

強相関絶縁体の一電子状態密度におけるインコヒーレント成分の優勢

物質構造科学研究所 富田 憲一、那須 奎一郎

一電子グリーン関数のスペクトル表示（状態密度）を通して、強いクーロン相互作用によって絶縁体となっている系（強相関絶縁系）の電子状態について調べる。通常、状態密度は、一電子的な状態を反映するコヒーレント成分と、他の素励起との結合状態を反映したインコヒーレント成分からなっている。従来のバンド理論では、状態密度を支配しているのはコヒーレント成分であり、インコヒーレント成分はサイドバンドを形成するに過ぎない、と考えられて来た。

ところが、銅酸化物のような強相関絶縁系では事情が大きく異なっており、角度分解光電子分光の実験からは、1 eV 近い幅を持った、broad なピークしか得られていない[1,2]。しかも、エネルギー解像度の著しい向上にもかかわらず、このピークには目立った内部構造は見えない。つまり、この系では、コヒーレント成分とインコヒーレント成分を分離することは非常に難しいと言わざるを得ない。このことは、強相関系の電子状態に、どの程度バンド的な成分が残っているのか、と言う問いに明確な解答が与えられない原因になっている。本研究では、強相関絶縁系の状態密度は、ほとんどインコヒーレント成分から構成されており、コヒーレント成分は、わずかしかなかったことを示す[3]。

この系の(逆)光電子分光スペクトルが、上述のように broad な単一ピークの構造になるのは、強相関系に特有のエネルギーギャップの無い素励起、マグノンが、正孔(電子)と結合する為であると考えられる。図 1a に模式図を示す。今、電子がバンドの底に入ったとする。この電子は、クーロン相互作用の電子相関効果によって他の状態に散乱されるであろう。この際、スピンや運動量を保存するためマグノンを生成する。こうしたマグノンを含む散乱された電子が、インコヒーレント成分を形成する。マグノンにギャップがなければ、zero-magnon (コヒーレント) 成分と、multi-magnon (インコヒーレント) 成分が重畳する為、両成分を区別することができなくなる。一方、図 1b のようにマグ

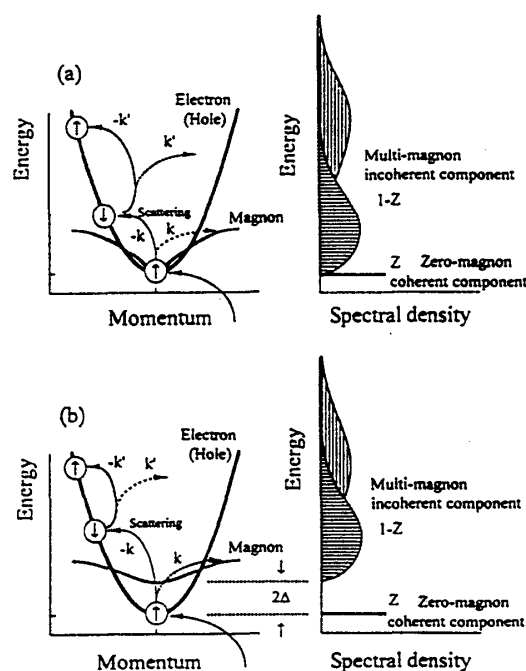


図1 コヒーレント成分とインコヒーレント成分の分離に関する模式図

ノンにギャップがあれば、コヒーレント成分とインコヒーレント成分は分離するはずである。さらに、このマグノンのギャップを小さくしたとき、コヒーレント成分がどう振る舞うかを調べることによって、マグノンにギャップがない時コヒーレント成分がどの程度残るかを見積もることもできるであろう。

そこで以下のように、1/2-filled のハバードモデルに site-diagonal な staggered potential Δ を加えたハミルトニアン

$$H = -t \sum_{\langle l,l' \rangle \sigma} (a_{l\sigma}^\dagger a_{l'\sigma} + a_{l'\sigma}^\dagger a_{l\sigma}) + U \sum_l n_{l\alpha} n_{l\beta} + \Delta \sum_l (-1)^l (n_{l\alpha} - n_{l\beta})$$

に対して状態密度の計算を行った。この Δ の効果によって、マグノンには 2Δ の人工的なギャップが生じる。以下に紹介するのは、2次元 1/2-filled の系 ($N=8 \times 8$) で、 $U/t=6, t=0.5$ の時の結果である。計算手法についての詳細は割愛するが、経路積分形式の量子モンテカルロ法を使ってグリーン関数を計算しており、電子相関の効果はすべて含まれている[4]。

図 2 に、いくつかの Δ に対する状態密度を示す。この図では、比較的シャープなピークのエネルギー位置がゼロに来るように、横軸をシフトしている。シフトしたエネルギーは E_{cp} で示してある。横軸の下にある矢印は対応する Hartree-Fock 解のエネルギーレベルを示している。 Δ が大きな時には (図 2a) シャープなピークが一つあるだけで、そのピーク位置は対応する Hartree-Fock のエネルギーレベルと良く一致している。したがって、これはコヒーレントピークであると考えられる。図 2b-d から、 Δ を小さくしていくとコヒーレントピークの強度は弱くなり、インコヒーレント成分が成長していく様子がわかる。こうした Δ 依存性を考えると $\Delta=0$ での状態密度 (図 2e) は、ほとんどインコヒーレント成分から構成されていると思われる。

この点をさらに明確にするために、定量的な解析を行った。ここでは、コヒーレント成分は δ -関数で記述し、インコヒーレント成分は結合エネルギーの高い側に幅を持った非対称 Lorentzian で記述できると仮定した。有限サイズ、有限温度の効果による broadening は

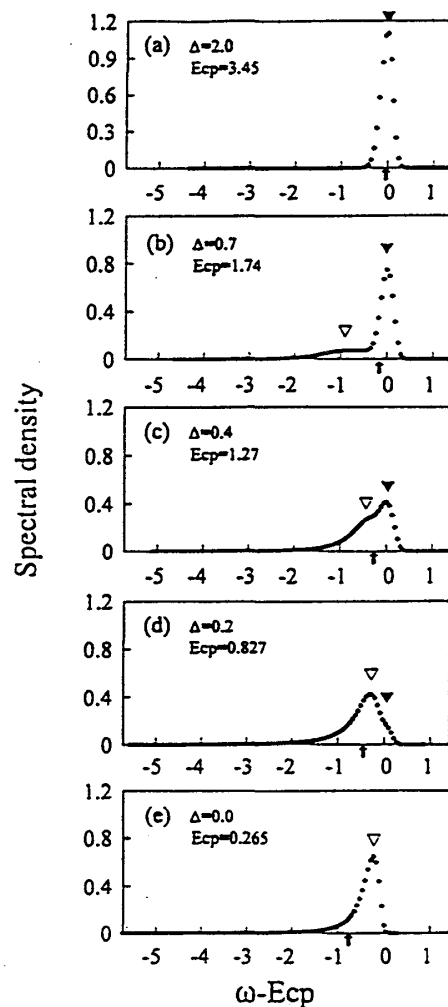


図2 いくつかの Δ に対する一電子グリーン関数のスペクトル表示

Gaussian で convolute することによって表現する。

図 3a に実際の状態密度（黒丸）と上述の方法で再現した状態密度（実線）を比較する。両者は良く合致していることが見て取れる。この解析によって状態密度をコヒーレント成分（波線）とインコヒーレント成分（点線）とに分けることができる。図 3b にコヒーレント成分の重み(Z)の Δ 依存性を示す。横軸は、おおよそ、全ギャップに対する staggered potential の占める割合である。この結果から $\Delta=0$ の極限(普通のハバードモデルに対応)で、コヒーレント成分は、高々2%弱の重みしか持たないことが分かる。つまり、インコヒーレント成分が状態密度に支配的な寄与をしているのである。(全く同様な結果が、一次元系に対しても得られている。)

以上の結果から、実験で観測される(逆)光電子スペクトルのピークは、このインコヒーレント成分から構成されており、一電子的状态を反映しているものではないと考えられる。またこのインコヒーレント成分はギャップの無い素励起マグノンが正孔(電子)と結合する事に起因している。

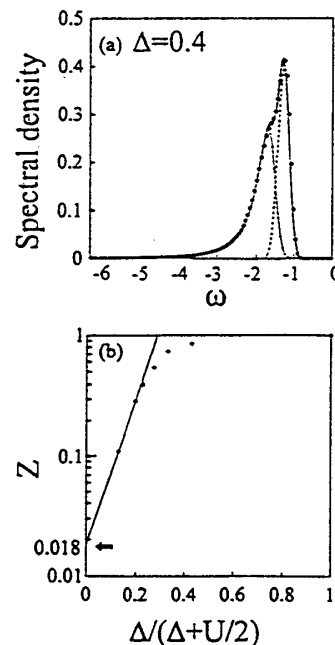


図3 コヒーレント、インコヒーレント成分の分離(a)とコヒーレント成分の重み(Z)の Δ 依存性(b)

参考文献

- [1] B.O.Wells, Z.X.Shen, A.Matsuura, D.M.King, M.A.Kastner, M.Greven, and R.J.Birgeneau, Phys.Rev.Lett. **74**(1995)964.
- [2] A.Ino, T.Mizokawa, K.Kobayashi, A.Fujimori, T.Sasagawa, T.Kimura, K.Kishio, K.Tamasaku, H.Eisaki, and S.Uchida, Phys.Rev.Lett. **81**(1998)2124.
- [3] N.Tomita and K.Nasu, submitted to Phys.Rev.B.
- [4] N.Tomita and K.Nasu, Phys.Rev. **B56**(1997)3779.