

(千葉大学審査学位論文)

典型性に基づく変分クラスター近似法の開発と
ハバード模型の熱力学的性質への応用

2020年2月

千葉大学大学院 融合理工学府
先進理化学専攻 物理学コース
強相関電子系理論研究室

西田 尚央

目次

第 1 章	序論	1
第 2 章	有限温度における数値計算手法	3
2.1	遍歴性と局在性	3
2.2	厳密対角化	4
2.2.1	完全対角化法 (Full-Diag)	4
2.2.2	Lanczos 法	6
2.2.3	Finite-temperature Lanczos method (FTLM)	7
2.2.4	Low-temperature Lanczos method (LTLM)	8
2.2.5	Lanczos 法を用いた時間発展	9
2.3	熱的純粋量子状態 (Thermal Pure Quantum state : TPQ)	10
2.3.1	はじめに	11
2.3.2	microcanonical TPQ state (mTPQ)	12
2.3.3	canonical TPQ state (cTPQ)	14
2.3.4	grand canonical TPQ state (gTPQ)	18
2.3.5	Chebyshev の不等式と分散	18
2.3.6	虚時間発展の数値計算手法	20
2.4	TPQ と動的相関関数	21
2.4.1	Lanczos 基底を用いた遅延動的相関関数	21
第 3 章	自己エネルギー汎関数理論と数値計算	23
3.1	自己エネルギー汎関数理論 (Self-Energy-Functional Theory: SFT)	23
3.1.1	Green 関数と自己エネルギー	23
3.1.2	Luttinger-Ward 汎関数	24
3.1.3	変分原理	24
3.1.4	参照系による近似	25
3.2	変分クラスター近似 (Variational Cluster Approximation: VCA)	27
3.2.1	グランドポテンシャル : V 行列の導入	27
3.2.2	有限温度における積分経路の工夫	30
3.2.3	自発的対称性の破れ	31
3.2.4	一体演算子の期待値	32
3.2.5	エントロピーと比熱	32

3.3	クラスター摂動理論 (Cluster Perturbation Theory: CPT)	33
第 4 章	計算結果	37
4.1	Hubbard 模型と参照系	37
4.2	1 次元鎖に関する解析	38
4.2.1	TPQ 計算の収束検証 (比熱と実軸上 Green 関数)	38
4.2.2	一粒子励起スペクトルと状態密度	40
4.3	2 次元正方格子に関する解析	43
4.3.1	TPQ 計算の収束検証 (グラウンドポテンシャルと積分経路上 Green 関数)	43
4.3.2	グラウンドポテンシャルと物理量	43
4.3.3	一粒子励起スペクトルと状態密度	46
4.4	追加データ	48
第 5 章	総括	63
付録 A	計算手法の補足	64
A.1	Green 関数の温度全微分 (1 階, 2 階)	64
A.1.1	Green 関数の微分形式 (完全基底)	64
A.1.2	Green 関数の微分形式 (Lanczos 基底)	64
A.2	オンサイト変分	66
A.3	Filter Operator method (FTK ω)	68
参考文献		70

第 1 章

序論

[背景]

従来の量子統計力学では、有限温度の物理量はアンサンブル平均をする必要があり、それを厳密に実行するためにハミルトニアン H の全固有値・全固有ベクトルを求める完全対角化または部分対角化を実行する必要がある。この場合、ハミルトニアン H の行列サイズはシステムサイズが大きくなるにつれて急速に大きくなるため、計算コストの面からシステムサイズが厳しく制限されてしまう。これに対して、近年の量子統計力学の発展により、システムサイズの大きな量子系では、単一の波動関数の虚時間発展によって得られた典型的な純粋状態 (熱的純粋量子状態 = TPQ state) によってアンサンブル平均が置き換え可能であることが示されている [1–4]。この理論は統計力学において「典型性 (typicality)」に基づいて定式化された画期的な理論である。典型性とは、「量子多体系の量子純粋状態を任意に 1 つ選んだ時、その物理量の期待値は (圧倒的な確率で) 熱平衡状態における物理量の期待値と非常に近い値を示すこと。」である。この原理から、厳密対角化法で用いられてきた Lanczos 法のアルゴリズムを採用して熱的純粋量子状態を構成することで、従来は解析が困難だったシステムサイズまで厳密な有限温度計算が実行できるようになった。ただ依然としてシステムサイズの制限は残ったままである。これに対して、自己エネルギー汎関数理論 [5, 6] に基づく量子クラスター近似は、熱力学的極限を扱える有効な手法である。例えば、動的平均場理論 (DMFT) [5, 7, 8]、動的クラスター理論 (DCA) [9]、クラスター摂動論 (CPT) [10, 11]、変分クラスター法 (VCA) [12–15] がある。その内、VCA は少数クラスターの Green 関数から熱力学的極限における強相関電子系の熱力学関数と一粒子励起スペクトルが求まり、自発的な対称性の破れが存在する場合も扱える手法である。先行研究に Block Lanczos 法を少数サイトソルバーに用いた有限温度の VCA 計算があるが [16]、Boltzmann 重みを持つすべての固有状態に対する一粒子 Green 関数の計算が必要であるため、計算コストは高温で急速に上昇してしまう。

[目的]

そこで本研究では、TPQ を少数サイトソルバーに用いて有限温度 VCA の新たな数値計算手法の開発を行う。さらに、遷移金属酸化物の電子状態を記述する理論模型として提案された Hubbard 模型の有限温度解析に適用する。この模型は、最近接の飛び移りとオンサイトクーロン相互作用のみを含む単純な模型であるが、その理論解析は難しく 1 次元などの限られた場合にしか厳密解が分かっていない。強磁性・反強磁性・Mott 絶縁体・高温超伝導など現在の固体物理で注目されている多くの現象を記述する最も基本的な模型として盛んに研究が行われている。有限温度計算は理論値と実験値との直接的な比較ができることから、量子多体系における非自明な秩序相や相構造を理解する上で重要な研究として位置づけられる。

[方法]

TPQ に Lanczos 法を適用して少数クラスターの Green 関数を求め、有限温度 VCA 計算を行う。TPQ+Lanczos 法による動的相関関数の計算は、TPQ state を Lanczos 展開させたときの擬固有値、擬固有ベクトルを用いて構成しており、調節パラメータが展開数のみとなる。そのため、TPQ state に射影演算子を作用させて動的相関関数を構成する FTK ω 法 [17] と比べてパラメータの検証コストが少ないため、効率よく計算が可能である。従って、得られた Green 関数から有限温度 VCA 計算を行い、Hubbard 模型の熱力学極限における物理量と対称性の破れを議論する。

[構成]

最後に本論文の構成について述べる。第 2,3 章では本研究で用いた有限温度の数値計算手法について解説する。まず第 2 章では、ハミルトニアン固有値と固有ベクトルを求める厳密対角化法と、典型性に基づく TPQ state について説明する。第 3 章では、自己エネルギー汎関数理論および変分原理について概説した後、VCA と CPT について解説する。第 4 章では、1 次元 Hubbard 模型と 2 次元正方格子 Hubbard 模型に関する計算結果を示す。そして第 5 章で本論文の総括を行う。

第 2 章

有限温度における数値計算手法

この章では大きく分けて 2 種類の数値計算手法について解説する。まず厳密対角化法について、ハミルトニアン固有値と固有ベクトルを求める際の有効なアルゴリズムである Lanczos 法について解説した後、この手法を用いた静的および動的相関関数の数値計算手法について紹介する。次に TPQ state について、従来の量子統計力学の定式化との違いや典型性について概説した後、代表的な統計集団（ミクロカノニカル分布、カノニカル分布、グランドカノニカル分布）それぞれでの定式化を行う。そして、TPQ state を Lanczos 展開して導出した動的相関関数の表式を示す。

2.1 遍歴性と局在性

物性論のうち電子相関が強い場合、格子状に並んだ原子に束縛された電子の振る舞いを評価する強束縛 (tight-binding) 近似という手法がある。このとき、多体 Fermion 系のハミルトニアンは一体パラメータ (t) で記述される項と相互作用 (U) の項から次のように与えられる。

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \hat{H}_U \quad (2.1)$$

$$\hat{H}_t = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta \quad (2.2)$$

$$\hat{H}_U = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta^\dagger \hat{c}_\gamma \hat{c}_\delta \quad (2.3)$$

ここで、 \hat{c}_α^\dagger (\hat{c}_α) は Fermion の生成 (消滅) 演算子である。この模型の理論解析は難しく、1 次元などの限られた場合にしか厳密解が分かっていないため、数値的な扱いが必要である。具体的には、有限の格子サイズ L_s に up spin と down spin の電子 n_σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) 個を配置した系におけるハミルトニアン行列の固有値と固有ベクトルを数値的に求めればよい。しかし、 L_s が大きくなると系の次元は急速に増大するため計算が困難になる (メモリ増大)。固定粒子系 (n_σ を指定した系) の Hilbert 空間の次元 N_H と全粒子系 ($n_\sigma = 0 \sim L_s$ 全てを含む系) の Fock 空間の次元 N_F はそれぞれ以下のように与えられる。

$$\text{固定粒子系} \quad N_H = (L_s C_{n_\uparrow})(L_s C_{n_\downarrow}) \quad (2.4)$$

$$\text{全粒子系} \quad N_F = \sum_{n=0}^{2L_s} (2L_s C_n) = 4^{L_s} \quad (2.5)$$

そこで、ハミルトニアン行列から効率よく系の固有状態や純粋状態を求める手法を紹介する。

2.2 厳密対角化

厳密対角化法は、数値的に行列表示したハミルトニアンを対角化して得られた固有値と固有ベクトルから系の状態を求める手法である。一切の近似を用いないため、有限の格子サイズ L_s における厳密な数値計算手法として幅広く用いられている。ハミルトニアン行列は大規模疎行列になることが多いため、これまでに開発された数値線形代数 (固有値問題の数値解法など) を積極的に活用できる*1。絶対零度の場合は最低エネルギーのみ求めればよいので、効率的に最低エネルギーを求める手法を採用するのが望ましい。例えば、Lanczos 法は Krylov 部分空間 $\{|\psi_0\rangle, \hat{H}|\psi_0\rangle, \dots, \hat{H}^{n-1}|\psi_0\rangle\}$ の部分空間ハミルトニアンを用いて最大固有値と最小固有値を計算する手法である。その発展として Block Lanczos 法では、部分空間ハミルトニアンを p 個用意することで、エネルギーの低い方から p 個の近似固有ベクトルを求めることができる。低温領域であれば少数の励起状態のみで記述できるので、この手法が有効である。さらに高温の厳密解 (有限サイズ) となると、ハミルトニアン行列を対角化して全ての固有値と固有ベクトルを求める必要がある。

2.2.1 完全対角化法 (Full-Diag)

ハミルトニアン行列 $\mathcal{H}_{ij} = \langle \psi_i | \hat{H} | \psi_j \rangle$ を対角化し、固有値 E_i , 固有ベクトル $|\psi_i\rangle$ から各固有状態の期待値 $\langle \hat{O}_i \rangle = \langle \psi_i | \hat{O} | \psi_i \rangle$ を求め、有限温度の各種物理量の期待値を計算する。

固定粒子系 (カノニカル分布)

N 粒子系の固有値と固有ベクトルを $E_\nu^{(N)}$, $|\nu^{(N)}\rangle$ として、各固有状態の期待値を $\langle \hat{O}_\nu^{(N)} \rangle = \langle \nu^{(N)} | \hat{O} | \nu^{(N)} \rangle$ とする。

- 分配関数

$$Z(\beta) = \text{tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right) = \sum_{\nu}^{N_H} e^{-\beta E_\nu^{(N)}} \quad (2.6)$$

- 自由エネルギー

$$F(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{\nu}^{N_H} e^{-\beta E_\nu^{(N)}} = E_0^{(N)} - \frac{1}{\beta} \ln \sum_{\nu}^{N_H} e^{-\beta(E_\nu^{(N)} - E_0^{(N)})} \quad (2.7)$$

- 静的物理量

$$\langle \hat{O} \rangle_{\beta}^{\text{ens}(c)} = \text{tr} \left(\frac{e^{-\beta \hat{H}} \hat{O}}{Z(\beta)} \right) = \frac{\sum_{\nu=1}^{N_H} \langle \hat{O}_\nu^{(N)} \rangle e^{-\beta E_\nu^{(N)}}}{\sum_{\nu=1}^{N_H} e^{-\beta E_\nu^{(N)}}} = \frac{\sum_{\nu=1}^{N_H} \langle \hat{O}_\nu^{(N)} \rangle e^{-\beta(E_\nu^{(N)} - E_0^{(N)})}}{\sum_{\nu=1}^{N_H} e^{-\beta(E_\nu^{(N)} - E_0^{(N)})}} \quad (2.8)$$

*1 関連する手法の一部：べき乗法, Lanczos 法, 共役勾配法, 逆反復法, QR 法, Sakurai-Sugiura 法, ...

- 一粒子 Green 関数

$$G_{ij}(z) = G_{ij}^e(z) + G_{ij}^h(z) \quad (2.9)$$

$$= \sum_{\nu} \frac{e^{-\beta E_{\nu}^{(N)}}}{Z(\beta)} \left[\left\langle \nu^{(N)} \left| \hat{c}_i \frac{1}{z + E_{\nu}^{(N)} - \hat{H}} \hat{c}_j^{\dagger} \right| \nu^{(N)} \right\rangle + \left\langle \nu^{(N)} \left| \hat{c}_i^{\dagger} \frac{1}{z - E_{\nu}^{(N)} + \hat{H}} \hat{c}_j \right| \nu^{(N)} \right\rangle \right] \quad (2.10)$$

$$= \sum_{\nu, \mu} \frac{e^{-\beta E_{\nu}^{(N)}}}{Z(\beta)} \left[\frac{\langle \mu^{(N+1)} | \hat{c}_i^{\dagger} | \nu^{(N)} \rangle^* \langle \mu^{(N+1)} | \hat{c}_j^{\dagger} | \nu^{(N)} \rangle}{z + E_{\nu}^{(N)} - E_{\mu}^{(N+1)}} + \frac{\langle \mu^{(N-1)} | \hat{c}_i | \nu^{(N)} \rangle^* \langle \mu^{(N-1)} | \hat{c}_j | \nu^{(N)} \rangle}{z - E_{\nu}^{(N)} + E_{\mu}^{(N-1)}} \right] \quad (2.11)$$

$$= \frac{\sum_{\nu, \mu} e^{-\beta(E_{\nu}^{(N)} - E_0^{(N)})} [\dots]}{\sum_{\nu} e^{-\beta(E_{\nu}^{(N)} - E_0^{(N)})}} \quad (2.12)$$

最低エネルギー $E_0^{(N)} = \min\{E_{\nu}^{(N)}\}$ を含む $e^{\beta E_0^{(N)}}$ を導入したのは、数値計算をする際に β が大きい低温で値が発散しないようにするためである。また、計算対象が低温領域であれば、 $E_0 \leq E_{M_H} \leq E_{N_H}$ を満たす $M_H (\leq N_H)$ を用いて、固有状態の和を $\sum_{\nu=1}^{N_H} \rightarrow \sum_{\nu=1}^{M_H}$ のように低エネルギー状態の和で書き直すことができる (高エネルギー状態はボルツマン因子 $e^{-\beta E_{\nu}^{(N)}}$ の寄与が小さくなるため)。

全粒子系 (グランドカノニカル分布)

化学ポテンシャル μ と粒子演算子 $\hat{N} = \sum_{i, \sigma} \hat{n}_{i, \sigma}$ を導入して空間次元を $N_H^{(N)} \rightarrow N_F$ へ拡張する。ハミルトニアン $\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N}$ の固有値と固有ベクトルを E_{ν} , $|\nu\rangle$ として、最低エネルギーを $E_0 = \min\{E_{\nu}\}$ 、各固有状態の期待値を $\langle \hat{O}_{\nu} \rangle = \langle \nu | \hat{O} | \nu \rangle$ とする。

- 大分配関数

$$\Xi(\beta) = \text{tr} \left(e^{-\beta \hat{K}} \right) = \sum_{\nu}^{N_F} e^{-\beta E_{\nu}} \quad (2.13)$$

- グランドポテンシャル

$$\Omega(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{\nu}^{N_F} e^{-\beta E_{\nu}} = E_0 - \frac{1}{\beta} \ln \sum_{\nu}^{N_F} e^{-\beta(E_{\nu} - E_0)} \quad (2.14)$$

- 静的物理量

$$\langle \hat{O} \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens(g)}} = \text{tr} \left(\frac{e^{-\beta \hat{K}} \hat{O}}{\Xi(\beta)} \right) = \frac{\sum_{\nu=1}^{N_F} \langle \hat{O}_{\nu} \rangle e^{-\beta E_{\nu}}}{\sum_{\nu=1}^{N_F} e^{-\beta E_{\nu}}} = \frac{\sum_{\nu=1}^{N_F} \langle \hat{O}_{\nu} \rangle e^{-\beta(E_{\nu} - E_0)}}{\sum_{\nu=1}^{N_F} e^{-\beta(E_{\nu} - E_0)}} \quad (2.15)$$

ハミルトニアンに固定粒子間の成分がない場合、上式は固定粒子系の固有値と固有ベクトルで書き直せる*2。

$$\Xi(\beta) = \sum_{N=0}^{2L_s} e^{\beta\mu N} Z(\beta, N) = \sum_{N=0}^{2L_s} \sum_{\nu=1}^{N_H^{(N)}} e^{-\beta(E_\nu^{(N)} - \mu N)} \quad (2.16)$$

$$\Omega(\beta) = E_0 - \frac{1}{\beta} \ln \sum_{N=0}^{2L_s} \sum_{\nu=1}^{N_H^{(N)}} e^{-\beta(E_\nu^{(N)} - \mu N - E_0)} \quad (2.17)$$

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens(g)}} = \frac{\sum_{N=0}^{2L_s} e^{\beta\mu N} Z(\beta, N)}{\Xi(\beta)} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\beta, N}^{\text{ens(c)}} = \frac{\sum_{N=0}^{2L_s} \sum_{\nu=1}^{N_H^{(N)}} \langle \hat{\mathcal{O}}_\nu^{(N)} \rangle e^{-\beta(E_\nu^{(N)} - \mu N - E_0)}}{\sum_{N=0}^{2L_s} \sum_{\nu=1}^{N_H^{(N)}} e^{-\beta(E_\nu^{(N)} - \mu N - E_0)}} \quad (2.18)$$

2.2.2 Lanczos 法

Lanczos 法はエルミートな大規模疎行列の固有値問題に対して有用な計算手法である。特に行列の最大固有値と最小固有値が効率的に求まる。そのときの固有ベクトルも求まるが数値計算では丸め誤差により精度が保証されないため、逆反復法などから再度固有ベクトルを計算するのが一般的である。この手法の基本方針は、対角化したい行列 $\hat{\mathcal{H}}$ を任意の単位ベクトル $|\psi_0\rangle$ に演算していき、 n 次元の Krylov 部分空間

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_n(\hat{\mathcal{H}}, |\psi_0\rangle) &= \{ |\psi_0\rangle, \hat{\mathcal{H}}|\psi_0\rangle, \dots, \hat{\mathcal{H}}^{n-1}|\psi_0\rangle \} \\ &= \{ |\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle, \dots, |\psi_{n-1}\rangle \} \end{aligned}$$

を構成する。その過程で得られる α_k, β_k から以下のような $n \times n$ の三重対角行列 $\hat{\mathcal{H}}_{\text{td}}$ を用意し、完全対角化や QR 法からその行列の固有値と固有ベクトルを求める。

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{td}} = U^\dagger \hat{\mathcal{H}} U = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ O & & & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

ここで、Lanczos 基底の各 $|\psi_k\rangle$ は規格直交系であるため、行列 $U = (|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle, \dots, |\psi_{n-1}\rangle)$ はユニタリー行列である。この手法のアルゴリズムは以下で与えられる。

for $k = 1$ to $n - 1$ **do**

$$(|\psi_{-1}\rangle = 0)$$

$$|\psi'_k\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\psi_{k-1}\rangle - \beta_{k-1}|\psi_{k-2}\rangle - \alpha_{k-1}|\psi_{k-1}\rangle$$

$$\alpha_k = \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}} | \psi_k \rangle$$

$$\beta_k = \langle \psi_{k-1} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_k \rangle = \sqrt{|\psi'_k\rangle}$$

$$|\psi_k\rangle = |\psi'_k\rangle / \sqrt{|\psi'_k\rangle}$$

end for

*2 固定粒子系の値の一部に添え字 N を追加した。

2.2.3 Finite-temperature Lanczos method (FTLM)

この節では、Lanczos 法を用いた有限温度の静的・動的相関関数の計算手法として FTLM [18, 19] を紹介する。

はじめに、以下の行列要素を Lanczos 基底で展開する。

$$W_{kl} = \langle n | \hat{\mathcal{H}}^k \hat{A} \hat{\mathcal{H}}^l \hat{B} | n \rangle \quad (2.20)$$

ここで、 $|n\rangle$ は任意の正規化ベクトル、 \hat{A}, \hat{B} は一般的な演算子である。展開数を $M = \max(k, l)$ として、 $|n\rangle$ と $\hat{A}|n\rangle$ に対して Lanczos 展開を実行すると、この式は正確に計算できる。ただし、Lanczos 展開の初期ベクトルは規格化されたベクトルを用いるので $\hat{B}|n\rangle$ に関しては

$$|n'\rangle = \frac{\hat{B}|n\rangle}{\sqrt{\langle n | \hat{B}^\dagger \hat{B} | n \rangle}} \quad (2.21)$$

と規格化したベクトルで計算する。この手続きで得た Lanczos 基底の (擬) 固有値と (擬) 固有ベクトルをそれぞれ $\tilde{\varepsilon}_i, |\tilde{\psi}_i\rangle$ と $\tilde{\varepsilon}'_j, |\tilde{\psi}'_j\rangle$ とする。ここで射影演算子

$$P_M = \sum_{i=0}^M |\tilde{\psi}_i\rangle\langle\tilde{\psi}_i|, \quad P'_M = \sum_{j=0}^M |\tilde{\psi}'_j\rangle\langle\tilde{\psi}'_j| \quad (2.22)$$

を式 (2.20) に挿入すると

$$W_{kl} = \sum_{i=0}^M \sum_{j=0}^M \langle n | \tilde{\psi}_i \rangle \langle \tilde{\psi}_i | \hat{A} | \tilde{\psi}'_j \rangle \langle \tilde{\psi}'_j | \hat{B} | n \rangle (\tilde{\varepsilon}_i)^k (\tilde{\varepsilon}'_j)^l \quad (2.23)$$

となる。上式の両辺は $M > (l, k)$ の場合のみ等しいことに注意する。

では、有限温度の静的物理量 (2.8) を Taylor 展開すると

$$\langle \hat{A} \rangle_\beta = Z^{-1} \sum_{\nu=1}^N \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!} \langle \nu | \hat{\mathcal{H}}^k \hat{A} | \nu \rangle \quad (2.24)$$

$$Z(\beta) = \sum_{\nu=1}^N \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!} \langle \nu | \hat{\mathcal{H}}^k | \nu \rangle \quad (2.25)$$

とかける。ここで展開係数 $\langle n | \hat{\mathcal{H}}^k \hat{A} | n \rangle$ は式 (2.20) の $l = 0, \hat{B} = 1$ の場合であり、展開数が $M \geq k$ を満たす Lanczos 基底を用いると式 (2.23) より

$$\langle \hat{A} \rangle_\beta = Z^{-1} \sum_{\nu=1}^N \sum_{i=0}^M \exp(-\beta \tilde{\varepsilon}_{\nu i}) \langle \nu | \tilde{\psi}_{\nu i} \rangle \langle \tilde{\psi}_{\nu i} | \hat{A} | \nu \rangle \quad (2.26)$$

$$Z(\beta) = \sum_{\nu=1}^N \sum_{i=0}^M \exp(-\beta \tilde{\varepsilon}_{\nu i}) \langle \nu | \tilde{\psi}_{\nu i} \rangle \langle \tilde{\psi}_{\nu i} | \nu \rangle \quad (2.27)$$

とかける。ここで $\tilde{\varepsilon}_{\nu i}, \tilde{\psi}_{\nu i}$ は各固有状態 $|\nu\rangle$ を Lanczos 展開した時の擬固有値と擬固有ベクトルである。この表式は、高温では M 次の展開で十分収束し、 $T \rightarrow 0$ では基底状態 $|\psi_0\rangle$ に置き換わるので正確な値を与え

る。しかし、依然として N 個の完全正規直交基底 $|\nu\rangle$ を求める必要があるため、実際に計算するのは困難である。

そこで、 $|\nu\rangle$ の代わりにランダムサンプリングした状態 (ランダムベクトル)

$$|r\rangle = \sum_{\nu=0}^N \eta_{r\nu} |\nu\rangle \quad (2.28)$$

に置き換える近似をする。ここで $\eta_{r\nu}$ は 2 乗平均が $|\eta_{r\nu}|^2 = 1/N$ となるような乱数であり、 $|r\rangle$ は規格化されたベクトルとする。この近似は統計誤差を含むが、高温領域では多数の固有状態で構成されるため、統計誤差は小さくなる。つまり、 $|r\rangle$ と $|\tilde{\psi}_{\nu r}\rangle$ が全 Hilbert 空間を埋め尽くせば、厳密な値が得られるということである。よって、サンプル数を R とすると式 (2.26),(2.27) は

$$\langle \hat{A} \rangle_{\beta} = \frac{N}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{i=0}^M \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_{ri}) \langle r | \tilde{\psi}_{ri} \rangle \langle \tilde{\psi}_{ri} | \hat{A} | r \rangle \quad (2.29)$$

$$Z(\beta) = \frac{N}{R} \sum_{r=1}^R \sum_{i=0}^M \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_{ri}) |\langle r | \tilde{\psi}_{ri} \rangle|^2 \quad (2.30)$$

となる。これが FTLM の表式である。

同様に、動的相関関数 $C(\omega)$ についてもランダムベクトルで置き換えた表式を示す。一般的な $C_{AB}(\omega)$ は以下のように与えられる (ここでは簡単のため $\hat{B} = \hat{A}$ とする)。

$$C(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{+\infty} dt e^{i\omega t} C(t) \quad (2.31)$$

$$C(t) = \langle \hat{A}^{\dagger}(t) \hat{A}(0) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\nu} \langle \nu | e^{(-\beta + it)\hat{H}} \hat{A}^{\dagger} e^{-i\hat{H}t} \hat{A} | \nu \rangle \quad (2.32)$$

ここで式 (2.32) の右辺を Lanczos 基底とランダムベクトルの和に書き直すと、

$$C(t) = \frac{N}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{i,j=0}^M \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_{ri}) \exp[it(\tilde{\epsilon}_{ri} - \tilde{\epsilon}'_{rj})] \langle r | \tilde{\psi}_{ri} \rangle \langle \tilde{\psi}_{ri} | \hat{A}^{\dagger} | \tilde{\psi}'_{rj} \rangle \langle \tilde{\psi}'_{rj} | \hat{A} | r \rangle \quad (2.33)$$

となる。さらに式 (2.31) に代入すると

$$C(\omega) = \frac{N}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{i,j=0}^M \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_{ri}) \langle r | \tilde{\psi}_{ri} \rangle \langle \tilde{\psi}_{ri} | \hat{A}^{\dagger} | \tilde{\psi}'_{rj} \rangle \langle \tilde{\psi}'_{rj} | \hat{A} | r \rangle \delta(\omega - \tilde{\epsilon}'_{rj} + \tilde{\epsilon}_{ri}) \quad (2.34)$$

となり、FTLM の表式が得られる。

2.2.4 Low-temperature Lanczos method (LTLM)

前節で紹介した FTLM は $T \rightarrow 0$ に近いほど統計誤差が大きくなる問題があった。この問題を解決したのが本節で解説する LTLM である [20]。ポイントは式 (2.8) で与えられる期待値のトレースの性質から $e^{-\beta\hat{H}}$ を分割し、

$$\langle \hat{A} \rangle_{\beta} = Z^{-1} \sum_{\nu=1}^N \langle \nu | e^{-\beta\hat{H}/2} \hat{A} e^{-\beta\hat{H}/2} | \nu \rangle \quad (2.35)$$

と書き直す点である。この操作により式 (2.29) は

$$\langle \hat{A} \rangle_\beta = \frac{N}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{i,j=0}^M \exp[-\beta(\tilde{\varepsilon}_{ri} + \tilde{\varepsilon}_{rj})/2] \langle r|\tilde{\psi}_{ri}\rangle \langle \tilde{\psi}_{ri}|\hat{A}|\tilde{\psi}_{rj}\rangle \langle \tilde{\psi}_{rj}|r\rangle \quad (2.36)$$

となる。また、両端はランダムベクトルの虚時間発展とみなせるので、 $T = 0$ の極限で Lanczos 基底は基底状態に収束する。 $|\tilde{\psi}_{r0}\rangle \sim |\psi_0\rangle$. つまり、

$$\langle \hat{A} \rangle_\beta = \sum_{r=1}^R \langle r|\psi_0\rangle \langle \psi_0|\hat{A}|\psi_0\rangle \langle \psi_0|r\rangle / \sum_{r=1}^R \langle r|\psi_0\rangle \langle \psi_0|r\rangle = \langle \psi_0|\hat{A}|\psi_0\rangle \quad (2.37)$$

動的相関関数も同様に

$$C(\omega) = \frac{N}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{i,j,l=0}^M \exp[-\beta(\tilde{\varepsilon}_{ri} + \tilde{\varepsilon}_{rl})/2] \langle r|\tilde{\psi}_{ri}\rangle \langle \tilde{\psi}_{ri}|\hat{A}^\dagger|\tilde{\psi}'_{rj}\rangle \langle \tilde{\psi}'_{rj}|\hat{A}|\tilde{\psi}_{rl}\rangle \langle \tilde{\psi}_{rl}|r\rangle \delta\left[\omega - \tilde{\varepsilon}'_{rj} + \frac{1}{2}(\tilde{\varepsilon}_{ri} + \tilde{\varepsilon}_{rl})\right] \quad (2.38)$$

と求まる。上式も $T = 0$ の場合は 1 つのランダムベクトルだけで厳密解が得られる。注意すべきは、 $|r\rangle$ の Lanczos 基底 $|\tilde{\psi}_{rl}\rangle$ に演算子 \hat{A} を作用させた $\hat{A}|\tilde{\psi}_{ri}\rangle$ をさらに Lanczos 展開する必要があることである。

さらなる修正として、右辺のベクトルの和

$$|\widetilde{Ar}\rangle = \hat{A} \sum_{l=0}^M \exp(-\beta\tilde{\varepsilon}_{rl}/2) |\tilde{\psi}_{rl}\rangle \langle \tilde{\psi}_{rl}|r\rangle \quad (2.39)$$

と先に計算することで Lanczos 操作を削減できる。このベクトルを用いると $C(\omega)$ は

$$C(\omega) = \frac{N}{ZR} \sum_{r=1}^R \sum_{i,k=0}^M \exp(-\beta\tilde{\varepsilon}_{ri}/2) \langle r|\tilde{\psi}_{ri}\rangle \langle \tilde{\psi}_{ri}|\hat{A}^\dagger|\tilde{\psi}'_{rk}\rangle \langle \tilde{\psi}'_{rk}|\widetilde{Ar}\rangle \delta(\omega - \tilde{\varepsilon}'_{rk} + \tilde{\varepsilon}_{ri}) \quad (2.40)$$

となる。この表式を本論文では「改良 LTLM」と呼ぶことにする。この場合も $T = 0$ で基底状態の結果を 1 つのサンプル計算から得られる。一方 $T > 0$ の場合、アルゴリズムは FTLM と同じ時間効率を持つが、同じ精度に達するために必要なサンプル数は少なくなる（少なくとも低温領域の場合）。ただし、改良 LTLM の欠点として各 T の結果を個別に計算する必要がある。それは、FTLM と LTLM は温度に依存する係数が $e^{-\beta^*}$ だけのため、一度 Lanczos 展開するだけで全温度を評価できるのに対して、改良 LTLM は先に和をとる $|\widetilde{Ar}\rangle$ も温度依存するからである。

2.2.5 Lanczos 法を用いた時間発展

論文 [21, 22] によると Lanczos 基底を用いた実時間発展は

$$\begin{aligned} |\psi(t + \Delta t)\rangle &\simeq e^{-i\hat{H}(t)\Delta t/\hbar} |\psi(t)\rangle \\ &\simeq \sum_{l=1}^{N_L} e^{-i\tilde{\varepsilon}_l \Delta t/\hbar} |\tilde{\psi}_l\rangle \langle \tilde{\psi}_l|\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (2.41)$$

とかける。ここで N_L は Lanczos 展開数、 $\tilde{\varepsilon}_l, |\tilde{\psi}_l\rangle$ は擬固有値と擬固有ベクトルである^{*3}。

^{*3} 式 (2.19) の三重対角行列 \hat{H}_{td} を完全対角化や QR 法から求めた固有値と固有ベクトルを指す。

表 2.1 統計集団 (アンサンブル)

統計集団	ミクロカノニカル分布 小正準集団	カノニカル分布 正準集団	グランドカノニカル分布 大正準集団
系がやりとりする 物理量	なし (孤立系)	エネルギー (熱浴)	エネルギー (熱浴) と粒子数 (粒子浴)
パラメータ	(E, V, N)	(T, V, N)	(T, V, μ)
確率 P_ν	等確率 $1/W(E, V, N)$	Boltzmann 因子 $e^{-E_\nu(V, N)/k_B T} / Z(T, V, N)$	$e^{-\{E_\nu(V, N) - N\mu\}/k_B T} / \Xi(T, V, \mu)$
規格化因子	状態数 $W(E, V, N)$	分配関数 $Z = \sum_\nu e^{-E_\nu(V, N)/k_B T}$	大分配関数 $\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_\nu e^{-\{E_\nu(V, N) - N\mu\}/k_B T}$ $= \sum_{N=0}^{\infty} e^{N\mu/k_B T} Z(T, V, N)$
熱力学関数	エントロピー Boltzmann の式 $S(E, V, N) = k_B \ln W$	Helmholtz の自由エネルギー $F(T, V, N) = -k_B T \ln Z$	グランドポテンシャル $\Omega(T, V, \mu) = -k_B T \ln \Xi$

中西 秀「統計力学」講義ノートの図を参考 (本論文では $V = L_s, k_B = 1$ としている。)

2.3 熱的純粋量子状態 (Thermal Pure Quantum state : TPQ)

従来の量子統計力学では、熱平衡状態における有限温度の物理量を等重率の原理に基づいた量子混合状態*4によるアンサンブル平均から求めていた。これを厳密に実行するためにはハミルトニアン の全固有値・全固有ベクトルを求める完全対角化または部分対角化を実行する必要があるが、ハミルトニアン の行列サイズはシステムサイズが大きくなるにつれて急速に大きくなるため、数値計算では計算コストの面からシステムサイズが厳しく制限されてしまう。これに対して近年、有限温度計算の手法として典型性に基づく熱的純粋量子 (TPQ) 状態の活用が有効だとされている [1-3]。「典型性」を広義に解釈すると、「集団内の大多数が同じ性質を示すならば、無作為に選んだ少数個の平均を評価するだけで十分信頼できる結果を得られる」という考えである。身近な例で言えば街頭調査が理解しやすいだろう。これを量子統計力学に即して言い換えると、「量子多体系の量子純粋状態を任意に 1 つ選んだ時、その物理量の期待値は (圧倒的な確率で) 熱平衡状態における物理量の期待値と非常に近い値を示す。」となる。

文献 [1-3] では、量子統計力学の新しい定式化として従来の統計集団の導出の流れと同様に、ミクロカノニカル分布である孤立系から始めてカノニカル分布やグランドカノニカル分布を導出しており、孤立系の典型性を用いて議論を展開している。孤立系における典型性は、TPQ の定式化より以前にも議論されている。ここでは、微小区間のエネルギーシェル ($E - \delta E, E + \delta E$) 内にエネルギー固有値が含まれる固有状態をランダムに重ね合わせた量子純粋状態は、磁化や相関関数といった「力学的物理量」が非常に小さい誤差でミクロカノニカル平均と一致する期待値を与えることが示されている [23-26]。この事実から文献 [1-3] は、量子純粋状態をエネルギーシェルに制限せず一般化して再構築することで、「力学的物理量」だけでなく、温度やエントロピーといった「純熱力学変数」も含めて両方とも量子純粋状態から求めることに成功した。また、TPQ の期待値とアンサンブル平均の値との分散は、 $O(\exp[-L_s])$ 程度になることが Chebyshev の不等式から保証さ

*4 量子混合状態：密度演算子を用いて表せる状態。量子純粋状態を古典的な確率で混合した状態。
量子純粋状態：状態ベクトルを用いて表せる状態。原理的に可能な限りの情報が含まれた状態。

れている。よって、TPQ の期待値は、システムサイズ L_s を増やすと指数関数的に小さくなる誤差の範囲で正しいアンサンブル平均の値を与えようとする。

これにより有限温度でのアンサンブル平均を、TPQ の期待値に置き換えることが可能となった。数値計算では TPQ の期待値のサンプル平均を評価する。この手法の計算は行列の積で表せるので、従来の厳密対角化法で解析が困難だったシステムサイズまで (分散をもつ平均値として) 厳密な有限温度計算が実行できる [18–20, 27, 28]。また、静的物理量だけでなく、励起スペクトルなどの動的物理量も TPQ state から求めることができる [17, 29–35]。

本節では、3つの統計集団 (マイクロカノニカル分布、カノニカル分布、グランドカノニカル分布) に従う TPQ state の導出と物理量の表式を解説する*⁵。

2.3.1 はじめに

TPQ 理論 *⁶ の新しい点は以下の2つである。

- 量子統計力学において、従来は「Boltzmann の原理」と「等重率」が要請として与えられたが、本質は「等重率」ではなく「典型性」であることを要請して新たに定式化されたこと。*⁷
- 量子純粋状態からエントロピーや温度といった純熱力学量も計算できる定式化を行ったこと。さらに3つの統計集団の定式化も完成されていること。不等式で誤差評価が可能。

まず、マイクロカノニカル分布から話を始めたいと思う。歴史的な流れとしてマイクロカノニカル分布は

- (1) 等重率の原理と統計アンサンブル
- (2) Boltzmann の式: $S = k_B \ln W$

を用いて議論されているが、(1) は統計力学の本質ではないと主張されている*⁸。(1) を別のものと置き換えるとき妥当な考えとして「典型性」が挙げられる。これは「統計アンサンブル中のどのマイクロ状態も圧倒的な確率で同じ平衡状態の性質を示す。」ということであり、理想的には1個の量子純粋状態が構成できれば良いのである。さらに、純粋状態を上手く構成することで、状態ベクトルのノルムが統計集団の規格化因子 (マイクロカノニカル分布は状態数 W 、カノニカル分布は分配関数 Z) になるため、エントロピー S や温度 T といった「純熱力学変数」を求める基本関係式が得られる。よって、(2) も不要となり統計力学の基本原則を次のように書き換えることができる。

- (1) 統計集団の中のどのマイクロ状態も圧倒的な確率で同じ平衡状態の性質を示す
- (2) 1個の量子純粋状態のノルムから純熱力学変数を求める公式

これらに基づいて清水, 杉浦らは量子統計力学の新しい定式化を示した [1]。この定式化は、理論に限らず実用的な数値計算手法としても有益なものになっている。

以下、数値計算を想定して有限次元の系に対する TPQ state を解説する。

*⁵ 原則として以降の議論では、規格化された状態ベクトルを $|\psi\rangle$ 、規格化されていない状態ベクトルを $|\phi\rangle$ と表記する。

*⁶ TPQ 理論の理解への近道として、杉浦, 清水による解説 [38, 39] を参照してほしい。

*⁷ 典型性については杉田の解説 [40] がわかりやすい。

*⁸ 詳細は杉田氏 [40] や田崎氏 [41] を参照

2.3.2 microcanonical TPQ state (mTPQ)

まず、文献 [1] で定義されたミクロカノニカル分布の量子純粋状態 mTPQ state を示す。次節では、mTPQ state の重ね合わせで効率的に構成できるカノニカル分布の量子純粋状態 cTPQ state を示す。

無限温度の熱平衡状態として規格化されたランダムベクトルを定義する。

$$|\psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{N_F} c_i |i\rangle, \quad (2.42)$$

ここで $|i\rangle$ はハミルトニアン \hat{H} の任意の正規直交基底、 $N_H = \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \frac{L_s!}{n_\sigma!(L_s-n_\sigma)!}$ は Hilbert 空間の次元、 L_s, n_σ はシステム内の格子サイトの数とスピン σ の電子数、 c_i は $\sum_i |c_i|^2 = 1$ を満たす複素数の乱数^{*9} である。この状態は $\beta = 0$ の TPQ state [27] に対応しているため、無限温度での平均値は $\langle \hat{O} \rangle_{\beta=0}^{\text{ens}} = \overline{\langle \psi_0 | \hat{O} | \psi_0 \rangle}$ で与えられる。ここでサンプル数 n として、 $\overline{(\dots)} = \frac{1}{n} \sum_{r=1}^n (\dots)_r$ をランダムサンプリングの平均処理 (= サンプル平均) とする。

次に、カットオフ ($l \geq \lceil \hat{H}/L_s \rceil$ の最大固有値) を満たす任意の定数 l を導入して、 $|\psi_0\rangle$ に $(l - \hat{H}/L_s)$ を k 回作用させた (各ステップごとに規格化させた) 状態

$$|\psi_k\rangle = \frac{(l - \hat{H}/L_s) |\psi_{k-1}\rangle}{\sqrt{\langle \psi_{k-1} | (l - \hat{H}/L_s)^2 | \psi_{k-1} \rangle}} \equiv \frac{(l - \hat{H}/L_s) |\psi_{k-1}\rangle}{\sqrt{Q_k}} = \frac{(l - \hat{H}/L_s)^k}{\prod_{i=1}^k \sqrt{Q_i}} |\psi_0\rangle \quad (k = 1, 2, \dots) \quad (2.44)$$

を mTPQ state と定義する。ここで、 Q_k は各ステップごとの規格化因子である。このとき対応する逆温度 β_k はエネルギー密度 $u_k = \langle \psi_k | \hat{H} | \psi_k \rangle / L_s$ を用いて

$$\beta_k = \left(\frac{2k/L_s}{l - u_k} \right) \quad (2.45)$$

と与えられる。そして β_k における演算子 \hat{O} のアンサンブル平均は

$$\langle \hat{O} \rangle_{\beta_k}^{\text{ens(m)}} = \overline{\langle \psi_k | \hat{O} | \psi_k \rangle} \quad (2.46)$$

となる。次に、 β_k の導出を mTPQ state の物理的描像から説明する。まず、エネルギー密度 $\hat{h} \equiv \hat{H}/L_s$ の固有状態 $\hat{h} |n\rangle = u_n |n\rangle$ による基底 $\{|n\rangle\}$ を用いて式 (2.44) を展開する。

$$|\psi_0\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad (2.47)$$

$$|\psi_k\rangle \propto (l - \hat{h})^k |\psi_0\rangle = \sum_n c_n (l - u_n)^k |n\rangle \quad (2.48)$$

ここで、 $\{c_n\}$ は $\{|n\rangle\}$ に対応する係数のため式 (2.42) の $\{c_i\}$ とは異なる値になるが、同じランダムベクトルの展開式であるため依然として正規分布に従う乱数の組であるとみなせる。このときのエネルギー分布

^{*9} 数値計算をする際、偏りの少ない乱数生成法として知られるメルセンヌツイスタ [42] を使用した。

具体的には、標準正規分布 (あるいは平均 0 の一様分布) に従う乱数 x_i, y_i で構成される複素数 $z_i = (x_i + iy_i)/\sqrt{2}$ を生成し、 $|\phi_0\rangle = \sum_{i=1}^{N_F} z_i |i\rangle$ を規格化したベクトルを $|\psi_0\rangle$ としている。

$$|\psi_0\rangle \equiv \frac{|\phi_0\rangle}{\sqrt{\langle \phi_0 | \phi_0 \rangle}} \quad (2.43)$$

$h(u)$ を考える。

$$h(u) = \frac{1}{\delta u} \sum_n' |c_n|^2 (l - u_n)^{2k} \simeq \tilde{g}(u) (l - u)^{2k} \quad (2.49)$$

ここで、 \sum_n' は微小区間のエネルギーシェル ($u - \delta u/2, u + \delta u/2$] 内の和、 δu は微小エネルギー幅、 $\tilde{g}(u) \equiv \delta u^{-1} \sum_n' |c_n|^2$ とした。 δu を固定した時、1つ1つの $|c_n|^2$ はランダムな値をとるが、典型性によりエネルギーシェル内に含まれる状態数は指数関数的に大きくなる。その結果、 $\tilde{g}(u)$ のサンプル平均が本来の状態密度 $g(u)$ に非常に近い分布を持つといえる。さらに、エントロピー密度 $s \equiv S/L_s$ と状態密度とエントロピーの関係式 $S(u) = \ln g(u)$ ^{*10} を用いると

$$h(u) \simeq g(u) (l - u)^{2k} = e^{L_s s(u)} e^{\ln(l-u)^{2k}} = e^{L_s [s(u) + 2k/L_s \ln(l-u)]} \equiv e^{L_s \xi_k} \quad (2.50)$$

となる。この分布は、 $\partial \xi_k / \partial u = 0$ を満たすようなエネルギー $u = u_k^*$ にて鋭いピークを持つ。したがって、

$$\frac{\partial \xi_k}{\partial u} = \frac{\partial [s(u) + 2k/L_s \ln(l-u)]}{\partial u} \quad (2.51)$$

$$= \beta(u) - \frac{2k/L_s}{l-u} = 0 \quad (2.52)$$

を満たす $u = u_k^*$ における逆温度は

$$\beta(u_k^*) = \frac{2k/L_s}{l - u_k^*} \quad (2.53)$$

となる。ここで逆温度の定義 $\beta(u) = \partial s(u) / \partial u$ を用いた。数値計算で用いるのは、上式を $u_k^* = u_k$ と置き換えサンプル平均をとった式 (2.45) である。また、エントロピー密度は $h(u_k^*) \simeq e^{L_s [s(u_k^*) + 2k/L_s \ln(l-u_k^*)]}$ より

$$s(u_k^*) = \frac{1}{L_s} \ln \left(\prod_{i=1}^k Q_i \right) - \frac{2k}{L_s} \ln(l - u_k^*) + \ln N_H \quad (2.54)$$

と与えられる^{*11}。この構成で計算するメリットは、ランダムベクトルにハミルトニアン密度 \hat{H}/L_s を k 回掛け算するだけで β_k の状態を生成できる点である。一方デメリットは、 β_k を間接的にしか求められず k による刻み幅も不明瞭な点である。これは式 (2.58) では解決され、指定の β におけるマイクロカノニカル分布の平衡値が得られる。

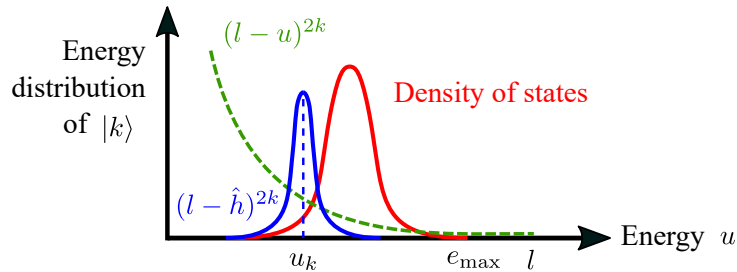


図 2.1 mTPQ に関するエネルギー分布の概念図。無限温度の状態密度に対して、ランダムベクトルに $(l - \hat{h})^k$ を作用させることで、エネルギー u_k にピークをもつ状態密度を構築している。

^{*10} Boltzmann の式におけるエネルギー幅の任意性から導かれる。

^{*11} 文献 [2] と表式が異なるのは、 Q_k の定義をステップごとの規格化定数にしたためである。数値計算ではこちらの表式を用いる。

2.3.3 canonical TPQ state (cTPQ)

逆温度 $\beta = (k_B T)^{-1}$ での規格化されていない canonical TPQ state は、

$$|\phi_\beta\rangle = e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}/2} |\psi_0\rangle = \sum_i e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}/2} c_i |i\rangle \quad (2.55)$$

と定義される [2]。ここで k_B は Boltzmann 定数。このとき分配関数は

$$Z(\beta) = \text{tr}\left(e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\right) = N_H \overline{\langle\phi_\beta|\phi_\beta\rangle} \quad (2.56)$$

と与えられる^{*12}。そして、式 (2.8) の代わりとして、演算子 $\hat{\mathcal{O}}$ のアンサンブル平均は

$$\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle_\beta^{\text{ens(m)}} = \left(\frac{\langle\phi_\beta|\hat{\mathcal{O}}|\phi_\beta\rangle}{\langle\phi_\beta|\phi_\beta\rangle} \right) \quad (\text{microcanonical}) \quad (2.58)$$

$$\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle_\beta^{\text{ens(c)}} = \frac{\langle\phi_\beta|\hat{\mathcal{O}}|\phi_\beta\rangle}{\langle\phi_\beta|\phi_\beta\rangle} \quad (\text{canonical}) \quad (2.59)$$

と表せる。ここでサンプル平均のとり方によって統計集団が変わることに注意してほしい。 $\overline{(\dots)}$ の中身である各サンプルの計算に注目すると、式 (2.58) の各サンプル値は分散のないただ一つの値として得られた「孤立系」とみなせるのでマイクロカノニカル分布となる（理由は後述）。一方、式 (2.59) では「熱浴内の部分系」として要請されるエネルギーの揺らぎが、 $Z(\beta)$ をサンプル平均から求めたことで取り込まれているのでカノニカル分布となる。内部エネルギーは

$$E(\beta) = \langle\hat{\mathcal{H}}\rangle_\beta^{\text{ens(*)}} \quad (2.60)$$

であり、自由エネルギーは

$$F(\beta)^{(m)} = -\frac{1}{\beta} \ln(N_H \overline{\langle\phi_\beta|\phi_\beta\rangle}) \quad (2.61)$$

$$F(\beta)^{(c)} = -\frac{1}{\beta} \ln\left(N_H \overline{\langle\phi_\beta|\phi_\beta\rangle}\right) \quad (2.62)$$

となり、内部エネルギーとエントロピーとの関係式 $F(\beta) = \langle\hat{\mathcal{H}}\rangle_\beta^{\text{ens(*)}} - TS(\beta)$ から

$$S(\beta)^{(m)} = \frac{1}{T} \left(\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle_\beta^{\text{ens(m)}} + k_B \overline{\ln(N_H \langle\phi_\beta|\phi_\beta\rangle)} \right) \quad (2.63)$$

$$S(\beta)^{(c)} = \frac{1}{T} \left(\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle_\beta^{\text{ens(c)}} + k_B \ln\left(N_H \overline{\langle\phi_\beta|\phi_\beta\rangle}\right) \right) \quad (2.64)$$

となる。比熱は次式から求まる。

$$C(\beta)^{(*)} = \beta^2 \left[\langle\hat{\mathcal{H}}^2\rangle_\beta^{\text{ens(*)}} - \left(\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle_\beta^{\text{ens(*)}} \right)^2 \right] \quad (2.65)$$

^{*12} ここで N_H をかけるのは、 $Z(\beta=0) = \overline{\langle\psi_0|\psi_0\rangle} = \sum_i |c_i|^2 = 1$ と c_i を定義したからである。
ちなみに、式 (2.43) の乱数 z_i が標準正規分布 (平均 0, 分散 1) に従う場合、 $\overline{\langle\phi_0|\phi_0\rangle} = \sum_{i=1}^{N_F} |z_i|^2 \simeq N_H$ となるので

$$Z(\beta) = \overline{\langle\phi_0|\phi_0\rangle} \overline{\langle\phi_\beta|\phi_\beta\rangle} \quad (2.57)$$

と定義してもよい。

統計誤差の評価

TPQ 理論における平均値からの分散は、サイトの数が増えると指数関数的に小さくなることが Chebyshev の不等式を用いて示されている (2.3.5 節)。具体的な数値計算をするにあたって本研究では、統計誤差を標準偏差の不偏推定量 σ_X (=不偏標準偏差^{*13}) で評価することにする。確率変数 X_r と平均値 \bar{X} を用いると

$$\sigma_X = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{r=1}^n (X_r - \bar{X})^2} \quad (2.66)$$

と与えられ、標準誤差は

$$\varepsilon_X = \frac{\sigma_X}{\sqrt{n}} = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)} \sum_{r=1}^n (X_r - \bar{X})^2} \quad (2.67)$$

となる^{*14}。例として、 \bar{X} には式 (2.60)-(2.65) を、 X_r には平均処理を除いたサンプル値を用いる。

$$E_r \rightarrow E(\beta) = \frac{\langle \phi_\beta | \hat{\mathcal{H}} | \phi_\beta \rangle}{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle} \quad (2.68)$$

$$S_r \rightarrow S(\beta) = \frac{\langle \phi_\beta | \hat{\mathcal{H}} | \phi_\beta \rangle}{T \langle \psi_\beta | \phi_\beta \rangle} + k_B \ln (N_H \langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle) \quad (2.69)$$

$$C_r \rightarrow C(\beta) = \beta^2 \left[\frac{\langle \phi_\beta | \hat{\mathcal{H}}^2 | \phi_\beta \rangle}{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle} - \left(\frac{\langle \phi_\beta | \hat{\mathcal{H}} | \phi_\beta \rangle}{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle} \right)^2 \right] \quad (2.70)$$

また、TPQ を少数サイトソルバーに採用した変分クラスター近似法 (3.2 節) による各種物理量 (Ω, m, S, C) に対しても、この標準誤差で評価する。

数値計算上の注意点

有限次元である数値計算の場合、式 (2.55) で定義される cTPQ state を計算しても式 (2.58),(2.59) のようにサンプル平均の取り方によって期待値が従う統計集団が変わる。これは、前節の mTPQ state の物理的描像を思い出すと理解できる。ミクロカノニカル分布の量子純粋状態は、「無限温度の純粋状態に対応するランダムベクトルに、 \hat{h} の関数を作用させ高エネルギーのカットオフを行うことで、高温から低温の純粋状態の構築に成功した」のである。前節のカットオフは、計算コストなどの実用上の構成のしやすさから $(l - \hat{h})^k$ を採用していたが、エネルギーのカットオフさえ出来れば \hat{h} の関数には任意性がある。

そこで、以下のような \hat{h} の関数を用いてミクロカノニカル分布の TPQ state を考える。

$$\begin{cases} e^{-a\hat{h}/2} & (u_k > 0) \\ e^{a\hat{h}/2} & (u_k < 0) \end{cases} \quad (2.71)$$

ここで、 a は正の実数であり、エネルギー期待値 u_k の正負によって関数が右肩下がりになるように定義している。 $u_k > 0$ の場合、

$$|\psi_k\rangle \propto e^{-a\hat{h}/2} |\psi_0\rangle = \sum_n c_n e^{-au_n/2} |n\rangle \quad (2.72)$$

^{*13} 厳密に言うと、不偏分散 $\frac{1}{n-1} \sum_{r=1}^n (X_r - \bar{X})^2$ の平方根を用いても不偏推定量にはならないが、正確な不偏標準偏差を計算するのは面倒なため通常はこの表式で推定する。

^{*14} 母集団の標準偏差 σ が未知なため、標本集団から計算した σ_X で代用している。

となり、エネルギー分布は

$$h(u) \simeq \frac{1}{\delta u} \sum'_n |c_n|^2 e^{-au_n} \quad (2.73)$$

$$\simeq g(u) e^{-au} \quad (2.74)$$

$$= e^{L_s[s(u) - au_n/L_s]} \quad (2.75)$$

この分布は、エネルギー $u = u_k^*$ にて鋭いピークを持つ。したがって、

$$\beta(u_k^*) = \left. \frac{\partial(au/L_s)}{\partial u} \right|_{u=u_k^*} = \frac{a}{L_s} \quad (2.76)$$

$u_k < 0$ の場合も同様に、

$$|\psi_k\rangle \propto e^{a\hat{h}/2} |\psi_0\rangle = \sum_n c_n e^{au_n/2} |n\rangle \quad (2.77)$$

となり、

$$\beta(u_k^*) = \left. \frac{\partial(-au/L_s)}{\partial u} \right|_{u=u_k^*} = -\frac{a}{L_s} \quad (2.78)$$

したがって、 $\beta(u_k^*) \equiv \beta_k$ を TPQ state に代入すると u_k の正負にかかわらず

$$|\psi_k\rangle = e^{-\beta_k L_s \hat{h}/2} |\psi_0\rangle = e^{-\beta_k \hat{H}/2} |\psi_0\rangle \quad (2.79)$$

と書き直せる。これは式 (2.55) そのものである。いまミクロカノニカル分布に沿って TPQ state を構成したので、式上では cTPQ state に見えてもサンプル平均 (2.58) を計算すれば、得られる平均値はミクロカノニカル分布に従う。逆に、カノニカル分布の結果を得るには分配関数を先に求める必要があるため、式 (2.59) のように分母と分子で別々に平均操作をすればよい。

効率的な cPTQ state の構築

式 (2.44) で定義される規格化された mTPQ state $|\psi_k\rangle$ を用いると、cTPQ state $|\phi_\beta\rangle$ は次のように mTPQ state の重ね合わせとして展開できる。

$$e^{L_s \beta l/2} |\phi_\beta\rangle = e^{L_s \beta(l - \hat{h})/2} |\psi_0\rangle \quad (2.80)$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(L_s \beta/2)^k}{k!} (l - \hat{h})^k |\psi_0\rangle \quad (2.81)$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \left(\prod_{i=0}^k \sqrt{Q_i} \right) \frac{(L_s \beta/2)^k}{k!} |\psi_k\rangle \equiv \sum_{k=0}^{\infty} R_k |\psi_k\rangle \quad (2.82)$$

ここで、 $Q_{i=0}$ はランダムベクトルのノルムに相当するため $Q_0 = 1$ とする。重ね合わせ係数 $R_k \equiv \prod_{i=0}^k \sqrt{Q_i} (L_s \beta/2)^k / k!$ は u_k の値が $\langle \phi_\beta | \hat{h} | \phi_\beta \rangle / \langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle$ と最も近い k のときに最大値をとり、 u_k と $\langle \phi_\beta | \hat{h} | \phi_\beta \rangle / \langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle$ が離れるほど R_k の寄与は指数関数的に減少していく [2]。つまり、cTPQ state は寄与の大きい少数個の mTPQ state の重ね合わせで構成できるのである。

また、演算子 \hat{O} のアンサンブル平均は

$$\langle \phi_\beta | \hat{O} | \phi_\beta \rangle = e^{-L_s \beta l} \sum_{k, k'} \frac{1}{k! k'!} \left(\frac{L_s \beta}{2} \right)^{k+k'} \left(\prod_{i=0}^k \sqrt{Q_i} \right) \left(\prod_{j=0}^{k'} \sqrt{Q_j} \right) \langle \psi_k | \hat{O} | \psi_{k'} \rangle \quad (2.83)$$

$$= e^{-L_s \beta l} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(L_s \beta)^{2k}}{(2k)!} \left(\prod_{i=0}^k Q_i \right) \left[\langle \psi_k | \hat{O} | \psi_k \rangle + \frac{L_s \beta}{2k+1} \sqrt{Q_{k+1}} \langle \psi_k | \hat{O} | \psi_{k+1} \rangle \right] \quad (2.84)$$

$$\langle \hat{O} \rangle_\beta^{\text{ens(c)}} = \frac{\langle \phi_\beta | \hat{O} | \phi_\beta \rangle}{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle} \quad (2.85)$$

とかける。第一式から第二式への変形では、 $\langle \psi_k | \hat{O} | \psi_{k+2} \rangle \rightarrow \langle \psi_{k+1} | * | \psi_{k+1} \rangle$ もしくは $\langle \psi_k | \hat{O} | \psi_{k+3} \rangle \rightarrow \langle \psi_{k+1} | * | \psi_{k+2} \rangle$ のように k と k' の差が 0 or 1 で表せる。従って、 $\langle \psi_k | \hat{O} | \psi_{k'} \rangle$ からは $\langle \psi_k | \hat{O} | \psi_k \rangle$, $\langle \psi_k | \hat{O} | \psi_{k+1} \rangle$ の項のみ出てくることがわかる。 $e^{-L_s \beta l}$ は第三式で分母分子にあるため先に消去して計算する。具体的な表式として、ハミルトニアン^{*}の期待値 $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_\beta^{\text{ens(*)}}$, $\langle \hat{\mathcal{H}}^2 \rangle_\beta^{\text{ens(*)}}$ は

$$\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle = e^{-L_s \beta l} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(L_s \beta)^{2k}}{(2k)!} \left(\prod_{i=0}^k Q_i \right) \left[1 + \frac{\beta}{2k+1} \left(L_s l - \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}} | \psi_k \rangle \right) \right] \quad (2.86)$$

$$\langle \phi_\beta | \hat{\mathcal{H}} | \phi_\beta \rangle = e^{-L_s \beta l} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(L_s \beta)^{2k}}{(2k)!} \left(\prod_{i=0}^k Q_i \right) \left[\langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}} | \psi_k \rangle + \frac{\beta}{2k+1} \left(L_s l \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}} | \psi_k \rangle - \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}}^2 | \psi_k \rangle \right) \right] \quad (2.87)$$

$$\langle \phi_\beta | \hat{\mathcal{H}}^2 | \phi_\beta \rangle = e^{-L_s \beta l} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(L_s \beta)^{2k}}{(2k)!} \left(\prod_{i=0}^k Q_i \right) \left[\langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}}^2 | \psi_k \rangle + \frac{L_s \beta l}{2k+1} \left(L_s l \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}} | \psi_k \rangle - \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}}^2 | \psi_k \rangle \right) - \frac{L_s^2 \beta}{2k+1} Q_{k+1} \langle \psi_{k+1} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{k+1} \rangle \right] \quad (2.88)$$

から求まる^{*15}。このように一度 mTPQ で計算した値を保存しておけば、任意の β に関する cTPQ の値を効率的に求めることができる。ただし、パラメータによって R_k が数値的に扱えない巨大な数になる場合があり、数値処理が可能な範囲まで縮小させる操作を要するため計算精度に注意が必要である。また、次節で解説する「TPQ を用いた動的相関関数の計算」では、温度 β の状態ベクトルを用意することになるが、式 (2.82) から求めるには精度やメモリの面から考えて困難である。そこで、本研究では上式は確認計算で使用し、以降の計算には後述する式 (2.116) のように、Lanczos 法を用いた虚時間発展から直接求めた cTPQ (gTPQ) state を使用している。

*15 ここで

$$\langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{k+1} \rangle = \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}} \frac{(l - \hat{\mathcal{H}}/L_s)}{\sqrt{Q_{k+1}}} | \psi_k \rangle = \frac{1}{\sqrt{Q_{k+1}}} \left(l \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}} | \psi_k \rangle - \frac{1}{L_s} \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}}^2 | \psi_k \rangle \right) \quad (2.89)$$

$$\langle \psi_{k+1} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{k+1} \rangle = \langle \psi_k | \frac{(l - \hat{\mathcal{H}}/L_s)}{\sqrt{Q_{k+1}}} \hat{\mathcal{H}} | \psi_{k+1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{Q_{k+1}}} \left(l \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{k+1} \rangle - \frac{1}{L_s} \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}}^2 | \psi_{k+1} \rangle \right) \quad (2.90)$$

$$\langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}}^2 | \psi_{k+1} \rangle = L_s \left(l \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{k+1} \rangle - \sqrt{Q_{k+1}} \langle \psi_{k+1} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{k+1} \rangle \right) \quad (2.91)$$

を用いた。

2.3.4 grand canonical TPQ state (gTPQ)

固定粒子系 (cTPQ) から全粒子系 (gTPQ) に拡張するため前節のパラメータの中で、Fock 空間の次元を $N_F = \sum_{n=0}^{2L_s} \frac{(2L_s)!}{n!(2L_s-n)!}$ と再定義し、全粒子のハミルトニアンを $\hat{K} = \hat{H} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma}$ と定義する。

逆温度 β および化学ポテンシャル μ での規格化されていない grand canonical TPQ state は、

$$|\phi_{\beta,\mu}\rangle = e^{-\beta\hat{K}/2} |\psi_0\rangle = \sum_i^{N_F} e^{-\beta\hat{K}/2} c_i |i\rangle \quad (2.92)$$

と定義される [3]。分配関数やグランドポテンシャルといった物理量は前節と同様に

$$\Xi(\beta, \mu) = \text{tr} \left(e^{-\beta\hat{K}} \right) = N_F \overline{\langle \phi_{\beta,\mu} | \phi_{\beta,\mu} \rangle} \quad (2.93)$$

$$\Omega(\beta, \mu) = -\frac{1}{\beta} \ln \left(N_F \overline{\langle \phi_{\beta,\mu} | \phi_{\beta,\mu} \rangle} \right) \quad (2.94)$$

$$\langle \hat{O} \rangle_{\beta,\mu}^{\text{ens(g)}} = \frac{\overline{\langle \phi_{\beta,\mu} | \hat{O} | \phi_{\beta,\mu} \rangle}}{\overline{\langle \phi_{\beta,\mu} | \phi_{\beta,\mu} \rangle}} \quad (\text{grand canonical}) \quad (2.95)$$

$$S(\beta, \mu) = \frac{1}{T} \langle \hat{K} \rangle_{\beta,\mu}^{\text{ens(g)}} + k_B \ln \left(N_F \overline{\langle \phi_{\beta,\mu} | \phi_{\beta,\mu} \rangle} \right) \quad (2.96)$$

と与えられる。また、ハミルトニアンに超伝導項などの固定粒子間の成分がない場合、gTPQ state (2.92) は、

$$|\phi_{\beta,\mu}\rangle = \begin{bmatrix} e^{-\beta\hat{K}/2} \\ (\in N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 0) \\ \\ \ddots \\ \\ e^{-\beta\hat{K}/2} \\ (\in N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = L_s) \\ \\ \ddots \\ \\ e^{-\beta\hat{K}/2} \\ (\in N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 2L_s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O \\ \\ \\ \\ O \\ \\ \\ \\ O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |\psi_0^{N_{\uparrow}=N_{\downarrow}=0}\rangle \\ \vdots \\ |\psi_0^{N_{\uparrow}=N_{\downarrow}=L_s}\rangle \\ \vdots \\ |\psi_0^{N_{\uparrow}=N_{\downarrow}=2L_s}\rangle \end{bmatrix} \quad (2.97)$$

のように、各固定粒子系の cTPQ state $|\phi_{\beta}^{(N)}\rangle = e^{-\beta\hat{K}/2} |\psi_0^{(N)}\rangle$ で表せる。本研究では、メモリ削減のため各固定粒子系ごとに計算した値を足し合わせて全粒子系の値を求めている。

2.3.5 Chebyshev の不等式と分散

Chebyshev の不等式は、確率変数 x , 平均値 y , 任意の数 ϵ としたとき

$$P(|x - y| \geq \epsilon) \leq \frac{|x - y|^2}{\epsilon^2} \quad (2.98)$$

と与えられる不等式である。任意の確率分布において、「平均値から離れた値になる確率」と分散の関係を見積もることができる。ここで、 $P(\dots)$ は \dots が成り立つ確率である。

以下では、不等式の x, y にアンサンブル平均や TPQ 期待値を代入し、TPQ 期待値がシステムサイズ L_s を増やすと指数関数的に小さくなる誤差の範囲で正しいアンサンブル平均の値を与えることがわかる [1-4]。

ミクロカノニカル分布 (mTPQ)

$$B_{L_s}^2 = \overline{(\langle \psi_k | \psi_k \rangle - 1)^2} \quad (2.99)$$

$$D_{L_s}(\hat{O})^2 = \overline{(\langle \psi_k | \hat{O} | \psi_k \rangle - \langle \hat{O} \rangle_{\beta_k}^{\text{ens(m)}})^2} \quad (2.100)$$

$$\frac{\tilde{Q}_{2k}}{\tilde{Q}_k^2} = \frac{1}{\exp\left[L_s \left\{ 2s(u_k^*) - s(u_{2k}^*) - 4k/L_s \ln\left(\frac{l-u_{2k}^*}{l-u_k^*}\right) \right\}\right]} \quad (2.101)$$

$$X_\beta^{(m)} = \left\{ \langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle_{\beta_{2k}}^{\text{ens(m)}} + \left(\langle \hat{O} \rangle_{\beta_{2k}}^{\text{ens(m)}} - \langle \hat{O} \rangle_{\beta_k}^{\text{ens(m)}} \right)^2 \right\} \quad (2.102)$$

$$P(|\langle \psi_k | \psi_k \rangle - 1| \geq \epsilon) \leq \frac{B_{L_s}^2}{\epsilon^2} \leq \frac{1}{\epsilon^2} \frac{\tilde{Q}_{2k}}{\tilde{Q}_k^2} \sim O(\exp[-L_s]) \quad (2.103)$$

$$P\left(\left| \langle \psi_k | \hat{O} | \psi_k \rangle - \langle \hat{O} \rangle_{\beta_k}^{\text{ens(m)}} \right| \geq \epsilon\right) \leq \frac{D_{L_s}^2}{\epsilon^2} \leq \frac{1}{\epsilon^2} \frac{\tilde{Q}_{2k}}{\tilde{Q}_k^2} X_\beta^{(m)} \sim \frac{O(L_s^{2m})}{O(\exp[L_s])} \quad (2.104)$$

ここで、 $\tilde{Q}_k \equiv \prod_{i=1}^k Q_i$, $\langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle_{\beta_k}^{\text{ens(m)}} \equiv \langle (\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle_{\beta_k}^{\text{ens(m)}})^2 \rangle_{\beta_k}^{\text{ens(m)}}$ と定義した。

カノニカル分布 (cTPQ)

$$B_{L_s}^2 = \overline{\left(\frac{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle}{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle} - 1 \right)^2} \quad (2.105)$$

$$D_{L_s}(\hat{O})^2 = \overline{\left(\frac{\langle \phi_\beta | \hat{O} | \phi_\beta \rangle}{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle} - \langle \hat{O} \rangle_\beta^{\text{ens(c)}} \right)^2} \quad (2.106)$$

$$\frac{Z(2\beta)}{Z(\beta)^2} = \frac{1}{\exp[2L_s \beta \{ F(2\beta)/L_s - F(\beta)/L_s \}]} \equiv e^{-S(\beta^*)}, \quad (\beta \leq \beta^* \leq 2\beta) \quad (2.107)$$

$$X_\beta^{(c)} = \left\{ \langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle_{2\beta}^{\text{ens(c)}} + \left(\langle \hat{O} \rangle_{2\beta}^{\text{ens(c)}} - \langle \hat{O} \rangle_\beta^{\text{ens(c)}} \right)^2 \right\} \quad (2.108)$$

$$P\left(\left| \frac{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle}{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle} - 1 \right| \geq \epsilon\right) \leq \frac{B_{L_s}^2}{\epsilon^2} \leq \frac{1}{\epsilon^2} \frac{N_H}{N_H + 1} \frac{Z(2\beta)}{Z(\beta)^2} \sim O(\exp[-L_s]) \quad (2.109)$$

$$P\left(\left| \frac{\langle \phi_\beta | \hat{O} | \phi_\beta \rangle}{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle} - \langle \hat{O} \rangle_\beta^{\text{ens(c)}} \right| \geq \epsilon\right) \leq \frac{D_{L_s}^2}{\epsilon^2} \leq \frac{1}{\epsilon^2} \frac{N_H}{N_H + 1} \frac{Z(2\beta)}{Z(\beta)^2} X_\beta^{(c)} \sim \frac{O(L_s^{2m})}{O(\exp[L_s])} \quad (2.110)$$

ここで、 $\langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle_\beta^{\text{ens(c)}} \equiv \langle (\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle_\beta^{\text{ens(c)}})^2 \rangle_\beta^{\text{ens(c)}}$ と定義した。第3式は $dF(\beta)/dT = -S(\beta)$ を用いた。

グランドカノニカル分布 (gTPQ)

式 (2.105) - (2.110) に以下の修正をすればよい。

$$\left\{ |\phi_\beta\rangle, Z(\beta), F(\beta), \langle \hat{O} \rangle_\beta^{\text{ens(c)}}, \langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle_\beta^{\text{ens(c)}} \right\} \rightarrow \left\{ |\phi_{\beta,\mu}\rangle, \Xi(\beta, \mu), \Omega(\beta, \mu), \langle \hat{O} \rangle_{\beta,\mu}^{\text{ens(g)}}, \langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle_{\beta,\mu}^{\text{ens(g)}} \right\} \quad (2.111)$$

2.3.6 虚時間発展の数値計算手法

数値計算において、式 (2.55) や式 (2.92) で与えられる虚時間発展の計算は、Taylor 展開もしくは Lanczos 展開を用いればよい。ただし、Taylor 展開は低温になると指数部分の肩が巨大な数になるため計算の工夫が必要になり、Lanczos 展開はハミルトニアン行列の次元が小さくなると精度が保証されない等の問題がある。そのため本研究では、全粒子系を固定粒子系の和から求める際、系の次元が数百個より小さい場合は Taylor 展開を、それ以上の次元では Lanczos 法を採用している。

Taylor 展開 (2 パターン)

- 1). 指数部分を n 分割した $e^{-i(\beta/n)\hat{H}/2}$ を n 回作用させる。各ステップで Taylor 展開させて規格化する。分配関数は全ステップのノルムの積で表せる。

$$|\psi_{\beta_k}\rangle = \frac{e^{-i(\beta/n)\hat{H}/2} |\psi_{\beta_{k-1}}\rangle}{\sqrt{\langle\psi_{\beta_{k-1}}| e^{-i(\beta/n)\hat{H}} |\psi_{\beta_{k-1}}\rangle}} \quad (k = 1, 2, \dots, n), \quad |\psi_{\beta_0}\rangle \equiv |\psi_0\rangle \quad (2.112)$$

$$Z(\beta) = N_F \prod_{k=1}^n \langle\psi_{\beta_k}|\psi_{\beta_k}\rangle \quad (2.113)$$

- 2). 展開次数を増やすループ内で、 k 次の展開数までの和で構成されるベクトルのノルムを監視して、一定値以下になるように定数倍する。

$$|\phi_\beta\rangle = e^{-\beta\hat{H}/2} |\psi_0\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta\hat{H})^k}{2^k k!} |\psi_0\rangle \quad (2.114)$$

以下にアルゴリズムを示す。(ノルムの収束誤差 ϵ 、数値処理が可能な巨大な定数 G)

```

k = 1, s = 0
|ψ1⟩ =  $\frac{-\beta\hat{H}}{2}$  |ψ0⟩, |Ψ0⟩ = |ψ0⟩
|Ψ1⟩ = |Ψ0⟩ + |ψ1⟩
while |⟨Ψk|Ψk⟩ - ⟨Ψk-1|Ψk-1⟩| ≥ ε do
  k = k + 1
  |ψk⟩ =  $\frac{-\beta\hat{H}}{2}$  |ψk-1⟩
  |Ψk⟩ = |Ψk-1⟩ +  $\frac{1}{k!}$  |ψk⟩
  if ⟨Ψk|Ψk⟩ ≥ G then
    s = s + 1
    |ψk⟩ = |ψk⟩ / √G
    |Ψk⟩ = |Ψk⟩ / √G
    |Ψk-1⟩ = |Ψk-1⟩ / √G
  end if
end while.
|φβ⟩ = |Ψk⟩.

```

よって、分配関数は次式で得られる。

$$Z(\beta) = N_F \overline{G^s} \langle\phi_\beta|\phi_\beta\rangle \quad (2.115)$$

Lanczos 展開

2.2.5 節の虚時間発展を $\tau = \beta$ にすると、

$$|\phi_\beta\rangle = e^{-\beta\hat{H}/2} |\psi_0\rangle \simeq \sum_{n=1}^{N_L} e^{-\beta\tilde{\epsilon}_n/2} |\tilde{\psi}_n\rangle \langle\tilde{\psi}_n|\psi_0\rangle \quad (2.116)$$

と書ける。この表式において β は係数のみに依存するため、任意の温度の計算コストは等しくなる。ただし、精度に必要な展開数 N_L は検証が必要である。本研究では $N_L < 100$ とした。

2.4 TPQ と動的相関関数

動的相関関数の計算には、ハミルトニアン¹⁶の完全系である N_H 個の固有値 E_n と固有ベクトル $|\psi_n\rangle$ をすべて (あるいは低温ならば一部) 求める必要がある。しかし、Hilbert 空間の次元はシステムサイズが大きくなるにつれて急速に大きくなるため、完全系の固有励起状態すべてを求めるのは困難である。そのため、TPQ state を用いた研究が多数なされており、[36, 37] では Chebyshev 多項式展開による実時間発展から $C(t)$ を計算し、式 (2.31) から $C(\omega)$ を求めている。また、[17] ではハミルトニアン¹⁶の各固有ベクトルへの射影演算子 P_ν を TPQ state に作用させて、Lehmann 表示の Green 関数 (2.10) と同等の式を評価している (付録 A.3)。

それらに対して本研究では、Krylov 部分空間として $N_L(N_H)$ 個の Lanczos 基底 (擬固有値, 擬固有ベクトル) に展開することで、計算コストを抑えて数値計算することができる。お気づきに読者もいるかもしれないが、Lanczos 法による TPQstate の動的相関関数の計算は、前節に紹介した「改良 LTLM」とほとんど同じ表式になる。^{*16}

2.4.1 Lanczos 基底を用いた遅延動的相関関数

一般に、演算子 \hat{A} および \hat{B} の遅延動的相関関数は、

$$\begin{aligned} G_{\hat{A}\hat{B}}(z) &= -i \int_0^\infty dt e^{izt} \langle \hat{A}(t)\hat{B}(0) \mp \hat{B}(0)\hat{A}(t) \rangle \\ &= G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z) \mp G_{\hat{B}\hat{A}}^-(z) \end{aligned} \quad (2.117)$$

である。ここで、 $\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t}\hat{A}e^{-i\hat{H}t}$ は演算子のハイゼンベルグ表示、上 (下) 記号 \mp は Boson (Fermion) 演算子に対応する。

まず、規格化されたある温度の状態ベクトル $|\psi_\beta\rangle$ に関する $G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z)$ を考える。被積分関数を

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(0) \rangle = \left[\langle \psi_\beta | e^{i\hat{H}t} \right] \times \hat{A} \times \left[e^{-i\hat{H}t} \hat{B} | \psi_\beta \right] \quad (2.118)$$

と分割して、左右のベクトル $[\dots]$ を Lanczos 法の初期ベクトルにして

$$e^{-i\hat{H}t} |\psi_\beta\rangle \simeq \sum_{n=1}^{N_L} e^{-i\tilde{\epsilon}_n t} |\tilde{\psi}_n\rangle \langle\tilde{\psi}_n|\psi_\beta\rangle \quad (2.119)$$

$$e^{-i\hat{H}t} \hat{B} |\psi_\beta\rangle \simeq \sum_{m=1}^{N_L} e^{-i\tilde{\epsilon}'_m t} |\tilde{\psi}'_m\rangle \langle\tilde{\psi}'_m|\hat{B}|\psi_\beta\rangle \quad (2.120)$$

^{*16} 表式上は似ていても物理的解釈として、ランダムベクトルを無限温度の純粋状態として温度 β の TPQ state で構成されるため、サンプル平均が統計集団の平衡値に非常に近い値を示す理由を典型性から理解できる。

と展開する*17。式 (2.118) と式 (2.119) を式 (2.120) に代入すると、

$$\langle \psi_\beta | e^{i\hat{H}t} \hat{A} e^{-i\hat{H}t} \hat{B} | \psi_\beta \rangle \simeq \sum_{n=1}^{N_L} \sum_{m=1}^{N_L} e^{-i(\tilde{\varepsilon}'_m - \tilde{\varepsilon}_n)t} \langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle \quad (2.123)$$

となる。これを式 (2.117) に代入して積分を実行すると

$$G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z) = \sum_{n,m} \frac{\langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle}{z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m} \quad (2.124)$$

となり、同様に $G_{\hat{B}\hat{A}}^-(z)$ も Lanczos 基底で表すと以下のようになる*18。

$$G_{\hat{B}\hat{A}}^-(z) = \sum_{n,m} \frac{\langle \psi_\beta | \hat{B} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{A} | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \psi_\beta \rangle}{z - \tilde{\varepsilon}_n + \tilde{\varepsilon}'_m} \quad (2.125)$$

$\hat{A} = \hat{c}_i, \hat{B} = \hat{c}_j^\dagger$ とした一粒子 Green 関数の場合は、 $G_{\hat{c}_i, a, \hat{c}_j^\dagger, b}$ のように記述でき、 a, b は、スピン、軌道、副格子など、系の内部自由度を指す。以降は一粒子 Green 関数を $G_{i,j}$ としスピン自由度 σ を省略する*19。

$$G_{ij}^+(z) = \sum_{n,m} \frac{\langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \hat{c}_i | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{c}_j^\dagger | \psi_\beta \rangle}{z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m}, \quad G_{ij}^-(z) = \sum_{n,m} \frac{\langle \psi_\beta | \hat{c}_j^\dagger | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{c}_i | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \psi_\beta \rangle}{z - \tilde{\varepsilon}_n + \tilde{\varepsilon}'_m} \quad (2.126)$$

動的相関関数の計算手順 (TPQ+Lanczos 法)

- 1). 虚時間発展 (Taylor 展開, Lanczos 展開) を用いて、規格化された TPQ state $|\psi_\beta\rangle$ を求める。
- 2). $|\psi_\beta\rangle$ の Lanczos 展開により、 $\tilde{\varepsilon}_n, |\tilde{\psi}_n\rangle, \langle \tilde{\psi}_n | \psi_\beta \rangle$ を求める。
- 3). $|\psi'_\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{B} |\psi_\beta\rangle$ の Lanczos 展開により、 $\tilde{\varepsilon}'_m, |\tilde{\psi}'_m\rangle, \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle \left[= \langle \tilde{\psi}'_m | \psi'_\beta \rangle \sqrt{N} \right]$ を求める。
- 4). $\hat{A}^\dagger |\tilde{\psi}_n\rangle$ を計算し、 $\langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle \left[= \left(\hat{A}^\dagger |\tilde{\psi}_n \rangle \right)^\dagger |\tilde{\psi}'_m \rangle \right]$ を求める。
- 5). 2 ~ 4 で求めた $\tilde{\varepsilon}_n, \tilde{\varepsilon}'_m, \langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle, \langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle, \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle$ を用いて式 (2.124) の関数を求める*20。

*17 ここで $|\psi_\beta\rangle$ は規格化されているが、 $\hat{B} |\psi_\beta\rangle$ は規格化されていない。そこで、

$$|\psi'_\beta\rangle = \frac{\hat{B} |\psi_\beta\rangle}{\sqrt{\langle \psi_\beta | \hat{B}^\dagger \hat{B} | \psi_\beta \rangle}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{B} |\psi_\beta\rangle \quad (2.121)$$

を初期ベクトルに採用して Lanczos 法を用いる。よって式 (2.120) は以下のように得られる。

$$e^{-i\hat{H}t} \hat{B} |\psi_\beta\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi'_\beta\rangle \sqrt{N} \simeq \sum_{m=1}^{N_L} e^{-i\tilde{\varepsilon}'_m t} |\tilde{\psi}'_m\rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \psi'_\beta \rangle \sqrt{N} = \sum_{m=1}^{N_L} e^{-i\tilde{\varepsilon}'_m t} |\tilde{\psi}'_m\rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle \quad (2.122)$$

*18 ちなみに、式 (2.119), (2.120) を Lanczos 基底で展開する代わりに、ハミルトニアン固有状態展開すると両辺は厳密に一致し、以降の計算は擬固有値と擬固有ベクトル $\tilde{\varepsilon}_l, |\tilde{\psi}_l\rangle$ を固有値と固有ベクトル $\varepsilon_l, |\psi_l\rangle$ に置き換えるだけでよい。

*19 本研究では、実軸と虚軸の一粒子 Green 関数を計算したが、値の変化が激しい実軸上は展開数を数百程度まで大きくする必要がある。一方、虚軸は値の変化が緩やかなため数十程度でよい。

*20 $G_{\hat{B}\hat{A}}^-(z)$ に関しても同様の手順で計算する。一粒子 Green 関数では、 $|\psi'_\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{c}_j^\dagger |\psi_\beta\rangle$ が $N \pm 1$ 系になる点に注意する。一般に、1 と 2,3 の Lanczos 展開数は異なる値をとっても精度は保証されるため、以降は 2,3 の展開数を N_L と表記する。また、サンプル平均 (2.59) をとる際は、暗に含まれる各サンプルの規格化因子を排除してから平均をとり、 $Z(\beta)$ で割ればよい。

第 3 章

自己エネルギー汎関数理論と数値計算

自己エネルギー汎関数理論 (Self-energy Functional Theory: SFT) [5,6] とは、Luttinger-Ward の定式化に基づき、系のグラウンドポテンシャルを自己エネルギーの汎関数として構築して変分原理により最適化する手法である。この理論枠組みは、相互作用に関して非摂動的な扱いが可能であり、熱力学的に矛盾の無い解を得ることができる利点を持つ。ここで、試行関数の役割をする自己エネルギーは、対象とする系と同じ相互作用項を持つ参照系の自己エネルギーに置き換える近似をしている。このため、参照系の選び方に結果が依存する欠点を持つため、複数の参照系の結果を比較して定性的な結論を導く必要がある。そして、実際に数値解析手法として扱うためには参照系の自己エネルギーに関する近似が必要になる。その近似の仕方によって複数の数値計算手法の開発されている。例えば、動的平均場理論 (DMFT) [5,7,8]、動的クラスター理論 (DCA) [9]、クラスター摂動論 (CPT) [10,11]、変分クラスター法 (VCA) [12–15] が挙げられる。本研究では、VCA と CPT を用いる。本章では、SFT の変分原理を導出した後、VCA および CPT を解説する*1。

3.1 自己エネルギー汎関数理論 (Self-Energy-Functional Theory: SFT)

3.1.1 Green 関数と自己エネルギー

相互作用のない系 ($U/t = 0$, 自由電子系) の一粒子 Green 関数

$$G_{t,0}(z) = \frac{1}{z + \mu - \mathcal{H}_{t,0}} \quad (3.1)$$

に対して、相互作用の効果をすべて含んだ自己エネルギーを $\Sigma_{t,U}$ とすると Dyson 方程式

$$G_{t,U} = G_{t,0} + G_{t,0} \Sigma_{t,U} G_{t,U} \quad (3.2)$$

を通して、相互作用を含んだ一粒子 Green 関数 $G_{t,U}$ は

$$G_{t,U}^{-1} = G_{t,0}^{-1} - \Sigma_{t,U} \quad (3.3)$$

$$G_{t,U}(z) = \frac{1}{z + \mu - \mathcal{H}_{t,0} - \Sigma_{t,U}} \quad (3.4)$$

と与えられる。

*1 本章に限り、行列およびベクトルを太字で表記している。

3.1.2 Luttinger-Ward 汎関数

Luttinger-Ward(LW) 汎関数 $\Phi[\mathbf{G}]$ は、自己エネルギーの摂動展開から無限次までのスケルトンダイアグラムの和として定義された。摂動論的には高次になるほど計算は困難になる。特に自発的対称性の破れや Mott 絶縁体を対象とする強相関電子系では摂動論の範囲での議論では十分でないことが知られている。そこで Potthoff は経路積分を用いて LW 汎関数を定義し非摂動論的な扱いを可能にした。

以下、LW 汎関数が満たす重要な性質を挙げる。

- 1). 系の厳密な Green 関数 $\mathbf{G}_{t,U}$ における LW 汎関数と自己エネルギーの汎関数は

$$\Phi_U[\mathbf{G}_{t,U}] = \Phi_{t,U} \quad (3.5)$$

$$\Sigma_U[\mathbf{G}_{t,U}] = \Sigma_{t,U} \quad (3.6)$$

と系の厳密な値を与える。この値を用いると系の厳密なグランドポテンシャルは次のように書ける*2。

$$\Omega_{t,U} = \Phi_{t,U} + \text{Tr} \ln(\mathbf{G}_{t,U}) - \text{Tr}(\Sigma_{t,U} \mathbf{G}_{t,U}) \quad (3.8)$$

- 2). LW 汎関数 $\Phi_U[\mathbf{G}]$ の Green 関数 \mathbf{G} による汎関数微分は以下のように自己エネルギー汎関数を与える。

$$\beta \frac{\delta \Phi_U[\mathbf{G}]}{\delta \mathbf{G}} = \Sigma_U[\mathbf{G}] \quad (3.9)$$

- 3). 相互作用のない系 ($U = 0$) では LW 汎関数 $\Phi_U[\mathbf{G}]$ は 0 になる。

$$\Phi_{U=0}[\mathbf{G}] = 0 \quad (3.10)$$

- 4). LW 汎関数 $\Phi_U[\mathbf{G}]$ は「ユニバーサル」である。

$\Phi_U[\mathbf{G}]$ は相互作用 U にのみ陽に依存し、一体部分 t は Green 関数 \mathbf{G} を介して陰に依存する。そのため、同じ相互作用を持つ系はハミルトニアンの一休部分が異なっても等価な LW 汎関数で記述される。同様に、 $\Sigma_U[\mathbf{G}]$ もユニバーサルである。

3.1.3 変分原理

ここでは、グランドポテンシャルを自己エネルギーの汎関数 $\Omega_{t,U}[\Sigma]$ と定義して停留条件を導出する。まず自己エネルギー $\Sigma[\mathbf{G}] = \Sigma$ を逆に解き、Green 関数を自己エネルギーの汎関数として $\mathbf{G}[\Sigma] = \mathbf{G}$ と書く。これを用いて LW 汎関数 $\Phi_U[\mathbf{G}]$ の Legendre 変換を

$$F_U[\Sigma] = \Phi_U[\mathbf{G}_U[\Sigma]] - \text{Tr} \ln(\Sigma \mathbf{G}_U[\Sigma]) \quad (3.11)$$

と定義する。この汎関数 $F_U[\Sigma]$ を自己エネルギーで汎関数微分すると式 (3.9) と類似した次式が得られる。

$$\beta \frac{\delta F_U[\Sigma]}{\delta \Sigma} = -\mathbf{G}_U[\Sigma] \quad (3.12)$$

*2 ここで、 Tr は松原周波数 $\omega_\nu = (2\nu + 1)\pi/\beta$, ($\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) と全ての量子数 α の和である。

$$\text{Tr}(\mathbf{A}) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_\nu} \sum_{\alpha} e^{i\omega_\nu 0^+} A_{\alpha\alpha}(i\omega_\nu) \quad (3.7)$$

ただし 0^+ は正の微小量であり、以降では無視する。

次に、汎関数 $F_U[\Sigma]$ を用いて式 (3.8) のグランドポテンシャルを自己エネルギーの汎関数として

$$\Omega_{t,U}[\Sigma] = F_U[\Sigma] + \text{Tr} \ln(\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma^{-1})^{-1} \quad (3.13)$$

と定義する。ここで、右辺は相互作用のない系の Green 関数 $\mathbf{G}_{t,0}$ を介して t に陽に依存するため、 $\Omega_{t,U}[\Sigma]$ と表記した。上式に変数として系の厳密な自己エネルギー $\Sigma_{t,U}$ を与えると、自己エネルギー汎関数 $\Omega_{t,U}[\Sigma]$ は系の厳密なグランドポテンシャル $\Omega_{t,U}$ と一致する。以下それを示す。

Σ が Dyson 方程式 (3.2) を満たす系の厳密な自己エネルギー $\Sigma_{t,U}$ のとき、

$$\mathbf{G}_U[\Sigma_{t,U}] = \mathbf{G}_{t,U} = \frac{1}{\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma_{t,U}} \quad (3.14)$$

と与えられ、Green 関数 $\mathbf{G}_U[\Sigma_{t,U}]$ が系の厳密な Green 関数になる。式 (3.11) の LW 汎関数は

$$F_U[\Sigma] = \Omega_{t,U} - \text{Tr} \ln(\mathbf{G}_{t,U}) \quad (3.15)$$

となる。よって、式 (3.13) は

$$\Omega_{t,U}[\Sigma_{t,U}] = \Omega_{t,U} \quad (3.16)$$

となり、系の厳密なグランドポテンシャルと一致する。

さらに、式 (3.13) の両辺を自己エネルギー Σ で汎関数微分すると

$$\beta \frac{\delta \Omega_{t,U}[\Sigma]}{\delta \Sigma} = \frac{1}{\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma} - \mathbf{G}_U[\Sigma] \quad (3.17)$$

となる。これと式 (3.17),(3.14) より、自己エネルギー汎関数の停留条件

$$\beta \frac{\delta \Omega_{t,U}[\Sigma]}{\delta \Sigma} \Big|_{\Sigma=\Sigma_{t,U}} = 0 \quad (3.18)$$

が得られる。したがって、相互作用系の厳密な状態を求める方法として、Dyson 方程式の解 $\Sigma_{t,U}$ を求める問題から、上式 (3.18) の変分問題へと置き換えることが、自己エネルギー汎関数理論の基礎となっており、後述の変分クラスター法などの近似手法へつながる。

3.1.4 参照系による近似

変分問題 (3.18) を解く上で、自己エネルギー汎関数 $\Omega_{t,U}[\Sigma]$ を計算することになるが、式 (3.13) の段階では LW 汎関数 $F_U[\Sigma]$ を正確に求めることが困難なため、数値計算可能な表式へ変換する近似を適用する。そこで LW 汎関数の性質 4 から、LW 汎関数は相互作用 U にも陽に依存するため、対象となる系と同じ相互作用をもち Green 関数が厳密に求まる系 (参照系) の LW 汎関数に置き換えることを目指す。

まず、参照系のハミルトニアンを次のように導入する。

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}_{t'} + \mathcal{H}_U \quad (3.19)$$

これは、元のハミルトニアン $\mathcal{H} = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_U$ と異なる一体部分 t' と共通の相互作用 U をもつ。この参照系における自己エネルギー汎関数は式 (3.13) より

$$\Omega_{t',U}[\Sigma] = F_U[\Sigma] + \text{Tr} \ln(\mathbf{G}_{t',0}^{-1} - \Sigma^{-1})^{-1} \quad (3.20)$$

と与えられる。このとき LW 汎関数のユニバーサル性から元の系と参照系の $F_U[\Sigma]$ は完全に等価である。これにより $F_U[\Sigma]$ を消去すると、

$$\Omega_{t,U}[\Sigma] = \Omega_{t',U}[\Sigma] + \text{Tr} \ln(\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma^{-1})^{-1} - \text{Tr} \ln(\mathbf{G}_{t',0}^{-1} - \Sigma^{-1})^{-1} \quad (3.21)$$

となる*3。上式では $F_U[\Sigma]$ の計算は回避することができたが、依然として試行変数 Σ と汎関数 $\Omega_{t',U}[\Sigma]$ は計算不可能である。そこで試行変数 Σ を、元の系の厳密な自己エネルギー $\Sigma_{t,U}$ から参照系の厳密な自己エネルギー $\Sigma_{t',U}$ に制限する。

$$\Sigma = \Sigma_{t,U} \rightarrow \Sigma = \Sigma_{t',U} \quad (3.22)$$

この近似によって式 (3.21) の右辺第一項は、参照系の厳密なグランドポテンシャル $\Omega_{t',U}[\Sigma_{t',U}] = \Omega_{t',U}$ となり、

$$\Omega(t') = \Omega_{t',U} + \text{Tr} \ln(\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma_{t',U}^{-1})^{-1} - \text{Tr} \ln(\mathbf{G}_{t',0}^{-1} - \Sigma_{t',U}^{-1})^{-1} \quad (3.23)$$

と書き換わる。ここで右辺は全て一体部分 t' に依存するため左辺を $\Omega_{t,U}[\Sigma_{t',U}] \equiv \Omega(t')$ と表記した。よって、参照系の自己エネルギー $\Sigma_{t',U}$ に対して停留条件

$$\left. \frac{\delta \Omega(t')}{\delta t} \right|_{t'=t'_{\text{opt}}} = 0 \quad (3.24)$$

を満たす一体部分 t'_{opt} を用いて、近似的に元の系のグランドポテンシャルが求まる。

以上より、自己エネルギー汎関数理論を背景とする近似手法は参照系の厳密な自己エネルギーを介して相互作用の効果を非摂動的に取り込んでおり、絶対零度から有限温度まで系統的な解析が可能であることがわかる。一方で、自己エネルギーが参照系の選び方に依存するため最終的な結果に強く影響する。そのため、対象とする物理に適した参照系を選択することが重要であり、複数の参照系の結果からの定性的な議論が必要になる。具体的な参照系として、少数クラスターであれば変数クラスター法 (VCA)、不純物 Anderson 模型なら動的平均場理論 (DMFT) で定式化される。

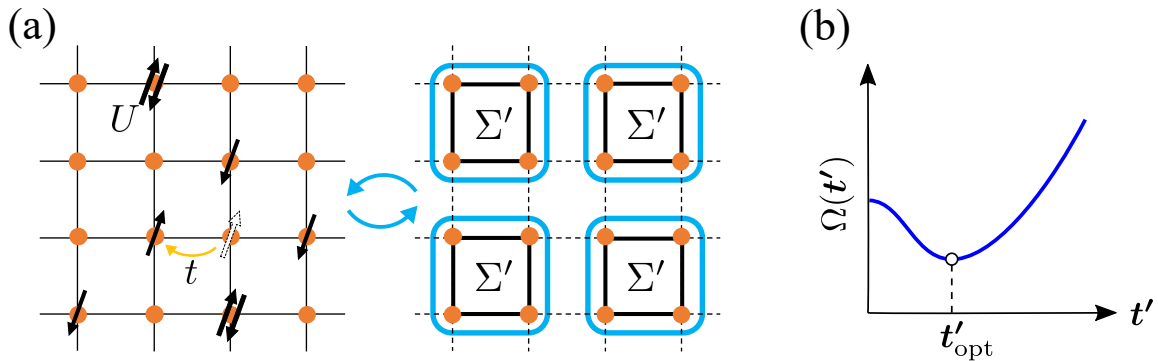


図 3.1 (a) 無限系と参照系 (b) グランドポテンシャルの一体部分に関する変分。停留点 t'_{opt} を探す。

*3 この式までは厳密に成り立つ。

3.2 変分クラスター近似 (Variational Cluster Approximation: VCA)

自己エネルギー汎関数理論に対する参照系の近似として、図 (4.1) のような少数サイトクラスター (超格子) を採用したものを VCA と呼ぶ。参照系の一体部分 t' はクラスター内のみ考慮し、クラスター間は無視する。VCA では弱相関から強相関までのあらゆる温度で記述できるため、Mott 転移をはじめとする強相関系の物理に対して有力な手法とされている。また、自発的対称性の破れを扱えるため、磁性や超伝導の研究に用いられている。この節では、少数サイトクラスターを導入した際のグランドポテンシャルの表式を示した後、有限温度における松原周波数の和を数値計算に適した形に書き換える。さらに、自発的対称性の破れを扱うために導入する Weiss 場を紹介し、各種物理量の表式を示す。

3.2.1 グランドポテンシャル：V 行列の導入

参照系を導入することでグランドポテンシャルは式 (3.23) のように表せた。ここで、実際に数値計算するためにグランドポテンシャルを見通しの良い式に書き換える。元の系と参照系の一体部分の差として行列 V を

$$V \equiv \mathcal{H}_t - \mathcal{H}_{t'} = G_{t,0}^{-1} - G_{t',0}^{-1} \quad (3.25)$$

と定義する*4。すると、式 (3.23) の右辺第 2 項は参照系の Dyson 方程式 $G_{t',U}^{-1} = G_{t',0}^{-1} - \Sigma_{t',U}$ を用いて

$$G_{t,0}^{-1} - \Sigma_{t',U} = G_{t',U}^{-1} - V \quad (3.26)$$

と書き換わる。よって式 (3.23) は

$$\Omega(t') = \Omega_{t',U} + \text{Tr} \ln \left(G_{t',0}^{-1} - V \right)^{-1} - \text{Tr} \ln G_{t',U} \quad (3.27)$$

$$= \Omega_{t',U} - \text{Tr} \ln \left(I - V G_{t',U} \right)^{-1} \quad (3.28)$$

となる。

次に V の詳しい表式を示す。以降の議論ではハミルトニアン (2.1) の添え字 α, β をサイトを指定する指標 i, j に置き換える*5。参照系は元の格子を少数サイトクラスターに分割したので、元の格子系の実格子ベクトル r_i と各クラスター (クラスター内のサイト) の位置を示す超格子ベクトル R (実格子ベクトル r_a) は

$$r_i = R + r_a \quad (3.29)$$

という関係になる。ここで参照系のハミルトニアンの一体部分ではクラスター間の一体部分が切れているため、

$$\mathcal{H}_{t'} = \sum_{ij} t'_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j = \sum_{RR'} \sum_{ab} t'_{ab} \delta_{RR'} \hat{c}_{Ra}^\dagger \hat{c}_{Rb} \quad (3.30)$$

と書ける。よって式 (3.25) を変形すると

$$V = \sum_{ij} (t_{ij} - t'_{ij}) \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j = \sum_{RR'} \sum_{ab} (t_{ab}^{RR'} - t'_{ab} \delta_{RR'}) \hat{c}_{Ra}^\dagger \hat{c}_{Rb} = \sum_{RR'} \sum_{ab} V_{ab}^{RR'} \hat{c}_{Ra}^\dagger \hat{c}_{Rb} \quad (3.31)$$

*4 右辺 2 つ目の等号は相互作用のない系の Green 関数の表式 $G_{t,0} = (z + \mu - \mathcal{H}_{t,0})^{-1}$ を思い出せば当然の結果である。

*5 この指標にはスピン σ も含まれるが、必要な場合を除き省略する。

と表せる。 \mathbf{V} は元の格子空間 γ の並進対称性を保っていないが、超格子空間 Γ の並進対称性は保っている。ここで超格子空間 Γ に対する波数ベクトルを \mathbf{Q} 、クラスターの数 N_c と定義すると、超格子空間 Γ に対する Fourier 変換は

$$\hat{c}_{\mathbf{R}a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{Q}} \hat{c}_{\mathbf{Q}a}^\dagger e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} \quad (3.32)$$

と表される。これを \mathbf{V} に用いると

$$\mathbf{V}(\mathbf{Q}) = \sum_{\mathbf{Q}} \sum_{ab} \left(\sum_{\mathbf{R}} V_{ab}^{\mathbf{0}\mathbf{R}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} \right) \hat{c}_{\mathbf{Q}a}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{Q}b} \equiv \sum_{\mathbf{Q}} \sum_{ab} V_{ab}(\mathbf{Q}) \hat{c}_{\mathbf{Q}a}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{Q}b} \quad (3.33)$$

$$V_{ab}(\mathbf{Q}) \equiv \sum_{\mathbf{R}} V_{ab}^{\mathbf{0}\mathbf{R}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{R}} (t_{ab}^{\mathbf{0}\mathbf{R}} - t'_{ab} \delta_{\mathbf{0}\mathbf{R}}) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{R}} t_{ab}^{\mathbf{0}\mathbf{R}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} - t'_{ab} \quad (3.34)$$

と変形できる。ここで $\mathbf{0}$ は \mathbf{R} の原点である。具体例として図 2.1 (a) のような 2 次元正方格子 (2×2) において一体部分が最近接ポッピング $-t$ のみの場合、次のように表せる。ただし、 $\mathbf{R}_1 = (1, 0)$, $\mathbf{R}_2 = (0, 1)$ 。

$$\mathbf{V}(\mathbf{Q}) = \begin{pmatrix} 0 & -te^{i\mathbf{Q}\cdot(-\mathbf{R}_1)} & 0 & -te^{i\mathbf{Q}\cdot(-\mathbf{R}_2)} \\ -te^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_1} & 0 & -te^{i\mathbf{Q}\cdot(-\mathbf{R}_2)} & 0 \\ 0 & -te^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_2} & 0 & -te^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_1} \\ -te^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_2} & 0 & -te^{i\mathbf{Q}\cdot(-\mathbf{R}_1)} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.35)$$

参照系の Green 関数はクラスターについて対角的であるため、Fourier 変換 (3.32) に対して

$$G_{\mathbf{t}', \mathbf{U}, ab}(\mathbf{Q}, z) = \sum_{\mathbf{R}} \delta_{\mathbf{0}\mathbf{R}} G_{\mathbf{t}', \mathbf{U}, ab}(z) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} = G_{\mathbf{t}', \mathbf{U}, ab}(z) \quad (3.36)$$

となり、波数 \mathbf{Q} と超格子ベクトル \mathbf{R} に依存しない。

以上を踏まえたうえで式 (3.28) を書き直す。このとき対角和 Tr は松原周波数 ω_ν とスピン σ の他に超格子空間の波数 \mathbf{Q} と実空間サイト番号 a の対角和となるので

$$\text{Tr}(\mathbf{A}) = T \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{Q}} \text{tr} \mathbf{A}(\mathbf{Q}, i\omega_\nu) = T \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{Q}} \sum_{a=1}^{L_s} A_{aa}(\mathbf{Q}, i\omega_\nu) \quad (3.37)$$

と書き直せる。さらに線形代数の公式 $\text{tr} \ln \mathbf{A} = \ln \det \mathbf{A}$ を用いると、式 (3.23) は

$$\Omega(\mathbf{t}') = \Omega_{\mathbf{t}', \mathbf{U}} - T \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{Q}} \ln \det [\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{Q}) \mathbf{G}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}(i\omega_\nu)] \quad (3.38)$$

となる。これまで系全体の量としてグランドポテンシャルを定義してきたが、以降は慣習に従い $\Omega(\mathbf{t}')$ を 1 サイトあたりの量に定義し直す。

$$\Omega(\mathbf{t}') = \frac{1}{L_s} \Omega_{\mathbf{t}', \mathbf{U}} - \frac{T}{N_c L_s} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{Q}} \ln \det [\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{Q}) \mathbf{G}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}(i\omega_\nu)] \quad (3.39)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Omega_{\mathbf{t}', \mathbf{U}} : \text{参照系のグランドポテンシャル} \\ L_s : \text{クラスター内のサイト数} \\ N_c : \text{クラスターの数 (超格子空間の格子点の数)} \\ T : \text{温度} \\ \mathbf{Q} \in \text{BZ}_\Gamma \\ \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} : \text{松原周波数の無限和 } (i\omega_\nu) \\ \sum_{\sigma} : \text{スピン自由度の和 (up spin は } +1, \text{ down spin は } -1 \text{ をとる.)} \end{array} \right. \quad (3.40)$$

VCA の計算手順

- 1). 少数サイトソルバー (厳密対角化法や TPQ 法など...) を用いて、
一体部分 \mathbf{t}' に対する参照系のグランドポテンシャル $\Omega_{\mathbf{t}',U}$ と一粒子 Green 関数 $\mathbf{G}_{\mathbf{t}',U}$ を求める。
- 2). 式 (3.39) の積分を実行して、一体部分 \mathbf{t}' に対するグランドポテンシャル $\Omega(\mathbf{t}')$ を求める。
- 3). 1 と 2 のステップを繰り返して、停留条件

$$\left. \frac{\delta\Omega(\mathbf{t}')}{\delta\mathbf{t}} \right|_{\mathbf{t}'=\mathbf{t}'_{\text{opt}}} = 0 \quad (3.41)$$

を満たす一体部分 \mathbf{t}'_{opt} を求める。

- 4). 最適化された一体部分 \mathbf{t}'_{opt} を CPT に適用することで、様々な物理量を求める。

最適化する参照系の一体部分として、例えば自発的対称性の破れを伴う秩序相の議論をしたい場合、対応する対称性が破れた自己エネルギーが必要なため、意図的に対称性を破るような Weiss 場項を参照系のハミルトニアンに加えて最適化する (3.2.3 節)。また、粒子ホール対称性の破れた系や half-filling 以外では、化学ポテンシャル μ の調節とオンサイトエネルギー項の最適化が必要になる (付録 A.2)。

式 (3.39) を数値計算する上で、松原周波数の無限和を扱うのは困難であるため複素積分に置き換える。次節の有限温度 ($T > 0$) との比較として、式 (3.39) の絶対零度 ($T = 0$) における積分経路の書き換えを示す。このとき、松原周波数の無限和を周回積分 $C_{<}$ および虚軸上の積分に置き換えられる*6。

$$\Omega(\mathbf{t}') = \frac{1}{L_s} \Omega_{\mathbf{t}',U} - \frac{1}{N_c L_s} \sum_{\sigma} \oint_{C_{<}} \frac{dz}{2\pi i} \sum_{\mathbf{Q}} \ln \det [\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{Q}) \mathbf{G}_{\mathbf{t}',U}(z)] \quad (3.42)$$

$$= \frac{1}{L_s} \Omega_{\mathbf{t}',U} - \frac{1}{N_c L_s} \sum_{\sigma} \left(\int_0^{\infty} \frac{dx}{\pi} \sum_{\mathbf{Q}} \ln |\det [\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{Q}) \mathbf{G}_{\mathbf{t}',U}(ix)]| + \text{Re} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{\text{tr} \mathbf{V}(\mathbf{Q})}{ix - p} \right) \quad (3.43)$$

ここで、任意の正の定数 $p (> 0)$ は被積分関数の無限遠点での振る舞いを改善するために導入されている。半無限区間の積分には二重指数関数型数値積分公式 (DE 公式) を用いるとよい。

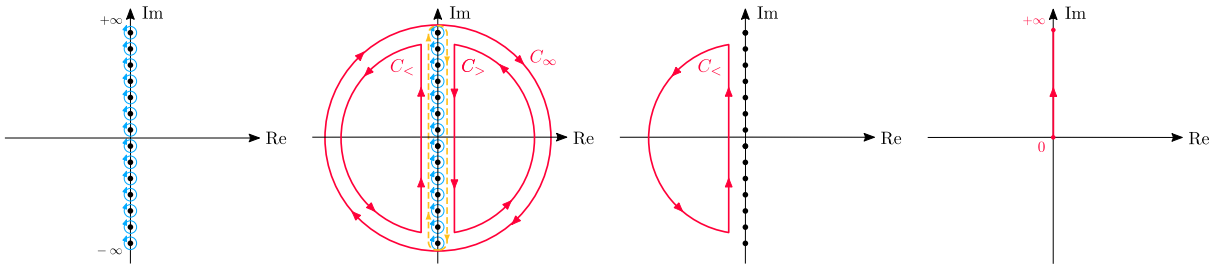


図 3.2 絶対零度における VCA の積分経路

*6 計算の詳細は [43] を参照。

3.2.2 有限温度における積分経路の工夫

これまで有限温度の数値計算では Q-matrix 法 [44, 45] が用いられてきたが、参照系のクラスターを完全対角化する必要があったため、解析の対象が小さなサイトに限られていた。それに対し文献 [16] では、松原周波数の無限和に対し、高周波部分を複素平面の周回積分に置き換えることでサイト数の拡大に成功した。以下、その方法について紹介する。

まず、松原周波数の無限和に対して注意すべきは、 $z \rightarrow \infty$ における Green 関数 $\mathbf{G}_{t',U}(z)$ の振る舞いが

$$\mathbf{G}_{t',U}(z) \sim \frac{1}{z} \quad (3.44)$$

となり、被積分関数が

$$\ln \det [\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{Q})\mathbf{G}_{t',U}(z)] = \text{tr} \ln [\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{Q})\mathbf{G}_{t',U}(z)] \quad (3.45)$$

$$\sim \text{tr} \ln \left[\mathbf{I} - \frac{\mathbf{V}(\mathbf{Q})}{z} \right] \quad (3.46)$$

$$\sim -\frac{1}{z} \text{tr} [\mathbf{V}(\mathbf{Q})] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2}\right) \quad (3.47)$$

のように減衰するため、高周波部分の寄与は無視できないことである。そこで、図 (3.3) のように低周波部分 ($|\omega_\nu| < \omega_{\nu_{\max}}$) と高周波部分 ($\omega_{\nu_{\max}} < |\omega_\nu|$) に分割し、高周波部分を複素平面内の閉経路 C_R と C_∞ の周回積分に置き換える。

$$T \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} [\dots] = T \sum_{\nu=-\nu_{\max}-1}^{\nu_{\max}} [\dots] + \left(\oint_{C_R} \frac{dz}{2\pi i} + \oint_{C_\infty} \frac{dz}{2\pi i} \right) n_F(z) [\dots] \quad (3.48)$$

ここで

$$n_F(z) [\dots] = [\exp(\beta z) + 1]^{-1} \quad (3.49)$$

は Fermi 分布関数である。また、経路 C_∞ の積分は式 (3.47) よりゼロとなる。経路 C_R の積分は $z = Re^{i\theta}$ を用いて

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta Re^{i\theta}}{\pi} n_F(Re^{i\theta}) [\dots] \quad (3.50)$$

となる。ここで、 R はカットオフ松原周波数 $\omega_{\nu_{\max}}$ ^{*7} に対して $\omega_{\nu_{\max}} < R < \omega_{\nu_{\max}+1}$ を満たすように、

$$R = \omega_{\nu_{\max}} + \pi T = 2(\nu_{\max} + 1)\pi T \quad (3.52)$$

とする^{*8}。さらに被積分関数の実軸における対称性から計算範囲を上半面にすることができるので、

$$T \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} [\dots] = 2T \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}} \text{Re}[\dots] + \text{Re} \int_0^\pi \frac{d\theta Re^{i\theta}}{\pi} n_F(Re^{i\theta}) [\dots] \quad (3.53)$$

と書き換えられる^{*9}。

^{*7} カットオフ松原周波数 $\omega_{\nu_{\max}}$ は経路 C_R が被積分関数の全ての極を囲うように、次式を満たす最小の松原周波数が設定される。

$$\omega_{\nu_{\max}} > 2(\omega'_{\nu_{\max}} + W) \quad (3.51)$$

ここで、 $\omega'_{\nu_{\max}}$ はクラスターの最大 (絶対値) の一粒子励起エネルギー、 W は $\mathcal{H}_{t',0}$ のバンド幅 (tight-binding) である。

^{*8} Fermion 系の松原周波数の中間点なので、これは Boson 系の松原周波数である。

^{*9} 第二項には Fermi 分布関数 $n_F(z)$ が含まれるため、 $n_F(z)$ が十分小さい低温では積分範囲を縮小できる。

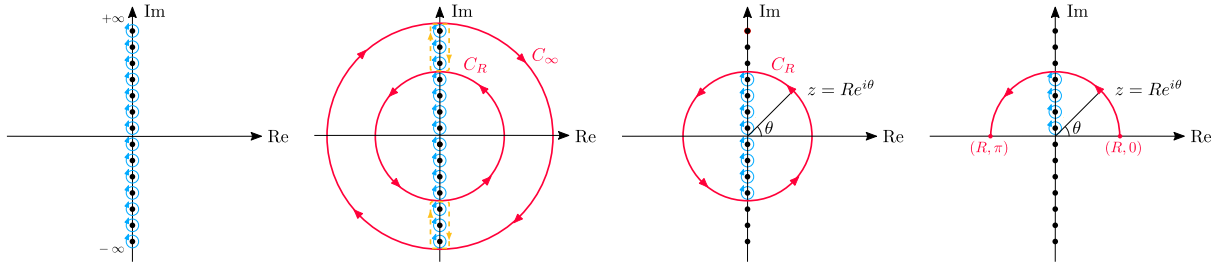


図 3.3 有限温度における VCA の積分経路

3.2.3 自発的対称性の破れ

VCA では意図的に対称性を破るような一体部分項 (Weiss 場)

$$\mathcal{H}_{\Delta'} = \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{ij} \Delta'_{ij\sigma\sigma'} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma'} \quad (3.54)$$

を参照系に加えることで、自発的対称性の破れを伴う秩序相の議論ができる。

このとき、参照系のハミルトニアン (3.19) と V 行列 (3.25) は次のように修正される。

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_U + \mathcal{H}_{\Delta'} \quad (3.55)$$

$$V \equiv \mathcal{H}_t - (\mathcal{H}_t + \mathcal{H}_{\Delta'}) = \tilde{V} - \mathcal{H}_{\Delta'} \quad (3.56)$$

ここで $\tilde{V} \equiv \mathcal{H}_t - \mathcal{H}_{t'}$ は Weiss 場を加える前の V 行列である。

具体例として、磁気秩序の Weiss 場は

$$\hat{\mathcal{H}}' = h' \sum_{i,\sigma} \sigma e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} \hat{n}_{i,\sigma} \quad (3.57)$$

で与えられる。ただし、 \mathbf{Q} は秩序ベクトルである。

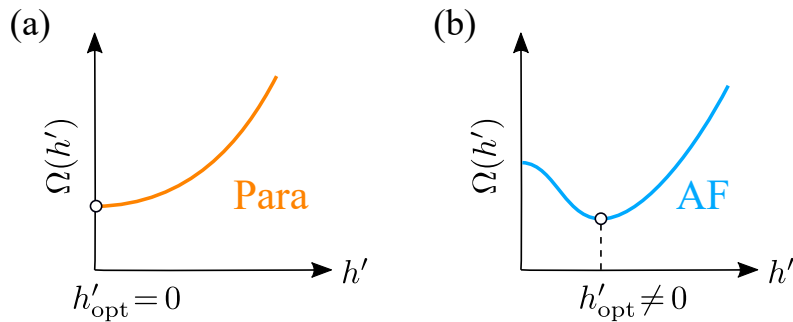


図 3.4 グランドポテンシャルの h' に関する変分。停留点の値で自発的対称性の破れが議論できる。

$\mathbf{Q}_{\text{AF}} = (\pi, \pi)$ としたとき、(a) 常磁性相 [Para]、(b) 反強磁性相 [AF] となる。

3.2.4 一体演算子の期待値

秩序変数や粒子数といった物理量の計算は、VCA における近似的な一粒子 Green 関数 \mathcal{G}

$$\mathcal{G} \equiv (\mathbf{G}_{t',U}^{-1} - \mathbf{V})^{-1} = [(\mathbf{I} - \mathbf{V}\mathbf{G}_{t',U})\mathbf{G}_{t',U}^{-1}]^{-1} = \mathbf{G}_{t',U}(\mathbf{I} - \mathbf{V}\mathbf{G}_{t',U})^{-1} \quad (3.58)$$

$$= (\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma_{t',U})^{-1} \quad (3.59)$$

$$\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{Q}, z) = [\mathbf{G}_{t',U}(z)(\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{Q})\mathbf{G}_{t',U}(z))^{-1}]_{ab} \quad (3.60)$$

を用いて^{*10}、サイト当たりの量として一体演算子 $\hat{\mathcal{O}}$ の期待値

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\beta} = \sum_{a,b} \mathcal{O}_{ab} \langle \hat{c}_a^{\dagger} \hat{c}_b \rangle_{\beta} = \frac{1}{N_c L_s} \text{Tr}(\mathcal{O}\mathcal{G}) = \frac{1}{N_c L_s} \sum_{\sigma} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{Q}} \text{tr}[\mathcal{O}\mathcal{G}(\mathbf{Q}, i\omega_{\nu})]$$

から求められる。また、グランドポテンシャルと同様に松原周波数の無限和の書き換えが可能である。

具体例として、粒子数の期待値

$$n = \langle \hat{n} \rangle_{\beta} = \frac{1}{L_s} \sum_{i,\sigma} \langle \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i\sigma} \rangle_{\beta} \quad (3.61)$$

における行列 \mathcal{O} は単位行列 \mathbf{I} となる。また、 μ_B を Bohr 磁子とすると磁気モーメントは

$$m = \langle m \rangle_{\beta} = \frac{1}{L_s} \mu_B \sum_{i,\sigma} \sigma e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i} \langle \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i\sigma} \rangle_{\beta} \quad (3.62)$$

となり、図 (4.1) のような 2 次元正方格子 (2×2) を参照系とする場合、反強磁性秩序 $\mathbf{Q}_{\text{AF}} = (\pi, \pi)$ に対応する行列 \mathcal{O} は

$$\mathcal{O} = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.63)$$

となる。

3.2.5 エントロピーと比熱

グランドポテンシャルの 2 次以上の導関数から得られる熱力学量を計算する際、秩序相では変分パラメータによる補正を考慮しなければならない [46, 47]。e.g. 帯磁率 (外部磁場) や比熱 (温度)。それは、比熱であれば変分パラメータ t' が温度に暗に依存するからである。式 (3.41) の停留条件は

$$\left. \frac{\delta \Omega(T, t')}{\delta t'} \right|_{t'=t'^*} = 0 \quad (3.64)$$

となるため、グランドポテンシャルは $\Omega = \Omega(T, t')$ とみなせる。以下、反強磁性秩序の Weiss 場パラメータ h^* を最適化された変分パラメータとして表記し、エントロピーと比熱の具体的な表式を示す。

^{*10} 式 (3.58) は、元の系 (無限系) の Dyson 方程式 (3.3) の自己エネルギー $\Sigma_{t,U}$ を参照系の自己エネルギー $\Sigma_{t',U}$ に置き換えた形であり、VCA の近似そのものを表す。

エントロピー S (比熱 C) は、温度に関するグランドポテンシャルの 1 次 (2 次) 導関数であり、

$$\begin{aligned} S &= -\frac{d\Omega}{dT} = -\frac{\partial\Omega}{\partial T} - \frac{dh^*}{dT} \cdot \frac{\partial\Omega}{\partial h^*} \quad \left(\frac{\partial\Omega}{\partial h^*} = 0 \right) \\ &= -\frac{\partial\Omega}{\partial T} \end{aligned} \quad (3.65)$$

$$\begin{aligned} C &= -T \frac{d^2\Omega}{dT^2} = -T \frac{\partial^2\Omega}{\partial T^2} - T \frac{dh^*}{dT} \cdot \frac{\partial^2\Omega}{\partial h^* \partial T} \\ &= -T \frac{\partial^2\Omega}{\partial T^2} + T \frac{dh^*}{dT} \cdot \frac{\partial S}{\partial h^*} \end{aligned} \quad (3.66)$$

と与えられる。 S の最右辺第 2 項は停留条件 (3.64) により、変分パラメータによる補正項は消去される。

ここで、温度微分演算子 D_T

$$D_T \equiv \frac{\partial}{\partial T} + i\omega_\nu \beta \frac{\partial}{\partial(i\omega_\nu)} \quad (3.67)$$

を導入すると、サイト当たりのエントロピーと比熱は式 (3.39) より

$$S = \frac{1}{L_c} S' - \frac{1}{N_c L_s} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \left(1 + \frac{1}{\beta} D_T \right) \ln \det \left[\mathbf{I} - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}) \mathbf{G}'(i\omega_\nu) \right] \quad (3.68)$$

$$-T \frac{\partial^2\Omega}{\partial T^2} = \frac{1}{L_s} C' + \frac{1}{N_c L_s} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \left(\frac{2}{\beta} D_T + \frac{1}{\beta^2} D_T^2 \right) \ln \det \left[\mathbf{I} - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}) \mathbf{G}'(i\omega_\nu) \right] \quad (3.69)$$

となる。ここで、 S' と $C' = -T \frac{\partial^2\Omega'}{\partial T^2}$ は参照系の厳密値である。また、それぞれの最後の項は関係式 $\partial_T \ln \det \mathbf{A}(T) = \text{tr} [\mathbf{A}(T)^{-1} \partial_T \mathbf{A}(T)]$ と $\partial_T \mathbf{A}(T)^{-1} = -\mathbf{A}(T)^{-1} [\partial_T \mathbf{A}(T)] \mathbf{A}(T)^{-1}$ を用いて

$$D_T \ln \det [\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{Q}) \mathbf{G}'(i\omega_\nu)] = -\text{tr} [(\mathbf{I} - \mathbf{V} \mathbf{G}')^{-1} \mathbf{V} (D_T \mathbf{G}')], \quad (3.70)$$

$$D_T^2 \ln \det [\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{Q}) \mathbf{G}'(i\omega_\nu)] = -\text{tr} \left[\{(\mathbf{I} - \mathbf{V} \mathbf{G}')^{-1} \mathbf{V} (D_T \mathbf{G}')\}^2 \right] - \text{tr} [(\mathbf{I} - \mathbf{V} \mathbf{G}')^{-1} \mathbf{V} (D_T^2 \mathbf{G}')] \quad (3.71)$$

と書き換えられる。よって、 T と z に関する $\mathbf{G}'(z)$ の導関数を計算すればよい。詳細は付録 (A.1) を参照。

3.3 クラスタ摂動理論 (Cluster Perturbation Theory: CPT)

CPT は、無限系を少数サイトのクラスターに分割して、クラスター内 (参照系) を厳密に、クラスター間の要素は摂動的に取り込み、無限系の近似的な Green 関数 (CPT Green 関数) \mathcal{G}_{CPT} を計算する手法である。CPT Green 関数の計算に VCA で最適化された一体部分 \mathbf{t}'_{opt} を用いることで、適切な系の状態に関する様々な物理量が得られる。

VCA では参照系の自己エネルギーを用いてグランドポテンシャルを求めた。近似的な一粒子 Green 関数 \mathcal{G} の成分表示 (3.60) をみると、 $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{Q}, z)$ はクラスター内については実空間表示 (a, b)、クラスター間については波数表示 (\mathbf{Q}) となっているため、2 つの空間の表記が混在している。これは、超格子に対して並進対称性は保たれ、元の格子の並進対称性は破れていることを反映している。これに対して \mathcal{G}_{CPT} では、元の格子系の波数 \mathbf{k} に関する表式が必要なため、まず実空間と波数空間におけるベクトルの関係を整理する。

まず、無限系と (分割した) クラスターの位置関係を、実空間と波数空間それぞれの格子ベクトルを用いて示す。

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{R} + \mathbf{r}_a \quad (3.72)$$

$$\mathbf{k} = \mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}} \quad (3.73)$$

格子点の数	実格子ベクトル	波数ベクトル	逆格子ベクトル
$N_c L_s$	$\mathbf{r}_i \in \gamma$	$\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \text{BZ}_\gamma$	(未定義) $\in \gamma^*$
N_c	$\mathbf{R} \in \Gamma$	$\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{K}' \in \text{BZ}_\Gamma$	$\mathbf{q}_s, \tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}}' \in \Gamma^*$

表 3.1 元の格子空間 γ と超格子空間 Γ に関するベクトルの表。ここで、クラスターの数 N_c 、クラスター内のサイト数を L_s とした。

ここで、 $\mathbf{r}_i(\mathbf{R})$ は元の格子空間 γ (超格子空間 Γ) で定義され、サイト (クラスター) の位置を指す実格子ベクトルであり、 $\mathbf{k}(\mathbf{K})$ はそれぞれ対応する波数ベクトルである。また、 \mathbf{r}_a はクラスター内で定義される実格子ベクトル、 $\tilde{\mathbf{k}}$ は超格子の逆格子空間 Γ^* で定義される逆格子ベクトルに対応している^{*11}。

次に、波数空間 BZ_γ における \mathcal{G} を考える。式 (3.72) の表記を用いると、 $\mathcal{G}_{ij}(z) = \mathcal{G}_{ab}^{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(z)$ となるので、波数 \mathbf{k} に関する Fourier 変換

$$\hat{c}_{\mathbf{R}a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_c L_s}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}a}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_a)} \quad (3.75)$$

で書き換えると、

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', z) = \frac{1}{N_c L_s} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \sum_{ab} \mathcal{G}_{ab}^{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(z) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_a)} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{R}' + \mathbf{r}_b)} \quad (3.76)$$

$$= \frac{1}{N_c L_s} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \sum_{ab} \left(\frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{Q}} \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{Q}, z) e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \right) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_a)} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{R}' + \mathbf{r}_b)} \quad (3.77)$$

$$= \frac{1}{L_s} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \sum_{ab} \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{Q}, z) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_b} \left(\frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{Q} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}} \right) \left(\frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{R}'} e^{-i(\mathbf{Q} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}'} \right) \quad (3.78)$$

$$= \frac{1}{L_s} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \sum_{ab} \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{Q}, z) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_b} \left(\frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{Q} - \mathbf{K} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{R}} \right) \left(\frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{R}'} e^{-i(\mathbf{Q} - \mathbf{K}' - \tilde{\mathbf{k}}') \cdot \mathbf{R}'} \right) \quad (3.79)$$

$$= \frac{1}{L_s} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \sum_{ab} \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{Q}, z) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_b} \delta_{\mathbf{Q}, \mathbf{K}} \delta_{\mathbf{Q}, \mathbf{K}'} \quad (3.80)$$

$$= \frac{1}{L_s} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \sum_{ab} \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{K}, z) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_b} \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \quad (3.81)$$

となる。また、 $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{K}, z)$ の波数依存部分 $V_{ab}(\mathbf{K})$ は

$$V_{ab}(\mathbf{K}) = \sum_{\mathbf{R}} V_{ab}^{0\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{R}} V_{ab}^{0\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = V_{ab}(\mathbf{k}) \quad (3.82)$$

となるので $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{K}, z) = \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{k}, z)$ が得られる。また $\delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}$ に関する変更は

$$\delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} = \sum_{s=1}^{L_s} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' - \mathbf{q}_s} \quad (3.83)$$

^{*11} 以下の関係式が成り立つ。

$$\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R} = 2\pi \times (\text{任意の整数}) \rightarrow e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R}} = 1 \quad (3.74)$$

となる。ここで

$$\mathbf{K} - \mathbf{K}' = \mathbf{k} - \mathbf{k}' + (\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{k}}) \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}_s \quad (\mathbf{q}_s \equiv \tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{k}}) \quad (3.84)$$

と定義しており、元の格子に対する BZ_γ の中に \mathbf{q}_s が L_s 個あることを反映している。よって、

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', z) = \frac{1}{L_s} \sum_{ab} \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{k}, z) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_b} \left(\sum_{s=1}^{L_s} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' - \mathbf{q}_s} \right) \quad (3.85)$$

と得られる。上式のままでは元の格子系の並進対称性が破れているため、波数 \mathbf{k} に対して Green 関数の非対角な要素 ($\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$) が表れる。並進対称性を近似的に回復させるべく、対角要素 $\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ のみに制限する ($\mathbf{q}_s = \mathbf{0}$ のみ残す) 近似をする。したがって、

$$\mathcal{G}_{\text{CPT}}(\mathbf{k}, z) = \frac{1}{L_s} \sum_{ab} \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{k}, z) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} \quad (3.86)$$

$$\begin{cases} \mathbf{k} \in BZ_\gamma \\ z = \omega + i\eta \\ L_s : \text{クラスター内のサイト数} \\ \mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b : \text{クラスター内のサイトの位置ベクトル} \\ \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{k}, z) = [\mathbf{G}_{t', U}(z) (\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{k}) \mathbf{G}_{t', U}(z))^{-1}]_{ab} \end{cases} \quad (3.87)$$

のように CPT Green 関数が得られる^{*12}。

CPT Green の関数を用いると、一粒子励起スペクトル $A(\mathbf{k}, \omega)$ と状態密度 $\rho(\omega)$ は

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} \mathcal{G}_{\text{CPT}}(\mathbf{k}, z = \omega + i\eta) \quad (3.88)$$

$$\rho(\omega) = \sum_{\mathbf{k} \in BZ_\gamma} A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k} \in BZ_\gamma} \text{Im} \mathcal{G}_{\text{CPT}}(\mathbf{k}, z = \omega + i\eta) \quad (3.89)$$

と与えられる。ここで、 η はブロードニングの値で、外挿を行なうことで一粒子スペクトルは正確に求まる。

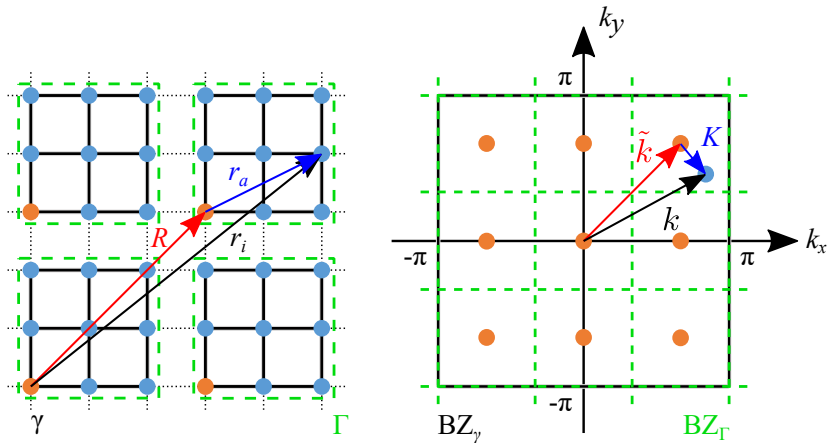


図 3.5 (左) 実空間におけるベクトルの関係、(右) 波数空間におけるベクトルの関係

*12 副格子や多軌道系の場合は、それぞれの副格子や軌道ラベルごとに左辺を計算した後に和をとることに注意する。

第 4 章

計算結果

この章では、TPQ 計算における各種物理量の平均値と分散から収束精度の検証と、TPQ を少数サイトソルバーに採用した有限温度 VCA および CPT の計算結果を示す。計算対象は、1 次元 Hubbard 模型の Mott 転移と 2 次元正方格子 Hubbard 模型の無秩序相から反強磁性相への相転移である。はじめに、本研究で扱う Hubbard 模型のハミルトニアンを紹介する。次に 1 次元鎖に関して、比熱と実軸上の Green 関数に対する TPQ 計算の収束検証を行い、CPT による一粒子励起スペクトルと状態密度の結果を解説する。次に 2 次元正方格子に関して、グラウンドポテンシャルと有限温度 VCA の積分経路上の Green 関数に対する TPQ 計算の収束検証を行う。そして、有限温度 VCA によるグラウンドポテンシャルの Weiss 場依存性を 8、10、12 サイトのクラスターごとに示す。また、CPT による一粒子励起スペクトルと状態密度の結果も解説する。

4.1 Hubbard 模型と参照系

本研究で扱う模型は、以下の式で与えられる Hubbard 模型である。

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{t,U} + \hat{\mathcal{H}}'_{AF} \quad (4.1)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{t,U} = t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \quad (4.2)$$

$$\hat{\mathcal{H}}'_{AF} = h' \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}), \mathbf{Q} = (\pi, \pi) \quad (4.3)$$

ここで、 $\hat{\mathcal{H}}'_{AF}$ は反強磁性秩序相の変分ハミルトニアンであり、 $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ はそのときの秩序ベクトルである。図 (4.1) に、参照系の一覧の図 (正方格子) を示す。

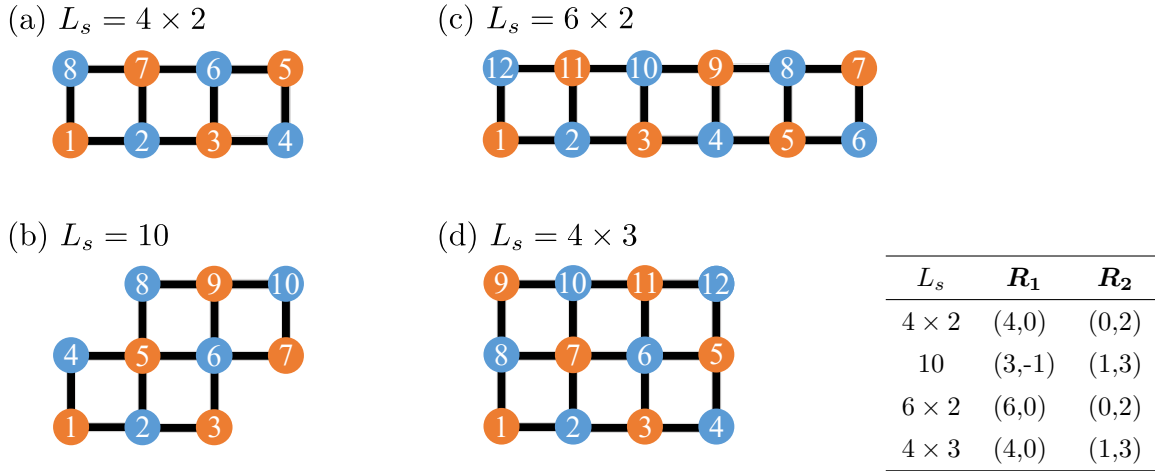


図 4.1 2次元正方形格子における参照系の模式図と超格子基本並進ベクトル。ただし、実空間における最近接格子間の長さを $a = 1$ として、基本並進ベクトルは $\mathbf{a}_1 = (1, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (0, 1)$ である。

4.2 1次元鎖に関する解析

1次元鎖 (OBC), $U/t = 8$, half-filling を $L_s = 8, 10, 12$ について gTPQ state を用いて計算する。

4.2.1 TPQ 計算の収束検証 (比熱と実軸上 Green 関数)

まず、静的物理量に関して、TPQ 計算のサンプル数を増やした時の平均値の収束を 8 サイトと 12 サイトで検証した (図 4.2)。8 サイトは完全対角化が可能のため厳密解として比較した。温度依存性を見ると、TPQ の各サンプル値は厳密解から外れた値になっているが、平均処理をした後の $\langle C \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens(g)}}$ は図の y 軸スケールだと厳密解に十分収束しているように見える。温度ごとの平均値のサンプル数依存性をみると、8 サイトの $T/t = 0.2$ では 1000 サンプル平均をとっても平均値は厳密解から離れているが、 $T/t = 1.0$ の高温になると急速に厳密解に近づいていることがわかる。この振る舞いは 12 サイトでも同様であり、一般に温度が高くなるかサイト数が大きくなると、少ないサンプル数で収束することが分かる。これは図 (4.3) の分散と $e^{-S(\beta^*)}$ のサイト数依存性からもわかる。 $e^{-S(\beta^*)}$ は Chebyshev の不等式の右辺に現れる量であり、低温で分散が急激に大きくなることを示唆している。

次に、CPT による一粒子励起スペクトルの計算に必要な実軸上の Green 関数を検証する。8 サイトのクラスターに関して、完全対角化法と TPQ+Lanczos 法による 2 パターンで Green 関数を計算し比較している。ここではサンプル数ではなく Lanczos 展開数による収束性をみる。Lanczos 展開 $N_L = 10 \sim 100$ の平均値と厳密解の比較した結果が図 4.4 である。 $T/t = 0.1$ をみると $N_L = 50$ でほぼ収束していることがわかる。一方、 $T/t = 1.0$ では $N_L = 100$ にしてようやく厳密解に収束している。 G_{13} 成分の方が収束具合が分かりやすい。よって、TPQ+Lanczos 法による実空間 Green 関数の計算では、高温になるほど Lanczos 展開数を大きくする必要があることがわかる。本研究で調べた温度は $T/t = 2.0$ であるため、高温の展開数に合わせてそれ以下の温度も $N_L = 100$ を採用した。

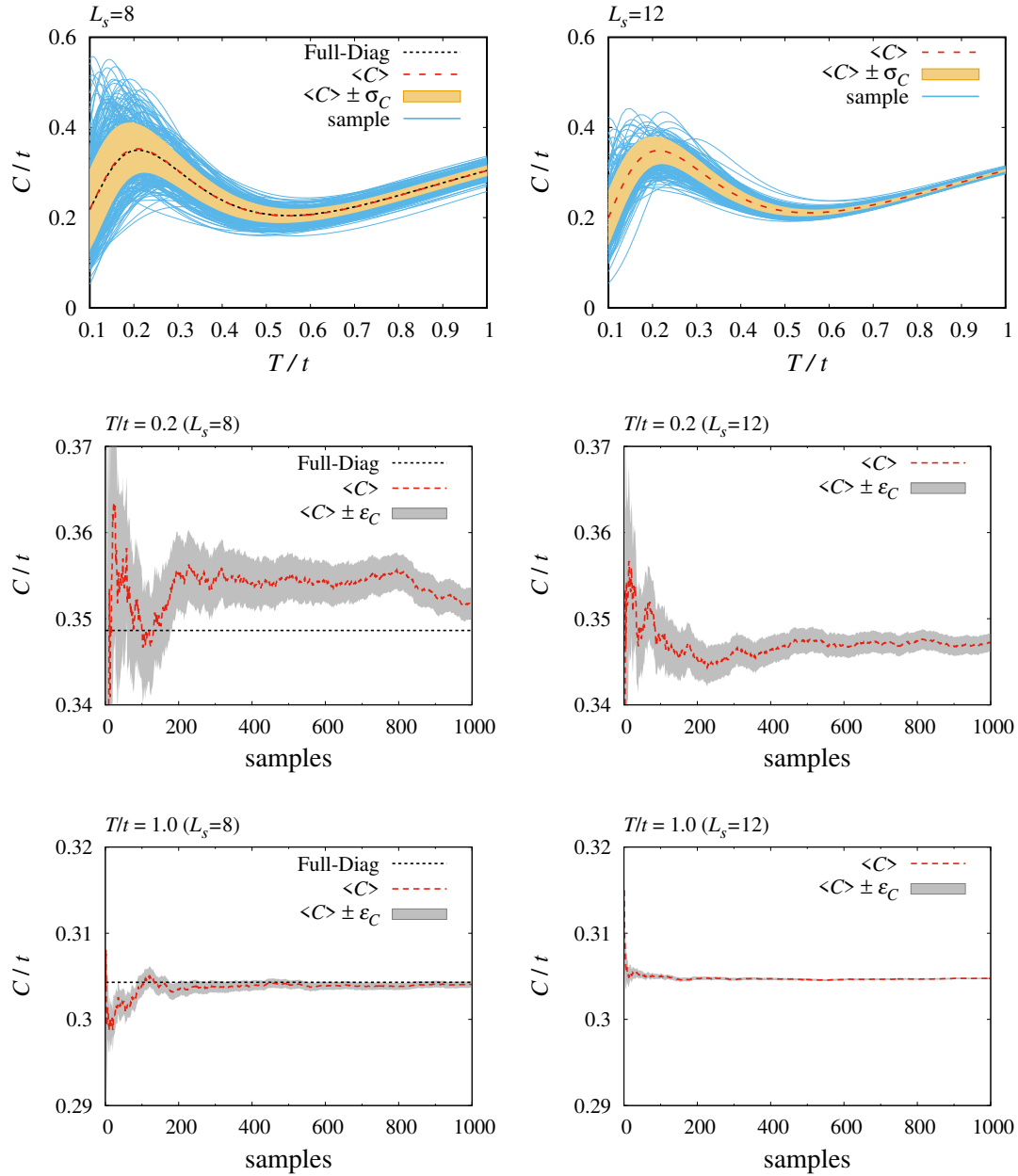


図 4.2 1次元鎖 (OBC), サイト当たりの比熱のサンプル平均 $\langle C \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens(g)}}$ と標準偏差のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 8$, 右側が $L_s = 12$. 黒線は完全対角法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

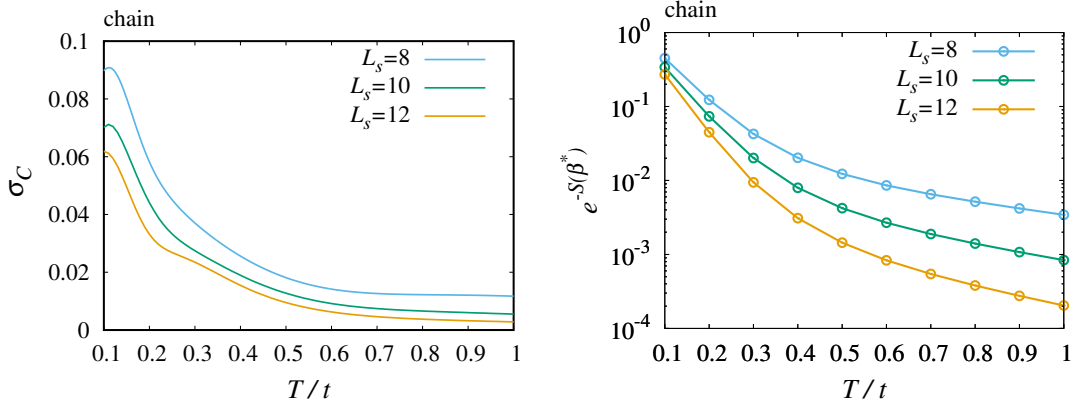


図 4.3 1次元鎖 (OBC), サイトあたりの比熱の分散と $e^{-S(\beta^*)}$ の温度依存性.

4.2.2 一粒子励起スペクトルと状態密度

次に、CPT と組み合わせた TPQ+Lanczos 法の妥当性を示すために、さまざまな温度 における half-filling での 1 次元 Hubbard 模型の一粒子励起スペクトルの photoemission part $A^-(\mathbf{k}, \omega)$

$$A^-(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} \mathcal{G}_{\text{CPT}}^-(\mathbf{k}, z = \omega + i\eta) \quad (4.4)$$

$$\mathcal{G}_{\text{CPT}}^-(\mathbf{k}, z) = \frac{1}{L_s} \sum_{ab} \mathcal{G}_{ab}^-(\mathbf{k}, z) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} \quad (4.5)$$

$$\mathcal{G}_{ab}^-(\mathbf{k}, z) = \left[\mathbf{G}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}^-(z) \left(\mathbf{I} - \mathbf{V}(\mathbf{k}) \mathbf{G}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}^-(z) \right)^{-1} \right]_{ab} \quad (4.6)$$

を計算する。ここで $\mathbf{G}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}^-(z)$ の成分は式 (2.126) の $G_{ij}^-(z)$ で与えられる。本研究では $\eta/t = 0.1$ とする。 $L_s = 8, 10, 12$ の結果を図 4.9 に示す。 $L_s = 8$ のソルバーは完全対角化、 $L_s = 10, 12$ のソルバーは TPQ+Lanczos 法を用いた。これらは有限温度の時間依存密度行列繰り込み群法 (tDMRG) によって得られた結果 [48] と比較すると、有限サイズ効果が多少残るがサイト数を大きくしていくことで十分一致していると言える。低温では、スピン電荷分離 [49] によって引き起こされるスピノンとホロンの分散が現れ、温度が上がると、スピノンの分散は徐々に消え、ホロンの分散は残っているのがわかる。また、熱励起された電子が上部 Hubbard バンドに入り、フェルミレベルを超えるスペクトルウェイトが出現している。したがって、TPQ+Lanczos 法と CPT を組み合わせは非常にうまく機能していると言える。

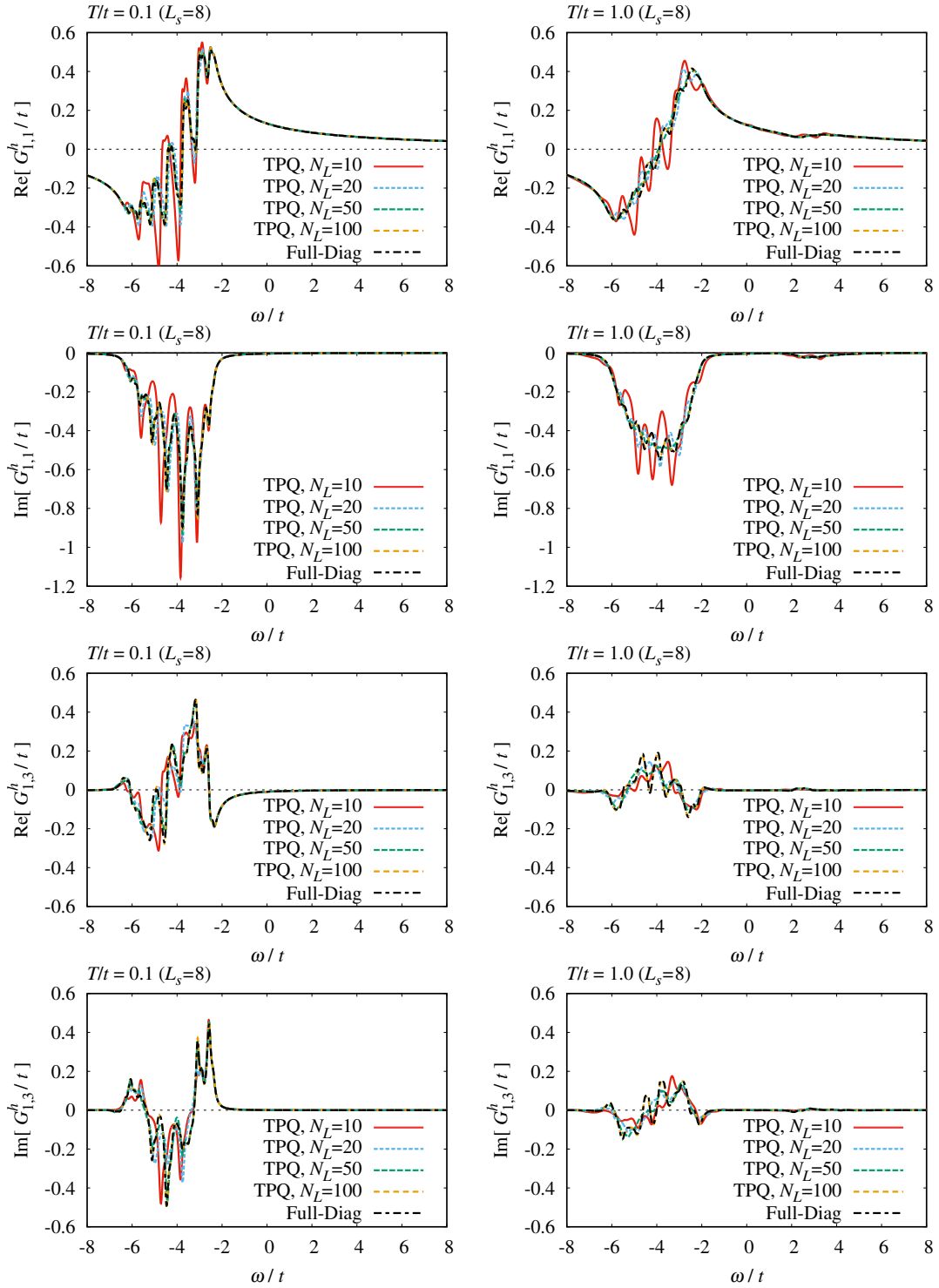


図 4.4 1次元鎖 (OBC), 実軸上の Green 関数 G_{11} 成分と G_{13} 成分. $\eta/t = 0.1$. 黒線は完全対角化法による厳密解. Lanczos 展開数は $N_L = 10, 20, 50, 100$, サンプル平均の数は全て 300 個とした.

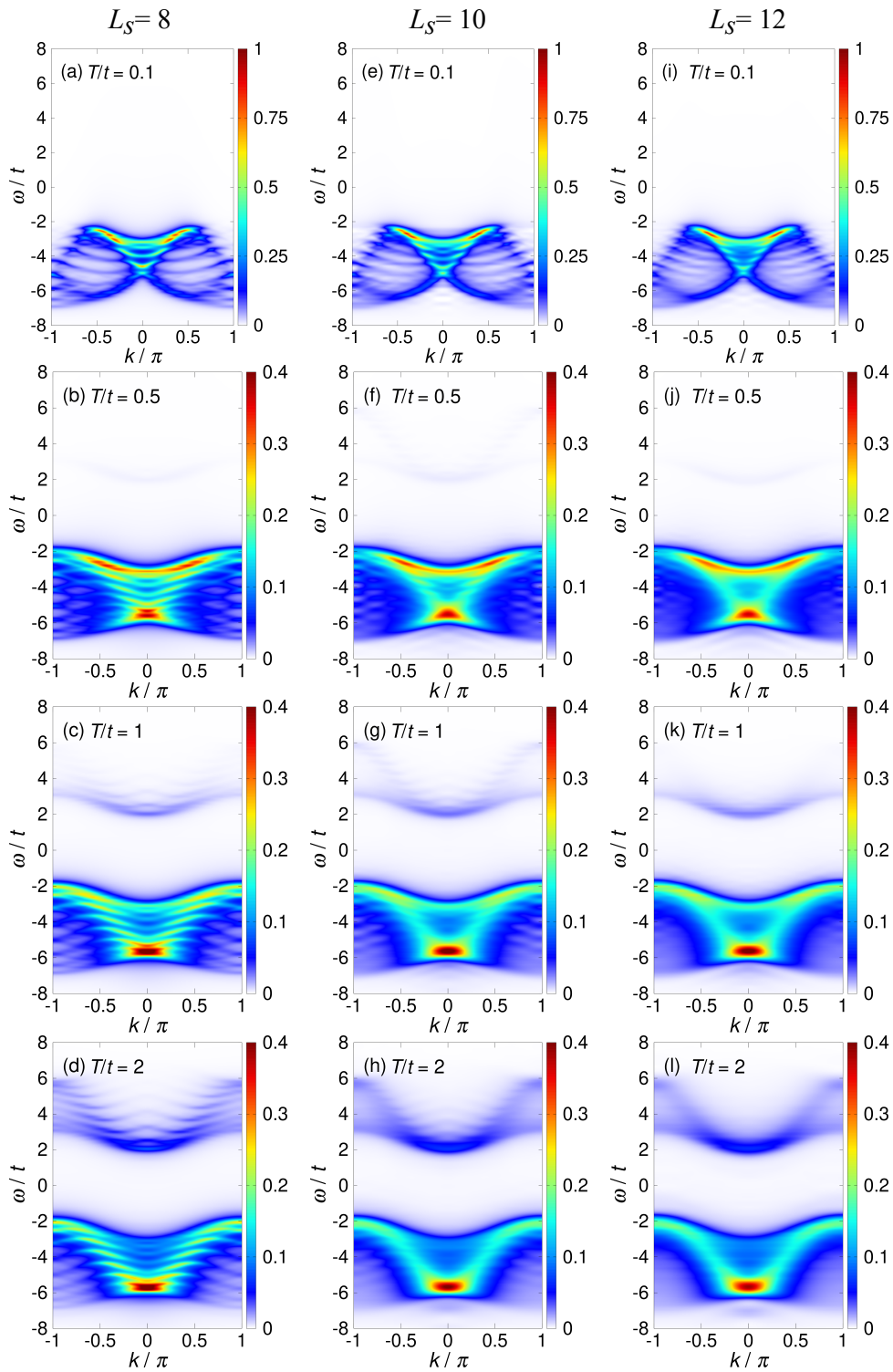


図 4.5 CPT による 1 次元 Hubbard 模型の一粒子励起スペクトルの photoemission part. 左側から順に $L_s = 8, 10, 12$. $\eta/t = 0.1$. 各温度は (a),(e),(i) $T/t = 0.1$, (b),(f),(j) $T/t = 0.5$, (c),(g),(k) $T/t = 1$, (d),(h),(l) $T/t = 2$. 少数サイトソルバーとして $L_s = 8$ は完全対角化法, $L_s = 10, 12$ は TPQ+Lanczos 法を採用した. Lanczos 展開数は $N_L = 100$, TPQ 計算のサンプル数は $L_s = 10$ は 200 個, $L_s = 12$ は 10 個とした.

4.3 2次元正方格子に関する解析

2次元正方格子 (OBC), $U/t = 8$, half-filling を $L_s = 4 \times 2, 10, 4 \times 3$ について gTPQ state を用いて計算する。

4.3.1 TPQ 計算の収束検証 (グラウンドポテンシャルと積分経路上 Green 関数)

1次元の場合と同様に、まず静的物理量に関して、TPQ 計算のサンプル数を増やした時の平均値の収束を 8 サイトと 12 サイトで検証した (図 4.6)。振る舞いは 1次元系と同じく厳密解に収束していく。今計算しているのは VCA 計算で使用する参照系のグラウンドポテンシャルである。VCA ではグラウンドポテンシャルの Weiss 場依存性から鞍点を探索するため、グラウンドポテンシャルに要求される精度は最低でも少数第 3,4 位は必要である。そう考えると 12 サイトでは少なくとも 300 から 400 サンプルは必要である。サイトごとのグラウンドポテンシャルの分散と $e^{-S(\beta^*)}$ の振る舞いは 1次元と同様で、当然サイト数が大きい方が小さくなる。

次に、有限温度 VCA における積分経路上の Green 関数に関して検証を行う。こちらも 1次元系と同様に 8 サイトと 12 サイトで検証する。この経路では Green 関数の値が緩やかに変化するため、Lanczos 展開数は少なくとも厳密解に一致し、サンプル数も小さい値で収束している。8 サイトでは $N_L = 15$ 、12 サイトでは $N_L = 20$ で収束しており、厳密解と十分一致している。図の左側は松原周波数のため点でプロットしている。標準誤差は原点付近しか大きくならない。

4.3.2 グラウンドポテンシャルと物理量

まず、8 サイトと 10 サイトに関して、有限温度 VCA における少数サイト系のソルバーを、TPQ+Lanczos 法と完全対角化 (Block Lanczos) 法にした際の結果を比較したのが図 4.9 である。計算コストの面から、サンプル平均に使用するサンプル数はグラウンドポテンシャルと Green 関数で異なる値にしている。図をみると TPQ による平均値が厳密解と誤差の範囲で一致していることがわかる。また、 h'/t が大きい領域では分散も大きくなっている。これは Weiss 場による局在化で、TPQ state を構成する主要な状態が減ったためだと考えられる。サイト数が大きくなると、精度に必要なサンプル数が少なくて済んでいる。

次に、12 サイトに関して、図 4.10(a) および 4.10(b) は、 $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ の反強磁性に対する Weiss 場の関数としてのグラウンドポテンシャルを示しており、 $U/t = 8$ における half-filling の正方格子 Hubbard 模型に対して計算している。図 4.10(a) および 4.10(b) の挿入図に示されているサイズ $L_s = 12$ の 2つの異なるクラスターを用いている。グラウンドポテンシャルは有限の Weiss 場 h' で最小値をもつので、反強磁性秩序が発現していることがわかる。温度の関数として計算された磁気モーメントを図 4.10(c) に示す。この図から、転移温度 $T_N/t = 0.28$ の 2次相転移だとわかる。ここで、Mermin-Wagner-Hohenberg の定理 [50, 51] によると、有限温度における 2次元系では連続対称性の自発的な破れは禁止されており、上の結果はこの定理と矛盾している。これは、元の格子のクラスターが長距離相関を遮断し、クラスターサイズを超える相関は Weiss 場の対称性を明示的に破る平均場近似レベルでのみ処理されるためである。この状況を反映して、クラスターサイズが大きくなるにつれて転移温度は低下する [16]。

VCA の利点は、熱力学関数 $\Omega(T)$ を近似を用いて直接計算できることである。これにより、 $S(T) = -d\Omega/dT$ および $C(T) = T(dS/dT)$ で与えられる系のエントロピーおよび比熱を計算できる。図 4.10(d) および 図 4.10(e) は、それぞれ系のエントロピーおよび比熱の温度依存性の結果を示す。これは $U/t = 8$ に

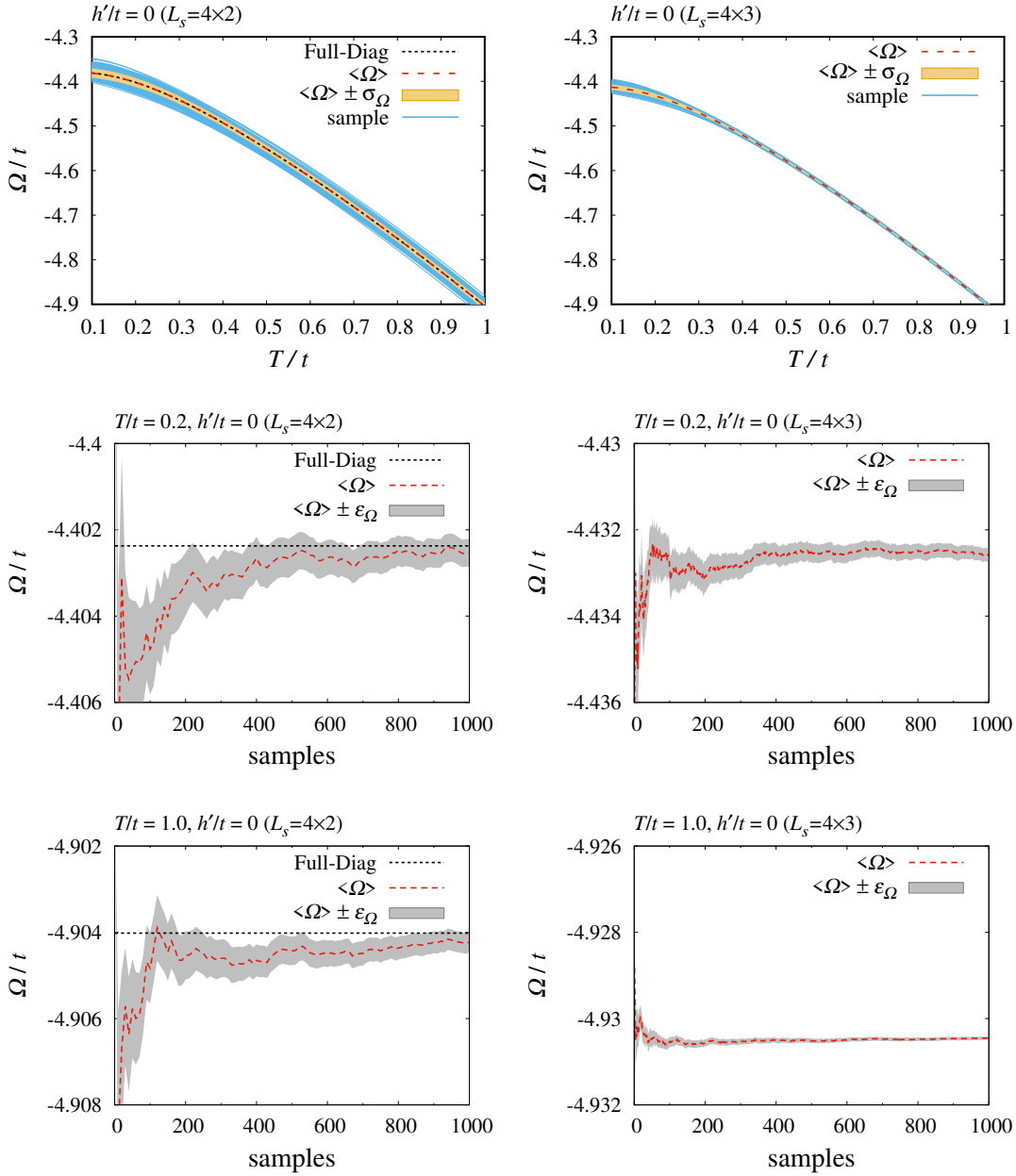


図 4.6 2次元正方格子 (OBC), サイト当たりのグラウンドポテンシャルのサンプル平均 $\langle \Omega \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens(g)}}$ と標準偏差のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 4 \times 2$, 右側が $L_s = 4 \times 3$. 黒線は完全対角法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

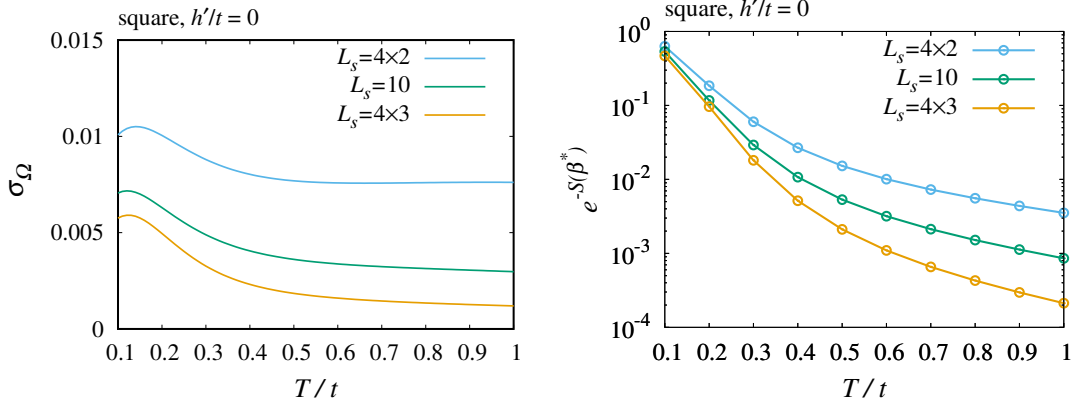


図 4.7 2次元正方形格子 (OBC), サイトあたりのグランドポテンシャルの分散と $e^{-S(\beta^*)}$ の温度依存性.

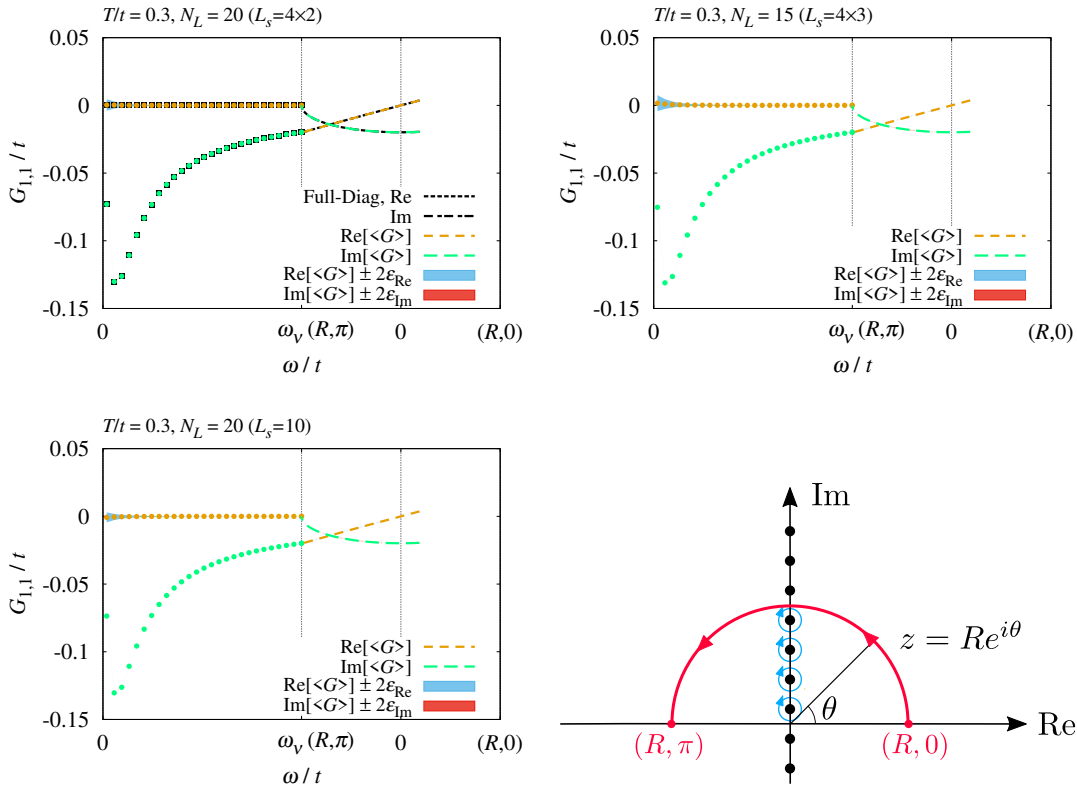


図 4.8 2次元正方形格子 (OBC), 一粒子 Green 関数 G_{11} 成分. カットオフ $R = 50$ とした. 黒線は完全対角化法による厳密解. $L_s = 4 \times 2$, $N_L = 20$, サンプル数は 300 個, $L_s = 10$, $N_L = 15$, サンプル数は 200 個, $L_s = 4 \times 3$, $N_L = 15$, サンプル数は 45 個とした. 積分経路の区間 $0 \leq \theta < \pi/2$ では, 温度によって Fermi 分布関数が微小となる区間の計算を省略した.

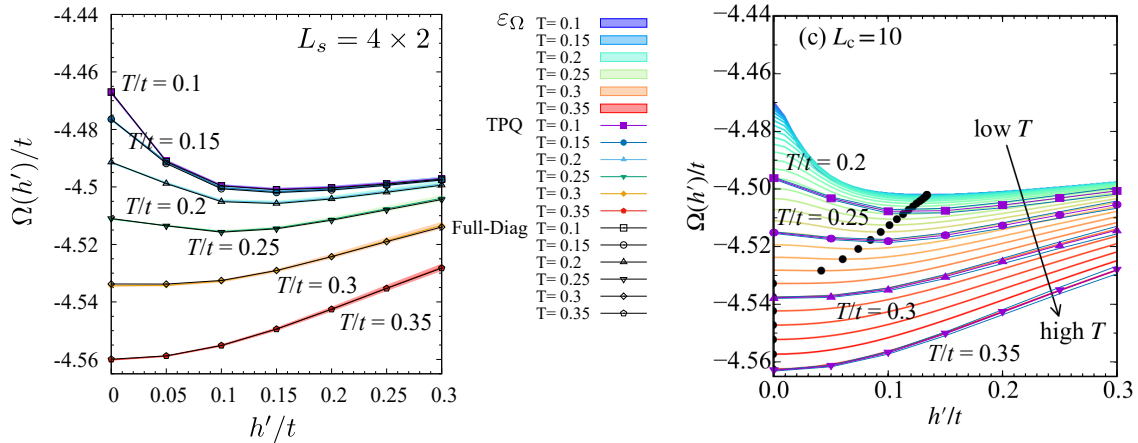


図 4.9 有限温度 VCA による 2 次元正方格子 ($L_s = 4 \times 2, 10$) のグランドポテンシャルと Weiss 場の温度依存性. Green 関数の計算手法として, 完全対角化法と TPQ+Lanczos 法の結果を比較. Lanczos 法の展開数を $N_L = 20$ に設定. (左図) $L_s = 4 \times 2$, TPQ state のサンプル数について, Ω' の計算は 1000 個, Green 関数の計算では 300 個とした. (右図) $L_s = 10$, TPQ state のサンプル数について, Ω' の計算は 500 個, Green 関数の計算では 200 個とした. $T/t = 0.2, 0.25, 0.3, 0.35$ の平均値を紫点, 標準誤差 $\Omega \pm \varepsilon_\Omega$ を青線で表した. 背面の図は, 先行研究 [16] による同一クラスターの結果.

における half-filling の正方格子 Hubbard 模型に対して計算している。エントロピーの急激な減少は、比熱のジャンプに関連する転移温度以下で発生することがわかる。これらの動作は、文献 [16], の結果と一致しており、TPQ と VCA の組み合わせは、相転移が発生するシステムの熱力学量を計算する強力な手法だと言える。

4.3.3 一粒子励起スペクトルと状態密度

最後に、上記と同じモデルを想定して、TPQ と VCA を組み合わせた一粒子励起スペクトルの温度依存性を計算する。結果は、図 4.11(a)-(d) であり、状態密度は図 4.11(e) となる。エネルギーギャップは転移温度の上下両方で開くため、システムは全温度範囲で絶縁体となる。バンドの分散は、相転移点で大きくは変化しない [図 4.11(b) および 4.11(c) を参照]。また、多くのダブロン状態が熱励起によって作成されるため、非常に高い温度でエネルギーギャップが徐々に小さくなることもわかる。これらの結果は、広い温度範囲にわたる Mott ギャップの動作を示している。

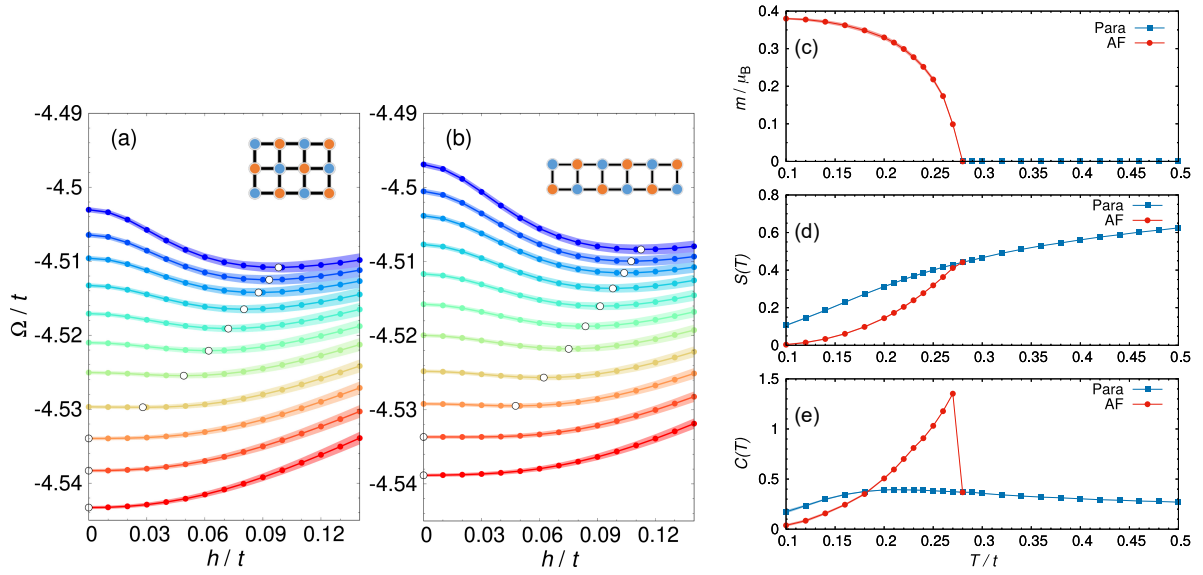


図 4.10 $T/t = 0.2$ (青線) から 0.3 (赤線) までの温度ごとの反強磁性 Weiss 場 h' に対するグランドポテンシャルの振る舞い (0.01 間隔). 正方格子 Hubbard 模型を $U/t = 8$ とし, 右上に挿入されている形状が 12 サイトのクラスターに対応する. 線の幅は, TPQ state のランダムサンプリングからの分散を示す. 白い丸は, グランドポテンシャルが最小値をとるポイントを表す. TPQ state のランダムサンプリングの数は, Ω' の計算は 300 個, Green 関数の計算では 45 個とした. (c,d,e) 常磁性 [Para] および反強磁性 [AF] 相の秩序変数 m , エントロピー S , および比熱 C の温度依存性, (a) の挿入図に示されている $L_s = 4 \times 3$ のクラスターを採用.

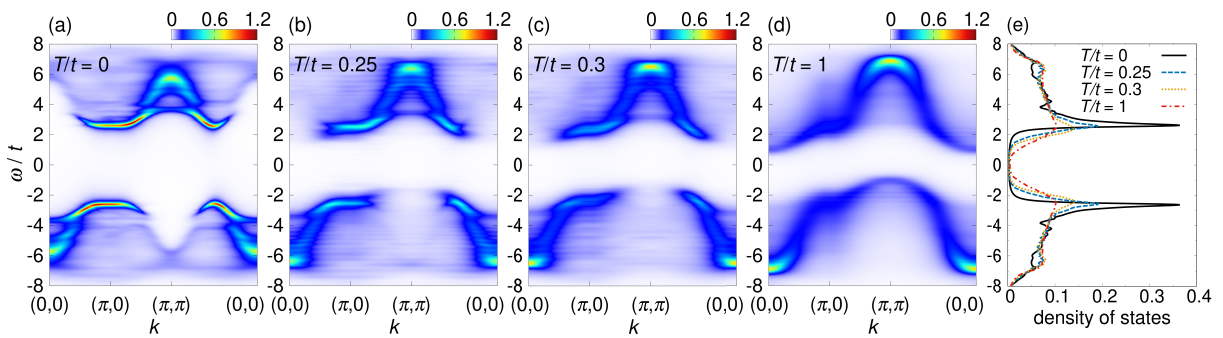


図 4.11 反強磁性転移温度 $T_N/t = 0.28$ 付近の $U/t = 8$ における正方格子 Hubbard 模型の一粒子励起スペクトル $A(\mathbf{k}, \omega)$. $\eta/t = 0.1$. 各温度は (a) $T/t = 0$, (b) $T/t = 0.25$, (c) $T/t = 0.3$, (d) $T/t = 1$. (e) は各温度の状態密度. $L_s = 4 \times 3$ のクラスターを採用. TPQ 計算はサンプル数 10 個で平均化した.

4.4 追加データ

TPQ 計算の収束検証に関して、これまでのパラメータ以外のデータがあるので載せておく。

[計算対象]

- 静的物理量 : E, Ω, S, C (温度依存性とサンプル平均数の依存性)
 - 1次元鎖 (OBC), $L_s = 8, 12, U/t = 8, T = 0.1, 0.2, 1.0$
 - 2次元正方格子 (OBC), $L_s = 4 \times 2, 4 \times 3, U/t = 8, h'/t = 0, T = 0.1, 0.2, 1.0$
 - 2次元正方格子 (OBC), $L_s = 4 \times 2, 4 \times 3, U/t = 8, h'/t = 0.1, T = 0.1, 0.2, 1.0$

[平均値と分散について]

- 誤差の範囲で厳密解と TPQ は一致する。
- 同じサンプル数での分散は低温になるほど大きくなる。ただし、内部エネルギーとグラウンドポテンシャルは絶対零度付近になると逆に小さくなる。
- サイト数が大きくなると平均値の収束が早まる。少ないサンプル数で済む。
- Weiss 場が入ると分散は大きくなる。局在化によって TPQ state を構成する主要な状態の減少によるものだと考える。

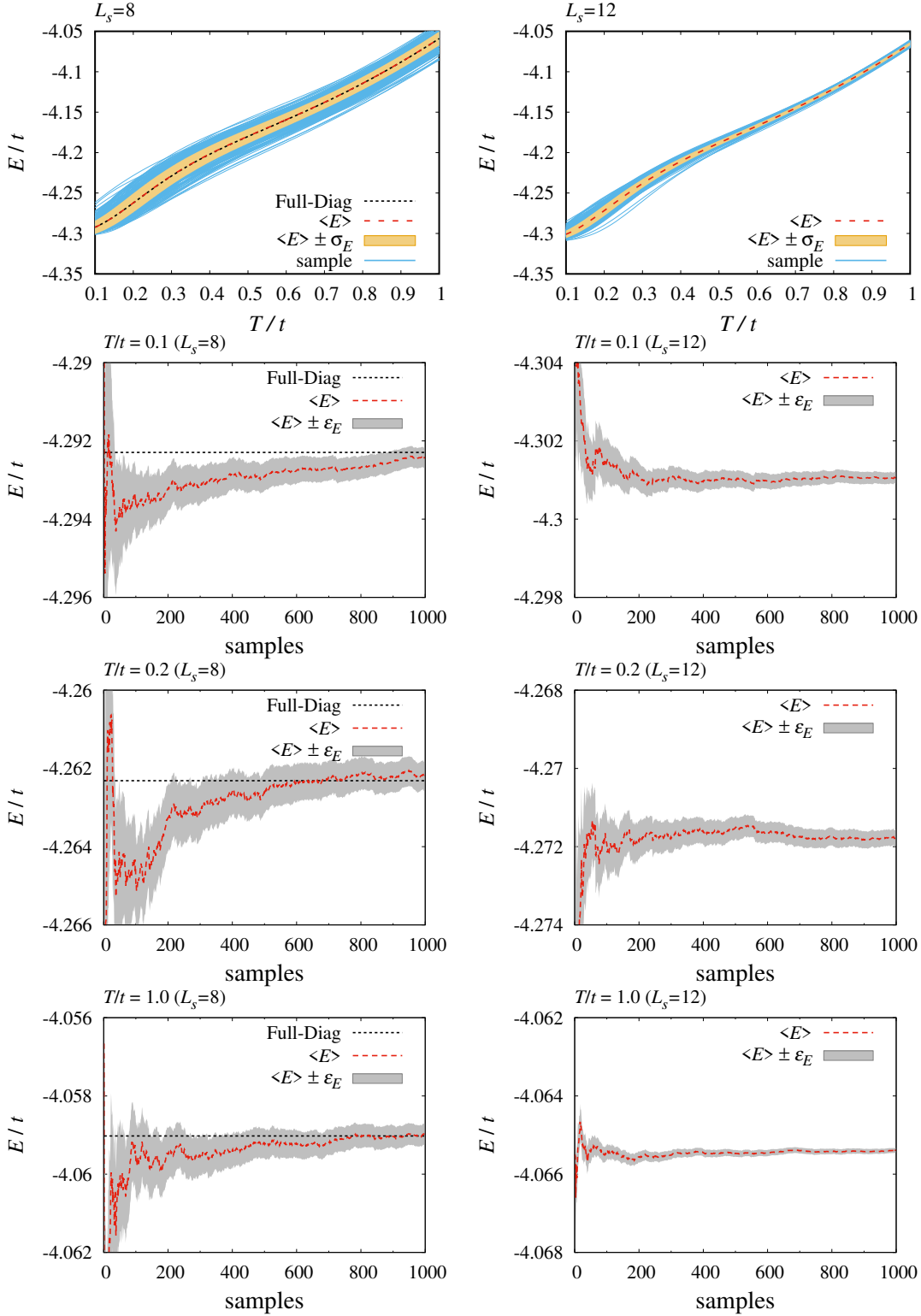


図 4.12 1次元鎖 (OBC), サイト当たりのエネルギーのサンプル平均 $\langle E \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}(g)}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 8$, 右側が $L_s = 12$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

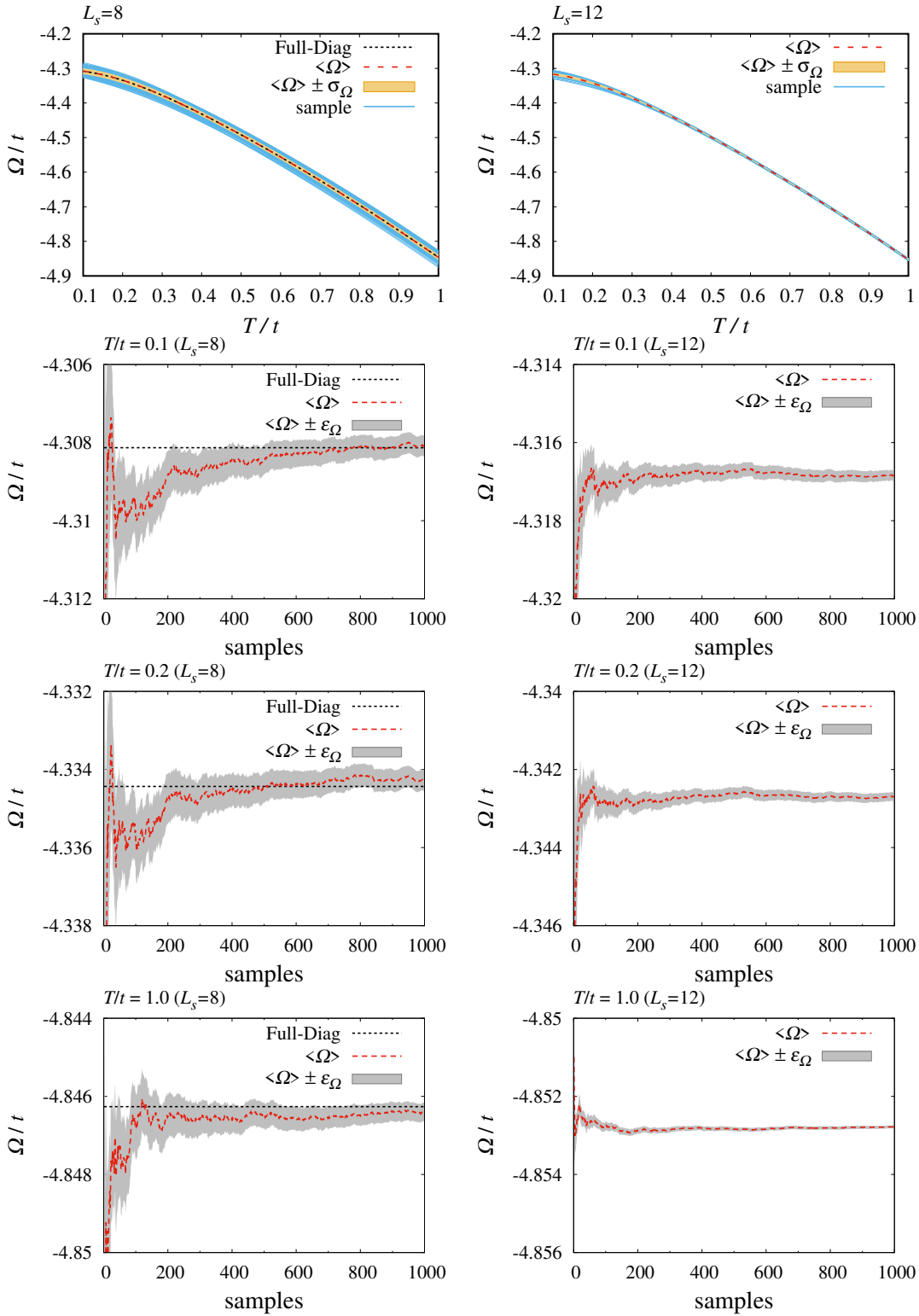


図 4.13 1次元鎖 (OBC), サイト当たりのグラウンドポテンシャルのサンプル平均 $\langle \Omega \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}(g)}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 8$, 右側が $L_s = 12$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

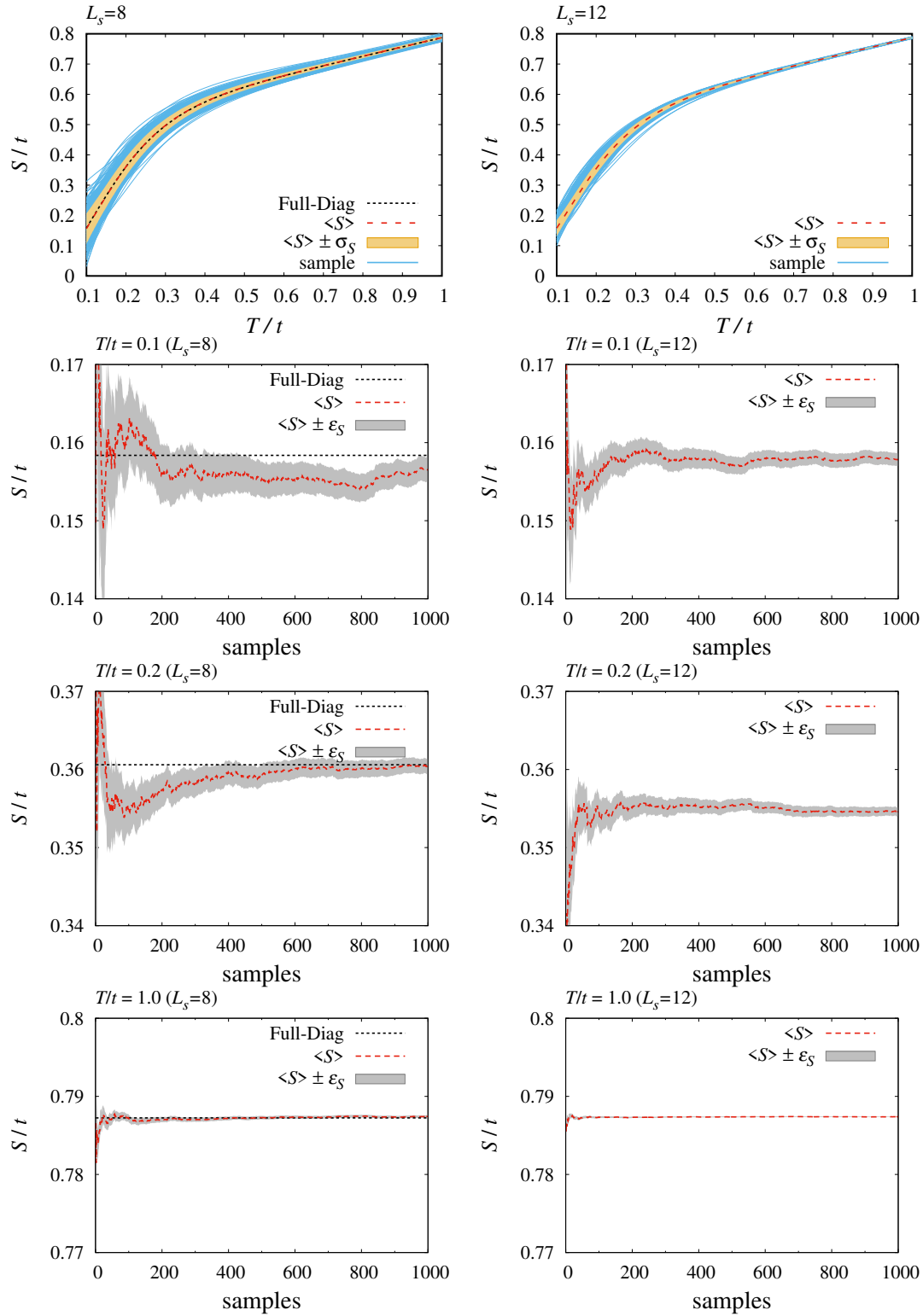


図 4.14 1次元鎖 (OBC), サイト当たりのエントロピーのサンプル平均 $\langle S \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}(\mathbf{g})}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 8$, 右側が $L_s = 12$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

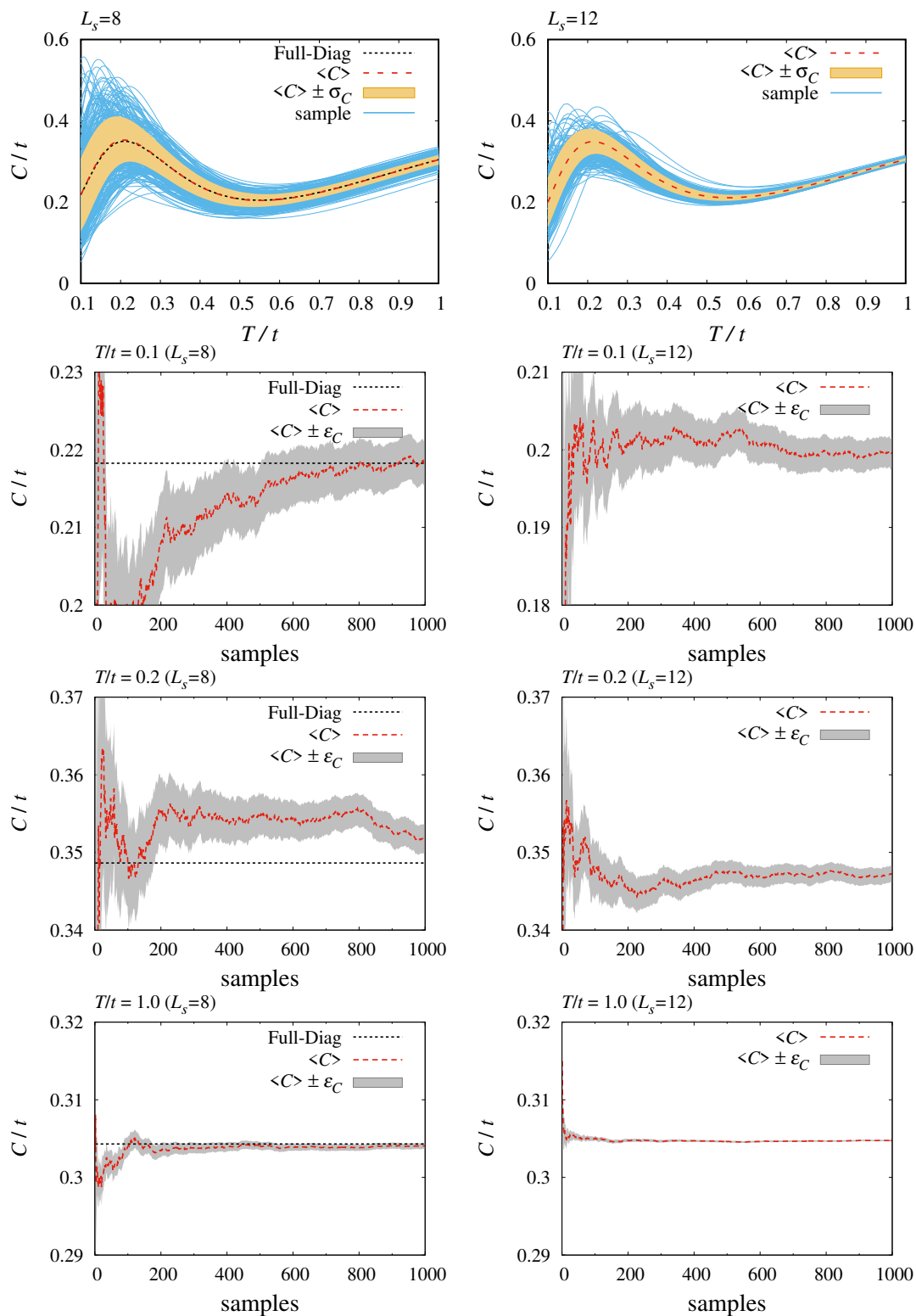


図 4.15 1次元鎖 (OBC), サイト当たりの比熱のサンプル平均 $\langle C \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}(g)}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 8$, 右側が $L_s = 12$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

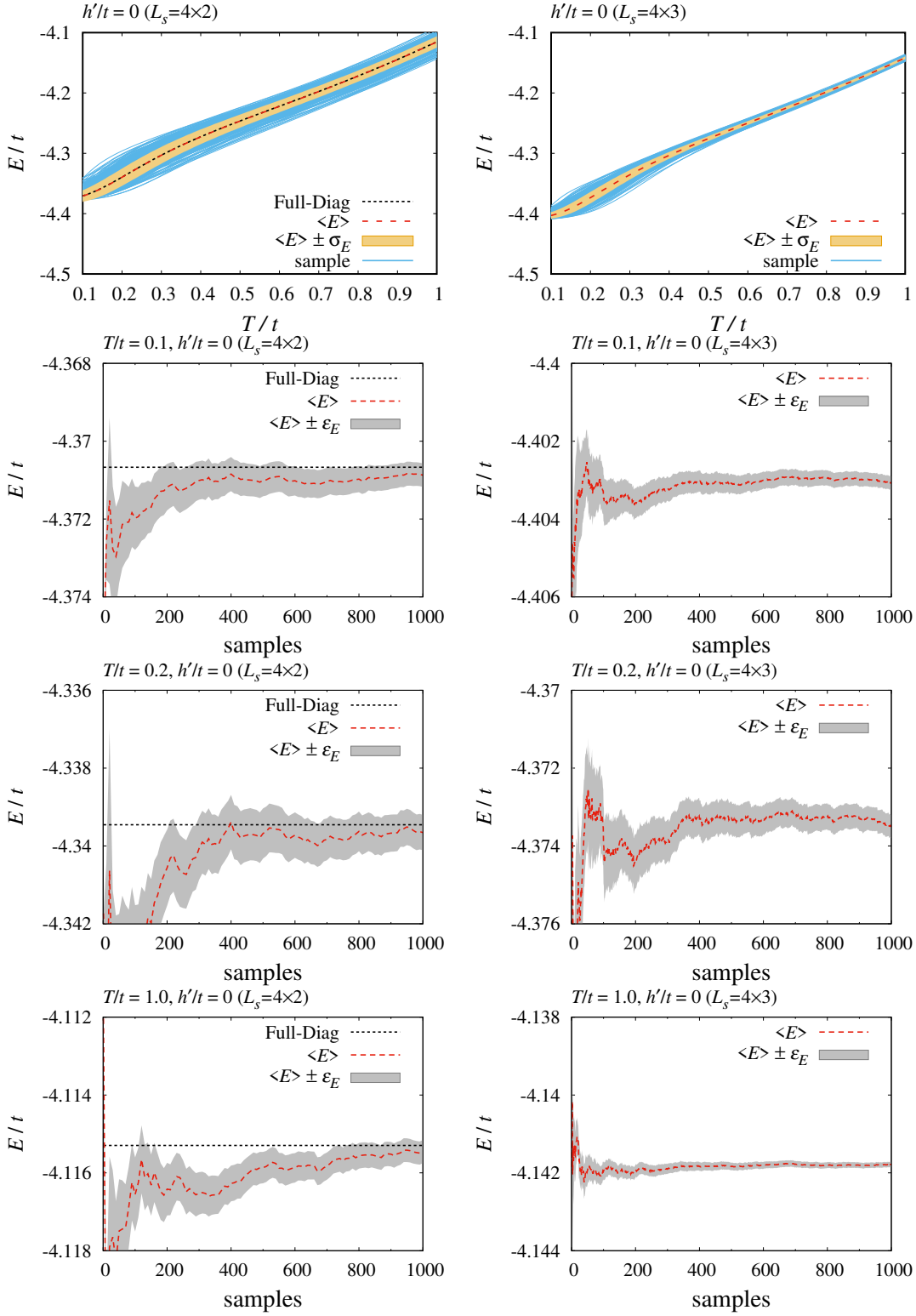


図 4.16 2次元正方格子 (OBC), $h'/t = 0$, サイト当たりのエネルギーのサンプル平均 $\langle E \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens(g)}}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 4 \times 2$, 右側が $L_s = 4 \times 3$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

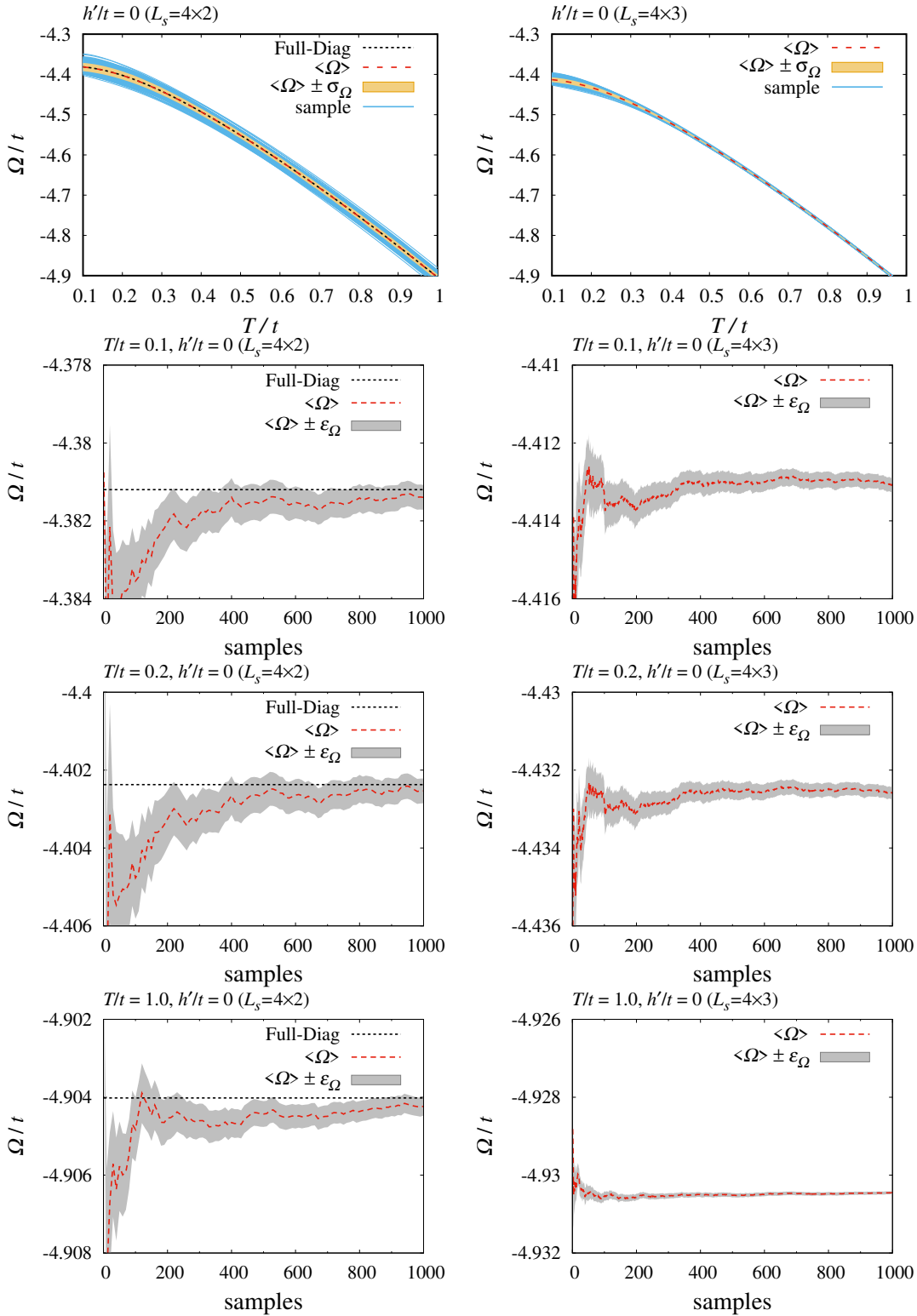


図 4.17 2次元正方格子 (OBC), $h'/t = 0$, サイト当たりのグラウンドポテンシャルのサンプル平均 $\langle \Omega \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}(g)}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 4 \times 2$, 右側が $L_s = 4 \times 3$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

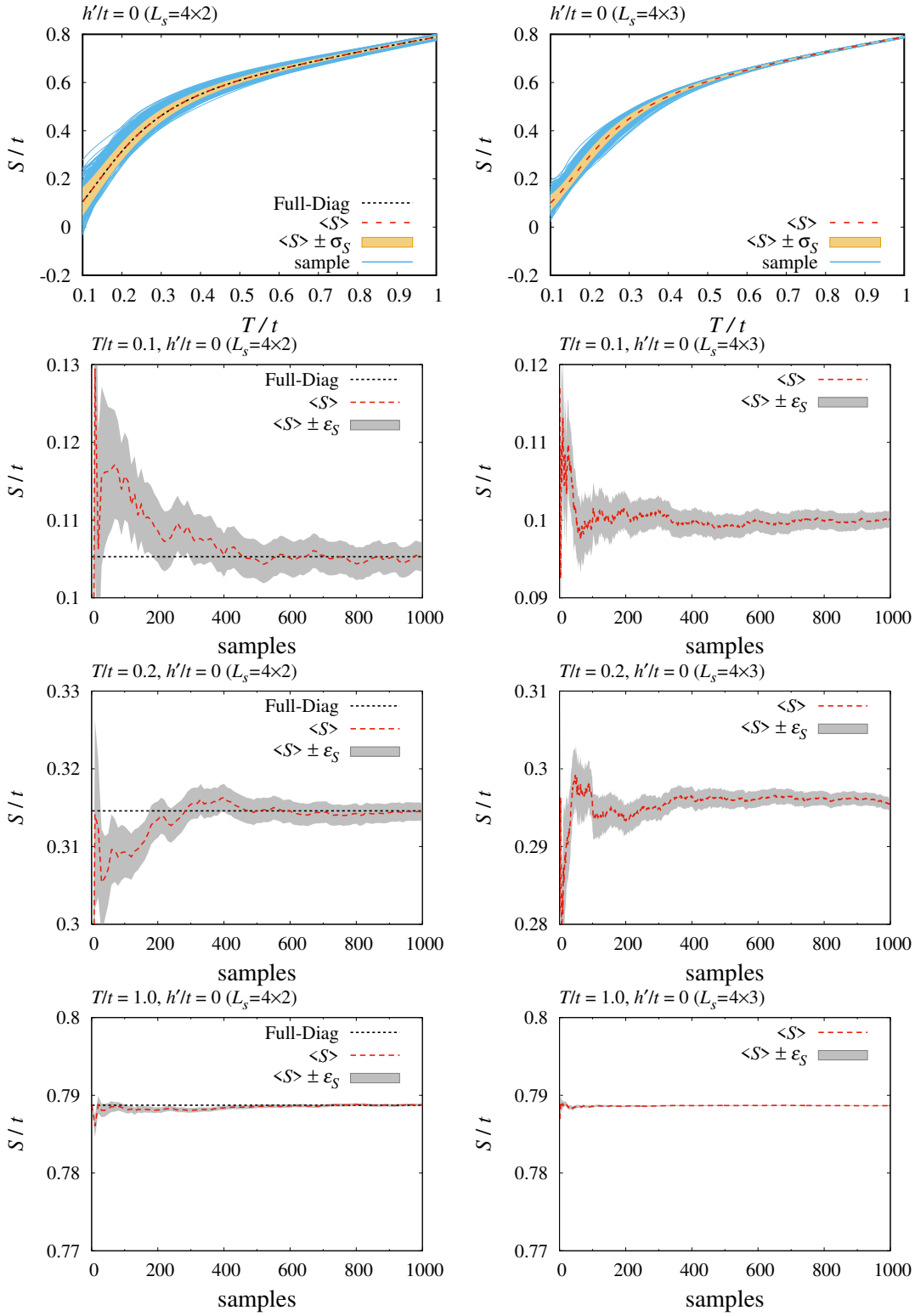


図 4.18 2次元正方格子 (OBC), $h'/t = 0$, サイト当たりのエントロピーのサンプル平均 $\langle S \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}(g)}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 4 \times 2$, 右側が $L_s = 4 \times 3$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

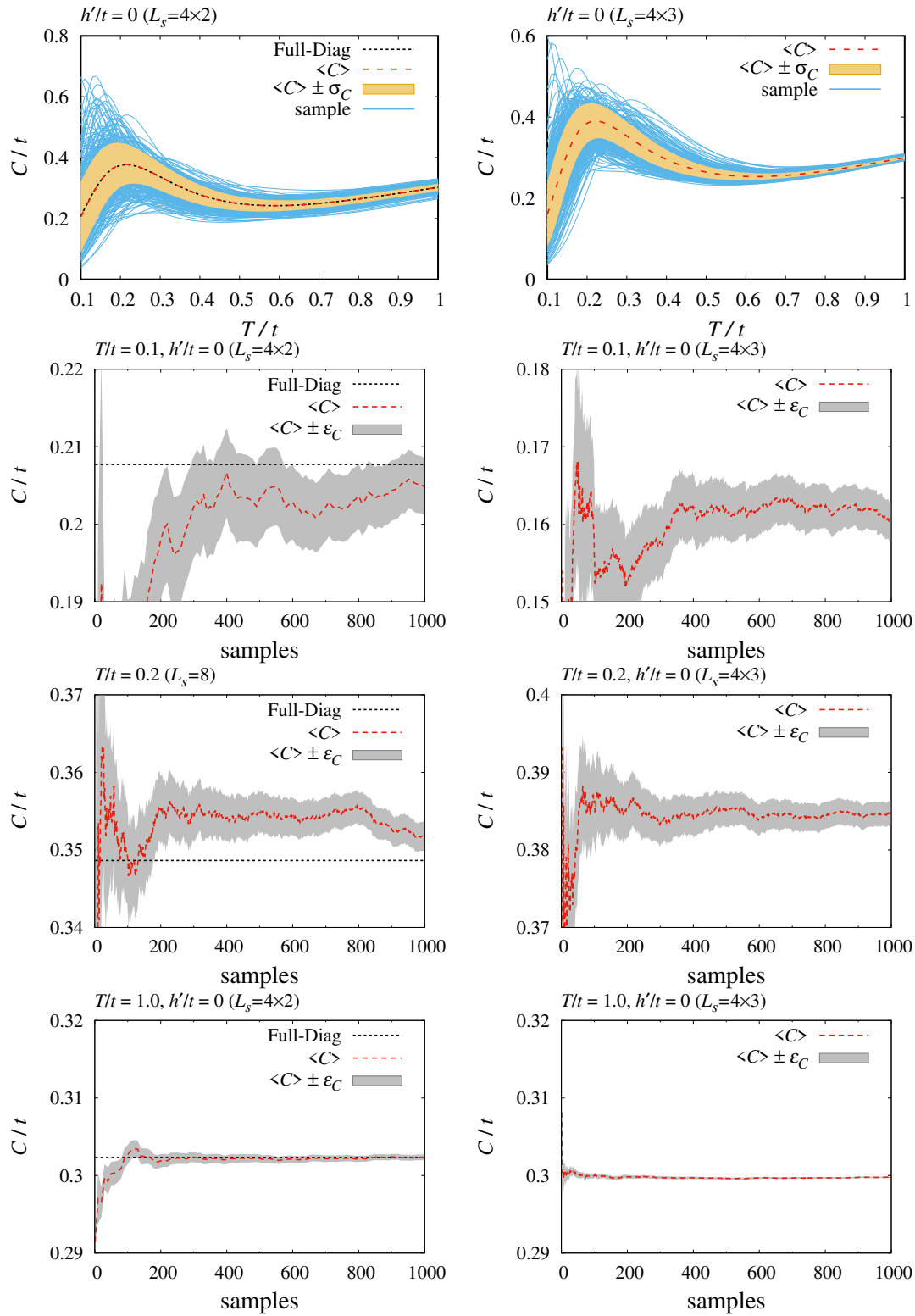


図 4.19 2次元正方格子 (OBC), $h'/t = 0$, サイト当たりの比熱のサンプル平均 $\langle C \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens(g)}}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 4 \times 2$, 右側が $L_s = 4 \times 3$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

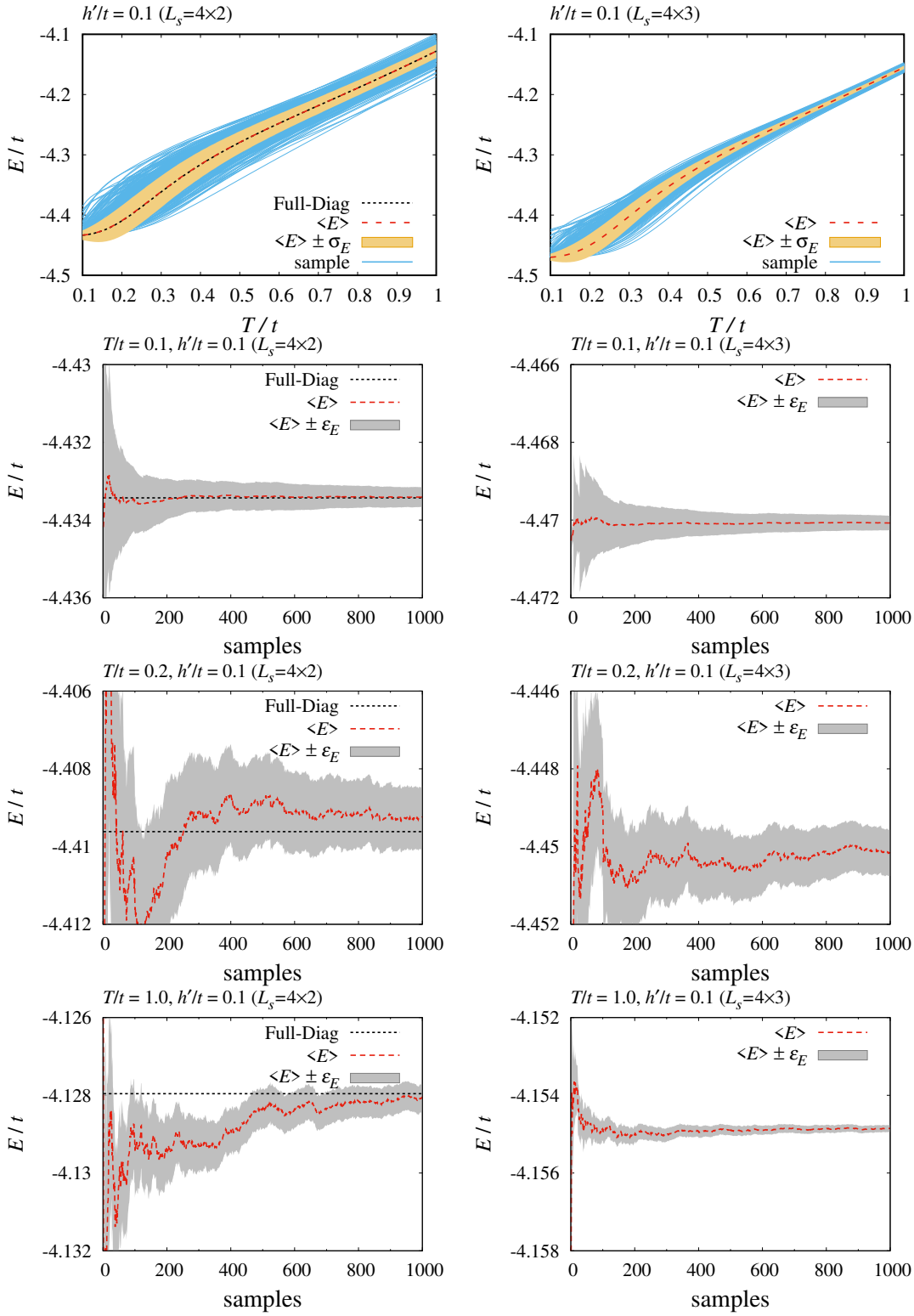


図 4.20 2次元正方格子 (OBC), $h'/t = 0.1$, サイト当たりのエネルギーのサンプル平均 $\langle E \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}(g)}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 4 \times 2$, 右側が $L_s = 4 \times 3$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

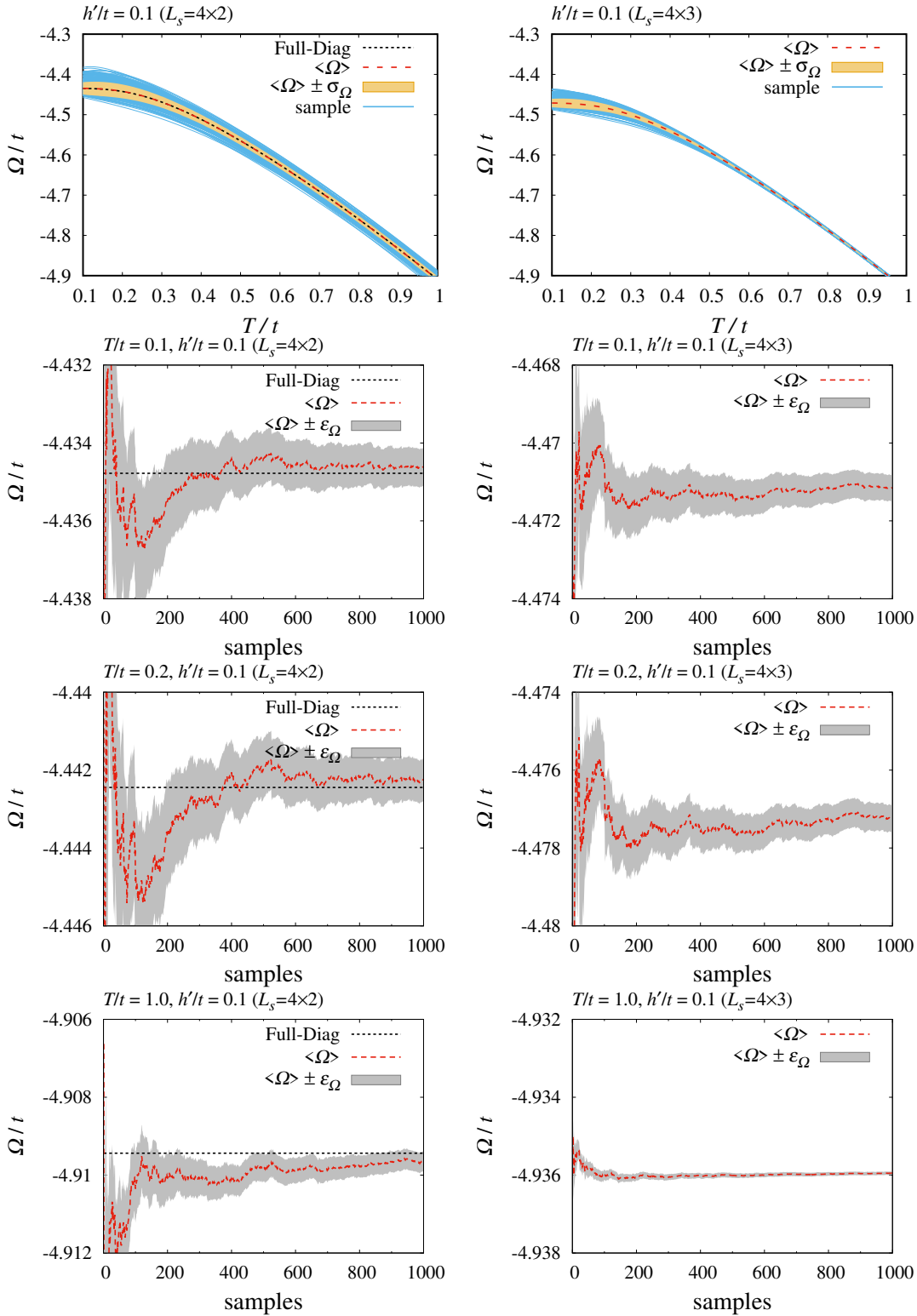


図 4.21 2次元正方形格子 (OBC), $h'/t = 0.1$, サイト当たりのグラウンドポテンシャルのサンプル平均 $\langle \Omega \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens(g)}}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 4 \times 2$, 右側が $L_s = 4 \times 3$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

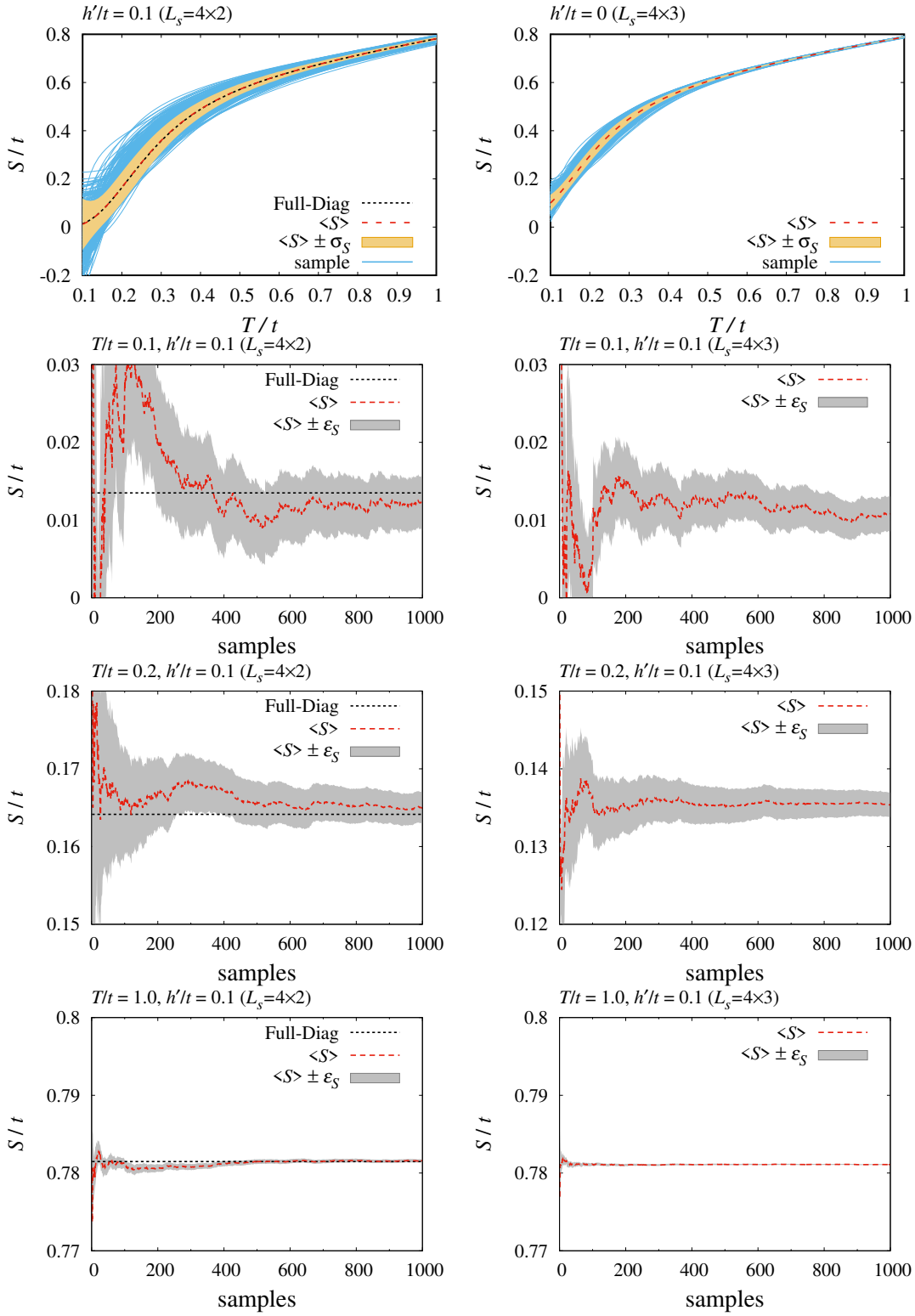


図 4.22 2 次元正方形格子 (OBC), $h'/t = 0.1$, サイト当たりのエントロピーのサンプル平均 $\langle S \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}(g)}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 4 \times 2$, 右側が $L_s = 4 \times 3$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

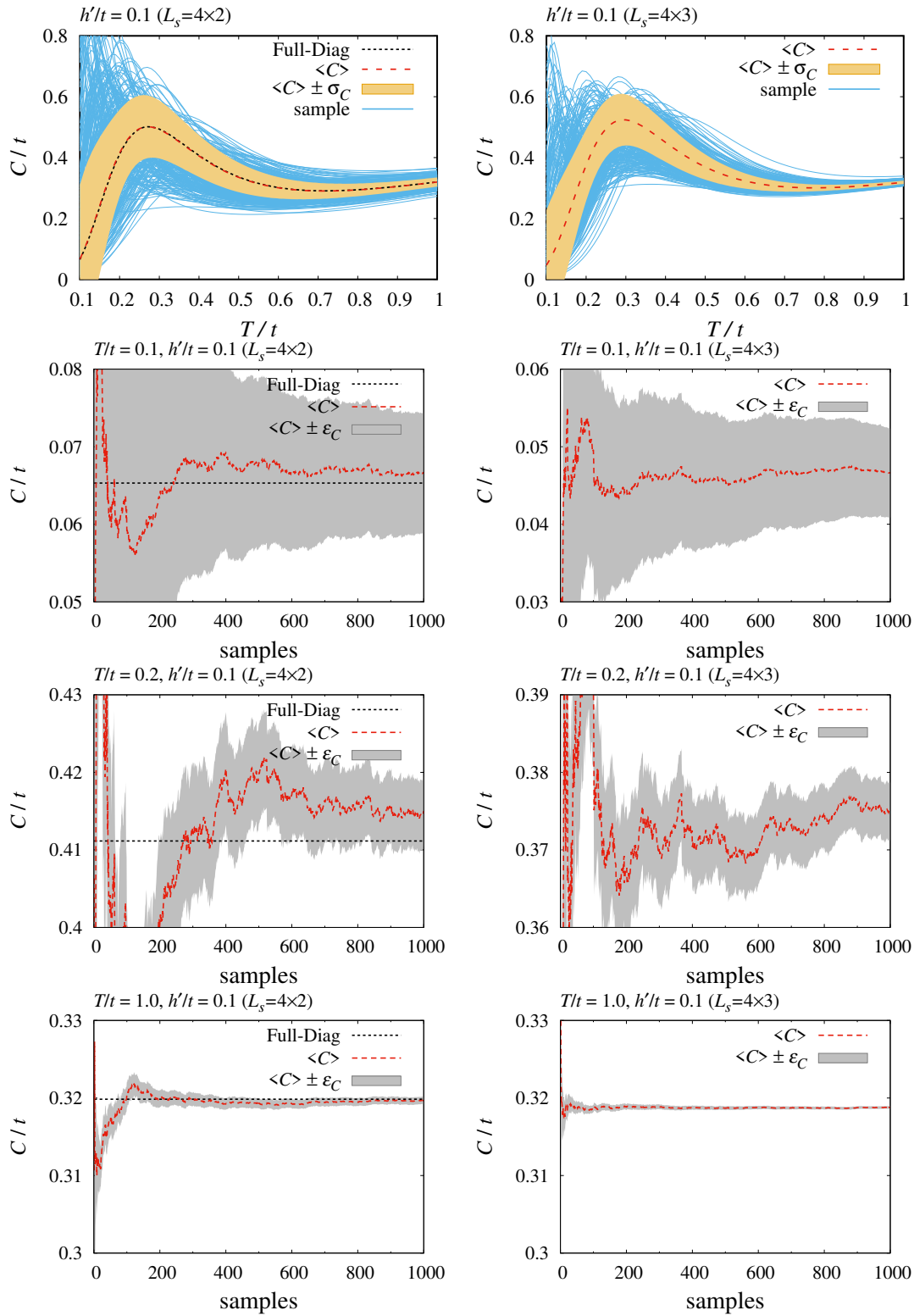


図 4.23 2次元正方格子 (OBC), $h'/t = 0.1$, サイト当たりの比熱のサンプル平均 $\langle C \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens(g)}}$ と標準偏差および平均値のサンプル数依存性. 左側が $L_s = 4 \times 2$, 右側が $L_s = 4 \times 3$. 黒線は完全対角化法による厳密解. 上段はサンプル数 1000 個の平均値を採用し, その内 300 個のサンプル値を青線で描いている.

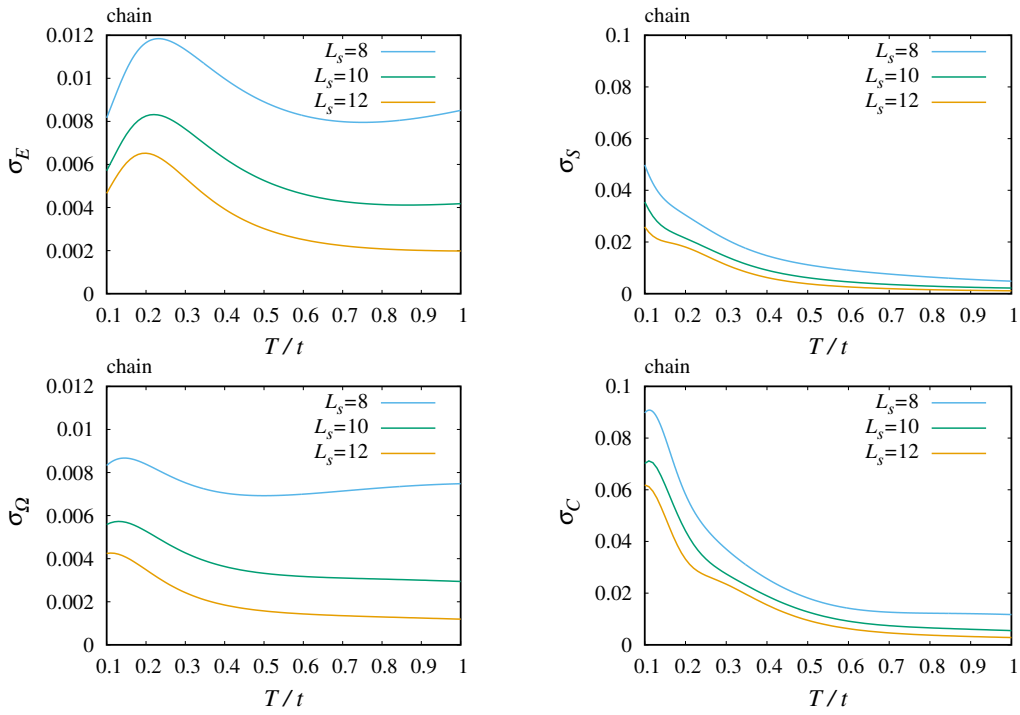


図 4.24 1 次元鎖 (OBC), 静的物理量に関する標準誤差の温度依存性.

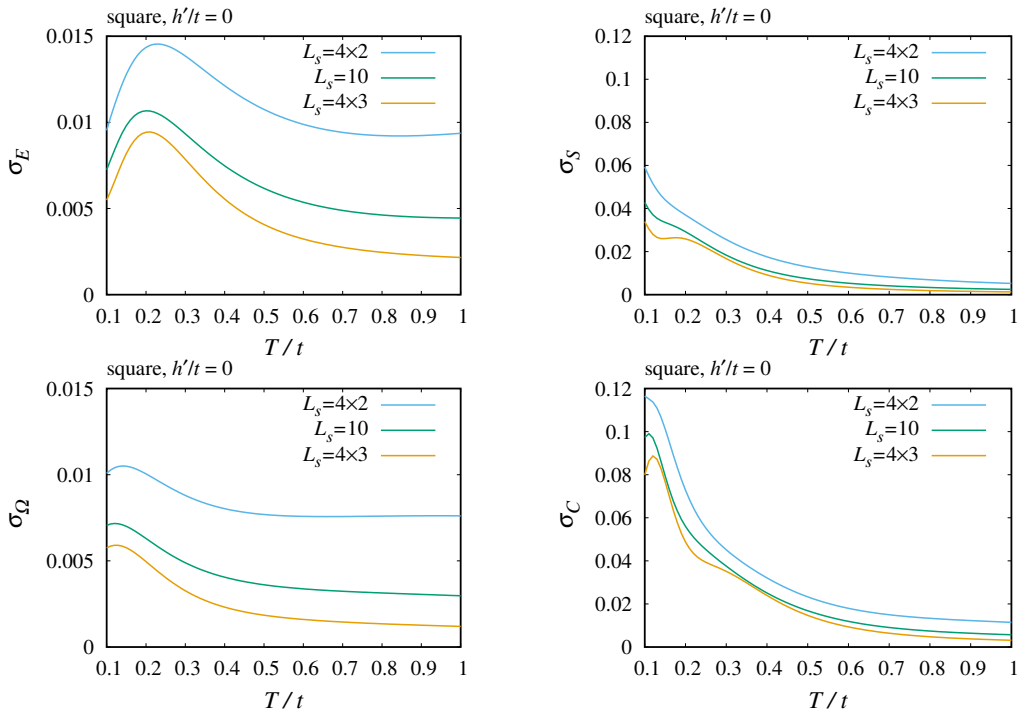


図 4.25 2 次元正方格子 (OBC), $h' = 0$, 静的物理量に関する標準誤差の温度依存性.

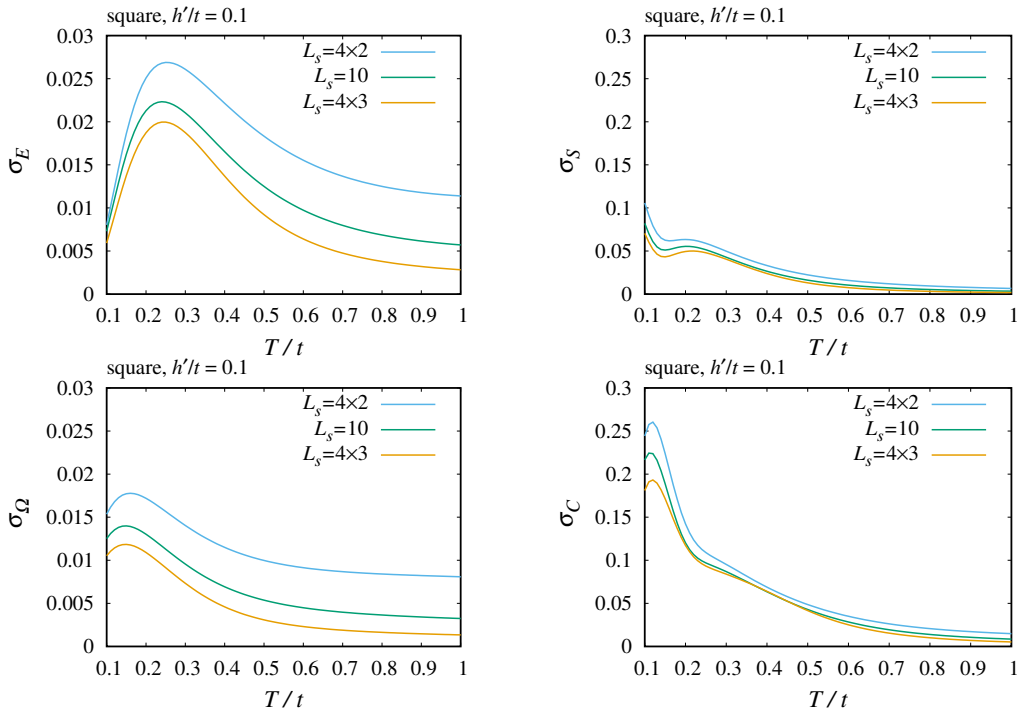


図 4.26 2次元正方格子 (OBC), $h' = 0.1$, 静的物理量に関する標準誤差の温度依存性.

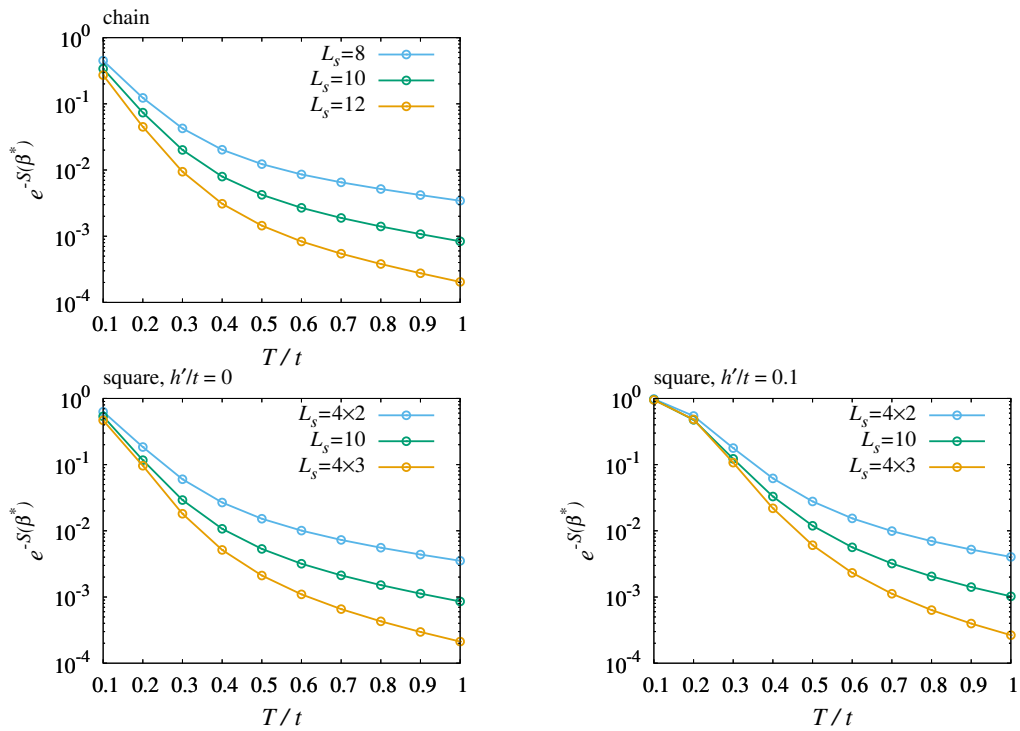


図 4.27 各格子系に対する $e^{-S(\beta^*)}$ の温度依存性.

第 5 章

総括

本研究では TPQ 法 を少数サイトソルバーに用いて有限温度 VCA の新たな数値計算手法の開発を行い、Hubbard 模型の熱力学極限における物理量と自発的対称性の破れを議論した。

まず TPQ state によるランダムサンプリング平均に対する Green 関数と静的物理量の分散と平均値を調査し、厳密解への収束精度を確認した。典型性から TPQ state はシステムサイズが大きくなるほど少ないサンプル数で熱平衡値を獲得でき、平均値と分散が VCA に必要な精度まで得られていることを示した。具体的には、1 次元 Hubbard 模型と 2 次元正方格子 Hubbard 模型を対象にした。1 次元 Hubbard 模型の Mott 転移は、スピンと電荷の分離によって説明され、その特徴は一粒子励起スペクトルに現れる。そこで有限温度 Green 関数に CPT を適用させ、温度ごとの一粒子励起スペクトルを求め、tDMRG による先行研究との十分な一致を確認した。次に、2 次元正方格子 Hubbard 模型の有限温度 VCA による解析では、熱力学極限におけるランドポテンシャルを変分原理に基づいて最適化することで反強磁性相と無秩序相の転移温度を明らかにした。さらに秩序変数、粒子数、エントロピー、比熱の温度依存性を示した。さらに、変分原理で最適化された Green 関数から CPT を用いて秩序相の一粒子励起スペクトルと状態密度の温度依存性を示した。

本研究で採用した TPQ や VCA といった手法は、ハミルトニアンに対する制約が少なく、Hubbard 模型に限らず様々な模型の数値計算に適用できる。特に、有限温度の効果的な解析手法として知られる量子モンテカルロ法において、負符号問題 [52, 53] により計算が困難な「フラストレート系」の解析に大きく貢献できると考える。また、本研究における CPT および VCA の計算では、一体相関関数に制限される理論に TPQ を導入したが、CPT および VCA による二体相関関数の計算 [54, 55] に対しても、TPQ state による有限温度の拡張が可能である。従って、実験と理論の両面からより詳細な議論されることだろう。

以上、本研究が有限温度における強相関量子系の研究の進展に貢献できることを期待する。

付録 A

計算手法の補足

A.1 Green 関数の温度全微分 (1 階, 2 階)

有限温度 VCA におけるエントロピーと比熱の計算には、 T と z に関する Green 関数の微分形式が必要になる。しかし、その表式は完全基底と Lanczos 基底で異なるため、具体的な式を以下に示す。

A.1.1 Green 関数の微分形式 (完全基底)

Lehmann 表示として固有値と固有ベクトルで表した $\mathbf{G}'(z)$ は Boltzmann 因子のみが T に依存するため [式 (2.11) を参照]、 $\partial_T \mathbf{G}'(i\omega_\nu)$ 、 $\partial_T^2 \mathbf{G}'(i\omega_\nu)$ は簡単に得られる。具体的に Boltzmann 因子 $e^{\beta(\Omega' - E_s)}$ *1 は

$$\partial_T e^{\beta(\Omega' - E_s)} = e^{\beta(\Omega' - E_s)} (E_s - E') \beta^2 \quad (\text{A.1})$$

$$\partial_T^2 e^{\beta(\Omega' - E_s)} = e^{\beta(\Omega' - E_s)} \{ (E_s - E')^2 \beta^4 - C' \beta^2 - 2(E_s - E') \beta^3 \} \quad (\text{A.2})$$

となる*2。 z に関して $\mathbf{G}'(z)$ は分母のみが依存するため、 $\partial_z \mathbf{G}'(z)$ 、 $\partial_z^2 \mathbf{G}'(z)$ も簡単に得られる。

$$\partial_z \left(\frac{b}{z+a} \right) = \frac{-b}{(z+a)^2}, \quad \partial_z^2 \left(\frac{b}{z+a} \right) = \frac{2b}{(z+a)^3} \quad (\text{A.4})$$

A.1.2 Green 関数の微分形式 (Lanczos 基底)

(2.2.1) 節は温度 T に依存する Boltzmann 因子があらわに書かれていたが、Lanczos 基底形式では温度依存が分子の期待値に含まれているため、表式が多少複雑になってしまう。以下では、ある温度の状態ベクトルの温度微分を求め、Green 関数の温度全微分 $D_T \mathbf{G}'(z)$ 、 $D_T^2 \mathbf{G}'(z)$ を示す。

ある温度の状態ベクトルとして、式 (2.55) で定義される $|\phi_\beta\rangle = e^{-\beta \hat{H}/2} |\psi_0\rangle$ を規格化した $|\psi_\beta\rangle$ を用いる。

$$|\psi_\beta\rangle = \frac{|\phi_\beta\rangle}{\sqrt{\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle}} = \frac{|\phi_\beta\rangle}{\sqrt{Z(\beta)/N_H}} = e^{\beta(\Omega' - \hat{H})/2} |\phi_0\rangle \sqrt{N_H} \quad (\text{A.5})$$

*1 グランドポテンシャルの定義 $\Omega' = -\ln Z(\beta)/\beta$ より $Z(\beta)^{-1} = e^{\beta\Omega'}$.

*2 クラスタの内部エネルギー $E' = \Omega' + TS'$ と温度微分の関係式

$$\frac{\partial E'}{\partial T} = \frac{\partial \Omega'}{\partial T} + S' + T \frac{\partial S'}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 \Omega'}{\partial T^2} = C' \quad \left(S' = -\frac{\partial \Omega'}{\partial T} \right) \quad (\text{A.3})$$

を用いた。

を用いると、 T に関する 1 階微分と 2 階微分は

$$\frac{\partial}{\partial T} |\psi_\beta\rangle = \frac{\partial}{\partial T} e^{\beta(\Omega' - \hat{\mathcal{H}})/2} |\psi_0\rangle \sqrt{N_H} \quad (\text{A.6})$$

$$= \left(\frac{\hat{\mathcal{H}} - \Omega'}{2T^2} - \frac{S'}{2T} \right) |\psi_\beta\rangle \quad (\text{A.7})$$

$$= \frac{\beta^2}{2} (\hat{\mathcal{H}} - E') |\psi_\beta\rangle \equiv x |\psi_\beta\rangle \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial T^2} |\psi_\beta\rangle = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\hat{\mathcal{H}} - E'}{2T^2} \right) |\psi_\beta\rangle \quad (\text{A.9})$$

$$= \left\{ \left(\frac{\hat{\mathcal{H}} - E'}{2T^2} \right)^2 - \frac{2}{T} \left(\frac{\hat{\mathcal{H}} - E'}{2T^2} \right) - \frac{C'}{2T^2} \right\} |\psi_\beta\rangle \quad (\text{A.10})$$

$$= \left(x^2 - 2\beta x - \frac{\beta^2}{2} C' \right) |\psi_\beta\rangle \equiv y |\psi_\beta\rangle \quad (\text{A.11})$$

となる*3。 $G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z)$ の温度全微分は、

- $D_T = \partial_T + z\beta\partial_z$

$$\partial_T G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z) = \sum_{n,m}^{N_L} \left\{ \langle \psi_\beta | x | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle + \langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} x | \psi_\beta \rangle \right\} \frac{\langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle}{z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m} \quad (\text{A.12})$$

$$z\beta\partial_z G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z) = \sum_{n,m}^{N_L} (-z\beta) \frac{\langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle}{(z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m)^2} \quad (\text{A.13})$$

$$D_T G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z) = \sum_{n,m}^{N_L} X_{\hat{B}nm}^+ \frac{\langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle}{z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m}, \quad (\text{A.14})$$

$$X_{\hat{B}nm}^+ \equiv \left\{ \langle \psi_\beta | x | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle + \langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} x | \psi_\beta \rangle - \frac{z\beta \langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle}{z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m} \right\} \quad (\text{A.15})$$

*3 前節と同様に、クラスターの内部エネルギー E' と温度微分の関係式 $\partial E' / \partial T = C'$ を用いた。式 (A.3) を参照。

- $D_T^2 = \partial_T^2 + z^2 \beta^2 \partial_z^2 + 2\beta \partial_T \partial_z$

$$\partial_T^2 G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z) = \sum_{n,m}^{N_L} Y_{Bnm}^+ \frac{\langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle}{z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m}, \quad (\text{A.16})$$

$$Y_{Bnm}^+ \equiv \left\{ \langle \psi_\beta | y | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle + \langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} y | \psi_\beta \rangle + 2 \langle \psi_\beta | x | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} x | \psi_\beta \rangle \right\} \quad (\text{A.17})$$

$$z^2 \beta^2 \partial_z^2 G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z) = \sum_{n,m}^{N_L} (2z^2 \beta^2) \frac{\langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle}{(z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m)^3} \quad (\text{A.18})$$

$$2z\beta \partial_T \partial_z G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z) = \sum_{n,m}^{N_L} (-2z\beta) \left\{ \langle \psi_\beta | x | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} | \psi_\beta \rangle + \langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{B} x | \psi_\beta \rangle \right\} \frac{\langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle}{(z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m)^2} \quad (\text{A.19})$$

$$D_T^2 G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z) = \sum_{n,m}^{N_L} \left\{ Y_{Bnm}^+ - \frac{2z\beta}{z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m} X_{Bnm}^+ \right\} \frac{\langle \tilde{\psi}_n | \hat{A} | \tilde{\psi}'_m \rangle}{z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m} \quad (\text{A.20})$$

となる。同様に X_{Bnm}^-, Y_{Bnm}^- を定義すると、 $G_{\hat{A}\hat{B}}^-(z)$ の温度全微分は以下ようになる。

$$X_{Bnm}^- \equiv \left\{ \langle \psi_\beta | \hat{B} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}_n | x | \psi_\beta \rangle + \langle \psi_\beta | x \hat{B} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \psi_\beta \rangle - \frac{z\beta \langle \psi_\beta | \hat{B} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \psi_\beta \rangle}{z - \tilde{\varepsilon}_n + \tilde{\varepsilon}'_m} \right\} \quad (\text{A.21})$$

$$Y_{Bnm}^- \equiv \left\{ \langle \psi_\beta | \hat{B} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}_n | y | \psi_\beta \rangle + \langle \psi_\beta | y \hat{B} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \psi_\beta \rangle + 2 \langle \psi_\beta | x \hat{B} | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}_n | x | \psi_\beta \rangle \right\} \quad (\text{A.22})$$

$$D_T G_{\hat{B}\hat{A}}^-(z) = \sum_{n,m}^{N_L} X_{Bnm}^- \frac{\langle \tilde{\psi}'_m | \hat{A} | \tilde{\psi}_n \rangle}{z - \tilde{\varepsilon}_n + \tilde{\varepsilon}'_m}, \quad (\text{A.23})$$

$$D_T^2 G_{\hat{B}\hat{A}}^-(z) = \sum_{n,m}^{N_L} \left\{ Y_{Bnm}^- - \frac{2z\beta}{z - \tilde{\varepsilon}_n + \tilde{\varepsilon}'_m} X_{Bnm}^- \right\} \frac{\langle \tilde{\psi}'_m | \hat{A} | \tilde{\psi}_n \rangle}{z - \tilde{\varepsilon}_n + \tilde{\varepsilon}'_m} \quad (\text{A.24})$$

A.2 オンサイト変分

VCA において、粒子ホール対称性の破れた系や half-filling 以外では、化学ポテンシャル μ の調節とオンサイトエネルギー項の最適化が必要になる。この変分では、系のエネルギーをシフトさせるだけで状態ベクトルは変化しないため変分パラメータごとに状態ベクトルを求める必要がなく、他の変分と比べて計算量が少なく済む。まず変分ハミルトニアン

$$\mathcal{H}_{\text{onsite}} = \varepsilon_{\text{on}} \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma} = \varepsilon_{\text{on}} \hat{N} \quad (\text{A.25})$$

を導入する。ここで \hat{N} は粒子数演算子である。この変分ハミルトニアンを全体のハミルトニアンに加えると

$$\hat{\mathcal{K}} = \hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N} \quad (\text{A.26})$$

$$\rightarrow \hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N} + \varepsilon_{\text{on}} \hat{N} \quad (\text{A.27})$$

と置き換わる*4。このとき厳密対角化法 (ED) と TPQ 法 (gTPQ) それぞれにおける状態ベクトルとグラントポテンシャルの変更は以下のとおりである。

ED (ハミルトニアン固有値と固有ベクトル) :

$$\hat{\mathcal{K}}|\nu^{(N)}\rangle = (E_\nu^{(N)} - \mu N)|\nu^{(N)}\rangle \quad (\text{A.28})$$

$$\rightarrow (\hat{\mathcal{K}} + \varepsilon_{\text{on}}\hat{N})|\nu^{(N)}\rangle = (E_\nu^{(N)} - \mu N + \varepsilon_{\text{on}}N)|\nu^{(N)}\rangle \quad (\text{A.29})$$

$$\Omega(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{N=0}^{2L_s} \sum_{\nu=1}^{N_H^{(N)}} e^{-\beta(E_\nu^{(N)} - \mu N)} \quad (\text{A.30})$$

$$\rightarrow -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{N=0}^{2L_s} \sum_{\nu=1}^{N_H^{(N)}} e^{-\beta(E_\nu^{(N)} - \mu N + \varepsilon_{\text{on}}N)} \quad (\text{A.31})$$

gTPQ (Lanczos 展開された表式) :

$$|\phi_\beta^{(N)}\rangle = e^{-\beta\hat{\mathcal{K}}/2} |\psi_0^{(N)}\rangle \simeq \sum_{l=1}^{N_L} e^{-\beta\tilde{\varepsilon}_l^{(N)}/2} |\tilde{\psi}_l^{(N)}\rangle \langle \tilde{\psi}_l^{(N)} | \psi_0^{(N)}\rangle \quad (\text{A.32})$$

$$\rightarrow e^{-\beta(\hat{\mathcal{K}} + \varepsilon_{\text{on}}\hat{N})/2} |\psi_0^{(N)}\rangle \simeq \sum_{l=1}^{N_L} e^{-\beta(\tilde{\varepsilon}_l^{(N)} + \varepsilon_{\text{on}}N)/2} |\tilde{\psi}_l^{(N)}\rangle \langle \tilde{\psi}_l^{(N)} | \psi_0^{(N)}\rangle \quad (\text{A.33})$$

$$\Omega(\beta, \mu) = -\frac{1}{\beta} \ln \left(N_F \overline{\langle \phi_{\beta, \mu} | \phi_{\beta, \mu} \rangle} \right) = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{N=0}^{2L_s} \left(N_H^{(N)} \overline{\langle \phi_\beta^{(N)} | \phi_\beta^{(N)} \rangle} \right) \quad (\text{A.34})$$

$$\rightarrow -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{N=0}^{2L_s} \left(e^{-\beta\varepsilon_{\text{on}}N} N_H^{(N)} \overline{\langle \phi_\beta^{(N)} | \phi_\beta^{(N)} \rangle} \right) \quad (\text{A.35})$$

ここで上付き (N) は N 粒子系を指す。どちらの場合もエネルギーのシフトだけでよく、状態ベクトルは変更されない。さらに、 $\hat{A} = \hat{c}_i, \hat{B} = \hat{c}_j^\dagger$ としたときの一粒子 Green 関数 $G_{ij}(z) = G_{ij}^+(z) + G_{ab}^-(z)$ のうち、規格化された TPQ state $|\psi_\beta\rangle$ に関する $G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z)$ は次のように変形される。以下では上付き (N) は省略する。

$$G_{ij}^+(z) = \sum_{n,m}^{N_L} \frac{\langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \hat{c}_i | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{c}_j^\dagger | \psi_\beta \rangle}{z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m} \quad (\text{A.36})$$

$$\rightarrow \sum_{n,m}^{N_L} \frac{\langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \hat{c}_i | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{c}_j^\dagger | \psi_\beta \rangle}{z + (\tilde{\varepsilon}_n + \varepsilon_{\text{on}}N) - (\tilde{\varepsilon}'_m + \varepsilon_{\text{on}}(N+1))} \quad (\text{A.37})$$

$$= \sum_{n,m}^{N_L} \frac{\langle \psi_\beta | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \hat{c}_i | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{c}_j^\dagger | \psi_\beta \rangle}{z + \tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}'_m - \varepsilon_{\text{on}}} \quad (\text{A.38})$$

擬固有値 $\tilde{\varepsilon}_n, \tilde{\varepsilon}'_m$ の変形は本文の式 (2.119), (2.120) を思い出すと、 $|\tilde{\psi}_n\rangle$ は N 粒子系、 $|\tilde{\psi}'_m\rangle$ は $N+1$ 粒子系であることから導かれる。

*4 式 (3.56) と同様に、VCA の変分では行列 \mathbf{V} の対角項から ε_{on} を差し引く必要がある。逆に差し引かない場合は、ハミルトニアンの化学ポテンシャルを $\mu \rightarrow \mu - \varepsilon_{\text{on}}$ と置き換えることに対応する。

同様に $G_{\hat{B}\hat{A}}^-(z)$ も次のように変形される。

$$G_{ij}^-(z) = \sum_{n,m}^{N_L} \frac{\langle \psi_\beta | \hat{c}_j^\dagger | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{c}_i | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \psi_\beta \rangle}{z - \tilde{\epsilon}_n + \tilde{\epsilon}'_m} \quad (\text{A.39})$$

$$\rightarrow \sum_{n,m}^{N_L} \frac{\langle \psi_\beta | \hat{c}_j^\dagger | \tilde{\psi}'_m \rangle \langle \tilde{\psi}'_m | \hat{c}_i | \tilde{\psi}_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | \psi_\beta \rangle}{z - \tilde{\epsilon}_n + \tilde{\epsilon}'_m - \epsilon_{\text{on}}} \quad (\text{A.40})$$

TPQ state を用いた Green 関数からオンサイト変分の計算をする際、各サンプルそれぞれで ϵ_{on} を変えた Green 関数を求める必要がある。さらに G_{ij} の和 $\sum_{n,m}^{N_L}$ の段階では ϵ_{on} の停留点が不明なため、あらかじめ多数の点に対する G_{ij} を各サンプルで保存する必要がある。 G_{ij} の和は Lanczos 展開より計算コストが軽いため、多数の ϵ_{on} で和をとってもさほど時間はかからないだろう。ただし、完全対角化から得た固有状態で構成すると和の数は莫大に増えるため所要時間はより増えることに注意されたい。

A.3 Filter Operator method (FTK ω)

ある温度の TPQ state に射影演算子 $\hat{P}_\nu = |\nu\rangle\langle\nu|$ を作用させて励起エネルギーを探索し、有限温度のスペクトル関数を求める [17]。このとき Green 関数は

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\beta^{AB}(\omega) &= \sum_\nu \frac{e^{-\beta E_\nu}}{Z(\beta)} \langle \nu | \hat{O}_\nu | \nu \rangle \\ &\simeq \sum_\nu \frac{e^{-\beta E_\nu}}{Z(\beta)} \langle \phi_\beta | \hat{P}_\nu \hat{O}_\nu \hat{P}_\nu | \phi_\beta \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

$$\hat{O}_\nu = \hat{A}^\dagger \frac{1}{\omega - E_\nu + \hat{\mathcal{H}}} \hat{B} \quad (\text{A.42})$$

となる。具体的な射影演算子として、ある固有エネルギー \mathcal{E}_m の固有状態への射影演算子を示す。

$$\hat{P}_{\mathcal{E}_m, \delta} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_{\mathcal{E}_m, \rho}} \frac{dz}{z - \hat{\mathcal{H}}} \quad (\text{A.43})$$

$$\simeq \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \frac{\rho e^{i\theta_j}}{\rho e^{i\theta_j} + \mathcal{E}_m - \hat{\mathcal{H}}} \quad (\text{A.44})$$

$$z = \rho e^{i\theta} + \mathcal{E}_m, \quad \mathcal{E}_m = E_0 + 2m\rho, \quad \theta_j = \frac{2\pi}{M} \left(j - \frac{1}{2} \right) \quad (\text{A.45})$$

各パラメータを $E_0 =$ 基底エネルギー、 $\rho =$ 周回積分の半径、 $M =$ 周回積分の離散化の分割数とし、 $\delta = (E_0, \rho, M)$ とまとめている。2行目では積分の離散化をしている。同様に、複数の固有エネルギーに対して射影演算子を作用させ、Filter 化された TPQ state を求める。実際に計算する点の模式図は図 A.1 の通りである。

よって Filter 化された TPQ state と物理量の期待値は、

$$|\phi_{\beta, \delta}^m\rangle = \hat{P}_{\mathcal{E}_m, \delta} |\phi_\beta\rangle \quad (\text{A.46})$$

$$\langle \hat{O} \rangle_{\beta, \delta} = \frac{\sum_{m=0}^{L-1} \langle \phi_{\beta, \delta}^m | \hat{O} | \phi_{\beta, \delta}^m \rangle}{\sum_{m=0}^{L-1} \langle \phi_{\beta, \delta}^m | \phi_{\beta, \delta}^m \rangle} \quad (\text{A.47})$$

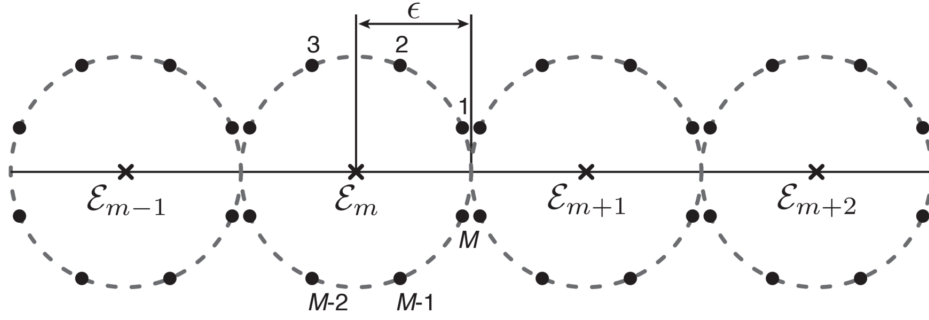


図 A.1 周回積分を離散化した射影演算子の計算対象点の模式図。黒点を実際に計算する。図中では見やすくするため黒点の数を少なくしているが実際に計算する点数は数十点を超える。

となる。固有状態の確率分布は

$$\hat{P}_\delta(\mathcal{E}_m) = \langle \phi_{\beta',\delta}^m | \phi_{\beta,\delta}^m \rangle \quad (\text{A.48})$$

と得られる。この表式では固有エネルギーが求まっているので、別温度の値は単に $e^{(\beta-\beta')\mathcal{E}_m}$ を加えればよく、

$$|\phi_{\beta',\delta}^m\rangle = e^{(\beta-\beta')\mathcal{E}_m/2} |\phi_{\beta,\delta}^m\rangle \quad (\text{A.49})$$

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\beta',\delta} = \frac{\sum_{m=0}^{L-1} e^{(\beta-\beta')\mathcal{E}_m} \langle \phi_{\beta,\delta}^m | \hat{\mathcal{O}} | \phi_{\beta,\delta}^m \rangle}{\sum_{m=0}^{L-1} e^{(\beta-\beta')\mathcal{E}_m} \langle \phi_{\beta,\delta}^m | \phi_{\beta,\delta}^m \rangle} \quad (\text{A.50})$$

とすればよい。単に確率分布に重み付けしているだけである。ただし、元の β に関する計算精度が粗かったり β と β' の差が大きすぎると正しく求まらない。Green 関数に関しても同様に、

$$\mathcal{G}_\beta^{AB}(\omega) = \lim_{\rho \rightarrow 0} \lim_{M \rightarrow +\infty} \frac{\mathbb{E}[\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\beta,\delta}]}{\mathbb{E}[\langle \phi_\beta | \phi_\beta \rangle]} \quad (\text{A.51})$$

$$\hat{\mathcal{O}}_\nu = \hat{A}^\dagger \frac{1}{\omega - E_\nu + \hat{\mathcal{H}}} \hat{B} \quad (\text{A.52})$$

となる。

参考文献

- [1] S. Sugiura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. **108**, 240401 (2012).
- [2] S. Sugiura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. **111**, 010401 (2013).
- [3] M. Hyuga, S. Sugiura, K. Sakai, and A. Shimizu, Phys. Rev. B **90**, 121110(R) (2014).
- [4] S. Sugiura, Formulation of statistical mechanics based on thermal pure quantum states, PhD thesis (University of Tokyo, 2015).
- [5] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, Rev. Mod. Phys. **77**, 1027 (2005).
- [6] D. Sénéchal, arXiv:0806.2690
- [7] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [8] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, Rev. Mod. Phys. **83**, 349 (2011).
- [9] M. H. Hettler, M. Mukherjee, M. Jarrell, and H. R. Krishnamurthy, Phys. Rev. B **61**, 12739 (2000).
- [10] D. Sénéchal, D. Perez, and M. Pioro-Ladrière, Phys. Rev. Lett. **84**, 522 (2000).
- [11] D. Sénéchal, D. Perez, and D. Plouffe, Phys. Rev. B **66**, 075129 (2002).
- [12] M. Potthoff, Eur. Phys. J. B **32**, 429 (2003).
- [13] M. Potthoff, Eur. Phys. J. B **36**, 335 (2003).
- [14] M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken, Phys. Rev. Lett. **91**, 206402 (2003).
- [15] C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke, E. Arrigoni, and M. Potthoff, Phys. Rev. B **70**, 245110 (2004).
- [16] K. Seki, T. Shirakawa, and S. Yunoki, Phys. Rev. B **98**, 205114 (2018).
- [17] Y. Yamaji, T. Suzuki, M. Kawamura, arXiv:1802.02854.
- [18] J. Jaklič and P. Prelovšek, Phys. Rev. B **49**, 5065 (1994).
- [19] J. Jaklič and P. Prelovšek, Adv. Phys. **49**, 1 (2000).
- [20] M. Aichhorn, M. Daghofer, H. G. Evertz, and W. von der Linden, Phys. Rev. B **67**, 161103(R) (2003).
- [21] T. J. Park and J. Light, J. Chem. Phys. **85**, 5870 (1986).
- [22] N. Mohankumar and S. M. Auerbach, Comput. Phys. Commun. **175**, 473 (2006).
- [23] S. Goldstein, J. L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zanghì, Phys. Rev. Lett. **96**, 050403 (2006).
- [24] S. Popescu, A. J. Short, and A. Winter, Nat. Phys. **2**, 754 (2006).
- [25] A. Sugita, Nonlinear Phenom. Complex Syst. **10**, 192 (2007).
- [26] P. Reimann, Phys. Rev. Lett. **99**, 160404 (2007).
- [27] M. Imada, and M. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 3354 (1986).
- [28] A. Hams and H. De Raedt, Phys. Rev. E **62**, 4365 (2000).

- [29] C. Bartsch and J. Gemmer, Phys. Rev. Lett. **102**, 110403 (2009).
- [30] T. A. Elsayed and B. V. Fine, Phys. Rev. Lett. **110**, 070404 (2013).
- [31] R. Steinigeweg, J. Gemmer, and W. Brenig, Phys. Rev. Lett. **112**, 120601 (2014).
- [32] T. Monnai and A. Sugita, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 094001 (2014).
- [33] F. Jin, R. Steinigeweg, F. Heidrich-Meisner, K. Michielsen, and H. De Raedt, Phys. Rev. B **92**, 205103 (2015).
- [34] R. Steinigeweg, J. Herbrych, F. Pollmann, and W. Brenig, Phys. Rev. B **94**, 180401(R) (2016).
- [35] J. Richter and R. Steinigeweg, Phys. Rev. B **99**, 094419 (2019).
- [36] Tarek A. Elsayed and Boris V. Fine Phys. Rev. Lett. **110**, 070404 (2013).
- [37] F. Jin, R. Steinigeweg, F. Heidrich-Meisner, K. Michielsen, and H. De Raedt Phys. Rev. B **92**, 205103 (2015).
- [38] 杉浦祥, 清水明. 量子純粋状態による統計力学の定式化. 数理科学, 51(6), 50-55 (2013).
- [39] 杉浦祥, 清水明. 熱的な量子純粋状態を用いた統計力学の定式化. 日本物理学会誌, 70(5), 368-373 (2015).
- [40] A. Sugita, RIMS Kokyuroku (Kyoto) 1507, **147** (2006).
- [41] 田崎晴明, 統計力学 **I,II** (培風館, 2008).
- [42] M. Matsumoto and T. Nishimura, ACM Trans. on Modeling and Computer Simulation Vol. 8, No. 1, January pp.3-30 (1998)
- [43] K. Seki, 「自己エネルギー汎関数理論に基づく励起子絶縁体状態の研究」, PhD thesis (Chiba University, 2013).
- [44] M. G. Zacher, R. Eder, E. Arrigoni, and W. Hanke: Phys. Rev. B **65**, 045109 (2002).
- [45] M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, and W. Hanke: Phys. Rev. B **74**, 235117 (2006).
- [46] R. Eder, Phys. Rev. B **81**, 035101 (2010).
- [47] M. Balzer and M. Potthoff, Phys. Rev. B **82**, 174441 (2010)
- [48] A. Nocera, F. H. L. Essler, and A. E. Feiguin, Phys. Rev. B **97**, 045146 (2018).
- [49] C. Kim, Z.-X. Shen, N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. B **56**, 15589 (1997).
- [50] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [51] P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).
- [52] E. Y. Loh, Jr., J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, S. R. White, D. J. Scalapino, and R. L. Sugar, Phys. Rev. B **41**, 9301 (1990).
- [53] M. Troyer and U.-J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **94**, 170201 (2005).
- [54] S. Brehm, E. Arrigoni, M. Aichhorn, and W. Hanke, EPL **89**, 27005 (2010).
- [55] P. T. Raum, G. Alvarez, T. Maier, and V. W. Scarola, arXiv:1908.10361.

謝辞

本学位論文は指導教官である千葉大学大学院理学研究科の太田幸則教授の指導のもとでまとめられました。太田教授には研究室配属された学部4年から博士後期課程修了までの6年間に渡り、物理学の考え方や理論研究の指導だけでなく、プレゼンテーションや論文のまとめ方、申請書の書き方など幅広く支援して頂きました。また、積極的な学会参加の方針を掲げ、国内外の物理学会にて多くの発表機会を得られたのは貴重な経験となりました。心より深く感謝いたします。

この学位論文は主査として近藤慶一教授、副査として太田幸則教授、深澤英人准教授、外部審査員として理化学研究所の柚木清司主任研究員に審査して頂きました。心より感謝申し上げます。

特任助教としてこられた杉本高大博士（現：慶応大学）には本研究の発端となるアイデアをいただき、共同研究者として数々のディスカッションから論文執筆まで多大な支援をしていただきました。心より感謝いたします。

理化学研究所の金子達也博士と宮腰祥平博士には太田研究室に在籍の頃から筆者の些細な質問にも快く答えていただき、研究の進め方や計算手法など、研究のいろはを丁寧に教えていただきました。さらに博士前期から博士後期前半に取り組んでいた励起子絶縁体の研究について、共同研究者として多くの議論をさせていただき論文出版することができました。心より感謝いたします。お二方と三角一真博士から教わった厳密対角化や変分クラスター近似法の物理解釈やプログラミング技能は、本研究の計算手法開発を遂行する上で欠くことのできない基礎となっています。

太田研究室の山口伴紀君には研究室のマシンやネットワークのトラブルを迅速な対応で解決していただきました。藤内亮君は本論文の共同研究者として計算手法プログラムの共同開発からデータ収集まで、多くの作業に尽力して頂きました。また、お二方から計算結果や理論解釈に関して有益なアドバイスを頂いたり、他愛のない雑談にも快く答えてくれたことを感謝いたします。太田研究室での6年間を通して、僅かながらも理論研究の醍醐味に触れることができました。多くの聡明な方たちと共に過ごせたことに感謝いたします。

最後に、定期的に連絡をくれて激励してくれた学部からの友人と、私の博士後期課程進学を快諾して精神的・経済的に支えて下さった両親・弟に心より深く感謝いたします。

参考資料

以下に本論文に関連する論文と参考論文を掲載する。

- “Typicality-Based Variational Cluster Approach to Thermodynamic Properties of the Hubbard Model”, Hisao Nishida, Ryo Fujiuchi, Koudai Sugimoto, and Yukinori Ohta, *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 023702 (2020).
- “Spin texture and spin current in excitonic phases of the two-band Hubbard model”, H. Nishida, S. Miyakoshi, T. Kaneko, K. Sugimoto, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **99**, 035119 (2019).

Reprinted from

JOURNAL
OF THE
PHYSICAL
SOCIETY
OF
JAPAN



■ LETTER

**Typicality-Based Variational Cluster Approach
to Thermodynamic Properties of the Hubbard Model**

Hisao Nishida, Ryo Fujiuchi, Koudai Sugimoto, and Yukinori Ohta

J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 023702 (2020)

Typicality-Based Variational Cluster Approach to Thermodynamic Properties of the Hubbard Model

Hisao Nishida^{1*}, Ryo Fujiuchi¹, Koudai Sugimoto², and Yukinori Ohta¹

¹*Department of Physics, Chiba University, Chiba 263-8522, Japan*

²*Department of Physics, Keio University, Yokohama 223-8522, Japan*

(Received November 23, 2019; accepted December 17, 2019; published online January 9, 2020)

We develop the variational-cluster-approximation method based on the thermal-pure-quantum-state approach and apply the method to the calculations of the thermodynamic properties of the Hubbard model. We thereby obtain the temperature dependence of the single-particle excitation spectra, entropy and specific heat, and order parameter of the antiferromagnetic phase efficiently. We thus demonstrate that the method developed here has a potential power for elucidating finite-temperature properties of strongly correlated electron systems.

Calculation of finite-temperature properties of strongly correlated quantum systems, for which perturbation theory breaks down, is a hard and challenging task because many excited states must be taken into account for evaluation of their physical quantities. In the grand canonical theory, we need to know all the eigenvalues E_ν and corresponding eigenstates $|\nu\rangle$ of the relevant Hamiltonian to evaluate the ensemble average of an operator \hat{O} at temperature T , which is given as

$$\langle \hat{O} \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}} = \frac{1}{Z(\beta, \mu)} \sum_{\nu} e^{-\beta(E_\nu - \mu N_\nu)} \langle \nu | \hat{O} | \nu \rangle, \quad (1)$$

where $\beta = 1/T$ is the reciprocal temperature, μ is the chemical potential, $Z(\beta, \mu) = \sum_{\nu} e^{-\beta(E_\nu - \mu N_\nu)}$ is the grand partition function, and N_ν is the number of particles of the state $|\nu\rangle$. A straightforward way to solve this problem is to fully or partially diagonalize the Hamiltonian. Although for quantum lattice models one can in principle evaluate this average if the system size is small enough, one immediately encounters a severe restriction because the dimension of the Hilbert space grows rapidly as the system size increases.

In this respect, quantum cluster approximations based on the self-energy functional theory^{1,2)} are found to be useful for treating the systems in the thermodynamic limit, the techniques of which include the dynamical cluster approximation, the single-site or cellular dynamical-mean-field theory (DMFT), the cluster perturbation theory (CPT), and the variational cluster approach (VCA). The DMFT combined with the quantum Monte Carlo (QMC) method for a single-impurity solver^{1,3,4)} is often used to obtain the electronic states at finite temperatures. However, it is well-known that the QMC method involves the notorious negative-sign problem,^{5,6)} especially in itinerant fermionic systems.

Recently, the thermal-pure-quantum (TPQ) state approach has been found to be useful for obtaining physical quantities at finite temperatures.⁷⁻⁹⁾ Based on the concept of typicality, i.e., the fact that observables in a thermal equilibrium state are obtained from a single pure quantum state,¹⁰⁻¹³⁾ one can construct the TPQ state by lowering temperature, starting from a random vector corresponding to a thermal equilibrium state at infinite temperature.⁷⁻⁹⁾ Some pioneering work¹⁴⁻¹⁸⁾ also uses the random vector to obtain the thermal average. Thus, the ensemble average at a finite temperature may be calculated by a single TPQ state obtained from the

imaginary-time evolution of the random vector, instead of calculating all the relevant eigenstates and summing over the average values multiplied by the Boltzmann weight, as in Eq. (1). Thereby, the computational cost can be reduced drastically in this approach although one needs to take a random-sampling average over the TPQ states. Another advantage of this approach is that there are no negative-sign problems occurring in the QMC method. Moreover, because one needs not diagonalize the huge Hamiltonian matrix, one can treat the larger-size systems. We should also emphasize that one can obtain not only the static thermal quantities but also the dynamical quantities such as the excitation spectrum using the typicality-based analyses.¹⁹⁻²⁶⁾

In this paper, we calculate the finite-temperature properties of the Hubbard model, a representative of strongly correlated electron models, by making use of the TPQ-state approach. First, we use this approach in the CPT^{27,28)} and calculate the single-particle excitation spectra in the thermodynamic limit. We then use this approach in the VCA²⁹⁻³²⁾ and calculate the grand potential as a function of the symmetry-breaking Weiss field for antiferromagnetism. We moreover calculate the static thermal quantities, such as the entropy and specific heat of the system. In a previous study,³³⁾ the same model as ours was investigated by the VCA, where the block Lanczos method was used as a quantum cluster solver. There, the calculations of the single-particle Green's functions for all eigenstates with nonvanishing Boltzmann weight are required, and therefore the computational cost rapidly rises up at high temperatures. On the other hand, the method presented here requires the Green's functions for a single TPQ state, thereby reducing the computational cost drastically. We thus demonstrate that the TPQ-state approach provides a powerful technique for elucidating the thermodynamic properties of the Hubbard model even at high temperatures.

In what follows, we first introduce the TPQ-state formalism briefly, and then present the results obtained by the CPT and VCA combined with the TPQ-state approach. We consider the single-band Hubbard model defined by the Hamiltonian

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{c}_{i, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j, \sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i, \uparrow} \hat{n}_{i, \downarrow}, \quad (2)$$

where $\hat{c}_{i, \sigma}^{\dagger}$ ($\hat{c}_{i, \sigma}$) is the creation (annihilation) operator of an electron at site i with spin σ , $\hat{n}_{i, \sigma} = \hat{c}_{i, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i, \sigma}$ is the electron

number operator, t is the hopping integral, and U is the on-site Coulomb interaction. $\langle i, j \rangle$ represents the nearest-neighbor pair of sites. We restrict ourselves to the cases of the one-dimensional chain and two-dimensional square lattice at half filling.

To construct the grand-canonical TPQ state, we prepare a random vector

$$|\psi_0\rangle = \sum_{x=1}^{N_F} c_x |x\rangle, \quad (3)$$

where $|x\rangle$ is an arbitrary orthonormal basis of the Hamiltonian, $N_F = \sum_{n=0}^{2L_s} \frac{(2L_s)!}{n!(2L_s-n)!}$ is the dimension of the Fock space, L_s is the number of lattice sites in the system, and c_x is a random complex number satisfying $\sum_x |c_x|^2 = 1$. This state corresponds to the TPQ state at $\beta = 0$,¹⁴⁾ so that the average value at infinite temperature is given by $\langle \hat{O} \rangle_{\beta=0}^{\text{ens}} = \langle \psi_0 | \hat{O} | \psi_0 \rangle$, where $\langle \dots \rangle$ is the average over the random samplings.

The unnormalized grand-canonical TPQ state at temperature β and chemical potential μ is given as⁹⁾

$$|\psi_{\beta, \mu}\rangle = e^{-\beta \hat{K}/2} |\psi_0\rangle \quad (4)$$

with $\hat{K} = \hat{H} - \mu \sum_{i, \sigma} \hat{n}_{i, \sigma}$. Then, instead of Eq. (1), we obtain the ensemble average of the operator \hat{O} as

$$\langle \hat{O} \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}} = \frac{\langle \psi_{\beta, \mu} | \hat{O} | \psi_{\beta, \mu} \rangle}{\langle \psi_{\beta, \mu} | \psi_{\beta, \mu} \rangle}. \quad (5)$$

The variance from the average value becomes exponentially small as the number of sites increases,⁸⁾ which means that the average value obtained from the single TPQ state is equal to the ensemble average in the thermodynamic limit.

The retarded dynamical correlation function of the operators \hat{A} and \hat{B} is given by

$$G_{\hat{A}\hat{B}}(z) = -i \int_0^{\infty} dt e^{izt} \langle \hat{A}(t) \hat{B}(0) \mp \hat{B}(0) \hat{A}(t) \rangle_{\beta, \mu}^{\text{ens}} \\ = G_{\hat{A}\hat{B}}^+(z) \mp G_{\hat{B}\hat{A}}^-(z), \quad (6)$$

where $\hat{A}(t) = e^{i\hat{K}t} \hat{A} e^{-i\hat{K}t}$ is the Heisenberg representation, and the upper (lower) sign is for bosonic (fermionic) operators. This function is calculated by the Lanczos procedure.^{16–18)} The single-particle Green's function may then be written as $G_{\hat{c}_{ia}, \hat{c}_{jb}^*}$, where a and b represent the internal degrees of freedom of the system, such as spin, orbital, sublattice, etc. We abbreviate the single-particle Green's function as $G_{ia, jb}$.

To calculate the single-particle excitation spectra in the thermodynamic limit, we use the CPT, where the original lattice is divided into the equal-shape disconnected clusters of L sites. We call the collection of the clusters forming the superlattice the reference system, and we denote $\tilde{\mathbf{k}}$ as the wave vector in the Brillouin zone defined for the superlattice, i.e., the wave vector is written as $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{G}} + \tilde{\mathbf{k}}$, where $\tilde{\mathbf{G}}$ is the reciprocal lattice vector for the superlattice. The Green's function in the CPT is given by^{27,28)}

$$G_{a, b}^{\text{CPT}}(\mathbf{k}, z) = \frac{1}{L} \sum_{i, j} e^{-ik \cdot (r_i - r_j)} \tilde{G}_{ia, jb}(\tilde{\mathbf{k}}, z) \quad (7)$$

where r_i and r_j are the site positions in the cluster and

$$\tilde{G}(\tilde{\mathbf{k}}, z) = [(G'(z))^{-1} - V(\tilde{\mathbf{k}})]^{-1}, \quad (8)$$

is the approximate single-particle Green's function of the original system in the matrix representation. Here, $G'^{-1}(z)$ is

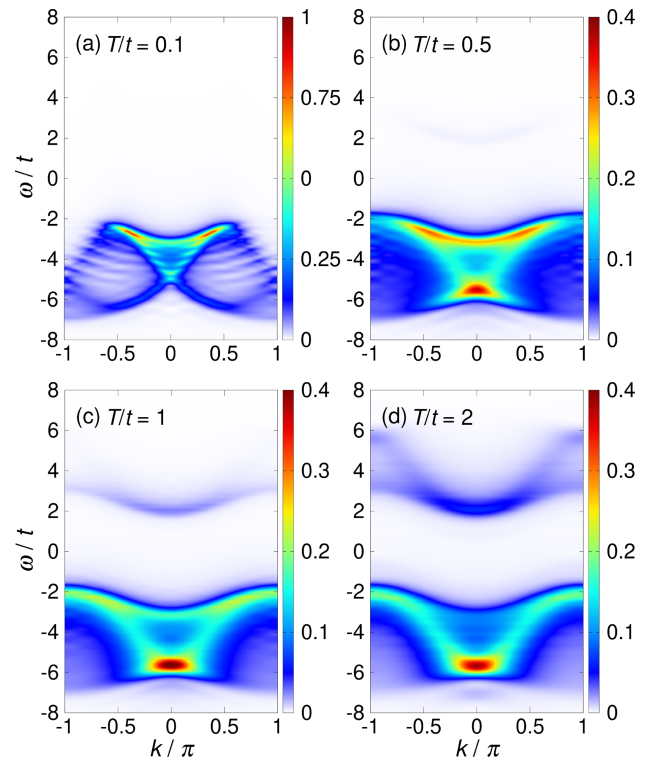


Fig. 1. (Color online) Contour plot of the photoemission spectra for the one-dimensional Hubbard model at (a) $T/t = 0.1$, (b) $T/t = 0.5$, (c) $T/t = 1$, and (d) $T/t = 2$ by the CPT. We set $U/t = 8$ and assume the size of the cluster to be $L = 12$ and the number of Lanczos iterations to be $N_L = 100$. Ten random samplings for the TPQ-state calculations are averaged.

the inverse of the exact Green's function of the reference system and $V(\tilde{\mathbf{k}})$ is the Fourier transform of $V = (G^{(0)})^{-1} - (G^{(0)})^{-1}$, the difference between the one-body-term Green's functions of the reference and original systems. With the CPT Green's function, the single-particle spectral function is given by $A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr } G^{\text{CPT}}(\mathbf{k}, z = \omega + i\eta)$.

First, to demonstrate the validity of the TPQ-state approach combined with the CPT, we calculate the photoemission spectral function $A^-(\mathbf{k}, \omega)$ for the one-dimensional Hubbard model at half filling at various temperatures. The results are shown in Fig. 1, which may be compared with the results obtained by the finite-temperature time-dependent density-matrix renormalization group method.³⁴⁾ We find that the agreement is very good: At low temperatures, the spinon and holon dispersions caused by the spin-charge separation³⁵⁾ appear, and with increasing temperature, the spinon dispersion gradually disappears while the holon dispersion remains. Also noticed is that thermally excited electrons go into the upper Hubbard band, leading to the emergence of the spectral weight above the Fermi level. We thus conclude that the TPQ-state approach combined with the CPT indeed works very well.

Next, we discuss the TPQ-state approach combined with the VCA. The VCA is an extended version of the CPT, where the grand potential of the original system is minimized by varying the self-energy of the reference system, or equivalently by varying one-body parameters in the cluster. The grand potential (per site) is given by³¹⁾

$$\Omega(\beta) = \Omega'(\beta) - \frac{1}{\beta L N_c} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_n \ln \det[1 - V(\tilde{\mathbf{k}}) G'(i\varepsilon_n)], \quad (9)$$

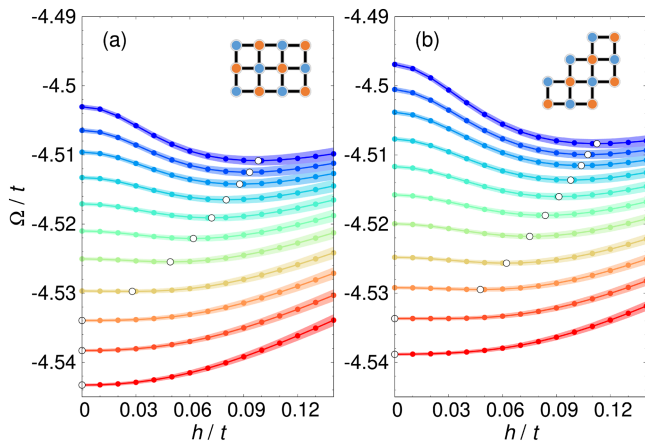


Fig. 2. (Color online) Calculated grand potentials as a function of the antiferromagnetic Weiss field at temperatures from $T/t = 0.2$ (blue line) to 0.3 (red line) in the interval of 0.01 . We assume the square-lattice Hubbard model at $U/t = 8$ and set the size of the clusters to be $L = 12$ with the shape shown in the inset. The width of the lines indicates the variance coming from the random samplings of the TPQ states. The white open circles represent the points at which the grand potential takes its minimum value. The number of random samplings for the TPQ states is 300 for calculating Ω' and 45 for calculating Green's functions.

where N_c is the number of the clusters in the system, $\varepsilon_n = (2n + 1)\pi/\beta$ is the Matsubara frequency, and

$$\Omega'(\beta) = -\frac{1}{\beta L} \ln(N_F \overline{|\psi_{\beta,\mu}\rangle}) \quad (10)$$

is the grand potential (per site) of the reference system. Here, $|\psi_{\beta,\mu}\rangle$ is the TPQ state in the cluster. Also, the average value of an operator \hat{O} in the VCA is given by

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{LN_c} \sum_{\vec{k}} \sum_n \text{Tr}\{\hat{O} G'(i\varepsilon_n)[1 - V(\vec{k})G'(i\varepsilon_n)]\}. \quad (11)$$

Because Eq. (9) contains the summation over an infinite number of Matsubara frequencies, which is difficult to calculate directly, we replace the summation in the high frequency part by the contour integral in the complex plane, as in Ref. 33.

The spontaneous symmetry breaking for antiferromagnetism is treated within the framework of the VCA by adding the Weiss field $\hat{\mathcal{H}}' = h \sum_{i,\sigma} \sigma e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} \hat{n}_{i,\sigma}$ to the Hamiltonian of the reference system, where h is the strength of the Weiss field and \mathbf{Q} is the ordering vector. The magnetic moment $m = \frac{1}{L} \mu_B \sum_{i,\sigma} \sigma e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} \langle \hat{n}_{i,\sigma} \rangle$, where μ_B is the Bohr magneton, is the order parameter of this system. Figures 2(a) and 2(b) show the grand potentials as a function of the Weiss field for antiferromagnetism with $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, calculated for the square-lattice Hubbard model at half filling with $U/t = 8$. We assume two different clusters of size $L = 12$ shown in the inset of Figs. 2(a) and 2(b). We find that the grand potentials have a minimum at a finite Weiss field, indicating that the antiferromagnetic (AF) ordering actually occurs. The calculated magnetic moment as a function of temperature is shown in Fig. 3(a), where we find that the phase transition is of the second order with the transition temperature $T_N/t = 0.28$. We should note here that, according to the Mermin–Wagner–Hohenberg theorem,^{36,37} any spontaneous breaking of continuous symmetries is prohibited in two dimension at finite temperature. Our results contradict with this theorem.

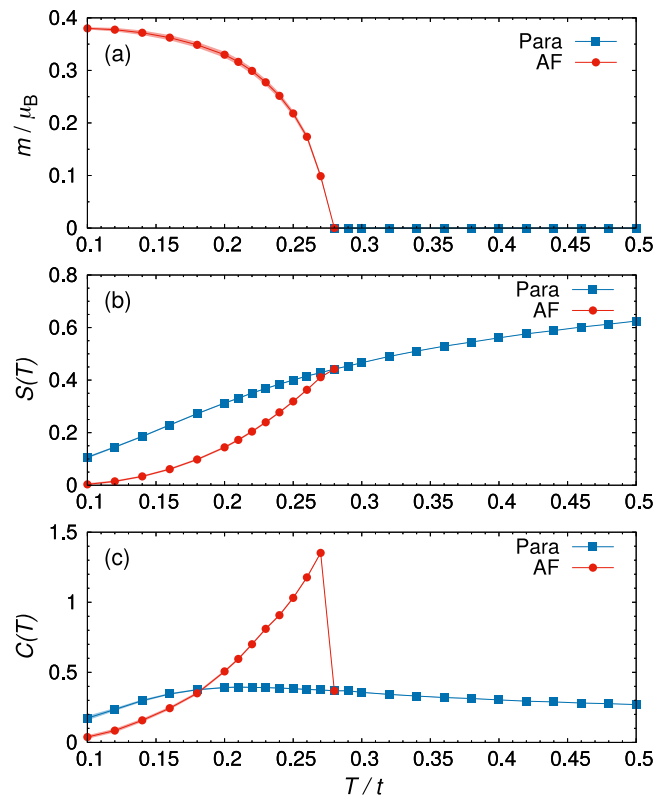


Fig. 3. (Color online) (a) Calculated order parameter m , entropy S , and specific heat C as a function of temperature T for the paramagnetic (Para) and AF phases of the square-lattice Hubbard model at $U/t = 8$. We assume the cluster of the size $L = 12$ with the shape shown in the inset of Fig. 2(a).

This is because the clustering of the original lattice cuts off the long-range correlations and correlations beyond the cluster size are treated only in a mean-field level where the Weiss field explicitly breaks the symmetry. Reflecting this situation, the transition temperature decreases as the cluster size increases.³³⁾

An advantage of the VCA is a direct calculation of the thermodynamic function $\Omega(T)$, which enables one to calculate the entropy and specific heat of the system directly as $S(T) = -(d\Omega/dT)$ and $C(T) = T(dS/dT)$. Figures 3(b) and 3(c) show the results for the temperature dependence of the entropy and specific heat of the system, respectively, calculated for the square-lattice Hubbard model at half filling with $U/t = 8$. We observe that a rapid decrease in the entropy occurs below the transition temperature, which is associated with a jump in the specific heat. These behaviors are consistent with the results given in Ref. 33, ensuring that the TPQ-state approach combined with the VCA is a powerful tool for calculating the thermodynamic quantities in systems where any phase transition occurs.

Finally, we calculate the temperature dependence of the single-particle excitation spectra in the TPQ-state approach combined with the VCA, assuming the same model as above. The results are shown in Figs. 4(a)–4(d), together with the density of states in Fig. 4(e). We find that the energy gap opens both below and above the transition temperature, so that the system is insulating in the entire temperature range. The band dispersions do not change largely across the phase transition point [see Figs. 4(b) and 4(c)]. We also find that the energy gap gradually decreases at very high temperatures

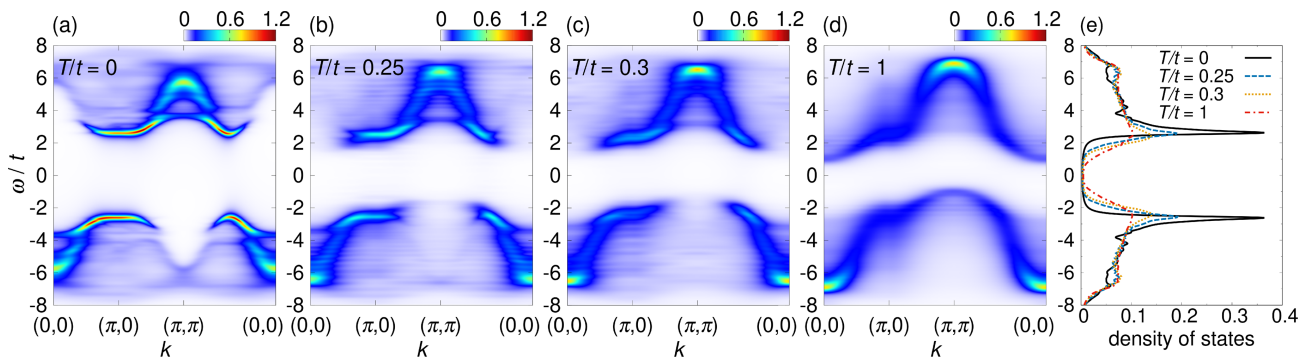


Fig. 4. (Color online) Contour plot of the calculated single-particle excitation spectra $A(\mathbf{k}, \omega)$ for the square-lattice Hubbard model at $U/t = 8$ both below and above the antiferromagnetic transition temperature $T_N/t = 0.28$. The results are given at (a) $T/t = 0$, (b) $T/t = 0.25$, (c) $T/t = 0.3$, and (d) $T/t = 1$. Calculated densities of states at different temperatures are also shown in (e). The cluster size is set to be $L = 12$ with the shape shown in the inset of Fig. 2(a). Ten random samplings for the TPQ-state calculations are averaged.

because many doublon states are created by thermal excitations. These results demonstrate the behavior of the Mott gap over a wide temperature range.

In summary, we developed the TPQ-state approach combined with the CPT and VCA and calculated the single-particle excitation spectra and specific heat of the Hubbard model at finite temperatures successfully. The primary advantage of the present approach is that the expectation value of the physical quantity can be obtained from the single TPQ state, so that one can efficiently investigate the thermodynamic properties of the system at high temperatures without diagonalizing the large Hamiltonian matrix. We note that the present approach is not restricted to the Hubbard model but is also applicable to other fermionic as well as bosonic models with strong correlations, and may also be useful for frustrated quantum systems where many nearly-degenerate eigenstates exist at low energies. Moreover, the calculations of the two-body correlation functions by the CPT and VCA^{38,39} can be extended to finite temperatures using the present TPQ-state approach. Our studies thus pave the way for future investigations of strongly correlated quantum systems at finite temperatures.

Acknowledgments We thank Ayumu Sugita for tutorial lectures on the typicality-based approaches and Tomoki Yamaguchi for enlightening discussions. This work was supported in part by JSPS KAKENHI Grants (Nos. JP19J20768, JP19K14644, and JP17K05530) and Keio University Academic Development Funds for Individual Research. The numerical calculations were carried out at YITP in Kyoto University and at Research Center for Computational Science in Okazaki Research Facilities.

*nishida-h@chiba-u.jp

- 1) T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1027 (2005).
- 2) D. Sénéchal, [arXiv:0806.2690](https://arxiv.org/abs/0806.2690).
- 3) A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- 4) E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 349 (2011).
- 5) E. Y. Loh, Jr., J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, S. R. White, D. J. Scalapino, and R. L. Sugar, *Phys. Rev. B* **41**, 9301 (1990).

- 6) M. Troyer and U.-J. Wiese, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 170201 (2005).
- 7) S. Sugiura and A. Shimizu, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 240401 (2012).
- 8) S. Sugiura and A. Shimizu, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 010401 (2013).
- 9) M. Hyuga, S. Sugiura, K. Sakai, and A. Shimizu, *Phys. Rev. B* **90**, 121110(R) (2014).
- 10) S. Goldstein, J. L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zanghì, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 050403 (2006).
- 11) S. Popescu, A. J. Short, and A. Winter, *Nat. Phys.* **2**, 754 (2006).
- 12) A. Sugita, *Nonlinear Phenom. Complex Syst.* **10**, 192 (2007).
- 13) P. Reimann, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 160404 (2007).
- 14) M. Imada and M. Takahashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**, 3354 (1986).
- 15) A. Hams and H. De Raedt, *Phys. Rev. E* **62**, 4365 (2000).
- 16) J. Jaklič and P. Prelovšek, *Phys. Rev. B* **49**, 5065 (1994).
- 17) J. Jaklič and P. Prelovšek, *Adv. Phys.* **49**, 1 (2000).
- 18) M. Aichhorn, M. Daghofer, H. G. Evertz, and W. von der Linden, *Phys. Rev. B* **67**, 161103(R) (2003).
- 19) C. Bartsch and J. Gemmer, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 110403 (2009).
- 20) T. A. Elsayed and B. V. Fine, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 070404 (2013).
- 21) R. Steinigeweg, J. Gemmer, and W. Brenig, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 120601 (2014).
- 22) T. Monnai and A. Sugita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 094001 (2014).
- 23) F. Jin, R. Steinigeweg, F. Heidrich-Meisner, K. Michielsen, and H. De Raedt, *Phys. Rev. B* **92**, 205103 (2015).
- 24) R. Steinigeweg, J. Herbrych, F. Pollmann, and W. Brenig, *Phys. Rev. B* **94**, 180401(R) (2016).
- 25) Y. Yamaji, T. Suzuki, and M. Kawamura, [arXiv:1802.02854](https://arxiv.org/abs/1802.02854).
- 26) J. Richter and R. Steinigeweg, *Phys. Rev. B* **99**, 094419 (2019).
- 27) D. Sénéchal, D. Perez, and M. Pioro-Ladrière, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 522 (2000).
- 28) D. Sénéchal, D. Perez, and D. Plouffe, *Phys. Rev. B* **66**, 075129 (2002).
- 29) M. Potthoff, *Eur. Phys. J. B* **32**, 429 (2003).
- 30) M. Potthoff, *Eur. Phys. J. B* **36**, 335 (2003).
- 31) M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 206402 (2003).
- 32) C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke, E. Arrighoni, and M. Potthoff, *Phys. Rev. B* **70**, 245110 (2004).
- 33) K. Seki, T. Shirakawa, and S. Yunoki, *Phys. Rev. B* **98**, 205114 (2018).
- 34) A. Nocera, F. H. L. Essler, and A. E. Feiguin, *Phys. Rev. B* **97**, 045146 (2018).
- 35) C. Kim, Z.-X. Shen, N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, T. Tohyama, and S. Maekawa, *Phys. Rev. B* **56**, 15589 (1997).
- 36) N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- 37) P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **158**, 383 (1967).
- 38) S. Brehm, E. Arrighoni, M. Aichhorn, and W. Hanke, *Europhys. Lett.* **89**, 27005 (2010).
- 39) P. T. Raum, G. Alvarez, T. Maier, and V. W. Scarola, [arXiv:1908.10361](https://arxiv.org/abs/1908.10361).

Spin texture and spin current in excitonic phases of the two-band Hubbard modelHisao Nishida,¹ Shohei Miyakoshi,² Tatsuya Kaneko,³ Koudai Sugimoto,⁴ and Yukinori Ohta¹¹*Department of Physics, Chiba University, Chiba 263-8522, Japan*²*Computational Quantum Matter Research Team, RIKEN Center for Emergent Matter Science (CEMS), Wako, Saitama 351-0198, Japan*³*Computational Condensed Matter Physics Laboratory, RIKEN Cluster for Pioneering Research (CPR), Wako, Saitama 351-0198, Japan*⁴*Center for Frontier Science, Chiba University, Chiba 263-8522, Japan*

(Received 16 October 2018; revised manuscript received 27 December 2018; published 10 January 2019)

Using the mean-field approximation, we study the k -space spin textures and local spin currents emerged in the spin-triplet excitonic insulator states of the two-band Hubbard model defined on the square and triangular lattices. We assume a noninteracting band structure with a direct band gap and introduce s -, p -, d -, and f -type cross-hopping integrals, i.e., the hopping of electrons between different orbitals on adjacent sites with four different symmetries. First, we calculate the ground-state phase diagrams in the parameter space of the band filling and interaction strengths, whereby we present the filling dependence of the amplitude and phase of the excitonic order parameters. Then, we demonstrate that the spin textures (or asymmetric band structures) are emerged in the Fermi surfaces by the excitonic symmetry breaking when particular phases of the order parameter are stabilized. Moreover, in the case of the p -type cross-hopping integrals, we find that the local spin current can be induced spontaneously in the system, which does not contradict the Bloch theorem for the absence of the global spin current. The proofs of the absence of the global spin current and the possible presence of the local spin currents are given on the basis of the Bloch theorem and symmetry arguments.

DOI: [10.1103/PhysRevB.99.035119](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.035119)**I. INTRODUCTION**

The excitonic phase, which is sometimes referred to as the excitonic insulator phase, is the state where valence-band holes and conduction-band electrons in small band-gap semiconductors or small band-overlap semimetals form pairs (or excitons) due to weakly screened Coulomb interactions, and a macroscopic number of the pairs condense into a quantum state acquiring the phase coherence. Although the excitonic phase was predicted to occur more than half a century ago as a spontaneous hybridization between the valence and conduction bands and has attracted much attention because a theoretical framework similar to that of BCS superconductors can be applied [1–7], the lack of candidate materials delayed our understandings of this phase until recently. However, the progress in this research field has been made rapidly in recent years owing to the discovery of some candidate materials. The spin-singlet excitonic phase has been suggested to emerge in some transition-metal chalcogenides such as $1T$ -TiSe₂ [8–13] and Ta₂NiSe₅ [14–21], and the spin-triplet excitonic phase has also been suggested to emerge in some cobalt oxide materials located in the crossover regime between the high-spin and low-spin states [22–31]. Since these materials are transition-metal compounds, the relevant properties should be considered within the framework of the physics of strong electron correlations using the Hubbard-like lattice models [32–42].

In a series of such studies, Kuneš and Geffroy [43] discussed the effects of cross-hopping integrals on the excitonic states in the two-band Hubbard model, where the cross hopping is defined as the hopping of electrons between different orbitals on the adjacent sites. The hopping integral between

different orbitals on the same site vanishes exactly because of the orthogonality of the orbitals, but the cross-hopping integrals between the adjacent sites can have a finite value [44]. Since the hybridization between the orthogonal orbitals occurs spontaneously due to interorbital Coulomb interactions in the excitonic phase, one may naturally expect that the hybridization caused by the cross-hopping integrals should affect the excitonic phase significantly. Kuneš and Geffroy, in particular, showed that the k -space spin texture, similar to the one derived from the Rashba-Dresselhaus spin-orbit coupling, can appear in the spin-triplet excitonic phases even in centrosymmetric lattices without any intrinsic spin-orbit coupling.

Kuneš and Geffroy [43] also argued that the spontaneous spin currents can appear if the order parameters of the spin-triplet excitonic phase are imaginary. Using different models with certain cross-hopping integrals, Volkov *et al.* [45,46] discussed the relationship between the excitonic phase and imaginary order parameters and showed that the spin current of the orbital off-diagonal components can remain finite, but the total spin current including both the orbital diagonal and off-diagonal components vanishes exactly. Thus, they concluded that the global spin currents can never appear spontaneously in the equilibrium excitonic phase. Geffroy *et al.* [47] also pointed out the absence of the global spin current. This result is consistent with the Bloch theorem [48,49] that claims that the global spin current does not appear spontaneously in the ground state. The existence of the spontaneous global spin current is thus unlikely to occur in the excitonic phases of strongly correlated electron systems.

In this paper, motivated by the above developments in the field, we study the excitonic phases of the two-band Hubbard

models with cross-hopping integrals within the mean-field approximation. We assume the square and triangular lattices in two dimensions and examine the cross-hopping integrals of four types, i.e., s , p , d , and f types. We thus calculate the ground-state phase diagram of the models and clarify the behaviors of the excitonic order parameters, Fermi surfaces, band dispersions, and spin currents. In particular, we discuss the relationship between the global spin currents and excitonic phase with imaginary order parameters. We thereby find that the spin textures are emerged in the Fermi surfaces by the excitonic symmetry breaking when particular phases of the order parameter are stabilized and that the local spin current can be induced in the system with the p -type cross-hopping integral. The proofs of the absence of the global spin current and the possible presence of the local spin currents are also given on the basis of the Bloch theorem and symmetry arguments. We thus present a comprehensive understanding of the spin textures and spin currents in the spin-triplet excitonic phases of the two-band Hubbard model.

The rest of this paper is organized as follows. In Sec. II, we introduce the two-band Hubbard model with the cross hopping integrals and derive the self-consistent equations for obtaining the ground state of the model in the mean-field approximation. In Sec. III, we present the calculated results for the phase diagram of the system, k -space spin texture, features of the order parameters, and the local and global spin currents of the system. We summarize our results in Sec. IV. Appendices are provided to show the proofs of the absence of the global spin currents and the possible presence of the local spin currents in the excitonic phases of the model.

II. MODEL AND METHOD

A. Model

We consider the two-band Hubbard model defined on the two-dimensional lattices. The Hamiltonian is written as

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_t = & \sum_{j,\tau,\sigma} (t_c \hat{c}_{j+\tau,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + t_f \hat{f}_{j+\tau,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} + \text{H.c.}) \\ & + \sum_{j,\tau,\sigma} (V_{1,\tau} \hat{c}_{j+\tau,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} + V_{2,\tau} \hat{f}_{j+\tau,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \text{H.c.}) \\ & + \frac{D}{2} \sum_{j,\sigma} (\hat{n}_{j,\sigma}^c - \hat{n}_{j,\sigma}^f) - \mu \sum_{j,\sigma} (\hat{n}_{j,\sigma}^c + \hat{n}_{j,\sigma}^f), \quad (2) \end{aligned}$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_j (U_c \hat{n}_{j,\uparrow}^c \hat{n}_{j,\downarrow}^c + U_f \hat{n}_{j,\uparrow}^f \hat{n}_{j,\downarrow}^f) + U' \sum_{j,\sigma,\sigma'} \hat{n}_{j,\sigma}^c \hat{n}_{j,\sigma'}^f, \quad (3)$$

where $\hat{c}_{j,\sigma}^\dagger$ ($\hat{f}_{j,\sigma}^\dagger$) and $\hat{c}_{j,\sigma}$ ($\hat{f}_{j,\sigma}$) are the creation and annihilation operators of an electron on the conduction (c) orbital [valence (f) orbital] at site j with spin σ . We define the number operators $\hat{n}_{j,\sigma}^c = \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma}$ and $\hat{n}_{j,\sigma}^f = \hat{f}_{j,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma}$. In \hat{H}_t , D is the on-site energy splitting, μ is the chemical potential, t_c and t_f are the hopping integrals between the same orbitals on the nearest-neighbor sites, and $V_{1,\tau}$ and $V_{2,\tau}$ are the hopping integrals between the different orbitals on

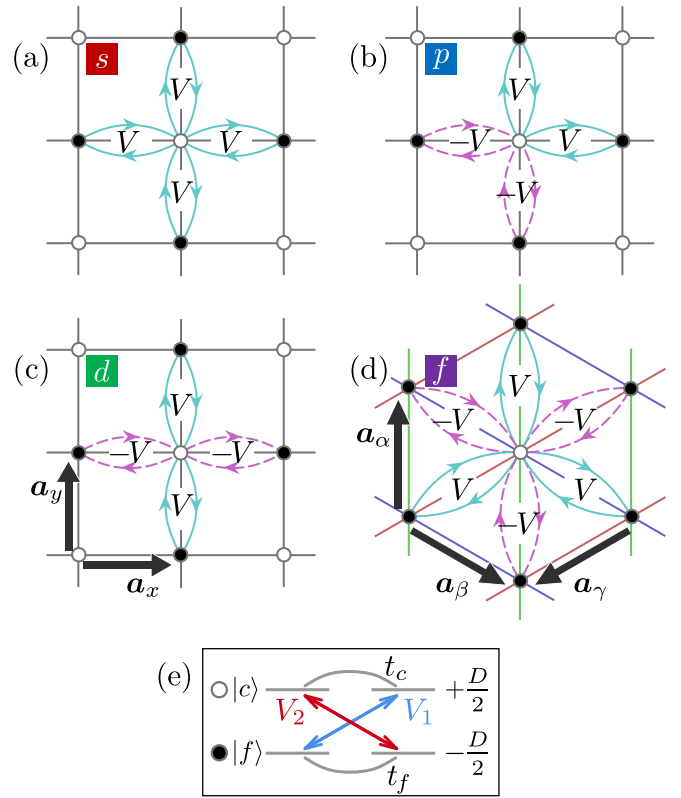


FIG. 1. Schematic representations of (a) the s -, (b) p -, (c) d -, and (d) f -type cross-hopping integrals defined on either the square or triangular lattice. The blue bonds indicate $V_{1,\tau} = V_{2,\tau} = V$ and the purple bonds indicate $V_{1,\tau} = -V_{2,\tau} = V$. In (e), the direct hoppings (t_c and t_f) and cross hoppings (V_1 and V_2) are illustrated. The primitive translation vectors are $\mathbf{a}_x = (1, 0)$ and $\mathbf{a}_y = (0, 1)$ in (c), and $\mathbf{a}_\alpha = (0, 1)$, $\mathbf{a}_\beta = (\sqrt{3}/2, -1/2)$, and $\mathbf{a}_\gamma = (-\sqrt{3}/2, -1/2)$ in (d).

the nearest-neighbor sites. $V_{1,\tau}$ and $V_{2,\tau}$ are referred to as the cross-hopping integrals. Note that $j + \tau$ indicates the nearest-neighbor site of j , where j runs over all sites in the system and τ denotes the primitive translation vector \mathbf{a}_τ illustrated in Fig. 1(c) for the square lattice and Fig. 1(d) for the triangular lattice. In \hat{H}_{int} , U_c and U_f are the intraorbital Coulombic repulsive interactions, and U' is the interorbital Coulombic repulsive interaction. This model is illustrated in Fig. 1, where \mathbf{a}_τ is the vector from site j to site $j + \tau$ (or the primitive translation vector). The Fourier transformation of Eq. (2) reads

$$\hat{H}_t = \sum_{k,\sigma} (\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{f}_{k,\sigma}^\dagger) \begin{pmatrix} \varepsilon_c(\mathbf{k}) & \gamma(\mathbf{k}) \\ \gamma^*(\mathbf{k}) & \varepsilon_f(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{k,\sigma} \\ \hat{f}_{k,\sigma} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

where the matrix elements are

$$\varepsilon_c(\mathbf{k}) = 2t_c \sum_{\tau} \cos k_{\tau} + \frac{D}{2} - \mu, \quad (5)$$

$$\varepsilon_f(\mathbf{k}) = 2t_f \sum_{\tau} \cos k_{\tau} - \frac{D}{2} - \mu, \quad (6)$$

$$\gamma(\mathbf{k}) = 2 \sum_{\tau} (V_{\tau} \cos k_{\tau} + i V'_{\tau} \sin k_{\tau}), \quad (7)$$

with $V_\tau = (V_{1,\tau} + V_{2,\tau})/2$, $V'_\tau = (V_{1,\tau} - V_{2,\tau})/2$, and $k_\tau = \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\tau$. We assume the hopping integrals as $-t_c = t_f = t = 1$ (direct gap) and set $D = 6$ and $U_c = U_f = U$ throughout the paper.

We consider four types of the cross-hopping integrals, i.e., s , p , d , and f types, where s , p , and d types are for the square lattice and f type is for the triangular lattice. The signs of $V_{1,\tau}$ and $V_{2,\tau}$ for each type are shown in Fig. 1. We set $V_{1,\tau} = V_{2,\tau} = V_{1,-\tau} = V_{2,-\tau}$ for the s and d types and $V_{1,\tau} = -V_{2,\tau} = -V_{1,-\tau} = V_{2,-\tau}$ for the p and f types, where $-\tau$ denotes the primitive translation vector in the opposite direction, $-\mathbf{a}_\tau$. Thus, we rewrite Eq. (7) as

$$\gamma(\mathbf{k}) = 2(V_x \cos k_x + V_y \cos k_y) \quad (8)$$

for s type,

$$\gamma(\mathbf{k}) = 2i(V'_x \sin k_x + V'_y \sin k_y) \quad (9)$$

for p type,

$$\gamma(\mathbf{k}) = 2(V_x \cos k_x - V_y \cos k_y) \quad (10)$$

for d type, and

$$\gamma(\mathbf{k}) = 2i \sum_{\tau=\alpha,\beta,\gamma} V'_\tau \sin k_\tau \quad (11)$$

with $k_\gamma = -k_\alpha - k_\beta$ for f type. Hereafter, we assume $V_\tau = V'_\tau = V = 0.1t$. Note that the space inversion of the s - and d -type cross-hopping integrals has even parity, while that of the p - and f -type ones has odd parity. Also, when there are no cross-hopping integrals, the ground state of our two-band model at half filling is a band insulator for $U', D \gg U$, while it is a Mott insulator for $U', D \ll U$, and the excitonic insulator state appears in the intermediate region [44,50,51].

B. Mean-field theory

We use the mean-field theory to obtain the ground state of the model. The excitonic order parameter is given by

$$\begin{aligned} \Phi_q &= \frac{1}{L^2} \sum_{j,\sigma,\sigma'} e^{-iq \cdot \mathbf{r}_j} \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger T_{\sigma,\sigma'}(l) \hat{f}_{j,\sigma'} \rangle \\ &= \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k},\sigma,\sigma'} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger T_{\sigma,\sigma'}(l) \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma'} \rangle, \end{aligned} \quad (12)$$

where $T(l) = l_0 I + \mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ with $l = (l_0, \mathbf{l})$ and $\mathbf{l} = (l_1, l_2, l_3)$, satisfying $l_0^2 + \mathbf{l} \cdot \mathbf{l} = 1$ for real numbers l_r ($r = 0, 1, 2, 3$). L^2 is the number of lattice sites in the system. In this paper, we assume the spin-triplet excitonic order of the spin direction along the z axis: i.e., $T(l) = \sigma_z$. Note that the energy of the spin-singlet excitonic order ($l_0 \neq 0$ and $\mathbf{l} = 0$) and that of the spin-triplet excitonic order ($l_0 = 0$ and $\mathbf{l} \neq 0$) are the same in the present model. However, we implicitly assume the presence of the exchange interactions like Hund's rule coupling, which stabilizes the spin-triplet excitonic order [38]. We do not consider the spin-singlet excitonic order, which may be stabilized in the presence of strong electron-phonon couplings [39].

If we restrict ourselves to the case $\mathbf{q} = 0$ (direct gap), the excitonic ordering changes the matrix $\gamma(\mathbf{k})$ as

$$\gamma(\mathbf{k}) \rightarrow \gamma'_\sigma(\mathbf{k}) = \gamma(\mathbf{k}) - \frac{U'}{2} \sigma \Phi_0^*. \quad (13)$$

The symmetry of the excitonic order depends on the phases of the hybridization term $\gamma(\mathbf{k})$ and order parameter Φ_0 . The mean-field Hamiltonian of the two-band Hubbard model may then read

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger) \begin{pmatrix} \varepsilon'_c(\mathbf{k}) & \gamma'_\sigma(\mathbf{k}) \\ \gamma'^*_\sigma(\mathbf{k}) & \varepsilon'_f(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} + 2L^2 \varepsilon_0, \quad (14)$$

with

$$\varepsilon'_c(\mathbf{k}) = 2g_c(\mathbf{k}) + \frac{D}{2} - \frac{n}{4}(U - 2U') - \mu_0, \quad (15)$$

$$\varepsilon'_f(\mathbf{k}) = 2g_f(\mathbf{k}) - \frac{D}{2} + \frac{n}{4}(U - 2U') - \mu_0, \quad (16)$$

$$\gamma'_\sigma(\mathbf{k}) = 2h(\mathbf{k}) - \frac{U'}{2} \sigma |\Phi_0^\dagger| e^{-i\phi}, \quad (17)$$

$$\varepsilon_0 = -\left(\frac{N}{4}\right)^2 (U + 2U') - \left(\frac{n}{4}\right)^2 (U - 2U') + \frac{U'}{4} |\Phi_0^\dagger|^2, \quad (18)$$

where we define $g_{c(f)}(\mathbf{k}) = t_{c(f)} \sum_\tau \cos k_\tau$, $h(\mathbf{k}) = \sum_\tau (V_\tau \cos k_\tau + i V'_\tau \sin k_\tau)$, and $\mu_0 = \mu - \frac{N}{4}(U + 2U')$. The number of electrons per unit cell is given by $N = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^c \rangle + \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^f \rangle)$, where $N = 2$ is for the half-filled band, and the difference between the numbers of c and f electrons is given by $n = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^f \rangle - \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^c \rangle)$.

We define the $\mathbf{q} = 0$ spin-triplet excitonic order parameter as

$$\Phi_0^\dagger = |\Phi_0^\dagger| e^{i\phi} = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sigma \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle, \quad (19)$$

where ϕ is the phase of the complex order parameter and $\sigma = \pm 1$. The mean-field Hamiltonian can be diagonalized by the Bogoliubov transformation

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha}_{\mathbf{k},\sigma,+} \\ \hat{\alpha}_{\mathbf{k},\sigma,-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k},\sigma} & e^{i\theta_{\mathbf{k},\sigma}} v_{\mathbf{k},\sigma} \\ e^{-i\theta_{\mathbf{k},\sigma}} v_{\mathbf{k},\sigma} & -u_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix}, \quad (20)$$

where we take $u_{\mathbf{k},\sigma}$ and $v_{\mathbf{k},\sigma}$ to be real, and $v_{\mathbf{k},\sigma}$ is multiplied by the phase factor $e^{i\theta_{\mathbf{k},\sigma}}$. This assumption does not lose generality because the relative phase of $u_{\mathbf{k},\sigma}$ and $v_{\mathbf{k},\sigma}$ is fixed in the Bogoliubov transformation. Since the Bogoliubov transformation is unitary, the identity $|u_{\mathbf{k},\sigma}|^2 + |v_{\mathbf{k},\sigma}|^2 = 1$ is satisfied. Thus, we obtain the diagonalized mean-field Hamiltonian as

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (E_{\mathbf{k},\sigma}^+ \hat{\alpha}_{\mathbf{k},\sigma,+}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k},\sigma,+} + E_{\mathbf{k},\sigma}^- \hat{\alpha}_{\mathbf{k},\sigma,-}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k},\sigma,-}) + 2L^2 \varepsilon_0, \quad (21)$$

with the quasiparticle band dispersions

$$E_{k,\sigma}^{\pm} = \eta_k \pm \sqrt{\xi_k^2 + |\gamma'_\sigma(\mathbf{k})|^2}, \quad (22)$$

$$\eta_k = \frac{1}{2}(\varepsilon'_c(\mathbf{k}) + \varepsilon'_f(\mathbf{k})), \quad (23)$$

$$\xi_k = \frac{1}{2}(\varepsilon'_c(\mathbf{k}) - \varepsilon'_f(\mathbf{k})). \quad (24)$$

The transformation coefficients and complex phase factor are given by

$$u_{k,\sigma}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + |\gamma'_\sigma(\mathbf{k})|^2}} \right), \quad (25)$$

$$v_{k,\sigma}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + |\gamma'_\sigma(\mathbf{k})|^2}} \right), \quad (26)$$

$$e^{i\theta_{k,\sigma}} = \frac{\gamma'_\sigma(\mathbf{k})}{|\gamma'_\sigma(\mathbf{k})|}. \quad (27)$$

Thus, the self-consistent equations are given by

$$N = \frac{1}{L^2} \sum_{k,\sigma} [f(E_{k,\sigma}^+) + f(E_{k,\sigma}^-)], \quad (28)$$

$$n = \frac{1}{L^2} \sum_{k,\sigma} (u_{k,\sigma}^2 - v_{k,\sigma}^2) [f(E_{k,\sigma}^+) - f(E_{k,\sigma}^-)], \quad (29)$$

$$\Phi_0^l = \frac{1}{L^2} \sum_{k,\sigma} \sigma u_{k,\sigma} v_{k,\sigma} e^{-i\theta_{k,\sigma}} [f(E_{k,\sigma}^+) - f(E_{k,\sigma}^-)], \quad (30)$$

where we define the Fermi distribution function $f(E_{k,\sigma}^{\pm}) = \langle \hat{\alpha}_{k,\sigma,\pm}^\dagger \hat{\alpha}_{k,\sigma,\pm} \rangle = 1/(1 + e^{\beta E_{k,\sigma}^{\pm}})$ using the reciprocal temperature β . We carry out the following calculations at zero temperature.

III. RESULTS AND DISCUSSION

A. Order parameter and k -space spin textures

Let us first discuss the excitonic order parameter focusing on its phase, which can cause the k -space spin textures. When the cross hopping is introduced, the phase of the excitonic order parameter is fixed to a certain value that depends on both types of the cross hopping and electron filling N [43]. The calculated results for the phase diagram are summarized in Fig. 2; the results in the parameter space of (N, U') at $U = 9$ are shown in Figs. 2(a)–2(d) and the results in the parameter space of (N, U) at $U' = 5$ are shown in Figs. 2(e)–2(h). The calculated results for the amplitude $|\Phi_0^l|$ and phase ϕ of the order parameter are also shown in Figs. 2(i)–2(l) at $U = 9.5$ and $U' = 5$ as a function of N . In the normal phase where the order parameter is zero, the system is a band insulator at half filling ($N = 2$) and a metal at $N < 2$. As the number of electrons decreases from $N = 2$, the required U for the excitonic phase transition increases. In the excitonic phase, the phase of the order parameter strongly depends on the types of the cross hopping and N . When the cross hopping is present, the k -space spin texture can emerge, where the splitting of the up-spin and down-spin bands occurs in the excitonic phase as is illustrated in Fig. 3 and Fig. 4. In the following, we discuss

the k -space spin texture in the even-parity (s - and d -type) and odd-parity (p - and f -type) cross-hopping cases separately.

For the s - and d -type cross-hopping integrals (even-parity case), we find that the phase is fixed to $\phi = \pi/2$ at $N = 2$, which decreases with decreasing N monotonically to zero. A finite value of the magnetization emerges, whose sign is opposite to the direction of the excitonic order parameter, in agreement with the preceding study [43]. We define the magnetization of each orbital ($\ell = c, f$) as $m_0^\ell = \frac{1}{2L^2} \sum_{k,\sigma} \sigma \langle \hat{n}_{k,\sigma}^\ell \rangle$, which is calculated in the mean-field approximation $\varepsilon'_\ell(\mathbf{k}) \rightarrow \varepsilon'_\ell(\mathbf{k}) - U\sigma m_0^\ell$ and $\varepsilon_0 \rightarrow \varepsilon_0 + U/2[(m_0^c)^2 + (m_0^f)^2]$. In the case of s -type cross hopping, there occurs the mixing between the orbital diagonal component of the order parameters (or magnetization) and the orbital off-diagonal component of the order parameter (or excitonic order), so that the excitonic order is accompanied necessarily by the magnetization. From Eqs. (17) and (22), we find that the quasiparticle band splits at $\phi \neq \pi/2$ since $h(\mathbf{k})$ is real.

The calculated k -space spin textures (or spin-dependent Fermi surfaces) are shown in Figs. 3(a) and 3(c) for the s - and d -type even-parity cross-hopping integrals, respectively, and the corresponding quasiparticle band dispersions are shown in Figs. 4(a), 4(b), and 4(e). The time-reversal symmetry breaking by the excitonic ordering leads to $E_{k,\sigma}^{\pm} = E_{k,\sigma}^{\pm}$ and $E_{k,\sigma}^{\pm} \neq E_{-k,-\sigma}^{\pm}$, whereby the degeneracy of the up-spin and down-spin bands is lifted along the ω direction. In the case of the s -type cross-hopping integral, the excitonic order splits the up-spin and down-spin bands along the ω direction in the entire k space, resulting in the net spin polarization. In the d -type cross-hopping integral, the excitonic order splits the spin bands as well, but due to the k -dependent spin occupation of the bands (or spin texture), the net spin polarization vanishes. Such a difference caused by the cross-hopping integrals affects the self-consistent equations, thereby giving rise to a qualitative difference in the orders of the excitonic phase transitions [see Figs. 2(i) and 2(k)].

On the other hand, for the p - and f -type cross-hopping integrals (odd-parity case), we find that the phase is fixed to $\phi = 0$ at $N = 2$, increases continuously with decreasing N , and reaches a constant value $\pi/2$ at $N < 1.96$ for the p type and at $N < 1.98$ for the f type. We also find that the excitonic order parameter continuously decreases with decreasing N . Since $h(\mathbf{k})$ is pure imaginary, the degeneracy of the up-spin and down-spin bands is lifted along the k direction (rather than the ω direction) when $\phi \neq 0$. The k -space spin textures are shown in Figs. 3(b) and 3(d) for the p - and f -type cross-hopping integrals, respectively, and the corresponding quasiparticle band dispersions are shown in Figs. 4(c), 4(d), and 4(f). The inversion symmetry breaking by the excitonic ordering leads to $E_{k,\sigma}^{\pm} \neq E_{-k,\sigma}^{\pm}$ and $E_{k,\sigma}^{\pm} = E_{-k,-\sigma}^{\pm}$, whereby the splitting of the up-spin and down-spin bands emerges. The splitting characteristic of the inversion symmetry breaking is clearly visible in the $X'-\Gamma-X$ line of the Brillouin zone [see Figs. 4(c) and 4(d)] as well as in the $K-\Gamma-K'$ line of the Brillouin zone [see Fig. 4(f)].

B. Spin currents

Next, let us discuss the local and global spin currents in the excitonic phases of our model. The global spin current may be

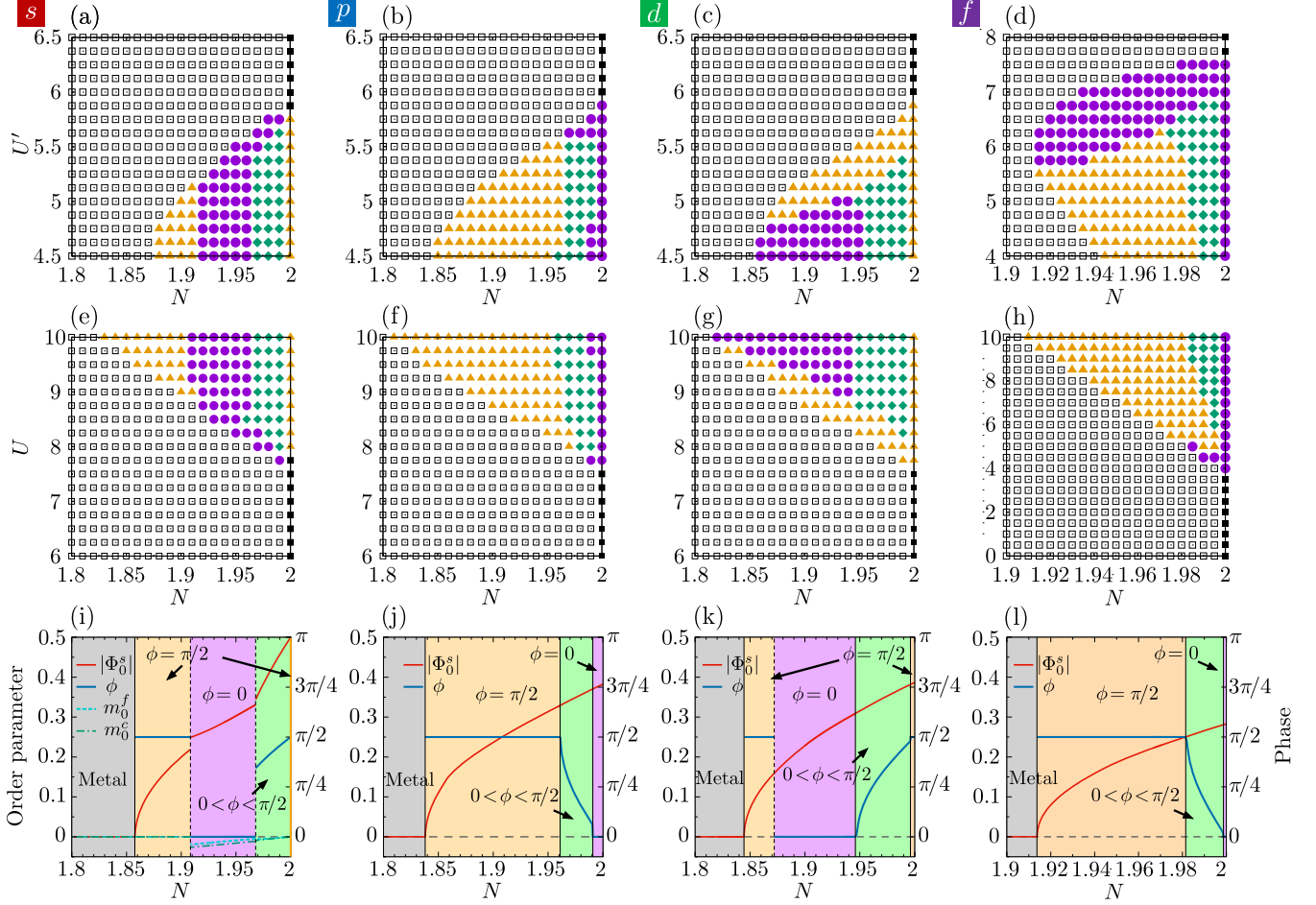


FIG. 2. Calculated phase diagrams of our model in the parameter space of (N, U') at $U = 9$ (upper panels) and (N, U) at $U' = 5$ (middle panels), where N is the number of electrons per site. The cross-hopping integrals of (a),(e) s , (b),(f) p , (c),(g) d , and (d),(h) f type are assumed. Circles, diamonds, and triangles in the phase diagrams represent the excitonic phases with the phase $\phi = 0$, $0 < \phi < \pi/2$, and $\phi = \pi/2$, respectively, and squares represent the normal phase. In the lower panels (i)–(l), we show the calculated amplitude $|\Phi_0^s|$ (red) and phase ϕ (blue) of the excitonic order parameter at $U = 9.5$ and $U' = 5$ as a function of N , where we assume the cross-hopping parameters of (i) s , (j) p , (k) d , and (l) f type. The solid and dotted lines at the phase boundaries represent the second- and first-order phase transitions, respectively.

defined as

$$\hat{\mathbf{J}}_{\text{tot}}^s = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\sigma}{2} (\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger) \nabla_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \varepsilon'_c(\mathbf{k}) & \gamma'_\sigma(\mathbf{k}) \\ \gamma'^*_{\sigma'}(\mathbf{k}) & \varepsilon'_f(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \\ \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma} \end{pmatrix} \quad (31)$$

with $\nabla_{\mathbf{k}} = \sum_{\tau} \mathbf{a}_{\tau} \frac{\partial}{\partial k_{\tau}}$, which may be separated into the orbital diagonal component

$$\hat{\mathbf{J}}_{cc}^s + \hat{\mathbf{J}}_{ff}^s = -\frac{1}{L^2} \sum_{\tau, \mathbf{k}, \sigma} \sigma t_c \sin k_{\tau} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \mathbf{a}_{\tau} - \frac{1}{L^2} \sum_{\tau, \mathbf{k}, \sigma} \sigma t_f \sin k_{\tau} \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma} \mathbf{a}_{\tau} \quad (32)$$

and orbital off-diagonal component

$$\hat{\mathbf{J}}_{cf}^s + \hat{\mathbf{J}}_{fc}^s = \frac{1}{L^2} \sum_{\tau, \mathbf{k}, \sigma} \sigma (-V_{\tau} \sin k_{\tau} + i V'_{\tau} \cos k_{\tau}) \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma} \mathbf{a}_{\tau} + \frac{1}{L^2} \sum_{\tau, \mathbf{k}, \sigma} \sigma (-V_{\tau} \sin k_{\tau} - i V'_{\tau} \cos k_{\tau}) \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \mathbf{a}_{\tau}. \quad (33)$$

Let us consider the diagonal component first. The expectation value of the diagonal component is given by

$$\langle \hat{\mathbf{J}}_{cc}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{ff}^s \rangle = -\frac{t}{L^2} \sum_{\tau, \mathbf{k}, \sigma}^{\text{occ.}} \sigma \frac{\xi_{\mathbf{k}} \sin k_{\tau}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\gamma'_{\sigma}(\mathbf{k})|^2}} \mathbf{a}_{\tau}, \quad (34)$$

where occ. means the summation over the \mathbf{k} points at which the quasiparticle band $E_{\mathbf{k}, \sigma}^-$ is occupied. In the even-parity case, we have $\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{-\mathbf{k}}$ and $|\gamma'_{\sigma}(\mathbf{k})|^2 = |\gamma'_{\sigma}(-\mathbf{k})|^2$, which lead to $\langle \hat{\mathbf{J}}_{cc}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{ff}^s \rangle = 0$ since the integrand of Eq. (34) becomes an odd function with respect to \mathbf{k} . Therefore, the diagonal

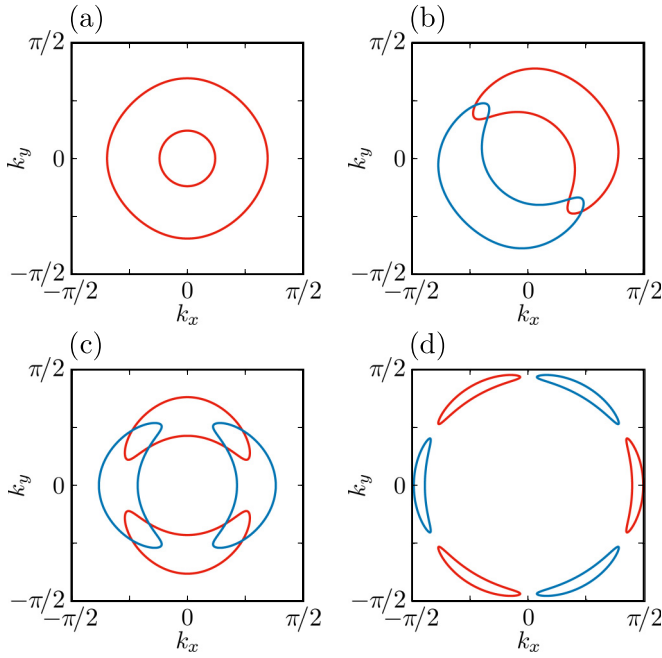


FIG. 3. Calculated k -space spin textures for the (a) s -, (b) p -, (c) d -, and (d) f -type cross-hopping integrals, where the up-spin (red) and down-spin (blue) Fermi surfaces are drawn. We assume $N = 1.94$ in (a), (b), and (c), and $N = 1.98$ in (d). We find $\phi = 0$ in (a) and (c) and $\phi = \pi/2$ in (b) and (d). We set $D = 6$, $U = 9.5$, and $U' = 5$. The areas enclosed by the dotted lines in Figs. 4(g) and 4(h) (see below) are shown.

component of the spin current never appears in the even-parity case. On the other hand, in the odd-parity case with $\phi \neq 0$ excitonic phases, we have $|\gamma'_\sigma(\mathbf{k})|^2 \neq |\gamma'_\sigma(-\mathbf{k})|^2$, which leads to $\langle \hat{\mathbf{J}}_{cc}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{ff}^s \rangle \neq 0$. The diagonal component of the spin current calculated for the model with the p -type cross hopping is shown in Fig. 5, where the phase of the order parameter varies continuously from zero to $\pi/2$ with decreasing N [see Fig. 2(j)]. When $\phi = 0$, we have $|\gamma'_\sigma(\mathbf{k})|^2 = |\gamma'_\sigma(-\mathbf{k})|^2$, which leads to $\langle \hat{\mathbf{J}}_{cc}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{ff}^s \rangle = 0$. However, when $\phi > 0$, the diagonal component acquires a finite value, which is caused by the spin-dependent band splitting as shown in Fig. 3(b). The value of the diagonal component increases until the phase reaches $\pi/2$, but it decreases by further decreasing N and vanishes when the excitonic order disappears.

Let us next consider the off-diagonal component of the spin current. V_τ and V'_τ in Eq. (33) depend on the types of the cross hopping: In the even-parity case, we have $V_\tau \neq 0$ and $V'_\tau = 0$, and in the odd-parity case, we have $V_\tau = 0$ and $V'_\tau \neq 0$. In the following, we consider the cases with the s - and p -type cross-hopping integrals.

For the s -type cross-hopping integral, we have the off-diagonal component of the spin current as

$$\langle \hat{\mathbf{J}}_{cf}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{fc}^s \rangle = \frac{V}{L^2} \sum_{\tau, \mathbf{k}, \sigma}^{\text{occ.}} \sigma \frac{\text{Re}[\gamma'_\sigma(\mathbf{k}) \sin k_\tau]}{\sqrt{\xi_k^2 + |\gamma'_\sigma(\mathbf{k})|^2}} \mathbf{a}_\tau. \quad (35)$$

Since $\gamma'_\sigma(\mathbf{k}) = \gamma'_\sigma(-\mathbf{k})$ in any ϕ , the inversion symmetry remains in the excitonic phase. Therefore, the integrand of Eq. (35) is an odd function with respect to \mathbf{k} , so that $\langle \hat{\mathbf{J}}_{cf}^s \rangle +$

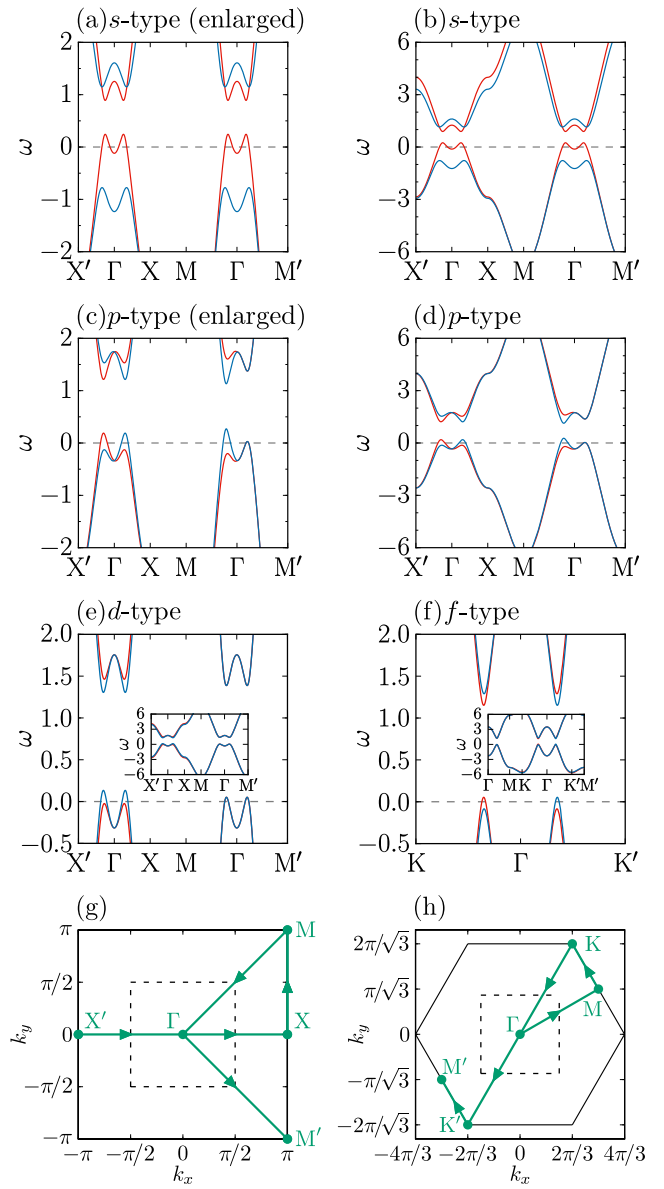


FIG. 4. Calculated quasiparticle band dispersions in the spin-triplet excitonic phases of our model. Their energies ω are plotted in the Brillouin zone. The up-spin (red) and down-spin (blue) bands are illustrated. We assume $N = 1.94$ for the s -, p -, and d -type cross-hopping integrals and $N = 1.98$ for the f -type cross-hopping integrals. We find $\phi = 0$ for the s and d type, and $\phi = \pi/2$ for the p and f type. We set $D = 6$, $U = 9.5$, and $U' = 5$. In (g) and (f), we show the Brillouin zones and the paths along which the band dispersions are drawn.

$\langle \hat{\mathbf{J}}_{fc}^s \rangle = 0$. The same discussion also applies to the case with the d -type cross-hopping integral.

For the p -type cross-hopping integral, we have the off-diagonal component as

$$\langle \hat{\mathbf{J}}_{cf}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{fc}^s \rangle = -\frac{V}{L^2} \sum_{\tau, \mathbf{k}, \sigma}^{\text{occ.}} \sigma \frac{\text{Im}[\gamma'_\sigma(\mathbf{k}) \cos k_\tau]}{\sqrt{\xi_k^2 + |\gamma'_\sigma(\mathbf{k})|^2}} \mathbf{a}_\tau. \quad (36)$$

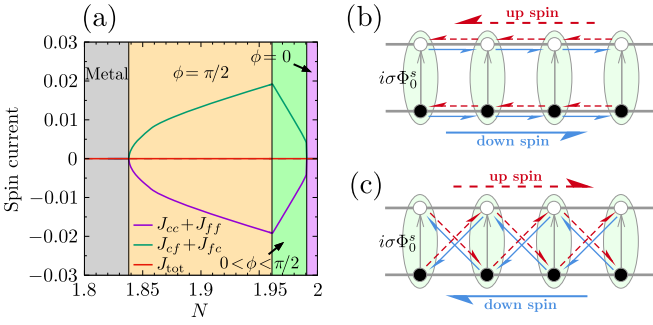


FIG. 5. (a) Calculated local and global spin currents as a function of the electron filling N , where we assume the p -type cross-hopping integral. We set $D = 6$, $U = 9.5$, and $U' = 5$. We also show schematic representations of the local spin currents in (b) and (c), where the diagonal and off-diagonal components are indicated, respectively.

Since $|\gamma'_\sigma(\mathbf{k})|^2 = |\gamma'_\sigma(-\mathbf{k})|^2$ and $\text{Im}[\gamma'_\sigma(\mathbf{k})] = 2V \sum_\tau \sin k_\tau$ at $\phi = 0$, the integrand of Eq. (36) becomes an odd function with respect to \mathbf{k} , which leads to $\langle \hat{\mathbf{J}}_{cf}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{fc}^s \rangle = 0$. However, the inequality $\gamma'_\sigma(\mathbf{k}) \neq \gamma'_\sigma(-\mathbf{k})$ at $\phi = \pi/2$ breaks the inversion symmetry, which leads to $\langle \hat{\mathbf{J}}_{cf}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{fc}^s \rangle \neq 0$. We obtain the same result whenever $\phi \neq 0$.

The calculated off-diagonal component of the spin current for the p -type cross-hopping integrals is shown in Fig. 5. One might think that this result contradicts the Bloch theorem that the current necessarily vanishes without external fields in the bulk systems. However, we find in Fig. 5 that the sum of the diagonal and off-diagonal components exactly vanishes as

$$\langle \hat{\mathbf{J}}_{\text{tot}}^s \rangle = \langle \hat{\mathbf{J}}_{cc}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{ff}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{cf}^s \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_{fc}^s \rangle = 0, \quad (37)$$

which is consistent with the Bloch theorem. Thus, the global spin current always vanishes, in agreement with the identity at zero temperature [46,52]

$$\langle \hat{\mathbf{J}}_{\text{tot}}^s \rangle = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma}^{\text{occ.}} \sigma \nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}, \sigma}^- = 0. \quad (38)$$

We should emphasize again that the global spin current never appears even if the cross-hopping integrals are added and the carriers are introduced. The same discussion can also be applied to the case of the f -type cross-hopping integrals. However, we note that the relation $\langle \hat{\mathbf{J}}_{\ell\ell'}^s \rangle = 0$ necessarily holds since we have $\sum_\tau \mathbf{a}_\tau = 0$ in the triangular lattice, which results in the vanishing local spin currents. As discussed in the study of superconductivity [48,49] and also in a recent paper by Geffroy *et al.* [47], the ground state containing a finite global current cannot be allowed in the equilibrium system. In our mean-field calculation, we actually find that there is no global spin current but there can be a finite local spin current. As shown here, the origin of the local spin current is the inversion-symmetry breaking in the excitonic phase. We again stress that the Bloch theorem does not prohibit the presence of the local spin currents. The detailed discussions on the absence of the global spin current and the presence of the local spin currents are found in Appendices A and B.

IV. SUMMARY

We studied the k -space spin textures and spin currents in the spin-triplet excitonic phase of the two-band Hubbard model defined on the square and triangular lattices by the mean-field approximation. We assumed the noninteracting band structure with a direct band gap and introduced the s -, p -, d -, and f -type cross-hopping integrals. We thus found that, depending on the types of the cross hopping, interaction strength, and electron filling, the phase of the excitonic order parameter is fixed to be imaginary, whereby the k -space spin texture and local spin current can emerge.

The even-parity cross-hopping integrals of the s and d type lift the spin degeneracy of the band dispersions by the breaking of the time-reversal symmetry, which leads to the k -space spin texture, whereas the local spin current exactly vanishes because the space-inversion symmetry remains in this system. On the other hand, the odd-parity cross-hopping integrals of the p and f type lift the spin degeneracy of the band structures by the breaking of the space-inversion symmetry, which leads to the k -space spin texture as well. Moreover, in the case of the p -type cross-hopping integral, the local spin currents of the diagonal and off-diagonal components remain finite when the excitonic order parameter has the imaginary value. The global spin current always vanishes, which is consistent with the Bloch theorem.

The experimental observation of the k -space spin textures and local spin currents may, therefore, be very useful for verification of the presence of the spin-triplet excitonic orders. We hope that our results will encourage experimental confirmations of the excitonic phases in real materials.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank Yoji Ohashi for tutorial lectures and enlightening discussions. This work was supported by Grants-in-Aid for Scientific Research (Nos. JP26400349, JP15H06093, JP17K05530, and JP18K13509) from JSPS of Japan. The numerical calculations were carried out on computers at Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Japan.

APPENDIX A: ABSENCE OF THE GLOBAL SPIN CURRENT

Here, we discuss the absence of the global spin current in spin-triplet excitonic insulator states from the viewpoint of the Bloch theorem. First, we introduce the spin current from the continuity equation in the d -dimensional lattice containing L^d sites and define the global and local (or partial) spin currents. Next, we derive the Bloch theorem for the global spin current and examine its correspondence with the results of our mean-field calculations.

1. Global and local spin currents

The current operators may be derived from the continuity conditions of the Hamiltonian as [53]

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{S}_j^z = i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{S}_j^z] = - \sum_{\tau} (\hat{J}_{(j,\tau)}^z - \hat{J}_{(j,-\tau)}^z), \quad (\text{A1})$$

where $\hat{J}_{(j,\tau)}^z$ denotes the operator of the spin current flowing out from site j to $j + \tau$ and $\hat{S}_j^z = 1/2 \sum_{\sigma} \sigma (\hat{n}_{j\sigma}^c + \hat{n}_{j\sigma}^f)$. We note that this argument is justified if and only if the system has the axial spin rotational symmetry about the z axis, R_z , and the expectation value of the z component of the total spin operator is conserved. Thus, we assume in the following discussions that the system has the symmetry R_z . The spin current operators $\hat{J}_{(j,\tau)}^z$ may then be divided into the orbital diagonal and orbital off-diagonal components as

$$\hat{J}_{(j,\tau),cc}^z = -it_c/2 \sum_{\sigma} \sigma (\hat{c}_{j+\tau,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} - \text{H.c.}), \quad (\text{A2})$$

$$\hat{J}_{(j,\tau),ff}^z = -it_f/2 \sum_{\sigma} \sigma (\hat{f}_{j+\tau,\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{j,\sigma} - \text{H.c.}), \quad (\text{A3})$$

$$\hat{J}_{(j,\tau),cf}^z = -iV_{1,\tau}/2 \sum_{\sigma} \sigma (\hat{c}_{j+\tau,\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{j,\sigma} - \text{H.c.}), \quad (\text{A4})$$

$$\hat{J}_{(j,\tau),fc}^z = -iV_{2,\tau}/2 \sum_{\sigma} \sigma (\hat{f}_{j+\tau,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} - \text{H.c.}). \quad (\text{A5})$$

Then, the global spin current flowing in the direction τ may be defined as

$$L^d \hat{J}_{\tau}^z = \sum_j \hat{J}_{(j,\tau)}^z = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma (\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}) \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{k})}{\partial k_{\tau}} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \quad (\text{A6})$$

with

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_c(\mathbf{k}) & \gamma(\mathbf{k}) \\ \gamma^*(\mathbf{k}) & \varepsilon_f(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (\text{A7})$$

where the τ denotes the vector from site j to site $j + \tau$. Note that the interaction terms of the Hamiltonian Eq. (3) do not contribute to the spin current operators.

Similarly, the partial spin current may be defined as

$$L^d \hat{J}_{\tau,ll'}^z = \sum_j \hat{J}_{(j,\tau),ll'}^z, \quad (\text{A8})$$

where l and l' ($= c, f$) denote the orbitals. We also define the difference between the orbital diagonal and orbital off-diagonal spin currents as

$$\begin{aligned} \hat{J}_{\tau}^{l'z} &= \hat{J}_{\tau,cc}^z + \hat{J}_{\tau,ff}^z - \hat{J}_{\tau,cf}^z - \hat{J}_{\tau,fc}^z \\ &= \frac{1}{2L^d} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma (\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}) \tau_z \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{k})}{\partial k_{\tau}} \tau_z \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix}, \quad (\text{A9}) \end{aligned}$$

where τ^z denotes the z component of the Pauli matrix. We may then obtain the orbital diagonal and orbital off-diagonal spin currents as $\hat{J}_{\tau}^{(+)} = \hat{J}_{\tau}^z + \hat{J}_{\tau}^{l'z}$ and $\hat{J}_{\tau}^{(-)} = \hat{J}_{\tau}^z - \hat{J}_{\tau}^{l'z}$, respectively.

Here, we note that the orbital-decomposed partial spin currents may be termed as the *local* spin currents if the orbitals are located in different spatial positions, as is assumed in the main text. The global (or total) spin current may then be defined as a sum of the local (or partial) spin currents. We also note that the global spin current if it exists may obviously be observed experimentally but the local spin currents should in principle be observed experimentally as well, which can lead to an experimental proof of the existence of the spin-triplet

excitonic insulator state. In the Appendices A and B, we use the term ‘‘partial’’ spin current rather than ‘‘local’’ spin current.

2. The Bloch theorem

Now, let us prove the Bloch theorem for our system, which states that the persistent spin current does not exist in thermal equilibrium without any external fields. The proof is carried out in the following two steps [49]. First, we introduce the excited state generated by an infinitesimal twisting of the spin-dependent Peierls phase in the hopping parameters. Secondly, using the inequality originated from the passivity (defined below) of thermal equilibrium states, we show on the basis of the dimensional analysis that a contradiction is lead if we assume the existence of the global spin current. In this proof, we assume that the system is under the periodic boundary condition in all the orthogonal directions.

First, we introduce the spin-dependent Peierls phase using the twist operator defined as

$$\hat{U}(\boldsymbol{\varphi}) = \exp \left(i \boldsymbol{\varphi} \cdot \sum_{l,j,\sigma} \sigma \hat{n}_{l,j,\sigma}^{\dagger} \mathbf{r}_j \right), \quad (\text{A10})$$

where $\boldsymbol{\varphi}$ denotes a vector in the reciprocal lattice space, which satisfies $L\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{a}_i = 0$ and its amplitude characterizes the intensity of the flux penetrating a one-dimensional ring. Thus, the vector $\boldsymbol{\varphi}$ can be written as

$$\boldsymbol{\varphi} = \frac{1}{L} \sum_j m_j \mathbf{b}_j = \mathcal{O}(L^{-1}), \quad m_j \in \mathbb{Z}, \quad (\text{A11})$$

where $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$. Here, we assume the integers $m_j \in \mathbb{Z}$ are sufficiently smaller than L , so that the vector $\boldsymbol{\varphi}$ has the order of L^{-1} . Using this twist operator, the fermion creation and annihilation operators with momentum \mathbf{k} are transformed into the other fermion operators with momentum $\mathbf{k} - \sigma\boldsymbol{\varphi}$ as

$$\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{\varphi}) \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{U}(\boldsymbol{\varphi}) = \hat{c}_{\mathbf{k}-\sigma\boldsymbol{\varphi},\sigma}, \quad (\text{A12})$$

$$\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{\varphi}) \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{U}(\boldsymbol{\varphi}) = \hat{c}_{\mathbf{k}-\sigma\boldsymbol{\varphi},\sigma}^{\dagger}, \quad (\text{A13})$$

$$\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{\varphi}) \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{U}(\boldsymbol{\varphi}) = \hat{f}_{\mathbf{k}-\sigma\boldsymbol{\varphi},\sigma}, \quad (\text{A14})$$

$$\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{\varphi}) \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{U}(\boldsymbol{\varphi}) = \hat{f}_{\mathbf{k}-\sigma\boldsymbol{\varphi},\sigma}^{\dagger}, \quad (\text{A15})$$

where we note that the shifted momentum $\mathbf{k} - \sigma\boldsymbol{\varphi}$ is in the Brillouin zone. Because thermal equilibrium states are passive (or energetically stable) for any local unitary transformation [49,54], we can introduce the following inequality:

$$\omega_0(\hat{U}^{\dagger}(\boldsymbol{\varphi}) [\hat{\mathcal{H}}, \hat{U}(\boldsymbol{\varphi})]) \geq 0, \quad (\text{A16})$$

where $\omega_0(\dots)$ is defined as the expectation value with respect to the infinite thermodynamical equilibrium state. In particular, if the N -fermion system has a unique ground state $|\Phi_0^{(N)}\rangle$ at zero temperature, $\omega_0(\dots)$ may be rewritten as

$$\omega_0(\dots) = \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \Phi_0^{(N)} | \dots | \Phi_0^{(N)} \rangle, \quad (\text{A17})$$

where we take the infinite volume limit $L \rightarrow \infty$ so that the density $\rho = N/L^d$ converges to a finite positive constant.

Using the twist operator, we then obtain

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})[\hat{\mathcal{H}}, \hat{U}(\boldsymbol{\varphi})] &= 2\boldsymbol{\varphi} \cdot \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\sigma}{2} (\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger) \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{H}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \\ &+ \mathcal{O}(L^{d-2}), \end{aligned} \quad (\text{A18})$$

where the first term of the right-hand side corresponds to the global spin current defined in Eq. (A6). If the system has a nonzero bulk spin current, this term is of the order of L^{d-1} . Thus, we find

$$\begin{aligned} \frac{1}{L^d} \omega_0(\hat{U}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})[\hat{\mathcal{H}}, \hat{U}(\boldsymbol{\varphi})]) \\ = \frac{4\pi}{L} \sum_{\tau} m_{\tau} \omega_0(\hat{J}_{\tau}^z) + \mathcal{O}(L^{-2}) \geq 0, \end{aligned} \quad (\text{A19})$$

where we note that the vector $\boldsymbol{\varphi}$ is arbitrary, so that we can take any values of m_{τ} . Now, if we assume the presence of the positive global spin current, i.e., $\omega(\hat{J}_{\tau}^z) > 0$, then choosing all m_{τ} to be negative, we obtain $\sum_{\tau} m_{\tau} \omega_0(\hat{J}_{\tau}^z) < 0$, which contradicts the passivity condition Eq. (A16). Therefore, we find that the global spin current does not exist. In other words, the axial spin rotational symmetry about the z axis is not broken in the ground state of the system. We also note that the above argument cannot be applied to the case of the surface currents. If the system has only the surface currents, the leading order of Eq. (A19) becomes L^{-2} . Therefore, the Bloch theorem does not prohibit the existence of the surface currents. Similarly, the bulk spin current is robust against surface defects because of the same reasons. As discussed in Appendix B, such a dimensional analysis can also be applied to the proof of the existence of the partial spin currents, which are not prohibited by the Bloch-like theorem in general.

3. Absence of the global spin current in the mean-field approximation

Here, we discuss the validity of the Bloch theorem in the straightforward mean-field calculation. In general, the Bloch theorem is applicable to any interacting electron systems with the axial spin rotational symmetry and therefore should be valid in the mean-field approximation as well. Using the Hellmann-Feynman theorem [55], we obtain

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{J}}_{\text{tot}}^s \rangle &= \frac{1}{L^d} \sum_{\tau, \mathbf{k}, \sigma} \sigma \left(\frac{\partial E_{\mathbf{k},\sigma}^+}{\partial \mathbf{k}_{\tau}} f(E_{\mathbf{k},\sigma}^+) + \frac{\partial E_{\mathbf{k},\sigma}^-}{\partial \mathbf{k}_{\tau}} f(E_{\mathbf{k},\sigma}^-) \right) \mathbf{a}_{\tau} \\ &= \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \nu=\pm} \sigma (\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k},\sigma}^{\nu}) f(E_{\mathbf{k},\sigma}^{\nu}), \end{aligned} \quad (\text{A20})$$

where ν denotes the band index. Using the density of states defined as

$$D_{\nu,\sigma}(E) dE = \frac{L^d}{(2\pi)^d} \left[\int_{E_{\mathbf{k},\sigma}^{\nu}=E} \frac{dl}{|\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k},\sigma}^{\nu}|} \right] dE, \quad (\text{A21})$$

where dl is the surface element in \mathbf{k} space satisfying $E_{\mathbf{k},\sigma}^{\nu} = E$, we can rewrite Eq. (A20) as

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{J}}_{\text{tot}}^s \rangle &= \frac{1}{L^d} \sum_{\sigma, \nu} \sigma \int D_{\nu,\sigma}(E_{\sigma}^{\nu}) (\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k},\sigma}^{\nu}) f(E_{\sigma}^{\nu}) dE_{\sigma}^{\nu} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \sum_{\sigma, \nu} \sigma \int dE_{\sigma}^{\nu} f(E_{\sigma}^{\nu}) \int \mathbf{n} dl = 0 \end{aligned} \quad (\text{A22})$$

with $\mathbf{n} = \nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k},\sigma}^{\nu} / |\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k},\sigma}^{\nu}|$. The integral over the closed constant-energy surface vanishes $\int \mathbf{n} dl = 0$, resulting in the vanishing global spin current.

APPENDIX B: EXISTENCE OF THE PARTIAL SPIN CURRENT

Here, we discuss the existence of the partial spin current in spin-triplet excitonic insulator states. First, we make the Bloch-like argument for the partial spin current [defined in Eq. (A9)] as an application of the method given in Appendix A. Next, we make the argument based on the discrete lattice symmetries.

1. Argument based on the Bloch-like theorem

Introducing the operator defined as

$$\hat{W} = \exp \left\{ i \frac{\pi}{2} \sum_{j,\sigma} (\hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma}^\dagger) \tau^z \begin{pmatrix} \hat{c}_{j,\sigma} \\ \hat{f}_{j,\sigma} \end{pmatrix} \right\}, \quad (\text{B1})$$

we find that the fermion creation and annihilation operators for the c - and f -band electrons are transformed as

$$\hat{W}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \hat{W} = i \hat{c}_{j,\sigma}, \quad (\text{B2})$$

$$\hat{W}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{W} = -i \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger, \quad (\text{B3})$$

$$\hat{W}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} \hat{W} = -i \hat{f}_{j,\sigma}, \quad (\text{B4})$$

$$\hat{W}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma}^\dagger \hat{W} = i \hat{f}_{j,\sigma}^\dagger. \quad (\text{B5})$$

Thus, using this operator \hat{W} and the twist operator defined in Eq. (A6), we obtain

$$\begin{aligned} \frac{1}{L^d} (\hat{U}(\boldsymbol{\varphi}) \hat{W})^\dagger [\hat{\mathcal{H}}, (\hat{U}(\boldsymbol{\varphi}) \hat{W})] \\ = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger) \tau^z [\mathcal{H}_{\sigma}(\mathbf{k}), \tau^z] \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \\ + 2\boldsymbol{\varphi} \cdot \hat{\mathbf{J}}^z + \mathcal{O}(L^{-2}), \end{aligned} \quad (\text{B6})$$

where we note that the first and second terms of the right-hand side are of the orders 1 and L^{-1} , respectively, if we assume that the bulk partial spin current exists. However, unless the commutator $[\mathcal{H}_{\sigma}(\mathbf{k}), \tau_z]$ is zero, the straightforward Bloch-like argument cannot be applied to the present case. In other words, because the first term is larger than the second one, we do not obtain the contradiction to the passivity of the thermal equilibrium states. Thus, in general, the partial spin current is not prohibited by the Bloch-like argument as long as there is the interorbital hybridization satisfying $[\hat{W}, \hat{\mathcal{H}}] \neq 0$. In this

sense, vanishing of the expectation value of the first term is a sufficient condition to prohibit the partial spin current. It should be noted that this condition is already broken in systems with the cross-hopping terms. However, the partial spin current does not appear in the normal phases, which is due to the other conditions associated with the lattice symmetries. As discussed below, the partial spin current emerges as a result of the “inversion” symmetry breaking in the excitonic phases.

2. Argument based on the discrete lattice symmetries

Now, let us prove the existence of the partial spin current from the viewpoint of the symmetries that are broken in the excitonic phases. Our strategy is based on the following two assumptions: (i) The ground state of our system is unique. (ii) There is no symmetry operation \hat{g} that anticommutes with the current operator \hat{J}_τ . These two assumptions are naturally applicable to our mean-field solutions obtained as the stationary points of the free energy. The relevance of these assumptions may be confirmed as follows: If there is at least one symmetry operation \hat{g} that anticommutes with the current operator $\{\hat{g}, \hat{J}_\tau\} = 0$, we obtain

$$0 = \langle \psi | \hat{g}^{-1} \{ \hat{J}_\tau, \hat{g} \} | \psi \rangle = 2 \langle \psi | \hat{J}_\tau | \psi \rangle, \quad (\text{B7})$$

where we use the uniqueness of the ground state, i.e., $\hat{g} |\Psi\rangle = e^{i\theta} |\Psi\rangle$ except for an arbitrary phase θ . Thus, we find that the

partial spin current is absent as long as the conditions (i) and (ii) are satisfied.

Next, let us examine the symmetries of our two-band Hubbard model. For simplicity, we consider the symmetries of the one body part of the Hamiltonian only and treat the interaction terms within the mean-field approximation. It is, however, not difficult to extend our argument to the interacting systems. As discussed in the main text, we have two types of the cross-hopping integrals, i.e., either with *even* parity (*s* type) or with *odd* parity (*p* type), where the latter has a sign change $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ for the spatial inversion. The mean-field Hamiltonian transforms under the time-reversal symmetry operation (\mathcal{T}) or under the space-inversion symmetry operation (\mathcal{P}) as

$$\mathcal{T}\mathcal{H}(\mathbf{k})\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{H}(-\mathbf{k}), \quad (\text{B8})$$

$$\mathcal{P}\mathcal{H}(\mathbf{k})\mathcal{P}^{-1} = \mathcal{H}(-\mathbf{k}), \quad (\text{B9})$$

where we note that \mathcal{P} is a unitary operator satisfying $\mathcal{P}^2 = 1$ while \mathcal{T} is an antiunitary operator containing the complex conjugate operation \mathcal{K} .¹ In our system, there are several candidates for these symmetry operations, which depend on both the parity of the cross-hopping term $l \in \{s, p\}$ and the phase of the excitonic order parameter $\phi \in \{0, \frac{\pi}{2}\}$. To see this explicitly, it is instructive to rewrite our mean-field Hamiltonian using the Pauli matrices as

$$\mathcal{H}_{\text{MF}}(\mathbf{k}) = \varepsilon'_+(\mathbf{k}) I_2 \otimes I_2 + \varepsilon'_-(\mathbf{k}) \tau^z \otimes I_2 + \begin{cases} \gamma_+(\mathbf{k}) \tau^x \otimes I_2 + \Delta_0 \tau^x \otimes \sigma^z, & (l, \phi) = (s, 0) \\ \gamma_+(\mathbf{k}) \tau^x \otimes I_2 + \Delta_\pi \tau^y \otimes \sigma^z, & (l, \phi) = (s, \frac{\pi}{2}) \\ \gamma_-(\mathbf{k}) \tau^y \otimes I_2 + \Delta_0 \tau^x \otimes \sigma^z, & (l, \phi) = (p, 0) \\ \gamma_-(\mathbf{k}) \tau^y \otimes I_2 + \Delta_\pi \tau^y \otimes \sigma^z, & (l, \phi) = (p, \frac{\pi}{2}) \end{cases} \quad (\text{B10})$$

where

$$2\varepsilon'_\pm(\mathbf{k}) = \varepsilon'_c(\mathbf{k}) \pm \varepsilon'_f(\mathbf{k}), \quad (\text{B11})$$

$$\gamma_+(\mathbf{k}) = 2 \sum_\tau V_\tau \cos k_\tau, \quad (\text{B12})$$

$$\gamma_-(\mathbf{k}) = 2 \sum_\tau V_\tau \sin k_\tau, \quad (\text{B13})$$

$$2\Delta_\phi = -U' |\Phi_0^l| e^{-i\phi}, \quad (\text{B14})$$

and \otimes denotes the tensor product of two matrices. τ^α and σ^α denote the Pauli matrices for the orbital and spin degrees of freedom, respectively. We note that $\gamma_-(\mathbf{k})$ is an odd function with respect to the inversion $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$. Then, if we note the relations $\{\sigma^a, \sigma^b\} = \{\tau^a, \tau^b\} = 2\delta_{ab}$ and $\{\tau^y, \mathcal{K}\} = \{\sigma^y, \mathcal{K}\} = 0$, we can easily write down the time-reversal \mathcal{T} and space inversion \mathcal{P} symmetries such that Eqs. (B8) and (B9) are satisfied. In fact, we can choose $\mathcal{T} = I_2 \otimes \sigma^x \mathcal{K}$ and

$\mathcal{P} = \tau^z \otimes \sigma^x$ for $(l, \phi) = (p, \frac{\pi}{2})$. For other (l, ϕ) , we can also choose \mathcal{T} and \mathcal{P} in the same manner.

Then, let us examine whether our mean-field Hamiltonian has the time-reversal \mathcal{T} or space-inversion \mathcal{P} symmetry that satisfies the condition (ii) given above. Using the mean-field Hamiltonian, the global and partial spin currents in Eqs. (A6) and (A9) can be rewritten, respectively, as

$$\mathcal{J}_\tau^z(\mathbf{k}) = \partial_\tau \varepsilon'_+(\mathbf{k}) I_2 \otimes \sigma^z + \partial_\tau \varepsilon'_-(\mathbf{k}) \tau^z \otimes \sigma^z + \begin{cases} \partial_\tau \gamma_+(\mathbf{k}) \tau^x \otimes \sigma^z & (l = s) \\ \partial_\tau \gamma_-(\mathbf{k}) \tau^y \otimes \sigma^z & (l = p) \end{cases} \quad (\text{B15})$$

$$\mathcal{J}_\tau^{l,z}(\mathbf{k}) = \partial_\tau \varepsilon'_+(\mathbf{k}) I_2 \otimes \sigma^z + \partial_\tau \varepsilon'_-(\mathbf{k}) \tau^z \otimes \sigma^z - \begin{cases} \partial_\tau \gamma_+(\mathbf{k}) \tau^x \otimes \sigma^z & (l = s) \\ \partial_\tau \gamma_-(\mathbf{k}) \tau^y \otimes \sigma^z & (l = p) \end{cases} \quad (\text{B16})$$

where we use the following notations:

$$\hat{\mathcal{O}} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{c}}_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{O}(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{c}}_{\mathbf{k}}, \quad (\text{B17})$$

$$\hat{\mathbf{c}}_{\mathbf{k}} = (\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{f}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{c}_{\mathbf{k},\downarrow}, \hat{f}_{\mathbf{k},\downarrow})^T, \quad (\text{B18})$$

$$\hat{\mathbf{c}}_{\mathbf{k}}^\dagger = (\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \hat{f}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \hat{f}_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger). \quad (\text{B19})$$

¹Note that we use a general definition Eq. (B8) of the time-reversal symmetry operation in this Appendix; another definition, which uses the antiunitary operator that changes the signs of \mathbf{k} and spin, does not satisfy the condition (ii).

TABLE I. The time-reversal and space-inversion symmetries for the mean-field Hamiltonian with the indexes (l, ϕ) . ω and $\omega\mathcal{K}$ ($^{-}$) denote the system with (without) time-reversal symmetry $\mathcal{T} = \omega\mathcal{K}$ or space-inversion symmetry $\mathcal{P} = \omega$. Here, ω is the unitary matrix defined as $\omega = e^{i\phi I_2 \otimes \sigma^z} = \cos \phi I_2 \otimes I_2 + i \sin \phi I_2 \otimes \sigma^z$. Note that the other time-reversal or space-inversion symmetries, which anti-commute with the spin current operators, do not exist except for $\mathcal{T} = \omega\mathcal{K}$ and $\mathcal{P} = \omega$.

	global		partial	
	\mathcal{T}	\mathcal{P}	\mathcal{T}	\mathcal{P}
$(l, \phi) = (s, 0)$	$\omega\mathcal{K}$	ω	$\omega\mathcal{K}$	ω
$(l, \phi) = (s, \frac{\pi}{2})$	-	ω	-	ω
$(l, \phi) = (p, 0)$	$\omega\mathcal{K}$	-	$\omega\mathcal{K}$	-
$(l, \phi) = (p, \frac{\pi}{2})$	-	-	-	-

By a straightforward calculation, we obtain the time-reversal symmetry \mathcal{T} and space-inversion symmetry \mathcal{P} that satisfy the relations $\mathcal{T}\hat{J}_\tau^z(\mathbf{k})\mathcal{T}^{-1} = -\hat{J}_\tau^z(-\mathbf{k})$ and $\mathcal{P}\hat{J}_\tau^z(\mathbf{k})\mathcal{P}^{-1} = -\hat{J}_\tau^z(-\mathbf{k})$, which correspond to the anticommutation relation for the partial spin current operator \hat{J}_τ^z , as shown in Table I.

In particular, if $(l, \phi) = (p, \pi/2)$, we find that there is no corresponding time-reversal \mathcal{T} or space-inversion \mathcal{P} symmetries in the system. In other words, because the mean-field Hamiltonian does not satisfy the condition (ii), the global

and partial spin currents are allowed by the symmetries \mathcal{T} and \mathcal{P} . However, the global spin current is prohibited by the Bloch theorem, so that only the partial spin current is allowed. Moreover, such symmetry breakings in the excitonic phase may lead to the asymmetry of the band structures, resulting in the k -space spin textures. In this sense, the partial spin current is a signature of the absence of the time-reversal \mathcal{T} and space-inversion \mathcal{P} symmetries in the system. It should be noted, however, that we do not deny the possible existence of the other symmetries that satisfy the conditions (i) and (ii). In fact, the model with the f -type cross hopping has the threefold rotational symmetry C_3 . Then, even if both the time-reversal \mathcal{T} and space-inversion \mathcal{P} symmetries are broken in the excitonic phase, the partial spin currents are canceled out due to the C_3 symmetry.

Finally, let us make a remark on our derivation of the partial spin currents. In this appendix, we use two approaches to prove the existence of the partial spin current. However, we should note that the arguments given in both of these two approaches are not the necessary condition, but they are the sufficient condition for the absence of the partial spin current. In other words, the existence of the partial spin currents is allowed only if the system has the cross hopping satisfying $[\hat{W}, \hat{\mathcal{H}}] \neq 0$ and does not satisfy the conditions (i) and (ii). Thus, if the system does not have the cross hopping satisfying $[\hat{W}, \hat{\mathcal{H}}] \neq 0$, the partial spin currents are prohibited by the Bloch-like argument, irrespective of whether condition (i) and (ii) are satisfied.

- [1] L. V. Keldysh and Y. V. Kopeav, *Sov. Phys. Solid State* **6**, 2219 (1965).
- [2] J. Des Cloizeaux, *J. Phys. Chem. Solids* **26**, 259 (1965).
- [3] D. Jérôme, T. M. Rice, and W. Kohn, *Phys. Rev.* **158**, 462 (1967).
- [4] W. Kohn, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 439 (1967).
- [5] B. I. Halperin and T. M. Rice, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 755 (1968).
- [6] B. I. Halperin and T. M. Rice, *Solid State Physics*, edited by F. Seitz, D. Turnbull, and H. Ehrenreich (Academic Press, New York, 1968), pp. 115–192.
- [7] F. X. Bronold and H. Fehske, *Phys. Rev. B* **74**, 165107 (2006).
- [8] H. Cercellier, C. Monney, F. Clerc, C. Battaglia, L. Despont, M. G. Garnier, H. Beck, P. Aebi, L. Patthey, H. Berger, and L. Forró, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 146403 (2007).
- [9] C. Monney, H. Cercellier, F. Clerc, C. Battaglia, E. F. Schwier, C. Didiot, M. G. Garnier, H. Beck, P. Aebi, H. Berger, L. Forró, and L. Patthey, *Phys. Rev. B* **79**, 045116 (2009).
- [10] B. Zenker, H. Fehske, H. Beck, C. Monney, and A. R. Bishop, *Phys. Rev. B* **88**, 075138 (2013).
- [11] G. Monney, C. Monney, B. Hildebrand, P. Aebi, and H. Beck, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 086402 (2015).
- [12] H. Watanabe, K. Seki, and S. Yunoki, *Phys. Rev. B* **91**, 205135 (2015).
- [13] T. Kaneko, Y. Ohta, and S. Yunoki, *Phys. Rev. B* **97**, 155131 (2018).
- [14] Y. Wakisaka, T. Sudayama, K. Takubo, T. Mizokawa, M. Arita, H. Namatame, M. Taniguchi, N. Katayama, M. Nohara, and H. Takagi, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 026402 (2009).
- [15] T. Kaneko, T. Toriyama, T. Konishi, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **87**, 035121 (2013); **87**, 199902(E) (2013).
- [16] K. Seki, Y. Wakisaka, T. Kaneko, T. Toriyama, T. Konishi, T. Sudayama, N. L. Saini, M. Arita, H. Namatame, M. Taniguchi, N. Katayama, M. Nohara, H. Takagi, T. Mizokawa, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **90**, 155116 (2014).
- [17] K. Sugimoto, T. Kaneko, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **93**, 041105 (2016).
- [18] T. Yamada, K. Domon, and Y. Ōno, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 053703 (2016).
- [19] K. Sugimoto and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **94**, 085111 (2016).
- [20] Y. F. Lu, H. Kono, T. I. Larkin, A. W. Rost, T. Takayama, A. V. Boris, B. Keimer, and H. Takagi, *Nat. Commun.* **8**, 14408 (2017).
- [21] K. Sugimoto, S. Nishimoto, T. Kaneko, and Y. Ohta, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 247602 (2018).
- [22] J. Kuneš and P. Augustinský, *Phys. Rev. B* **90**, 235112 (2014).
- [23] A. Ikeda, T. Nomura, Y. H. Matsuda, A. Matsuo, K. Kindo, and K. Sato, *Phys. Rev. B* **93**, 220401 (2016).
- [24] J. Nasu, T. Watanabe, M. Naka, and S. Ishihara, *Phys. Rev. B* **93**, 205136 (2016).
- [25] A. Sotnikov and J. Kuneš, *Sci. Rep.* **6**, 30510 (2016).
- [26] T. Tatsuno, E. Mizoguchi, J. Nasu, M. Naka, and S. Ishihara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 083706 (2016).
- [27] T. Yamaguchi, K. Sugimoto, and Y. Ohta, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 043701 (2017).
- [28] J. F. Afonso and J. Kuneš, *Phys. Rev. B* **95**, 115131 (2017).
- [29] A. Sotnikov and J. Kuneš, *Phys. Rev. B* **96**, 245102 (2017).

- [30] T. Moyoshi, K. Kamazawa, M. Matsuda, and M. Sato, *Phys. Rev. B* **98**, 205105 (2018).
- [31] K. Ishigaki, J. Nasu, and A. Koga, [arXiv:1811.03779](https://arxiv.org/abs/1811.03779).
- [32] D. Ihle, M. Pfafferoth, E. Burovski, F. X. Bronold, and H. Fehske, *Phys. Rev. B* **78**, 193103 (2008).
- [33] V.-N. Phan, K. W. Becker, and H. Fehske, *Phys. Rev. B* **81**, 205117 (2010).
- [34] K. Seki, R. Eder, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **84**, 245106 (2011).
- [35] B. Zenker, D. Ihle, F. X. Bronold, and H. Fehske, *Phys. Rev. B* **85**, 121102 (2012).
- [36] S. Ejima, T. Kaneko, Y. Ohta, and H. Fehske, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 026401 (2014).
- [37] K. Hamada, T. Kaneko, S. Miyakoshi, and Y. Ohta, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 074709 (2017).
- [38] T. Kaneko and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **90**, 245144 (2014).
- [39] T. Kaneko, B. Zenker, H. Fehske, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **92**, 115106 (2015).
- [40] J. Kuneš, *Phys. Rev. B* **90**, 235140 (2014).
- [41] J. Kuneš, *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 333201 (2015).
- [42] T. Kaneko and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **94**, 125127 (2016).
- [43] J. Kuneš and D. Geffroy, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 256403 (2016).
- [44] J. Kuneš and P. Augustinský, *Phys. Rev. B* **89**, 115134 (2014).
- [45] B. A. Volkov and Y. V. KopaeV, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **27**, 10 (1978) [*Sov. Phys. JETP Lett.* **27**, 7 (1978)].
- [46] B. A. Volkov, A. A. Gorbatsevich, Y. V. KopaeV, and V. V. Tugushev, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **81**, 729 (1981) [*Sov. Phys. JETP* **54**, 391 (1981)].
- [47] D. Geffroy, A. Hariki, and J. Kuneš, *Phys. Rev. B* **97**, 155114 (2018).
- [48] Y. Ohashi and T. Momoi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 3254 (1996).
- [49] Y. Tada and T. Koma, *J. Stat. Phys.* **165**, 455 (2016).
- [50] B. Zocher, C. Timm, and P. M. R. Brydon, *Phys. Rev. B* **84**, 144425 (2011).
- [51] T. Kaneko, K. Seki, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **85**, 165135 (2012).
- [52] V. Dubovik and V. Tugushev, *Phys. Rep.* **187**, 145 (1990).
- [53] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 3rd ed. (Springer US, New York, 2000).
- [54] O. Bratteli and D. W. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics II* (Springer-Verlag, Berlin, 1981).
- [55] R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).