

周期アンダーソン模型における非局所相関効果の動的クラスター近似による研究

東北大学大学院 工学研究科 応用物理学専攻 清水幸弘

1. 始めに

固体中には極めて多数の電子があり，電子間にはクーロン相互作用が働いている．クーロン相互作用を平均場近似で扱うことにより，固体中の電子の電子状態を記述する一体近似理論は，多くの有用な成果を挙げてきた．しかしながら，平均場近似では記述できない多彩な現象があることも事実である．平均場近似を越えたクーロン相互作用の取り扱いが必要であり，この問題は，電子相関効果の問題と呼ばれ，現在の物性物理学において，最も重要な研究分野の1つとなっている．

周期アンダーソン模型は，重い電子系などの電子相関効果の強い系の電子状態を記述する基本的な模型として，これまで広範に研究されてきた．空間次元が1次元の系においては密度行列繰り込み群の手法が有効である．しかしながら，2次元，あるいは3次元の系におけるこの模型の電子状態の理解は十分ではない．量子モンテカルロ法や厳密対角化法による数値計算手法による解法は，少数サイトの有限系に限られている．熱力学極限となる系においては，動的平均場理論が有効な手法である．動的平均場理論は，空間次元無限大の系において厳密となる手法である．無限次元においては，電子間相互作用の自己エネルギーが局所的となり，波数依存性が厳密になくなる．このことを利用すると，格子模型の解が，自己無撞着に決定する必要がある有効媒質中の1不純物問題にマップされ，一粒子グリーン関数を計算することが可能となる．2次元，3次元の系においても自己エネルギーの波数依存性を落として一粒子グリーン関数を計算する近似法は，動的平均場近似 (DMFA) と呼ばれている．

DMFA による計算法では局所的な電子相関効果は十分に考慮されるが，非局所相関効果の扱いは不十分である．最近，この点を改良し，局所相関効果に加え，短距離の非局所相関効果を考慮する方法が提唱され，動的クラスター近似 (DCA) と呼ばれている．DCA 法では，格子模型の解が，自己無撞着に決定する必要がある有効媒質中のクラスター不純物問題にマップされる．マップされる模型が，1不純物模型でなくクラスター不純物模型となる点が，DMFA による計算手法と異なる点である．

本稿では DCA 法を2次元正方格子の周期アンダーソン模型に適用し，この模型の電子状態における局所相関効果と非局所相関効果に関して研究した結果について概要を述べる．結晶における電子相関効果の問題，すなわち多体問題を数値的に研究する場合には，膨大な計算量が必要であり，スーパーコンピュータは有用である．本稿では DCA 法の数値計算プログラムの開発において行ったベクトル化と並列化についても簡単に記す．

2. DCA の計算方法

2次元正方格子周期アンダーソン模型のハミルトニアンは，

$$\begin{aligned} H_{\text{PAM}} = & - \sum_{ij\sigma} t c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + V \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \text{h.c.} \right) \\ & - \sum_{ij\sigma} \alpha t f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + \varepsilon_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + U \sum_i f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\uparrow} f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\downarrow} \end{aligned} \quad (1)$$

である．ここで $c_{i\sigma}^\dagger$ ($f_{i\sigma}^\dagger$) は，サイト i ，スピン σ の伝導電子 (f 電子) の生成演算子である．伝導電子は遍歴性の強い電子であるのに対して，f 電子は局在性が強く，f 電子間にはクーロン相互作用 U が働いている．ハミルトニアン の 第一項が伝導電子の運動エネルギーを表し，第二項は伝導電子と f 電子が混成する効果を表している．エネルギーを測る単位として $t = 1$ をとることにする．本研究では，ハーフ・フィリングの場合の混成ギャップの問題を避けるために $\alpha > 0$ (第三項) とし，f 電子のバンド分散を導入する．この模型の f 電子の一粒子グリーン関数は，

$$G_f(\mathbf{k}, z) = \left\{ z - \varepsilon_f - \alpha\varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_U(\mathbf{k}, z) - \frac{V^2}{z - \varepsilon(\mathbf{k})} \right\}^{-1} \quad (2)$$

である．ここで $\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y))$ が正方格子のエネルギー分散であり， $\Sigma_U(\mathbf{k}, z)$ がクーロン相互作用 U による自己エネルギーである．

DCA 法においては，波数空間 (\mathbf{k} 空間) を N_c 個の領域に分割し，(2) 式中の自己エネルギーの波数依存性を粗削りに取り入れ， $\bar{\Sigma}_U(\mathbf{K}, z)$ と近似し，f 電子の一粒子グリーン関数として‘粗削りなグリーン関数’

$$\bar{G}_f(\mathbf{K}, z) = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \left\{ z - \varepsilon_f - \alpha\varepsilon(\mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}) - \bar{\Sigma}_U(\mathbf{K}, z) - \frac{V^2}{z - \varepsilon(\mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}})} \right\}^{-1} \quad (3)$$

を定義する．ここで \mathbf{K} はクラスター波数であり， N_c 個の各領域を代表する波数である． $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$ の和は， \mathbf{K} の周りの領域の波数についてとる． $N_c = 1$ の場合には， $\bar{\Sigma}_U(\mathbf{K}, z)$ の波数依存性がないので，DMFA の計算と同等になる． N_c が大きくなるに従い，自己エネルギーの波数依存性を詳細に取り入れることができる．粗削りなグリーン関数を計算するために有効模型としてクラスター不純物アンダーソン模型を考える必要がある．有効模型のグリーン関数は

$$G_{\text{clu}}(\mathbf{K}, z) = \left\{ \tilde{G}(\mathbf{K}, z)^{-1} - \bar{\Sigma}_U(\mathbf{K}, z) \right\}^{-1} \quad (4)$$

と与えられる． \tilde{G} が有効媒質のグリーン関数であり，収束条件 $\bar{G}_f(\mathbf{K}, z) = G_{\text{clu}}(\mathbf{K}, z)$ を満たすように自己無撞着に決定する必要がある．

有効模型としてのクラスター不純物アンダーソン模型のグリーン関数を計算するために本研究では NCA 法を用いた．NCA 法は，強相関不純物模型の解法に用いられている，縮退度の逆数による展開理論であり，以下の連立積分方程式の自己無撞着解を数値的に解く必要がある．

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha\alpha'}(z) &= -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{K}\sigma} \sum_{\beta\beta'} \langle \alpha | f_{\mathbf{K}\sigma} | \beta \rangle \langle \beta' | f_{\mathbf{K}\sigma}^\dagger | \alpha' \rangle \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \Gamma''(\mathbf{K}, \varepsilon) R_{\beta\beta'}(z + \varepsilon) \\ &\quad - \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{K}\sigma} \sum_{\beta\beta'} \langle \alpha | f_{\mathbf{K}\sigma}^\dagger | \beta \rangle \langle \beta' | f_{\mathbf{K}\sigma} | \alpha' \rangle \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon (1 - f(\varepsilon)) \Gamma''(\mathbf{K}, \varepsilon) R_{\beta\beta'}(z - \varepsilon), \end{aligned} \quad (5)$$

$$R_{\alpha\alpha'}(z) = \sum_{\tilde{\alpha}(z)} \langle \alpha | \tilde{\alpha}(z) \rangle \langle \tilde{\alpha}(z) | \alpha' \rangle \frac{1}{z - E_\alpha - \Sigma_{\tilde{\alpha}(z)\tilde{\alpha}(z)}(z)} \quad (6)$$

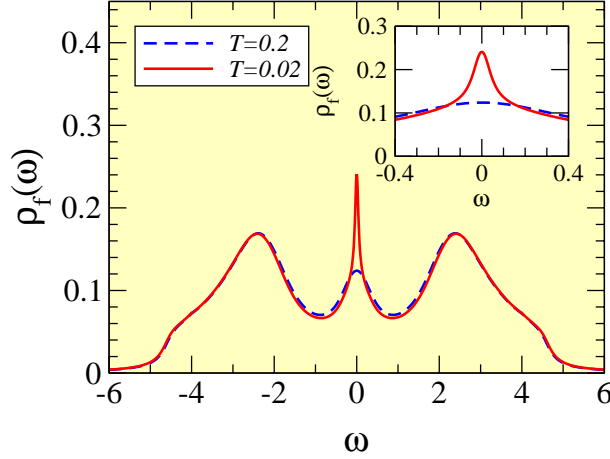


図 1: ハーフ・フィリング模型, $N_c = 1$ の場合の一粒子励起スペクトル．フェルミ準位を $\omega = 0$ とした．模型のパラメータは, $\varepsilon_f = -2, U = 4, V = 1, \alpha = 0.3$ である．赤い実線の温度が $T = 0.02$ であり, 青い破線の温度は $T = 0.2$ ．挿入図はフェルミ準位近くの拡大図．

$R_{\alpha\alpha'}(z)$ がリゾルベントと呼ばれる複素関数行列であり, $\Sigma_{\alpha\alpha'}(z)$ も複素関数行列で, NCA 法における自己エネルギーである．複素関数行列の行列要素を $(\alpha\alpha')$ 等で表している．複素関数行列の引数 z はエネルギーを表し, バンド幅の 3 倍程度の広いエネルギー領域に関して, リゾルベントと自己エネルギーを求める必要がある．一方, z の計算メッシュは近藤温度のような特性温度や計算する温度の $1/20$ 程度に細かく刻む必要がある．例えばバンド幅が 8 eV で, 特性温度が 20 K の系を取り扱おうとすると 2.4×10^5 個のエネルギーメッシュ点が必要になる．リゾルベントと自己エネルギーの行列要素数は $4^{N_c} \times 4^{N_c}$ であり, $N_c = 4$ の場合で 256×256 となる．電子数等の保存則を用いると計算すべき行列要素数を減らすことができ, 170 個程度となるが, この部分の計算負荷が大きく, 計算アルゴリズムの工夫が必須である．本研究においてはエネルギーメッシュを等間隔とせず, 細かく刻む必要があるエネルギー領域を自動的に探しながら計算する方法を開発した．更に, 積分計算をベクトル化し, 複素関数行列の要素に関して並列化計算を行った．

3. 計算結果

3.1 ハーフ・フィリング模型

本研究においては, $N_c = 1$ と $N_c = 4$ の計算結果を比較することによって非局所相関効果が電子状態に如何に寄与しているかを調べた．最初に電子の占有数が丁度半分であるハーフ・フィリングの場合を取り扱い, 3.2 節でハーフ・フィリングからずれた場合について述べる．

図 1 に $N_c = 1$ の場合の一粒子励起スペクトル (f 電子のグリーン関数の虚部) を示した．赤い実線で示した低温の場合と青い破線で示した高温の場合の両者共に 3 つのピーク構造をしている．励起エネルギーの高いピークは $|\omega| \sim U/2$ 程度に位置しほとんど温度変化しない．フェルミ準位に位置するピークは降温とともにシャープになり, 共鳴ピークと呼ばれている．

図 2 に $N_c = 4$ の場合のクラスター波数分解一粒子励起スペクトル ($\bar{G}_f(K, \omega + i\delta)$) の

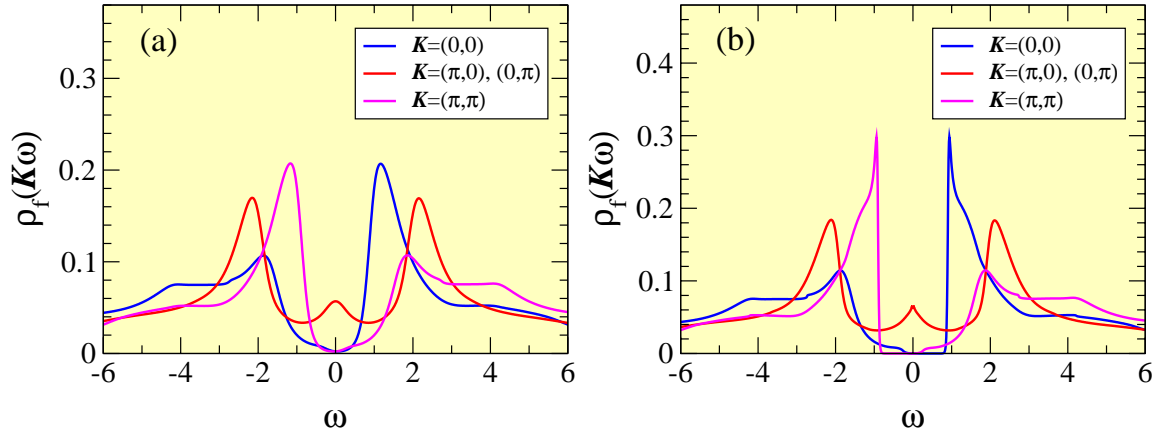


図 2: ハーフ・フィリング模型, $N_c = 4$ の場合のクラスター波数分解一粒子励起スペクトル. フェルミ準位を $\omega = 0$ とした. 各スペクトルのクラスター波数 K は図中に示してある. 模型のパラメータは, 図 1 のそれと同じ. 図 (a) の温度が $T = 0.2$ で, 図 (b) の温度は $T = 0.02$.

虚部) を示した. 模型のパラメータと温度は図 1 に示した $N_c = 1$ の場合と同じである. $K = (0, 0)$ と $K = (\pi, \pi)$ の波数分解スペクトルにおいてギャップ構造が見られ, 温度の低下と共にギャップ端にシャープなピーク構造が現れる. $K = (\pi, 0), K = (0, \pi)$ の波数分解スペクトルは $N_c = 1$ の場合と同様に 3 ピーク構造を持つ. しかしながら, フェルミ準位上のピーク構造は温度が低下してもシャープにならない. その結果 $N_c = 4$ の場合にはフェルミ準位に擬ギャップ構造が生じる. この点が $N_c = 1$ の計算結果と著しく異なる点であり, 非局所相関効果が擬ギャップ構造に寄与していることが分かる. 擬ギャップ構造の起源を明らかにするために運動交換相互作用, フェルミ面のネスティング効果, RKKY 相互作用に関して調べた. その結果, 擬ギャップ構造の起源は反強磁性 RKKY 相互作用であることが明らかになった. ハーフ・フィリング模型においては非局所相関効果の寄与が局所相関効果より大きいと考えられる.

3.2 フィリング依存性

伝導電子バンドの電子の占有数がハーフ・フィリングからずれたときに局所相関効果と非局所相関効果が如何に寄与するかを調べた. 図 3 が $N_c = 1$ の場合の一粒子励起スペクトルである. 伝導電子バンドのフィリングを 0.18 (ハーフ・フィリングの場合が 0.5) とした. フェルミ準位に位置する共鳴ピークがハーフ・フィリングの場合と同様に温度変化している. 図 4 が $N_c = 4$ の場合の波数分解一粒子励起スペクトルである. $K = (0, 0)$ の波数分解スペクトルに共鳴ピークが現れ, 図 (b) に示したように低温の場合にはシャープな共鳴ピークとなる. これはハーフ・フィリングの場合と異なる振る舞いである. 低温における共鳴ピークの強度は $N_c = 1$ のそれより少し小さい. このことは, 非局所相関効果は少し残っているが, 局所相関効果の寄与が大きいことを示している.

4. まとめ

DCA 法を 2 次元周期アンダーソン模型に適用することによって, この模型に含まれている局所相関効果と非局所相関効果の双方を取り扱うことができることを示した. 本研究で行った DCA 計算は, N_c が小さく, 自己エネルギーの波数依存性を文字通りに「粗削り

に'取り入れられた段階である．更に大きい N_c を用いた研究への発展が期待されている．また，現実の実験結果との対応を考えるためには，3次元模型を用いた研究，更にはバンド計算とDCA計算を組み合わせる研究への発展が必要である．更に大容量メモリ，かつ超高速CPUを多数持つ計算機環境が近い将来に整備され，これらの研究が可能となることを期待している．

本研究の一部は，著者と東北大学大型計算機センター（2001年4月より東北大学情報シナジーセンター）と共同で行ったスーパーコンピュータの高度利用に関する共同研究に基づいている．Fortranコードのベクトル化と並列化に関して同センターの岡部公起氏から有意義な助言を頂いたことに感謝する．

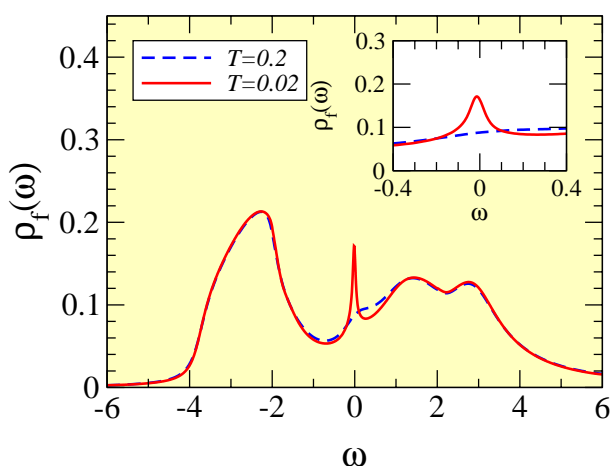


図 3: 伝導電子バンドのフィリングが 0.18, $N_c = 1$ の場合の一粒子励起スペクトル．その他の模型のパラメータは，図 1 のそれと同じ．挿入図はフェルミ準位近くの拡大図．

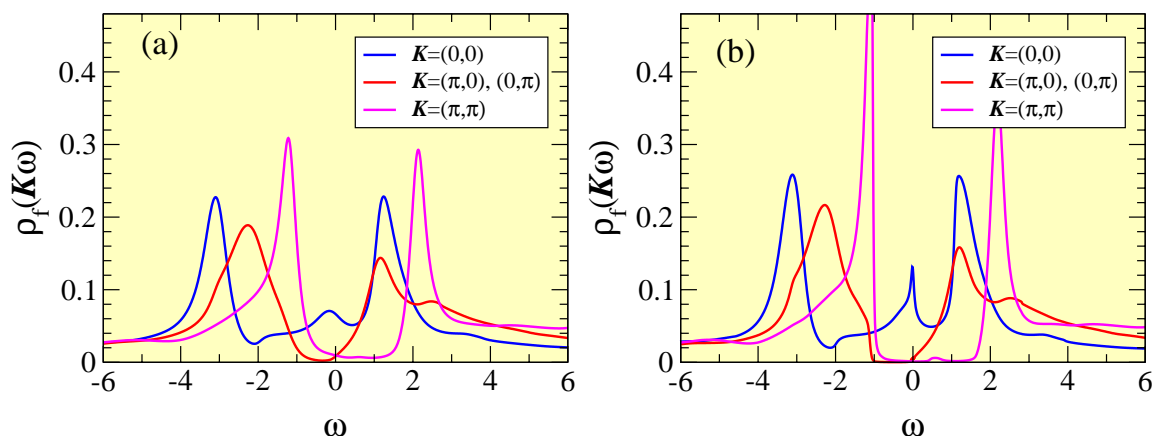


図 4: 伝導電子バンドのフィリングが 0.18, $N_c = 4$ の場合のクラスター波数分解一粒子励起スペクトル．その他の模型のパラメータは，図 3 のそれと同じ．図 (a) の温度が $T = 0.2$ で，図 (b) の温度は $T = 0.02$ ．