动力学平均场理论（Dynamical Mean Field Theory, DMFT）是一种处理强关联电子体系的近似方法，将难以求解的晶格问题转化成量子杂质问题，从而有效降低多体问题的自由度。在处理量子杂质模型时，由于杂质哈密顿量并不会因为晶格模型的不同类型而发生较大变化，因此这一方法的优势是可以处理不同的晶格问题，进一步能够与真实的材料体系计算相结合，很大程度上扩展了强关联材料的计算领域。利用 DMFT 方法的这一优势，并进一步将这套技术推广到非平衡体系，人们就能够在热力学极限下直接处理时间域的量子涨落。在此框架下，人们更好地理解许多非平衡体系的物理性质，例如莫特绝缘体中的介电击穿，光掺杂以及淬火系统中的崩溃和复苏振荡 (collapse-and-revival oscillations) 等。本篇读书报告主要参考 RMP 86,779(2014) 和 RMP 68,13(1996) 两篇综述，简要介绍非平衡 DMFT 的理论框架。

在处理晶格系统的电子相互作用时，最简单的方法是做平均场近似。但这种方法得到的是静态的库仑势，电子因此只能形成静态的长程序，时间关联的电子涨落无法得到很好描述，因此人们无法得到例如 Mott 绝缘性相关的强关联物理图像。但因为 DMFT 方法处理的不是电子密度，而是与频率依赖的格林函数 $G(\omega)$，因此它能够自然地将时间涨落相关信息包括进来。DMFT 的核心思想是将晶格模型自洽地映射为单杂质模型，从而把物理问题等效地转化成对单杂质的求解问题。非平衡 DMFT 是对平衡态理论框架的一个直接推广，利用双时格林函数和相应的时间依赖的 Weiss 场自洽地描述系统的有效作用量。下面从平衡态出发，对这一方法做简要推导。

为了将晶格模型的性质映射到单杂质模型中，一个直接的方式是扣除晶格模型的一个格点，利用路径积分将其他格点积分掉，得到与单杂质模型数学形式相同的有效作用量。文献中一般称这种推导方法为空腔法（cavity method）。

Hubbard 模型的哈密顿量为

$$\hat{H} = -\sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \tag{0-1}$$

其中, 设 $t_{ii} = 0, t_{ij} = t_{ji} \in \mathbb{R}$。

在相干态路径积分下, 有配分函数

$$Z = \int \prod_{i} \prod_{\sigma} \mathcal{D}c_{i\sigma}^{*}(\tau) \mathcal{D}c_{j\sigma}(\tau) \mathrm{e}^{-S}, \tag{0-2}$$

其中作用量的表达式为

$$S=\int_0^{\infty}\mathrm{d}\tau\left[\sum_{i\sigma}c_{i\sigma}^*(\tau)\left(\frac{\partial}{\partial\tau}-\mu\right)c_{i\sigma}(\tau)-\sum_{ij}\sum_{\sigma}t_{ij}c_{i\sigma}^*(\tau)c_{j\sigma}(\tau)+U\sum_{i}n_{i\uparrow}(\tau)n_{i\downarrow}(\tau)\right],\tag{0-3}$$

将作用量划分为空腔 o 格点项 S_o, 剩余格点项 $S^{(o)}$ 以及相互作用项 ΔS, 其中

$$S_o=\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\left[\sum_{\sigma}c_{o\sigma}^*(\tau)\left(\frac{\partial}{\partial\tau}-\mu\right)c_{o\sigma}(\tau)+Un_{o\uparrow}(\tau)n_{o\downarrow}(\tau)\right],\tag{0-4}$$

$$\Delta S=-\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\sum_{i\sigma}t_{io}\left[c_{i\sigma}^*(\tau)c_{o\sigma}(\tau)+c_{o\sigma}^*(\tau)c_{i\sigma}(\tau)\right].\tag{0-5}$$

记 $\eta_{i\sigma}(\tau)\equiv t_{io}c_{o\sigma}(\tau)$, 并对 t_{ij} 作标度变换:

$$t_{ij}=\frac{\tilde{t}_{ij}}{D^{\frac{|i-j|}{2}}}.\tag{0-6}$$

这里的标度变换方式与 Ising 模型的处理不同, D. Vollhardt 证明, 这样的取法可以在大维度极限 $D\to\infty$ 时得到有限的 $\langle H_T\rangle$, 否则将发散或趋于零 [1]。

定义空腔格点的有效作用量:

$$\frac{1}{Z_{\mathrm{eff}}}\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{eff}}}\equiv\frac{1}{Z}\int\prod_{i\neq o}\prod_{\sigma}\mathcal{D}c_{i\sigma}^*\mathcal{D}c_{i\sigma}\mathrm{e}^{-S},\tag{0-7}$$

为方便表述, 令 $\eta_1^*,\cdots,\eta_N^*\equiv\eta_{N+1},\cdots,\eta_{2N}$, 视为和 $\eta_1,\cdots,\eta_N$ 相互独立的变量。利用 Grassmann 函数的泰勒展开式:

$$\begin{aligned}S_{\mathrm{eff}}(\eta_1,\cdots,\eta_{2N})&=\int\mathrm{d}\tau L_{\mathrm{eff}}\\&=\int\mathrm{d}\tau\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i_1\cdots i_n=1}^{2N}\frac{1}{n!}\left.\frac{\partial^n L_{\mathrm{eff}}}{\partial\eta_{i_1}\cdots\partial\eta_{i_n}}\right|_{\{\eta_1,\cdots,\eta_{2N}=0\}}\eta_{i_n}\cdots\eta_{i_1},\end{aligned}\tag{0-8}$$

利用

$$\frac{\partial\eta_{i\sigma}(\tau)}{\partial\eta_{j\sigma'}(\tau')}=\delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}\delta(\tau-\tau')\tag{0-9}$$

以及有效作用量的定义式, 可以计算各阶偏导数的表达式:

$$\begin{aligned}-\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{eff}}}\int\mathrm{d}\tau\frac{\partial L_{\mathrm{eff}}}{\partial\eta_{i_1\sigma}}&=\int\prod_{k\neq o}\prod_{\sigma}\mathcal{D}c_{k\sigma}^*\mathcal{D}c_{k\sigma}\mathrm{e}^{-S}\left[-\int\mathrm{d}\tau c_{i_1\sigma}^*\right]\\\Rightarrow\int\mathrm{d}\tau\left[\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{eff}}}\frac{\partial L_{\mathrm{eff}}}{\partial\eta_{i_1}}\right]&=\int\mathrm{d}\tau\left[\int\prod_{k\neq o}\prod_{\sigma}\mathcal{D}c_{k\sigma}^*\mathcal{D}c_{k\sigma}\mathrm{e}^{-S}c_{i_1\sigma}^*\right],\end{aligned}\tag{0-10}$$

从中得到

$$
\begin{aligned}
\left.\frac{\partial L_{\mathrm{eff}}}{\partial \eta_{i_1}}\right|_{\{\eta_{1,\cdots,N},\eta^*_{1,\cdots,N}=0\}} &= \frac{\int \prod_{k\neq o}\prod_\sigma \mathcal{D}c^*_{k\sigma}\mathcal{D}c_{k\sigma}\mathrm{e}^{-S^{(o)}}c^*_{i_1\sigma}}{\int \prod_{k\neq o}\prod_\sigma \mathcal{D}c^*_{k\sigma}\mathcal{D}c_{k\sigma}\mathrm{e}^{-S^{(o)}}} \\
&= \langle c^*_{i_1\sigma}(\tau_{i_1})\rangle^{(o)},
\end{aligned} \tag{0-11}
$$

但是奇数阶 Grassmann 变量的期望值都是 0, 所以这里得到的一阶导为零。再求一次导, 得到

$$
\begin{aligned}
\left.\frac{\partial^2 L_{\mathrm{eff}}}{\partial \eta_{i_1}\partial \eta^*_{j_1}}\right|_{\{\eta_{1,\cdots,N},\eta^*_{1,\cdots,N}=0\}} &= -\left.\frac{\partial^2 L_{\mathrm{eff}}}{\partial \eta^*_{i_1}\partial \eta_{j_1}}\right|_{\{\eta_{1,\cdots,N},\eta^*_{1,\cdots,N}=0\}} \\
&= -\langle c_{j_1\sigma}(\tau_{j_1})c^*_{i_1\sigma}(\tau_{i_1})\rangle^{(o)} \\
&= -G^{(o)}(\tau_{j_1},\tau_{i_1}).
\end{aligned} \tag{0-12}
$$

同理, 应有

$$
\left.\frac{\partial^{2n} L_{\mathrm{eff}}}{\partial \eta^*_{j_1\sigma}\cdots\partial \eta^*_{j_n}\partial \eta_{i_1}\cdots\partial \eta_{i_n}}\right|_{\{\eta_{1,\cdots,N},\eta^*_{1,\cdots,N}=0\}} = (-1)^n G^{(o)}(\tau_{j_1}\cdots\tau_{j_n},\tau_{i_1}\cdots\tau_{i_n}). \tag{0-13}
$$

在 Taylor 展开式中, 首先, 只考虑 $\eta\eta^*$ 耦合, 不考虑 $\eta\eta$ 和 $\eta^*\eta$ 耦合, 其次, $2n$ 个 Grassmann 变量换序时会产生符号变化 $(-1)^n$ 与上式的符号抵消, 最后, 对应每一阶 n, 确定了 $i_1,\cdots,i_n,j_1,\cdots,j_n$ 的取值后, 应有 $n!$ 种排列组合方式, 写成正规形式后可以合并为一项。这样, 展开式可以表示为

$$
\begin{aligned}
S_{\mathrm{eff}} &= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\langle i_1,\cdots,i_n=1\rangle}^{N}\sum_{\langle j_1,\cdots,j_n=1\rangle}^{N}\int \left.\frac{\partial^{2n} L_{\mathrm{eff}}}{\partial \eta_{i_1}\cdots\partial \eta_{i_n}\partial \eta^*_{j_1}\cdots\partial \eta^*_{j_n}}\right|_{\{\eta_1,\cdots,\eta^*_N=0\}} \eta^*_{j_n}\cdots\eta^*_{j_1}\eta_{i_n}\cdots\eta_{i_1} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{i_1\cdots j_n}\int \eta^*_{i_1}(\tau_{i_1})\cdots\eta^*_{i_n}(\tau_{i_n})\eta_{j_1}(\tau_{j_1})\cdots\eta_{j_n}(\tau_{j_n})G^{(o)}_{i_1\cdots j_n}(\tau_{i_1}\cdots\tau_{i_n},\tau_{j_1}\cdots\tau_{j_n}) + S_o + \mathrm{const}.
\end{aligned} \tag{0-14}
$$

其中, 忽略了 $\eta_{i\sigma}(\tau)$ 的自旋指标和对 τ 的依赖关系。此即综述中 (34) 式。在大维度极限 $D\to\infty$ 下, 可以证明, 各阶展开中, 只有 $n=1$ 项保留下来, 其他高阶项快速衰减。于是有效作用量可以简化为

$$
S_{\mathrm{eff}} = S_o + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \int_0^\beta \mathrm{d}\tau' \sum_\sigma c^*_{i\sigma}(\tau)\left[\sum_{ij} t_{oi}t_{oj}G^{(o)}_{ij}(\tau-\tau')\right] c_{o\sigma}(\tau'), \tag{0-15}
$$

中括号内的表达式被称为动力学平均场。整个积分式描写了周围格点对 o 格点的影响。另外, S_o 的表达式为

$$
S_o = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \sum_\sigma \left[c^*_{o\sigma}(\tau)\left(\frac{\partial}{\partial\tau}-\mu\right)c_{o\sigma}(\tau)\right] + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \left[U n_{o\uparrow}(\tau)n_{o\downarrow}(\tau)\right]. \tag{0-16}
$$

由单杂质安德森模型

$$H_{\mathrm{SAIM}} = \epsilon_d \sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \sum_{k\sigma} \left[\epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + V_k \left(d_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right) \right] + U n_{\uparrow}^{d} n_{\downarrow}^{d}, \tag{0-17}$$

对应的杂质作用量为

$$S_{\mathrm{imp}}[d_{\sigma}^{*}, d_{\sigma}] = \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau' d_{\sigma}^{*}(\tau) \left[-\mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') \right] d_{\sigma}(\tau') + U \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau n_{\uparrow}^{d}(\tau) n_{\downarrow}^{d}(\tau). \tag{0-18}$$

上面得到的 S_{eff} 可以写成类似的形式, 即

$$\begin{aligned} S_{\mathrm{eff}} =& \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau' \sum_{\sigma} c_{o\sigma}^{*}(\tau) \left[\left(\frac{\partial}{\partial\tau} - \mu \right) \delta(\tau - \tau') + \sum_{ij} t_{oi} t_{oj} G_{ij}^{(o)}(\tau - \tau') \right] c_{o\sigma}(\tau') \\ &+ \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau U n_{o\uparrow}(\tau) n_{o\downarrow}(\tau) \\ =& \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau' \sum_{\sigma} c_{o\sigma}^{*}(\tau) \left[\delta^{(1)}(\tau - \tau') - \mu\delta(\tau - \tau') + \sum_{ij} t_{oi} t_{oj} G_{ij}^{(o)}(\tau - \tau') \right] c_{o\sigma}(\tau') \\ &+ \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau U n_{o\uparrow}(\tau) n_{o\downarrow}(\tau), \end{aligned} \tag{0-19}$$

对比两式, 得到

$$\mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') = \delta^{(1)}(\tau - \tau') - \mu\delta(\tau - \tau') + \sum_{ij} t_{oi} t_{oj} G_{ij}^{(o)}(\tau - \tau'), \tag{0-20}$$

人们一般也将这里的无库仑相互作用格林函数 $\mathcal{G}_0$ 称为 Weiss 场。这样就将晶格模型映射为了杂质模型。

在一般情况下，格点自能应该是动量依赖的，但在无穷维极限下，格点自能是对角的。在这种近似下，格点自能函数就等于空腔的自能函数，没有动量依赖 [2]。此外，为了自洽地将晶格模型映射到杂质模型，要求两个体系的格点可观测量和相互作用项都对应相等，也就是要求两个体系的自能函数相同，因此就得到杂质自能等于空腔自能，即

$$\Sigma_{\mathrm{imp}}(\tau - \tau') = \Sigma_{oo}(\tau - \tau'). \tag{0-21}$$

上式等价于

$$G_{\mathrm{imp}}(\tau - \tau') = G_{oo}(\tau - \tau'). \tag{0-22}$$

利用杂质模型的 Dyson 方程，可以得到

$$G_{\mathrm{imp}}(\mathrm{i}\omega_n) = \left\{ \mathcal{G}_0^{-1}(\mathrm{i}\omega_n) - \Sigma_{\mathrm{imp}}(\mathrm{i}\omega_n) \right\}^{-1}, \tag{0-23}$$

另外，在 $D=\infty$ 极限下，晶格模型的格林函数具有下面的关系式 [3]

$$G_{ij}^{(o)}(\mathrm{i}\omega_n)=G_{ij}(\mathrm{i}\omega_n)-\frac{G_{io}(\mathrm{i}\omega_n)G_{oj}(\mathrm{i}\omega_n)}{G_{oo}(\mathrm{i}\omega_n)}, \tag{0-24}$$

以上四式已构成封闭方程组。在实际计算中，人们还需要作进一步简化处理，在此暂时不加赘述。

以上是在平衡态体系下推导出的 DMFT 自洽方程。非平衡体系的 DMFT 可以看作在此基础上的一个推广，形式上与平衡态类似，所有的格林函数和自能都表示为双时格林函数。与平衡态对应的杂质自能为

$$\Sigma_{\mathrm{imp}}(t,t')=\Sigma_{oo}(t,t'), \tag{0-25}$$

但非平衡框架下的 DMFT 自洽方程组具有完全不同的物理意义：

参考文献

[1] Metzner W, Vollhardt D. Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions [J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1989, 62: 324-327. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.324.

[2] Müller-Hartmann E. Correlated fermions on a lattice in high dimensions [J/OL]. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 1989, 74: 507-512. DOI: https://doi.org/10.1007/BF01311397.

[3] Byczuk K, Vollhardt D. Correlated bosons on a lattice: Dynamical mean-field theory for bose-einstein condensed and normal phases [J/OL]. Phys. Rev. B, 2008, 77: 235106. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.235106.