

9. 一次元周期アンダーソン模型の熱力学

東北大・理 佐 宗 哲 郎

工業技術院 清 野 豊

軌道縮退のない一次元周期アンダーソン模型の経路積分法による量子モンテカルロ計算¹⁾について報告した。特に、最近の1及び2不純物の場合の量子モンテカルロ計算²⁾および1不純物のベート仮説による厳密解³⁾と比較した。

ハミルトニアンは

$$H = -t \sum_{i\sigma} (c_{i+1\sigma}^+ c_i + c_{i\sigma}^+ c_{i+1\sigma}) + E_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} \\ + V \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{if\uparrow} n_{if\downarrow} .$$

分配関数は次のように書かれる⁴⁾：

$$Z = \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \sum_{\{x_{l\sigma}(j)\}} \sum_{\{\tau_{l\sigma}(j)\}} \text{sign}(\rho(\{x_{l\sigma}(j), \tau_{l\sigma}(j)\})) \\ \cdot |\rho(\{x_{l\sigma}(j), \tau_{l\sigma}(j)\})| \\ \rho(\{x_{l\sigma}(j), \tau_{l\sigma}(j)\}) \\ = \prod_{j=1}^M \det[G^\uparrow(j, j+1)] \det[G^\downarrow(j, j+1)] \\ \cdot \exp[-\beta H_u(j)/M] .$$

ここで $\beta = 1/T$ ， M は Trotter 分割数である。 $H_u(j)$ はハミルトニアンの最後の項の「虚時間」 j での値。 $x_{l\sigma}(j)$ および $\tau_{l\sigma}(j)$ は「虚時間」 j での l 番目の粒子の位置と種類 (c か f) である。 G の行列要素は

$$[G^\sigma(j, j+1)]_{ll'} \\ = g(x_{l\sigma}(j) - x_{l'\sigma}(j+1); \tau_{l\sigma}(j), \tau_{l'\sigma}(j+1))$$

となっている。ここで

$$g(y; \tau, \tau') = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \cos(2\pi k y / N) \cdot \sum_{\tau''} (U^t)_{\tau\tau''} U_{\tau''\tau'} \exp[-\beta E_{\tau''}(k)/M]$$

行列 U は、ハミルトニアンの中の最初の 3 項を運動量表示で対角化するもので

$$U_{11} = U_{22} = V / \{V^2 + (E_1(k) - \epsilon_k)^2\}^{1/2}$$

$$U_{21} = -U_{12} = |E_1(k) - \epsilon_k| / \{V^2 + (E_1(k) - \epsilon_k)^2\}^{1/2}$$

また、 $\epsilon_k = -2t \cos(2\pi k/N)$ 、 $E_\alpha(k) (\alpha=1,2) = [(\epsilon_k + E_f) \pm \text{sign}(\epsilon_k - E_f) \{(\epsilon_k - E_f)^2 + 4V^2\}^{1/2}] / 2$ である。

用いたパラメータは文献 2) と同じで、伝導電子の重なり積分 t を 1 として、 $V=1$ ($\Delta = \pi \rho V^2 = 0.5$)、 $E_f = -U/2$ 、 $U = 0 \sim 4$ 、 $T = 0.125 \sim 10$ 、 $\Delta\tau = 1/MT = 0.25$ (M : トロッター数)、各データは 10^5 MCS での平均である。モンテカルロの方法は、文献 4) によっている。次に、結果を示す。

$U=2$ を例にとると、まず局所モーメント $\langle (\sigma_{if}^z)^2 \rangle$ ($\sigma = n_{if\uparrow} - n_{if\downarrow}$ 、 $n_{if\uparrow}$ は i サイトの f 電子数) は、 $T > 0.5$ では 1 不純物の時と変わらない (図 1)。 $T < 0.5$ で反強磁性的相関が成長し始めると同時に、モーメントも減少し出す。(強磁性的に結合した 2 不純物²⁾ とは反対。また、1 不純物の時、 $T < 0.25$ で近藤効果によりモーメントが死に始めていることに注意。このときの $T_K \sim 0.087$) 次に図 2 に同一サイトでの f 電子間の相関 $\langle n_{if\uparrow} n_{if\downarrow} \rangle$

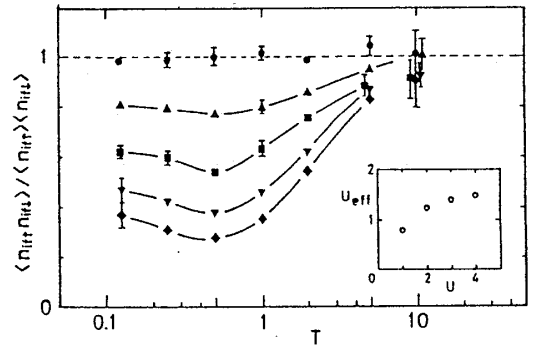
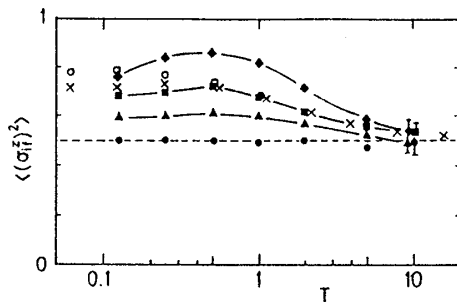


図 1 局所モーメントの温度依存性 ($U=0$ (●), 図 2 f 電子間の局所相関。記号は図 1 と同じ。

1 (▲), 2 (■), 4 (◆)). 1 不純物 (×) (▼は $U=3$) 挿入図は有効相互作用 $U_{\text{eff}} = U \langle n_{if\uparrow} n_{if\downarrow} \rangle / \langle n_{if\uparrow} \rangle \langle n_{if\downarrow} \rangle$ 及び 2 不純物 (○) の結果²⁾ も示してある。

の温度変化を示す。低温で相関が成長するが、 $T < 0.5$ では再び相関が弱まる。挿入図は $T = 0.125$ での有効相互作用 $U_{\text{eff}} = U \langle n_{if\uparrow} n_{if\downarrow} \rangle / \langle n_{if\uparrow} \rangle \langle n_{if\downarrow} \rangle$ を U の関数として示したものである。この量は準粒子間の相互作用 $\Gamma_{\uparrow\downarrow}(\omega)$ とは異なる。 $\Gamma_{\uparrow\downarrow}(\omega)$ は低エネルギーで $\pi^2 \Delta^2 / 4T_K$ 程度に大きくなるが、ここでの U_{eff} は $\Gamma_{\uparrow\downarrow}(\omega)$ を ω について平均した程度のも

のであろう。計算結果は U の大きいところで $U_{\text{eff}} \sim \pi A$ 程度で飽和するように見える。

一様帯磁率 χ_{ff} は反強磁性的傾向に、より敏感である。1 不純物に比べて大きく増大した後、反強磁性相関の為に急激に減少する (図 3)。帯磁率の振幅は、有効バンド幅を $t/2$ 程度にとった 1 次元 Hubbard 模型⁵⁾に近い。上記のモーメントの低温での減少及び有効相互作用の増加も Hubbard 模型と同様で、基底状態でスピンの反強磁性的整列に隣から反対向きスピンの $\sim t^2/U$ 程度混ざることによる。

以上の結果は、 f の縮重度が 2 では、 f 間の磁気的相関が近藤効果に勝ってしまうことを示している。縮重度を増やせば磁気的相互作用は減少し、近藤温度は上がる。一次元モデルでは、確かに、低温で磁気秩序化しやすいから非磁性的な Fermi 液体状態は調べにくい、逆に、磁気秩序と近藤効果の競争を調べるという観点からみれば縮重度を代えて調べてみることは興味深い。

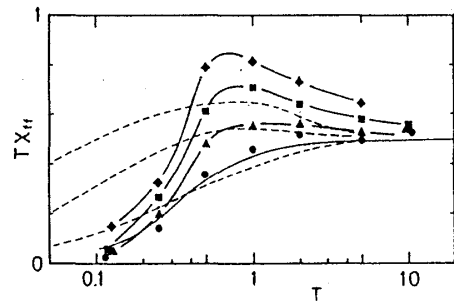


図 3 一様帯磁率の f 成分 $T\chi_{ff}$ 。記号は図 1 と同じ。この図に限り、誤差は 0.1 の程度ある。点線は 1 不純物の厳密解³⁾ (下から $U=0, 2, 4$)。細線は $U=0$ の時の大正準集合による計算値。

参 考 文 献

- 1) T. Saso and Y. Seino: J. Phys. Soc. Jpn. に投稿中。
- 2) J. E. Hirsch and R. M. Fye: Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 2521.
- 3) A. Okiji and N. Kawakami: Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 1157.
- 4) M. Takahashi and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 963.
D. J. Scalapino and R. L. Sugar: Phys. Rev. Lett. **46** (1981) 519.
- 5) H. Shiba and P. A. Pincus: Phys. Rev. **B5** (1972) 1986; H. Shiba: Prog. Theor. Phys. **48** (1972) 2171.