

モンテカルロ法によって高密度近藤状態を調べる

東大 物性研究所 斯波弘行

高密度近藤状態は電子間に強い相関のある フルニ流注と想像されている。その状態を変分法とモンテカルロ法の組み合わせによって調べているので 今迄に得られている結果をあげる。

一般に強い電子相関のある多電子系は 困難な理論的課題である。相関の弱い場合に摂動論によって取り扱うことが可能だが、強い場合には近似理論としては変分法が有力である。しかし、その変分理論すら容易でない。よく知られた Hubbard モデルに対しては Gutzwiller 理論¹⁾ が最も注目すべき変分理論であるが、エネルギー一期待値の計算には非常に問題がある。

幸い、高密度近藤状態についてもみてはまる。ここでは変分理論は満足すべき水準に達していない。我々は両者共モンテカルロ法によってある程度克服出来ると考えて現在計算を進めている。²⁾ 以下の話はその中間報告である。

高密度近藤状態を調べる最も簡単なモデルとして $U \rightarrow \infty$ a single-orbital periodic Anderson model ε とする。それに対する変分理論は Stevens³⁾, Brandow⁴⁾, Rice-Ueda⁵⁾ により提出されてきた。その変分波動関数は single impurity problem の Yosida 理論の第一近似に相当する Valma-Yafet の自然な拡張である。

$$\Psi = \prod_j [1 + \sum_{\sigma} f_{j\sigma} \tilde{c}_{j\sigma}] |F\rangle \quad (1)$$

$$\tilde{c}_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik \cdot R_j} \Gamma_k c_{k\sigma}$$

ここで Γ_k は site j のまわりの bound state の cloud (ここで hole) を記述する。エネルギーを最小にするような Γ_k を決めるのが変分問題である。³⁾ (1) は定数 ε と別にして

$$\Psi = \hat{P} \prod_k \prod_{\sigma} [\cos \phi_k c_{k\sigma} + \sin \phi_k f_{k\sigma}] |vacuum\rangle \quad (2)$$

と書ける。⁵⁾ $\hat{P} = \prod_j (1 - n_{j\uparrow} n_{j\downarrow})$ である。(2) は Gutzwiller 型である。

モンテカルロ法で変分計算を行い、物理量の期待値を行うには第一量子化の表示で (2) の Ψ を書き実行する。⁶⁾ ε を最小にする Γ_k の k 依存性を決める計算を進めつつあるが、これから示すものはより簡単に 2つのパラメータを含む式で Γ_k を表わしそのパラメータを变分で決めた計算である。電子相関がないとき Γ_k は単純に s, f の混成バンドの f, s 成分比になり、それは f レベルの位置 E_f と混成の大きさを V で表

わさ水子. ϵ で電子相関 λ 入ったと30 E_f . V の代りにくり込まれ去他 \tilde{E}_f , \tilde{V} と代入し, \tilde{E}_f , \tilde{V} を変分パラメータとする. correlation factor \hat{F} は変分モンテカルル法での正確に取り扱わなければならない. モンテカルル計算は有限系で実行する. 系の大きさは計算時間の電子数 n 乗に比例することから上限が生じ 現実的には上限は 200 程度と予想される. (以下 n の計算は $n > 100$ の系に對するものである)

今回本計算はモデルとして一次元モデルとし, 伝導電子帯の中は -2 から 2 まで (全バンド幅 $= 4$), V は 0.5 とし, E_f は $0, -1, -1.5$ とかえてみた. 原子数 N_a は ~ 40 で 電子濃度 $= N_e/N_a = 2, 7/4$ と選んでいる.

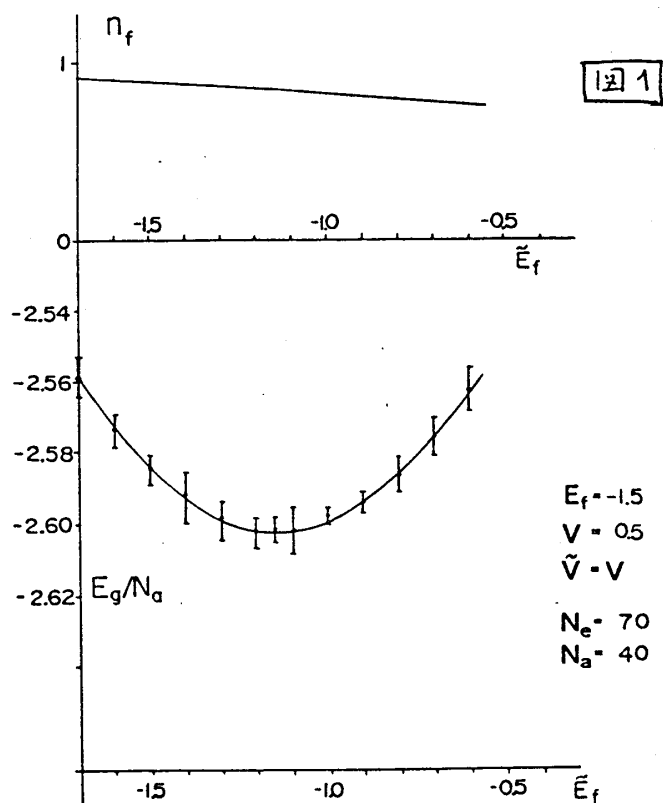
E と最小化する変分パラメータの値

E と最小化する $\tilde{E}_f - \tilde{V}$ の値は以下通りである. ($N_e = 70, N_a = 40$ に對して)

E_f	0	-1	-1.5
\tilde{E}_f	~ 0.05	~ -0.8	~ -1.0
\tilde{V}	~ 0.4	~ 0.2	~ 0.1
n_f	0.64	0.87	0.93

即ち \tilde{V} は元々の値 $V = 0.5$ より小さくなる. \tilde{E}_f (有効 f 準位) は E_f より高くなる. n_f は ϵ の f 電子数の平均である.

図1は E の変分パラメータと共に変わる原子 ϵ での $\tilde{V} = V$ とし \tilde{E}_f とかえていく. 変分モンテカルル法では統計誤差を伴うためこの図で明らかになる E と最小化する \tilde{V}, \tilde{E}_f は「正確に」決まるには若干の困難がある. 上の表に \sim がついているのはその為である.



基底状態の性質

変分パラメータが決まればそれを含む波動関数で物理量の期待値を計算すればよい. この段階もモンテカルル法による実行である.

(1) 運動量分布

s 電子, f 電子の運動量分布を計算したものが図 2, 3 である。図 2 は $N_e = 2N_a$ の場合でこのとき系は insulator と思われた。 $E_f = 0.0$ に対する結果である。 f 電子の運動量分布は電子相関が弱いときは $k=0$ の付近で 0 に近く、 $k \sim \pi$ の付近で 1 に近いが電子相関により k 依存性が小さくなっている。つまり f 電子は電子相関により局在性が増している。
 $N_e/N_a = 7/4$ に対する結果は図 3 であるが、この場合系は metal の metal 特有の γ 準位が存在する。 f 電子の分布は $k=0$ の付近で 1 に近いが電子相関効果である。

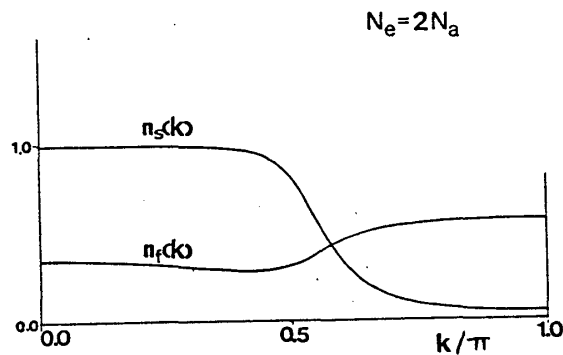
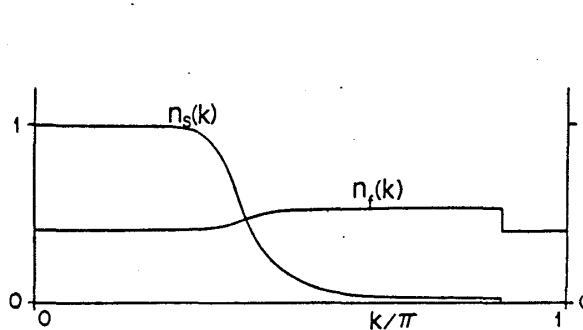


図 2

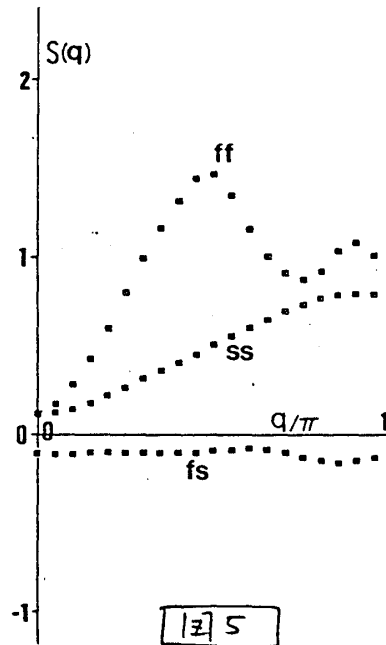
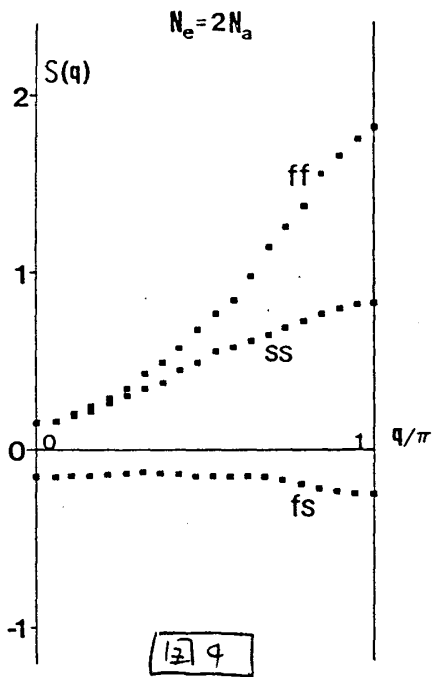


$V = 0.5$
 $E_f = -1.5$
 $\bar{V} = 0.1$
 $\bar{E}_f = -1.0$
 $N_e = 70$
 $N_a = 40$

図 3

(2) スピン相関効果

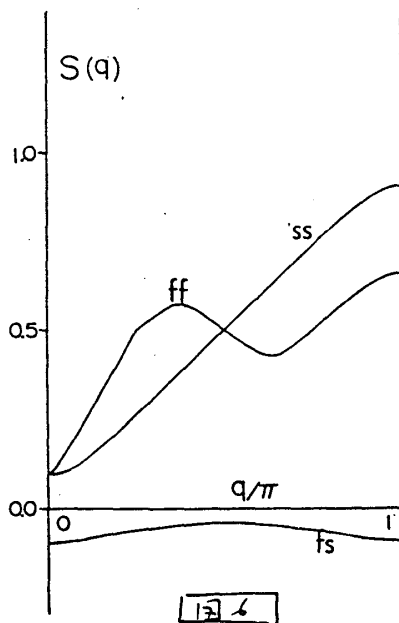
基底状態でのスピン相関と見做すスピン相関効果の γ - γ 変換 (magnetic structure factor) を s, f を合わせて計算して見たものが図 4, 5 である。図 4 は ff は f-s と同様のスピン相関効果、 fs は f-s と s-s と同様の、 ss は s-s と同様のスピン相関効果を示す。この図はスピン相関が局所的であるか q 依存性が小さくなるかを示している。この図は ff の相関が q 依存性が大きいことを示す。これは筆者にとって全く予想外であった。広く想像されているような single impurity のモデルが成り立っているわけではない。 ff の q 依存性は小さいはずである。これは f 電子間の intensity correlation のある程度あることを示している。これは q が 2π (1) の反対側で cloud が overlap していることを考慮して q 依存性の詳細は別としてある程度真実(含む)と今は考えている。 fs の方は f-spin と s-spin の向きの相関があり fs の余り q のよさ $q=0$ はその相関が局所的であることを示す。図 4 は $N_e = 2N_a$ に対する結果でこのとき f-s と同様の反磁性の相関があることを ff の γ - γ よりわかる。図 5 は $N_e/N_a = 7/4$ の図 3 に対応する場合 q の途中の ff の γ - γ がある。これについては今後更に検討して取りたいので、 Γ_k の k 依存性が反映していると思われ。という q の相互作用



用 a の値を計算してあると図 6 の様
になり、これを図 5 と比べると ff
の値が大きく増大しているからである。

まとめと今後の課題

1. ニニで変分モンテカルロ法で高精度
近藤状態, 殆く singlet bound
state a cloud の重なり a 処理の
ある程度できたことと示した。
2. 物理的結果としては, 基底状態での
スピン相関のかなり強いことがわかった。
これは新しい結果であると思う。
3. 今後に残された問題は沢山あり、
これからひたつたき努力をして解決は
ならないことが多い。第一、今迄の結果をよりきちんとしたものにすること。
4. そしてモデルを本邦の近況に近づけてゆきつくりである。3次元, orbital
degeneracy etc.
5. フェルミ換行パラメータを定めること
6. 変分法初期内政を (1) から更に進めて改良すること。
現在これらの点を目標として計算をつけている。なお、ニニの進め方を



s-f exchange model (Kondo lattice) に使った。一切予備の結果から
はたしての $\lambda^0 - \lambda^1$ の値を算出した。

文献

- (1) M. C. Gutzwiller: *Phys. Rev. Lett.* 10, 159 (1963)
- (2) この連べた 変分モンテカルロ法は Hubbard 行列の Gutzwiller 理論を検討
及び改良の便に。現在計算の進行中。横山寿敏, 其の論文行: 準備中。
- (3) K. W. H. Stevens: in *Valence Fluctuations in Solids* (Falicov - Hanke
- Maple)
- (4) B. H. Brandow: preprint (1985)
- (5) T. M. Rice and K. Ueda: *Phys. Rev. Lett.*
- (6) W. L. McMillan: *Phys. Rev.* 138, A442 (1965)