得られている [36]．以上のように，デュアルフェルミオン法と梯子近似によって，臨界点近傍で重要となる主要な長距離揺らぎが適切に取り込まれているとみてよいだろう．

5.3 超伝導

最後に超伝導について述べる．超伝導転移は常伝導状態における超伝導ペア感受率の発散から調べることができる．実際の計算手順は揺らぎ交換近似などの場合と同様にして，粒子・粒子相関関数のベータ・サルペーター方程式を線形化して固有値問題として取り扱う^{*11}．固有値 λ^{SC} が揺らぎの大きさを表し，最大固有値が 1 に達する温度が超伝導転移に対応する．ギャップ関数の対称性は対応する固有関数 $\phi(i\omega, \mathbf{k})$ から分かる．

第 8 図は固有値 λ^{SC} の温度依存性である．既約バーテックス Γ^{PP} としては第 4 図 (b) のダイアグラムを考慮している．スピン対称性と空間対称性で分

^{*11} BCS 理論の線形化ギャップ方程式に対応する．固有値方程式は振動数と波数をまとめて $k = (i\omega, \mathbf{k})$ と表すと， $-(T/N) \sum_{k'} \tilde{G}(k) \tilde{G}(-k) \Gamma^{\text{PP}}(k, k'; 0) \phi(k') = \lambda^{\text{SC}} \phi(k)$ である．

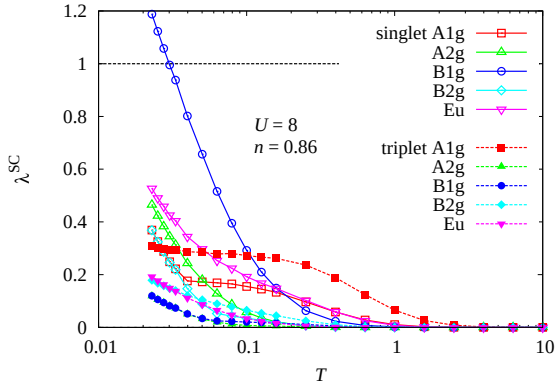


図 8 超伝導揺らぎの大きさを示す無次元量 λ^{SC} . $\lambda^{\text{SC}} = 1$ が超伝導転移に対応する．実線はスピン一重項ペア，点線はスピン三重項ペアを表す．文献 [20] より．

類された 10 個のペア対称性のそれぞれについて，最大の固有値を図示した．第 9 図が対応するギャップ関数の波数依存性である．2 次元ハバード模型で実現すると考えられているスピン一重項の $d_{x^2-y^2}$ 波 (B_{1g}) が，実際にデュアルフェルミオン法による計算で得られることが第 8 図から分かる．この結果は定性的には既知の結果を再現しているに過ぎないが，転移温度は相関効果を反映して大きく抑制されている．また，比較的高温で弱相関の近似では見られない奇周波数の拡張 s 波三重項 (A_{1g}) が発達している点にも注意して欲しい．一般に，強い振動数依存性を持つ揺らぎは奇周波数ペアに有利に働き，デュアルフェルミオン法ではそのような効果が適切に取り入れられているのである．この点は，次節の近藤格子模型における超伝導において重要になる．

ここで紹介した結果の他にも，異方的電荷密度波や相分離などが調べられ，多くの数値計算と定性的に矛盾のない結果が得られている [20]．特に，低ドーピング領域における相分離の存在のために，純粋な超伝導は狭いドーピング領域でしか実現しないという結果は，最近の多変数の変分計算 [37] と一致する結論である．以上のことから，デュアルフェルミオン法による梯子近似は強相関系の超伝導を適切に議論できる強力な手法であると言えるだろう．

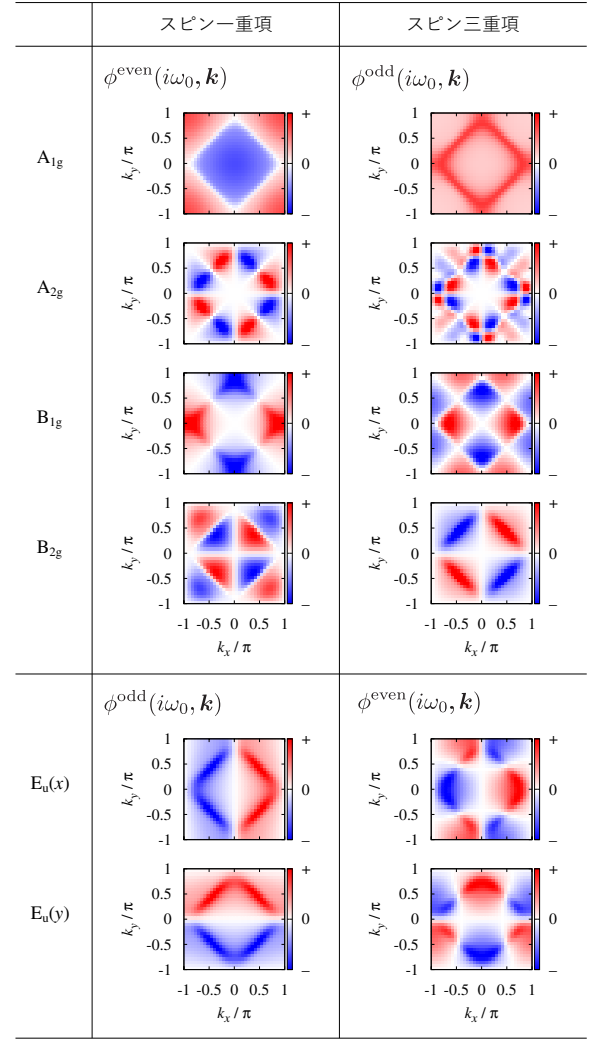


図 9 ギャップ関数 $\phi(i\omega_0, \mathbf{k})$ の波数依存性． ω_0 は最小の松原振動数．スピンと正方晶の既約表現により分類した．振動数に関して偶成分と奇成分に分け $[\phi^{\text{even/odd}}(i\omega, \mathbf{k}) = \phi(i\omega, \mathbf{k}) \pm \phi(-i\omega, \mathbf{k})]$ ，そのうちパウリ排他律から許される成分のみを図示した．文献 [20] より．

6 応用例 2：近藤格子模型

デュアルフェルミオン法のふたつめの応用例として，重い電子系の基本模型である近藤格子模型における超伝導について紹介する [21]．近藤格子模型の相互作用は

$$\mathcal{H}_i^{(\text{int})} = \frac{J}{2} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot c_{i\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'} \quad (7)$$

で与えられる．ここで， $\mathbf{S}_i$ は局在電子を表す $S = 1/2$ のスピン演算子， $\boldsymbol{\sigma}$ はパウリ演算子である．こ

の模型は局在的な f 電子と伝導電子との間の混成効果を表す周期アンダーソン模型の強相関極限になっている。また、この対応から J の符号は正、すなわち反強磁性的である。

6.1 重い電子系における遍歴・局在

重い電子系では、温度や圧力 (J の大きさと単調な関係が期待される) などの外部パラメーターによって、 f 電子の性質が劇的に変化するという特徴がある。すなわち、高温・低圧領域 (第 10 図 (b) 左上側) では f 電子は局在的であり局所的なスピン・軌道自由度が主役となるのに対し、低温・高圧 (第 10 図 (b) 右下側) になると f 電子がコヒーレンスを獲得して有効質量の大きな準粒子、いわゆる重い電子状態が実現する。両者の間の移り変わりには、第 3 節で述べたように、局所相関が本質的である。

遍歴・局在双対性を考慮に入れた上で磁性 (一般には多極子) や超伝導を議論するのは容易なことではないので、通常は、局在描像または遍歴描像のどちらかに立って理論を展開する。自然なアプローチは、局在描像に基づいた多極子秩序理論、及び遍歴描像に基づいた超伝導理論である。それでは、もっとも興味深い量子臨界点の近傍、すなわち遍歴と局在の狭間において、それら秩序状態はどのような性質を示すだろうか？例えば、長年の未解決問題である URu₂Si₂ の隠れた秩序相の解明には、局在描像を超えた多極子理論が必要であると考えられる。これについて詳しくは過去の記事 [38] を参照していただくこととして、ここでは超伝導について議論しよう。

重い電子系の超伝導は、通常の意味での準粒子、すなわち低エネルギーのコヒーレント部分のみに注目して議論するのが一般的である。しかし、多くの重い電子系の超伝導は反強磁性量子臨界点近傍に見出されるので、高エネルギーのインコヒーレント部分もまた重要な役割を果たす。超伝導を生み出す反強磁性揺らぎは主に局在的な自由度から生じるため、インコヒーレント部分なしには有効的な引力の空間的・時間的構造を正しく記述できない。さらに、量子臨界点近傍では特徴的なエネルギースケールが小さく、 f 電子のもつ遍歴と局在の性格が容易に変化する。このことは、コヒーレント部分の強度やフェル

ミ面の形状が容易に変化することを意味する。インコヒーレント部分を無視した近似では、このような効果が失われてしまう。

これまでも述べたように、電子の遍歴・局在双対性の記述には局所相関が重要であり、動的平均場近似の得意とするところである。一方、反強磁性量子臨界点近傍の超伝導の記述には局在成分が作り出す長距離揺らぎを考慮しなければならない。したがって、重い電子系の超伝導は局所相関と長距離相関を同時に考慮できるデュアルフェルミオン法の格好のターゲットである。

6.2 大きいフェルミ面・小さいフェルミ面

それではまず、 f 電子の遍歴・局在双対性をモデル計算で確認してみよう。第 10 図 (a) はデュアルフェルミオン法により計算された一粒子励起スペクトル強度 $A(\mathbf{k}, \omega) = -(1/\pi) \text{Im} G(\omega + i0, \mathbf{k})$ である。弱相関領域の結果は、相互作用のない場合のエネルギー分散 $\epsilon(\mathbf{k})$ とほぼ同じスペクトルを示す。このとき、 f 電子のスピンは伝導電子と分離しており、これが f 電子の局在状態を表す。一方、強相関領域では、伝導電子と f 電子のスピンが強く結合しており、スペクトルには「混成バンドとギャップ」が現れる。これが f 電子の遍歴状態を表す。ただし、今考えている近藤格子模型では、 f 電子の電荷の自由度は消去されているので、スペクトル強度には f 電子の寄与はないことに注意する。

第 10 図 (a) の 2 つのスペクトルはフェルミ面に関するラッティンジャーの定理によって明確に区別される^{*12}。ラッティンジャーの定理は、波数空間におけるフェルミ面の囲む体積と遍歴的に振る舞う電子の数密度とを関連づける定理である。これを近藤格子模型に適用すると、フェルミ面の囲む体積から見積もられる電子数密度を n_{FS} ^{*13}、伝導電子数を n_c とし、 f 電子の局在状態では $n_{\text{FS}} = n_c$ であり、遍歴状態では f 電子の寄与を加えて $n_{\text{FS}} = n_c + 1$ とな

^{*12} 厳密に言えば、有限温度では $\text{Im} \Sigma(0, \mathbf{k})$ が有限の値を持つのでフェルミ面はブロードになるが、ここでは $\text{Im} \Sigma$ を無視して有限温度でのフェルミ面を定義する。

^{*13} フェルミ面の囲む体積から見積もられる電子数密度は $n_{\text{FS}} = (2/N) \sum_{\mathbf{k}} \Theta(\mu - \epsilon(\mathbf{k}) - \text{Re} \Sigma(0, \mathbf{k}))$ のように定義される。ここで、 N は格子点の数、 $\Theta(x)$ は階段関数。

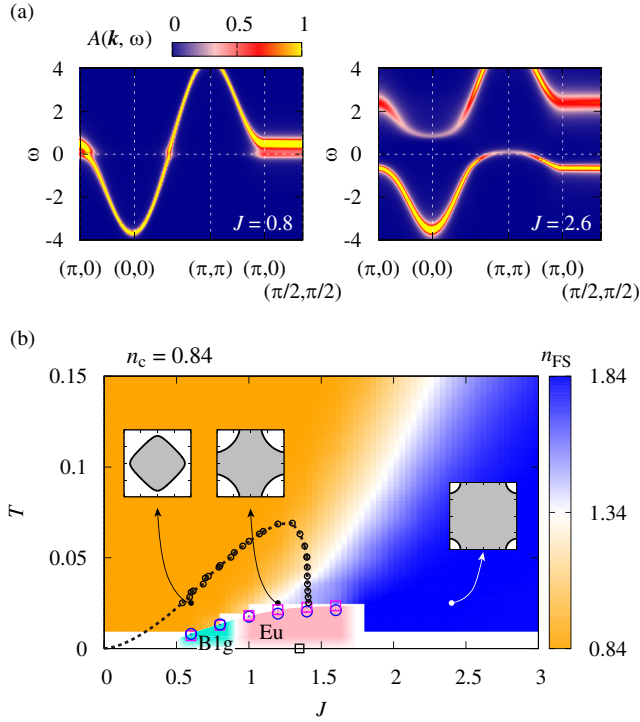


図 10 (a) 近藤格子模型の一粒子励起スペクトル $A(\mathbf{k}, \omega)$. 左欄が弱相関領域, 右欄が強相関領域の結果. (b) フェルミ面の変化と超伝導相図. n_{FS} はフェルミ面の囲む体積を表す (正方形内の灰色が電子の占有領域). B_{1g} と E_u はそれぞれスピン一重項の d 波 (偶周波数) と p 波 (奇周波数) の超伝導である. 点線は弱い 3 次元性を導入した場合に期待される反強磁性転移温度, $T = 0$ の点は量子相転移点 J_c を表す ($n_c = 1$ の場合). 文献 [21] より.

る. 前者を小さいフェルミ面, 後者を大きいフェルミ面と呼ぶ. 第 10 図 (b) の強度プロットは n_{FS} を表しており, 両極限の間を連続的に変化していることが見て取れる. このように, フェルミ面によって f 電子の遍歴性と局在性を定量化できる. この結果には局所相関, すなわち $\Sigma_{\text{loc}}(i\omega)$ が本質的な役割を果たしており, 動的平均場近似でも同様の結果が得られる [39].

6.3 重い電子超伝導

超伝導に進もう. 前節のハバード模型と同じエネルギー分散 $\epsilon(\mathbf{k})$ を考えており, フェルミ面のネスティングに起因した波数 $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ の不安定性がある. この不安定性は伝導電子を媒介とした局在スピンの RKKY 相互作用を通して反強磁性を誘起す

る. 弱い 3 次元性を導入した場合に期待される反強磁性転移温度と量子相転移点 J_c を第 10 図 (b) に示す^{*14}. $J \lesssim J_c$ の領域で存在する臨界的な反強磁性揺らぎによって, ハバード模型と同様の d 波超伝導が誘起されると予想される.

ところが予想に反して, d 波超伝導は弱相関の限られた領域でしか出現しない. 超伝導相図を第 10 図 (b) に示す. J が小さい領域ではハバード模型と同様に d 波超伝導が実現するが, J が大きくなると代わりに p 波の奇周波数超伝導 (第 9 図のスピン一重項・ E_u 対称性) が出現する^{*15}. 超伝導対称性の変化が遍歴と局在のクロスオーバー領域で起こっていることに注意して欲しい. フェルミ面の形状が変化したために, 小さなフェルミ面に整合する単純な反強磁性揺らぎよりも大きなフェルミ面に整合する E_u 対称性の揺らぎが実効的に有利になったためと解釈される. このような奇周波数の超伝導が安定に得られるためには強い周波数依存性を持つ有効引力を適切に取り扱える手法が不可欠であり, デュアルフェルミオン法の面目躍如というところである. 有効相互作用 $\gamma^{(4)}$ の構造, 特に強い振動数依存性が重要な役割を果たしていることは, 同様のフェルミ面を持つハバード模型ではこの p 波超伝導が生じないことからもうかがえる. このような量子臨界点近傍における超伝導対称性の変化の可能性が, CeCu_2Si_2 や CeRhIn_5 に見られる異常物性を念頭に, 現象論的に議論されている [41].

以上の計算結果は教訓的である. f 電子系の局在状態における磁気構造は伝導電子のエネルギー分散 $\epsilon(\mathbf{k})$ から計算される二体相関関数 $\chi_0(i\nu, \mathbf{q})$ の波数依存性によって大まかに予想することができる. 圧力を強くすると, f 電子は次第に遍歴的になり, 磁気秩序は抑えられる. 量子臨界点近傍においても, おもにインコヒーレント部分から生じる磁気揺らぎは低圧領域と同じ波数構造を持つが, 重い電子状態の

^{*14} 反強磁性揺らぎの大きさを表す無次元量 $\lambda_{\text{AFM}} = 0.99$ で「転移温度」を定義している. 超伝導相図の計算に用いた電子密度と異なる $n_c = 1$ の計算結果であり, 目安として考えていただきたい.

^{*15} これはスピン一重項の奇周波数超伝導である. 奇周波数超伝導については文献 [40] を参照されたい.

形成に伴い一粒子励起は伝導電子の分散 $\epsilon(\mathbf{k})$ とは別の構造に変化し、フェルミ面の形状も急激に変化する。第 10 図の結果は、このような遍歴と局在の急激な変化が起こるクロスオーバー領域において、遍歴と局在の両極限からは予想されない新奇な超伝導状態が実現することを示している。

超伝導の議論においては、これまで f 電子の局在的な側面はほとんど考慮されてこなかった。近藤格子模型における非自明な超伝導相の発見は、その描像にある程度の一般性があり、重い電子系の超伝導に対して f 電子の遍歴・局在双対性の重要性和新たな視点を与えていると言えよう。

7 まとめと今後の展望

本稿では動的平均場法を出発点としたダイアグラム展開について解説した。この理論は、物理的には、モット絶縁体や重い電子状態を記述する「準粒子」を用いた摂動展開という意味がある。理論の有用性については、ハバード模型と近藤格子模型に関する計算例から理解していただけたと思う。以下では、この理論の今後の展望について思いつくままに述べたい。

7.1 近似の改良と簡略化

デュアルフェルミオン法における近似は 2 つ、有効相互作用を $\gamma^{(4)}$ に制限したこと、そして $\tilde{\Sigma}$ の摂動展開において特定の部分和のみを考慮したことである。後者の近似では、計算コストのために、現段階では揺らぎ交換近似と同様の梯子型ダイアグラムに限っている。この近似は反強磁性量子臨界点近傍の集団励起を取り込む第一近似としては妥当であると考えられるが、反強磁性揺らぎを過剰評価しているのも事実である。種々の揺らぎを等しく取り込むためには、 $\gamma^{(4)}$ に関する梯子近似をやめて、パルケ近似などのより洗練された方法を適用することが考えられる。この拡張は異なる揺らぎ間の競合を考慮する意味もあり、多軌道系でとくに重要となろう。

また、別の方向性として、計算の簡略化を追求する研究も将来的に必要であろう。特に、第 2 節で述べた第一原理計算との融合においては、定量性と実用性との適度なバランスが重視される。実際の計算における要所は局所バーテックス $\gamma^{(4)}(i\omega, i\omega'; i\nu)$ の

扱いである。最も粗い近似は $\gamma^{(4)}$ の振動数依存性を無視し有効的な定数に置き換えるものであるが、これは伝統的な意味での準粒子相互作用（いわゆるランダウパラメーター）を微視的に得たことにあたる。そこから一歩進み、 $\gamma^{(4)}$ の振動数依存性を少数のパラメーターで特徴づけられる適当な関数形で近似すれば、「動的ランダウパラメーター」を用いた半現象論的な理論を展開することもできるだろう。適切なパラメーター化には $\gamma^{(4)}$ の特性を知る必要があるが、 $\gamma^{(4)}$ の計算例はまだ少なく、これに関する我々の知識は十分ではないので更なる研究が必要である。

7.2 非局所相互作用

本稿では相互作用を局所的なものに限って話を進めた。ここで、非局所的な相互作用の扱いについて少し述べておこう。相互作用をボゾンの交換と見れば、非局所相互作用はボゾンの跳び移りに対応する。よって、それに対して同様の動的平均場近似を適用することが可能である。このような近似理論は、古くは量子スピングラスの高次元極限 [42] をはじめ、そのドーブ系 [43, 44]、量子スピン系の動的平均場理論 [45, 46] や拡張動的平均場法 [47] として知られている。これらの近似を極限として含む拡張理論は、非局所相互作用を媒介する補助ボゾンを用いたダイアグラム展開として定式化されている（デュアルボゾン法と呼ばれる）[48]。

なお、非局所相互作用を補助ボゾンとして含めた場合、有効不純物模型において一体の動的ポテンシャル $\Delta(i\omega)$ だけでなく、局所的な相互作用も振動数に依存する複雑なものになる。しかしながら、この有効模型は既に CTQMC 法で厳密に解くことができるようになっている [49, 50]。

8 おわりに

第 2 節で述べたように、本稿で解説した理論はモデル計算のみならず、将来的には化合物の多体電子状態計算において重要な位置を占めることが期待される。DFT+DMFT によるバンド計算や DFT+RPA 等による揺らぎを考慮した計算手法が急速に発展しているが、デュアルフェルミオン法はそれらを包括的に取り扱うことのできる方法論を与えているから

である。本稿によって、この壮大な目標への可能性を少しでも感じ取っていただけたならば幸いである。

本稿で紹介した研究は科学研究費補助金・若手研究 (B) (No. 26800172) の補助を受けて行われました。また、数値計算の一部は東京大学物性研究所のスーパーコンピュータを用いて行われました。本稿で解説した内容は以下の方々との共同研究や議論を通して学んだことを元にまとめたものです。H. Hafermann, P. Werner, A. Lichtenstein, D. Vollhardt, A.-M. S. Tremblay, 倉本義夫, 三宅和正。この場を借りて感謝いたします。

参考文献

- [1] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg: *Rev. Mod. Phys.* **68** (1996) 13.
- [2] *Strongly Correlated Systems*, ed. A. Avella and F. Mancini (Springer, 2012).
- [3] *DMFT at 25: Infinite Dimensions*, ed. E. Pavarini, E. Koch, D. Vollhardt, and A. Lichtenstein (Forschungszentrum Jülich, 2014).
- [4] 文献 [3, 14] を含む動的平均場理論関連の秋の学校テキストが <http://www.cond-mat.de/events/correl.html> からダウンロードできる。
- [5] G. Kotliar and D. Vollhardt: *Physics Today* **57** (2004) 53.
- [6] 倉本義夫, 清水幸弘: 固体物理 **39** (2004) 417.
- [7] 楠瀬博明. 動的平均場理論の基礎と応用. <http://www.isc.meiji.ac.jp/~hk/documents/memo/dmft.pdf>, 2011.
- [8] J. K. Freericks: *Phys. Rev. B* **70** (2004) 195342.
- [9] J. K. Freericks, V. M. Turkowski, and V. Zlatić: *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 266408.
- [10] H. Aoki, N. Tsuji, M. Eckstein, M. Kollar, T. Oka, and P. Werner: *Rev. Mod. Phys.* **86** (2014) 779.
- [11] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti: *Rev. Mod. Phys.* **78** (2006) 865.
- [12] M. Imada and T. Miyake: *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** (2010) 112001.
- [13] 今田正俊, 三宅隆: 固体物理 **47** (2012) 113.
- [14] *The LDA+DMFT approach to strongly correlated materials*, ed. E. Pavarini, E. Koch, D. Vollhardt, and A. Lichtenstein (Forschungszentrum Jülich, 2011).
- [15] H. Kusunose: *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** (2006) 054713.
- [16] A. Toschi, A. A. Katanin, and K. Held: *Phys. Rev. B* **75** (2007) 045118.
- [17] A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, and A. Georges: *Phys. Rev. B* **79** (2009) 045133.
- [18] C. Taranto, S. Andergassen, J. Bauer, K. Held, A. Katanin, W. Metzner, G. Rohringer, and A. Toschi: *Phys. Rev. Lett.* **112** (2014) 196402.
- [19] M. Kitatani, N. Tsuji, and H. Aoki: *Phys. Rev. B* **92** (2015) 085104.
- [20] J. Otsuki, H. Hafermann, and A. I. Lichtenstein: *Phys. Rev. B* **90** (2014) 235132.
- [21] J. Otsuki: *Phys. Rev. Lett.* **115** (2015) 036404.
- [22] 池田浩章, 鈴木通人: 固体物理 **47** (2012) 693.
- [23] 楠瀬博明, 大槻純也: 物性研究 **94** (2010) 404.
- [24] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner: *Rev. Mod. Phys.* **83** (2011) 349.
- [25] K. G. Wilson: *Rev. Mod. Phys.* **47** (1975) 773.
- [26] R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke: *Rev. Mod. Phys.* **80** (2008) 395.
- [27] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler: *Rev. Mod. Phys.* **77** (2005) 1027.
- [28] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke, and H. R. Krishnamurthy: *Phys. Rev. B* **58** (1998) R7475.
- [29] M. Potthoff: *Eur. Phys. J. B* **32** (2003) 429.
- [30] M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken: *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 206402.
- [31] T. A. Maier, M. Jarrell, T. C. Schulthess, P. R. C. Kent, and J. B. White: *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 237001.
- [32] J. E. Hirsch: *Phys. Rev. B* **28** (1983) 4059.
- [33] H. Hafermann, G. Li, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, and H. Monien: *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 206401.
- [34] S. Brener, H. Hafermann, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein: *Phys. Rev. B* **77** (2008) 195105.
- [35] N. D. Mermin and H. Wagner: *Phys. Rev. Lett.* **17** (1966) 1133.
- [36] A. E. Antipov, E. Gull, and S. Kirchner: *Phys. Rev. Lett.* **112** (2014) 226401.
- [37] T. Misawa and M. Imada: *Phys. Rev. B* **90** (2014) 115137.
- [38] 楠瀬博明, 播磨尚朝: 固体物理 **47** (2012) 681.
- [39] J. Otsuki, H. Kusunose, and Y. Kuramoto: *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 017202.
- [40] 星野晋太郎, 楠瀬博明: 日本物理学会誌 **71** (2016)

27.

- [41] Y. Fuseya, H. Kohno, and K. Miyake: J. Phys. Soc. Jpn. **72** (2003) 2914.
- [42] A. J. Bray and M. A. Moore: J. Phys. C: Solid State Phys. **13** (1980) L655.
- [43] O. Parcollet and A. Georges: Phys. Rev. B **59** (1999) 5341.
- [44] J. Otsuki and D. Vollhardt: Phys. Rev. Lett. **110** (2013) 196407.
- [45] Y. Kuramoto and N. Fukushima: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 583.
- [46] J. Otsuki and Y. Kuramoto: Phys. Rev. B **88** (2013) 024427.
- [47] J. L. Smith and Q. Si: Phys. Rev. B **61** (2000) 5184.
- [48] A. Rubtsov, M. Katsnelson, and A. Lichtenstein: Annals of Physics **327** (2012) 1320 .
- [49] P. Werner and A. J. Millis: Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 146401.
- [50] J. Otsuki: Phys. Rev. B **87** (2013) 125102.