多体効果の最前線

東北大学大学院　理学研究科　大槻純也

1　はじめに

世話人の方から、「動的平均場理論をも取り上げながら『多体効果の最前線』」というお題をいただいた。この講義ノートでは私の知識の及ぶ範囲で「最前線」の理論について解説したいと思う。多体効果の理論はどうしても数式が多く技術的な話が中心になりがちであるが、本稿では理論が必要となる背景や物理的なアイデアを中心に解説するように努めた。ただし、単なるお話に留まることを避けるため、一部の理論に関しては導出を付録にまとめた。なるべく省略せずに書いたので、詳細が知りたい読者は参考にしてほしい。

ちなみに私は 2009 年に開催された重い電子系若手秋の学校でも講師を担当した。その時の題目は「重い電子系の近藤効果と磁気秩序」で、テキストも残っている [1]。本稿はそのテキストとなるべく重複のないようにしている。特に、強相関電子系を理解する上で必要不可欠な近藤効果についてはここでは解説しない。これについては上述のテキストとそこで引用されている文献を参考にしてほしい。

本稿は以下のように構成される。次の節ではまず、なぜ多体効果を考慮する必要があるのかを私なりの視点から述べたい。多体効果の（数値）計算は込み入ったものが多いが、そこまでして難解な計算に取り組むことの動機付けを行う。第 3 節では、強相関模型を平均場近似や極限によって理解できるところまでを解説し、多体効果の必要性を再確認する。そこまで準備が整ったら、いよいよ多体効果を扱う理論に進む。第 4 節で、強相関系において重要となる動的な局所相関効果を扱うための動的平均場理論について述べる。数値計算を用いた計算例についても紹介する。次に、動的平均場理論とは対極にある空間揺らぎを扱う理論を第 5 節で紹介する。これは主に超伝導を目的とした理論である。第 6 節で、動的平均場理論と空間揺らぎを統合する最近の理論について解説する。そこで紹介する理論は発展途上であり、解決すべき課題が多く残っている。それについて第 7 節で議論し、まとめとする。

2　多体効果の最前線

2.1　電子相関による局在状態

強相関電子系の面白さは「中間領域」にあると思う。物理では極限を考えて、そこからのズレとして定性的に、時には定量的に理解するのが常套手段である。ところが、異なる電子状態を持つ 2 つの極限の中間領域において、しばしば両極限とは異なる新しい電子状態が出現する。例えば、磁性の量子臨界点は磁気秩序と常磁性状態の「中間領域」であるが、そこでは低温で発達した磁気揺らぎが別の揺らぎを誘起し、非従来型の超伝導などの相転移を引き起こす。電子の局在状態も非自明な中間領域を生み出す要因である。通常、固体中の電子は波数を良い量子数とした遍歴電子として表されるが、強相関電子系では原子に局在した状態が良い出発点となる場合がある。電子の遍歴状態と局在状態の中間領域では、波でもなく粒子でもない状態にあり、多彩な量子状態が実現する舞台となる。

強相関電子系に分類されるのは、Fe や Cu などの遷移金属元素を含む d 電子系化合物と Ce や U などの希土類・アクチナイド元素を含む f 電子系化合物であるが、両者で少々事情が異なる。それぞれ順に見ていこう。図 1(a) に典型的な d 電子系の相図を示す。縦軸は温度、横軸は電子間クーロン斥力 U である。弱相関領域は金属であるが、$U \geq U_{\rm c}$ において磁気秩序が起こる（反強磁性とする）。この秩序相は強相関領域までつながっている。常磁性相の電子状態に注目すると、弱相関領域は通常の金属であり、一方、強相関領域はモット絶縁体である。モット絶縁体はバンド理論では説明できない、電子相関による局在状態と解釈される。モット絶縁体は弱相関の金属状態とは繋がらないので、仮に反強磁性相を無視して考えると、電子状態が不連続に変化するモット転移が期待される [1]。このときの U の大きさ $U_{\rm MI}$ はバンド幅 W 程度と考えるのが妥当であろう。有名な銅酸化物高温超伝導体は $U \sim U_{\rm MI}$ に位置すると考えられている。したがって、遍歴と局在の中間領域にあり、それが微小ドープ領域における特異な電子状態と関連していると考えられている。

[1] モット絶縁体状態は多くの化合物で見られるが、モット転移の例は少ない。それは、実際の化合物では、図 1(a) の相図のように低温において反強磁性秩序などの対称性の破れが起こり、弱相関と強相関が連続的に変化できるようになるためである。常磁性状態におけるモット転移の典型例としては V_2O_3 がよく挙げられる [2]。

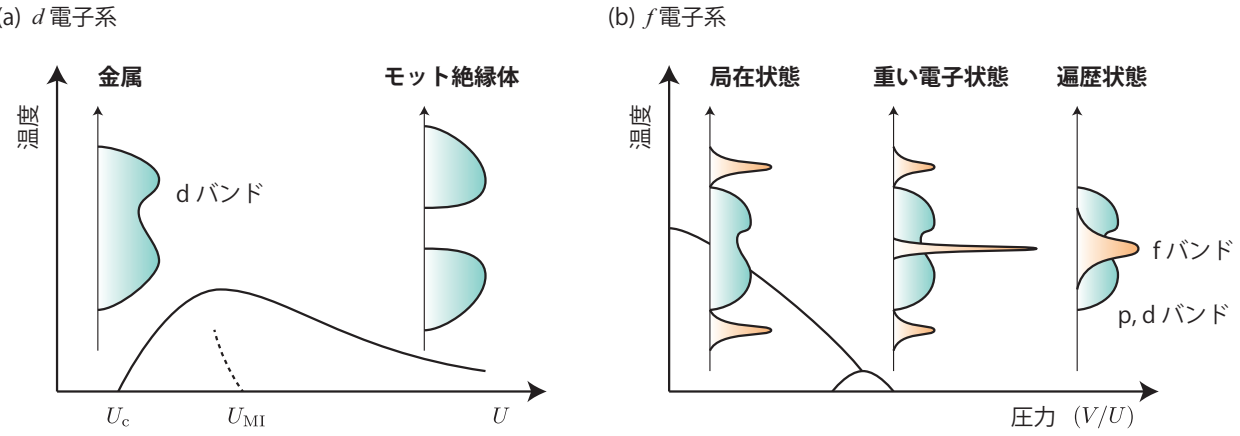


図 1: 強相関電子系化合物の相図と電子状態の概念図。電子状態は常磁性状態のものを描いてある。(a) d 電子系の場合で横軸はクーロン斥力 U。点線は反強磁性相がないと仮定したときに期待されるモット転移。(b) f 電子系の場合で横軸は圧力。V/U と読み換える。

図 1(b) は典型的な f 電子系化合物の相図である。横軸は多くの実験と対応させて圧力としている。圧力は、f 電子と伝導電子の混成効果を V として、V/U に対応すると考える。したがって、この図の横軸は図 1(a) のそれとは反転していることに注意されたい。高圧領域（弱相関領域）は常磁性金属状態である。f バンドだけでなく、希土類以外の構成元素の p 電子や d 電子を主成分として持つ伝導バンドもフェルミ面に顔を出す点が d 電子系化合物との違いである。低圧または負圧領域（強相関領域）では、f 電子が局在磁性として振る舞う。これはいわば電子相関による「f 電子のモット絶縁体」状態である。ただし、伝導バンドがあるので金属状態のままである。この局在領域では、f 電子がフェルミ面から消失し、Ce 化合物（$4f^1$ 電子配置）の電子状態が La 化合物（$4f^0$ 電子配置）のそれと類似したものになる。また、全領域で金属状態であるため、U（または圧力）の変化に対してモット転移のような不連続は存在せずに連続的に変化する [2]。中間領域において実現する両極限の性質を併せ持った状態が重い電子状態である。その電子状態の一粒子励起スペクトルは、電子の遍歴状態に相当する低エネルギーのコヒーレント部分と局在状態に相当する高エネルギーのインコヒーレント部分の両方を同時に持っている。前者が伝導に寄与をし、後者が局在磁性を担う。このようにスペクトルが遍歴と局在の両方の性質を併せ持った 3 ピーク構造を示すのが強相関電子系の特徴である。

強相関系の理論計算では、弱相関の遍歴状態から強相関の局在状態までを包括的に扱う必要がある。これに関しては、動的平均場理論とその自己無撞着方程式を解く数値計算手法の発展により、ほぼ道具が出揃っていると言ってよい。多体効果に関する最近の研究課題は、強相関系特有のスペクトルの 3 ピーク構造は前提として、その状態で起こる磁性や超伝導をどのように記述するかという問題である。

2.2 重い電子超伝導の面白さと難しさ：局所相関と空間揺らぎ

f 電子系化合物における超伝導は $CeCu_2Si_2$ の発見 [3] 以来、数多く見出されている（これまで見つかっている重い電子系超伝導体が文献 [4] で分類されている）。ここで一例を挙げると、U 化合物でいくつか見つかっている強磁性超伝導 [5] や反転対称性のない系における超伝導 [6] がある。超伝導はそれ自体、多くの研究者を魅了する現象であるが、重い電子系で起こる超伝導の特別な魅力はなにか。これについては人それぞれだと思うが、私なりの考えを述べたい。

ひとつめは非従来型超伝導の舞台であること。一般に、f 電子間の強いクーロン斥力のために等方的な超伝導ギャップを持つ s 波超伝導は不利である。そのため、d 波対称性がスピン一重項電子対の中で「最低次」の対称性となる。ふたつめは、超伝導が磁性と強く相関していること。重い電子系化合物で見つかっている多くの超伝導相が磁性相の近くに存在していること、あるいは超伝導と磁性が共存していることがその証拠である。斥力から引力を作り出すような、狭い意味での BCS 理論とは異なるメカニズムによって電子対が形成されていると考えられている。最後に理論的な立場からの興味として、重い電子超伝導が 2 つの種類の中間領域にある点が挙げられる。すなわち、f 電子系において超伝導が観測されている領域は、磁気秩序と常磁性状態の中間領域（量子臨界点近傍）であり、遍歴状態と局在状態の中間領域

[2] 磁性相を無視して考えると、基底状態では f 電子は必ず遍歴的である。これは、伝導電子との混成効果によって、U がどれだけ大きくても低エネルギー励起が可能なためである（近藤効果）。ただし、そのエネルギースケール T^* が U の増加と共に指数関数的に小さくなるため、強相関領域では $T = 0$ を除いて実質的に局在状態とみなせる。T^* における変化は連続的である。

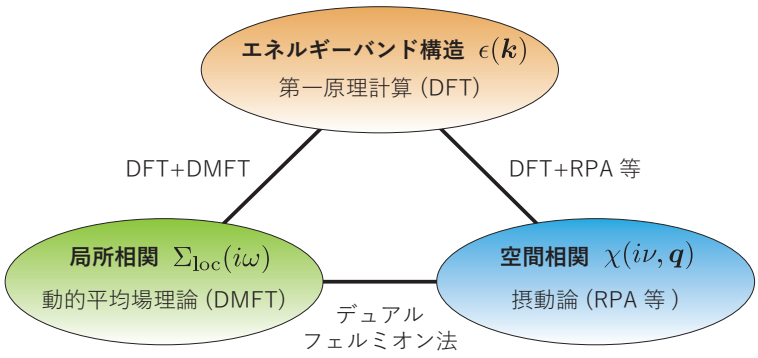


図 2: 強相関電子系に関連した各種理論の関係。文献 [7] より。

でもある（図 1(b)）。そのため、準粒子のエネルギースケールが小さく、様々な揺らぎが拮抗しているために多彩な超伝導状態が実現していると思われる。これはまた、理論的に扱う際の難しさでもあり、それ故に重い電子超伝導は理論的に挑戦的な課題であり続けている。これに関する最近の進展は本稿の後半で紹介する。

2.3 第一原理計算における多体効果

フェルミ面は「金属の顔」と言われるように、エネルギーバンド構造が化合物の個性を決定する。しかし、バンド理論は一体問題に基づいたものなので、強相関化合物の個性を議論するにはそれだけでは不十分である。例えば、一粒子励起スペクトル [3] は多体効果によってブロードになっている（ただし、フェルミ面は存在する）し、図 1 にあるようなスペクトルの 3 ピーク構造やモットギャップはもちろんバンド理論では再現できない。また、電子状態の温度変化も多体効果を考慮して初めて議論できる。

多体効果の理論研究では、化合物の詳細を極力そぎ落とした低エネルギーの有効模型を扱うのが一般的である。それは、注目する現象に本質的な要素のみを取り出して議論をするというのが物理の基本的な考え方だからである。一方、最近では化合物の詳細をなるべく取り入れたまま多体効果を考慮し、化合物の個性を議論するという、言ってみれば化学的な方向の研究も盛んになっている。

この方向での各種理論を図 2 にまとめた。DFT+DMFT 法 [4] と呼ばれる枠組みは、動的平均場理論（DMFT）を用いて局所相関効果（局所自己エネルギー $\Sigma_{\rm loc}(\omega)$）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縁体を含む強相関化合物へと拡張するものである [8–10]。またそれとは別に、化合物のエネルギーバンド構造を取り入れた揺らぎ $\chi(\omega,\boldsymbol{q})$ の計算（ここでは DFT+RPA 法と呼ぶ）も盛んである。特に、d 電子系の超伝導の研究では標準的になっていると言ってよい。それは、超伝導の性質がフェルミ面の構造に大きく依存するため、個々の化合物における超伝導を議論するにはバンドの詳細が必須となるためである。この方法は f 電子系の多極子秩序にも応用され始めている [11]。DFT+DMFT 法と DFT+RPA 法は、それぞれ一粒子相関（自己エネルギー）と二粒子相関（揺らぎ）を扱うという点で別々の目的を持っている。将来的にはそれらの理論は統合されるべきであろう。

本稿では、モデル計算の範囲で DMFT や RPA などの各種理論とそれらを統合する最近の取り組みを紹介する。第一原理計算への応用に関しては、私の力不足から本稿で解説することはしない。興味のある読者は、上に挙げた文献や日本語の解説記事 [12] を参照してほしい。

3 強相関模型と平均場近似

この節では、強相関電子系の模型の簡単な近似や極限を考えることによって、前節の概念図 1 の外堀を埋めていく。

[3] エネルギーバンドは、厳密に言えば、一体問題の場合にしか定義できない。多体効果がある場合には、一粒子励起スペクトルと呼ぶのが正しい。
[4] DFT は密度汎関数理論の略である。ほとんどの第一原理計算は DFT に基づいているので、象徴的にこのように書くことが多い。あるいは、もう少し限定的に LDA+DMFT 法（LDA は局所密度近似の略）と呼ばれることもあるが、基本的には同じものを指している。

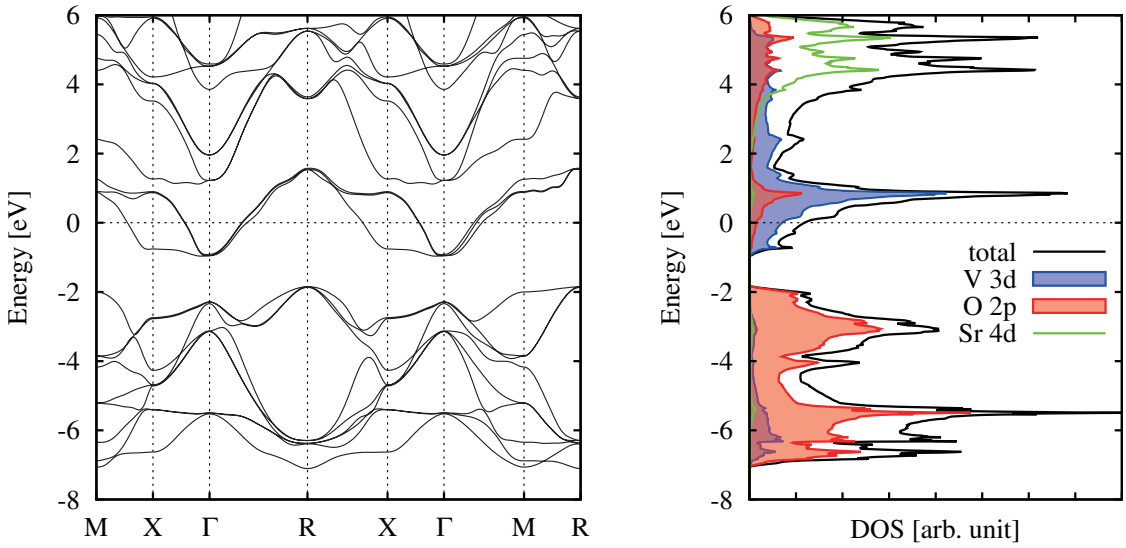


図 3: ペロブスカイト構造を持つ化合物 $SrVO_3$ のエネルギーバンド分散（左）と状態密度（右）。LDA による計算。フェルミ準位 $E_F = 0$ 付近の 3 つのバンドは V の $3d$-t_{2g} 軌道、フェルミ準位以下の 9 つのバンドは O の 2p 軌道である。

3.1 d 電子系：ハバード模型

遷移金属を含む d 電子系化合物では、多くの場合、d 電子がフェルミ準位近くのエネルギーバンドを構成する。例として、ペロブスカイト構造をもつ化合物 $SrVO_3$ のエネルギーバンド構造と状態密度を図 3 に示す。フェルミ面を構成するバンドは V の $3d$-t_{2g} 軌道を主成分として持つ 3 つのバンドである。V^{4+} の電子配置は $3d^1$ なので、このバンドに電子が 1 つ（バンド 1/2 個分）詰まっている。フェルミ準位以下の占有側に O の $2p$ バンドが、非占有側に V の $3d$-e_g バンドがあり、それらはフェルミ準位から $1\text{eV} \approx 10^4\text{K}$ 以上離れている。そこで、フェルミ準位近傍にある d バンド（この場合は t_{2g} バンド）のみを取り出して他のバンドを無視するのが室温以下の低温物性を考える上で良い出発点となるであろう。そこに電子間のクーロン相互作用を加えた模型がハバード模型である。エネルギーバンドを記述するハミルトニアンは強束縛近似による表示を用いて

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{ij,\alpha\beta} t_{ij,\alpha\beta} c^\dagger_{i\alpha} c_{j\beta} = \sum_{\boldsymbol{k}\lambda} \epsilon_{\boldsymbol{k}\lambda} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda} c_{\boldsymbol{k}\lambda} \tag{1}$$

と表される。ここで、i, j は格子点のインデックス、α, β はスピンと軌道を含む局所自由度を表すインデックスで、λ はバンドのインデックスである。$t_{ij,\alpha\beta}$ は跳び移り積分であり、軌道量子数は格子全体では保存量でないために、α, β に関して非対角要素を持つ。

電子間のクーロン斥力は金属中では遮蔽効果によりスクリーンされて短距離力（湯川型）になるので、第一近似として同一原子上の電子間にのみ作用すると考える。簡単のため軌道自由度は無視すると、ハバード模型のハミルトニアンは化学ポテンシャル μ も含めて

$$\mathcal{H}_{\text{Hubbard}} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu) c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \tag{2}$$

と表される。ここで、$n_{i\sigma} = c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma}$ および $c_{i\sigma} = (1/\sqrt{N}) \sum_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\sigma} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i}$ である。このハミルトニアンは、第 1 項が波数表示、第 2 項が実空間表示で書かれているため、同時対角化できないという点が本質的である。別の言葉でいえば、遍歴的性質と局在的性質をどうやって繋ぐかという問題である。

本稿では特に断りのない限り、軌道自由度を省略してスピン自由度のみを明記する。多体論の枠組みは軌道自由度の有無でほとんど変わらない（物理はもちろん変わる）。軌道自由度を考慮する場合には、各種物理量を軌道の添え字を持った行列と見て、数式を行列演算として解釈しなおせばほとんどの場合はそのまま適用できる。

ここで、後の議論のために一粒子グリーン関数 $G(\omega, \boldsymbol{k})$ を導入しておこう。いきなりではあるが、グリーン関数は以下のように定義される：

$$G(\omega, \boldsymbol{k}) = \frac{1}{\omega^+ + \mu - \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \Sigma(\omega, \boldsymbol{k})} \tag{3}$$

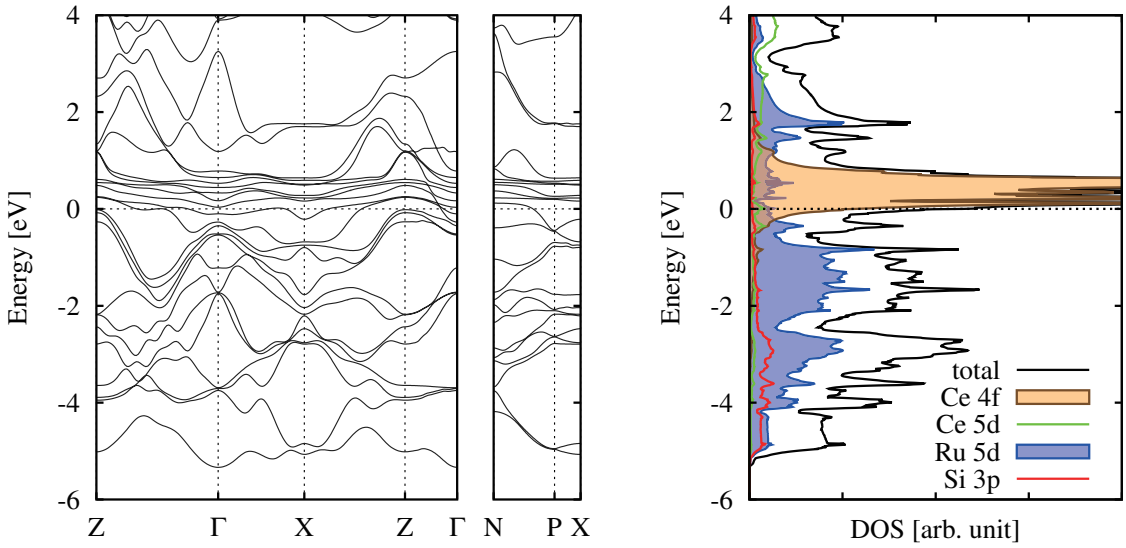


図 4: $CeRu_2Si_2$ のエネルギーバンド分散（左）と状態密度（右）。文献 [13] を参考に LDA で計算。フェルミ準位 $E_F = 0$ より上にある 7 つの平坦なバンドが Ce の $4f$ バンド、それらを除く -5eV から $+2$eV 程度の間にあるバンドが Ru の $5d$ バンドである。

ここで、$\omega^+ = \omega + i0$ である [5]。$\Sigma(\omega, \boldsymbol{k})$ は自己エネルギー（複素数）で、相互作用 U の効果は全てここに含まれる。グリーン関数の虚部は角度分解光電子分光（と逆光電子分光）で観測することのできる一粒子励起スペクトル $A(\boldsymbol{k}, \omega) = -(1/\pi)\mathrm{Im}G(\omega, \boldsymbol{k})$ を与える。例えば、$U = 0$ の場合を考えて $\Sigma(\omega, \boldsymbol{k})$ を落とすと、公式 $1/(\omega^+ - \epsilon) = P/(\omega - \epsilon) - i\pi\delta(\omega - \epsilon)$（$P$ は主値の意味）から $A(\boldsymbol{k}, \omega) = \delta(\omega + \mu - \epsilon_{\boldsymbol{k}})$ が得られ、エネルギー分散 $\omega = \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu$ を描くことができる。$U \neq 0$ の場合には、$\Sigma(\omega, \boldsymbol{k})$ が有限の値を持ち、その実部はエネルギーシフトを、虚部はスペクトルの幅、すなわち励起状態の寿命を与える。多体効果を考慮して $\Sigma(\omega, \boldsymbol{k})$ を計算することが理論の目標である。

3.2 f 電子系：周期アンダーソン模型

希土類やアクチナイドなどの f 電子系化合物の電子状態は d 電子系化合物と比べて複雑であり、ほとんどの場合、フェルミ面が複数ある。例として、重い電子状態を示す非磁性化合物 $CeRu_2Si_2$ のエネルギーバンドと状態密度を図 4 に示す。LDA による計算であるため、多体効果は考慮されていないことに注意されたい。この計算は図 1(b) の相図上の高圧領域に対応する。フェルミ準位近傍の非占有側、1eV 以下にある 7 つの平坦なバンドが Ce の $4f$ バンドである。Ce^{3+} の電子配置は $4f^1$ なので、このバンドに電子が 1 つだけ詰まっている計算である。$4f$ バンドのエネルギー幅が 0.1eV 程度以下である点に注目してほしい。これは、$4f$ 軌道が局在性を強く持つことを意味する。-5eV から $+2$eV 程度の範囲にあるバンドが Ru の $4d$ バンドである。このように、f 電子系化合物の電子状態はバンド幅の狭い $4f$ バンドと幅の広い伝導バンド（この場合は $5d$ 電子由来）によって構成される。この状況を極力簡単化したものが以下のハミルトニアンで与えられる周期アンダーソン模型である：

$$\mathcal{H}_{\mathrm{PAM}} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \left[(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu) c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} + (\epsilon_f - \mu) f^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} f_{\boldsymbol{k}\sigma} + V_{\boldsymbol{k}} f^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} + V^*_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} f_{\boldsymbol{k}\sigma} \right] + U \sum_i n^f_{i\uparrow} n^f_{i\downarrow} \tag{4}$$

$c_{\boldsymbol{k}\sigma}$ が伝導電子を $f_{\boldsymbol{k}\sigma}$ が f 電子を表す。簡単のため、軌道縮退は無視している。この模型は磁性不純物の近藤効果に関連して研究されたアンダーソン模型の周期系への拡張になっており、多くの f 電子系化合物において高温で近藤効果が観測されていることと整合している。

まず、相互作用の無い極限 $U = 0$ を考えよう。このとき、ハミルトニアンは c と f に関する 2 次形式になり、混成 $V_{\boldsymbol{k}}$ が非対角要素を与える。これを対角化すると図 5(a) のような混成バンドが得られ、$4f$ 準位 ϵ_f の周りにエネルギーギャップ（混成ギャップと呼ばれる）が形成される。実際には、f バンドの分散や軌道縮退、また複数の伝導バンドの存在などのために、エネルギーギャップができることは少なく、状態密度は図 5(b) のようなピーク構造になる。図 4 のバンド構

[5] このように微小な虚部を加えたのは、すぐ後で見るように、虚部をとってスペクトル関数を計算する際にあいまいさのないようにするためである。また、実際の計算では、ω の代わりに純虚数の松原振動数 $i\omega_n$ を引数とした松原グリーン関数を使って計算をし、最後に $i\omega_n \to \omega^+$ と解析接続することが多い。

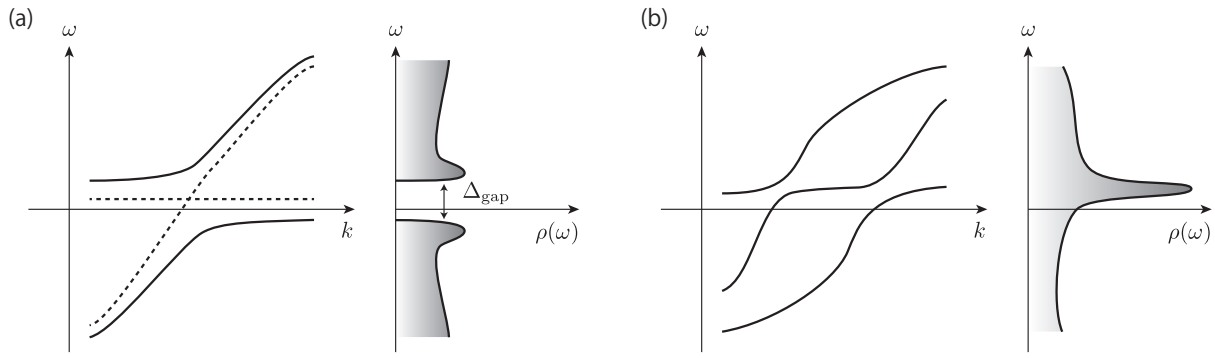


図 5: $U = 0$ の周期アンダーソン模型におけるエネルギーバンド分散と状態密度の概略図。(a) 絶縁体あるいは近藤絶縁体の場合。点線は混成がない場合のバンド分散を表す。(b) ギャップが開かない金属の場合。

造もこの場合に該当する。$U \neq 0$ になると、フェルミ準位の近傍にある $4f$ 電子の状態密度の大部分がフェルミ準位から離れた領域に移動する [6]。これを理解することが本稿の目的のひとつである。

ここで、図 5(a) のように理想的な混成ギャップが形成された場合を考えよう。多体効果を考慮すると、エネルギーギャップの大きさ $\Delta_{\rm gap}$ は $U = 0$ のそれよりも小さくなる。こうしてくり込まれて小さくなった $\Delta_{\rm gap}$ が 10K〜100K 程度であるとしよう。このとき、$T < \Delta_{\rm gap}$ では通常の絶縁体であるが、$T \gtrsim \Delta_{\rm gap}$ では混成バンドを構成する準粒子のブロードニングが顕著になり、エネルギーギャップが埋まってしまう（詳細は第 4 節で議論する）。このように、高温では金属的に振る舞い、低温でのみ絶縁体的に振る舞う物質は近藤絶縁体あるいは近藤半導体と呼ばれる。SmB_6 や YbB_{12} などが近藤絶縁体に分類される。

余談になるが、SmB_6 は初めてのトポロジカル近藤絶縁体として近年再注目を集めている [14]。この物質が盛んに研究されていた当初から、ある温度以下で絶縁体的に振る舞う電気抵抗が、さらに低温の数 K 以下で一定値に落ち着く様子が観測されていたが [15]、当時はその起源として不純物準位や Sm の価数が不均一（特に表面において）になっているなどの理由が考えられていた。この絶縁体状態における微小な電気伝導がトポロジカル絶縁体の金属的な端状態に起因している可能性が強まってきている。なお、トポロジカル絶縁体の物理は基本的に一体問題であり、これが電子相関の強い近藤絶縁体に適用できるのは、上にも述べた通り、近藤絶縁体のエネルギーギャップが基本的に $U = 0$ の極限で理解可能なためである（U は高温でギャップを壊す役割をする）。

3.3 原子極限

クーロン斥力 U の影響を見るために原子極限を考えよう。これはハバード模型では $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = 0$, アンダーソン模型では $V_{\boldsymbol{k}} = 0$ である。どちらの模型で考えても本質は同じであるが、ここではハバード模型について考える。周期アンダーソン模型の場合には、以下の議論において μ を $\mu - \epsilon_f$ で置き換えればよい。

原子極限では各格子点が独立なので、ひとつの格子点のみに注目すると、固有状態は 4 つ $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$ である。エネルギーはそれぞれ $E_0 = 0$, $E_\uparrow = -\mu$, $E_\downarrow = -\mu$, $E_{\uparrow\downarrow} = -2\mu + U$ で与えられる。これらの状態間の一粒子励起を考える。スピン σ の電子を付け加えるのに必要なエネルギーは逆向きスピン（$-\sigma$ と表す）の電子がいるかいないかに依存し、いない場合は $E_\sigma - E_0 = -\mu$，いる場合は $E_{\uparrow\downarrow} - E_{-\sigma} = -\mu + U$ である（図 6(a)）。それぞれの状況が選ばれる確率を重みとして考慮すると、一粒子グリーン関数が

$$G_\sigma^{\rm atom}(\omega) = \frac{1 - \langle n_{-\sigma}\rangle}{\omega^+ + \mu} + \frac{\langle n_{-\sigma}\rangle}{\omega^+ + \mu - U} \tag{5}$$

と求まる [7]。この式からスペクトル $A_\sigma(\omega) = -(1/\pi){\rm Im}G_\sigma(\omega)$ を求めると、図 6(b) のように U だけ離れた 2 つのデルタ関数が得られる。なお、電子の占有数が 1 になるように $0 < \mu < U$ の領域を想定している。ここで考えた原子極限は二体問題であるが、逆向きスピンの占有状態に応じて一粒子励起のエネルギーが変化する点は相関効果の本質を表している。N 粒子系では、注目する電子のエネルギーが残りの $N - 1$ 個の電子の状態に応じて変化する。これが多体効果である。

[6] これは、7 つのバンドの内の 6 つがシフトするという意味ではなく、全てのバンドの重みの内の大部分が高エネルギーに移動する。このことは、軌道縮退を無視した周期アンダーソン模型においても、この「重みの再配分」が起こることから理解できる。

[7] これを導出するにはグリーン関数のスペクトル表示（レーマン表示）を用いるのが便利である。

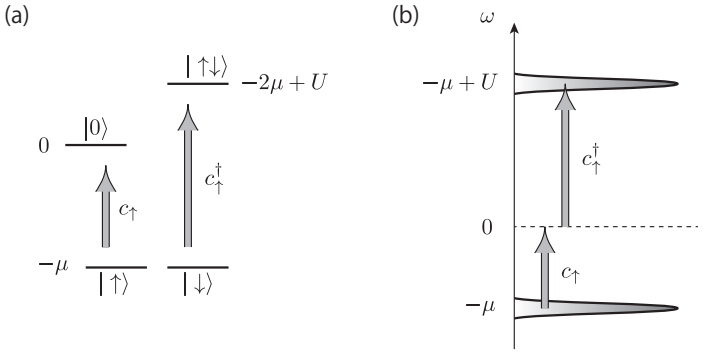


図 6: 原子極限におけるエネルギー準位（左）と励起スペクトル（右）。スペクトルは実際にはデルタ関数であるが、分かり易いように幅をつけて書いてある。

モット絶縁体はこの原子極限と繋がる局在状態として理解される。なお、モット絶縁体状態ではスピン自由度が残っているので、反強磁性秩序等によりスピンのエントロピーを消失しない限り基底状態にはなれないことに注意されたい。また、f 電子系における局在状態も同様に原子極限によって理解することができる。このように、強相関領域における局在状態自体は原子極限から理解できるが、そこから U を減少させたときに実現するモット転移や重い電子状態を理解するには多体効果を真面目に考慮しなければならない。

3.4 フェルミ液体

低エネルギーの一粒子励起が十分長い寿命を持つとき、それを「粒子」として定義できる。これを準粒子と呼ぶ。準粒子描像に基づくフェルミ液体論は元々は現象論であったが、有名な AGD の教科書 [16] でグリーン関数を用いて微視的な基礎付けがなされた。それ以降、準粒子描像は一部の例外を除き様々な模型で成り立つことが確かめられ、現在では低温の一般的な性質として考えられている。例えば、磁性の量子臨界点の性質を説明する SCR 理論 [17] も準粒子描像の範囲内である。以下で、グリーン関数を用いた準粒子描像についてまとめておこう。

準粒子の存在は自己エネルギー $\Sigma(\omega,\boldsymbol{k})$ の虚部によって定量化される。具体的には、$\mathrm{Im}\Sigma(\omega,\boldsymbol{k})$ が低エネルギーで $\mathrm{Im}\Sigma(\omega,\boldsymbol{k})\propto\omega^2$ の依存性を持つとき、準粒子描像が適用できると考える。このとき、グリーン関数の表式（(3) 式）において、実部 $\mathrm{Re}\Sigma(\omega,\boldsymbol{k})$ を ω に関して展開して $\mathcal{O}(\omega^2)$ の項を無視すると、低エネルギーで成り立つグリーン関数の表式として

$$G(\omega,\boldsymbol{k})\approx\frac{z_{\boldsymbol{k}}}{\omega+\tilde{\mu}-\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}} \tag{6}$$

が得られる。ここで、$z_{\boldsymbol{k}}$ は $z_{\boldsymbol{k}}=[1-\partial\mathrm{Re}\Sigma(\omega,\boldsymbol{k})/\partial\omega]^{-1}$ で定義されるくり込み因子（または準粒子重み）で、スペクトル全体の中で準粒子として記述される部分の割合を表す（$\boldsymbol{k}$ 依存性はあまり重要ではないので、以下では $z_{\boldsymbol{k}}$ を単に z と書く）。これをコヒーレント部分と呼び、残りの $1-z$ をインコヒーレント部分と呼ぶ。分母の量は $\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}-\tilde{\mu}\equiv z[\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu+\mathrm{Re}\Sigma(0,\boldsymbol{k})]$ で定義され、相互作用によるエネルギー分散と化学ポテンシャルのくり込み効果を表す。比熱等によって定義される有効質量 m^* はくり込み因子と $m^*/m_0\approx 1/z$ の関係があり、強相関になるほど z は小さくなる [8]。つまり、強相関領域では、スペクトル全体の内のほんの一部分が大きな寄与をすることになる。

図 7 は f 電子系におけるフェルミ液体論によるアプローチの概念図である。フェルミ液体論は、U の影響が相対的に小さい高圧領域を出発点としている。圧力が小さくなるほど強相関になり、それに伴ってコヒーレント部分の割合 z は小さくなる。このとき、$\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}$ で与えられる準粒子バンドの幅は狭くなるが、フェルミ面の構造はそれほど変化しないことが期待される。それは、ラッティンジャーの定理によって、波数空間におけるフェルミ面の囲む体積の総和が相互作用の影響を受けないためである。つまり、フェルミ面の囲む体積は相互作用の有無に対して保存量になっている。この制約があるために、多体効果を考慮していない LDA のバンド計算でも、重い電子状態を基底状態として持つ Ce 化合物のフェルミ面をある程度再現できていると考えられる。ただし、準粒子描像が成り立つ温度領域（$T\lesssim T^*$）は強相関になるほど狭くなっていく。

[8] 自己エネルギーの実部と虚部はクラマース・クロニッヒの関係で結びついているので、$\mathrm{Im}\Sigma(\omega,\boldsymbol{k})$ の立ち上がりが急なほど、つまり準粒子として記述できるエネルギー領域が小さいほど、$\mathrm{Re}\Sigma(\omega,\boldsymbol{k})$ の傾きが急になり z が小さくなる。

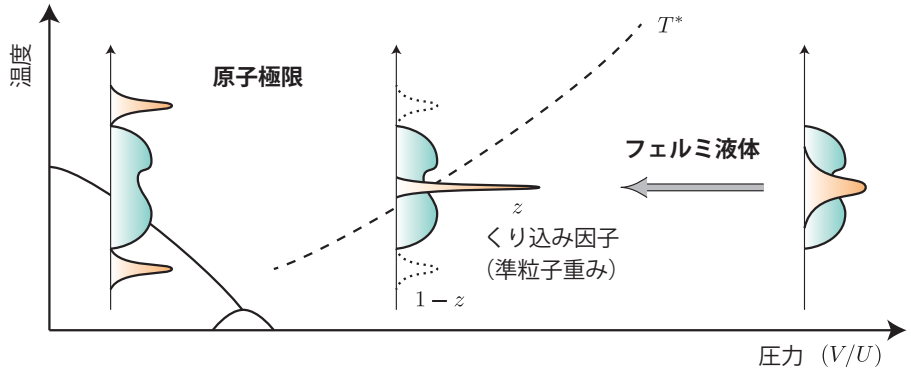


図 7: フェルミ液体論によるアプローチの概念図。破線はフェルミ液体論で到達可能な限界の目安を表す。

超伝導などの相転移は準粒子間の相互作用を考慮に入れることによって議論される。準粒子間相互作用は二粒子グリーン関数の既約バーテックス（第 4.5 節や第 6.2 節を参照）の低エネルギー極限 $\Gamma^{\rm irr}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';\boldsymbol{q})$ によって与えられる。バーテックスは摂動展開において、必ず $z^2\Gamma^{\rm irr}$ の形で現れるので、相互作用も一粒子励起と同様にくり込まれて小さくなる [16]。この残留相互作用によって、重い電子超伝導のような、準粒子状態における対称性の破れが引き起こされると考えられている。

やや繰り返しになるが、超伝導の議論においてしばしば用いられている弱相関の摂動論では、スペクトルのインコヒーレント部分が再現できないため、局在的なスピン揺らぎは考慮されていないことに注意する。つまり、$T > T^*$ の局在状態は弱相関理論の適用外であるのはもちろんであるが、$T < T^*$ においても局在的なスピン揺らぎが及ぼす準粒子への影響等は取り込まれていない。インコヒーレント部分を含むスペクトル全体を再現し、さらに局在状態までをも包括的に扱うことが次節で述べる動的平均場理論の目的である。

4 動的平均場理論

この節では動的平均場理論の概観を述べ、後半で応用例を紹介する。方程式の導出は付録 A にまとめた。動的平均場理論は様々な見方や導出ができるので、本稿以外にも複数の文献を読むことをお勧めする。Georges らによる有名な総説 [18] の他に、日本語で書かれた入門的な文章として文献 [19, 20] を挙げておく。

4.1 局所相関

非相互作用極限と原子極限をつなぐ理論を構築したいという問題設定を考えよう。これは電子の遍歴状態と局在状態の中間領域を記述する理論を作る問題と言ってもよい。そこで、原子極限のグリーン関数をもう一度見てみる。(5) 式のグリーン関数を $G_\sigma^{\rm atom}(\omega) = 1/(\omega^+ + \mu - \Sigma_\sigma^{\rm atom}(\omega))$ の形に整理すると、自己エネルギーが

$$\Sigma_\sigma^{\rm atom}(\omega) = U\langle n_{-\sigma}\rangle + \frac{U^2\langle n_{-\sigma}\rangle(1-\langle n_{-\sigma}\rangle)}{\omega^+ + \mu - U(1-\langle n_{-\sigma}\rangle)} \tag{7}$$

と求まる。この自己エネルギーから、どのようにモットギャップが記述されるかを確認しよう。簡単のため、電子・正孔対称の場合を考え、$\mu = U/2, \langle n_\sigma\rangle = 1/2$ とする。これを (7) に代入すると $\Sigma_\sigma^{\rm atom}(\omega) = U/2 + U^2/(4\omega^+)$ となる。第 1 項は μ と打ち消し合い、第 2 項がモットギャップを作る。このように、モットギャップはフェルミ準位上にある自己エネルギーの極（発散）によって記述される。物理的には、励起状態の寿命がゼロ、あるいは無限大に強い散乱と解釈される。

この原子極限で得られた自己エネルギーをそのまま格子系の自己エネルギーとして用いる近似はハバード I 近似と呼ばれる。この近似でのグリーン関数を書き下しておくと

$$G_{\rm Hubbard-I}(\omega,\boldsymbol{k}) = \frac{1}{\omega^+ + \mu - \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \Sigma_\sigma^{\rm atom}(\omega)} \tag{8}$$

である。ハーフフィリングでは $G_{\rm Hubbard-I}(\omega,\boldsymbol{k}) = 1/(\omega^+ - \epsilon_{\boldsymbol{k}} - U^2/\omega^+)$ となる。このときのスペクトル $A(\boldsymbol{k},\omega)$ と状態密度が図 8 に示してある。ハバード I 近似が妥当な強相関領域 $U > W$ を想定している。上部および下部ハバードバンドはそれぞれ 1/2 の重みである。このスペクトルはバンド描像からは決して得られないことに注意してほしい。バンド

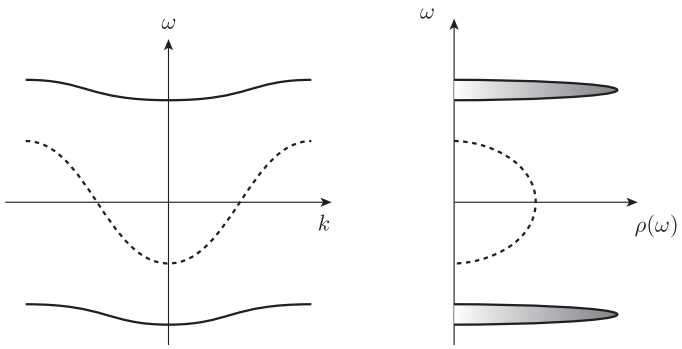


図 8: ハバード I 近似によるエネルギーバンド（左）と励起スペクトル（右）。点線は相互作用がない場合（$\Sigma = 0$）に対応。実線は重み 1/2、点線は重み 1 である。

理論では、どれだけ複雑なバンド構造であっても各波数におけるバンドの数はかならず軌道の数と一致する（つまりすべてのバンドの重みが 1）。軌道自由度を無視したハバード模型ではバンドは 1 つ（図 8 の点線）、周期アンダーソン模型では 2 つ（図 5(a)）である。図 8 のようなスペクトル強度の振動数方向への分割は相関効果を考慮して初めて得られる。以上のことから、インコヒーレント部分を含むスペクトルを得るためには、最低限、自己エネルギーの振動数依存性を考慮する必要があることが分かる。

4.2 有効不純物模型

ここまで議論してきたように、自己エネルギーの ω 依存性と $\boldsymbol{k}$ 依存性の内、ハバードバンドの形成に重要なのは ω 依存性のほうである。そこで、思い切って自己エネルギーの波数依存性を無視する近似を考えよう：

$$\Sigma(\omega, \boldsymbol{k}) \to \Sigma_{\rm loc}(\omega) \tag{9}$$

これは局所近似と呼ばれる。この近似の下での最適な自己エネルギーを決定する処方箋を与えるのが動的平均場理論である。動的平均場理論におけるグリーン関数は

$$G_{\rm DMFT}(\omega, \boldsymbol{k}) = \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \Sigma_{\rm loc}(\omega)} \tag{10}$$

と表される。このグリーン関数は非相互作用極限（$\Sigma_{\rm loc} = 0$）と原子極限（$\Sigma_{\rm loc}(\omega) = \Sigma_{\rm atom}(\omega)$）の両極限を含んでいることに注目してほしい。このことから、両極限の間を内挿できそうである。また、有効質量のくり込み効果は自己エネルギーの ω 微分から得られる（第 3.4 節）ことから、準粒子の記述も期待できる。

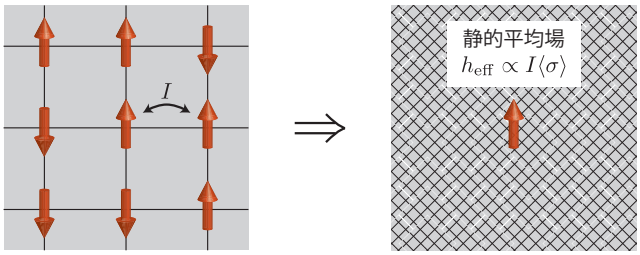
動的平均場理論では格子模型を有効的な 1 サイト模型に射影して解く。これをイジング模型の平均場近似との類推によって理解しよう。イジング模型の平均場近似では、非局所相互作用 $I\sigma_i\sigma_j$ の効果を有効的な磁場、すなわち平均場 $h_{\rm eff} \propto I\langle\sigma_i\rangle$ によって考慮した。これにより多体問題が 1 スピン問題に帰着し、解析的に解くことができるようになった。この過程を図 9(a) のように表現する。

さて、ハバード模型において非局所性（波数依存性）を生み出すのは電子の跳び移り $t_{ij}c^\dagger_{i\sigma}c_{j\sigma}$ である。グリーン関数で言えば、$G_{\rm DMFT}(\omega, \boldsymbol{k})$ の表式（(10) 式）にある $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ がそれに対応する。この効果を有効場で置き換えることを考えよう。このとき、イジング模型の場合のような静的な平均場ではなく動的な場 $\Delta(\omega)$ を考える。つまり、正確な書き方ではないが、$\Delta(\omega)e^{i\omega t}c^\dagger_{i\sigma}c_{i\sigma}$ のような振動するポテンシャルで運動エネルギー項の代わりをさせる。すると、各サイトが独立に、動的ポテンシャル中に存在する模型に置き換わる（図 9(b) の左から中への変化）。同様のことをグリーン関数に対して行うと、$G_{\rm DMFT}(\omega, \boldsymbol{k})$ の表式中の $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ を $\Delta(\omega)$ で置き換えて、ω だけを引数として持つ局所グリーン関数

$$g(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \Delta(\omega) - \Sigma_{\rm loc}(\omega)} \tag{11}$$

が得られる。こうして複雑な格子模型が有効的な 1 サイト模型に置き換えられたが、動的ポテンシャル $\Delta(\omega)$ があるためにその解は非自明である（$\Delta(\omega) = 0$ のときは原子極限なので、解は自明 $\Sigma_{\rm loc}(\omega) = \Sigma_{\rm atom}(\omega)$ である）。ただ、元の格子模型よりは遙かに簡単になっており、数値計算を駆使すれば解くことができる。具体的手順の詳細は後ほど述べるが、(11) 式から自己エネルギー $\Sigma_{\rm loc}(\omega)$ を除いたもの $g_0(\omega) = 1/[\omega + \mu - \Delta(\omega)]$ を“非相互作用”グリーン関数とみなし、相

(a) イジング模型の（静的）平均場近似



(b) ハバード模型の動的平均場近似

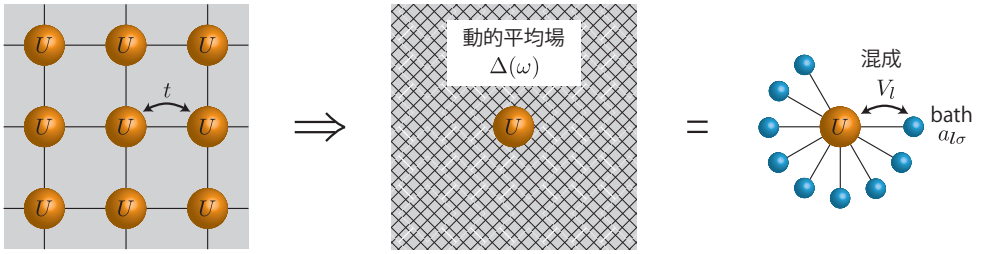


図 9: (a) イジング模型の（静的）平均場近似と (b) 動的平均場近似における有効模型への射影の概念図。左図は元の格子模型、中央の図は有効場（静的平均場 $h_{\rm eff}$ または動的平均場 $\Delta(\omega)$）の中の 1 サイト模型を表す。右下は $\Delta(\omega)$ を “bath” との混成によって表した不純物アンダーソン模型。

互作用 U の効果を考慮して $\Sigma_{\rm loc}(\omega)$ を計算する。これを (10) 式に戻せば、局所的な相関効果が完全に取り込まれた、元の格子系のグリーン関数が得られる。なお、ここまでの手順において、仮に $\Delta(\omega) = 0$ とすると、この枠組みはハバード I 近似に帰着する。$\Delta(\omega)$ を考慮している点が本質的な違いで、これによって注目するサイト以外のサイト上での多体効果を考慮している。最適な $\Delta(\omega)$ を決定する条件については後ほど述べる。

(11) 式の局所グリーン関数についてもう少し考えよう。これは近藤効果に関連して議論された不純物アンダーソン模型のグリーン関数に他ならない。実際にハミルトニアンを書き下すには、演算子 $a_{l\sigma}$ で表されるフェルミオン (“bath” と呼ばれる) を導入し、注目するサイト（$i = 0$ とする）の局所電子 $c_{0\sigma}$ との混成効果を考慮する：

$$\mathcal{H}_{\rm eff} = -\mu \sum_{\sigma} c^{\dagger}_{0\sigma} c_{0\sigma} + U n_{0\uparrow} n_{0\downarrow} + \sum_{l\sigma} \left(E_l a^{\dagger}_{l\sigma} a_{l\sigma} + V_l a^{\dagger}_{l\sigma} c_{0\sigma} + V^*_l c^{\dagger}_{0\sigma} a_{l\sigma} \right) \tag{12}$$

このハミルトニアンのパラメーター E_l と V_l は $\Delta(\omega)$ と

$$\Delta(\omega) = \sum_{l} \frac{|V_l|^2}{\omega^+ - E_l} \tag{13}$$

によって結びついている。この表現から、$\Delta(\omega)$ はしばしば混成関数と呼ばれる。$\Delta(\omega)$ は連続スペクトルなので、l は無限個必要である。図 9(b) の右図はこの不純物アンダーソン模型を表したものである。

動的平均場理論の解は基本的にこの有効模型の性質を引き継ぐ。そこで、不純物アンダーソン模型の解を確認しておこう。図 10 は $\Delta(\omega)$ のスペクトルが ω によらない一定値 $\Delta(\omega) = -i\Delta_0$ の場合に計算された局所状態密度 $\rho(\omega) = -(1/\pi){\rm Im}g(\omega)$ である。電子・正孔対称の条件 $\mu = U/2$ で U を変化させている。U が大きいとき、局在状態に対応するピークが $\omega \simeq \pm U/2$ に確認できる。これが元の格子模型におけるハバードバンドの元となる。スペクトルの重みが高エネルギーに移動した分だけ、$\omega = 0$ のピーク（準粒子ピーク）の幅は狭くなる。図 10 において、$\rho(0)$ の値が U に依存しないのは（局所）フェルミ液体の性質である。このように、不純物アンダーソン模型の基底状態は U の大きさによらずフェルミ液体である [9]。このことは動的平均場理論の解が必ずフェルミ液体になることを意味しそうだが、実際は必ずしもそうではない。モット絶縁体の領域では、$\Delta(\omega)$ がフェルミ準位上で極を持ち、それによって $\Sigma_{\rm loc}(\omega)$ も同様の発散を示してエネルギーギャップが形成されるのである。

[9] ただし、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条件が付く。

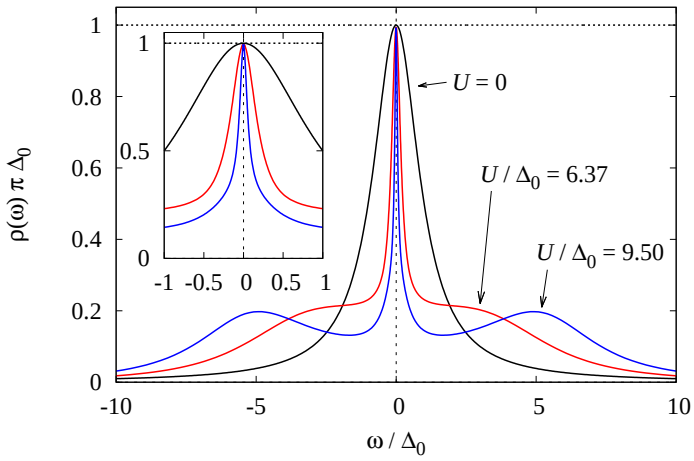


図 10: 不純物アンダーソン模型における状態密度 $\rho(\omega)$。電子・正孔対称（$\mu = U/2$）で十分低温の計算。$\Delta(\omega) = -i\Delta_0$ として Δ_0 でエネルギーを規格化している。挿入図は $\omega = 0$ を拡大したもので、点線はローレンツ関数によるフィット。CTQMC 法による計算。文献 [1] より。

4.3 自己無撞着条件

ここまでは $\Delta(\omega)$ は任意の関数であった。$\Delta(\omega)$ は以下の条件を満たすように自己無撞着に決定される：

$$g(\omega) = \langle G_{\mathrm{DMFT}}(\omega, \boldsymbol{k}) \rangle_{\boldsymbol{k}} \tag{14}$$

ここで、右辺の括弧は波数に関する平均（積分）を意味する。この条件は、元の格子模型の局所グリーン関数が有効模型のグリーン関数と等しい場合に、その有効模型で計算された $\Sigma_{\mathrm{loc}}(\omega)$ が元の格子系の自己エネルギーの最適な近似になる、ということを意味する。この条件は自由エネルギーの変分原理から導かれる。詳細は付録 A を参照のこと。

最後に、実際の計算手順をまとめておこう。まず、$\Delta(\omega)$ として適当な関数形を仮定する。それをインプットとして、(12) 式のハミルトニアンで表される有効不純物模型のグリーン関数 $g(\omega)$ または自己エネルギー $\Sigma_{\mathrm{loc}}(\omega)$ を計算する。これには別途、数値計算手法が必要になるが、詳細は後ほど議論する。この $\Sigma_{\mathrm{loc}}(\omega)$ を (10) 式に代入すると、格子系のグリーン関数が求まる。これが (14) 式の自己無撞着条件を満たしているかをチェックし、満たしていない場合には $\Delta(\omega)$ を更新する。更新には、(14) 式と (11) 式を $\Delta(\omega)$ に関して解いて得られる関係式 $\Delta^{\mathrm{new}}(\omega) = \omega + \mu - \Sigma_{\mathrm{loc}}(\omega) - \langle G_{\mathrm{DMFT}}(\omega, \boldsymbol{k}) \rangle_{\boldsymbol{k}}^{-1}$ を使う。

以上の手順において、格子の情報は $\langle G_{\mathrm{DMFT}}(\omega, \boldsymbol{k}) \rangle_{\boldsymbol{k}}$ の波数積分として取り込まれる。したがって、エネルギーバンド $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ の情報は状態密度 $\rho_0(\omega) = (1/N) \sum_{\boldsymbol{k}} \delta(\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}})$ を通してのみ入る。モデル計算では、簡単な $\rho_0(\omega)$ を与えて計算することが多い。よく使われるのはガウシアンと半円形である。ガウシアンは立方格子上の強束縛バンドの $d = \infty$ 次元への拡張である。ガウシアンはバンド端を持たないので、その点で半円形の方が好まれる傾向がある（実際にはバンド端の振る舞い以外は結果に大差はない）。半円形の状態密度は接続数 $z = \infty$ のベーテ格子（ツリー）上の強束縛バンドに対応する。どちらの模型も bipartite な格子であり、ハーフフィリングで完全なネスティングを持つので、U があれば必ず反強磁性が起こる。実際に数値計算をする場合には、心に留めておく必要がある。

4.4 不純物ソルバー

動的平均場理論の解を得るためには、結局、(12) 式のハミルトニアンで与えられる有効不純物模型を解いてグリーン関数 $g(\omega)$ を計算することになる。任意の関数形を持つ $\Delta(\omega)$ をインプットとして計算する必要があるので、厳密解の方法は使えず、数値計算が必須となる。標準的な手法は、$T = 0$ であれば数値繰り込み群法（NRG）、$T \neq 0$ であれば連続時間量子モンテカルロ法（CTQMC）である。それらの手法の特徴について述べておこう。

NRG 法は近藤問題の基底状態と低エネルギー励起状態をくり込みの方法で求める数値計算手法である [21]。くり込みの途中の状態が有限のエネルギースケールの状態に対応していることを利用して、全エネルギー領域の励起スペクトル

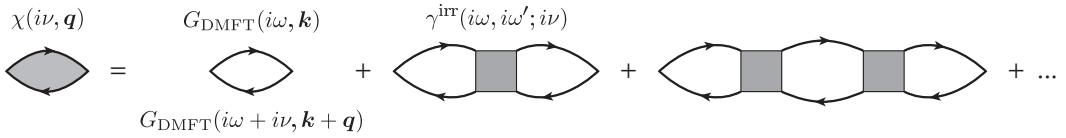


図 11: 動的平均場理論における二体相関関数 $\chi(i\nu,\boldsymbol{q})$ を表すダイアグラム。

を計算することができる [22]。低エネルギーのスペクトル構造を精度よく計算できるのが最大の特長であるが、高エネルギーの構造はそれほど正確ではないことには注意が必要である。

CTQMC 法は 2005 年に Rubtsov らによって考案された方法である [23]。摂動展開の表式を元にして、摂動計算をモンテカルロ法によって評価する。サンプリングにおいて大きな寄与をする摂動次数が温度の逆数に比例することから、有限温度において摂動が収束することが保障されている。また、鈴木・トロッター分解を使っていないため、系統的な誤差がなく、統計誤差の範囲で厳密な結果が得られる。ただし、スペクトルを得るには松原グリーン関数の解析接続が必要なので、高振動数のスペクトルは精度が出にくい（この誤差は動的平均場理論の収束性には影響しない）。手法の詳細は [24, 25] を参照のこと。CTQMC 法のひとつの特長として、バーテックスの計算が容易である（計算時間は別にしてアルゴリズム上は）という点が挙げられる。これを利用すると、後程示すように波数依存した二体相関関数 $\chi(\omega,\boldsymbol{q})$ を計算することができる。これは相転移を調べる際に威力を発揮する。なお、多くのモンテカルロ法と同様に、負符号問題は依然として残っており、それがこの手法の応用上の最大の課題である。

少し話がそれるが、動的平均場理論の応用では不純物ソルバーの役割が大きく、その意味で上記の強力な数値計算手法の存在意義は非常に大きい。もし不純物ソルバーとして近似理論を使う場合には、その近似と動的平均場理論の局所近似の両方について考察する必要がある。このことは、予想とは反する結果が得られた場合にソルバーの近似による間違い（artifact）である可能性を吟味しなければならなず、精神衛生上よろしくない。NRG 法や CTQMC 法を用いると、得られた結果を「局所近似ではこうなる」と自信を持って主張することができるのが強みである。

4.5 二体相関関数

相転移を調べる方法には二通りある。秩序変数を直接計算する方法と感受率（二体相関関数）の発散を調べる方法である。前者の場合には、秩序相で非等価になるサイト（反強磁性なら 2 つ）ごとに異なる局所自己エネルギーを導入し、それらが非等価な解に収束するかによって秩序の有無を判定する。そのため、秩序変数とその波数（周期）をある程度事前に予想して計算を行う必要がある。一方、感受率の計算では対称性の破れを仮定しないため、スピンや電荷などの異なる揺らぎや長周期を含む任意の波数も一度の計算でまとめて扱うことができる。また、実際に相転移が起こらなくても、相転移の傾向（起こりそうかどうか）を知ることができるのも利点である。理想的には、まず最初に感受率から相転移を系統的に調べ、そのあとで秩序相内の計算を行うのが良い。そうすると、予想していない秩序相を見落とす心配がない。

それでは、二体相関関数の計算法 [18,19,26] について解説する。表記の簡単化のため、スピン帯磁率と電荷感受率を区別するインデックスを省略して、相関関数を $\chi(i\nu,\boldsymbol{q})$ で表す。ここで、$i\nu$ はボゾンの松原振動数である。相関関数は 4 つの生成・消滅演算子を用いて定義される二粒子グリーン関数 $\chi(i\omega,\boldsymbol{k},i\omega',\boldsymbol{k}';i\nu,\boldsymbol{q})$ から $\chi(i\nu,\boldsymbol{q})=(T/N)\sum_{\omega\omega'\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\chi(i\omega,\boldsymbol{k},i\omega',\boldsymbol{k}';i\nu,\boldsymbol{q})$ のように引数を消去することにより計算される。二粒子グリーン関数は、一粒子グリーン関数のダイソン方程式に対応する以下のベーテ・サルペーター方程式を満たす：

$$\hat{\chi}(i\nu,\boldsymbol{q})=\hat{\chi}_0(i\nu,\boldsymbol{q})+T\hat{\chi}_0(i\nu,\boldsymbol{q})\hat{\Gamma}^{\mathrm{irr}}(i\nu,\boldsymbol{q})\hat{\chi}(i\nu,\boldsymbol{q}) \tag{15}$$

ここで、表記を簡単化するため、$\chi(i\omega,\boldsymbol{k},i\omega',\boldsymbol{k}';i\nu,\boldsymbol{q})\equiv[\hat{\chi}(i\nu,\boldsymbol{q})]_{(\omega,\boldsymbol{k}),(\omega',\boldsymbol{k}')}$ のような行列表示を用いた。$\hat{\chi}_0$ は相互作用を含まない部分（自己エネルギーを通した相関効果は含まれる）で対角行列である。$\Gamma^{\mathrm{irr}}(i\omega,\boldsymbol{k},i\omega',\boldsymbol{k}';i\nu,\boldsymbol{q})$ は二粒子グリーン関数の「自己エネルギー」に相当する既約バーテックスである。動的平均場理論の方程式を導く際に行った近似は自己エネルギーに対する局所近似であった（(9) 式）。そこで、同様の近似を Γ^{irr} に対して適用し、波数依存性を無視する：

$$\Gamma^{\mathrm{irr}}(i\omega,\boldsymbol{k},i\omega',\boldsymbol{k}';i\nu,\boldsymbol{q})\to\gamma^{\mathrm{irr}}(i\omega,i\omega';i\nu) \tag{16}$$

この振動数のみに依存する既約バーテックス γ^{irr} を有効不純物模型において計算すれば、(15) 式から格子系の二粒子グ

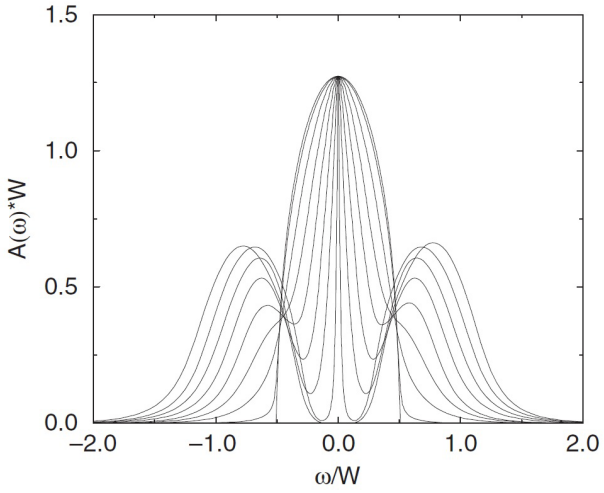


図 12: 動的平均場理論によるハバード模型の一粒子励起スペクトル（ハーフフィリング）。状態密度はバンド幅 W の半円形。不純物ソルバーは NRG 法。U の値は $U/W = 0$ から 1.6 まで 0.2 刻みである。文献 [27] より。

リーン関数 $\hat{\chi}(i\nu, \boldsymbol{q})$ が求まる。すべての行列要素の和（添え字 ω, $\boldsymbol{k}$, ω', $\boldsymbol{k}'$ に関する和）をとれば相関関数 $\chi(i\nu, \boldsymbol{q})$ が得られる。この方程式を表すダイアグラムを図 11 に示す。

バーテックスの波数依存性を無視したために、(15) 式において、波数依存性は $\hat{\chi}_0(i\nu, \boldsymbol{q})$ のみが持つ。したがって、(15) 式の両辺で波数 $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'$ に関する和を γ^{irr} とは無関係に実行することができる。結局、$\chi(i\nu, \boldsymbol{q})$ の $\boldsymbol{q}$ 依存性は

$$[\hat{\chi}_0(i\nu, \boldsymbol{q})]_{\omega,\omega'} = -\delta_{\omega,\omega'} \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} G_{\mathrm{DMFT}}(i\omega, \boldsymbol{k}) G_{\mathrm{DMFT}}(i\omega + i\nu, \boldsymbol{k} + \boldsymbol{q}) \tag{17}$$

によって決定される。このことは動的平均場理論において空間相関が平均場近似のレベルで扱われていることを意味する。

4.6 モット絶縁体

それでは動的平均場理論の応用例を見ていこう。動的平均場理論が成功した最も顕著な例はモット転移である。図 12 にハバード模型のハーフフィリングにおける一粒子励起スペクトルを示す。状態密度はバンド幅 W の半円形である。U が大きくなるにつれ、$\omega = 0$ の準粒子ピークと上部・下部ハバードピークから成る 3 ピーク構造になり、最終的に準粒子ピークが消えてモット絶縁体になる。

図 12 の計算は常磁性状態を仮定した計算であるが、実際には反強磁性相転移が存在する。特に、モット絶縁体状態はスピン自由度が残っているので、そのままでは基底状態になりえない。図 13 に反強磁性も考慮した U–T 相図を示す。これは立方格子の計算である。$U/W \simeq 1.2$ のあたりに常磁性を仮定した場合のモット転移（1 次転移）があるが、反強磁性絶縁相によって完全に隠れてしまっていることが分かる。このことから、純粋なモット転移は、少なくともこの（bipartite な）模型では起こらない。高温の常磁性相において金属・絶縁体間のクロスオーバー（図 13 の影の領域）が観測されるだけである。なお、モット転移点が温度の増加によって弱相関側にシフトしているのは、モット絶縁体状態がスピンのエントロピーを持っているためである。

次に反強磁性相に注目しよう。図 13 において反強磁性相が $U = 0$ から始まっているが、これは模型の特殊性による。すなわち、今の模型には完全なネスティングがあり、電子・正孔励起の揺らぎが $T = 0$ に向かって対数発散しているため、無限小の U で反強磁性揺らぎが発散する。一般的には、図 1(a) のように閾値 U_{c} が存在すると思われる。一方、強相関領域では、転移温度が $T_{\mathrm{AF}} \propto 1/U$ に比例して減少する。これは原子極限からの摂動によって理解できる。T_{AF} が最大になるのは $U/W \simeq 1$ 程度である。これより弱相関側が遍歴磁性的、強相関側が局在磁性的である。前者はスレーター型、後者はハイゼンベルグ型と呼ばれる。この磁性状態の移り変わりは、反強磁性を無視した場合のモット転移とその高温における金属・絶縁体クロスオーバーが同程度の U/W で起こっていることと矛盾がない。以上の結果から、動的平均場理論は弱相関領域と強相関領域をうまく繋いでいるといえる。

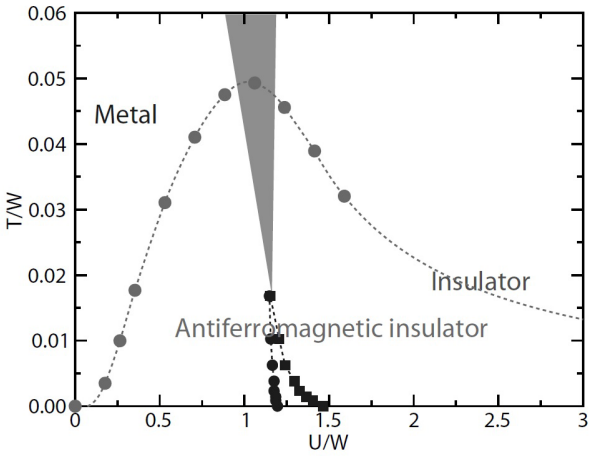


図 13: 動的平均場理論によるハバード模型の反強磁性相図（ハーフフィリング）。低温の四角は反強磁性を無視した計算で得られたモット転移（1 次転移）で、影の部分は金属と絶縁体のクロスオーバー領域を表す。立方格子上の最近接ホッピングを考慮した模型でバンド幅 $W = 12t$ で規格化している。不純物ソルバーは NRG 法。文献 [28] より。

4.7 重い電子状態

4.7.1 遍歴と局在

動的平均場理論の重い電子系への応用を見てみよう。まずはエネルギーバンドに対する U の影響を議論する。図 14(a) は $U = 0$ の場合のエネルギー分散である。バンド幅が $2D$ の半円形の状態密度（ベーテ格子）を考え、$D = 1$ をエネルギーの単位としている。図 5(a) の概念図と同じものだが、こちらは計算して描いたもので、さらに f 成分と c 成分の重み $w_\alpha^\pm$ ($\alpha = c, f$) を濃淡で表している。定義を正確に書くと、各成分ごとのスペクトルを $A_\alpha(\omega, \boldsymbol{k}) = w_\alpha^+ \delta(\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}}^+) + w_\alpha^- \delta(\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}}^-)$ と表したときの係数が重みを表す。ここで、$\epsilon_{\boldsymbol{k}}^\pm$ は混成バンドのエネルギー分散である。$w_c^\pm + w_f^\pm = 1$ の関係がある。図から、混成バンド（実線）が混成前のバンド（点線）に近い部分ほどその成分の重みが 1 に近くなっていることが分かる。状態密度 $\rho_\alpha(\omega)$ には $V \approx 0.47$ 程度の大きさの混成ギャップができ、粒子数が $n = 1.9$ なので、絶縁体状態にホールをドープした状況になっている。

U が有限の場合にはスペクトルが幅を持つので、分散を線で表すことはできない。図 14(b) は $U = 4$ の場合の十分低温（$T = 0.001$）における一粒子励起スペクトル $A_\alpha(\kappa, \omega)$ の強度を表したものである。ここで、動的平均場理論におけるグリーン関数（(10) 式）は $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ のみが波数依存性を持つため、$\kappa \equiv \epsilon_{\boldsymbol{k}}$ を「波数」とみなして、κ の関数としてスペクトルを描いている。低エネルギー部分のスペクトルは、$U = 0$ のエネルギー分散を ω 方向に縮めたものになっていることが分かる。これが U によるくり込みの効果である。くり込み因子 z は $z \approx 0.2$ 程度なので、全スペクトルの内の約 2 割がコヒーレント部分である。残りの 8 割は高エネルギー（$\omega \simeq \pm 2$）の方にあり、これがインコヒーレントな局在成分である。このように、強相関領域の低温におけるスペクトルは低エネルギーの遍歴成分と高エネルギーの局在成分の両方を兼ね備えている。繰り返しになるが、図 14(b) のように、バンドがあたかも 3 つあるようなスペクトル構造は多体効果なしには決して得られないことを改めて注意しておく。

図 14(c) は高温（$T = 0.1$）の場合のスペクトルである。低温の結果と比較して、コヒーレント部分のスペクトルがぼやけ、代わりにインコヒーレント部分が顕著になっている。つまり、この温度では準粒子は well defined ではない。言い換えると、このパラメーターは f 電子の局在状態にあると言える。この計算では極端な高温にしているが、実際には準粒子の特徴的な温度 T^* と比較して「高温」であればよい。したがって、T^* が極端に小さいような状況では、測定可能な全ての温度領域において局在状態とみなせる。

この計算は金属状態の計算であるが、低温で存在しているエネルギーギャップが温度の上昇によって消失する振る舞い（図 14(b) から図 14(c) の変化）は近藤絶縁体の特徴と一致している。この結果から、近藤絶縁体におけるエネルギーギャップの存在自体は $U = 0$ のバンド構造（（図 14(a)））から理解できるが、ギャップの大きさがくり込まれて小さくなっている点、また温度によってギャップが閉じる点に多体効果の特徴が現れているということが分かる。

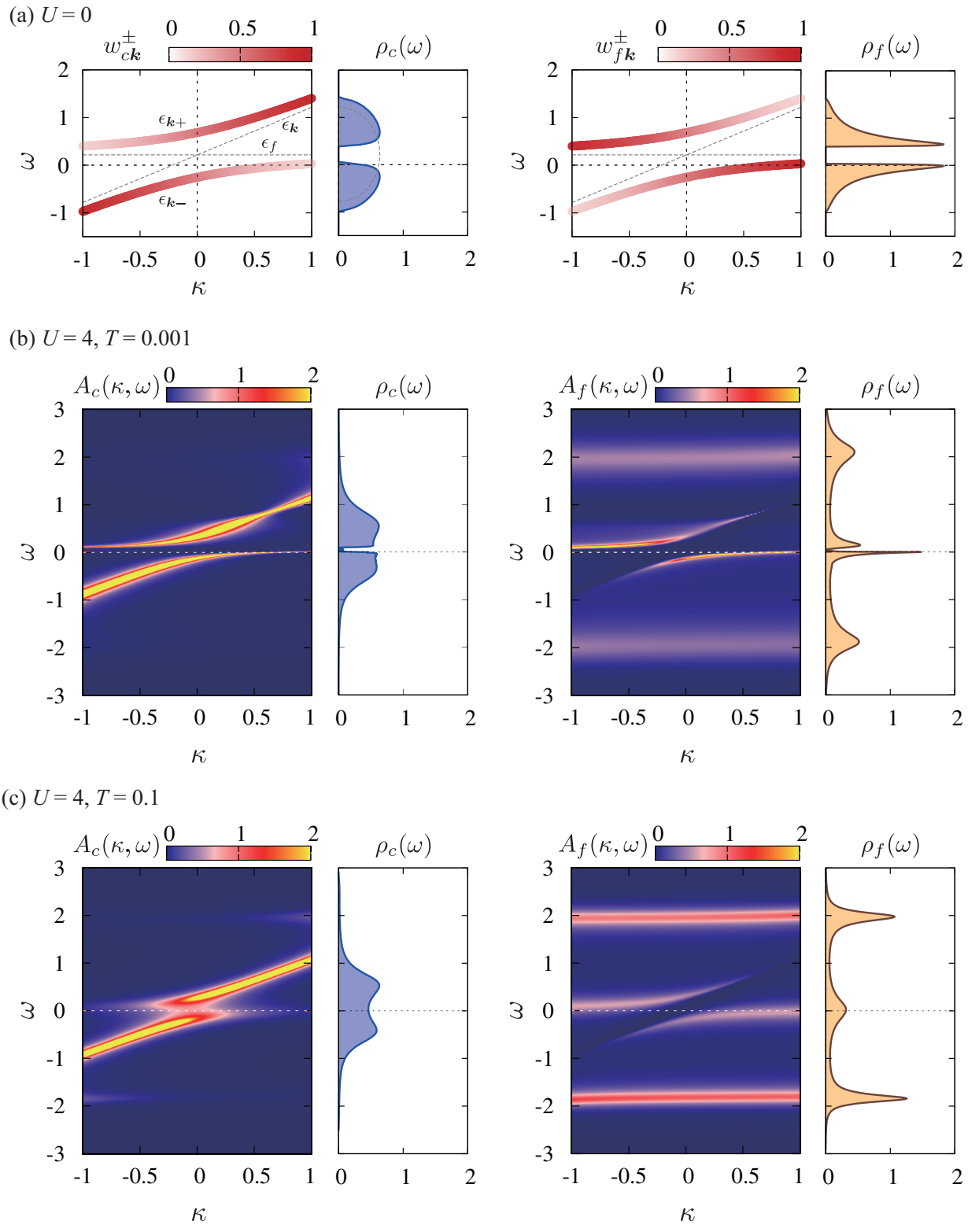


図 14: (a) $U = 0$ の周期アンダーソン模型のエネルギー分散を「波数」$\kappa \equiv \epsilon_{\boldsymbol{k}}$ の関数として表した図。左が伝導電子 c、右が f 電子。色の濃さは重み $w^{\pm}_{\alpha}$ を表す。点線は混成がない場合のエネルギー分散。ベーテ格子上の強束縛バンド（状態密度はバンド幅 $2D$ の半円形）を考えている。パラメーターは $D = 1$ として、$V^2 = 0.22$, $n = 1.9$ である。(b),(c) は $U = 4$ の場合の動的平均場理論による一粒子励起スペクトル $A_{\alpha}(\kappa,\omega)$ と状態密度 $\rho_{\alpha}(\omega)$。ソルバーは CTQMC 法。(b) $T = 0.001$, (c) $T = 0.1$。

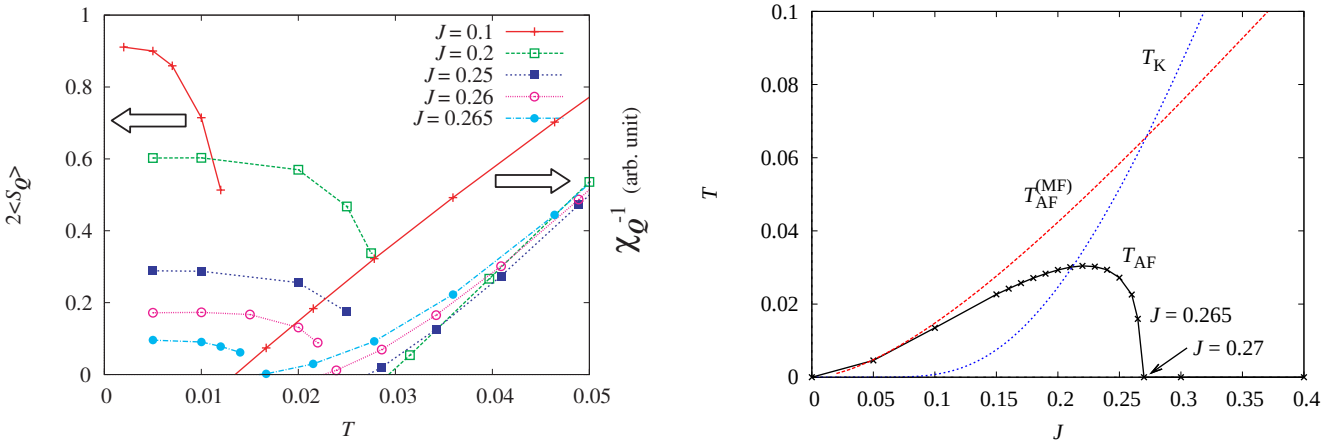


図 15: (左) 近藤格子模型における反強磁性モーメント $\langle S_{\boldsymbol{Q}} \rangle$ と反強磁性帯磁率 $\chi_{\boldsymbol{Q}}$ の逆数の温度依存性（ハーフフィリング）。文献 [29] より。(右) 反強磁性相図（$T_{\rm AF}$）。$J < J_{\rm c} \approx 0.27$ は反強磁性絶縁体、$J > J_{\rm c}$ は常磁性絶縁体。$T_{\rm AF}^{\rm (MF)}$ は RKKY 相互作用から平均場近似によって見積もった転移温度、$T_{\rm K}$ は不純物系における近藤温度。文献 [30] より。いずれも計算も、状態密度はガウシアン $\rho_{\rm c}(\omega) \propto \exp(-2\omega^2/D)$ で $D = 1$ をエネルギーの単位としている（空間次元 $d = \infty$ の超立方格子に対応）。ソルバーは CTQMC 法。

4.7.2　RKKY 相互作用と近藤効果

次に f 電子の磁気秩序を議論する。この場合は、周期アンダーソン模型の代わりに、その強相関極限に対応する近藤格子模型を考えるのが都合が良い。近藤格子模型は、(4) 式の周期アンダーソン模型において、$J \equiv 4V^2/U$ を一定に保ったまま $U \to \infty$ および $\epsilon_f = -U/2 \to -\infty$ の極限をとったもので、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\rm KL} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} + J \sum_i \boldsymbol{S}_i \cdot \sum_{\sigma\sigma'} c^\dagger_{i\sigma} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'} \tag{18}$$

で与えられる。斥力 $U > 0$ の場合には $J > 0$ なので、相互作用は反強磁性的である。近藤格子模型は、物理的には、上部および下部ハバードバンドがフェルミレベルから十分遠いエネルギーにある極限を考え、f 電子のスピン自由度のみに注目した模型である。図 1(b) の相図で言えば、低圧の局在領域に対応しており、J が圧力印加に対応していると考える。f 電子の電荷の自由度は消去されているが、f 電子の遍歴状態からつながる一粒子励起のコヒーレント部分も J の効果として議論できる。このことは以下に紹介する数値計算の結果を見て理解してほしい。

図 15(左) はハーフフィリングにおける反強磁性帯磁率 $\chi_{\boldsymbol{Q}}$ の逆数と反強磁性モーメント $\langle S_{\boldsymbol{Q}} \rangle$ の温度変化である。$\chi_{\boldsymbol{Q}}$ が発散する温度以下で $\langle S_{\boldsymbol{Q}} \rangle$ が発生していることが確認できる。$J = 0.1$ ではフルモーメント $\langle S_{\boldsymbol{Q}} \rangle \simeq 1/2$ に近いが、J が大きくなるにつれてモーメントが小さくなっている。これは近藤スクリーニングによって局在スピンが伝導電子に部分的に遮蔽されていると解釈される。$J > J_{\rm c} \approx 0.27$ では局在スピンが完全に遮蔽されて、反強磁性は起こらなくなる。

この計算により決定された反強磁性相図を図 15(右) に示す。$J < J_{\rm c}$ が反強磁性絶縁体、$J > J_{\rm c}$ が常磁性絶縁体である。これはいわゆるドニアック相図 [31] と呼ばれるものを数値計算によって再現したものである。それではドニアックに従って $J_{\rm c}$ の値を見積もってみよう。$T_{\rm AF}^{\rm (MF)}$ は J の 2 次摂動で RKKY 相互作用を導出し、平均場近似を適用して得た転移温度である。$T_{\rm AF}^{\rm (MF)} \propto J^2$ で単調増加する。$T_{\rm K}$ は局在スピンが 1 つだけの不純物近藤模型において見積もった近藤温度である。この図から $T_{\rm AF}^{\rm (MF)}$ と $T_{\rm K}$ が逆転する付近に、数値計算で見積もった $J_{\rm c}$ が位置しており、ドニアックの描像と一致している。以上のように、動的平均場理論によって、J の小さい（低圧領域の）局在磁性状態と J の大きい（高圧領域の）近藤一重項状態の両方を記述することができる。

4.7.3　大きいフェルミ面

図 15 の計算はハーフフィリングであるため、J の全領域で絶縁体である。ここでは金属状態を考え、重い電子（準粒子）の形成を定量的に議論することを考える。一口に重い電子の形成と言っても、何を見るかが問題である。ここでは、フェルミ面に注目しよう。図 1(b) と関連して述べたように、f 電子の局在状態（低圧領域）ではフェルミ面から f 電子の寄与が消えるため、f 電子の遍歴状態（高圧領域）とは異なったフェルミ面になる。もっと具体的に言えば、ラッティ

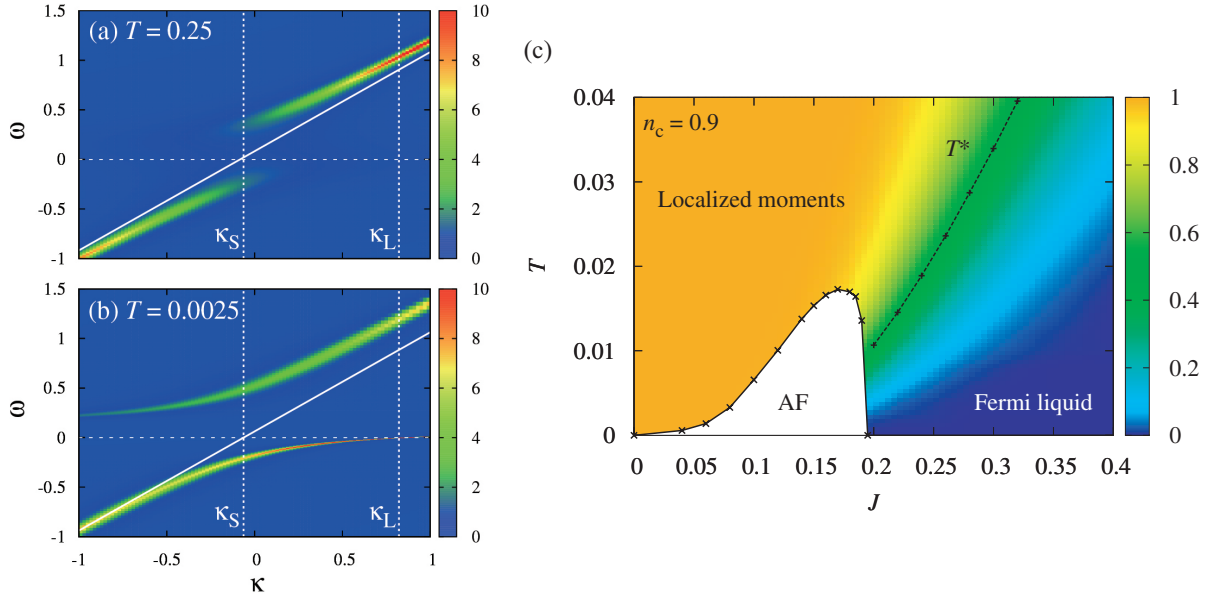


図 16: 近藤格子模型における (a,b) 一粒子励起スペクトル $A(\kappa,\omega)$。ハーフフィリング近傍 $n_c = 0.9$ で $J = 0.3$。κ_S と κ_L はそれぞれ小さいフェルミ面と大きいフェルミ面に対応する波数である。実線は $J = 0$ の場合のエネルギー分散。(c) f 電子の遍歴性・局在性を表す相図。強度プロット（ξ とする）はフェルミ波数に対応するくり込まれた化学ポテンシャル $\tilde{\mu}$ を規格化したもので、$\xi = 0$ が遍歴状態、$\xi = 1$ が局在状態に対応する。それらの中間値 $\xi = 0.5$ によって重い電子状態の特徴的温度 T^* を定義している。文献 [32] より。

ンジャーの定理から、局在状態におけるフェルミ面の囲む体積は遍歴状態のそれと比べて f 電子 1 つ分だけ小さくなる。前者を小さいフェルミ面と呼び、後者を大きいフェルミ面と呼ぶ。このように、フェルミ面の体積は f 電子の遍歴性・局在性を表す指標と考えることができる。これを利用すると、小さいフェルミ面（局在状態）から大きいフェルミ面（遍歴状態）への変化によって重い電子の形成を捉えることができる。これを数値計算によって観測すればよい。

まずは一粒子励起スペクトルから見てみよう。図 16 の (a) と (b) はそれぞれ高温領域と低温領域におけるスペクトル $A_c(\kappa,\omega)$ である。この結果は図 14(b),(c) に示した周期アンダーソン模型のスペクトルからインコヒーレント部分を除いたものに対応する [10]。高温（図 16(a)）では、相互作用の影響により $\omega = 0$ 近傍のスペクトルがぼやけているものの、$J = 0$ の分散（実線）に近い。一方、十分低温（図 16(b)）では、低エネルギーのスペクトルがシャープになり、混成バンドが形成されているのがはっきりと見て取れる。フェルミ波数に注目すると、混成バンドのフェルミ波数 κ_L は $J = 0$ のフェルミ波数 κ_S からは明らかにシフトしているが、高温の低エネルギー励起は κ_S 近傍で起こっているのが分かる。

以上のスペクトルの温度変化を定量化しよう。相関のある系では、$\omega = 0$ を除いてエネルギー分散は厳密には定義できないが、自己エネルギーの虚部を無視することにより有限温度・有限振動数におけるエネルギー分散を定義する。こうしてフェルミ波数の温度変化を議論する。図 16(c) はフェルミ波数の変化を J–T 相図上に描いたものである [11]。強度プロットの $\xi = 0$ が大きいフェルミ面（遍歴状態）、$\xi = 1$ が小さいフェルミ面（局在状態）に対応している。この図から、小さい J（低圧）における局在状態と大きい J（高圧）における遍歴状態の間のクロスオーバーが見て取れる。また、$\xi = 0.5$ によって定義される特徴的温度 T^* は $J = J_c$ において有限の値を持つ。これは、$J \simeq J_c$ の反強磁性状態は遍歴磁性的な性質を持つことを意味する [29]。

以上のように、動的平均場理論によって f 電子の局在状態から遍歴状態への変化を記述することができた。ここで、図 1(b) の相図と見比べてみると、量子臨界点における超伝導はどうなっているのかと疑問に思うかもしれない。残念ながら、動的平均場理論ではそれは議論することができない。これについては、第 6 節でさらに進んだ理論を用いてもう一度議論する。

[10] 図 16 には伝導電子のスペクトルのみを示している。これは近藤格子模型では f 電子のグリーン関数が定義できないためであるが、代わりに t 行列が同様の情報を持っている。t 行列は不純物系では $t(\omega) = V^2 G_f(\omega)$ で与えられ、格子系にも拡張できる。

[11] 具体的には、くり込まれた化学ポテンシャル $\tilde{\mu} = \mu - \mathrm{Re}\Sigma_{\mathrm{loc}}(0)$ を見ている。(10) 式の $G_{\mathrm{DMFT}}(\omega, \boldsymbol{k})$ の表式で、自己エネルギーの虚部を無視すると、$\omega = 0$ における極が $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \tilde{\mu}$ で与えられる。このことから、$\tilde{\mu}$ を通してフェルミ波数を議論できることが分かる。

表 1: f^2 電子配置の立方晶結晶場状態における秩序状態と近藤効果。

結晶場基底状態	長距離秩序	近藤効果
Γ_1 一重項	秩序なし	フェルミ気体・液体
Γ_3 二重項	電気四極子、磁気八極子	非フェルミ液体（四極子近藤効果）[33]
Γ_4 三重項	磁気双極子、電気四極子、+高次多極子	非フェルミ液体 [34]
Γ_5 三重項	磁気双極子、電気四極子、+高次多極子	非フェルミ液体 [34]

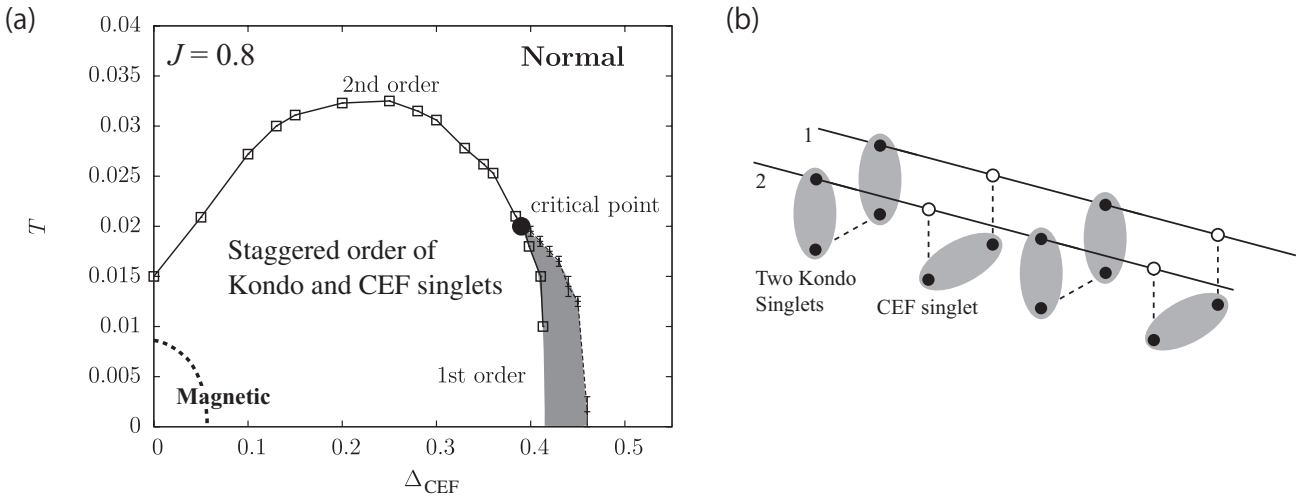


図 17: 結晶場一重項と三重項を低エネルギー状態として持つ f^2 近藤格子模型における結晶場一重項・近藤一重項秩序状態の (a) 相図と (b) 概念図。相図の横軸は一重項と三重項のエネルギー分裂 $\Delta_{\rm CEF}$ で、$\Delta_{\rm CEF}=0$ が通常の近藤格子模型に対応する。文献 [35] より。

4.8 f^2 電子配置における局所相関

ここまで議論した重い電子状態の記述は多くの Ce 化合物に当てはまると考えられている。しかし、原子当たり f 電子を 2 つ持つ Pr 化合物や U 化合物では事情が異なってくる。例えば、立方晶の結晶場を考えた場合、フント則の基底状態である全角運動量 $J=4$ ($S=1, L=5$) の 9 重縮退は Γ_1 一重項、Γ_3 二重項、Γ_4 三重項、Γ_5 三重項に分裂する。それぞれの結晶場状態が基底状態の時に起こり得る長距離秩序状態と近藤効果を表 1 にまとめた。伝導電子との交換相互作用による広い意味での近藤効果を考慮すると、Γ_1 以外のいずれの場合も基底状態は非フェルミ液体となる。Γ_3 二重項の場合はよく知られた四極子近藤効果（2 チャンネル近藤効果）[33] であり、三重項の場合にも非フェルミ液体になる [34]。長距離秩序を伴わずにフェルミ液体状態となるためには、Γ_1 一重項が基底状態の場合しかない。ただし、f 電子の遍歴性が強く、そもそも局所多重項状態が良い出発点でない場合にはその限りではない。Pr 化合物における重い電子状態は前者の可能性が高く、一方 U 化合物の場合には後者の可能性も十分に考えられる。

さて、f 電子系の長距離秩序は、通常は RKKY 相互作用による多極子秩序であるが、それとは異なる局所相関効果による長距離秩序を紹介する。考えるのは結晶場一重項と三重項がエネルギー的にあまり離れていない（$\Delta_{\rm CEF}$ とする）系である。この系で近藤効果を考慮に入れると、伝導電子のフィリングが 1/4（単位胞当たり 1/2 個）のときに、CDW を伴って近藤一重項が選択的に形成される対称性の破れが起こる [35]。図 17(a) は横軸を $\Delta_{\rm CEF}$ とした相図で、$\Delta_{\rm CEF}=0$ が通常の（f^1 の）近藤格子模型に対応する。$\Delta_{\rm CEF}\simeq 0.2$ において、この秩序状態が安定して存在していることが分かる。基底状態では、図 17(b) で表されるように近藤一重項と結晶場一重項状態が空間的に交互に並んだ状態になっている。したがって、この秩序状態の実現には近藤効果が本質的な役割をしている。通常の多極子秩序は近藤効果によって抑えられるが、この秩序状態は近藤効果が対称性の破れを引き起こす珍しい例である。これは充填スクッテルダイト化合物 $PrFe_4P_{12}$ で起こっているとされるスカラー（単極子）秩序状態 [36,37] の微視的状態として提案されている [38]。

また、ここでは紹介しないが、動的平均場理論を Γ_3 二重項における近藤効果を記述する 2 チャンネル近藤格子模型に適用した場合にも、興味深い秩序状態が見つかっている。詳細は文献 [39–41] を参照のこと。

4.9 動的平均場理論の限界

ここまで紹介したように、動的平均場理論は強相関効果を扱うことのできる適用範囲の広い理論である。何度も触れているモット絶縁体や重い電子状態の他にも、例えば、電子と局所フォノン（アインシュタインフォノン）との結合系にも応用されている [18]。これらの物理は $\Sigma(\omega, \boldsymbol{k})$ の ω 依存性が重要な役割を果たすという共通点がある。また、磁気秩序に関して言えば、転移温度が U に対して単調増加する弱相関領域の遍歴磁性と転移温度が t^2/U に比例する強相関領域の局在磁性を繋ぐことができるため、強相関模型における長距離秩序を調べる手段としても有用である。スピン系の相転移を調べるのにまずは平均場近似を適用するのと同様に、電子系では動的平均場近似が最初の選択肢となり得る。ただし、非局所相関は（静的）平均場近似のレベルでしか考慮されていないので、転移温度を高く見積もる傾向があることは心に留めておく必要がある。

それでは、動的平均場近似で扱えない現象は何か。その代表は非従来型の超伝導である。自己エネルギー（と既約バーテックス）の局所近似のために、等方的な超伝導ギャップしか扱えないというのが普通の説明であるが、根本的に考えて、フェルミ面の構造が重要な役割を果たす強相関化合物の超伝導に対して、エネルギーバンドの情報を波数積分した状態密度としてのみ考慮する動的平均場理論では不十分なのは明らかである。この問題を解消する最近の理論については第 6 節で紹介する。

5 揺らぎの協奏

前節で解説した動的平均場理論は、空間相関（波数依存性）を犠牲にする代わりに時間相関（振動数依存性）を正確に扱う理論であった。この節では、それとは逆に、空間相関を重点的に扱う理論について議論する。これは空間揺らぎを表す二体相関関数 $\chi(\omega, \boldsymbol{q})$ をいかに計算するかという問題である。二体相関関数の解析から、磁気揺らぎと超伝導揺らぎが互いに相関していることが分かり、磁性と超伝導の密接な関係が明らかになってくる。この節で解説する内容の入門書としては文献 [19] を挙げておく。

5.1 乱雑位相近似（RPA）

まずは磁気揺らぎを考えよう。動的帯磁率 $\chi_{\rm sp}(\omega, \boldsymbol{q})$ はスピン密度演算子 $\rho_-(\boldsymbol{q}) = (1/N)\sum_{\boldsymbol{k}}(c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\uparrow} - c^\dagger_{\boldsymbol{k}\downarrow}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\downarrow})$ を用いて $\chi_{\rm sp}(\omega, \boldsymbol{q}) = \langle\langle \rho_-(\boldsymbol{q}); \rho_-(-\boldsymbol{q})\rangle\rangle$ により定義される [12]。相互作用の影響を含まない「裸の」感受率 $\chi_0(\omega, \boldsymbol{q})$（リントハルト関数）がエネルギーバンド構造やフェルミ面のネスティングなどの基本的な情報を持っている。これは図 18(a) のファインマンダイアグラムで表され、バブル（泡）ダイアグラムと呼ばれる。矢印付きの実線がグリーン関数を表しており、2 つの矢印が逆向きに向いているのが電子・正孔対の励起を意味する。このようなダイアグラムを用いると、相互作用の影響を系統的かつ直感的に扱うことができる。

それでは相互作用の影響を考えよう。ハバード模型の局所クーロン相互作用を図 18(b) のように波線で表す。この図は 2 つの粒子が波数 $\boldsymbol{q}$ を交換する散乱過程を表しているが、今の場合は相互作用が局所的なので $U(\boldsymbol{q}) = U$ である。相互作用の影響を扱う最も基本的な近似は乱雑位相近似（RPA）である。RPA におけるスピン帯磁率 $\chi^{\rm RPA}_{\rm sp}(\omega, \boldsymbol{q})$ と電荷感受率 $\chi^{\rm RPA}_{\rm ch}(\omega, \boldsymbol{q})$ はそれぞれ

$$\chi^{\rm RPA}_{\rm sp}(\omega, \boldsymbol{q}) = \frac{\chi_0(\omega, \boldsymbol{q})}{1 - U\chi_0(\omega, \boldsymbol{q})}, \quad \chi^{\rm RPA}_{\rm ch}(\omega, \boldsymbol{q}) = \frac{\chi_0(\omega, \boldsymbol{q})}{1 + U\chi_0(\omega, \boldsymbol{q})} \tag{19}$$

で与えられる。これをダイアグラムで表現したものが図 18(c) である。バブルと波線の繰り返しが級数になっていることに注目して、級数展開の公式 $1/(1-x) = 1 + x + x^2 + \cdots$ を使うと上記の表式が得られる。分母の符号の違いは、ハバード相互作用を電荷演算子 $n_+ = n_\uparrow + n_\downarrow$ とスピン演算子 $n_- = n_\uparrow - n_\downarrow$ を用いて $Un_\uparrow n_\downarrow = U(n_+n_+ - n_-n_-)/4$ と表したときの符号に起因している。第 2 項のマイナス符号は、ハバード相互作用がスピン自由度に対して「引力的」に働くことを意味する。それによりスピン揺らぎが増強されるが、逆に電荷揺らぎは抑えられる。この結果は、原子極限（第 3.3 節）において電荷の自由度がなくなり、スピンの自由度のみが残ったことと対応している。なお、軌道自由度がある場合には、χ_0 や U が軌道の添え字を持った行列で置き換えられる。

[12] 動的相関関数は、虚時間表示を用いると $\langle\langle A; B\rangle\rangle(i\nu) = \int_0^\beta d\tau \langle A(\tau)B\rangle e^{i\nu\tau}$ によって定義される。これから松原振動数を $i\nu \to \omega^+$ と解析接続したものが、実振動数 ω を引数として持つ動的相関関数である。

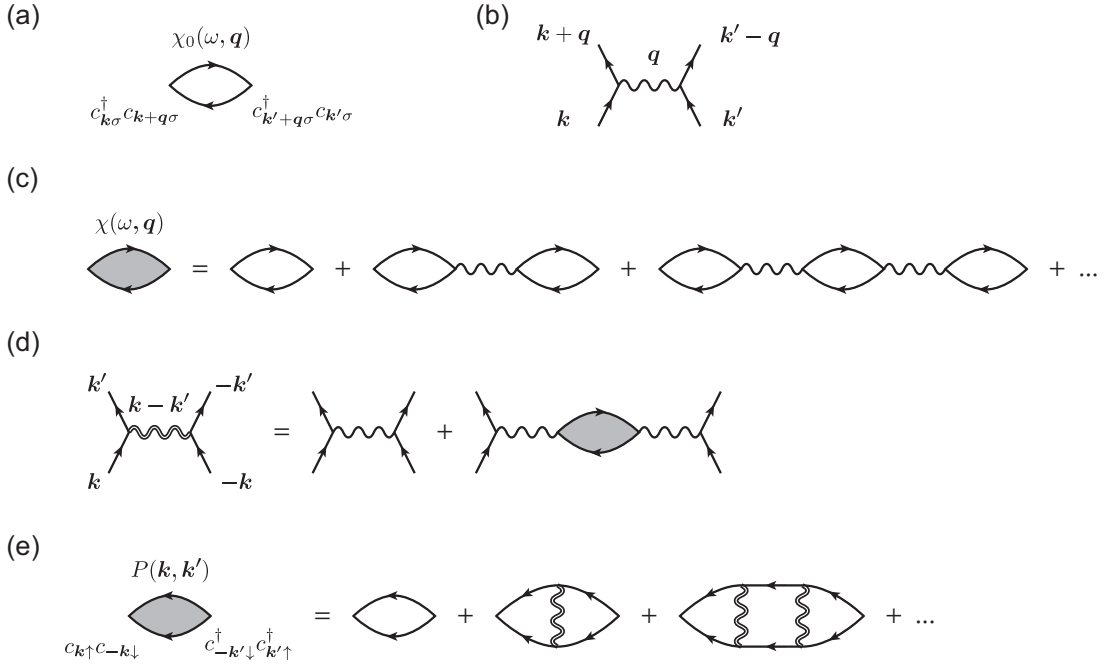


図 18: RPA による各種物理量のダイアグラム。(a) 裸の感受率 $\chi_0(\omega,\boldsymbol{q})$。(b) クーロン相互作用 U。(c) RPA によるスピン帯磁率 $\chi^{\rm RPA}_{\rm sp}(\omega,\boldsymbol{q})$ および電荷感受率 $\chi^{\rm RPA}_{\rm ch}(\omega,\boldsymbol{q})$。(d) スピン揺らぎを媒介とした有効相互作用。(e) 有効相互作用による超伝導感受率 $P_\alpha=\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\phi^*_\alpha(\boldsymbol{k})P(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\phi_\alpha(\boldsymbol{k}')$。

斥力によりスピン揺らぎが増強されることがわかった。次に、スピン揺らぎが生み出す二次的な効果を考えよう。図 18(d) のダイアグラムはスピン揺らぎを媒介とした有効相互作用を表す。超伝導を意識して、2 粒子の合計の運動量が $\boldsymbol{Q}=0$ の相互作用を考えている。右辺第 2 項がスピン揺らぎによる寄与で、

$$V_{\rm eff}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\propto U^2\chi^{\rm RPA}_{\rm sp}(0,\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \tag{20}$$

と表される。簡単のため、フェルミ準位近傍にある 2 粒子間の散乱を想定して、振動数は 0 とした。この有効相互作用は正、すなわち斥力であるが、相互作用が波数依存性を持っている点が重要である。そのため、フェルミ面上でギャップの符号が変化するような電子対（非従来型や異方的と呼ばれる）に対しては引力として働く場合もある。これを見るためには、点群の既約表現によって分類される因子 $\phi_\alpha(\boldsymbol{k})$ を用いて、有効相互作用を

$$V_{\rm eff}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')=\sum_\alpha V_\alpha\phi_\alpha(\boldsymbol{k})\phi^*_\alpha(\boldsymbol{k}') \tag{21}$$

と展開する [13]。ギャップ関数にも同様の波数依存性を考慮に入れるために、因子 $\phi_\alpha(\boldsymbol{k})$ を用いて電子対演算子を $B_\alpha=\sum_{\boldsymbol{k}}\phi_\alpha(\boldsymbol{k})c_{\boldsymbol{k}\uparrow}c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}$ で定義する。この非 s 波まで含めた電子対の揺らぎに対応する超伝導感受率 $P_\alpha=\langle\langle B_\alpha;B^\dagger_\alpha\rangle\rangle_{\omega=0}$ に対して、有効相互作用 $V_{\rm eff}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$ を考慮に入れた RPA ダイアグラムは図 18(e) で与えらえれる。このダイアグラムは、図 18(c) と同様に級数になっていることから、

$$P^{\rm RPA}_\alpha=\frac{P_{0\alpha}}{1+V_\alpha P_{0\alpha}} \tag{22}$$

とまとめることができる。ここで $P_{0\alpha}$ は $|\phi_\alpha(\boldsymbol{k})|^2$ の重みを付けて波数和をとった粒子・粒子揺らぎであるが、フェルミ面が存在すれば低温で必ず対数発散する（クーパー不安定性）。したがって、V_α が負（引力）になる基底 $\phi_\alpha(\boldsymbol{k})$ があれば、その対称性を持った超伝導揺らぎが発散する。

それでは、どのような場合に V_α が負になるのか。これを理解するには $\chi^{\rm RPA}_{\rm sp}(0,\boldsymbol{q})$ の関数形を仮定して実際に展開してみるのが分かり易い [4, 42]。例として 2 次元正方格子を考え、反強磁性揺らぎが強いとして $\chi_{\rm sp}(0,\boldsymbol{q})=J_0-J_1\gamma(\boldsymbol{q})$ を仮定する（$J_0>0$, $J_1>0$）。$\gamma(\boldsymbol{q})$ を含む正方格子の場合の基底 $\phi_\alpha(\boldsymbol{q})$ は表 2 にまとめてある。$\chi_{\rm sp}(0,\boldsymbol{q})$ の第 1 項の

[13] このように展開できることは、ルジャンドル関数の加法定理 $P_l(\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}')\propto\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{k}})Y^*_{lm}(\hat{\boldsymbol{k}}')$ を想像すると分かり易い（回転対称性がある場合）。

表 2: 2 次元正方格子（点群 D_4）の場合の基底 $\phi_\alpha(\boldsymbol{k})$。

既約表現	因子 $\phi_\alpha(\boldsymbol{k})$
A_{1g}	$\gamma(\boldsymbol{k}) = \cos k_x + \cos k_y$
B_{1g}	$\eta(\boldsymbol{k}) = \cos k_x - \cos k_y$
E_u	$\zeta_x(\boldsymbol{k}) = \sqrt{2}\sin k_x, \quad \zeta_y(\boldsymbol{k}) = \sqrt{2}\sin k_y$

J_0 は等方的な s 波に対して斥力として働く。第 2 項の $\gamma(\boldsymbol{q})$ に $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$ を代入して展開すると

$$\gamma(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') = \frac{1}{2}\left[\gamma(\boldsymbol{k})\gamma(\boldsymbol{k}') + \eta(\boldsymbol{k})\eta(\boldsymbol{k}') + \zeta_x(\boldsymbol{k})\zeta_x(\boldsymbol{k}') + \zeta_y(\boldsymbol{k})\zeta_y(\boldsymbol{k}')\right] \tag{23}$$

が得られる。この結果は反強磁性揺らぎが表 2 にある 3 つのタイプの超伝導揺らぎを誘起することを意味する。この 3 つの電子対が反強磁性揺らぎによって有利になるのは、それらが隣同士の格子点の電子対を表しているためである（$\phi_\alpha(\boldsymbol{k})$ を実空間で表してみると分かる）。実際にどの超伝導が選ばれるかは、(22) 式の $P_{0\alpha}$ の発散の強さによって決まる。発散の強さは、$|\phi_\alpha(\boldsymbol{k})|^2$ とフェルミ面との重なりが大きいほど大きくなる。このことから、強相関系の超伝導には磁気揺らぎの波数ベクトルとフェルミ面の構造が重要な役割をすることが分かる。

5.2 パルケ方程式

上記のダイアグラムを用いた議論によって、磁性と超伝導が互いに密接に関連していることが直感的に理解できたと思う。同様の考察から、超伝導が逆に磁気揺らぎに影響することも示せる。しかしながら、このようなダイアグラム展開で取り込む項を増やしていくには限界があるのは明らかである。むしろ、各ダイアグラムに物理的意味があるので、ダイアグラム展開は「このような項（効果）を取り込んだらこういう超伝導が有利になる」と解釈するのが妥当であろう。例えば、高温超伝導と関連して、反強磁性揺らぎが $d_{x^2-y^2}$ 対称性の超伝導ペアに有利に働くという描像はダイアグラムによる議論を用いると明快である。

このように各ダイアグラムに意味を求める伝統的な摂動論とは対照的に、ダイアグラムを系統的に取り込んでいく方法にパルケ（寄せ木）方程式というものがある [14]。パルケ方程式は、反強磁性揺らぎが d 波超伝導の揺らぎを生み出し、その超伝導揺らぎが磁気揺らぎにフィードバックし…という際限なく繰り返される揺らぎ同士の交差相関を積分方程式として表したものである。具体的には、2 粒子グリーン関数の「自己エネルギー」に相当する既約バーテックスが 3 通り（近藤問題の場合には 2 通り）に表せることを利用して、それらが互いに入れ子になったダイアグラムを逐次作っていく。これにより磁性と超伝導の揺らぎを対等に含んだバーテックスが得られるが、積分方程式の数値解法が実際上の課題である。汎関数繰り込み群と呼ばれる方法 [46] は、揺らぎの交差相関を積分方程式として取り込むという点で、パルケ方程式と共通の狙いを持っている。

以上のような揺らぎを扱う理論は強相関系の超伝導の研究で主役となっている。特に、重い電子系はエネルギースケールが小さく、異なる波数や対称性を持つ磁性や超伝導の揺らぎが拮抗しているので、RPA を超えた理論が必要であると思われる。なお、このような空間揺らぎを扱う理論では、自己エネルギー $\Sigma(\omega, \boldsymbol{k})$ における局所相関効果が十分には取り込まれていないため、あくまでも弱相関の理論であることに注意されたい。これらの方法を重い電子超伝導に適用する（している）場合には、既に局所相関が取り込まれた準粒子を扱っているものと考えている。一段階戻って準粒子の形成から議論するには、前節の動的平均場理論を併用するのが望ましい。次節でこれについて議論する。

6 動的平均場理論の拡張

第 4 節で解説した動的平均場理論は非相互作用極限と原子極限、すなわち、遍歴状態と局在状態をうまく内挿し、それらの間の「中間領域」の記述を与える。この理論がモット絶縁体や重い電子状態の研究で威力を発揮してきたことは計算例を交えて紹介した通りである。一方、強相関系の超伝導では、第 5 節で述べたような様々な拮抗する揺らぎを扱う理論が有用である。これらの理論のいいとこどりのような都合のよい理論はできないものか。これが多体電子論の分野で、ここ 10 年、20 年ほど研究されているトピックスである。

[14] パルケ方程式は近藤問題（実際は X 線の吸収・放出スペクトルのフェルミ端異常の問題）において最強発散項を取り込む方程式として導入された [43]。磁性と超伝導との関連では [44, 45] が詳しい。

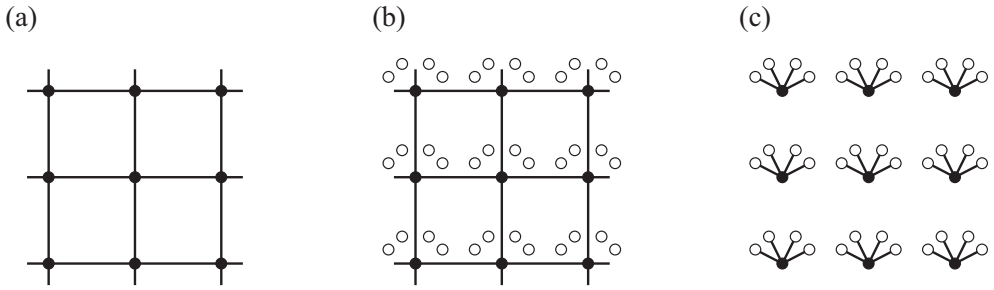


図 19: 自己エネルギー汎関数理論の概念図。(a) 元の格子模型。黒丸は相関のある格子点。(b) 元の格子模型と等価な模型。白丸は相互作用の無い格子点（bath）。(c) 参照系。文献 [53] より。

この節では動的平均場理論をベースとして、超伝導の記述に必要な空間揺らぎを取り込む拡張理論を紹介する。動的平均場理論の拡張は大きく 2 つのクラスに分けられる。直接的な方法は、複数の格子点を含むクラスターに対して局所近似を適用するいわゆるクラスター動的平均場理論 [15] である [47]。厳密に扱う部分を大きくして、いわば力ずくで空間相関を取り込もうという考えで、数値計算に自信のある“力自慢”向きの方法である。クラスター動的平均場理論はクラスター内の短距離相関を取り込む拡張であるが、それとは対照的に、ダイアグラム展開などと組み合わせることにより長距離揺らぎを取り込む拡張理論が近年発展している [48–52]。ダイアグラム展開が超伝導の理論研究において主要な計算手法になっていることを考えると、動的平均場理論の拡張の方向性として理にかなっていると思う。

以下では、まず最初にクラスター拡張理論の一種である自己エネルギー汎関数理論という理論を紹介する。次に、ダイアグラム展開により長距離揺らぎを取り込む拡張理論を紹介する。

6.1 自己エネルギー汎関数理論

動的平均場理論のクラスター型拡張の一種である Potthoff の自己エネルギー汎関数理論 [53, 54] を紹介しよう。この理論は動的平均場理論の拡張というだけでなく、動的平均場近似のひとつの側面を与える意味もあり、視野が広がると思う。

ラッティンジャー・ワードの定式化を使う。これは自由エネルギー Ω をグリーン関数 $G(\omega, \boldsymbol{k})$ の汎関数として $\Omega[G]$ のように表すと、平衡状態におけるグリーン関数が停留条件 $\delta\Omega[G]/\delta G = 0$ によって決定されるというものである。この理論で主要な役割をするのが、相互作用の効果を表すラッティンジャー・ワード汎関数 $\Phi[G]$ である。$\Phi[G]$ を構成するダイアグラムは骨格ダイアグラムと呼ばれる。自己エネルギーダイアグラムは $\Sigma[G] = \delta\Phi[G]/\delta G$ で与えられる。この $\Omega[G]$ と $\Phi[G]$ をルジャンドル変換して、Σ の汎関数として見ることもできる。そうすると、

$$\Omega_{\boldsymbol{t},\boldsymbol{U}}[\Sigma] = \mathrm{Tr}\ln[-(G_{0,\boldsymbol{t}}^{-1} - \Sigma)^{-1}] + F_{\boldsymbol{U}}[\Sigma] \tag{24}$$

右辺の $F[\Sigma]$ は $\Phi[G]$ のルジャンドル変換 $F[\Sigma] = \Phi - \mathrm{Tr}(\Sigma G)$ で、相互作用の効果は全てここに含まれる。この汎関数は元の汎関数 $\Omega[G]$ と同様に、停留条件 $\delta\Omega[\Sigma]/\delta\Sigma = 0$ が平衡状態を決定する。添え字 $\boldsymbol{t}$ はホッピングとポテンシャルを含むハミルトニアンの一体部分のパラメーターをシンボリックに表したもので、$\boldsymbol{U}$ は 2 体相互作用のパラメーターをシンボリックリンクに表したものである。

この表現を使って近似理論を構築するために、同じ相互作用 $\boldsymbol{U}$ を持ち、一体部分のみが異なる（$\boldsymbol{t}'$ とする）参照系を用意する。なお、このとき元の格子模型には存在しない格子点（ただしこの格子点で相互作用は働かない）を付け加えても問題ない。元の格子模型と参照系の例を図 19 に示す。参照系の自由エネルギーは (24) 式において $\boldsymbol{t}$ を $\boldsymbol{t}'$ で置き換えて

$$\Omega_{\boldsymbol{t}',\boldsymbol{U}}[\Sigma] = \mathrm{Tr}\ln[-(G_{0,\boldsymbol{t}'}^{-1} - \Sigma)^{-1}] + F_{\boldsymbol{U}}[\Sigma] \tag{25}$$

となる。参照系は数値計算を使って厳密に解ける（解けるように $\boldsymbol{t}'$ を選ぶ）とする。つまり、与えられた $\boldsymbol{t}'$ に対して、停留条件を満たす厳密な Σ が求まるとする。これを $\Sigma(\boldsymbol{t}')$ と表し、そのときのグリーン関数と自由エネルギーを $(G_{0,\boldsymbol{t}'}^{-1} - \Sigma(\boldsymbol{t}'))^{-1} \equiv G'$ および $\Omega_{\boldsymbol{t}',\boldsymbol{U}}[\Sigma(\boldsymbol{t}')] \equiv \Omega'$ と表す。

[15] クラスター動的平均場理論という言葉は、クラスター型の拡張理論の総称として使われる。実際は、自己無撞着条件の取り方によって 2 つの異なる拡張法、cellular DMFT (CDMFT) と dynamical cluster approximation (DCA) がある。また、第 6.1 節で紹介する自己エネルギー汎関数理論も広い意味でクラスター動的平均場理論の一種である。

元の模型と参照系で相互作用は同じなので、(24) 式と (25) 式の $F_{\boldsymbol{U}}[\Sigma]$ は共通である（つまり、骨格ダイアグラムの構造は同じ）点が重要である。よって、両式から $F_{\boldsymbol{U}}[\Sigma]$ を消去できて、

$$\Omega_{\boldsymbol{t},\boldsymbol{U}}[\Sigma(\boldsymbol{t}')] = \Omega' + \mathrm{Tr}\ln[-(G_{0,\boldsymbol{t}}^{-1} - \Sigma(\boldsymbol{t}'))^{-1}] - \mathrm{Tr}\ln(-G') \tag{26}$$

が得られる。右辺の 3 つの項は全て計算可能であるので、この式から元の格子模型の「厳密な」自由エネルギーが求まる。ただし、Σ の動ける範囲が制限されていることに注意する。Ω をこの部分空間の中で停留条件を満たすようにすると、この近似の範囲での最適な解が求まる：$\partial\Omega_{\boldsymbol{t},\boldsymbol{U}}[\Sigma(\boldsymbol{t}')]/\partial\boldsymbol{t}' = 0$. 参照系として各サイトに無限個の bath がくっついた系をとると、この近似は動的平均場近似と一致することを示すことができる。

以上の定式化は、動的平均場理論の拡張や亜種を与えるだけでなく、動的平均場理論において行われている近似のひとつの視点を与える。摂動論と対比させて考えると、計算できるように近似された $\Omega[\Sigma] \approx \Omega^{\mathrm{approx}}[\Sigma]$ を Σ の全空間において最小化するのが摂動論、厳密な $\Omega[\Sigma]$ を部分空間 $\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{partial}}$ 内で最小化するのが動的平均場理論である。別の言葉で言うと、$\Omega[\Sigma]$（あるいは $\Phi[G]$）を構成するダイアグラムを制限するのが摂動論、Σ の空間を制限するのが動的平均場理論である。

また、この枠組みでは、1 体の項であれば任意の変分パラメーターを加えることができる。例えば、元のハミルトニアンの対称性を破るポテンシャルを考慮すると、相転移を議論することができる。この理論は変分クラスター近似（VCA）と呼ばれている [54]。

6.2 動的平均場理論まわりの摂動展開

局所相関がくり込まれた準粒子による超伝導をどのように扱うかを考えよう。重い電子のように準粒子の有効質量が非常に大きいとき、有効質量の逆数に相当するくり込み因子は $z \ll 1$ を満たす。くり込み因子は一粒子励起スペクトル $A(\boldsymbol{k},\omega)$ の中で準粒子として記述される部分（コヒーレント部分）の割合を表す。したがって、有効質量が大きいほど、スペクトルの大部分 $1-z$ はフェルミ準位から離れたインコヒーレント部分が占める。これが原子極限とつながる部分で、局在磁性としての役割を担う。このことから、強相関系における磁気揺らぎを媒介とした超伝導を微視的模型に基づいて議論するには、準粒子成分だけでなく局在成分も含むスペクトル全体を扱う必要があると考えられる。このような狙いを持った理論に duality model と呼ばれる現象論 [4,55,56] があるが、ここでは微視的に扱う方法について考える。

第 4 節で紹介したように、強相関系に特徴的なスペクトルの 3 ピーク構造は動的平均場理論によって得ることができた。それならば、このスペクトルを使って磁気揺らぎとそれによって誘起される超伝導揺らぎを計算すればよいのではないかと考えるのは自然であろう。例えば、図 11 で表される動的平均場理論における帯磁率 $\chi_{\mathrm{sp}}^{\mathrm{DMFT}}(\omega,\boldsymbol{q})$ を、図 18(d) の有効相互作用 $V_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$ における「糊」として採用すればよさそうだが、それは正しくない。相互作用 U の効果を二重に数えてしまうためである。この問題を解決し、動的平均場近似を出発点としたダイアグラム展開により空間揺らぎを系統的に取り込むことを可能にするのがデュアルフェルミオン法と呼ばれる理論 [50,57] である。

デュアルフェルミオン法の概略と最近の応用例については最近の記事 [7] に解説を書いた。非専門家向けに数式を一切用いないで解説しているので、そちらも参考にしていただきたい。数式を用いた導出は論文 [57,58] などを参考のこと。本稿では物理的なアイデアを中心に、概観を述べよう。

動的平均場理論で得られた格子系のグリーン関数 $G_{\mathrm{DMFT}}(i\omega,\boldsymbol{k})$ から補助粒子（d と表す）のグリーン関数を以下のように定義する：

$$\widetilde{G}_0(i\omega,\boldsymbol{k}) = G_{\mathrm{DMFT}}(i\omega,\boldsymbol{k}) - g(i\omega) \tag{27}$$

ここで、$g(i\omega)$ は (11) 式で定義される、有効不純物模型の局所グリーン関数である。このように局所成分を差し引いておくことにより、相互作用の二重数えが回避される [16]。d 粒子間の相互作用は動的平均場理論の有効不純物模型において計算される完全な（可約な）バーテックス $\gamma(i\omega,i\omega';i\nu)$ である。図 11 で用いられている既約バーテックス $\gamma^{\mathrm{irr}}(i\omega,i\omega';i\nu)$ とは異なるので注意。これら局所相関を完全に取り込んだ $\widetilde{G}_0$ と γ をダイアグラム展開の構成要素として、通常の摂動論と同様に、自己エネルギーや二体相関関数を計算する（図 20(a)）。これにより空間相関が取り込まれる。こうして求まった d 粒子の物理量は、厳密な関係式を通して元の電子の物理量に変換される。

d 粒子を用いた摂動論と第 5 節で解説した通常の摂動論との違いを具体的に考えてみよう。図 18(d) のダイアグラムに対応する磁気揺らぎを媒介とした有効相互作用は図 20(b) で与えられる。このダイアグラムを構成する $\widetilde{G}_0$ と γ には局所

[16] $\widetilde{G}(i\omega,\boldsymbol{k})$ は高振動数極限で通常のグリーン関数のような $1/(i\omega)$ ではなく、$1/(i\omega)^2$ に比例することに注意されたい。したがって、d 粒子のスペクトルには物理的な意味はなく、あくまでも計算上の都合で導入したものと解釈すべきである。

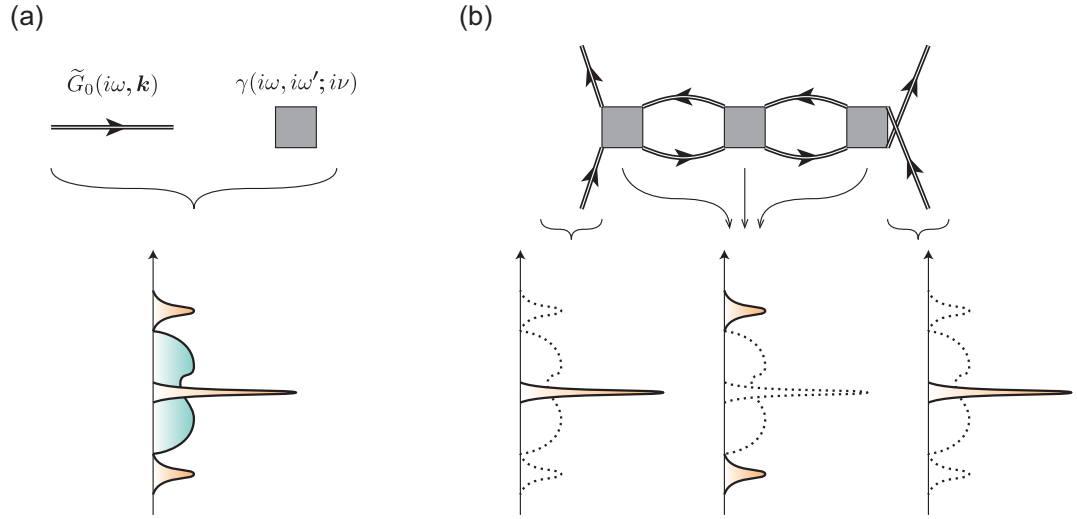


図 20: 動的平均場理論まわりの摂動展開の概念図。(a) ダイアグラムを構成する要素とその物理的意味。(b) 有効相互作用のダイアグラムの例とそれにより考慮される過程の一例。

相関が完全に取り込まれているので、この有効相互作用には、準粒子（コヒーレント部分）の間の有効相互作用を局在成分（インコヒーレント部分）が媒介するというような過程が含まれていることになる。コヒーレント部分のみを扱う通常の摂動論やフェルミ液体論ではこのような過程は含まれない。これがどのような結論をもたらすか、その一例を次に示そう。

6.3 重い電子超伝導

それではデュアルフェルミオン法を用いた計算例を一つだけ紹介する。第 4.7 節で近藤格子模型に動的平均場理論を適用した結果を紹介したが、量子臨界点近傍における超伝導は局所近似の制約から手付かずのままであった。ここでは超伝導に関して議論しよう。

結果に行く前に、問題点を整理しておこう。2 次元正方格子で最近接ホッピングのみを持つ電子系を考える。まずはハバード模型を考えると、ハーフフィリングで反強磁性が起き、そこにキャリアをドープすると $d_{x^2-y^2}$ 波の超伝導が実現するというのが銅酸化物高温超伝導のシナリオである。それではハバード U の代わりに、近藤相互作用 J がある場合には、同様の超伝導は出現するだろうか。近藤格子でも RKKY 相互作用によって反強磁性が起こるので、揺らぎの観点からは、ハバード模型と同じ $d_{x^2-y^2}$ 波の超伝導が予想される。しかし、その揺らぎを生み出す微視的相互作用 U と J は全く別ものなので、同じ超伝導が実現するかは自明ではない。これは d 電子系と f 電子系における超伝導の違いは何かという基本的な問題意識である。

それでは結果に移ろう。図 21(b) は 2 次元近藤格子模型における超伝導と反強磁性を含む相図である。この計算では、d 粒子の自己エネルギーや二体相関関数として、揺らぎ交換近似（FLEX）と同様の梯子型ダイアグラムを考慮している。J の小さい領域では、ハバード模型と同じ $d_{x^2-y^2}$ 波（$\mathrm{B_{1g}}$）対称性の超伝導が起こる。しかし、J が大きくなると、それに代わって p 波（E_u）対称性を持つ超伝導が実現する。このようにハバード模型と異なる結果になったのはなぜだろうか。

これを理解するカギは、第 4.7 節で議論した大きいフェルミ面である。図 21(b) の強度プロットは、フェルミ面の囲む体積（実際は 2 次元なのでフェルミ線の囲む面積）からラッティンジャーの定理によって見積もられたバンドの電子数 n_{FS} を表す。弱結合・高温領域（相図の左上）では $n_{\mathrm{FS}} = n_{\mathrm{c}}$ の小さいフェルミ面（局在状態）、強結合・低温領域（相図の右下）では $n_{\mathrm{FS}} = n_{\mathrm{c}} + 1$ の大きいフェルミ面（遍歴状態）になっていることが分かる。この結果は図 16 の動的平均場理論による結果と対応している。図 21(b) において、n_{FS} が大きく変化している領域と超伝導状態の転移が起こっている領域が一致している点に注目してほしい。このことから、遍歴・局在の移り変わりが超伝導状態の転移を引き起こしていると考えられる。実際、遍歴・局在の連続変化が起こることが重い電子系の特徴であり、ハバード模型との違いである。以上のように、f 電子系では重い電子状態の形成に伴ってフェルミ面が変化するために、予想とは異なる超伝導状態が実現する場合がある。

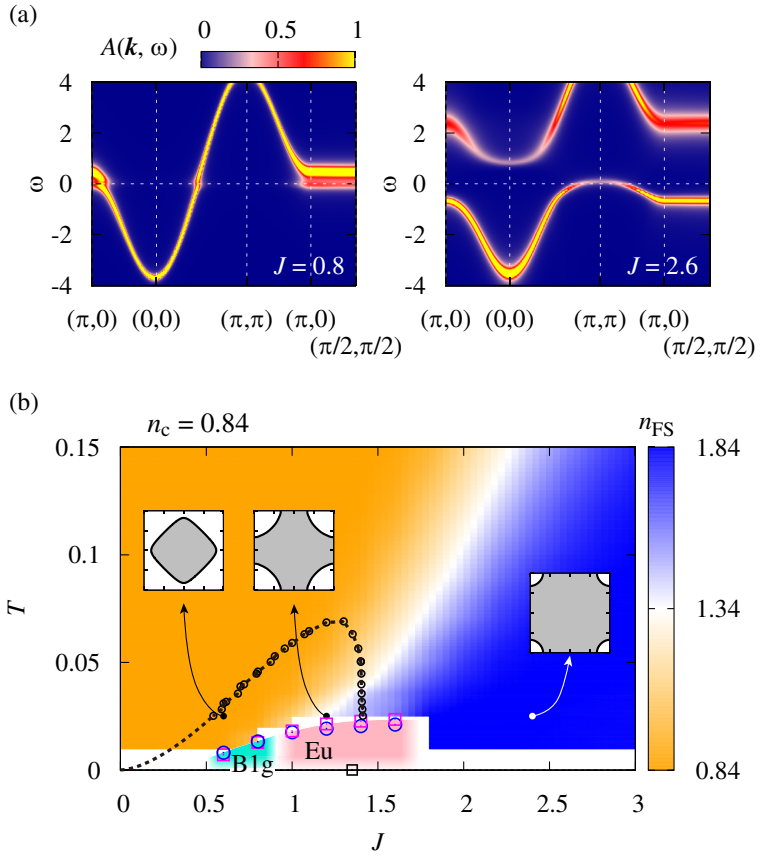


図 21: デュアルフェルミオン法による 2 次元正方格子上の近藤格子模型における (a) 一粒子励起スペクトルと (b) 超伝導相図 [59]。伝導電子数 $n_c = 0.84$ のハーフフィリング近傍。B_{1g} と E_u はそれぞれスピン一重項の $d_{x^2-y^2}$ 波と p 波の対称性を持つ超伝導。強度プロットはフェルミ面の囲む体積によって定義される電子数 n_{FS} を表す。丸と点線は反強磁性相の目安を表す（ハーフフィリングの場合）。図は文献 [7] より。

この計算で得られた p 波超伝導はスピン一重項の奇周波数超伝導である。この揺らぎが増強された要因は、中間領域におけるフェルミ面の形状と、図 20(b) で表されるインコヒーレントなスピン揺らぎを介した動的な有効相互作用の 2 つが考えられる。ここではこれに関して深入りしないが、詳細は解説 [7] とそこで引用されている文献を参考にしてほしい。

7 おわりに

多体効果を扱う理論は着実に進歩していると思う。磁性と超伝導の理論は、1980 年代後半以降の銅酸化物高温超伝導や重い電子系超伝導の研究で発展し、一定の理解が得られている。それとは別に、1990 年ごろから動的平均場理論が広まり、数値計算手法の発展と計算機の進歩も相まって、モット絶縁体や重い電子状態などに本質的な局所相関効果を議論することができるようになった。別々に発展したこれらの理論が、最近の研究で統合されつつある。それによって、これまでは夢物語であった重い電子超伝導の一貫した計算（重い電子状態の形成から超伝導の発現まで）に手が届くところまで来ている。とはいえ、実際の化合物の性質を議論するには課題も多い。今後解決すべき問題点とそれに対する取り組みを文献を列挙して紹介しよう。

動的平均場理論の数値計算では、CTQMC 法が一般的になっている。CTQMC 法の実用上の課題を 2 つ挙げておく。ひとつ目は計算コストの問題である。最も広く使われている混成展開アルゴリズムは、計算時間が軌道の数に対して指数関数的に増大する。したがって、多軌道系への応用に際しては計算時間を減らすための工夫が必須である。これに関する取り組みは [25,60,61] がある。もう一つは負符号問題である。こちらが CTQMC 法の応用上、最大の障壁であるが、これについては解決の見込みは今のところない。特に、一般的な二体相互作用を持つ多軌道系やクラスター系では負符号問題は不可避である。ただし、基底の取り方によってある程度軽減できる場合もある。詳細は例えば [25,62] を参照のこと。

超伝導の理論では、RPA（化合物の場合は DFT+RPA 法）による結論が最初に知るべき基本的な情報であるが、過信は禁物である。例えば、最近の鉄系超伝導の研究では、RPA による初期の計算 [63] とバーテックス補正まで含めた計

算 [64] では異なった結論を与える。また、同様の計算を U 化合物の多極子秩序に適用した例でも、バーテックス補正が少なからず寄与をする [65]。これらの経験から、特に多軌道系においては、RPA を超えて様々な揺らぎ（スピン・軌道・電子対など）を対等に扱う必要があると思われる。汎関数繰り込み群法やパルケ方程式等の強相関系への応用は、例えば [51,66–68] がある。

動的平均場理論を超えた理論では、準粒子間の相互作用の役割をするバーテックス $\gamma(i\omega, i\omega'; i\nu)$ が重要な役割をする。バーテックスは軌道の添え字を 4 つ持つので、多軌道系でこれをまともに扱うことは避けたい。例えば、振動数依存性の中で重要な部分のみを取り出すのはひとつの手であるが、そのためには、まず $\gamma(i\omega, i\omega'; i\nu)$ の特性を詳しく知る必要があるだろう。バーテックスの詳細な扱いは、例えば文献 [67,69] が詳しい。

動的平均場理論では非局所相互作用は平均場近似レベルの扱いになってしまう。平均場近似を超えて非局所相互作用を扱う理論にデュアルボゾン法と呼ばれるものがある [69–71]。これは、電子のホッピングに起因する非局所性と元々のハミルトニアンにある非局所相互作用を対等に扱う理論である。また、これと同じ流れで、スクリーンされて振動数依存性を持った電子間クーロン相互作用 $U(\omega)$ を GW 近似によって考慮する理論も発展している [72]。

強相関化合物の多体効果を考慮に入れた電子構造計算を目的とした DFT+DMFT 法には、電子相関の二重数えの問題がある。DFT と DMFT は別々の言葉で表された理論なので、両者で考慮されている電子相関の対応がつかないのが根本的な問題である。このあいまいさは、エネルギーバンドが複雑な重い電子系化合物に適用した場合に、特に大きな問題となる。これに関する最近の研究は [73] を参照のこと。

以上、最後はまとまりがなくなってしまったが、多体効果の最前線では試行錯誤を繰り返しつつ様々な理論や技術の開発が行われている。これに関しては海外に先を越されてしまっている感が否めないが、日本からも新しい潮流が出てくることを強く願う。

本稿の内容は、以下の方々との共同研究と議論によって得られた理解を元にまとめたものである：（敬称略）倉本義夫、楠瀬博明、星野晋太郎、播磨尚朝、D. Vollhardt, A. I. Lichtenstein, H. Hafermann。以上の方々に感謝する。また、夏の学校の講師の機会をくださった野原実教授、藤秀樹教授、播磨尚朝教授と原稿に目を通して有益なコメントをくださった楠瀬博明准教授には特別感謝を申し上げたい。

A　変分原理による動的平均場理論の定式化

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 [74] 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）[18] 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、やや進んだ導出法として、第 6.1 節の自己エネルギー汎関数法 [53,54] や第 6.2 節のデュアルフェルミオン法 [50,57] 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。

A.1　（静的）平均場近似

変分原理は近似理論の構築において非常に有益である。動的平均場理論に入る前に、イジング模型の平均場近似を例にとり、変分原理を確認しよう。イジング模型のハミルトニアン $\mathcal{H}_{\rm Ising} = I\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j$ を考える。よく知られているように、$\sigma_i = \langle\sigma_i\rangle + (\sigma - \langle\sigma_i\rangle)$ と書き表し、平均値からのズレを表す右辺の括弧部分に関する 2 次の項を無視するというのが平均場近似である。

これを別の見方をする。まず未知の量 m を導入し、$\sigma_i = m + (\sigma_i - m)$ と表す。最終的には $m = \langle\sigma_i\rangle$ となるが、ここでは m は任意の数とする。当然、模型を厳密に解けば答えは m に依らないが、近似を導入すると結果が m に依存するようになる。$(\sigma_i - m)$ の 2 次の項を無視すると、m に依存した平均場ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\rm MF}(m) = zIm\sum_i\sigma_i + (N/2)zIm^2$ が得られる。ここから m をパラメーターとして含む自由エネルギー $F_{\rm MF}(m)$ が求まる。停留条件 $\partial F(m)/\partial m = 0$ を課すと、平均場近似における自己無撞着方程式 $m = \tanh(\beta zIm)$ が得られる。右辺が $\mathcal{H}_{\rm MF}$ から計算される σ_i の平均値の表式と一致することから、未知定数として導入した m が $\langle\sigma_i\rangle$ として意味を持っていたことが分かる。

以上の手順をまとめると、まず適当なパラメーターを導入してハミルトニアンを書き換える。次に、そのパラメーターを含んだまま近似を適用し、解ける模型に落とす。最後に、自由エネルギーの停留条件からパラメーターを決定する。ここでは一つのパラメーター m、あるいは同じことであるが平均場 $h_{\rm eff} = zIm$ を導入したが、代わりに時間依存する局所場を導入して最適化するのが動的平均場近似である。

A.2 有効媒質

経路積分表示を使う。変分原理による導出以外に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

$$Z = \int \prod_i \mathcal{D}\bar{c}_i \mathcal{D}c_i e^{-\mathcal{S}\{\bar{c},c\}} \tag{28}$$

と表され、作用 $\mathcal{S}$ は

$$\mathcal{S}\{\bar{c},c\} = \int d\tau d\tau' \sum_{ij} \bar{c}_i(\tau) \left[-G_0^{-1}(\tau-\tau')\right]_{ij} c_j(\tau') + \sum_i \mathcal{S}_{\rm int}\{\bar{c}_i, c_i\} \tag{29}$$

で与えられる。G_0 は自由粒子のグリーン関数で $G_0^{-1}(i\omega, \boldsymbol{k}) = i\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}}$ を時間・空間に関してフーリエ変換したものである。$\mathcal{S}_{\rm int}$ 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 $\boldsymbol{c}_i$ で表し、上式を

$$\mathcal{S}\{\bar{c},c\} = \sum_{ij} \bar{\boldsymbol{c}}_i (-G_0^{-1})_{ij} \boldsymbol{c}_j + \sum_i \mathcal{S}_{\rm int}\{\bar{c}_i, c_i\} \tag{30}$$

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 $S_{\rm int}$ 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。この一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

$$G^{-1}(i\omega, \boldsymbol{k}) = G_0^{-1}(i\omega, \boldsymbol{k}) - \Sigma(i\omega) \tag{31}$$

となる。この式から Σ 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。Σ 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

$$\mathcal{S}\{\bar{c},c\} = \underbrace{\sum_{ij} \bar{\boldsymbol{c}}_i (-G^{-1})_{ij} \boldsymbol{c}_j}_{\mathcal{S}_{\rm med}} + \sum_i (\mathcal{S}_{\rm int}\{\bar{c}_i, c_i\} - \bar{\boldsymbol{c}}_i \Sigma \boldsymbol{c}_i) \tag{32}$$

となる。この表式を式 (28) の分配関数に代入すると

$$Z = Z_{\rm med} \left\langle e^{-\sum_i (\mathcal{S}_{\rm int}\{\bar{c}_i, c_i\} - \bar{\boldsymbol{c}}_i \Sigma \boldsymbol{c}_i)} \right\rangle_{\rm med} \tag{33}$$

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

ここで近似をする。式 (33) の指数部分を展開すると、$\mathcal{S}_{\rm int}\{\bar{c}_i, c_i\}\mathcal{S}_{\rm int}\{\bar{c}_j, c_j\} \cdots$ 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を無視することに対応する。以上の近似は、平均 $\langle \cdots \rangle_{\rm med}$ 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

$$Z \approx Z_{\rm med} \prod_i \left\langle e^{-\sum_i (\mathcal{S}_{\rm int}\{\bar{c}_i, c_i\} - \bar{\boldsymbol{c}}_i \Sigma \boldsymbol{c}_i)} \right\rangle_i \equiv Z_{\rm med} \prod_i \frac{Z_{\rm imp}}{Z_i} \tag{34}$$

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

$$\mathcal{S}_{\rm imp}\{\bar{c}_i, c_i\} = \bar{\boldsymbol{c}}_i (-\mathcal{G}^{-1}) \boldsymbol{c}_i + \mathcal{S}_{\rm int}\{\bar{c}_i, c_i\} \tag{35}$$

で定義される。ここで $\mathcal{G}$ は

$$\mathcal{G}^{-1} = (G_{ii})^{-1} + \Sigma \tag{36}$$

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 (35) の $\mathcal{S}_{\rm imp}$ 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。

A.3 変分原理

ここまでは $\Sigma(i\omega)$ を任意の関数としてきた。式 (33) の分配関数を厳密に評価することができれば結果は Σ に依らないが、実際は式 (34) の近似のために結果は Σ に依存する。この近似の元での最適な Σ 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：

$$\beta\Omega[\Sigma] = \beta\Omega_{\rm med} - \sum_i \beta\Omega_i + \sum_i \beta\Omega_{\rm imp} \tag{37}$$

ここで、Ω が Σ 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 $Z_{\rm med}$ 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

$$\beta\Omega_{\rm med} = -{\rm Tr}\ln G^{-1} \tag{38}$$

$$\beta\Omega_i = -{\rm Tr}\ln G_{ii}^{-1} \tag{39}$$

のように解析的に求まる。一方、$\beta\Omega_{\rm imp} = -\ln Z_{\rm imp}$ 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、$\Omega_{\rm med}$ の微分は G の定義式 (31) を使うと、$\delta\Omega_{\rm med}/\delta\Sigma = {\rm Tr}G$ と計算できる。次に、Ω_i を微分する際には式 (36) を使って G_{ii} を Σ と $\mathcal{G}$ で置き換え、$\mathcal{G}$ が Σ に依存することに注意すると、$\delta\Omega_i/\delta\Sigma = {\rm Tr}G_{ii}(1 - \delta\mathcal{G}^{-1}/\delta\Sigma)$ と計算できる。最後に、$\Omega_{\rm imp}$ の微分は $\mathcal{G}^{-1}$ の微分に書き換えることにより、$\delta\Omega_{\rm imp}/\delta\Sigma = -{\rm Tr}G_{\rm imp}(\delta\mathcal{G}^{-1}/\delta\Sigma)$ と求まる。ここで、$G_{\rm imp}$ は有効不純物模型 $\mathcal{S}_{\rm imp}$ のグリーン関数 $G_{\rm imp} = \langle \bar{\mathbf{c}}_i \mathbf{c}_i \rangle_{\rm imp}$ である。以上をまとめると、Ω の変分は

$$0 = \frac{\delta\Omega}{\delta\Sigma} = {\rm Tr}(G_{ii} - G_{\rm imp})\frac{\delta\mathcal{G}^{-1}}{\delta\Sigma} \tag{40}$$

と計算され、これより動的平均場理論の自己無撞着条件

$$G_{ii} = G_{\rm imp} \tag{41}$$

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 Σ が有効不純物模型の自己エネルギー $\Sigma_{\rm imp}$ と一致することを確認しよう。まず $\Sigma_{\rm imp}$ は定義から $\Sigma_{\rm imp} = \mathcal{G}^{-1} - G_{\rm imp}^{-1}$ である。一方、$\mathcal{G}$ の定義式 (36) と自己無撞着条件 (41) を使うと

$$\Sigma = \mathcal{G}^{-1} - (G_{\rm imp})^{-1} = \Sigma_{\rm imp} \tag{42}$$

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] 大槻純也. 重い電子系の近藤効果と磁気秩序. http://www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~otsuki/otsuki-heavy.pdf, 2009.

[2] D. B. McWhan, A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman, and T. M. Rice: Phys. Rev. B **7** (1973) 1920.

[3] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Meschede, W. Franz, and H. Schäfer: Phys. Rev. Lett. **43** (1979) 1892.

[4] 佐藤憲昭，三宅和正: 磁性と超伝導の物理 (名古屋大学出版, 2013).

[5] 青木大，J. Flouquet: 固体物理 **47** (2012) 623.

[6] 木村憲彰: 固体物理 **47** (2012) 593.

[7] 大槻純也，楠瀬博明: 固体物理 **51** (2016) 223.

[8] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti: Rev. Mod. Phys. **78** (2006) 865.

[9] M. Imada and T. Miyake: J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 112001.

[10] *The LDA+DMFT approach to strongly correlated materials*, ed. E. Pavarini, E. Koch, D. Vollhardt, and A. Lichtenstein (Forschungszentrum Jülich, 2011).

[11] 池田浩章，鈴木通人: 固体物理 **47** (2012) 693.

[12] 今田正俊，三宅隆: 固体物理 **47** (2012) 113.

[13] M.-T. Suzuki and H. Harima: J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 024705.

[14] T. Takimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 123710.

[15] J. C. Cooley, M. C. Aronson, Z. Fisk, and P. C. Canfield: Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 1629.

[16] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski: *Methods of qunatum field theory in statistical physics* (Dover, 1963).

[17] 守谷亨: **磁性物理学** (朝倉書店, 2006).

[18] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg: Rev. Mod. Phys. **68** (1996) 13.

[19] 斯波弘行: **電子相関の物理** (岩波書店, 2001).

[20] 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.

[21] K. G. Wilson: Rev. Mod. Phys. **47** (1975) 773.

[22] R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke: Rev. Mod. Phys. **80** (2008) 395.

[23] A. N. Rubtsov, V. V. Savkin, and A. I. Lichtenstein: Phys. Rev. B **72** (2005) 035122.

[24] 楠瀬博明，大槻純也: 物性研究 **94** (2010) 404.

[25] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner: Rev. Mod. Phys. **83** (2011) 349.

[26] M. Jarrell: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 168.

[27] D. Vollhardt, K. Held, G. Keller, R. Bulla, T. Pruschke, I. A. Nekrasov, and V. I. Anisimov: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 136.

[28] T. Pruschke: Prog. Theor. Phys. Suppl. **160** (2005) 274.

[29] S. Hoshino, J. Otsuki, and Y. Kuramoto: Phys. Rev. B **81** (2010) 113108.

[30] J. Otsuki, H. Kusunose, and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 034719.

[31] S. Doniach: Physica B+C **91** (1977) 231 .

[32] J. Otsuki, H. Kusunose, and Y. Kuramoto: Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 017202.

[33] D. L. Cox: Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 1240.

[34] M. Koga, G. Zaránd, and D. L. Cox: Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 2421.

[35] S. Hoshino, J. Otsuki, and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 074720.

[36] A. Kiss and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 034602.

[37] O. Sakai, J. Kikuchi, R. Shiina, H. Sato, H. Sugawara, M. Takigawa, and H. Shiba: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 024710.

[38] S. Hoshino, J. Otsuki, and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 033703.

[39] S. Hoshino, J. Otsuki, and Y. Kuramoto: Phys. Rev. Lett. **107** (2011) 247202.

[40] S. Hoshino, J. Otsuki, and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 044707.

[41] S. Hoshino and Y. Kuramoto: Phys. Rev. Lett. **112** (2014) 167204.

[42] K. Miyake, S. Schmitt-Rink, and C. M. Varma: Phys. Rev. B **34** (1986) 6554.

[43] B. Roulet, J. Gavoret, and P. Nozières: Phys. Rev. **178** (1969) 1072.

[44] N. E. Bickers and S. R. White: Phys. Rev. B **43** (1991) 8044.

[45] N. E. Bickers: in *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons*, ed. D. Sénéchal, A.-M. Tremblay, and C. Bourbonnais (Springer, New York, 2004), pp. 237–296.

[46] W. Metzner, M. Salmhofer, C. Honerkamp, V. Meden, and K. Schönhammer: Rev. Mod. Phys. **84** (2012) 299.

[47] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler: Rev. Mod. Phys. **77** (2005) 1027.

[48] H. Kusunose: J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 054713.

[49] A. Toschi, A. A. Katanin, and K. Held: Phys. Rev. B **75** (2007) 045118.

[50] A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein: Phys. Rev. B **77** (2008) 033101.

[51] C. Taranto, S. Andergassen, J. Bauer, K. Held, A. Katanin, W. Metzner, G. Rohringer, and A. Toschi: Phys. Rev. Lett. **112** (2014) 196402.

[52] M. Kitatani, N. Tsuji, and H. Aoki: Phys. Rev. B **92** (2015) 085104.

[53] M. Potthoff: Eur. Phys. J. B **32** (2003) 429.

[54] M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken: Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 206402.

[55] Y. Kuramoto and K. Miyake: J. Phys. Soc. Jpn. **59** (1990) 2831.

[56] K. Miyake and Y. Kuramoto: Physica B **171** (1991) 20.

[57] A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, and A. Georges: Phys. Rev. B **79** (2009) 045133.

[58] J. Otsuki, H. Hafermann, and A. I. Lichtenstein: Phys. Rev. B **90** (2014) 235132.

[59] J. Otsuki: Phys. Rev. Lett. **115** (2015) 036404.

[60] A. M. Läuchli and P. Werner: Phys. Rev. B **80** (2009) 235117.

[61] H. Shinaoka, M. Dolfi, M. Troyer, and P. Werner: J. Stat. Mech. **2014** (2014) P06012.

[62] H. Shinaoka, Y. Nomura, S. Biermann, M. Troyer, and P. Werner: Phys. Rev. B **92** (2015) 195126.

[63] K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka, H. Kontani, and H. Aoki: Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 087004.

[64] S. Onari and H. Kontani: Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 137001.

[65] H. Ikeda, M.-T. Suzuki, R. Arita, T. Takimoto, T. Shibauchi, and Y. Matsuda: Nat. Phys. **8** (2012) 528.

[66] H. Kusunose: J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 094707.

[67] G. Li, N. Wentzell, P. Pudleiner, P. Thunström, and K. Held: Phys. Rev. B **93** (2016) 165103.

[68] S. Iskakov, A. E. Antipov, and E. Gull: Phys. Rev. B **94** (2016) 035102.

[69] H. Hafermann, E. G. C. P. van Loon, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, and O. Parcollet: Phys. Rev. B **90** (2014) 235105.

[70] A. Rubtsov, M. Katsnelson, and A. Lichtenstein: Ann. Phys. **327** (2012) 1320 .

[71] E. G. C. P. van Loon, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, O. Parcollet, and H. Hafermann: Phys. Rev. B **90** (2014) 235135.

[72] T. Ayral, S. Biermann, and P. Werner: Phys. Rev. B **87** (2013) 125149.

[73] K. Haule: Phys. Rev. Lett. **115** (2015) 196403.

[74] D. Vollhardt: AIP Conf. Proc. **1297** (2010) 339.