

尚,  $\hat{G}_{k\sigma}(\omega)$  の定義はバンド計算との関係を意識させるが, 電子相関による  $r$  と  $\chi_s$  の増大因子  $1 - \partial \hat{\Sigma} / \partial \omega$ ,  $\hat{\chi}_{\uparrow\uparrow} + \hat{\chi}_{\uparrow\downarrow}$  はバンド計算には取り入れられていないものである。我々はこれらの増大因子を  $U$  に関する摂動計算に依り評価することを目指す。

## 5. 周期的アンダーソンモデルの変分理論

東大・物性研 柳沢 孝, 斯波弘行

### (1) はじめに

高密度近藤系は電子間に強い相関のある系であり, 低温では Fermi 流体であると思われているがその理論的取り扱いが難しい。変分法はこのような強い相関のある系を扱う一つの有力な方法であり, それによって調べた効果を紹介する。

モデルとして, 周期的 Anderson モデル

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} - V \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}) + \epsilon_f \sum_{k\sigma} f_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + U \sum_j n_{fj\uparrow} n_{fj\downarrow} \quad (1)$$

をとり,  $U \rightarrow \infty$  とする。変分波動関数は single impurity problem の第一近似である Varma - Yafet の波動関数を格子の場合に自然に拡張した

$$\Psi = \prod_j \left( 1 + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \Gamma_{\mathbf{k}} f_{j\sigma}^+ c_{k\sigma} \right) |F\rangle \quad (2)$$

をとる。ここで  $|F\rangle$  は伝導電子だけがつまった Fermi 球であり,  $N$  は格子点の数である。エネルギーを最小にするように  $\Gamma_{\mathbf{k}}$  を決めればよい。実は, この波動関数を用いてエネルギー期待値の計算をすることは難しく, どうやって計算するかが変分計算の一つのポイントになる。

### (2) Gutzwiller 近似

Hubband モデルに対して用いられた Gutzwiller 近似<sup>1)</sup>を周期的 Anderson モデルに適用した計算が Rice-Ueda ら<sup>2)</sup>によってなされている。エネルギー期待値は一種の平均場近似を行うことにより

$$E = E_{\text{kin}} + \sum_{\sigma} q_{\sigma} E_{\text{mix},\sigma} + \epsilon_f n_f \quad (3)$$

と求められる。ここで、

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \epsilon_k \langle c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle_0$$

$$E_{\text{mix},\sigma} = -2V \frac{1}{N} \sum_k \langle f_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle_0$$

$$q_\sigma = \sqrt{\frac{1-n_f}{1-n_{f\sigma}}} \quad , \quad n_f = \sum_\sigma n_{f\sigma}$$

である。 $\langle A \rangle_0 = \langle \psi_0 | A | \psi_0 \rangle / \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle$  で、 $\psi_0$  は  $U=0$  の時の  $f, s$  が混成したバンドを表わす：

$$\psi_0 = \prod_{k,\sigma} (1 + \Gamma_{k\sigma} f_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}) |F\rangle \quad (4)$$

$f$  電子数  $n_{f\sigma}$  が  $U=0$  のときと同じ式で与えられると仮定すると、条件つき変分問題を解くことになり、 $\mu_\sigma$  を Lagrange の未定係数として

$$E = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \left( \frac{\epsilon_k}{1 + \Gamma_{k\sigma}^2} - 2V q_\sigma \frac{\Gamma_{k\sigma}}{1 + \Gamma_{k\sigma}^2} + \epsilon_f \frac{\Gamma_{k\sigma}^2}{1 + \Gamma_{k\sigma}^2} \right)$$

$$+ \sum_\sigma \mu_\sigma \left( n_{f\sigma} - \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Gamma_{k\sigma}^2}{1 + \Gamma_{k\sigma}^2} \right)$$

を  $\{\Gamma_{k\sigma}\}$  ,  $n_{f\sigma}$  で変分することになる。その結果、 $\Gamma_{k\sigma}$  は

$$\Gamma_{k\sigma} = \frac{2q_\sigma V}{\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_k + \sqrt{(\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_k)^2 + 4q_\sigma^2 V^2}}$$

で与えられてエネルギー  $E$  は

$$E = \sum_\sigma \left[ \frac{\rho}{2} \left\{ \epsilon_{0\sigma}^2 - D^2 - \frac{2\epsilon_{0\sigma} n_{f\sigma}}{\rho} + \frac{n_{f\sigma}^2}{\rho^2} \right. \right.$$

$$\left. \left. - 2V_\sigma^2 \log \frac{n_{f\sigma} \left( \frac{1}{2} - n_{f\sigma} + \rho \epsilon_{0\sigma} \right)}{\rho^2 \tilde{V}_\sigma^2} \right\} + \epsilon_f n_{f\sigma} \right]$$

となる。ここで、 $\tilde{V}_\sigma = q_\sigma V$  であり、バンドの幅  $2D$  が  $\Delta = \pi \rho V^2$  ,  $\rho \equiv 1/2D$  より十分大

きいとした。  $E$  を  $n_f$  で変分すると、特に  $n_f \simeq 1$  のときには

$$1 - n_f = \frac{\epsilon_0}{4\rho V^2} \exp\left(\frac{\epsilon_f + D - \epsilon_0}{4\rho V^2}\right)$$

となる。右辺の指数の肩は single impurity のときと比べて factor 2 だけ違う。エネルギーを磁化  $m$  で展開することにより帯磁率が計算できるが、 $\epsilon_f$  がかなり高くない限り帯磁率は発散する (図 6)。この発散は少し強すぎるように思われる。

### (3) 変分モンテカルロ法<sup>3)</sup>

モンテカルロ法によってエネルギー期待値を正しく評価し、Gutzwiller 近似の欠点を取り除こうとするのが変分モンテカルロ法である。 $\Gamma_k$  を少数個のパラメーターで表わし、変分によってパラメーターを決める。 $U=0$  のとき  $\Gamma_k$  が  $f$  レベルの位置  $\epsilon_f$  と混成の大きさ  $V$  で表わされることを考えて、電子相関の入ったとき ( $U \rightarrow \infty$ ) は、 $\epsilon_f, V$  をくりこまれた  $\tilde{\epsilon}_f, \tilde{V}$  に変えたもので  $\Gamma_k$  がかけるとして、 $\tilde{\epsilon}_f, \tilde{V}$  を変分パラメーターとする:

$$\Gamma_k = \frac{2\tilde{V}}{\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_k + ((\tilde{\epsilon}_f - \epsilon_k)^2 + 4\tilde{V}^2)^{1/2}} \quad (5)$$

波動関数の形が決まれば変分モンテカルロ法では電子相関を正確に取り入れることができる。今回の計算は一次元モデルをとり、伝導電子の分散を  $\epsilon_k = -2 \cos k$  とする。 $V$  を 0.5,  $\epsilon_f$  を 0, -1, -1.5 とした。原子数  $N_a \sim 40$  で電子数  $N_e$  は  $N_e/N_a = 2, 7/4$  を選んだ。エネルギーを最小にする変分パラメーター  $\tilde{V}$  は  $V$  より小さくなり、 $\tilde{\epsilon}_f$  は  $\epsilon_f$  より高くなる。これは物理的に予想された通りであり、 $\tilde{\epsilon}_f, \tilde{V}$  の値は結果としては Gutzwiller 近似によるものに近い。

s 電子, f 電子の運動量分布を計算したのが図 1 である。ここで、 $\epsilon_f = 0, N_e/N_a = 7/4$  としている。f 電子の運動量分布は  $U=0$  のときに比べて  $k$  依存性が小さくなっていて、電子相関により f 電子の局在性が強くなっていることを示している。系は metal で Fermi 面が存在し、そこで f 電子の分布にとびが現われる。このとびが小さいのは電子相関の効果である。基底状態でのスピン相関を見るためにスピン相関関数の Fourier 変換を s, f 電子について計算したのが図 2 である。 $S(q)$  (・印),  $C(q)$  (▲印) はそれぞれスピン, 密度 (charge) 相関である。パラメーターは図 1 と同じである。これらの図から、f 電子間の密度相関は小さくおさえられているが、スピン相関は非常に強められているのがわかる。s 電子の密度, スピン相関は  $U=0$  のときとほとんど変わらず相互作用  $U$  の効果は s 電子には影響がないことを示

している。  $U=0$  の場合 ( 図 3 ) と図 2 を比べると  $f$  電子間のスピン相関のみ強められているのがわかる。  $f-s$  相関の  $q$  依存性は小さく局所的である。

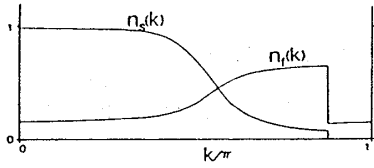


図 1  $f, s$  電子の運動量分布

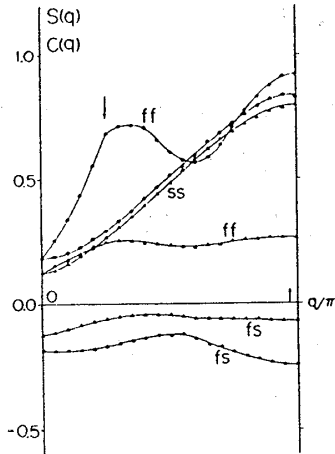


図 2 スピン, 密度相関関数

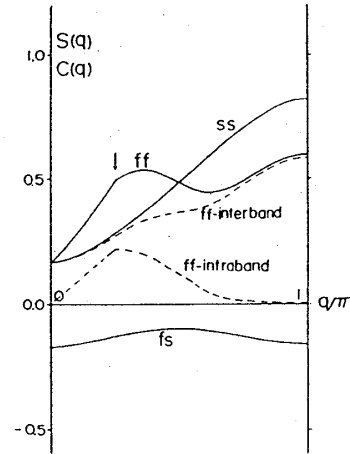


図 3  $U=0$  の時のスピン相関関数

(4) 別のアプローチによる変分計算

Gutzwiller 近似および変分モンテカルロ法では  $\Gamma_{\mathbf{k}}$  が少数個のパラメーターで表わせるとしたがその保証はない。また変分モンテカルロ法では帯磁率の計算は難しい。そこで、別の変分計算を行った。

まず、(2)の波動関数が次の形に書き換えられることに注意する。

$$\Psi = \exp(S) \psi_0 \tag{6}$$

ここで、 $\psi_0$  は(4)で与えられ、

$$S = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}j} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \Gamma_{\mathbf{k}\sigma} f_{j\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} n_{fj,-\sigma} \quad (\sigma = \uparrow \text{ or } \downarrow) \tag{7}$$

である。  $\epsilon_f$  があまり深くなく  $f$  電子数  $n_f$  が小さいときには  $S$  は小さいだろうから、  $\exp(S) = 1 + S + \dots$  と展開して高次の項を落すことが許されると期待できる。エネルギー期待値は linked cluster 展開ができる：

$$\begin{aligned} E &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle \\ &= \langle H \rangle_0 + \langle HS + S^+ H \rangle_{0,c} + \langle S^+ HS \rangle_{0,c} + \dots \end{aligned}$$

$E$  を最小にするように  $\Gamma_{\mathbf{k}\sigma}$  を決めればよい。すなわち、  $\Gamma_{\mathbf{k}\sigma}$  の形を仮定せずに  $\Gamma_{\mathbf{k}\sigma}$  を決定できる。実際の計算は簡単のため再び次元とし伝導電子を  $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2 \cos k$  とした。 band

filling は  $N_e/N_a = 3/2$  とし, metal の場合を考える。図4は  $\Gamma_k$  の  $k$  依存性である。Fermi 面の近くで  $\Gamma_k$  が大きくなっている。これは  $\Gamma_k$  を  $\tilde{\epsilon}_f$ ,  $\tilde{V}$  で表わしたとすると  $\tilde{\epsilon}_f$  が大きくなり  $\tilde{V}$  が小さくなっていることに相当する。f 電子の運動量分布を図5に示す。電子相関の効果によって Fermi 面でのとびが小さくなり,  $R$  依存性も小さくなっている。

帯磁率の計算結果が図6である。f 電子の帯磁率を Gutzwiller 近似で計算するとかなり高い  $\epsilon_f$  で発散するのに対して, 今回の計算では有限のみである。s 電子の帯磁率は小さく,  $U=0$  の時とほとんど変わらない。これらの結果より特に価数揺動領域では Fermi 流体が実現していると考えられる。軌道縮退が2 (スピンも含めて縮重度  $N_f = 4$ ) の帯磁率も図6に入れてある。軌道縮退のない場合 ( $N_f = 2$ ) に比べて小さくなっていて, この傾向は Rice - Ueda の結果と consistent である。

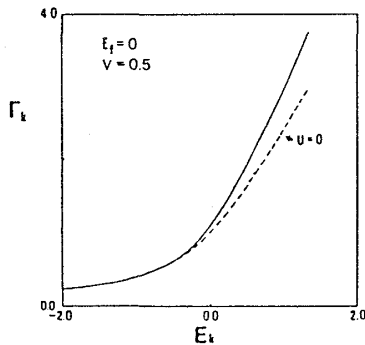


図4  $\Gamma_k$  の  $k$  依存性

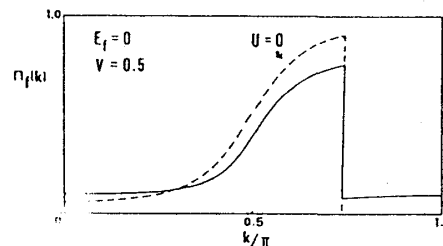


図5 f 電子の運動量分布

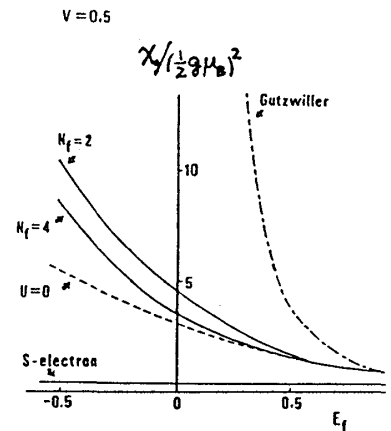


図6 帯磁率

## 文 献

- 1) M. C. Gutzwiller: Phys. Rev. **137**, A1726 (1965).  
D. Vollhardt: Rev. Mod. Phys. **56**, 99 (1984).
- 2) T. M. Rice and K. Ueda: Phys. Rev. Lett. **55**, 995, 2093(E) (1985).  
C. M. Varma, W. Weber and L. J. Randall: Phys. Rev. B **33**, 1015 (1986).  
P. Fazekas: Preprint.
- 3) H. Shiba: J. Phys. Soc. Jpn. **55**, No. 8 (1986).