

3.2. 動的平均場理論

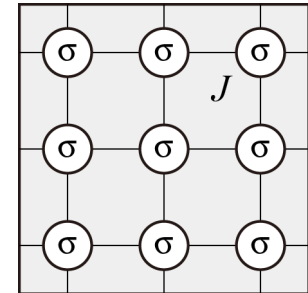
イジング模型の平均場近似

$$H_{\text{Ising}} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \underbrace{\sigma_i \sigma_j}_{\text{interaction}} - h \sum_i \sigma_i$$

$$\simeq \sigma_i \langle \sigma_j \rangle + \langle \sigma_i \rangle \sigma_j - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$$

$$= m(\sigma_i + \sigma_j) - m^2$$

$$\langle \sigma_i \rangle \equiv m \quad \text{サイトに依存しない (常磁性 or 強磁性)}$$



有効磁場中の一体模型

$$H_{\text{eff}} = -h_{\text{eff}} \sum_i \sigma_i, \quad h_{\text{eff}} = h + \underline{zJm} \quad z: \text{最近接格子点の数}$$

$$\text{scaling } J \propto 1/z$$

$$\text{mean field} \quad \mathcal{O}(1)$$

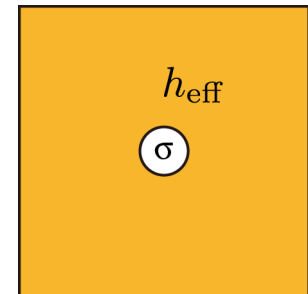
$$\text{fluctuations} \quad \mathcal{O}(1/z)$$

evaluate m

update the
effective field

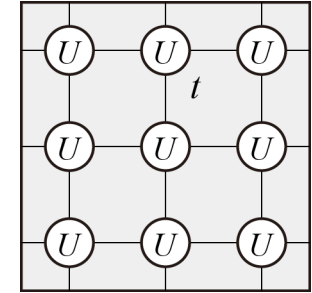
$$m = \tanh \beta h_{\text{eff}}$$

Mean-field approximation
is exact in $z \rightarrow \infty$



ハバード模型

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - \mu \sum_i n_i + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

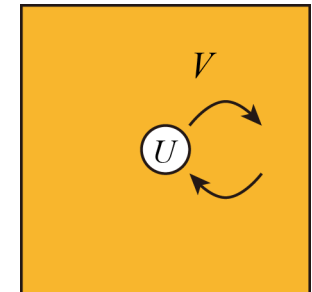


Georges, Kotliar 1992, Georges et al. 1996

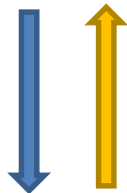
有効媒質中の一不純物模型（不純物アンダーソン模型） **多体問題**

$$H_{\text{eff}} = \sum_{l\sigma} \left[E_l a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} + V_l (c_\sigma^\dagger a_{l\sigma} + a_{l\sigma}^\dagger c_\sigma) \right] - \mu n + U n_\uparrow n_\downarrow$$

hybridization with "bath"



solve the effective
model (numerical
calculations)



update the "bath"

$$\Delta(\omega) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{\omega - E_l}$$

$$\mathcal{S}_{\text{hyb}} = \sum_\omega \Delta(i\omega) c^*(i\omega) c(i\omega)$$

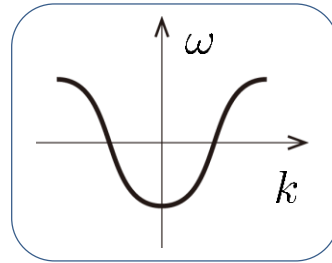
他サイトにおける多体効果を
時間依存した場"bath"で近似
(local in space but non-local in time)
→ 動的平均場

$$G_{\text{imp}}(\tau) = -\langle c_\sigma(\tau) c_\sigma^\dagger(0) \rangle_{\text{imp}}$$

ハバード模型

$$G_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}}$$

pole
 $\omega = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$

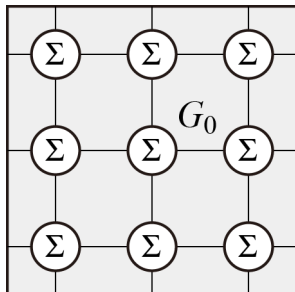


$U \neq 0$

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}$$

local in space
non-local in time

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\omega)}$$

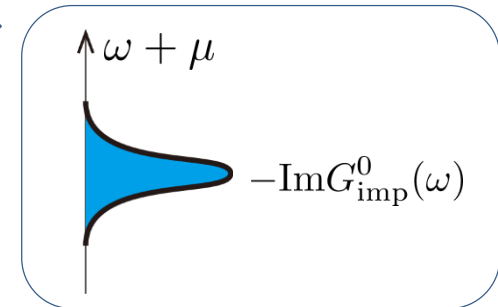


不純物アンダーソン模型

$$G_{\text{imp}}^0(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \Delta(\omega)}$$

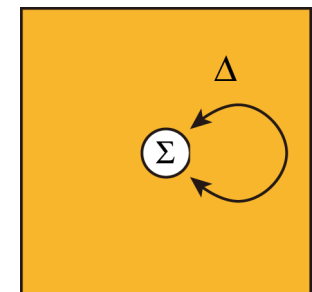
$$\Delta(\omega) = i\Delta$$

$$\Delta(\omega) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{\omega - E_l}$$



$U \neq 0$

$$G_{\text{imp}}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega)}$$



self-consistency condition

$$\langle G(\mathbf{k}, \omega) \rangle_{\mathbf{k}} = G_{\text{imp}}(\omega)$$

動的平均場理論

ハバード模型

initial guess

不純物アンダーソン模型

$\Delta(\omega)$

$$G_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}}$$

update

$$\Delta(\omega) = \omega + \mu - \Sigma(\omega) - \langle G(\mathbf{k}, \omega) \rangle_{\mathbf{k}}^{-1}$$

$U \neq 0$

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}$$

local in space
non-local in time

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\omega)}$$

$$G_{\text{imp}}^0(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \Delta(\omega)}$$

$$\Delta(\omega) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{\omega - E_l}$$

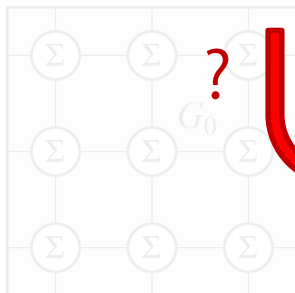
$$\Delta(\omega) = i\Delta$$

solve impurity problem
(take into account U)

Auxiliary numerical method

$U \neq 0$

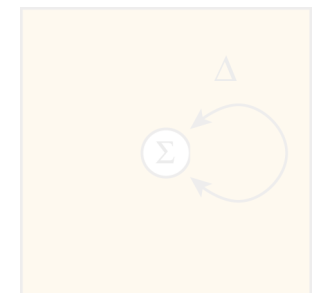
$$G_{\text{imp}}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega)}$$



check if the condition is fulfilled

self-consistency condition

$$\langle G(\mathbf{k}, \omega) \rangle_{\mathbf{k}} = G_{\text{imp}}(\omega)$$



動的平均場理論：近似について

$$\Sigma(\omega, \mathbf{k}) \rightarrow \Sigma(\omega)$$

the only approximation

Justification

$$t \propto 1/\sqrt{d}$$

$$G_{ii} \sim \mathcal{O}(1)$$

$$G_{ij} \sim t \sim \mathcal{O}(1/\sqrt{d})$$

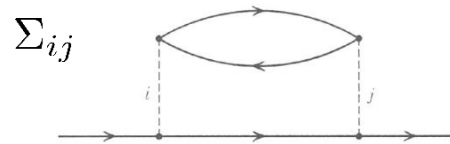


図 5.3 2 次の自己エネルギー部分の Feynman 図形. 相互作用(破線)に付けた i, j は相互作用の起こるサイトを示す.

From Shiba 2001

Metzner, Vollhardt 1989

$$\Sigma_{ii} \sim \mathcal{O}(1)$$

$$\sum_j \Sigma_{ij} \sim U^2 \sum_j G_{ij}^3 \sim \mathcal{O}(1/\sqrt{d})$$

Exact in $d \rightarrow \infty$

Physically

ω Local correlations: Mott insulator, Heavy fermion (Kondo effect)

$\mathbf{k}$ Spatial correlations: Low-dimensionality, Anisotropic SC



strictly taken into account by
solving effective impurity problem

Müller-Hartman 1989, Georges et al. 1996

$$\begin{aligned}\langle G(\mathbf{k}, i\omega) \rangle_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n) - \epsilon_{\mathbf{k}}} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{z - \epsilon}\end{aligned}$$

格子の情報は状態
密度を通して入る

$$z = i\omega_n + \mu - \Sigma(i\omega_n)$$

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

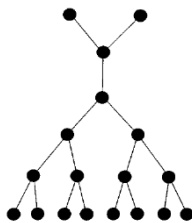
超立方格子 ($d \rightarrow \infty$)

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -\frac{D}{\sqrt{2d}} \sum_{i=1}^d \cos k_i,$$

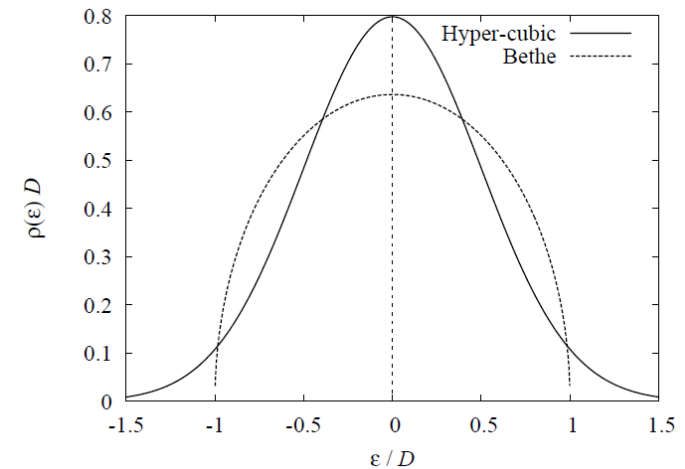
$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{D} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-2\epsilon^2/D^2}.$$

Bethe格子 ($z \rightarrow \infty$)

$$t = D/2\sqrt{z}$$



$$\rho(\epsilon) = \frac{2}{\pi D^2} \sqrt{D^2 - \epsilon^2},$$



一般の場合 (有限サイズ系を含む)

波数を離散化して数値和
(有限サイズ系で計算)

- Uの2次摂動 (Iterative Perturbation Theory; IPT)
 - 電子・正孔対称性がある場合は妥当な結果
- Vに関する摂動論 (Non-Crossing Approximation; NCA)
 - 高温では良い近似
 - フェルミ液体は記述できない
- 厳密対角化
 - 複雑な相互作用も扱えるのが利点
 - 状態密度を離散化するので、スペクトルの計算には向かない
- 量子モンテカルロ法 (Hirsch-Fye法)
 - 一世代前のスタンダード
- 連続時間量子モンテカルロ法
 - 現在の標準的な手法
 - 虚時間の離散化による誤差がないのが利点
 - 多軌道系を扱うには工夫が必要

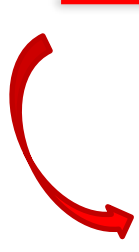
連続時間量子モンテカルロ法 for fermions

Rubtsov et al. 2005

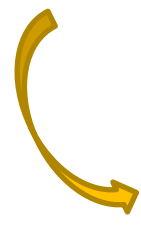
摂動展開の表式

$$H = H_0 + H'$$

$$\begin{aligned} Z/Z_0 &= \text{Tr} \left\{ T_\tau e^{-\beta H_0} \exp \left[- \int_0^\beta d\tau H'(\tau) \right] \right\} / Z_0 \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_k (-1)^k \langle T_\tau H'(\tau_1) \cdots H'(\tau_k) \rangle_0 \end{aligned}$$


$$k, (\tau_1, \cdots, \tau_k) \equiv q_k$$

モンテカルロサンプリング


$$P(q_k) = \left\langle \begin{array}{c} H_1 \quad H_1 \quad \cdots \quad H_1 \\ \hline 0 \quad \tau_1 \quad \tau_2 \quad \cdots \quad \tau_k \quad \beta \end{array} \right\rangle_{H_0}$$

H'を追加・消去、移動

No Suzuki-Trotter decomposition
⇒ No systematic error, Lower-T accessible

連続時間量子モンテカルロ法 for fermions

不純物アンダーソン模型

$$H_0 = \sum_{l\sigma} \left[E_l a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} + V_l (c_\sigma^\dagger a_{l\sigma} + a_{l\sigma}^\dagger c_\sigma) \right] - \mu n$$

$$H' = U n_\uparrow n_\downarrow$$

Rubtsov et al. 2005

$$P(q_k) = \left\langle \begin{array}{c} \text{---} H_1 \text{---} H_1 \text{---} \cdots \text{---} H_1 \text{---} \\ | \quad | \quad \quad | \quad \quad | \\ 0 \quad \tau_1 \quad \tau_2 \quad \cdots \quad \tau_k \quad \beta \end{array} \right\rangle_{H_0}$$

重み

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



Wickの定理

$$P(q_k) = (-U)^k \prod_{\sigma} \det \hat{G} \quad \begin{aligned} \hat{G}_{ij} &= G_{\text{imp}}^0(\tau_i - \tau_j) \\ G_{\text{imp}}^0(i\omega) &= \frac{1}{i\omega + \mu - \Delta(i\omega)} \end{aligned}$$

$k \rightarrow k+1$ の更新確率

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

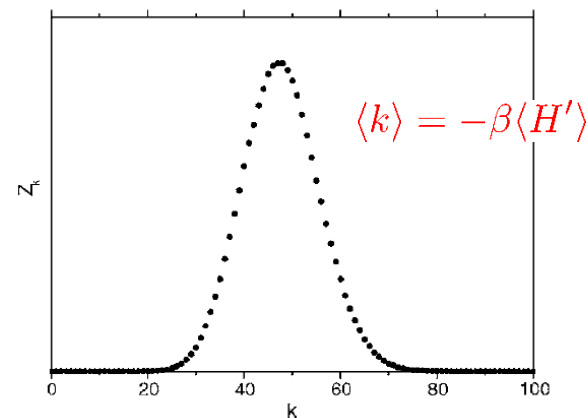
fast update formula
 $\mathcal{O}(k^3) \rightarrow \mathcal{O}(k^2)$

計算コスト

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\langle k \rangle^3) &\sim \mathcal{O}(\beta^3) \quad \text{for impurity model} \\ \mathcal{O}(N^3 \beta^3) &\quad \text{for lattice} \end{aligned}$$

autocorrelation time
 $\mathcal{O}(\langle k \rangle)$

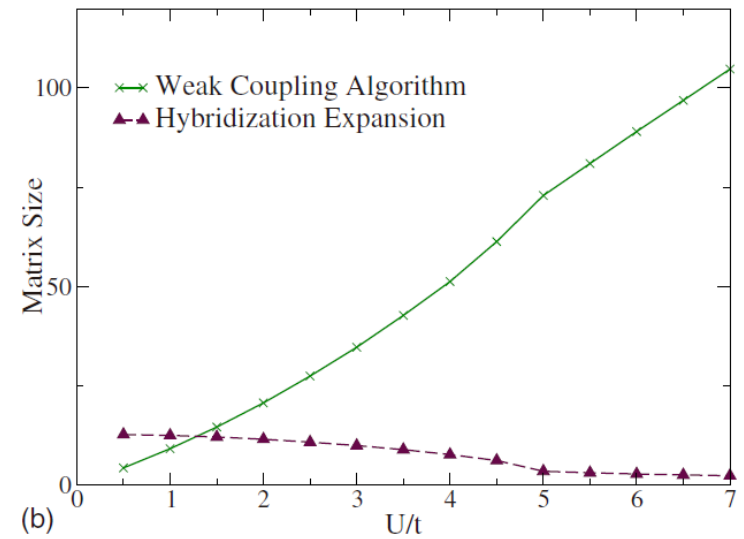
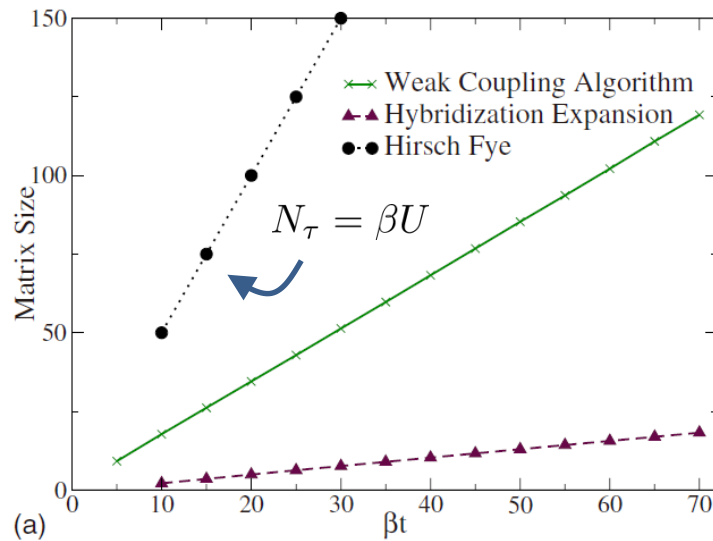
Weight Z_k of each expansion order



連続時間量子モンテカルロ法 for fermions

行列サイズ $\langle k \rangle$

Gull et al. 2007



連続時間量子モンテカルロ法 *for fermions*

日本語解説記事： 楠瀬博明、大槻純也： 物性研究 94 (2010) 404



PDFファイル

Google

連続時間量子モンテカルロ



ウェブ

ニュース

動画

画像

地図

もっと見る ▼

検索ツール

約 23,600 件 (0.19 秒)

[\[PDF\] 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 - ...](#)

www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~otsuki/ctqmc.pdf ▼

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 ... 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: ...

重い電子系秋の学校2009テキスト

Google 近藤効果  

ウェブ 画像 動画 ニュース 地図 もっと見る ▼ 検索ツール

約 5,400,000 件 (0.21 秒)

他のキーワード: 近藤効果 ノーベル賞 近藤効果 電気抵抗 近藤一重項

近藤効果 - Wikipedia

ja.wikipedia.org/wiki/近藤効果 ▼

近藤効果(こんどうこうか、Kondo effect)とは、磁性を持った極微量な不純物(普通磁性のある鉄原子など)がある金属では、温度を下げていくとある温度以下で電気抵抗が上昇に転じる現象である。これは通常の金属の、温度を下げていくとその電気抵抗も減少 ...

現象 - 理論 - 理論の拡張と応用 - 脚注

^[PDF] 近藤効果とその周辺の物理

www.phys.shimane-u.ac.jp/mutou_lab/zakki/Kondo/Kondo.pdf ▼

電気抵抗極小現象(近藤効果)。金属の電気抵抗の原因は、陽イオンからなる✓。格子の熱振動による、電子の散乱。温度を下げていけば、電気抵抗は小さくなる。少量の不純物を含む時は、不純物の濃度に、比例した残留抵抗がある。不純物を含む金属の電気 ...

^[PDF] 近藤効果とは - Staff

<https://staff.aist.go.jp/t-yanagisawa/Kondo-effect.pdf> ▼

1. 近藤効果とは。近藤博士は、バンド理論により半導体エレクトロニクスの基礎が既に確立され、物性物理学の長年の謎であった超伝導の機構がバーディーン、クーパー、シュリーファールの理論により解明され、超伝導エレクトロニクスへの道が開かれ始めた ...

^[PDF] 重い電子系の近藤効果と磁気秩序 - 東北大学物性理論研究室

www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~otsuki/otsuki-heavy.pdf ▼

重い電子系の近藤効果と磁気秩序。東北大学大学院理学研究科。大槻純也*1. 1 序論。重い電子系は「局在」と「遍歴」という 2 つの言葉で象徴される。4f 電子間に働く強いクーロン斥力。U のために、4f 電子は高温では局在的な性質を持ち、局在スピンとして ...



重い電子系秋の学校2009テキスト

Google  

[ウェブ](#) [画像](#) [ニュース](#) [動画](#) [ショッピング](#) [もっと見る ▼](#) [検索ツール](#)

約 7,040,000 件 (0.34 秒)

重い電子系 - Wikipedia

ja.wikipedia.org/wiki/重い電子系 ▼

重い電子系(おもいでんしけい、英: Heavy fermion)は、ランタノイドやアクチノイドの化合物において、金属的な電気伝導を示すにもかかわらず、電気伝導を担う電子の有効質量が、自由電子の質量の数百倍〜千倍も「重く」なっていると考えられる一連の物質群 ...

新学術領域研究「重い電子の秩序化」

www.heavy-electrons.jp/ ▼

第4回研究会の開催日程について(2012.10.01). 第6回物性科学領域横断研究会「凝縮系科学の最前線」のお知らせ(2012.10.01). 新学術領域研究「重い電子系の形成と秩序化」ワークショップ ～純良単結晶育成と重い電子系のフェルミ面～(2012.09.10).

[PDF] 重い電子はどこで、どのようにして生まれるのか？ - 日本物...

www.jps.or.jp/books/jpsjselectframe/2012/files/12-05-2.pdf ▼

重い電子はどこで、どのようにして生まれるのか？ 強相関 f 電子系物質と呼ばれる Ce などの希土類化合物などでは、しばしば電子の静止質量より 100 倍以上大きい有効質量を持つ伝導電子が見出されている。このような**重い電子**が形成されるメカニズム。

[PDF] 重い電子系の近藤効果と磁気秩序 - 東北大学物性理論研究室

www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~otsuki/otsuki-heavy.pdf ▼

重い電子系は「局在」と「遍歴」という 2 つの言葉で象徴される。4f 電子間に働く強いクーロン斥力、U のために、4f 電子は高温では局在的な性質を持ち、局在スピンとして振舞う。ところが、低温になると 4f 電子は遍歴的な性質へと移り変わり、U = 0 の多体相互 ...

