

# 動的平均場理論

動的平均場理論の自己無撞着方程式の導出には様々な方法がある。どれが分かり易いかは人それぞれだと思う。このノートでは有効媒質理論 (Effective medium theory) と呼ばれる方法で導出する。この導出法は合金 (乱雑ポテンシャル系) を扱う理論である CPA (Coherent Potential Approximation) と呼ばれる理論の相互作用系への拡張になっている。以下の導出は、いろいろな文献を参考にしてそれを自分なりに解釈してまとめたものなので、元ネタの参考文献を1つだけ挙げるのは難しい。CPA との関連で例えば文献 [1] が参考になる。

ちなみに、以下の導出の他にはキャビティの方法 (cavity method) [2] と呼ばれるものもあり、そちらの方が一般的であると思う。また、ややアドバンスな導出法として、自己エネルギー汎関数法 [3] やデュアルフェルミオン法 [4] というものもある。これらの理論は動的平均場理論の拡張理論であるが、より広い視点からの極限として動的平均場理論を導出することにより、一歩進んだ理解ができると思う。

## 1 有効媒質

経路積分表示を使う。有効媒質理論によらずどのような導出をするにしても、動的平均場理論の定式化には経路積分表示が必須だと思う。分配関数  $Z$  はグラスマン数  $c, \bar{c}$  の積分によって

$$Z = \int \prod_i D\bar{c}_i Dc_i e^{-\mathcal{S}\{\bar{c}, c\}} \quad (1)$$

と表され、作用  $\mathcal{S}$  は

$$\mathcal{S}\{\bar{c}, c\} = \int d\tau d\tau' \sum_{ij} \bar{c}_i(\tau) [-G_0^{-1}(\tau - \tau')]_{ij} c_j(\tau') + \sum_i \mathcal{S}_{\text{int}}\{\bar{c}_i, c_i\} \quad (2)$$

で与えられる。 $G_0$  は自由粒子のグリーン関数で  $G_0^{-1}(i\omega, \mathbf{k}) = i\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}$  を時間・空間に関してフーリエ変換したものである。 $\mathcal{S}_{\text{int}}$  は局所的な相互作用を表す項である。記述を簡単化するため、関数  $c_i(\tau)$  を形式的にベクトル  $\mathbf{c}_i$  で表し、上式を

$$\mathcal{S}\{\bar{c}, c\} = \sum_{ij} \bar{c}_i (-G_0^{-1})_{ij} \mathbf{c}_j + \sum_i \mathcal{S}_{\text{int}}\{\bar{c}_i, \mathbf{c}_i\} \quad (3)$$

のように表すことにする。 $G_0$  は虚時間依存性に関して行列になっていると解釈する。

今、各サイトにおける相互作用  $\mathcal{S}_{\text{int}}$  の効果を、ある一体のポテンシャルに押し込めることを考える。この考え方はスピン系の平均場近似と似ているが、スピン系の平均場が静的な場 (磁場) であるのに対して、ここでは動的な場を考える。この様な動的場を有効媒質と呼ぶ。動的ポテンシャルを  $\Sigma(i\omega)$  で表すと、ポテンシャルによる補正を受けた格子系のグリーン関数  $G$  は

$$G^{-1}(i\omega, \mathbf{k}) = G_0^{-1}(i\omega, \mathbf{k}) - \Sigma(i\omega) \quad (4)$$

となる。この式から  $\Sigma$  は波数依存性を無視した自己エネルギーとしての意味を持つことが分かる。 $\Sigma$  が有効不純物模型の自己エネルギーとして求まることは後ほど示されるが、ここでは任意の関数である。全系の作用  $\mathcal{S}$  を  $G$  を使って書き換えると

$$\mathcal{S}\{\bar{c}, c\} = \underbrace{\sum_{ij} \bar{c}_i (-G^{-1})_{ij} \mathbf{c}_j}_{S_{\text{med}}} + \sum_i (\mathcal{S}_{\text{int}}\{\bar{c}_i, \mathbf{c}_i\} - \bar{c}_i \Sigma \mathbf{c}_i) \quad (5)$$

となる。この表式を式 (1) の分配関数に代入すると

$$Z = Z_{\text{med}} \left\langle e^{-\sum_i (\mathcal{S}_{\text{int}}\{\bar{c}_i, c_i\} - \bar{c}_i \Sigma c_i)} \right\rangle_{\text{med}} \quad (6)$$

と書き換えられる。ここで、 $Z_{\text{med}}$  は作用  $\mathcal{S}_{\text{med}}$  で表される系の分配関数、 $\langle \dots \rangle_{\text{med}}$  は  $\mathcal{S}_{\text{med}}$  に関する平均を表す。

ここで近似をする。式 (6) の指数部分を展開すると、 $\mathcal{S}_{\text{int}}\{\bar{c}_i, c_i\} \mathcal{S}_{\text{int}}\{\bar{c}_j, c_j\} \dots$  のように異なるサイトの相互作用の積が現れるが、このような項を無視し、同一サイトの相互作用の積のみを残すことにする。これは物理的には、非局所的な相関効果は無視することに対応する。以上の近似は、平均  $\langle \dots \rangle_{\text{med}}$  の中で使われるグリーン関数  $G$  をその局所成分  $G_{ii}$  で置き換えることによって記述でき、このとき分配関数は

$$Z \approx Z_{\text{med}} \prod_i \left\langle e^{-\sum_i (\mathcal{S}_{\text{int}}\{\bar{c}_i, c_i\} - \bar{c}_i \Sigma c_i)} \right\rangle_i \equiv Z_{\text{med}} \prod_i \frac{Z_{\text{imp}}}{Z_i} \quad (7)$$

となる。最後の表式の  $Z_i$  は  $Z_i = \int \mathcal{D}\bar{c}_i \mathcal{D}c_i e^{-\bar{c}_i (-G_{ii})^{-1} c_i}$  で定義される。 $Z_{\text{imp}} = \int \mathcal{D}\bar{c}_i \mathcal{D}c_i e^{-\mathcal{S}_{\text{imp}}}$  は相互作用を含む項で、 $\mathcal{S}_{\text{imp}}$  は

$$\mathcal{S}_{\text{imp}}\{\bar{c}_i, c_i\} = \bar{c}_i (-\mathcal{G}^{-1}) c_i + \mathcal{S}_{\text{int}}\{\bar{c}_i, c_i\} \quad (8)$$

で定義される。ここで  $\mathcal{G}$  は

$$\mathcal{G}^{-1} = (G_{ii})^{-1} + \Sigma \quad (9)$$

である。この式は、有効媒質中のグリーン関数から、ある注目するサイトでのポテンシャルを取り除くことを意味する。そのため、 $\mathcal{G}$  はキャビティ（空洞）グリーン関数と呼ばれる。

式 (8) の  $\mathcal{S}_{\text{imp}}$  は不純物アンダーソン模型の作用に他ならない。これを確認するためには、 $c_i$  を局在電子を表す  $f$  または  $d$  と読み替え、さらに  $\mathcal{G}$  を  $\mathcal{G}(i\omega)^{-1} = i\omega - \epsilon_f - \Delta(i\omega)$  と表す。そうすると、 $\Delta(i\omega)$  が媒質との混成効果としての意味を持ち、不純物アンダーソン模型になっていることが確認できる。

## 2 変分原理

ここまでは  $\Sigma(i\omega)$  を任意の関数としてきた。式 (6) の分配関数を厳密に評価することができれば結果は  $\Sigma$  に依らないが、実際は式 (7) の近似のために結果は  $\Sigma$  に依存する。この近似の元での最適な  $\Sigma$  の条件は変分原理から導くことができる。そのために、自由エネルギー  $\Omega = -(1/\beta) \ln Z$  を以下のように書き下す：

$$\beta\Omega[\Sigma] = \beta\Omega_{\text{med}} - \sum_i \beta\Omega_i + \sum_i \beta\Omega_{\text{imp}} \quad (10)$$

ここで、 $\Omega$  が  $\Sigma$  の汎関数であることを強調するため、左辺のみ引数を露わに書いた。右辺の最初の 2 項はそれぞれ分配関数  $Z_{\text{med}}$  と  $Z_i$  に対応する自由エネルギーで、それらは 1 体問題なので

$$\beta\Omega_{\text{med}} = -\text{Tr} \ln G^{-1} \quad (11)$$

$$\beta\Omega_i = -\text{Tr} \ln G_{ii}^{-1} \quad (12)$$

のように解析的に求まる。一方、 $\beta\Omega_{\text{imp}} = -\ln Z_{\text{imp}}$  は多体問題なので解析的には求まらない。

$\delta\Omega/\delta\Sigma$  の計算を各項ごとに見ていこう。まず、 $\Omega_{\text{med}}$  の微分は  $G$  の定義式 (4) を使うと、 $\delta\Omega_{\text{med}}/\delta\Sigma = \text{Tr} G$  と計算できる。次に、 $\Omega_i$  を微分する際には式 (9) を使って  $G_{ii}$  を  $\Sigma$  と  $\mathcal{G}$  で置き換え、 $\mathcal{G}$  が  $\Sigma$  に依存することに注意すると、 $\delta\Omega_i/\delta\Sigma = \text{Tr} G_{ii} (1 - \delta\mathcal{G}^{-1}/\delta\Sigma)$  と計算できる。最後に、 $\Omega_{\text{imp}}$  の微分は  $\mathcal{G}^{-1}$  の微分に書き

換えることにより、 $\delta\Omega_{\text{imp}}/\delta\Sigma = -\text{Tr}G_{\text{imp}}(\delta\mathcal{G}^{-1}/\delta\Sigma)$  と求まる。ここで、 $G_{\text{imp}}$  は有効不純物模型  $\mathcal{S}_{\text{imp}}$  のグリーン関数  $G_{\text{imp}} = \langle \bar{\mathbf{c}}_i \mathbf{c}_i \rangle_{\text{imp}}$  である。以上をまとめると、 $\Omega$  の変分は

$$0 = \frac{\delta\Omega}{\delta\Sigma} = \text{Tr}(G_{ii} - G_{\text{imp}}) \frac{\delta\mathcal{G}^{-1}}{\delta\Sigma} \quad (13)$$

と計算され、これより動的平均場理論の自己無撞着条件

$$G_{ii} = G_{\text{imp}} \quad (14)$$

が得られる。

最後に、有効媒質中の動的ポテンシャルとして導入した  $\Sigma$  が有効不純物模型の自己エネルギー  $\Sigma_{\text{imp}}$  と一致することを確認しよう。まず  $\Sigma_{\text{imp}}$  は定義から  $\Sigma_{\text{imp}} = \mathcal{G}^{-1} - G_{\text{imp}}^{-1}$  である。一方、 $\mathcal{G}$  の定義式 (9) と自己無撞着条件 (14) を使うと

$$\Sigma = \mathcal{G}^{-1} - (G_{\text{imp}})^{-1} = \Sigma_{\text{imp}} \quad (15)$$

となり、不純物模型の自己エネルギーが系全体の自己エネルギーと一致することが確認できる。

## 参考文献

- [1] D. Vollhardt, “*Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV*”, eds. A. Avella and F. Mancini, AIP Conference Proceedings (2010), arXiv:1004.5069.
- [2] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [3] M. Potthoff, *Eur. Phys. J. B* **32**, 429 (2003).
- [4] A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, and A. Georges, *Phys. Rev. B* **79**, 045133 (2009).