

多体電子論と第一原理電子構造理論の融合と強相関電子系への応用

研究代表者 石井 靖 研究員

Introduction

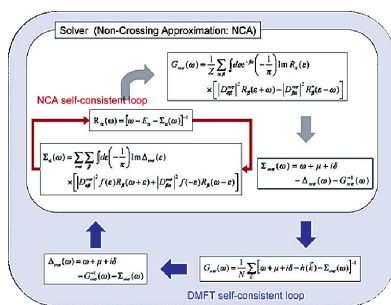
強相関電子系の物質は、高温超伝導、金属-絶縁体転移などの多彩な現象を示す。これらの現象の発現には、局在したd, f軌道内の強い電子間相互作用が重要な役割を果たす。従来の第一原理電子構造理論は、1電子近似に基づいており多体効果の扱いが不十分なため、強相関電子系の電子構造を正しく記述できない。

本研究では、動的平均場理論(Dynamical Mean Field Theory: DMFT)を用いて多体効果を取り込むことで、強相関電子系に対する第一原理電子構造理論の構築を目指し、その計算コードの開発とテストを行う。

Formulation

- 3d軌道のみを格子点上に配置した tight-binding 模型を考える。
- 動的平均場理論(DMFT)では、格子系での多体問題が有効媒質中の1不純物問題に置き換わる。本研究では、有効1不純物問題のソルバーとして Non-Crossing Approximation (NCA) を用いる。

- 1不純物問題内での局所的な電子間相互作用は、原子極限で配位子場理論に一致する様にとる。



Results

計算は、相互作用の無いときの t_{2g} 軌道の全バンド幅 = 2.0 に対して、クーロン相互作用、交換相互作用の平均 U, J を、それぞれ $U=3.0, J=0.3$ 、逆温度 $\beta=30$ 、結晶場分裂の大きさ $10Dq=0.6$ として行った。

● 状態密度 (1電子スペクトル)

1サイト当りの占有電子数 $n_d = 1.79$ における状態密度を Fig. 2. に示す。

DMFTで多体効果を取り込んだことにより、状態密度は異なる多電子状態に対応したいくつかのピークに分裂する。 $\omega = -4$ のピークは $d^1 \rightarrow d^2$ への遷移に、 $\omega = -2 \sim 0$ の幅広いピークは $d^2 \rightarrow d^1$ 遷移、 $\omega = 0.5, 1.0$ の鋭いピークは $d^1 \rightarrow d^2$ 遷移、 $\omega = 2 \sim 5$ の幅広いピークは $d^2 \rightarrow d^3$ 遷移に、それぞれ対応している。またピークに見られる微細構造は結晶場分裂した多重項間の遷移に対応付けることができる。

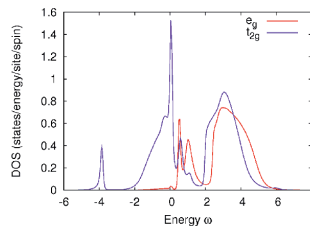


Fig. 2. 単純立方格子, $U=3.0, J=0.3, 10Dq=0.6, n_d=1.79$ における t_{2g} (青), e_g (赤) 軌道の状態密度 (1電子スペクトル: 光電子-逆光電子分光実験によって得られるスペクトルに対応している)。

● k-依存スペクトル

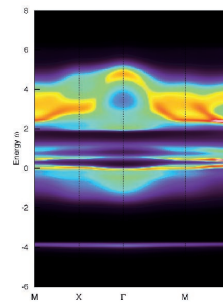


Fig. 3 に d 軌道の k 依存スペクトルの等高図を示す。フェルミレベル ($\omega = 0$) で k に強く依存したコヒーレントピークが現れる。 $\omega = 0.5, 1.5$ には k に依存しないピークが現れる。これらは、 d^1 状態から異なる d^2 状態への遷移に対応している。 $\omega = 2 \sim 5$ のバンドは、相互作用がない場合のバンドのピークが幅を持ち広がった構造をしている。

Fig. 3. $n_d = 1.79$ における d 軌道の波数 k 依存スペクトルの等高図。

● 状態密度の占有電子数 n_d 依存性

Fig. 4. は状態密度の1サイト当りの占有電子数 n_d 依存性を示す。1サイト当りの占有電子数が $n_d = 1.0, 2.0, 3.0$ と整数のところでフェルミレベル ($\omega = 0$) にギャップが開き絶縁体となる。占有電子数 n_d が非整数のところでは、フェルミレベルのコヒーレントピークが現れ金属となり、占有電子数の変化による金属-絶縁体転移の様子を捉えている。

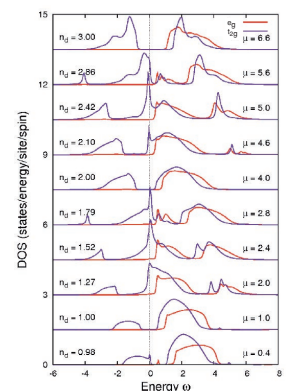


Fig. 4. 状態密度の1原子当りの占有電子数 n_d 依存性。 μ は化学ポテンシャル。

Conclusion

立方対称場中の3d軌道電子のスペクトルを、DMFT-NCA法により定量的に扱える計算コードを得た。