

## 3.4. 動的平均場理論の最近の発展と課題

---

## 動的平均場理論

エネルギーバンド構造  
軌道自由度

### 不純物ソルバーの問題

状態数の増大、負符号問題、…  
解消されつつある

空間相関

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

### DMFTを極限として含む理論

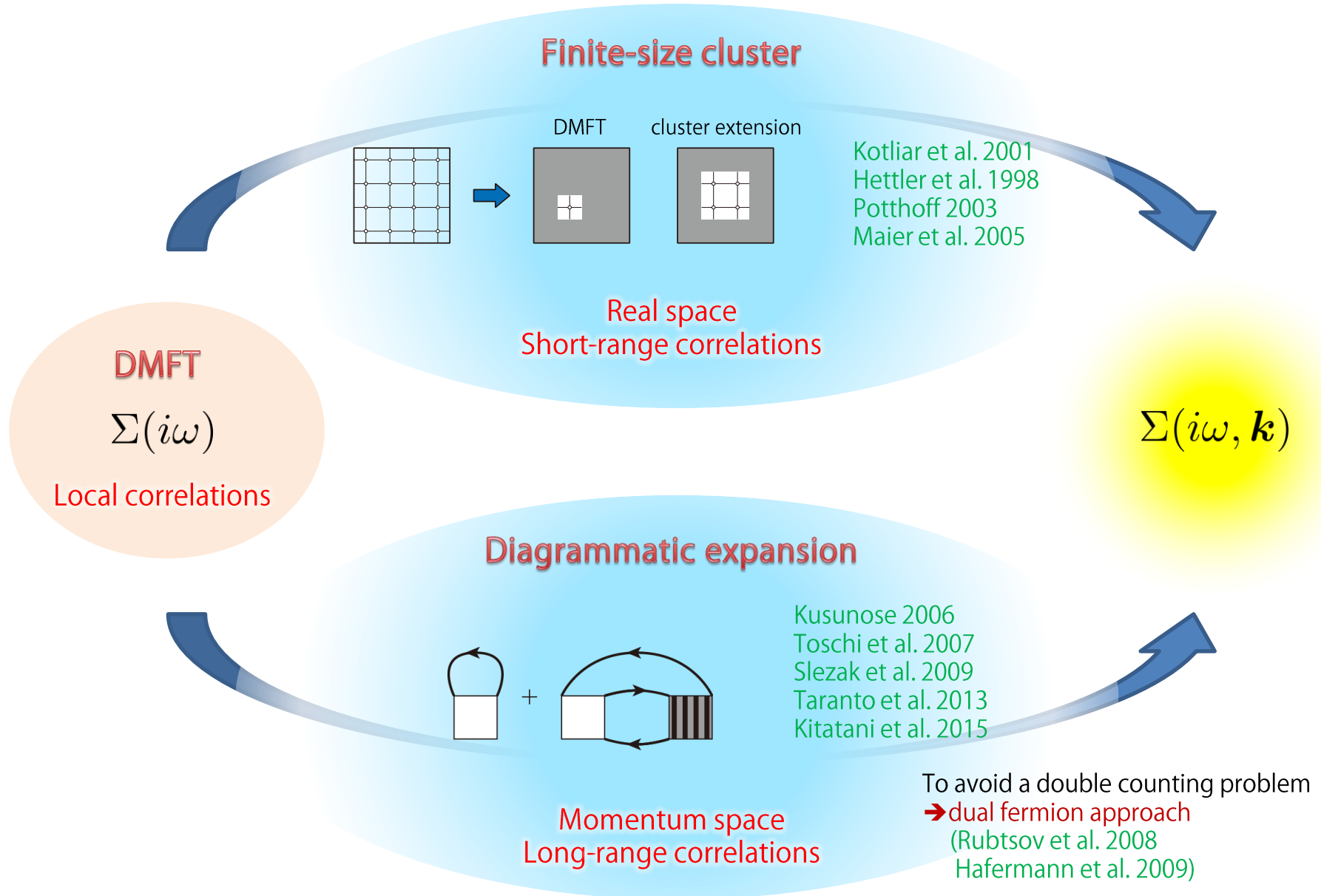
クラスター不純物 or ダイアグラム展開

強相関化合物のバンド構造、磁性

モット絶縁体近傍の電子状態と超伝導  
重い電子系超伝導

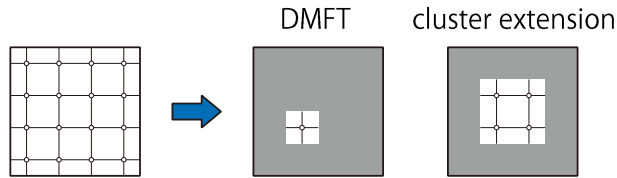
強相関化合物の磁性と超伝導

# Extension of DMFT —non-local correlations



# cluster-extension of DMFT

## 有効クラスター不純物問題



自己無撞着条件

- 実空間：Cellular DMFT (C-DMFT)
- 波数空間：Dynamical Cluster Approx. (DCA)

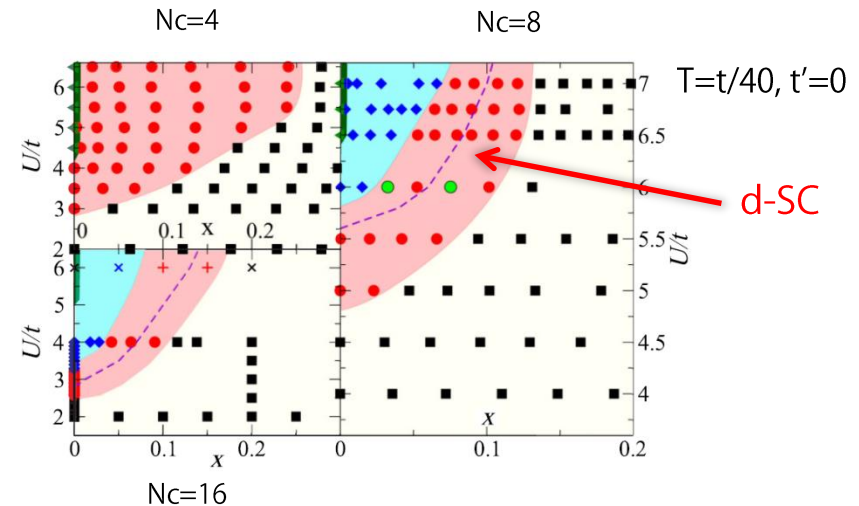
総称してCluster-DMFT

(論文でCDMFTと書かれている場合、  
普通はCellular-DMFTを指すので注意)

短距離相関

d波超伝導やRVB状態

DCA results for Hubbard model [Gull et al. 2013](#)

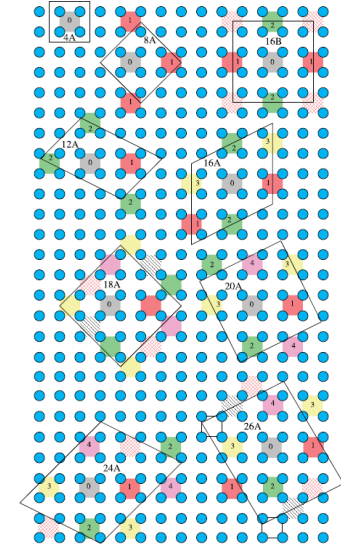
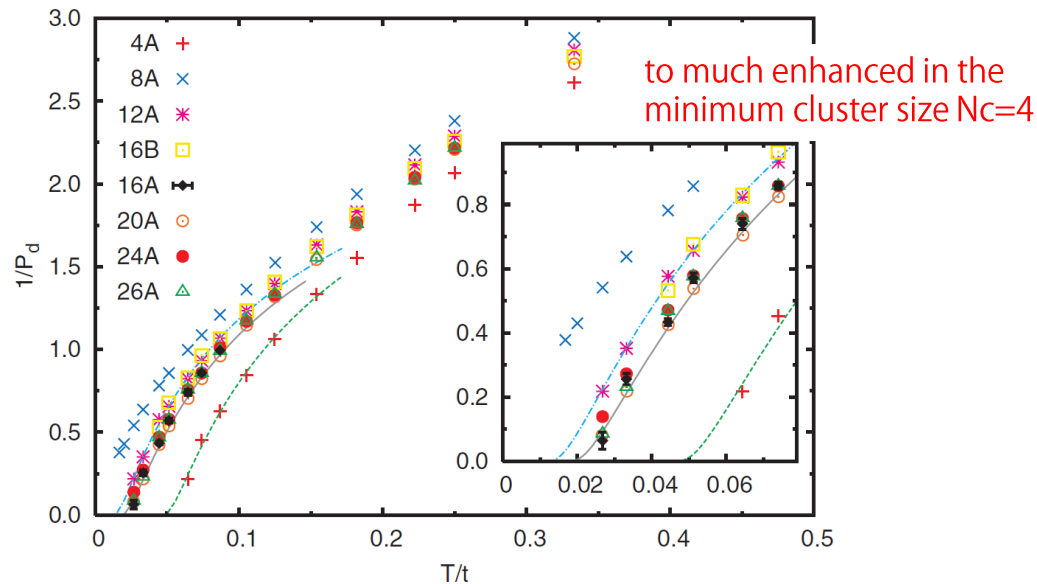


# Problems in cluster DMFT

## (i) Finite size effect

Maier et al., PRL 95, 237001 (2005)

d-wave pairing susceptibility



## (ii) Sign problem in QMC

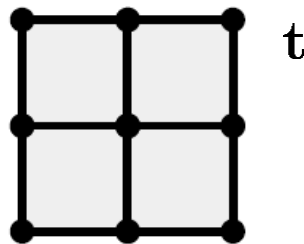
$$\langle \text{sign} \rangle \sim e^{-\beta \Delta} \quad \text{Sever sign problem for } N_c > 1$$

Very difficult to address low-T and thermodynamic limit

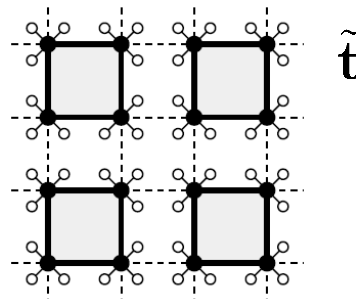
# Self-energy Functional Theory

Potthoff, EPJ B 32, 429 (2003)  
Potthoff et al., PRL 91, 206402 (2003)

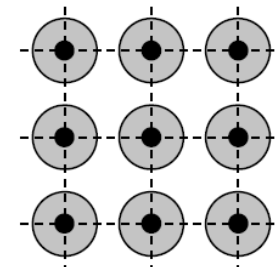
Original lattice



Reference system



DMFT



相互作用は同じ

## 最適化

$$\frac{\partial \Omega_t[\Sigma(\tilde{t})]}{\partial \tilde{t}} = 0$$

$$\Omega_t[\Sigma] = \Omega_{\tilde{t}}[\Sigma] - \text{Tr} \ln[-(G_{0,t}^{-1} - \Sigma)] + \text{Tr} \ln[-(G_{0,\tilde{t}}^{-1} - \Sigma)]$$

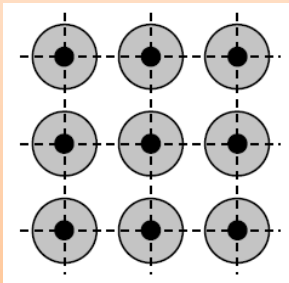
Luttinger-Ward汎関数を消去

- 動的平均場理論のひとつの導出法
- 厳密対角化ソルバーと好相性
- 対称性を破る変分パラメーター  
→ Variational Cluster Approximation (VCA)

# 長距離揺らぎを取り込む拡張理論

## 強相関

動的平均場理論

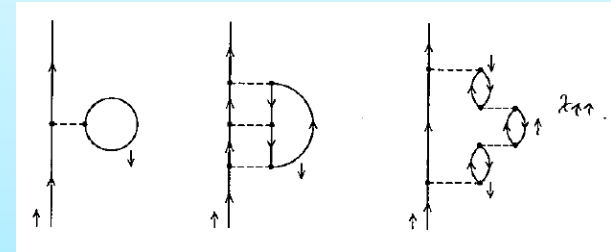


モット絶縁体、重い電子

+

## 反強磁性揺らぎ

e.g. RPA, FLEX, FRG, Parquet eq.



斯波弘行「電子相関の物理」

超伝導、臨界現象

モット絶縁体、重い電子状態からの準粒子展開

注：相互作用の重複数え

- Bethe-Salpeter eq. + DMFT  
Kusunose 2006
- Dynamical vertex approximation  
Toschi, Katanin, Held, 2007
- Dual fermion approach  
Rubtsov et al. 2008, Hafermann et al. 2009, Otsuki et al. 2014
- Based on Cluster DMFT  
Slezak et al. 2009
- GW + DMFT  
Biermann et al. 2003, Sun, Kotliar 2004, Ayrat et al. 2013
- FRG + DMFT  
Taranto et al. 2014
- FLEX + DMFT  
Kitatani, Tsuji, Aoki 2015



# 課題とまとめ：重い電子系の包括的理解に向けて

