

動的平均場理論の基礎

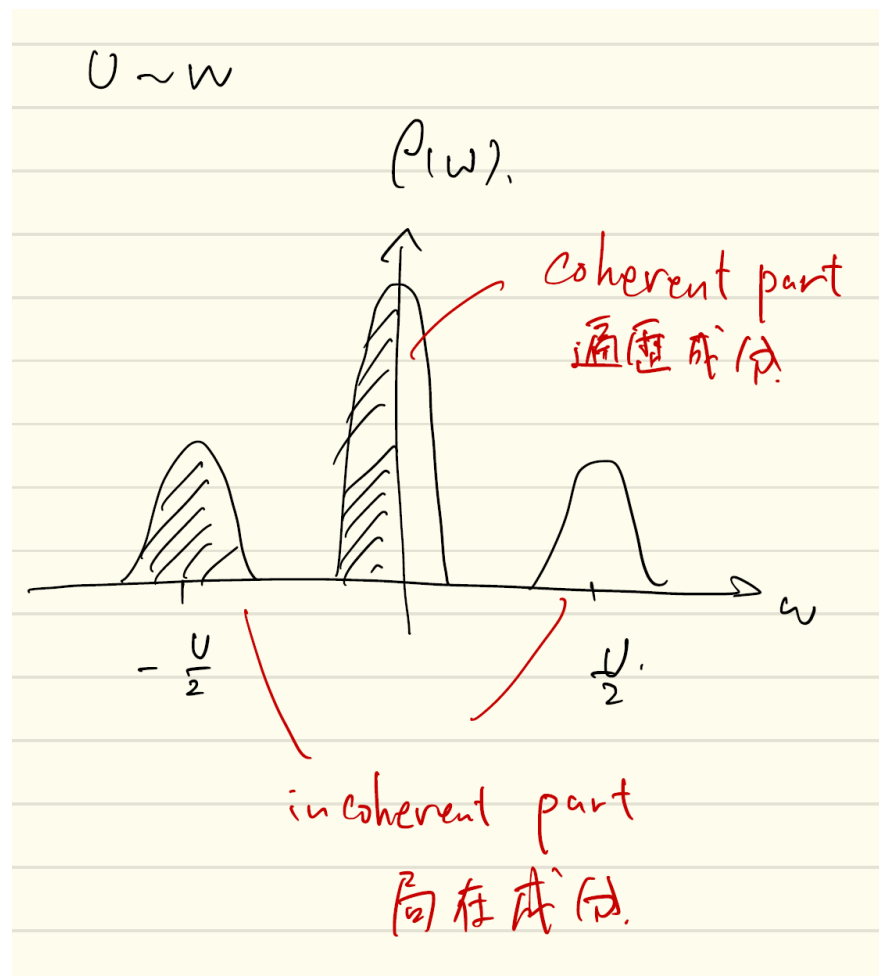
岡山大学 異分野基礎科学研究所

大槻純也



前回までの復習

- (遮蔽された短距離)クーロン斥力が強いと...
 - 電子が局在的になる
 - スピンゆらぎの増大
 - 遍歴電子のバンド幅が狭くなる
 - エネルギースケールの小さい準粒子
- 今日のテーマは...
 - 遍歴性と局在性を併せ持つ電子状態をどのように記述するか



復習：フェルミ液体

自己エネルギー

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) = \text{Re}\Sigma_{\mathbf{k}}(0) + \omega \left. \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re}\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) \right|_{\omega \rightarrow 0} + \mathcal{O}(\omega^2, T^2)$$

低エネルギー励起は寿命が長い

ARPESスペクトル

$U=0$

$$\rho_{\mathbf{k}}(\omega) = \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})$$

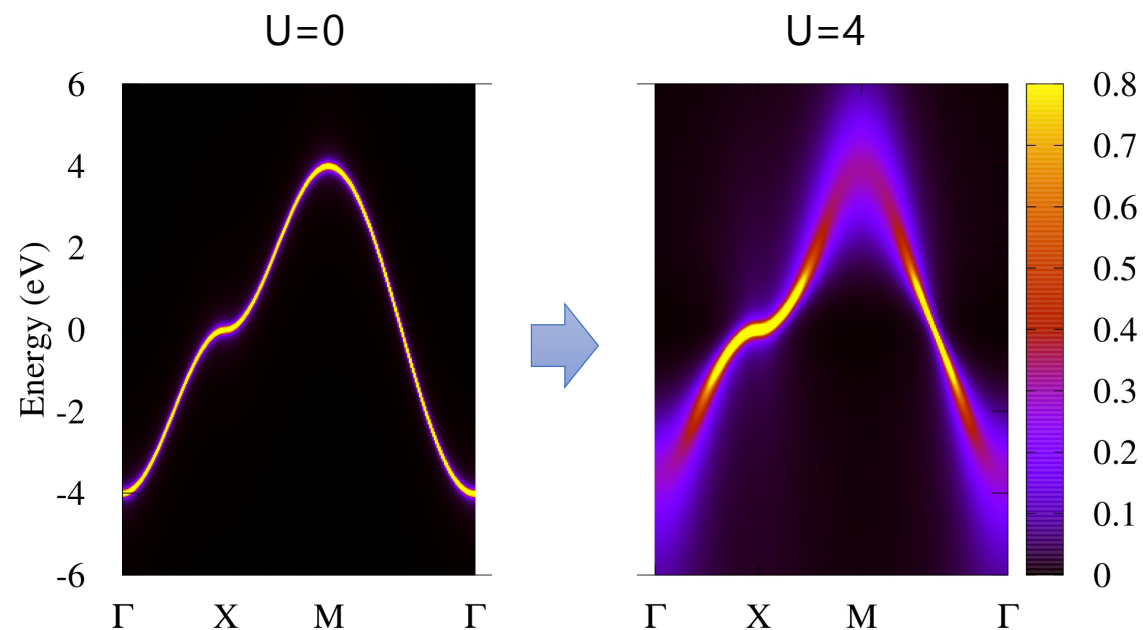
$$G_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}}$$

$U \neq 0$

$$\rho_{\mathbf{k}}(\omega) \simeq z_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}})$$

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) \simeq \frac{z_{\mathbf{k}}}{\omega - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}$$

動的平均場法による正方格子ハバード模型の
一粒子励起スペクトル(ARPESスペクトル)



$W=8, n=1, T=0.1$

DCoreチュートリアルより

<https://issp-center-dev.github.io/DCore/develop/tutorial/square/square.html>

復習：局在状態

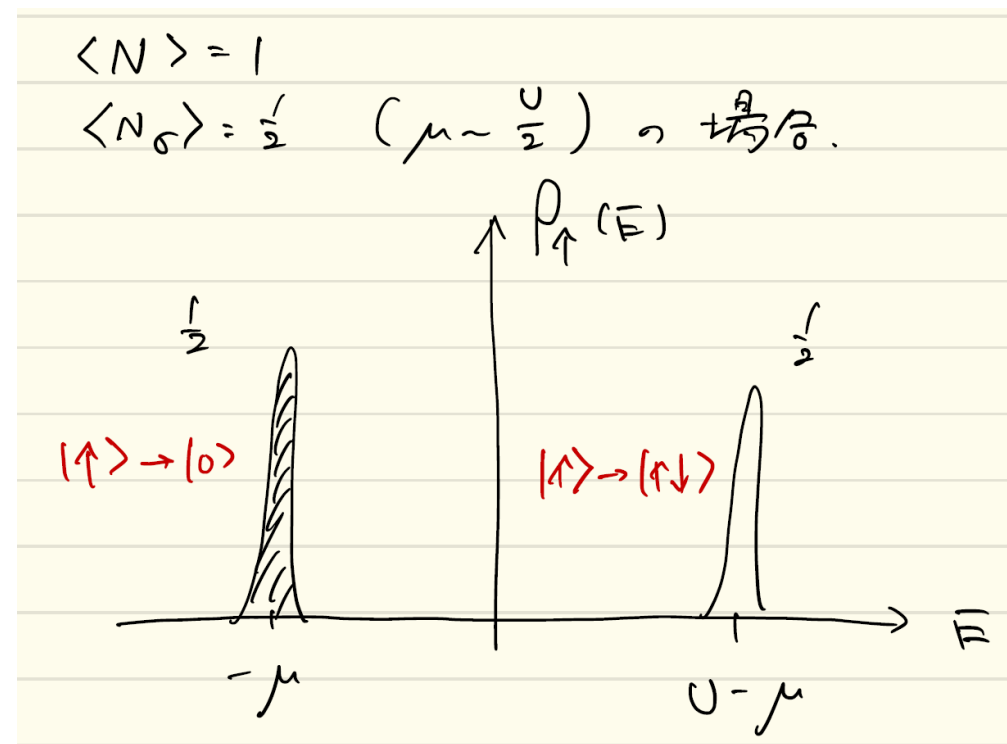
PESスペクトル

$$\rho_{\sigma}(\omega) = (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \delta(\omega + \mu) + \langle n_{-\sigma} \rangle \delta(\omega + \mu - U)$$

逆向きスピンのいる・いないに
応じてエネルギーが変化する

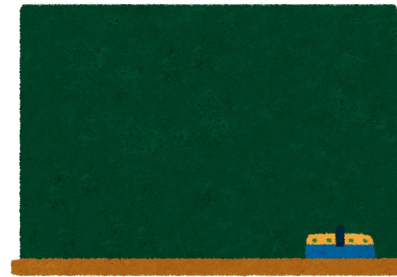
$$G_{\sigma}(\omega) = \frac{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega + \mu} + \frac{\langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega + \mu - U}$$

今日考えること：
遍歴・局在の性質を併せ持つスペクトル
を与える自己エネルギーはどのようなものか？



原子極限の自己エネルギー

局在状態を与える自己エネルギーの形を知る



Hubbard-I近似

ARPESスペクトル

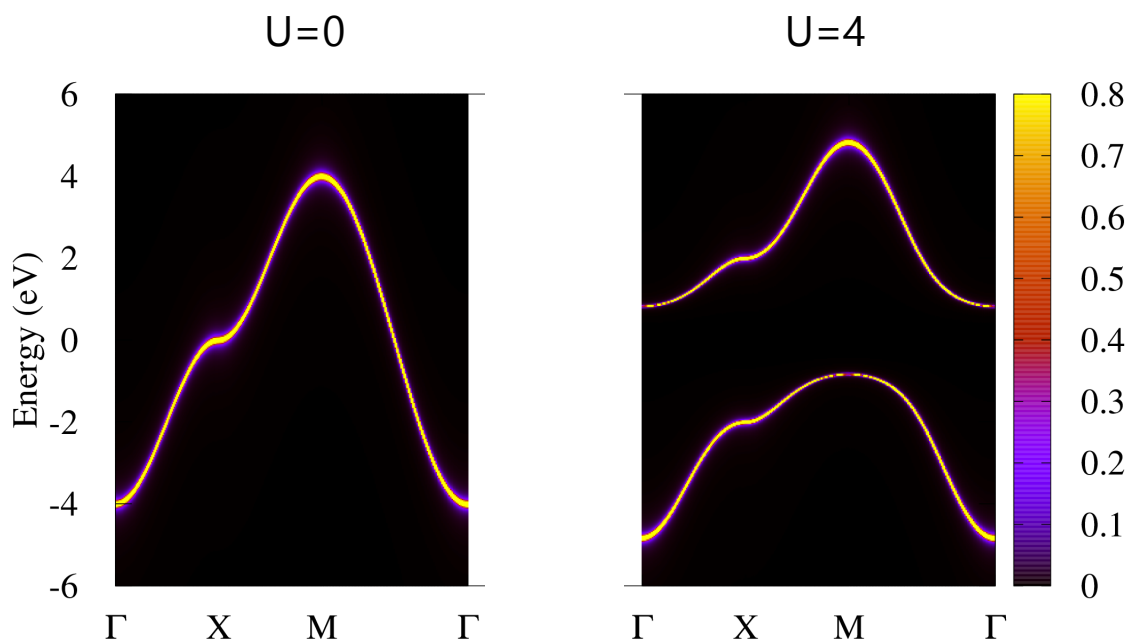
$$G_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} - \underline{\Sigma^{\text{atom}}(\omega)}}$$

原子極限($t=0$)の自己エネルギー

$$\Sigma^{\text{atom}}(\omega) = \frac{U}{2} + \frac{U^2}{4\omega}$$

モットギャップ、インコヒーレント成分を記述するには、**自己エネルギーの ω 依存性**が重要

Hubbard-I近似による正方格子ハバード模型の
一粒子励起スペクトル(ARPESスペクトル)



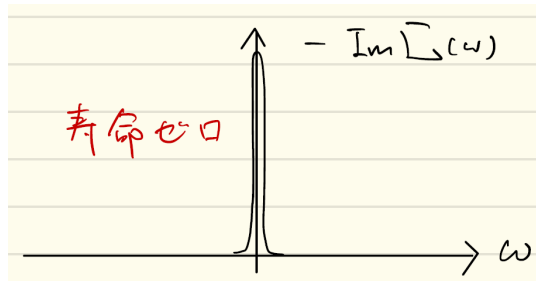
DCoreチュートリアルより

<https://issp-center-dev.github.io/DCore/develop/tutorial/square/square.html>

動的平均場理論

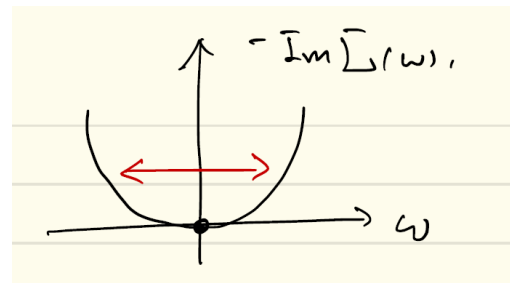
モット絶縁体

$$\Sigma^{\text{atom}}(\omega) = \frac{U}{2} + \frac{U^2}{4\omega}$$



フェルミ液体

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) = \text{Re}\Sigma_{\mathbf{k}}(0) + \omega \left. \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re}\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) \right|_{\omega \rightarrow 0} + \mathcal{O}(\omega^2, T^2)$$



自己エネルギーの ω 依存性が重要！

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

 と近似してみる

この近似の下で“最適な”自己エネルギーを計算する方法が動的平均場理論

動的平均場理論を詳しく知りたい人

すべてwebでダウンロード可能

- イメージをつかみたい
 - 「多体効果の最前線」大槻純也、物性研究(2016)
- しっかり数式を理解したい
 - 「動的平均場理論の基礎と応用」楠瀬博明
 - 「動的平均場理論の自己無撞着方程式の導出」大槻純也
- 拡張理論などの発展を知りたい
 - 「長距離相関効果を考慮した動的平均場法の拡張理論」大槻純也・楠瀬博明、固体物理(2016)
 - 「動的平均場理論とその拡張」倉本義夫・清水幸弘、固体物理(2004)

動的平均場理論

約 5,300,000 件 (0.52 秒)

動的平均場理論は、固体内電子の強い相関効果を非摂動的に扱える強力な方法である。 2004/05/19

www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp ~qmbt> articles | PDF
動的平均場理論とその拡張 - 物性理論研究室

park.itc.u-tokyo.ac.jp ~nagai> note_080411_aneff | PDF
Hubbard模型の有効作用と動的平均場理論
2008/04/11 — 動的平均場を理解するため、Ising 模型の平均場理論とその有効ハミルトニアンについて考える。このノートは A. Georges et al. Rev. Mod. Phys. 68 13 (1996). の 3-A に基づいて ...

他の人はこちらも検索

動的平均場理論の基礎と応用 動的平衡とは
DMFT 物理 有効ハミルトニアン
平均場近似 松原グリーン関数

www.physics.okayama-u.ac.jp ~nagoya2015> DMFT | PDF
動的平均場理論の自己無撞着方程式の導出
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ふ。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) ...

www.isc.meiji.ac.jp ~documents> memo> dmft | PDF
7. 動的平均場理論 応用
2011/10/26 — 動的平均場理論 役立主 強相関電子系 呼 分野: 分野 物性研究 大・一領域 占, 銅酸化物高温超伝導体 有機物質, 重 電子系 呼 物質群, 鉄. 代表 強磁性金属 研究対象. 強相関電子系, 運動 相互作用 含 取扱. 相互作用.

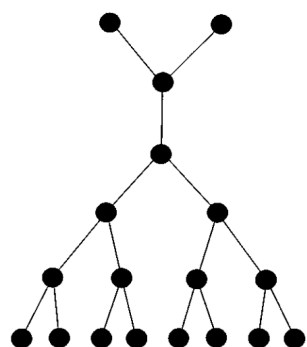
mercury.yukawa.kyoto-u.ac.jp ~bussei.kenkyu> pdf | PDF
多体効果の最前線
DFT+DMFT 法 4 と呼ばれる枠組みは、動的平均場理論 (DMFT) を用い、局所相関効果 (局所自己エネルギー $\Sigma(\omega)$) を考慮することによって、電子構造計算 (DFT) の適用範囲をモット絶。緑体を含む強相関化合物へと拡張するものである [8 ...

金属・絶縁体転移 (モット転移)

ハバード模型

$$\mathcal{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

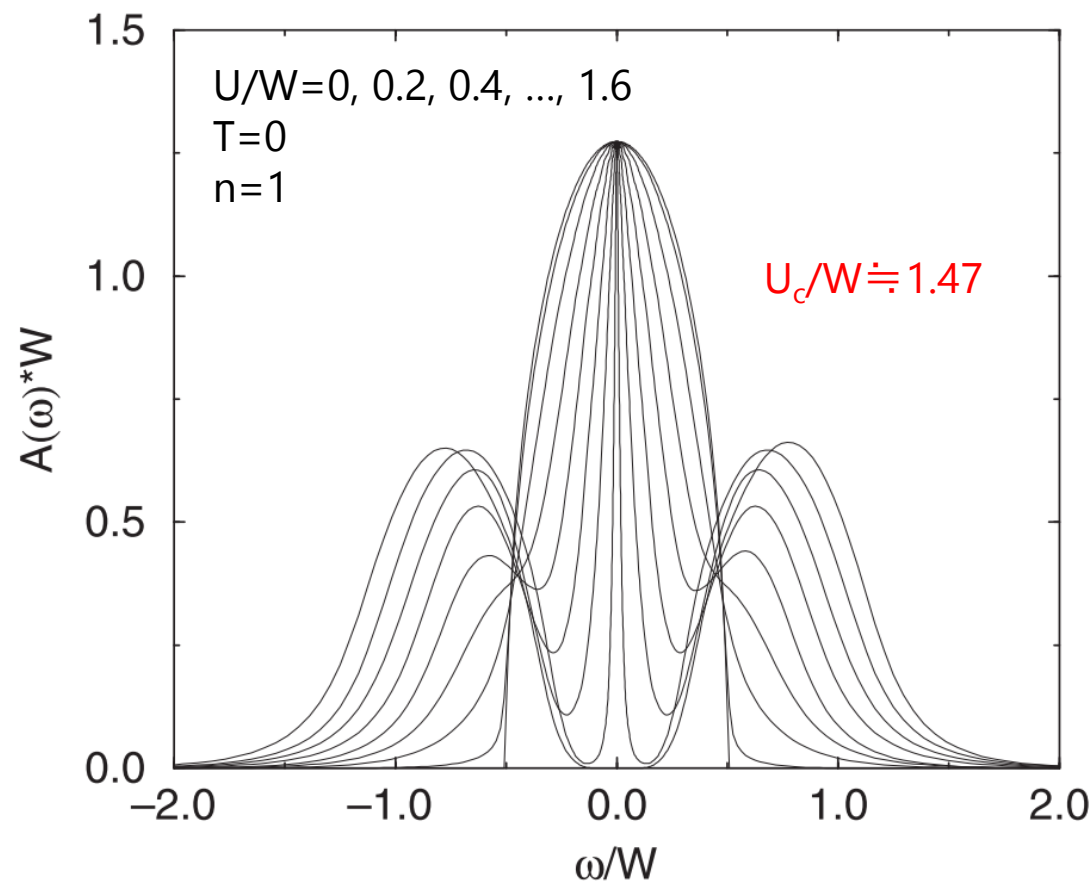
ベーテ格子(ツリー)



接続数
 $z \rightarrow \infty$

A. Georges et al., Rev. Mod. Phys. 68, 13 (1996)

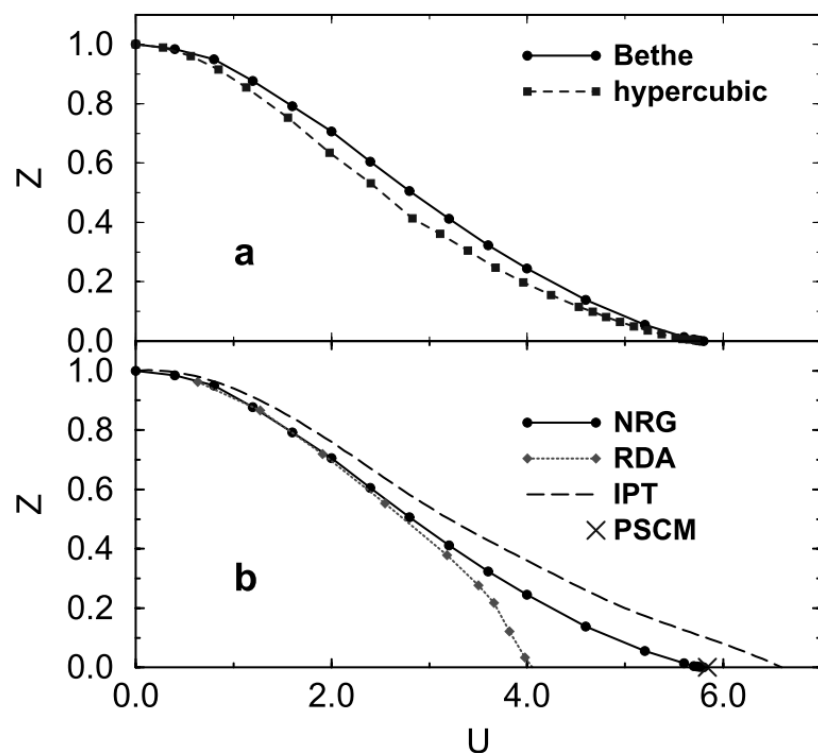
動的平均場法による一粒子励起スペクトル



D. Vollhardt et al., J. Phys. Soc. Jpn. 74, 136 (2005)

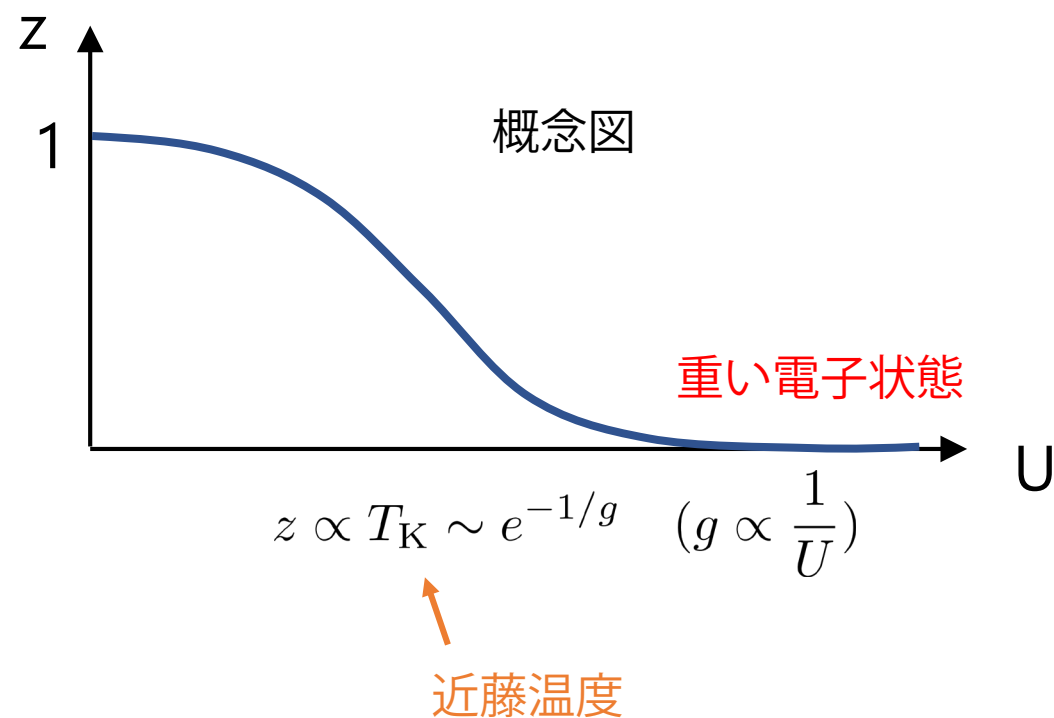
繰り込み因子

ハバード模型



R. Bulla: Phys. Rev. Lett. 83 (1999) 136

周期アンダーソン模型

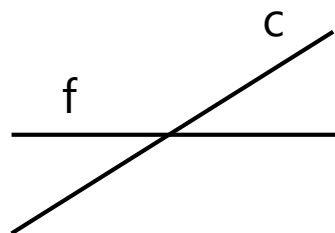


重い電子状態

周期アンダーソン模型

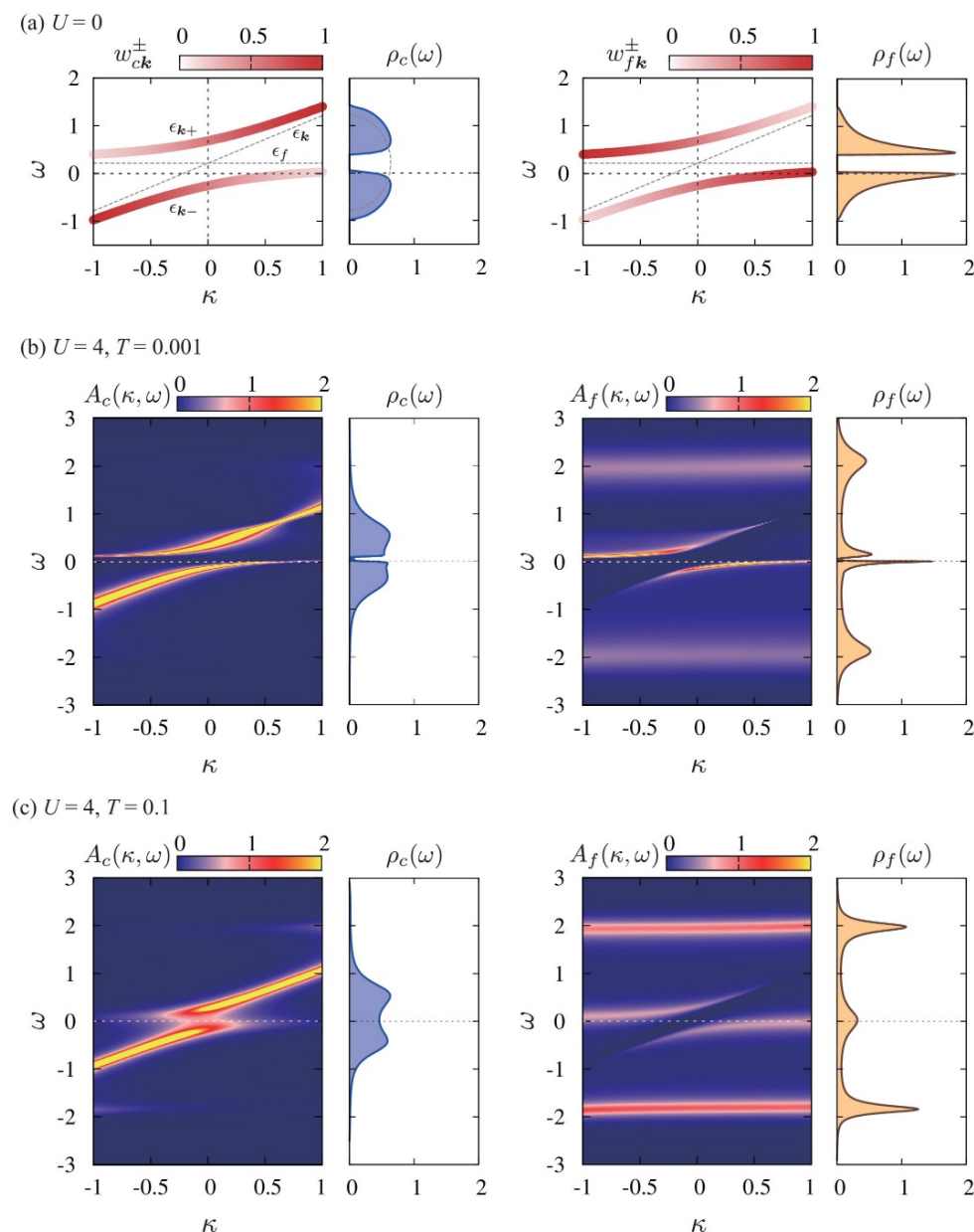
$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \epsilon_f f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + V_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + V_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \right] + U \sum_i f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\uparrow} f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\downarrow}$$

バンド幅 $W=2$ の伝導バンドと
局在した(バンド幅ゼロの)f電子



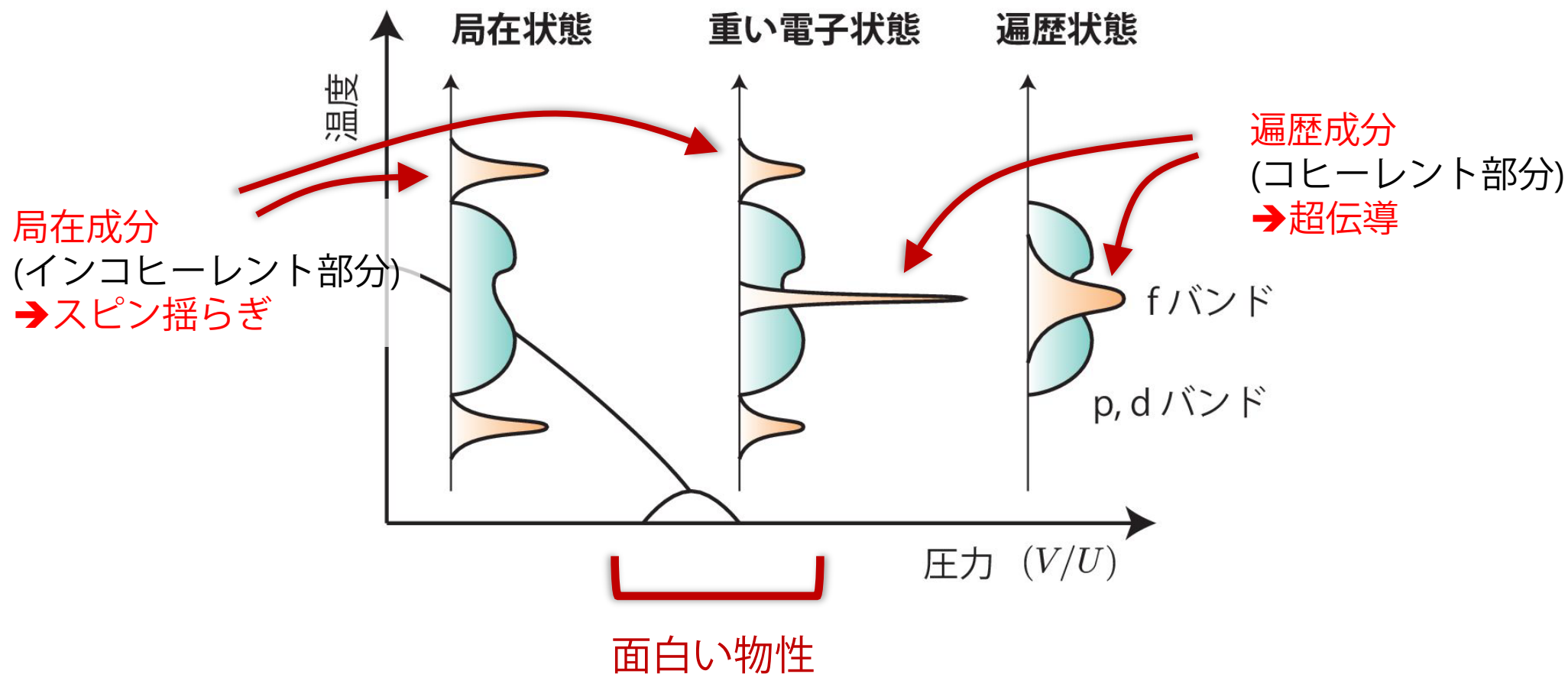
コヒーレント成分は低温でのみ顕著
フェルミ液体のエネルギースケール T^*

$$T^* \propto T_K \sim e^{-1/g} \quad (g \propto \frac{1}{U})$$



重い電子系の電子状態(まとめ)

(b) f 電子系



CeRu_2Si_2 , CeCu_2Si_2 , URu_2Si_2 , ...

f電子の遍歴・局在を観測する方法

- 帯磁率の温度依存性
- 電気抵抗の温度依存性
- フェルミ面を観測する フェルミ面の囲む体積から遍歴・局在を判定可能
 - PES, ARPES これで観測できれば一番良いが...
非占有状態が観測できないので難しい
 - 磁化振動（de Haas-van Alphen効果） フェルミ面の直接観測
低温極限・有限磁場
 - コンプトン散乱 物性コロキウムでお話します