

モット転移の二段階性と光電子スペクトルの  
経路積分理論

山崎 才弘

総合研究大学院大学 物質構造科学専攻

# 目次

1	序論	1
2	モデル・ハミルトニアンと経路積分形式	3
3	数値計算とその結果	6
3.1	温度およびクーロン斥力の変化による金属-絶縁体転移 . . . . .	6
3.2	金属絶縁体中間相の電子状態 . . . . .	9
3.3	スピン相関関数 . . . . .	11
3.4	静的不純物モデル . . . . .	13
3.5	実験との比較 . . . . .	15
4	結論	16
	今後の展望	17
	謝辞	18
A	追補 : Hubbard-Stratonovitch Transformation	20
B	追補 : UDR 分解法	22
C	追補 : Numerical Results	25
D	追補 : 分散関係	29
E	追補 : 二次元での数値計算結果	32
F	追補 : Tomonaga-Luttinger Model	33

本論文の内容は次の投稿論文に拠っている。

- Path-integral theory for photoemission spectra of intermediately correlated systems,  
Masahiro YAMAZAKI, Norikazu TOMITA, and Keiichiro NASU,  
to be published in J. Phys. Chem. Solids.
- Quantum Monte Carlo study for intermediately correlated many-electron systems,  
Masahiro YAMAZAKI, Norikazu TOMITA, and Keiichiro NASU,  
submitted to Phys. Rev. B (2001. DEC.).

# 1 序論

固体内の伝導電子が相互に強いクーロン斥力で反発する為に起きるモット型の金属-絶縁体転移は高温超伝導現象の機構解明等にも関連し、現在の固体物理学における最重要課題の一つであり、様々な観点からの研究が実験的・理論的に試みられている。

まず、これに関する分光学による実験的な研究について述べる。固体中の伝導電子の一電子状態を分光学的方法で直接観測する最も標準的な実験は、光電子分光である。最近、この光電子分光法によって得られる光電子スペクトルの分解能は数 meV にまで達しており、角度分解光電子スペクトルは伝導電子の分散関係を調べるのに十分なエネルギー分解能が得られるようになった。そして、この精密な実験により、これまでも増して固体中の電子状態の詳細が明らかになりつつある。この高分解能光電子分光法に関して、ペロブスカイト構造を持つ  $\text{CaVO}_3$  や  $\text{SrVO}_3$  等の物質におけるフェルミ準位近傍の電子状態が最近、特に多くの興味をあつめている。何故なら、ごく最近、これらの物質での光電子分光実験により、伝導電子帯全体は金属-絶縁体転移の兆候を示しながらも、僅かフェルミ準位近傍だけは金属的なまま残るという全く新しい中間相の存在が発見されたからである。これらの実験は大阪大学のグループ [1, 2] と東京大学のグループ [3] によって、それぞれが完全に独立に行なわれたにも拘らず、その(逆)光電子スペクトルは、すでに良く知られた上下二つのハバード・バンドのピークに加えて、フェルミ準位近傍に新たなピーク構造を持つという一致した結果が得られている。そして、このピークはフェルミ準位直上ではスペクトル強度が減少し、全体は低温で上下に分裂する。このようなスペクトル構造は、これまでにない発見であり非常に興味深い。

次に、この種の問題に関する理論的な研究に視点を移そう。光電子スペクトルは一電子グリーン関数のレーマン・スペクトルに直接対応している事は良く知られている事である。このレーマン・スペクトルに関する過去の研究を通覧してみると、相互に異なる二種類の理論に大別する事ができる。

一方は、仮想的無限次元格子で、動的平均場理論を用いて厳密解を得る方法 [4, 5] であり、他方は、1 ~ 3 次元の有限次元格子を対象にして、経路積分(量子モンテ・カルロ)法を用い数値解を得る方法 [6] や、その他の各種の近似法を用いた研究である。とりわけ、一次元格子に関しては、厳密解 [7] を含む数多くの研究が既に存在している。

まず、無限次元格子の場合をみると、動的平均場理論で得られるそのレーマン・スペクトルは金属-絶縁体転移が進行する過程において、フェルミ準位近傍にピーク構造を持つような、幾つかの過渡的で中間的な相が発生する事を予言する。そして、このフェルミ準位近傍のピークは絶縁体転移が完了するまで残存する。

一方で、有限(1 ~ 3)次元格子の場合、実際の数値計算が困難である事が災いし、これまでは、クーロン斥力が電子の遍歴性に比較して十分強い場合(いわゆる

強相関係)のみが計算されてきた。そして、その結果によれば、金属-絶縁体転移は、金属から絶縁体へ一段階で直接起こり、途中には何等の中間相も現れないという結論が得られていた。

従って、無限次元格子での中間相の存在は、正に無限次元という仮想性の結果にすぎないと見なされてきた。

しかしながら、これまでの有限(1～3)次元格子での、これらの経路積分(量子モンテ・カルロ)法で行なわれてきた計算は、その全てが、強斥力領域のみに限られている。この強斥力領域では、フェルミ準位近傍に前述のような新たなピーク構造が現れない事は既に十分に理論的には確定している。しかし、中間斥力および弱斥力領域でもフェルミ準位近傍に新たなピーク構造が本当に現れないのか否かは、未だ、理論的には明らかにされていない。

この様な理由から、本研究では、上述のフェルミ準位近傍に現れると思われる新しいピークの存否、及び存在するならば、その形状・起源、等々に関して、一電子状態密度と波数分解レーマン・スペクトルを計算する事により電子状態の詳細を明らかにする。この目的の為に、本研究では主にクーロン斥力が中間的な強さの場合および弱い場合に焦点をあてる。

本研究の概略は以下の通りである。まず、経路積分(量子モンテ・カルロ)法によって計算される一電子グリーン関数を解析接続する事でレーマン・スペクトルを得る。この際、現在汎用されている数値計算法の不完全性から生じる誤差と、理論上不可避免的に発生する統計的誤差とを分離し、前者を極力排除する方法を新たに導く。そして、計算用コードに種々の工夫を施し、様々なパラメーターでも正しくグリーン関数が得られるようにする。これにより、広域に渡りクーロン斥力を変化させた計算が可能となり、今まで以上に、低温領域での解析が可能になる。そして、この方法による精密な計算を一次元ハバード・モデルで、クーロン斥力および温度を変化させながら実行する。そして無限次元のみならず、一次元においてもフェルミ準位に新たなピーク構造が現れる事を明らかにする。更に、一次元で現れたそのフェルミ準位のピークは、温度を下げた場合およびクーロン斥力を強くした場合、フェルミ準位を境にして上下に分裂し、金属-絶縁体転移が進行する事を明らかにする。すなわち、金属-絶縁体転移は、前述の実験にあるような金属絶縁体中間相を経由して起きる事を世界に先駆けて理論的に立証する。この結果は、単純化した静的不純物モデルによって、非常に粗くではあるが、説明できるものであり、また、次元に依存しない特徴的な振る舞いである事も立証される。更に、以上の結果は  $\text{CaVO}_3$  や  $\text{SrVO}_3$  等の実験結果とも定性的に一致する。

本論文の構成は以下の通りである。第2節においてモデルの設定と計算方法を記述し、第3節で数値計算の結果を議論する。最後に、第4節で本研究の結論を述べる。

## 2 モデル・ハミルトニアンと経路積分形式

本研究のモデルとして、次式で与えられるハバード・ハミルトニアン ( $\equiv \mathcal{H}$ ) を考える。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I, \quad (1)$$

$$\mathcal{H}_0 \equiv -t \sum_{\langle m, m' \rangle, \sigma} (a_{m\sigma}^\dagger a_{m'\sigma} + a_{m'\sigma}^\dagger a_{m\sigma}), \quad (2)$$

$$\mathcal{H}_I \equiv U \sum_m n_{m\uparrow} n_{m\downarrow}, \quad n_{m\sigma} \equiv a_{m\sigma}^\dagger a_{m\sigma}, \quad \sigma \equiv \uparrow, \downarrow. \quad (3)$$

ここで、 $t$  は格子点 (サイト)  $m$  とその最近接サイト  $m'$  の間の輸送エネルギーで、電子の遍歴性の強さを表している。和記号  $\sum_{\langle m, m' \rangle}$  は、この最近接サイト間についての和を取るものとする。 $a_{m\sigma}^\dagger$  はサイト  $m$  にスピン  $\sigma$  を持つ電子の生成演算子である。 $U$  はオン・サイト・クーロン斥力の強さを表す。本論文では以後、エネルギーはすべて  $t (= 1.0 \text{ [eV]})$  で規格化する。本研究では、電子数がサイト数と等しい場合 (half-filled case) のみを考え、また周期的境界条件を仮定する。式 (1) に対する経路積分形式については、長距離クーロン斥力まで含めた形で既に文献 [8] で詳細な定式化が与えられているので、ここでは、その概要を繰り返すだけにする。まず、経路積分形式へ進むためにボルツマン演算子を

$$e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad \beta \equiv \frac{1}{k_B T}$$

のように導入する。ここで、 $k_B$  はボルツマン定数であり、 $T$  は温度である。 Trotter 公式を用いると、ボルツマン演算子は微小量 ( $\equiv \Delta$ ) を導入して、次式のように書く事ができる。

$$e^{-\beta \mathcal{H}} = \lim_{W \rightarrow \infty} (e^{-\Delta \mathcal{H}} \dots e^{-\Delta \mathcal{H}}), \quad \Delta \equiv \frac{\beta}{W}. \quad (4)$$

これに Hubbard-Stratonovitch 変換を施せば、ボルツマン演算子に対する経路積分形式が次式のように与えられる<sup>1</sup>。

$$e^{-\beta \mathcal{H}} \rightarrow \int \mathcal{D}x \left. \begin{array}{l} T_+ \exp \left[ - \int_0^\beta d\tau h(\tau, x(m, \tau)) \right] \\ h(\tau, x(m, \tau)) \equiv \mathcal{H}_0(\tau) + \sqrt{\frac{U}{\Delta}} \sum_m x(m, \tau) (n_{m\uparrow}(\tau) - n_{m\downarrow}(\tau)) \end{array} \right\}. \quad (5)$$

ここで、式 (5) に現れた  $T_+$  は時間順序演算子であり、演算子  $\mathcal{H}_0(\tau)$  および  $n_{m\sigma}(\tau)$  を時刻  $\tau$  の順序に並べかえる事を意味する。演算子  $\mathcal{H}_0(\tau)$  および  $n_{m\sigma}(\tau)$  は、この意味でのみ、時刻  $\tau$  を引数としており、後述のハイゼンベルク表示における時

<sup>1</sup>付録 A を参照のこと。

刻依存性を意味するものではない。積分記号  $\int \mathcal{D}x$  は 1 および  $-1$  を任意に取り得るイジング・スピン変数  $x(m, \tau)$  についての経路積分を実行する事を意味する。こうして、モデル・ハミルトニアンに含まれる式 (3) にあった二体の演算子は、式 (5) に表されるような時刻  $\tau$  およびサイト  $m$  の関数として振る舞うゼーマン場下での一電子の演算子へと変換された事になる。

次に、文献 [8] に従って、時間発展演算子 ( $\equiv R(\tau, x)$ ) を次のように定義する。

$$R(\tau, x) \equiv T_+ \exp \left[ - \int_0^\tau d\tau' h(\tau', x(m, \tau')) \right]. \quad (6)$$

ここで、 $x$  は経路  $x(m, \tau)$  を象徴的に表したものである。これを使うと、任意に与えられた経路  $x$  に対して、一電子温度グリーン関数 ( $\equiv \mathcal{G}(m, \tau, m', \tau', \sigma, x)$ ) は次式のように定義される。

$$\mathcal{G}(m, \tau, m', \tau', \sigma, x) = -\text{sign}(\tau - \tau') \langle T_+ \tilde{a}_{m\sigma}(\tau) \tilde{a}_{m'\sigma}^\dagger(\tau') \rangle_x, \quad (7)$$

$$\langle \dots \rangle_x \equiv \frac{\text{Tr}[\dots R(\beta, x)]}{\text{Tr}[R(\beta, x)]}. \quad (8)$$

ここで、演算子  $\tilde{a}_{m\sigma}(\tau)$  は  $a_{m\sigma}$  のハイゼンベルク表示であり、次式で定義される。

$$\tilde{a}_{m\sigma}(\tau) \equiv R^{-1}(\tau, x) a_{m\sigma} R(\tau, x). \quad (9)$$

一方、通常温度グリーン関数 ( $\equiv \bar{\mathcal{G}}(m, \tau, \sigma)$ ) は、経路積分を実行した後に得られ、次のようになる。

$$\bar{\mathcal{G}}(m - m', \tau - \tau', \sigma) = \frac{\sum_{\{x\}} \text{Tr}[R(\beta, x)] \mathcal{G}(m, \tau, m', \tau', \sigma, x)}{\sum_{\{x\}} \text{Tr}[R(\beta, x)]}. \quad (10)$$

この経路  $x$  に関する積分 (和)  $\sum_{\{x\}}$  は、汎用のメトロポリス型量子モンテ・カルロ法により計算される。

波数 ( $\equiv k$ ) を指定した一電子グリーン関数 ( $\equiv \bar{\mathcal{G}}(k, \tau, \sigma)$ ) と、エネルギー ( $\equiv \omega$ ) 表示のレーマン・スペクトル ( $\equiv A(k, \omega, \sigma)$ ) とは解析接続により、次の関係式で結ばれている。

$$\bar{\mathcal{G}}(k, \tau, \sigma) = \sum_m e^{ik \cdot m} \bar{\mathcal{G}}(m, \tau, \sigma), \quad (11)$$

$$\bar{\mathcal{G}}(k, \tau, \sigma) = - \int d\omega \frac{e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\beta\omega}} A(k, \omega, \sigma). \quad (12)$$

追補 B, C で詳細に述べるように、本研究では、数値誤差によって汚されたグリーン関数から滑らかなスペクトルを計算する際に、通常よく用いられる maximum entropy method [9] は使用しない。最小自乗法だけで、このレーマン・スペクト

ル  $A(k, \omega)$  を計算する。その為に、一電子グリーン関数に含まれる数値計算上の誤差を極力排除しながら、数値計算を実践する。この為に、四倍精度 (16 byte 精度) で計算出来るよう計算コードを組む。更に、行列の乗算および和算で生じる丸め誤差を減らす為に、UDR 分解法 [10] を使用した。この結果、深刻なノイズが入り込む事なく、滑らかなスペクトルを得る事が可能になった。これは、本研究の大きな成果である。最後に、これまでに良く知られている強相関係における量子モンテ・カルロ計算の結果 [11] を、この計算方法は完全に再現する事ができる事を強調しておきたい。この計算方法の妥当性を証明する結果の例は次節で示すことにする。

データ型	有効数字 (桁)	指数部
単精度実数型	8	1E±[35-40]
倍長精度実数型	16	1E±[300-310]
四倍長精度実数型	35	1E±[4900-5000]

表 1: 実数型における仮数部と指数部の有効数字。ただし、これらの値はあくまでも目安であり、使用する Architecture に依存する。



### 3 数値計算とその結果

#### 3.1 温度およびクーロン斥力の変化による金属-絶縁体転移

最初に、比較的小さな系(20 サイト)において、温度  $T$  およびクーロン斥力  $U$  を変化させた場合の状態密度(レーマン・スペクトル)から金属-絶縁体転移が進行する過程を通覧してみよう。

図 1 は、 $U$  を  $U/t = 2.0$  に固定し、温度  $T$  を  $t/(k_B T) = 1$  から 10, 15, 25, 30 まで変化させた場合のレーマン・スペクトルである。図 1(a) では、およそ 10000[K] という高温である為に、コサイン・バンド ( $-2t\cos(k)$ ) が熱揺らぎによって、完全にぼけてしまい、一般的な通常の金属状態になっている事がわかる。一方、温度を  $t/(k_B T) = 10$  まで下げた図 1(b) では、ちょうどフェルミ準位に特徴的な新しいピーク構造が現れていることがわかる。更に、低温まで温度を下げたものが、図 1(c)-(e) である。これによれば、金属-絶縁体転移が起こる中間的な温度である図 1(b) に現れたフェルミ準位のピークは、更に温度を下げることにより、フェルミ準位を境にして、上下に僅かに分裂する様子をはっきりとわかる。そして、フェルミ準位上に擬ギャップが成長し、十分低温においては、レーマン・スペクトルの形状から解るように、系は絶縁体へと転移する。

次に、温度を固定し、クーロン斥力を変化させた場合を観てみよう。図 2 は  $T$  を  $t/(k_B T) = 18$  に固定し、 $U$  を  $U/t = 1.0$  から 2.5, 4.0 まで変化させた時のレーマン・スペクトルである。まず、系が完全に絶縁体転移を起こす以前の弱斥力および中間斥力である場合の図 2(a),(b) をみると、クーロン斥力を固定して温度を変化させた上述の場合と同様に、上下のハバード・バンド・ピークとは異なる特徴的なピークがフェルミ準位およびフェルミ準位近傍に現れている事がわかる。すなわち、図 2(a) は図 1(b) と同じ 3 重ピーク構造であり、図 2(b) は図 1(c)-(e) 等と同じ 4 重ピーク構造になっている。一方、更に  $U$  を大きくした場合、図 2(c) に示したように、もはやフェルミ準位近傍にピーク構造は存在しない。そして、この結果は、正に強相関系(強斥力)での過去の報告 [11] にあるようなレーマン・スペクトルである事がわかる。

レーマン・スペクトルの  $T$  および  $U$  依存性を調べたこの結果から、明らかにになった事は、次の通りである。すなわち、金属-絶縁体転移が進行する過程において、レーマン・スペクトルの形状は、フェルミ準位の強度を弱めながら一段階で絶縁体転移を起こすのでは決してなく、むしろ、フェルミ準位から僅か上下にずれたところで、その強度が減少しはじめる。この結果、フェルミ準位に上下ハバード・バンド・ピークとは異なる新しいピーク構造が形成されるのである。その後、更に転移が進行していくと、やがてフェルミ準位に見えていたピークが、本当の金属-絶縁体転移によって、フェルミ準位に関して対称な上下二本のピークへと分裂を開始する。そして最終的に、ここで現れた擬ギャップはフェルミ準位を切る事となり、系は絶縁体へと転移する。十分に  $U$  が大きい場合、フェルミ準位近傍の

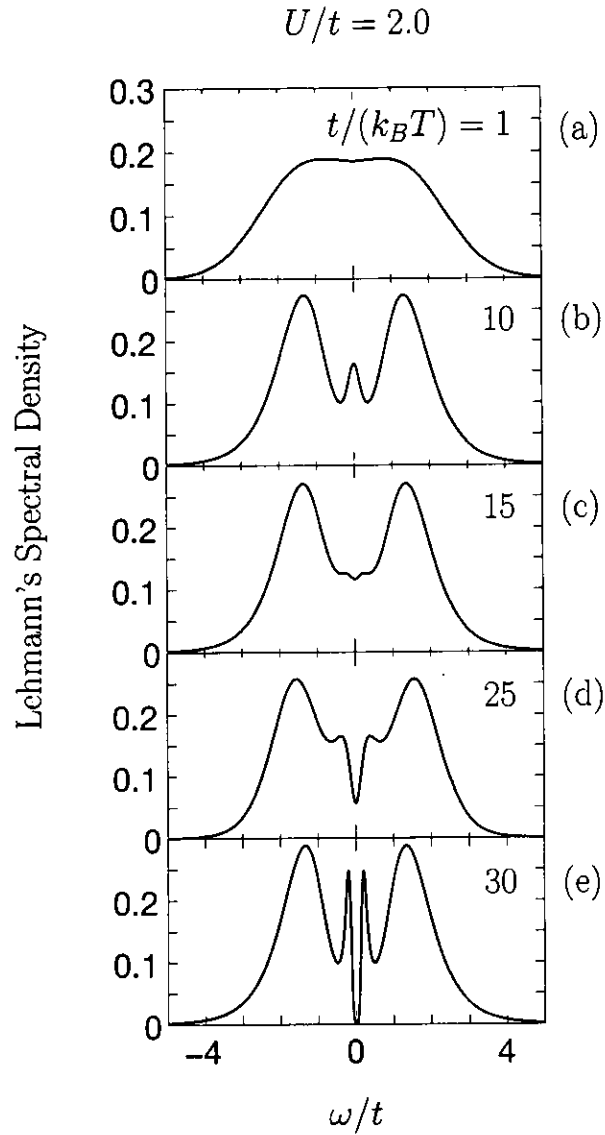


図 1: クーロン斥力を  $U/t = 2.0$  に固定し、およそ 10000[K] の高温側 (a) から、およそ 300[K] の低温側 (e) まで、温度  $T$  を変化させた場合のレーマン・スペクトル。それぞれ、(a):  $t/(k_B T) = 1$ , (b):  $t/(k_B T) = 10$ , (c):  $t/(k_B T) = 15$ , (d):  $t/(k_B T) = 25$ , (e):  $t/(k_B T) = 30$  の場合。

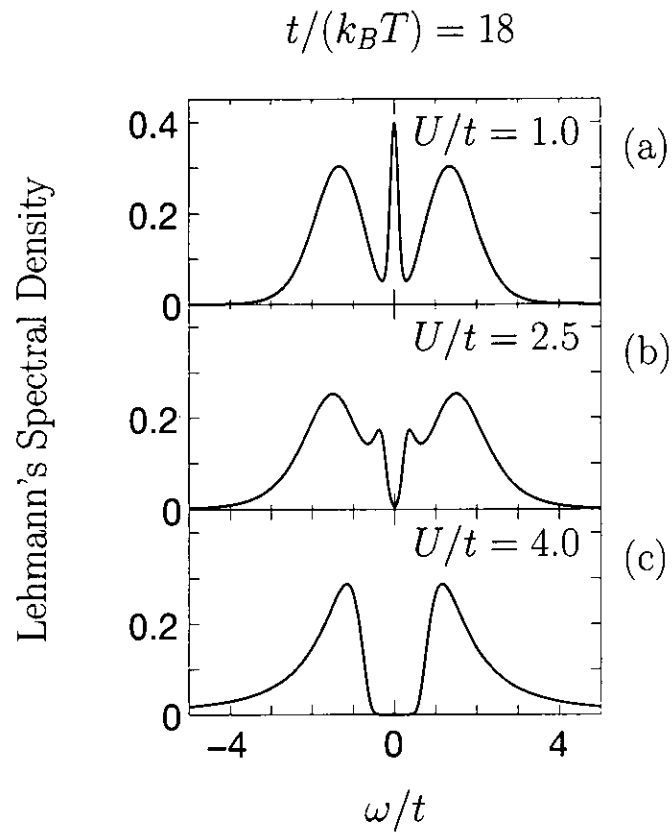


図 2: 温度を  $t/(k_B T) = 18$  に固定し、 $U$  を変化させた場合のレーマン・スペクトル。それぞれ、(a):  $U/t = 1.0$ , (b):  $U/t = 2.5$ , (c):  $U/t = 4.0$  の場合。

ピークは消失、あるいは上下ハバード・バンド・ピークに吸収され、良く知られているような上下ハバード・バンド・ピークのみを持つ強相関係での絶縁体となる。

ここで注意しておくが、図 2(c) に示したように、本研究での計算は、これまでの文献 [11] にあるような強相関係での計算結果を完全に再現出来る。これは、本理論が大変正確なものであることを立証している。

### 3.2 金属絶縁体中間相の電子状態

第 3.1 節で明らかになったように、金属-絶縁体転移が進行する過程において、金属絶縁体中間相と呼べる、幾つかの過渡的で中間的な相が現れる事がわかった。ここでは、上下ハバード・バンド・ピークの他に、フェルミ準位近傍にピーク構造を持つ金属絶縁体中間相について、系のサイズを 20 サイトから 48 サイトへ大きくして、更に詳しく観てみる事にしよう。

図 3 に、 $U/t = 2.0$ ,  $t/(k_B T) = 20$  でのレーマン・スペクトルを示した。このパラメータ設定は、図 1(c)-(d) あるいは、図 2(a)-(b) の中間的な値になっており、得られた結果である図 3 は、ちょうど、その中間的な形状になっている事がわかる。すなわち、フェルミ準位のスペクトル強度が減少し、そのかわり、フェルミ準位から僅かにずれたところに、上下ハバード・バンド・ピークとは明らかに異なるピーク構造が現れている。この新たに見つかった  $\omega/t = -0.4$  近傍のピークは、図 3 において矢印  $\Downarrow$  で示されており、一方  $\omega/t = -1.5$  にある下部ハバード・バンド・ピークは  $\Uparrow$  で示してある。系のサイズを大きくして得られたこの結果から、金属絶縁体中間相の存在は、扱う系のサイズが小さい為に生じるサイズ効果やゴーストでは決してなく、中間的相互作用あるいは中間的温度で発現する、この系に固有の特徴的な性質であると言える。

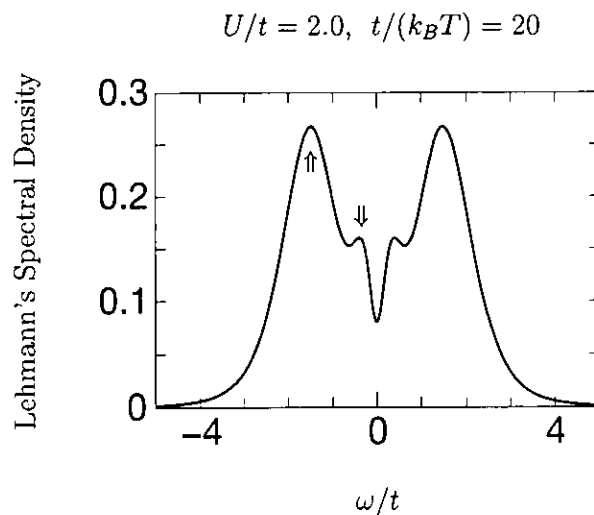


図 3:  $U/t = 2.0$ ,  $t/(k_B T) = 20$  でのレーマン・スペクトル。

次に、図 3 に現れた二種類のピークについて、その電子状態を波数指定レーマン・スペクトルによって詳しく調べてみよう。図 4 に、図 3 で示した矢印  $\Downarrow$ ,  $\Uparrow$  に対応する波数(運動量)を指定したレーマン・スペクトルを示した。下向き矢印( $\Downarrow$ )で示したフェルミ準位近傍のピークに対応する  $k = 11\pi/24$  でのスペクトルが図 4(a) であり、上向き矢印( $\Uparrow$ )で示した下部ハバード・バンド・ピークに対応する  $k = 0$  でのスペクトルが図 4(b) である。これをみると、(a):  $k = 11\pi/24$  でのスペクトル形状は、有限な幅を持っているものの、非常に鋭く、 $\omega/t = -0.4$  近傍に大きな強度を持ち、明瞭なピーク構造が現れている。一方で、(b):  $k = 0$  でのスペクトルは、(a)と比較してピークの強度が弱く、非常に幅の広い高エネルギー側へ長い尾をひいた構造になっている。

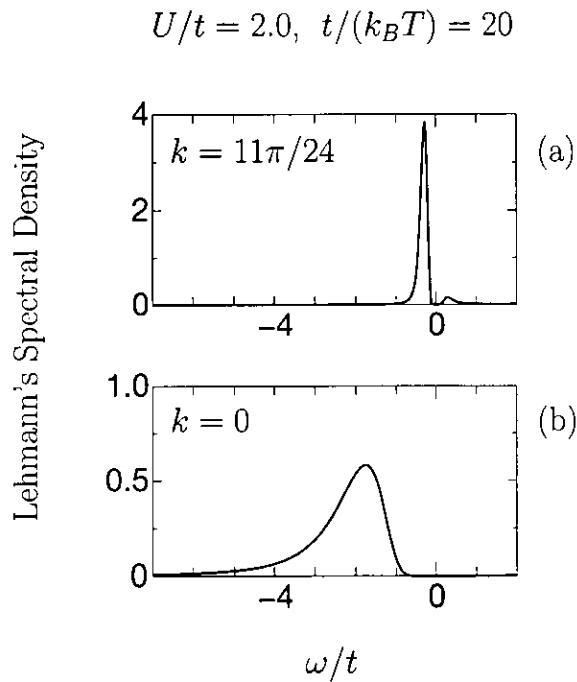


図 4:  $U/t = 2.0, t/(k_B T) = 20$  での波数指定レーマン・スペクトル。それぞれ、(a):  $k = \frac{11}{24}\pi$ , (b):  $k = 0$  の場合であり、図 3 の  $\Downarrow, \Uparrow$  に対応する。

周知の如く、光電子スペクトルの形状は、電子間相互作用が働かない場合には幅のないデルタ関数となり、一方、強相関係では電子の多体効果によるインコヒーレント成分が支配的となり、幅の広いピークになる。本論文においても、この習慣に従い、一電子的(自由電子的)な成分を持ったピークをコヒーレント・ピークと呼び、一電子的な描像では説明出来ない電子多体効果の成分が支配的になったピークをインコヒーレント・ピークと呼ぶ事にしよう。

この観点から、図 4 に話を戻すと、(a):  $k = 11\pi/24$  でのスペクトルは比較的コヒーレント成分が強く残っているものの、(b):  $k = 0$  では、完全にインコヒー

レント成分が支配的になっている事がわかる。この事から、図 3 に現れたフェルミ準位近傍のピークは、比較的 一電子状態を良く反映しており、系のバンド構造 ( $-2t\cos(k)$ ) を表していると考えられる。これに対して、上下ハバード・バンド・ピークは完全にインコヒーレント成分によって支配されている。これは、もはや、上下ハバード・バンド・ピークが一電子状態としての意味を失い、系のバンド構造を忠実に反映したものではない事を意味している。従って、波数に依存せず全ての  $k$  において同じようにスペクトルの幅が変化するというような、単純な縮小バンド描像は、この系の描像としては正しくないことがわかる。すなわち、金属絶縁体中間相では、系が絶縁体へと転移する以前から、その電子状態は波数  $k$  の全領域で大きく再構成されているのである。

### 3.3 スピン相関関数

ここでは、金属絶縁体中間相に現れるフェルミ準位近傍のピーク構造の起源について考察する。

まず、電子が相互に強いクーロン斥力で反発する為に起きるモット型の金属-絶縁体転移において、系を特徴付ける物理量としては反強磁性的なスピン(クーロン)相関が挙げられる。この観点からすると、本研究で扱うモデル・ハミルトニアンはサイト数と電子数が同じ場合 (half-filled case) なので、完全に絶縁体転移を起こすような強斥力領域では、明瞭な反強磁性的サイト間スピン相関が現れると考えられる。

一方で、無限次元格子系のスペクトルでは、金属-絶縁体転移の進行する過程で、フェルミ準位近傍にピーク構造が現れる(残る)事が知られているが、この無限次元格子系では、周知の如く、上述のような反強磁性的なサイト間スピン相関は全く存在しない。

この事から、本研究で得られたフェルミ準位近傍にピーク構造を持つような金属絶縁体中間相の起源は、サイト間スピン相関が存在しない(あるいは十分弱い)事が原因であろうと推論される。

そこで、次式で定義されるスピン相関関数 ( $\equiv f(m-m')$ ) を観てみる事にしよう。

$$f(m-m') \equiv \langle\langle \mathbf{s}_m \cdot \mathbf{s}_{m'} \rangle\rangle, \quad \langle\langle \cdots \rangle\rangle \equiv \frac{\text{Tr}[\cdots e^{-\beta\mathcal{H}}]}{\text{Tr}[e^{-\beta\mathcal{H}}]}, \quad (13)$$

$$\mathbf{s}_m \equiv \sum_{\sigma, \sigma'} a_{m\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} a_{m\sigma'}, \quad \boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z). \quad (14)$$

ここで、 $\boldsymbol{\sigma}$  はパウリのスピン行列である。

図 5 は、 $T$  を  $t/(k_B T) = 10$  に固定し、 $U$  を  $U/t = 4.0$  から  $2.0, 1.0$  まで変化させた場合のスピン相関関数の空間的分布を示したものである。ここで、系のサイズは 3.2 節と同じく 48 サイトである。図 5 中の挿入図は、オン・サイトのスピ

ン相関値  $f(0)$  で規格化した相対値  $(f(m - m')/f(0))$  を示したものである。これにより、 $U$  の減少と共に、反強磁性的なスピン相関の空間的な広がりが短くなっている事がわかる。すなわち、 $U/t = 2.0$  や  $1.0$  といった中間斥力あるいは弱斥力領域では、サイト間の反強磁性的スピン相関は明らかに小さくなっている。この状況は、無限次元格子系のそれと定性的にはあるが、類似していると言えよう。この事は既に周知のことではあるが、以下の議論では重要な意味を持っているので、ここで強調しておきたい。

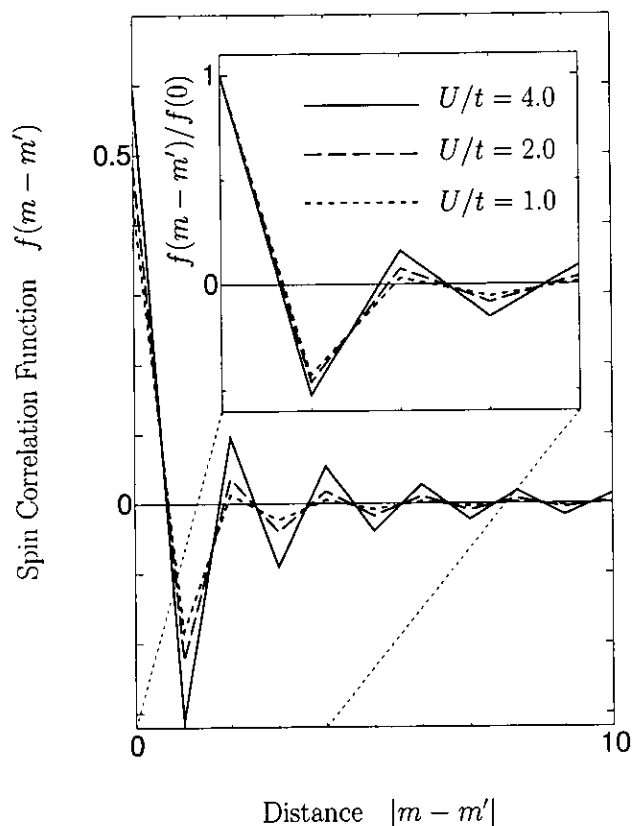


図 5: 温度  $T$  を  $t/(k_B T) = 10$  に固定し、クーロン斥力  $U$  を  $U/t = 4.0$  から  $2.0, 1.0$  まで変化させた場合のスピン相関関数。挿図は  $f(m - m')/f(0)$  を拡大したもの。サイト数は図 3 と同じ。

### 3.4 静的不純物モデル

第 3.3 節の結果から、式 (5) で導入された外場  $x$  から受ける個々の電子に対する有効磁場の影響は、中間斥力 (弱斥力) 領域では弱いサイト間相関しか持たないことがわかった。この理由から、或るサイト (例えば、原点サイト) のみに注目し、非常に粗い近似ではあるが、外場 (ゼーマン場)  $x$  は唯一つの静的な値 (1 または  $-1$  に固定された値) を取ると仮定してみる。更に、この原点サイト以外での外場  $x$  は全くランダムであるので、平均すれば、その効果がゼロであると仮定できる。そうすると、この系は静的不純物モデルと同等になる。

本節では、この粗い近似によって与えられる静的不純物モデル [12] を用いて、第 3.1 節で得られた 3 重ピーク構造 (図 1(b)) の起源を定性的に説明する。

静的不純物モデルとして、次式で表されるハミルトニアン ( $\equiv H$ ) を考えよう。

$$H = H_0 + H_1, \quad (15)$$

$$H_0 \equiv \sum_{k,\sigma} E_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}, \quad a_{k\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{-ik \cdot m} a_{m\sigma}, \quad (16)$$

$$H_1 \equiv U_e \sum_{\sigma} a_{0\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma}^z a_{0\sigma}. \quad (17)$$

ここで、 $E_k$  は波数  $k$  を持った電子のエネルギーであり、 $N$  は系のサイト数である。 $U_e$  は原点サイト ( $m=0$ ) でのみ働く有効磁場の強さを表すものとし、前述の理由から、 $U_e$  の大きさは  $U$  と同程度であるとする。このハミルトニアン  $H$  に対する原点サイトでの格子グリーン関数 ( $\equiv G$ ) は次式のように表される。

$$G = \frac{1}{G_0^{-1} \pm U_e}. \quad (18)$$

ここで、 $G_0$  は  $H_0$  に対する原点サイトでの格子グリーン関数であり、次式で与えられる。

$$G_0 = \int dE' \frac{\rho(E')}{E + i\epsilon - E'}, \quad (19)$$

$$\rho(E) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(E - E_k). \quad (20)$$

図 6 は、式 (18) に対する典型的な数値解の一つである。ここで、 $\rho(E)$  として、楕円 (上半円) 型の状態密度を仮定し、図 6(a) の実線で  $\rho(E)$  および  $\text{Re}G_0$  を示した。二本の破線は、 $+1/U_e$  (長破線) と  $-1/U_e$  (短破線) を表している。図 6(b) には、それぞれ、 $+1/U_e$  と  $-1/U_e$  に対して得られる状態密度 ( $-\frac{1}{\pi} \text{Im}G$ ) を対応する破線によって示してある。図 6 において、(a) から (b) へ向かって引かれた矢印は、 $G$  の極の位置を表しており、図 6(b) に現れるピークの位置と対応している事がわかる。図 6(b) において、 $-1.0 \sim 1.0$  [eV] に現れた共鳴ピークは、図 6(a) で仮定した結晶全体に広がる平面波的な一電子状態 (楕円) を引きずっている事は明らか



である。一方で、高エネルギー側に現れる二本の独立したピークは、 $U(U_e)$  自身によって原点サイトに局在化した状態に対応している。この結果(破線)は、絶対零度での解であるが、実際には種々の熱揺らぎや量子揺らぎ等があり、これらの種々の効果によって、そのスペクトル形状はブロードなものになるであろう。この様子を形式的に表したものが、図 6(b) の太実線である。

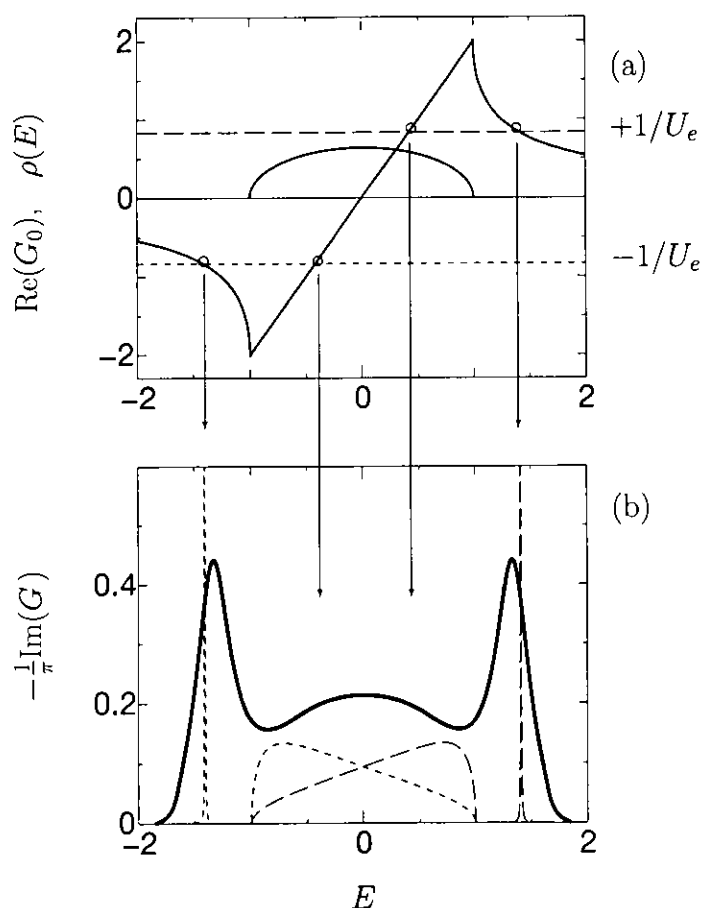


図 6: 3-ピーク構造を太実線により、図式的に示した。(a)において、実線は格子グリーン関数  $G_0$  の実部と虚部(状態密度)を表し、破線は、それぞれ  $+1/U_e$ (長破線) および  $-1/U_e$ (短破線) を表す。(b)の破線はそれぞれ、(a)の破線に対応する  $-\frac{1}{\pi} \text{Im}G$  を表す。図中(a)から(b)へ向かう矢印は  $G$  の極の位置を表す。

このようにして、静的不純物モデルによって、定性的で粗くではあるが、レーマン・スペクトル(状態密度)の3重ピーク構造を再現できた。すなわち、高エネルギー側に現れる上下二本のインコヒーレント・ピークと、フェルミ準位近傍に現れる一電子的な状態を保ったコヒーレント・ピークによって、中間斥力あるいは弱斥力領域での金属絶縁体中間相が構成される事が定性的に明らかになったのである。

しかしながら、この不純物モデルによる粗い近似では、並進対称性がないモデルになっているので、各ピークの幅や強度、ギャップがフェルミ準位を切るような4重ピーク構造になる事等を統一的に説明する事は出来ない。特に、この3重ピーク構造から4重ピーク構造への変化は、まさに固体電子の集団的な性質として本当の金属-絶縁体転移が進行している事を示すものであり、そのような、電子多体効果が重要になってくる系では、不純物モデルのような粗い近似ではなく、本研究で行なったような量子モンテ・カルロ計算による精密な解析が必要なのである。

ここで、図6のモデル(静的不純物モデル)が次元に全く依存していなかった事を強調しておこう。すなわち、この金属絶縁体中間相は、中間斥力あるいは弱斥力領域で現れる次元に依存しない特徴的な振る舞いであると言える。この観点から、我々は二次元系および三次元系における予備的な計算を既に行なった。その結果、追補Eに示したごとく、これらの系においても上述のような金属絶縁体中間相が現れる事が確かめられた。

### 3.5 実験との比較

最後に、本研究の結果と、前述の光電子分光実験とを比較してみよう。ごく最近の高分解能光電子分光 [1, 2, 3] によって、 $\text{CaVO}_3$  や  $\text{SrVO}_3$  等のペロブスカイト型物質において、伝導電子帯全体としては金属-絶縁体転移の兆候を示しながらも、僅かフェルミ準位近傍だけは金属的なまま残るといった中間相の存在が発見されている。そして、その光電子スペクトルは、上下ハバード・バンド・ピークに加えて、フェルミ準位近傍にもピークを持っており、本研究の中間斥力で得られた結果(図3)と定性的に良く一致している。

この実験は、一部がごく簡単に報告 [13] されているのみで、詳細は未確定であるが、Vの3d準位には電子が一個のみ存在する $d^1$ 系であることは既に知られている。

## 4 結論

固体内の伝導電子が相互に強いクーロン斥力で反発する為に起きるモット型の金属-絶縁体転移に関連して、クーロン斥力(および温度)を変化させた場合に、レーマン・スペクトル(一電子状態密度)が如何に変化するかを、一次元ハバード・モデルで経路積分(量子モンテ・カルロ)法を用いて明らかにした。本研究の結論は、次の通りである。

中間斥力および弱斥力領域でのレーマン・スペクトル(状態密度)には、上下ハバード・バンド・ピークに加えて、フェルミ準位近傍に新たなピーク構造を持つような金属絶縁体中間相が現れる。

無限次元格子系において現れるフェルミ準位のピークは、低温まで保持されるのに対して、一次元ハバード・モデルで得られた金属絶縁体中間相に現れるフェルミ準位のこのピークは、金属-絶縁体転移が進行する過程でフェルミ準位に関して対称な二本のピークへと分裂する。そして、この擬ギャップがフェルミ準位を完全に切ることにより、レーマン・スペクトルからみると系は絶縁体へと転移する。

金属絶縁体中間相でのハバード・バンド・ピークはインコヒーレント成分で支配されている。これに対し、フェルミ準位近傍に現れるピークにはコヒーレント成分が強く残っている事が波数指定レーマン・スペクトルの計算により明らかになった。

また、このような金属絶縁体中間相(3重ピーク構造および4重ピーク構造)の出現は、次元に依存しない事が明らかになった。

本研究で得られた金属絶縁体中間相のレーマン・スペクトルの幾つかは、高分解能光電子分光実験によって得られた  $\text{CaVO}_3$  や  $\text{SrVO}_3$  での光電子スペクトルと定性的に一致する。

## 今後の展望

本研究で得られた結論は、前述の如く、次元性に依存しない。従って、今後は、二次元、三次元での計算を系統的に行なっていく必要がある。三次元に関しては、守谷-長谷川の静的 CPA による相図が提案されている [14]。本研究で提案している量子モンテ・カルロ法で、同じ三次元での相図を計算した場合、この守谷-長谷川理論と如何に違ってくるか興味を持たれるところである。

本研究の結論は銅酸化物型高温超伝導体の機構解明にも大きく寄与すると予想される。この物質の母体となる電子状態はやはり、中間結合領域にあるモット絶縁体である。この状態にある電子で BCS 型の電子対を生成させる為には、電子間に働く斥力 (1 eV 程度) に打ち勝つだけの強い電子間引力の存在が必要であると従来から考えられてきており、この引力の起源は世界的な論争点であり、いまだに結論は得られていない。

しかし、本研究 7 頁の第 1 図 (b ~ e) をみればわかるように、モット転移の中間状態で Fermi 準位近傍に現れる金属的状态では、結果的にみれば電子間に  $U$  程の大きな斥力は働いておらず、エネルギー間隙の大きさ (約 0.1 eV) 程の斥力が働いているにすぎないと言える。

従って、 $U$  よりも充分小さい電子格子相互作用等でも、この斥力に対抗して、弱い引力を発生させる事が可能であり、その結果、この弱い引力により Fermi 準位近傍の金属的状态だけは容易に BCS 状態に転移すると思われる。

## 謝辞

本研究は、那須 奎一郎教授 (物質構造科学研究所・総合研究大学院大学) の御指導のもとで行なわれたものであります。那須先生には、本研究のすべてにわたり絶えず研究指導と励ましを賜りました。

富田 憲一助手 (物質構造科学研究所) には博士課程入学以来、幾度となく有益な議論・助言を頂きました。

辛 埴教授 (東京大学)、菅 滋正教授 (大阪大学) には光電子分光による最新の実験結果を提供して頂き、有益な議論を賜りました。

酒井 治教授 (東京都立大学) には研究に関する多くの有益な議論を賜りました。

本研究に関して、有益な議論・助言、多大な御協力と温かい励ましを頂いた先生方に深く感謝いたします。

# 付録

## A 追補 : Hubbard-Stratonovitch Transformation

第 2 節における式 (5) がトロッター公式 (4) と同じ誤差範囲内 ( $\mathcal{O}(\Delta^2)$ ) で正しい事を示す。すなわち、トロッター公式が有効である限り、式 (5) が有効である事を証明しよう。ここでは、オン・サイト・クーロン斥力のみを考え、ハバード・モデルに含まれる二体の演算子を含む式 (3) のみに焦点をあてる。より一般的な形式については、文献 [8] を参照して頂きたい。

まず、式 (3) は次のように書き直すことが出来る。

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_I &\equiv U \sum_m n_{m\uparrow} n_{m\downarrow} \\
 &= -\frac{U}{2} \sum_m (n_{m\uparrow} + n_{m\downarrow} - 2n_{m\uparrow} n_{m\downarrow}) + \frac{U}{2} N \\
 &= -\frac{U}{2} \sum_m (n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow})^2 + \frac{U}{2} N.
 \end{aligned} \tag{21}$$

ここで、次の関係式を用いた。

$$\begin{aligned}
 \sum_m (n_{m\uparrow} + n_{m\downarrow}) &= N, \\
 [n_{m\uparrow}, n_{m\downarrow}]_- &= 0.
 \end{aligned}$$

ただし、 $N$  は系のサイト数である<sup>2</sup>。式 (21) より、次式が成り立つ。

$$\begin{aligned}
 e^{-\Delta \mathcal{H}_I} &= \exp\left\{\frac{\Delta U}{2} \sum_m (n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow})^2 - \frac{U}{2} N \Delta\right\} \\
 &= \exp\left(-\frac{U}{2} N \Delta\right) \prod_m \left[\exp\left\{\frac{\Delta U}{2} (n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow})^2\right\}\right] \\
 &= \exp\left(-\frac{U}{2} N \Delta\right) \left[\prod_m \left\{1 + \frac{\Delta U}{2} (n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow})^2\right\} + \mathcal{O}(\Delta^2)\right].
 \end{aligned} \tag{22}$$

ここで、 $\Delta$  は式 (4) で定義される微小量である。

---

<sup>2</sup>これは、half-filled case であるが、化学ポテンシャルを導入すれば、電子数を制御できる。

一方で、次式の左辺で定義される演算子は、次のように書き表せる。

$$\begin{aligned}
& \prod_m \left( \frac{1}{2} \sum_{x(m)=\pm 1} \right) \exp \left[ \Delta \sqrt{\frac{U}{\Delta}} \sum_m \left\{ x(m)(n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow}) \right\} \right] \\
&= \prod_m \left[ \frac{1}{2} \exp \left\{ \sqrt{\Delta U}(n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow}) \right\} + \frac{1}{2} \exp \left\{ -\sqrt{\Delta U}(n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow}) \right\} \right] \\
&= \prod_m \left[ \frac{1}{2} \left\{ 1 + \sqrt{\Delta U}(n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow}) + \frac{1}{2} \Delta U (n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow})^2 + \dots \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 1 - \sqrt{\Delta U}(n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow}) + \frac{1}{2} \Delta U (n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow})^2 + \dots \right\} \right] \\
&= \prod_m \left\{ 1 + \frac{\Delta U}{2} (n_{m\uparrow} - n_{m\downarrow})^2 \right\} + \mathcal{O}(\Delta^2). \tag{23}
\end{aligned}$$

ここで、

$$(\text{const}) \prod_m \sum_{x(m)=\pm 1} \rightarrow \int \mathfrak{D}x \tag{24}$$

と書き表す事を約束する。

トロッター公式(4)を考慮し、これを虚時間( $\tau$ )に関する積分( $\int d\tau$ )として表現すれば、式(22), (23)より、経路積分形式(5)が得られる。

(24)に現れる定数に関して、コメントしておこう。実際の計算では、式(8)や式(13)から分かるように、分母分子の定係数は必ずキャンセルされるので、ここでは、その定係数を書き下す必要はない<sup>3</sup>。

---

<sup>3</sup>気になるようであれば、式(22),(23)を比較すれば良い。



## B 追補：UDR 分解法

ここでは、実際の数値計算を精密に行なう為に用いた技法の一つである UDR 分解法について、その概略を紹介する。

最初に、本研究で経路積分 (量子モンテ・カルロ) 法を用いて計算すべき物理量は、式 (7) および式 (8) である事を確認しておこう。すると、このままでは演算子が含まれているので、計算コードにする上で不便である。そこで、以下、行列表記に書き直す事にする。

式 (5) で定義されている  $h(\tau, x(m, \tau))$  に対応する行列 ( $\equiv \mathbb{H}(\tau, x(m, \tau))$ ) を導入し、その行列成分を次式で定義する。

$$\left( \mathbb{H}(\tau, x(m, \tau)) \right)_{mm'}^{\sigma} \equiv \langle 0 | a_{m\sigma}(\tau) h(\tau, x(m, \tau)) a_{m'\sigma}^{\dagger}(\tau) | 0 \rangle. \quad (25)$$

ここで、 $|0\rangle$  は電子真空状態である。 $a_{m\sigma}(\tau)$  は式 (9) で定義されるハイゼンベルク表示とは異なり、時間順序演算子 ( $T_+$ ) に対する時刻のみを表している。これは、式 (5) に現れた  $\mathcal{H}_0(\tau)$  等と同様である。すると、時間発展演算子 (式 (6)) に対応する行列 ( $\equiv \mathbb{R}(\tau, x)$ ) は、次式で与えられる。

$$\mathbb{R}(\tau, x) = T_+ \exp \left[ - \int_0^{\tau} d\tau' \mathbb{H}(\tau', x(m, \tau')) \right]. \quad (26)$$

これは、 Trotter 公式 (4) の表記法に従えば、次のように形式的に書く事ができる。

$$\mathbb{R}(\tau, x) = e^{-\Delta\mathbb{H}} e^{-\Delta\mathbb{H}}, \dots, e^{-\Delta\mathbb{H}} \quad (27)$$

$$= \underbrace{\mathbf{B}_w \mathbf{B}_{w-1}, \dots, \mathbf{B}_1}_w \quad (1 \leq w \leq W),$$

$$\mathbf{B}_w \equiv e^{-\Delta\mathbb{H}(\tau, x(m, \tau))}. \quad (28)$$

ここで、 $\mathbb{H}$  は  $\mathbb{H}(\tau, x(m, \tau))$  を象徴的に表したものである。

以上で準備が整ったので、式 (7) および式 (8) で計算される量を書き直すと、次のようになる。

$$\text{Tr}[R(\beta, x)] = \det |\mathbb{E} + \mathbb{R}(\beta, x)|, \quad (29)$$

$$\mathcal{G}(m, \tau, m', 0, \sigma, x) = - \left( \mathbb{R}(\tau, x) \frac{1}{\mathbb{E} + \mathbb{R}(\beta, x)} \right)_{mm'}. \quad (30)$$

ここで、 $\mathbb{E}$  は単位行列である。従って、式 (29), (30) から分かるように、数値計算では主に式 (27) で書かれているような行列の乗算を行なう必要がある。

それでは、この行列の乗算を精密に行なう為の UDR 分解法を具体的にみていく事にしよう。これまでの習慣に従って、ユニタリ行列、対角行列、右三角行列をそれぞれ、 $\mathbf{U}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{R}$  で表記する事にする。

具体的には、次のように表現される<sup>4</sup>。

$$\left. \begin{aligned}
 \mathbf{U}^t \mathbf{U} &= \mathbf{E} \\
 \mathbf{D} &= \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & d_{NN} \end{pmatrix} \\
 \mathbf{R} &= \begin{pmatrix} 1 & r_{12} & \cdots & r_{1N} \\ 0 & 1 & r_{23} & \cdots & r_{2N} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & r_{(N-1)N} \\ 0 & \cdots & 0 & & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

式(27)の計算手順は以下の通りである。

$$\begin{aligned}
 \mathbb{R}(\tau, x) &= \mathbf{B}_w, \dots, \mathbf{B}_{2l+1}, \mathbf{B}_{2l}, \dots, \mathbf{B}_{l+1} \underbrace{\mathbf{B}_l, \dots, \mathbf{B}_1}_l \\
 &= \mathbf{B}_w, \dots, \mathbf{B}_{2l+1}, \mathbf{B}_{2l}, \dots, \mathbf{B}_{l+1} \mathbf{U}_1 \mathbf{D}_1 \mathbf{R}_1 \\
 &= \mathbf{B}_w, \dots, \mathbf{B}_{2l+1}, \underbrace{\mathbf{B}_{2l}, \dots, \mathbf{B}_{l+1}} \mathbf{U}_1 \mathbf{D}_1 \mathbf{R}_1 \\
 &= \mathbf{B}_w, \dots, \mathbf{B}_{2l+1} \mathbf{U}_2 \mathbf{D}_2 \mathbf{R}_2 \mathbf{D}_1 \mathbf{R}_1 \\
 &= \mathbf{B}_w, \dots, \mathbf{B}_{2l+1} \mathbf{U}_2 \mathbf{D}_2 \mathbf{D}'_1 \mathbf{R}'_2 \mathbf{R}_1 \\
 &= \mathbf{B}_w, \dots, \mathbf{B}_{2l+1} \mathbf{U}_2 \mathbf{D}_2'' \mathbf{R}_2'' \\
 &\vdots \\
 &= \mathbf{UDR}.
 \end{aligned} \quad (32)$$

ここで、 $l$ は整数であり、 $l$ 個の行列を乗算した時に深刻な誤差を生じない程度に小さいとする。

まず、式(32)の一行目から二行目は、 $l$ 個の行列( $\mathbf{B}$ )の乗算を行ない、これを $\mathbf{UDR}$ に分解する。すると、ユニタリ行列は比較的素直な行列になる事が知られているので、非常に大きな数と小さな数を持つような数値的に不安定な部分は主として対角行列に含まれる事になる。三行目から四行目では、上で計算されたユニタリ行列も含めて次の $l$ 個の行列 $\mathbf{B}$ を乗算し、再び $\mathbf{UDR}$ 分解を実行する。ここでも $l$ が十分小さければ、深刻な数値誤差は発生しない。四行目から五行目では、対角行列に挟まれた三角行列を右の対角行列と入れ換える。ところで、数値計算上の誤差を抑える上で最も注意すべき部分は、絶対値が有効桁数程度以上に異なる数同士を加減算する場合である。従って、一般的に $\mathbf{D}$ と $\mathbf{R}$ は非可換であるが、一方が対角行列なので、加減算を全く使用する事なく、各成分のスケ-

<sup>4</sup>ここで、スピンに関する添字を省略している。

ルを変えるだけで済む。五行目から六行目では、対角行列同士、右三角行列同士をまとめる。さて、二行目と六行目は行列  $\mathbf{B}$  の数だけ異なるから、これまでの手続きを  $\mathbf{B}$  が完全になくなるまで繰り返せば、最終的に式 (32) が計算される。こうして、数値計算上不安定な部分は最後まで加減算される事なく行列  $\mathbf{D}$  に閉じ込めておく事ができる。

以上、UDR 分解法についてみてきたが、最後に二点コメントしておこう。

一つ目は、UDR 分解 (式 (32)) に現れた整数  $l$  について、上述の通り、 $l$  は小さければ小さい程 行列  $\mathbf{B}$  の乗算を精密に実行出来る。そして、 $l=1$  の場合、この UDR 分解法としては最も精度良く計算出来るようになる。しかしながら、数値計算で最も時間を費す部分でもあるので、 $l$  をどの程度小さくするかは、計算時間と精度のトレードオフなのである。

もう一つは、UDR 分解法にも当然ながら、限界がある点である。式 (27) あるいは Trotter 公式 (4) から明らかなように、温度が低い場合 ( $\beta$  が大きい場合)、乗算すべき行列  $\mathbf{B}$  が多くなる。温度を下げれば下げる程 行列  $\mathbf{B}$  は増え続け、最終的には、UDR 分解法を用いた数値計算でも、精密な計算を実行する事が不可能 (困難) になってしまうのである。

## C 追補：Numerical Results

ここでは、UDR 分解法を用いた数値計算を実践した場合に、一電子温度グリーン関数が精密に計算される様子を具体例を挙げて紹介しておこう。

その為に、式 (7, 10) あるいは式 (30) の対角成分、すなわち、同時刻グリーン関数が静的な電子数としての物理的解釈を持つような部分に注目して、これを次式で定義する。

$$g(\tau, x) \equiv \frac{1}{N} \sum_{m, \sigma} \mathcal{G}(m, \tau, m, 0, \sigma, x), \quad (33)$$

$$\bar{g}(\tau) \equiv \frac{1}{N} \sum_{m, \sigma} \bar{\mathcal{G}}(m, \tau, \sigma). \quad (34)$$

ここで、 $g(\tau, x)$  は上述の理由から、符号まで考慮すると、half-filled case であるという仮定以外に何等条件を課さずとも  $g(0, x) = -1$  となるべき量である。さらに、任意の経路  $x(m, \tau)$  には、必ず時刻  $\tau$  に関して対称な経路  $x(m, \beta - \tau)$  が存在するから、式 (10) によって計算される式 (34) もまた、経路積分が十分に収束した後には、時刻  $\tau$  に関して対称になる事がわかる。それでは、以上の考察を踏まえて、この一電子温度グリーン関数(式 (33, 34)) をみていこう。

図 7 は、 $U/t = 3.5$ ,  $t/(k_B T) = 10$  の場合で、UDR 分解法を使用せず、倍精度実数型を使用して計算した結果である。ここで、式 (4) の Trotter 刻み  $W$  は  $W = 112$  とした。これは、式 (32) において、 $l = w = W = 112$  としたのと同等である。図 7(a) では、 $g(\tau, x)$  の  $\tau \geq 3\beta/4$  での絶対値も然ることながら、符号まで反転しており、 $g(\beta, x) = -1$  になる様子は全くない。また、図 7(b) は 10000 本の経路を積分した結果であるが、図 7(a) のような  $g(\tau, x)$  を積分したところで、意味のある正しい一電子温度グリーン関数が計算される事はないのである。この結果から、UDR 分解法を使用しない倍精度実数型の計算では累積した数値誤差により、十分な精度で数値計算出来ない事がわかった。

それでは次に、UDR 分解法を使用した場合の結果をみてみよう。図 8 は、式 (32) において、 $l = 8$  で計算した場合の  $g(\tau, x)$ ,  $\bar{g}(\tau)$  である。ここで、その他のパラメータは全て図 7 と同じものにした。すなわち、数値計算における技巧上の違いはあっても、全く同じ物理量を計算しているのである。この結果をみると、図 7 と比較して、その計算精度が遥かに改善されている様子がわかるであろう。それは、図 8(a) で示された  $\tau \leq \beta/4$  における各点での不連続な結果と比較して、図 8(b) で示された積分結果は、8 点置き ( $l = 8$ ) の不連続性を除けば、かなり滑らかな結果である事からも明らかである。しかしながら、この  $l = 8$  での UDR 分解法だけでは依然として不十分であり、 $g(\beta, x)$  が  $-1$  になる(戻る)事が無い。そして、幾ら統計誤差を減らす為に多くの経路を積分してみたところで、図 8(b) が時刻  $\tau$  に関して対称になり得ない事も明らかであろう。さて、この残り僅かな数値誤差を克服する為には、 $l$  を更に小さくすれば良さそうである。実際、 $l$  を小さく

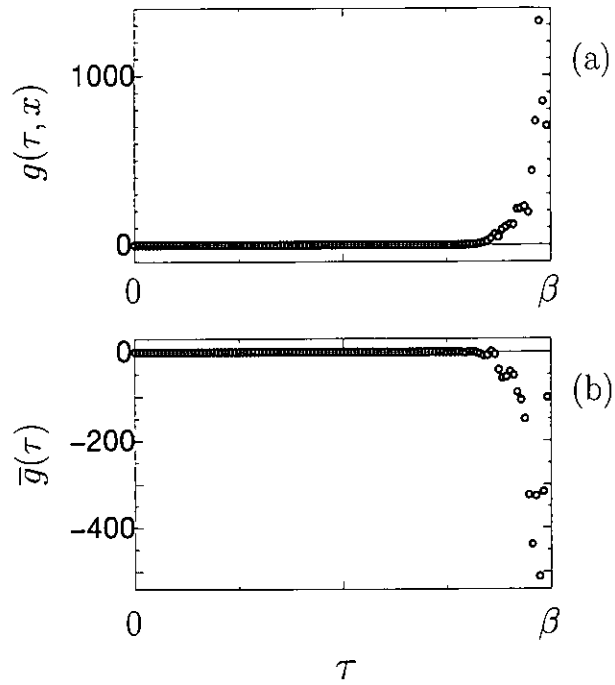


図 7: UDR 分解法を使用せずに倍精度計算での  $g(\tau, x)$  および  $\bar{g}(\tau)$  をプロットしたもの。

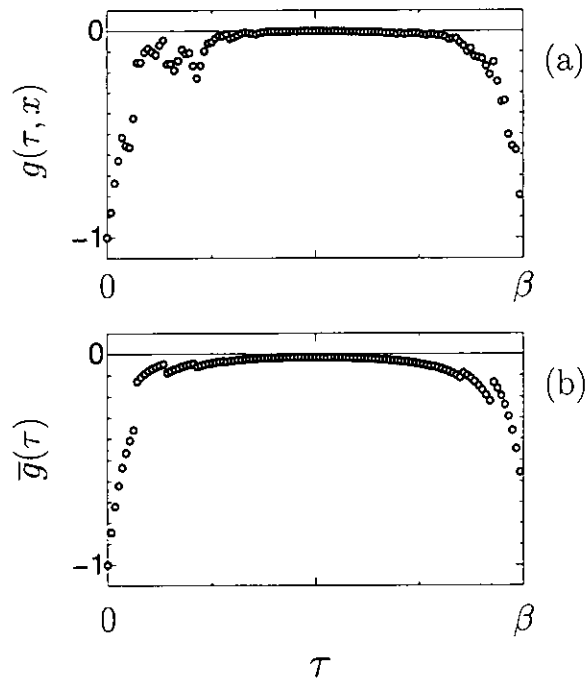


図 8: UDR 分解法を用いた倍精度計算での  $g(\tau, x)$  および  $\bar{g}(\tau)$  をプロットしたもの。  $U$ ,  $\beta$  その他のパラメータは全て図 7 と同じ。

すれば更に精度良く計算出来るようになる筈だが、ここでは、四倍精度実数型を用いた計算で、精密に計算した結果を紹介しよう。

図 9 は、図 8 と全く同じパラメータ設定で UDR 分解を行ない、実数型として、倍精度の代わりに四倍精度を使用した場合の結果である。図 9(a) をみると、 $\tau \leq \beta/4$  および  $\tau \geq 3\beta/4$  での値が不連続で一見、数値誤差により酷く汚れているように思われるかもしれない。一方で、図 9(a) まで含めて 10000 本の経路で積分を実行した(統計平均を取った)図 9(b) は、 $\bar{g}(0) = \bar{g}(\beta) = -1$  を満足し、時刻  $\tau$  に関して十分に対称的であり、統計誤差や数値誤差がほとんど含まれないと言えよう。すなわち、実は図 9(a) も一電子温度グリーン関数を正しく計算していると言えるのである。これは、図 9(a) となるような経路  $x$  が量子モンテ・カルロ法によって選択(積分)されたというだけの事である。

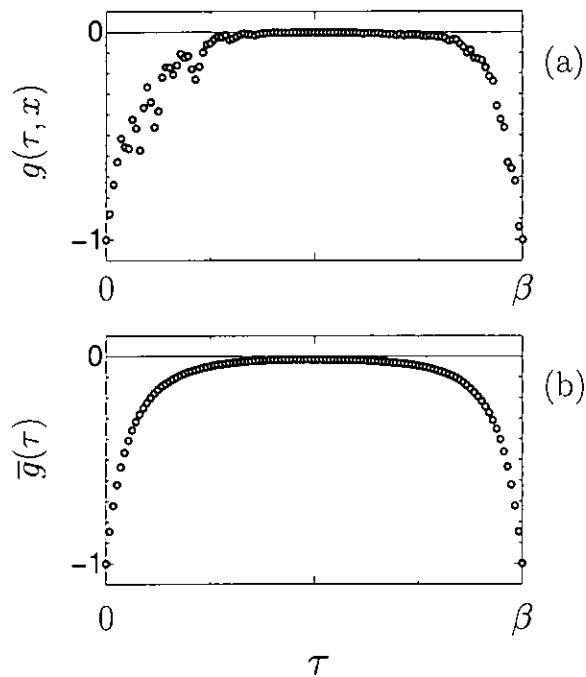


図 9: UDR 分解法を用いた四倍精度計算での  $g(\tau, x)$  および  $\bar{g}(\tau)$  をプロットしたもの。  $U, \beta$  その他のパラメータは全て図 7,8 と同じ。

図 7-9 でみてきたように、UDR 分解法を利用し、四倍精度実数型で数値計算を行なう事により、精密な経路積分 (量子モンテ・カルロ) 法を実行出来るようになる事がわかった。

最後に二点コメントしておこう。

一つは付録 B でも言及したように、UDR 分解法と四倍精度実数型を用いても、低温になればなる程 精密な数値計算は困難になり、最終的には図 8 あるいは図 7 で示したような一電子温度グリーン関数しか得られなくなってしまう。

もう一点は、本研究の計算において、経路  $x$  に対して、あるいは一電子温度グリーン関数に対して何等の拘束条件も課していないという事である。実際、図 9 でみたように、個々の一電子温度グリーン関数の積分は全くの確率過程により採用され、 $g(0, x)$ ,  $g(\beta, x)$  の値については精密な数値計算により、自ずと電子数としての物理的解釈を正しく与えていた。

以上、追補 B と追補 C とを結合する事により、我々は、一体グリーン関数を計算する際に出てくる数値誤差を、不可避免的に出てくる統計的誤差と現在汎用されている数値計算法の不完全性からくる誤差に分離し、後者をほぼ完全に除外する事に成功した。

## D 追補：分散関係

ここでは、レーマン・スペクトルが上下ハバード・バンド・ピーク以外にピーク構造を持つような金属絶縁体中間相について、その波数指定レーマン・スペクトルから分散関係を明らかにする。

図 10 は一次元 48 サイト、 $U/t = 0.5$ ,  $t/(k_B T) = 10$  でのレーマン・スペクトルである。この結果は図 1, 2 とコンシステントである事がわかる。すなわち、フェルミ準位のピークが完全に分裂を始める直前の金属-絶縁体転移の初期段階にある。

このときの波数指定レーマン・スペクトルを図 11 に示した。この結果から、フェルミ準位近傍のレーマン・スペクトル (図 10) のピークに対応する  $k = \pi/2$  近傍の波数指定レーマン・スペクトルは、非常に鋭いピーク構造を持ち、バンドの底 ( $k = 0$ ) のそれと比較してコヒーレント成分が多く残っていることがわかる。一方で、バンドの底へ向かって  $k$  を変化させた場合、 $k = 9\pi/24$  あたりを境にして急激に幅を広め、完全にインコヒーレント成分に支配されていく様子がわかるであろう。このことから、金属-絶縁体転移が進行する初期段階において、バンドの底のスペクトルが急激にインコヒーレント成分で支配される為に、フェルミ準位から僅かにずれたところからレーマン・スペクトル (状態密度) の強度が減少する事が理解出来よう。この結果は、第 3 節の結論と完全に一致している。

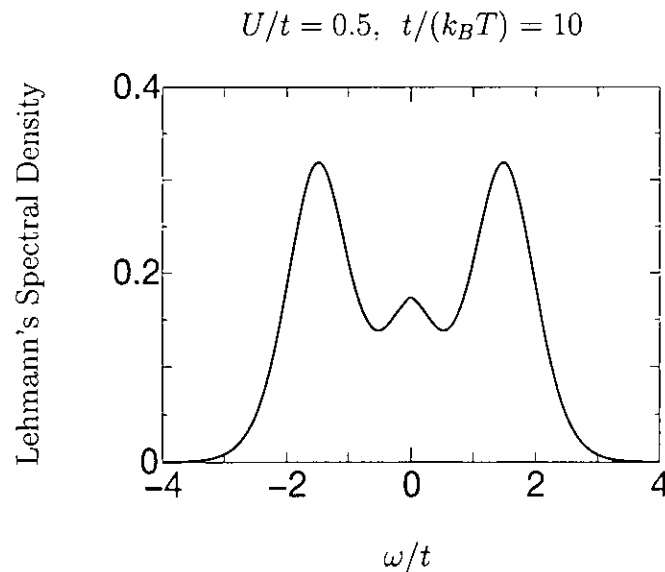


図 10: 一次元 48 サイト、 $U/t = 0.5$ ,  $t/(k_B T) = 10$  でのレーマン・スペクトル。



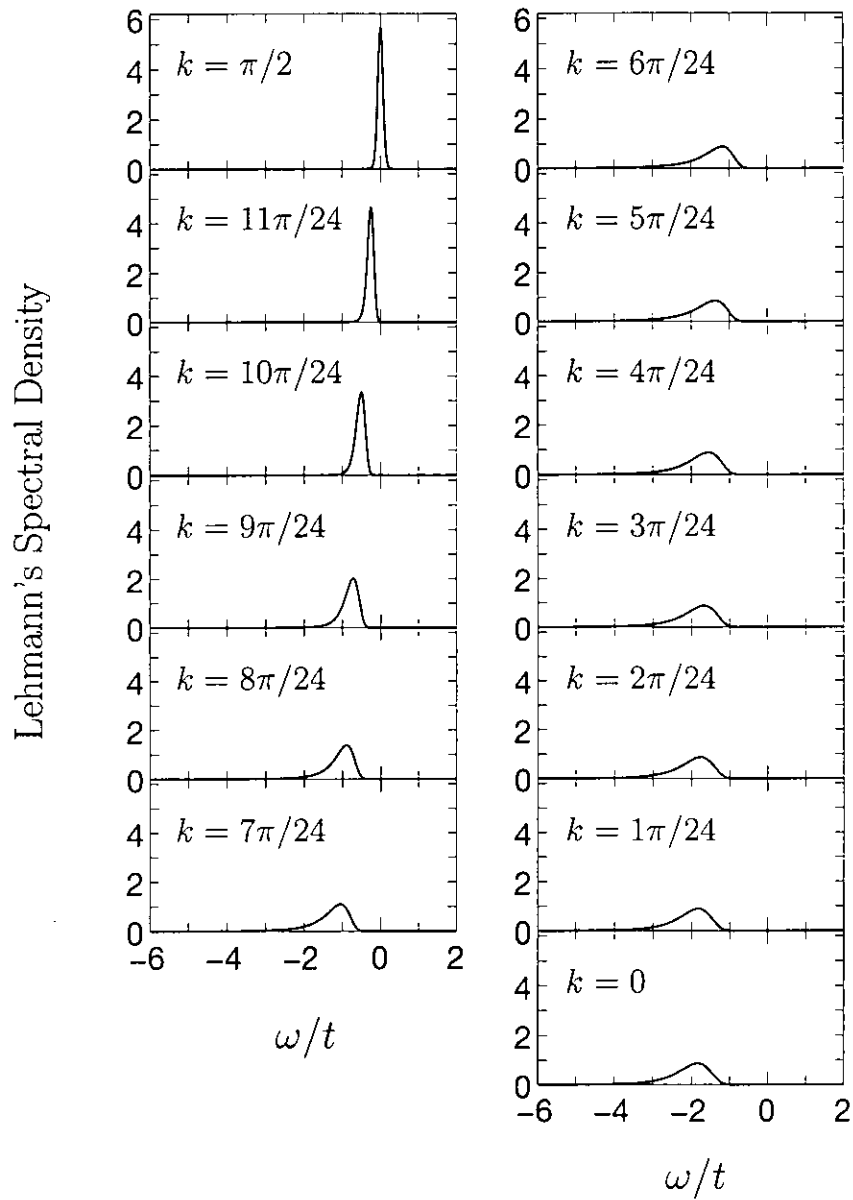


図 11: 一次元 48 サイト、 $U/t = 0.5$ ,  $t/(k_B T) = 10$  での波数指定レーマン・スペクトル。

図 12 は図 11 のスペクトル・ピークから再現された分散関係をプロットしたものである。エラーバーは図 11 におけるスペクトルの半値幅として見積もった。ここで、実線は  $U = 0, T = 0$  のコサイン・バンド ( $-2t \cos(k)$ ) を表す。この結果から、フェルミ準位近傍では、コサイン・バンドの分散関係とかなり良く一致している事がわかる。一方で、 $k = 9\pi/24$  あたりからバンドの底 ( $k = 0$ ) へ向かうに従いコサイン・バンドからずれていき、一電子的な描像を失っていく様子がわかるであろう。これは、波数指定レーマン・スペクトルが  $k = \pi/2$  近傍ではデルタ関数型に近いコヒーレント・ピークを形成する一方で、 $k = 0$  へ向かうに従って幅の広いインコヒーレント・ピークを形成する図 11 の結果からすれば、当然の結論であると言える。

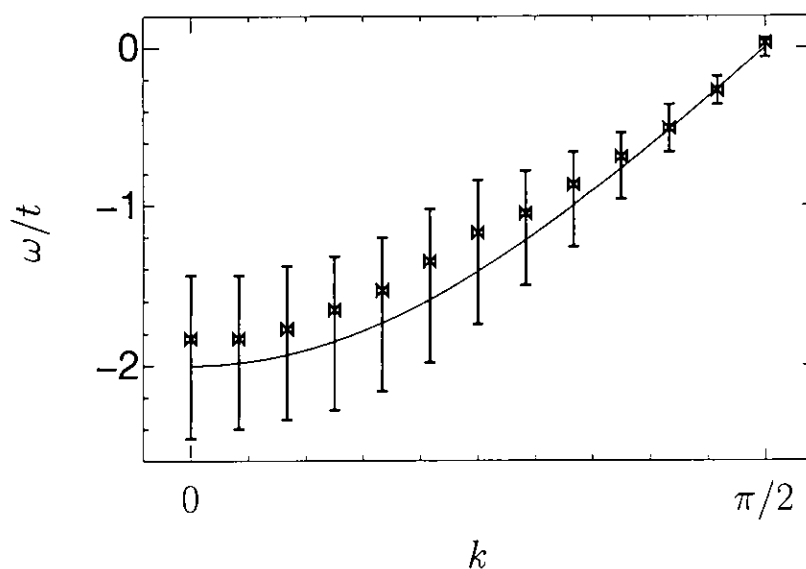


図 12: 図 11 から再現された分散関係をエラーバーを含めてプロットしたもの。実線はコサイン・バンド ( $-2t \cos(k)$ ) を表す。

## E 追補：二次元での数値計算結果

第 3.4 節では、金属絶縁体中間相の出現が、次元に依存しない特徴である事を述べた。そこで、これに関して二次元ハバード・モデルでの予備的な数値計算による結果を示しておこう。

図 13 は、 $U/t = 1.0$ ,  $t/(k_B T) = 10$  でのレーマン・スペクトルである。二次元ハバード・モデルにおいても中間斥力 (あるいは弱斥力) 領域では、一次元系の場合と同様に、フェルミ準位から僅か上下のスペクトル強度が減少し、フェルミ準位および高エネルギー側に合わせて三つのピークが現れている。この結果は、第 3.4 節における不純物モデルでの解釈とコンシステントであり、金属絶縁体中間相の出現は次元に依存しない振る舞いである事がわかる。

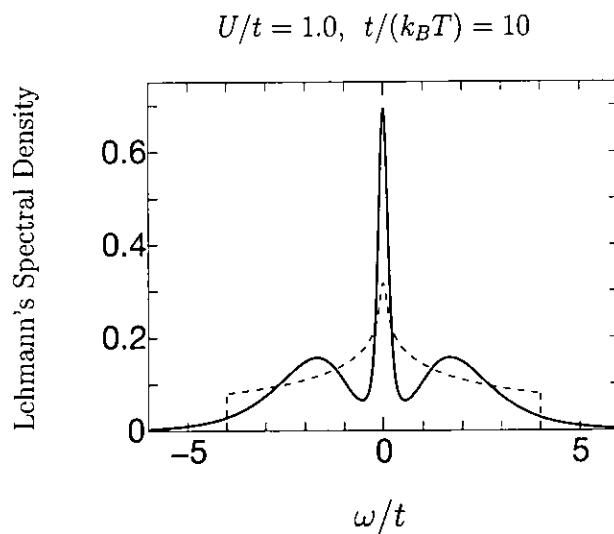


図 13: 実線は、二次元ハバード・モデル ( $8 \times 8$  サイト) の  $U/t = 1.0$ ,  $t/(k_B T) = 10$  でのレーマン・スペクトル。破線は、二次元コサイン・バンドでの状態密度を表す。

## F 追補：Tomonaga-Luttinger Model

一次元多体系を記述する為の理論として、しばしば標記の理論 [15] が用いられている。この理論では、本研究で我々が用いたコサイン型バンドを Fermi 準位の二つの部分だけ一致させ、一体的バンドを上下無限大まで線形に拡張する。(下図)

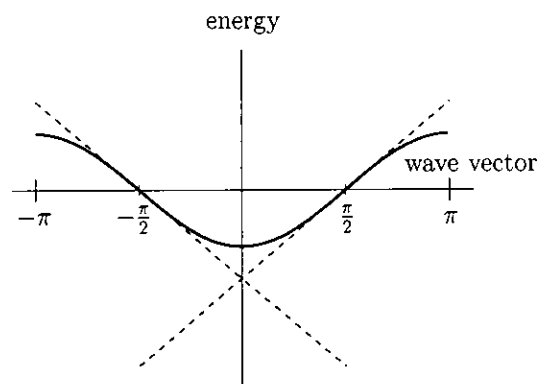


図 14: コサイン型バンド (実線) と Tomonaga-Luttinger Model における線形拡張されたバンド (破線) を表す。

このような拡張を行なうと、全てのこの系の励起は完全な Bose 粒子となり、理論的な取り扱いが容易になるからである。

しかし、本研究で我々が問題にしているように、有限のバンド幅を持つ系での中間結合での特殊性を解明しようとする場合、標記のモデルから得られる結論の如何なる部分が有効で、如何なる部分は無効なのか、判断は難しい。

## 参考文献

- [1] A. Sekiyama, H. Fujiwara, T. Satonaka, M. Okazaki, A. Shigemoto, S. Imada, S. Suga, H. Eisaki, S. Uchida, K. Takegahara, and H. Harima, private communication.
- [2] S. Suga, A. Sekiyama, and S. Imada, 日本放射光学会誌 Vol. 15, No. 1 (2002), 20.
- [3] R. Eguchi, T. Yokoya, T. Kiss, H. Ishii, S. Shin, K. Kanai, S. Nozawa, and Y. Tokura, private communication.
- [4] X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **70**(1993), 1666.
- [5] O. Sakai and Y. Kuramoto, Solid State Commun. **89**(1994), 307.
- [6] Steven R. White, Phys. Rev. B **46**(1992), 5678.
- [7] S. Maekawa, T. Toyama, and S. Yunoki, Physica C **263**(1996), 61.
- [8] N. Tomita and K. Nasu, Phys. Rev. B **56**(1997), 3779.
- [9] R. N. Silver, D. S. Sivia, and J. E. Gubernatis, Phys. Rev. B **41**(1990), 2380.
- [10] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, and R. T. Scalettar, Phys. Rev. B **40**(1989), 506.
- [11] P. D. Landau, K. K. Mon, and H. -B. Schüttler, *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics VII* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1994), 113.
- [12] Yu. A. Izyumov, *Theory of an Impurity State in a Crystal, Advances in Physics* (Phil. Mag. Supplement), **14**(1965), 569.
- [13] I. H. Inoue, I. Hase, Y. Aiura, A. Fujimori, Y. Haruyama, T. Maruyama, and Y. Nishihara, Phys. Rev. Lett. **74**(1995), 2539.
- [14] T. Moriya and H. Hasegawa, J. Phys. Soc. Jpn. **48**(1980), 1490.
- [15] Gerald D. Mahan, *Many-Particle Physics, third edition* (Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York), (2000), 256.
- [16] M. Yamazaki, N. Tomita, and K. Nasu, to be published in J. Phys. Chem. Solids.

# Path-integral theory for photoemission spectra of intermediately correlated systems

Masahiro Yamazaki<sup>1</sup> \* , Norikazu Tomita<sup>2</sup> and Keiichiro Nasu<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*The Graduate University for Advanced Studies, 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan*

<sup>2</sup>*Institute of Materials Structure Science, KEK, 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan*

## Abstract

By using the quantum Monte-Carlo method, we calculated the Lehmann spectra of momentum-specified one-body Green's functions as well as the total density of states(DOS), for 1-dimensional half-filled Hubbard systems with various correlation strengths and temperatures. In the region of the intermediate correlation strength and temperature, we found that the DOS has new characteristic peaks near the Fermi level, in addition to the well-known upper and lower Hubbard-band peaks. We show these new peaks near the Fermi level are quasi coherent, while the upper and lower Hubbard-band peaks are strongly incoherent. This multi-peaked structure in the intermediate region is also found to be insensitive to the dimensionality. Our results qualitatively agree with the recent experiment on  $\text{CaVO}_3$  and  $\text{SrVO}_3$ .

Keywords: D. electronic structure, D. Fermi surface

Typeset using REVTeX

---

\*fax: +81-298-64-2801, E-mail address: yamama@post.kek.jp

## I. INTRODUCTION

The photoemission spectroscopy is the most standard experimental method to get information about the density of states(DOS) of the electron, and it directly determines the Lehmann spectrum of one-body Green's function. At present, the energy resolution of this photoemission spectrum(PES) overreaches a few meV, and the momentum resolution is also high enough to cut the first Brillouin zone into 20 pieces or more. Hence, it can clarify the natures of the electronic states in detail than ever before. In particular, to clarify the spectral feature around the Fermi level by this high resolution photoemission spectroscopy is one of the most important issues in the solid state physics.

In connection with this problem, a new peak structure around the Fermi level has been clearly observed in  $\text{CaVO}_3$  and  $\text{SrVO}_3$  [1], in addition to the well-known Hubbard-band peaks. Thus, the origin of this new peak, which is only slightly distant from the Fermi level, has become a debating point. In terms of theoretical works, the DOS was calculated by using the infinite dimensional Hubbard model [2,3], by quantum Monte-Carlo simulations [4], and by various other methods [5]. In 1-dimension, there are many studies including the exact results [6]. It is already well-known that, in the infinite dimensional case a peaked structure appears at the Fermi level. On the other hand, within the quantum Monte-Carlo method for 1-, 2- and 3-dimensional systems, up to present, there is no theoretical study that predicts the appearance of such peaks around the Fermi level. For this reason, our purpose, in the present paper, is to clarify the DOS and the electronic property related with this new peak.

We calculated the one-body Green's functions for 1-dimensional half-filled Hubbard systems with various correlation strengths and temperatures, using quantum Monte-Carlo simulation [7]. The spectral functions are obtained by making use of the analytic continuation method. In the region of the intermediate correlation strength and temperature, we have found some new peaks appear around the Fermi level, even in the case of 1-dimensional systems, just like the case of the infinite dimension. Some of these multi-peaked results qualitatively agree with the recent experiment on  $\text{CaVO}_3$  and  $\text{SrVO}_3$ .

## II. MODEL AND METHOD

We consider the Hubbard Hamiltonian ( $\equiv H$ ), which is represented by

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^\dagger a_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad n_{i\sigma} \equiv a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}, \quad \sigma \equiv \uparrow, \downarrow, \quad (2.1)$$

where  $-t$  is the electron transfer energy from a lattice site  $i$  to a site  $j$ , and  $\langle i, j \rangle$  represents the set of neighboring two sites.  $a_{i\sigma}^\dagger$  denotes the creation operator of an electron localized at the site  $i$  with the spin  $\sigma$ .  $U$  is the strength of the on-site Coulomb repulsion. All the energies are normalized by  $t$  ( $= 1.0$  eV). Subscripts for the spin will be omitted hereafter. We will be concerned only with the half-filled case, and a periodic boundary condition is imposed for practical calculations. The one-body Green's function ( $\equiv G(k, \tau)$ ) with the momentum ( $\equiv k$ ) is defined by

$$G(k, \tau) \equiv -\langle T_+ a_k(\tau) a_k^\dagger(0) \rangle, \quad (2.2)$$

where  $\tau$  is the imaginary time argument, and  $T_+$  denotes the time-ordering operator for  $\tau$ .  $\langle X \rangle$  represents the thermal average of  $X$ , and  $a_k(\tau)$  is the Fourier transform of the Heisenberg representation ( $\equiv a_i(\tau)$ ) of  $a_i$ . The spectral function ( $\equiv A(k, \omega)$ ) in the Lehmann's representation for the eq. (2.2) is given by

$$G(k, \tau) = - \int d\omega \frac{e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\beta\omega}} A(k, \omega), \quad (2.3)$$

where  $\beta \equiv 1/k_B T$ ,  $k_B$  is the Boltzmann constant, and  $T$  is the absolute temperature. From  $G(k, \tau)$ , we have obtained the spectral function  $A(k, \omega)$ , using the least-squares method. We have not used the so-called maximum entropy method [8], but have used quadruple precision in the matrix multiplications and factorizations [9] to avoid numerical errors, and to get the smooth and reliable spectral functions. It should be noted that our method can completely reproduce various well-established theoretical results of quantum Monte-Carlo method for the strongly correlated systems [10].



### III. RESULTS AND DISCUSSION

In order to get an overview for the metal-insulator transition, we, at first, show  $T$  and  $U$  dependencies of DOSs, using a rather small size system (20 sites). Figure 1 shows the DOSs at  $t/(k_B T) = 1, 10, 15, 25$  and  $30$ , where we fixed  $U/t$  at  $2.0$ . In Fig. 1(a), we can see the normal metallic state, which is quite fuzzy around the  $-2t\cos(k)$  band, because of the high temperature. At a glance, we can find in Fig. 1(b) the characteristic peak just at the Fermi level. In Fig. 1(c)-(e), we can see this characteristic peak splits into two symmetrical ones, and the growth of the pseudogap, which indicates that the system goes into an insulator, as temperature decreases. In the next, we change  $U$  for fixed  $T$ . Figure 2 shows the DOSs at  $U/t = 1.0, 2.5$  and  $4.0$ , along fixed  $t/(k_B T) = 18$ . In Fig 2(a) and (b), we can see the same characteristic peak(s) which are already shown in Fig. 1. In Fig 2(c), we can see the DOS which has no characteristic peak around the Fermi level. This result is same as the well-known one for the strongly correlated systems [10]. As the result, we have clearly shown that the change of the DOS from metallic states to the insulating states has many intermediate steps. The DOS of these intermediate states has the characteristic peak(s) around the Fermi level, in addition to the so-called Hubbard-band peaks.

Finally, we will increase the system size from 20 sites to 48 sites, and show the momentum-specified Lehmann's spectral functions, as well as the DOS. Figure 3 shows the DOS for  $U/t = 2.0$  and  $t/(k_B T) = 20$ . This result is consistent with previous ones shown in Fig. 1 and 2. We can see a concavity at  $\omega/t = 0$  and two new characteristic peaks at around  $\omega/t = \pm 0.4$ , as well as the so-called Hubbard peaks at about  $\omega/t = \pm 1.5$ . This result qualitatively agrees with the experiments on  $\text{CaVO}_3$  and  $\text{SrVO}_3$ . These experiments are performed by Tokyo Univ. group and Osaka Univ. group independently each other. The resultant photoemission spectra have a concavity at the Fermi level, and the peak structure a little below it. This result is entirely same between these two independent groups. In Fig 4, we show the momentum-specified Lehmann's spectral functions for  $k = 11\pi/24$  and  $k = 0$ . These momenta correspond to the new peak and the old lower-Hubbard peak, re-

spectively, as marked by  $\Downarrow$  and  $\Uparrow$  in Fig. 3. When  $k = 11\pi/24$ , the spectral shape is quite sharp but still has a finite width, while when  $k = 0$ , it is quite broad. That is, the new peak corresponds to the quasi coherent state, while the old peak corresponds to the strongly incoherent state.

Let us now qualitatively clarify the origin of these multi-peaked structures in connection with the infinite dimensional case. In the present case, we should note that the strength of  $U$  is limited within the intermediate(or small) values. Since, our system is 1-dimension, the long range order of the electron correlation is absent from the beginning. However, even the short range order will be so short as compared with the large  $U$  case. That is, the electron feels effective magnetic field which has no inter-site coherence. In this point of view, it becomes quite similar to the infinite dimensional systems. Therefore, we can understand that the characteristic peak(s) appear not only infinite dimensional systems, but also finite(1-, 2-, 3-) dimensional systems, if the correlation strength is intermediate. We have already preliminary calculated the cases of 2- and 3- dimensional systems with intermediate strengths, and have confirmed that the multi-peaked structures appear even in these cases.

#### IV. SUMMARY

We have calculated the momentum-specified Lehmann's spectral functions, as well as the total density of states for 1-dimensional half-filled Hubbard system using a quantum Monte-Carlo method. In the region of the intermediate correlation strength and temperature, we have found the DOS has the new characteristic peak(s) near the Fermi level. We have shown this new peaks are quasi coherent, while the well-known Hubbard-band peaks are strongly incoherent. We have also clarified that this multi-peaked structure in the intermediate region is rather insensitive to the dimension.

## **ACKNOWLEDGMENTS**

The authors would like to thank Professor S. Shin and Dr. R. Eguchi for providing us the photoemission(inverse-photoemission) spectrum data before publication. The present study was supported by the Joint Studies Program of The Graduate University for Advanced Studies.

## REFERENCES

1. R. Eguchi et al., unpublished.
2. X.Y. Zhang, M.J. Rozenberg and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. 70(1993), 1666.
3. O. Sakai and Y. Kuramoto, Solid State Commun. 89(1994), 307.
4. Steven R. White, Phys. Rev. B 46(1992), 5678.
5. M. Imada, A. Fujimori and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. 70(1998), 1039.
6. S. Maekawa, T. Toyama and S. Yunoki, Physica C 263(1996), 61
7. N. Tomita and K. Nasu, Phys. Rev. B 56(1997), 3779.
8. R.N. Silver, D.S. Sivia and J.E. Gubernatis, Phys Rev. B 41(1990), 2380.
9. S.R. White et al., Phys. Rev. B 40(1989), 506.
10. P.D. Landau, K.K. Mon and H.-B. Schüttler, Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics VII(Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1994), 113.

## FIGURES

FIG. 1. The DOSs for  $U/t = 2.0$  at  $t/(k_B T) = 1$  (a),  $t/(k_B T) = 10$  (b),  $t/(k_B T) = 15$  (c),  $t/(k_B T) = 25$  (d) and  $t/(k_B T) = 30$  (e).

FIG. 2. The DOSs for  $t/(k_B T) = 18$  at  $U/t = 1.0$  (a),  $U/t = 2.5$  (b) and  $U/t = 4.0$  (c).

FIG. 3. The DOS for  $U/t = 2.0$  and  $t/(k_B T) = 20$ .

FIG. 4. The momentum-specified spectral functions for  $k = 11\pi/24$  (a) and  $k = 0$  (b).

$$U/t = 2.0$$

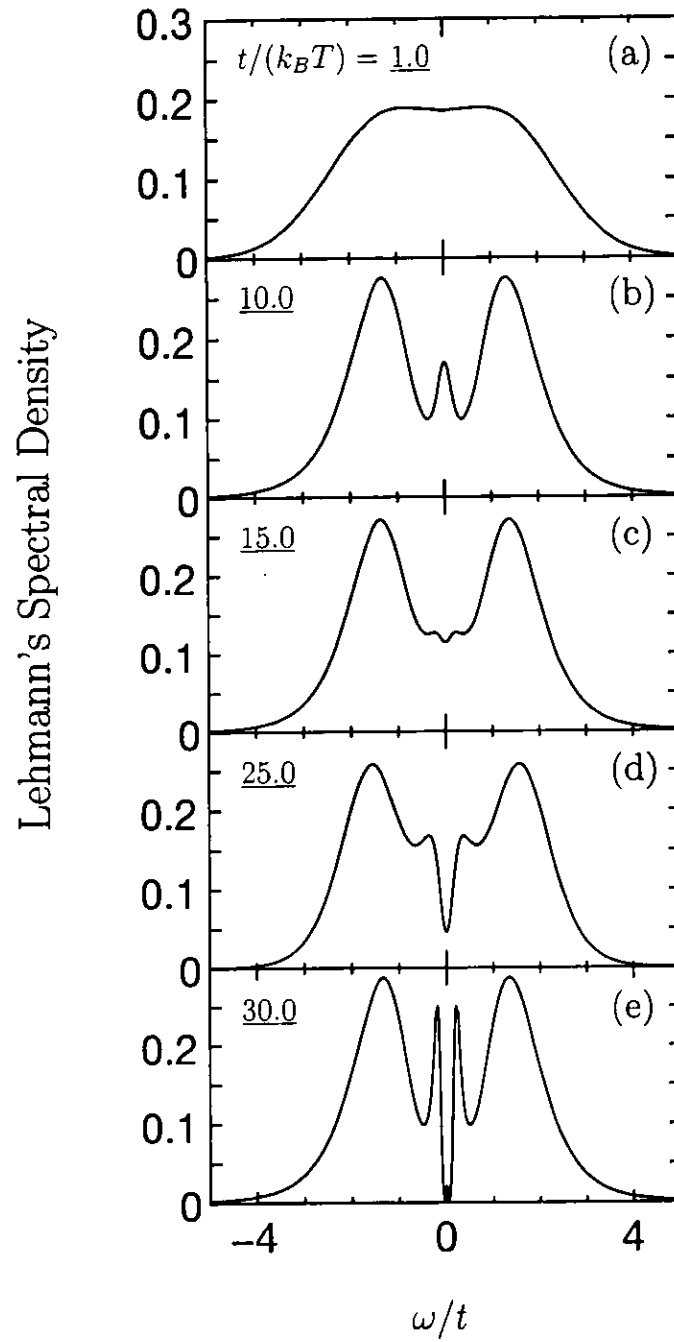


Figure 1 (M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu)

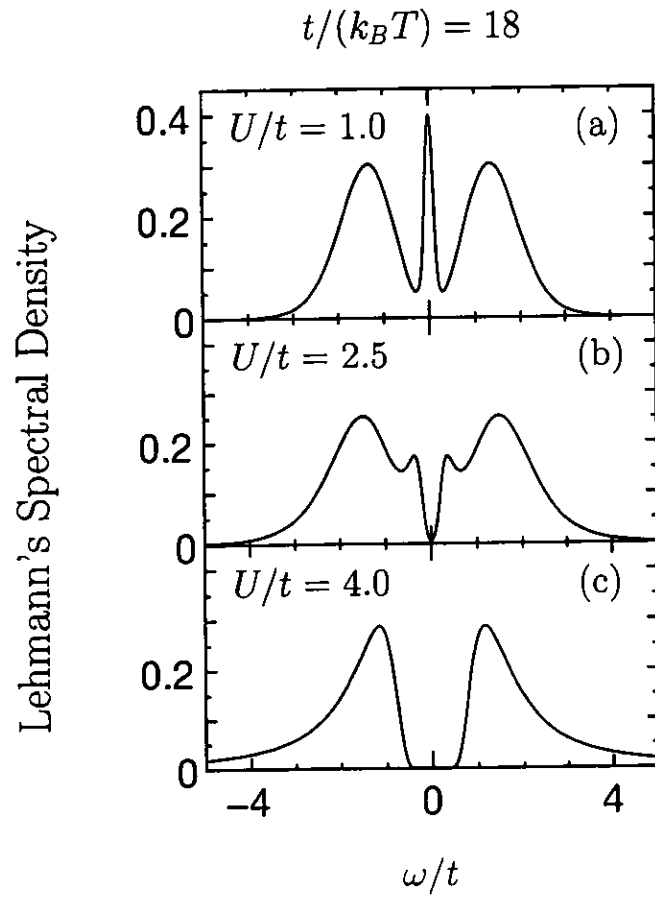


Figure 2 (M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu)

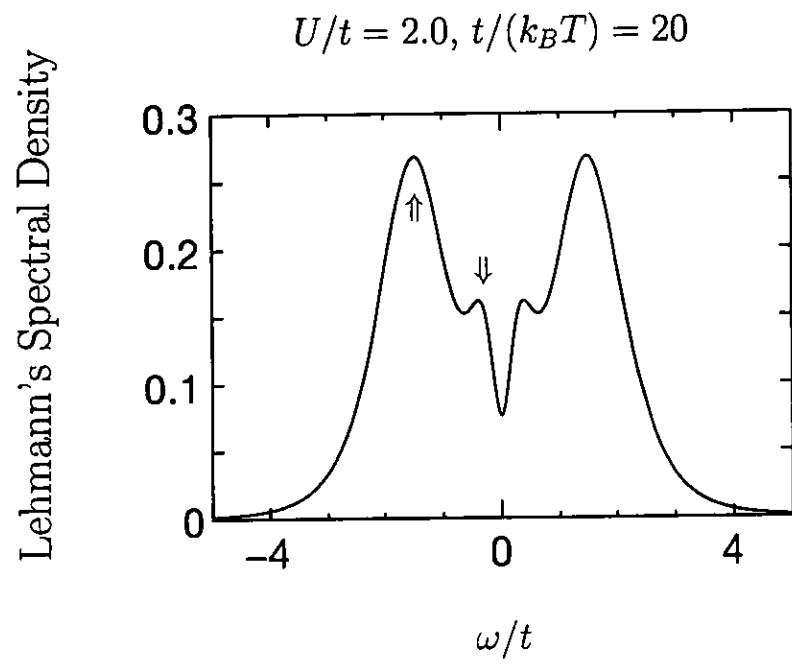


Figure 3 (M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu)



$$U/t = 2.0, t/(k_B T) = 20$$

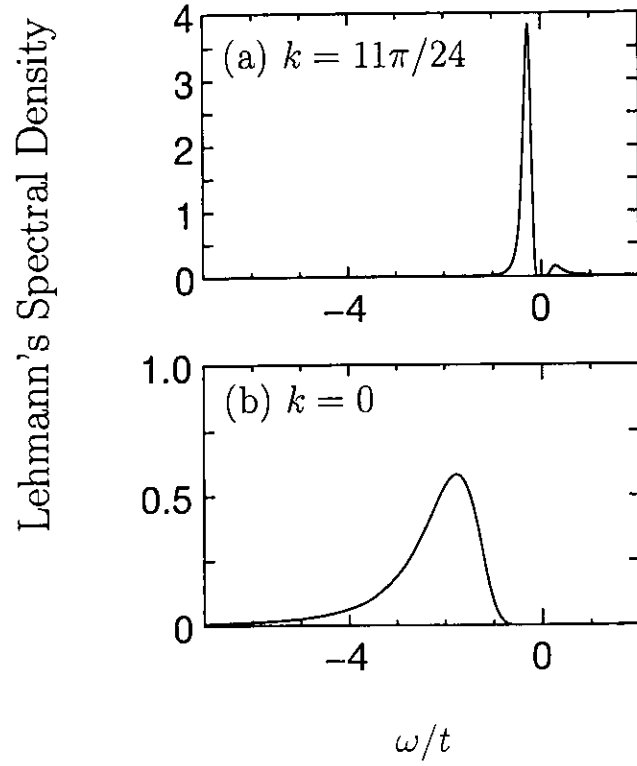


Figure 4 (M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu)

# Quantum Monte Carlo study for intermediately correlated many-electron systems

Masahiro Yamazaki<sup>1\*</sup>, Norikazu Tomita<sup>2</sup> and Keiichiro Nasu<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*The Graduate University for Advanced Studies, 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan*

<sup>2</sup>*Institute of Materials Structure Science, KEK, 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan*

## Abstract

We have theoretically studied the one-dimensional half-filled Hubbard model with various correlation strengths, and calculated the Lehmann spectra of momentum-specified one-body Green's functions, as well as the total density of states(DOS), using the quantum Monte Carlo method. In the region of intermediate correlation strength, we have found the DOS has new characteristic peaks near the Fermi level, in addition to the well-known upper and lower Hubbard-band peaks. We show these new peaks near the Fermi level come from quasi-coherent states, while the upper and lower Hubbard-band peaks come from strongly incoherent ones. This multi-peaked structure, appeared only in the intermediate region, is also shown to be quite insensitive to the dimensionality. Finally, we compare our results with the single impurity model, and give a rough explanation for the origin of this newly obtained multi-peaked structure. Our results also qualitatively agree with the recent experiments on  $\text{CaVO}_3$  and  $\text{SrVO}_3$  crystals.

---

\*fax: +81-298-64-2801, E-mail address: yamama@post.kek.jp

## I. INTRODUCTION

The photoemission spectroscopy is the most standard and contemporary method to determine the density of states(DOS) of valence electrons in solids. At present, the energy resolution of this photoemission spectrum(PES) overreaches a few meV, and the momentum resolution also has become high enough to clarify the dispersion relation of the valence band electron in detail. Thus, the photoemission spectroscopy can now clarify the natures of the electronic states more precisely than before. In particular, to clarify the natures of the electronic states just around the Fermi level is one of the most important issues in the solid state physics.

In connection with this high resolution photoemission spectroscopy, the nature of the electronic states around the Fermi level of the perovskite-type compounds such as  $\text{CaVO}_3$  and  $\text{SrVO}_3$  crystals is the matter of great interest in recent years. According to the most up-to-date experiments, a new peak structure has been discovered at around the Fermi level of these crystals, in addition to the well-known Hubbard-band peaks. This new peak at the Fermi level has such a twin structure, that its intensity is clearly suppressed just on the Fermi level, but enhanced at slightly below and above this level. These experiments are performed by Osaka Univ. group<sup>1</sup> and Tokyo Univ. group<sup>2</sup> quite independently. However, the resultant spectra are entirely same between these two groups. Thus, the origin of these new peaks, which are slightly below and above the Fermi level, has become a hot debating point.

From the theoretical point of view, the PES directly corresponds to the Lehmann spectrum of the one-body Green's function. Looking back on past theoretical studies for the Lehmann spectra, they were often calculated for the infinite dimensional Hubbard model by using the dynamical mean-field method<sup>3,4</sup>. While, in the cases of finite dimensions, they are often calculated by using the quantum Monte Carlo simulations<sup>5</sup>, and also by various other approximations. In particular, for one-dimensional systems, there are many studies including the exact results<sup>6</sup>.

In the infinite dimensional case, as is already well-known, a significant peak clearly appears at the Fermi level, if the inter-electron Coulomb repulsion is weak enough to keep the whole system in a metallic state. However, it has long been believed that, this peak-structure at the Fermi level is only the artifact of the infinite dimension. In fact, for the finite dimensional cases, many calculations are undertaken for the Lehmann spectra as mentioned above, but, in that spectra, no peak-structure is reported at around the Fermi level.

However, it should be noted that all these Monte Carlo studies have been restricted only within strongly correlated cases. Up to present, the quantum Monte Carlo method for one-, two- and three-dimensional systems in these strongly correlated cases, does not predict the appearance of such a peak around the Fermi level. Nevertheless, in the case of intermediate correlation, the presence or absence of such a peak is still not clarified.

For this reason, the purpose of the present paper is to clarify the DOS and the electronic property related with this new peak around the Fermi level. In particular, we focus mainly on intermediately(or weakly) correlated regions, concerning with the metal-insulator transition.

We calculate the one-body Green's functions of one-dimensional half-filled Hubbard system for various correlation strengths and temperatures, using the quantum Monte Carlo method<sup>7</sup>. The Lehmann's spectral functions of the one-body Green's functions are obtained by using the analytic continuation method. In the region of intermediate correlation strength, we will show some new peaks appear around the Fermi level, even in the case of one-dimension, just like the case of the infinite dimension. This new peak at the Fermi level splits into two peaks, as the temperature decreases or the on-site Coulomb repulsion increases. These theoretical results will be roughly examined in terms of a single impurity model, and will also be shown to be insensitive to the dimensionality. Our results also qualitatively agree with the aforementioned recent experiments on  $\text{CaVO}_3$  and  $\text{SrVO}_3$  crystals.

This paper is organized as follows: In Section II, we describe our model and method. The numerical results will be discussed in Section III. In Section IV, we give a summary of the present work.

## II. MODEL AND METHOD

We consider the Hubbard Hamiltonian( $\equiv\mathcal{H}$ ), which is represented by

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I, \quad (2.1)$$

$$\mathcal{H}_0 \equiv -t \sum_{\langle m, m' \rangle, \sigma} (a_{m\sigma}^\dagger a_{m'\sigma} + a_{m'\sigma}^\dagger a_{m\sigma}), \quad (2.2)$$

$$\mathcal{H}_I \equiv U \sum_m n_{m\uparrow} n_{m\downarrow}, \quad n_{m\sigma} \equiv a_{m\sigma}^\dagger a_{m\sigma}, \quad \sigma \equiv \uparrow, \downarrow, \quad (2.3)$$

where  $t$  is the transfer energy of an electron from a lattice site  $m$  to its nearest neighboring site  $m'$ , and  $\langle m, m' \rangle$  represents this nearest-neighbor relation.  $a_{m\sigma}^\dagger$  denotes the creation operator of an electron localized at the site  $m$  with the spin  $\sigma$ .  $U$  is the strength of the on-site Coulomb repulsion, and throughout of this paper all the energies are normalized by  $t$  ( $= 1.0$  eV). We will be concerned only with the half-filled case, and a periodic boundary condition is imposed for practical calculations. The path-integral formulation is already well-known, and has been given in the reference<sup>7</sup> in detail, so we repeat here only its outline. By the Trotter's formula and the discrete Hubbard-Stratonovitch transformation, we get a path-integral form for  $e^{-\beta\mathcal{H}}$  as

$$e^{-\beta\mathcal{H}} \rightarrow \int \mathcal{D}x \, T_+ \exp \left[ - \int_0^\beta d\tau \, h(\tau, x(m, \tau)) \right], \quad (2.4)$$

$$h(\tau, x(m, \tau)) \equiv \mathcal{H}_0(\tau) + \sqrt{\frac{U}{\Delta}} \sum_m x(m, \tau) (n_{m\uparrow}(\tau) - n_{m\downarrow}(\tau)). \quad (2.5)$$

Here,  $\beta \equiv 1/k_B T$ ,  $k_B$  is the Boltzmann constant,  $T$  is the absolute temperature.  $T_+$  in eq. (2.4) is the time ordering operator, and the time argument  $\tau$  ( $0 \leq \tau \leq \beta$ ) of the operators  $\mathcal{H}_0(\tau)$  and  $n_{m\sigma}(\tau)$  represents only this time ordering. The symbol  $\int \mathcal{D}x$  denotes the path-integral over the Ising spin variable  $x(m, \tau)$  which takes only 1 or  $-1$ , randomly.  $\Delta$  is the time interval of the Trotter's formula. Thus, the two-body term in eq. (2.3) is now reduced into a one-body Zeeman field, which fluctuates as a function of  $m$  and  $\tau$ .

Then, according to the reference<sup>7</sup>, we define the time evolution operator( $\equiv R(\tau, x)$ ) as

$$R(\tau, x) \equiv T_+ \exp \left[ - \int_0^\tau d\tau' \, h(\tau', x(m, \tau')) \right], \quad (2.6)$$

wherein  $x$  symbolically denotes a path  $x(m, \tau)$ , and this simple notation will be used hereafter. Now we can define the one-body thermal Green's function ( $\equiv \mathcal{G}(m, \tau, m', \tau', \sigma, x)$ ) along a given path  $x$  as

$$\mathcal{G}(m, \tau, m', \tau', \sigma, x) = -\text{sign}(\tau - \tau') \langle T_+ \tilde{a}_{m\sigma}(\tau) \tilde{a}_{m'\sigma}^\dagger(\tau') \rangle_x, \quad (2.7)$$

$$\langle \cdots \rangle_x \equiv \frac{\text{Tr}[\cdots R(\beta, x)]}{\text{Tr}[R(\beta, x)]}, \quad (2.8)$$

where  $\tilde{a}_{m\sigma}(\tau)$  is the Heisenberg representation of  $a_{m\sigma}$ , which is defined by

$$\tilde{a}_{m\sigma}(\tau) \equiv R^{-1}(\tau, x) a_{m\sigma} R(\tau, x). \quad (2.9)$$

While the ordinary thermal Green's function ( $\equiv \bar{\mathcal{G}}(m, \tau, \sigma)$ ) can be obtained after the path-integral as

$$\bar{\mathcal{G}}(m - m', \tau - \tau', \sigma) = \frac{\sum_{\{x\}} \text{Tr}[R(\beta, x)] \mathcal{G}(m, \tau, m', \tau', \sigma, x)}{\sum_{\{x\}} \text{Tr}[R(\beta, x)]}. \quad (2.10)$$

This path-integral or the summation over the path is the Monte Carlo calculation, which takes the weight of each path  $\text{Tr}[R(\beta, x)]$  into account.

The relations between the momentum-specified one-body Green's function ( $\equiv \bar{\mathcal{G}}(k, \tau, \sigma)$ ) with the wave-number ( $\equiv k$ ), and its Lehmann's spectral representation ( $\equiv A(k, \omega, \sigma)$ ) with the energy  $\omega$ , are given by

$$\bar{\mathcal{G}}(k, \tau, \sigma) = \sum_m e^{ik \cdot m} \bar{\mathcal{G}}(m, \tau, \sigma), \quad (2.11)$$

$$\bar{\mathcal{G}}(k, \tau, \sigma) = - \int d\omega \frac{e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\beta\omega}} A(k, \omega, \sigma). \quad (2.12)$$

We have obtained this spectral function  $A(k, \omega)$ , using the least-squares fitting method, and not employed the so-called maximum entropy method<sup>8</sup>. To avoid numerical errors, in practical numerical calculations, we also have used quadruple precision in the matrix multiplications and factorizations<sup>9</sup>, and thus, the smooth spectral functions have obtained without serious noise. It should be noted that our present method can completely reproduce various well-known theoretical results of quantum Monte Carlo calculations for the strongly correlated systems<sup>10</sup>. One of such results will be shown in next Section, for proof.

### III. RESULTS AND DISCUSSION

In order to get an overview for the metal-insulator transition, we, at first, show  $T$  and  $U$  dependencies of DOSs, using only a small size system (20 sites). Figure 1 shows the DOSs at  $t/(k_B T) = 1, 10, 15, 25$  and  $30$ , wherein we fixed  $U$  at  $U/t = 2.0$ . In Fig. 1(a), we can see the normal metallic state, which is quite fuzzy around the  $-2t\cos(k)$  band, because of its high temperature,  $t/(k_B T) = 1$ . In Fig. 1(b) with  $t/(k_B T) = 10$ , on the other hand, we can find a characteristic peak just at the Fermi level. In Fig. 1(c)-(e) with much low temperatures, we can see this characteristic peak splits into two symmetrical ones, and the growth of the pseudogap, which indicates that the system undergoes to an insulator, as temperature decreases. Next, we change  $U$  for fixed  $T$ . Figure 2 shows the DOSs at  $U/t = 1.0, 2.5$  and  $4.0$ , with fixed  $T$ ,  $t/(k_B T) = 18$ . In Fig 2(a) and (b), we can see the same characteristic peak(s) which are already shown in Fig. 1. In Fig. 2(c), we can see that the DOS has no peak around the Fermi level. This result is same as the well-known DOS already reported for the strongly correlated systems<sup>10</sup>. Thus, we have shown clearly that the change of the DOS from the metallic state to the insulating one has many intermediate steps. The DOSs of these intermediate states have the characteristic peak(s) around the Fermi level, in addition to the so-called Hubbard-band peaks. Here, we should note again that for the large  $U$  cases, our present theory can completely reproduce the DOS which is already well-known, and it proves the reliability of our calculations.

Next, we will increase the system size from 20 sites to 48 sites, and show the momentum-specified Lehmann's spectral functions, as well as the DOS. Figure 3 shows the DOS for  $U/t = 2.0$  and  $t/(k_B T) = 20$ . Now, we can see the spectral shape around the Fermi level more distinctively. That is, the spectral intensity is suppressed just at the Fermi level, and new peaks appear at slightly below and above the Fermi level, in addition to the so-called Hubbard-band peaks. These peaks are marked by two arrows at  $\omega/t = -0.4$  and  $-1.5$ . In order to clarify the electronic states much more in detail, we show in Fig 4, the momentum-specified Lehmann's spectral functions for  $k = 11\pi/24$  and  $k = 0$ . These momenta just

correspond to the new peak and the conventional lower Hubbard peak, respectively, and they are marked by  $\Downarrow$  and  $\Uparrow$  in Fig. 3. At  $k = 11\pi/24$ , the spectral shape is quite sharp but still has a finite width, while at  $k = 0$ , it is quite broad. Thus, the new peak corresponds to the quasi-coherent(or weakly incoherent) plane-wave state, while the conventional peak corresponds to the strongly incoherent one. Consequently, we can say that the electronic states can no longer keep the simple one-body type cosine-band nature. Before the system goes into an insulating state, each one-electron state has been already greatly reconstructed.

Let us now qualitatively clarify the origin of these multi-peaked structures in connection with the infinite dimensional case. Since our system is a half-filled one, the antiferromagnetic correlation dominates the electrons. However, as is well-known, in the case of the infinite dimensional system, this antiferromagnetic order has no inter-site coherence. Thus, we can infer that this absence of inter-site coherence is the origin of the new peak structure. In the present case, we should note that the strength of  $U$  is limited within the intermediate(or small) values. Since our system is one-dimension, the real long range order is absent from the beginning. However, the spatial extent of the antiferromagnetic spin correlation helps us to understand the origin of this multi-peaked structure. For this reason, let us see the spin correlation function( $\equiv f(m - m')$ ), which is defined by

$$f(m - m') \equiv \langle\langle \mathbf{s}_m \cdot \mathbf{s}_{m'} \rangle\rangle, \quad \langle\langle \dots \rangle\rangle \equiv \frac{\text{Tr}[\dots e^{-\beta\mathcal{H}}]}{\text{Tr}[e^{-\beta\mathcal{H}}]}, \quad (3.1)$$

$$\mathbf{s}_m \equiv \sum_{\sigma, \sigma'} a_{m\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} a_{m\sigma'}, \quad \boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z), \quad (3.2)$$

where  $\boldsymbol{\sigma}$  denotes the Pauli matrix. In Fig 5, we show the spin correlation functions at  $U/t = 4.0, 2.0$  and  $1.0$ , with fixed  $T, t/(k_B T) = 10$ . We can clearly see that the spatial extent of the spin correlation becomes shorter and shorter, as  $U$  decreases. At  $U/t = 1.0$  and  $2.0$ , we can see that the intermediately correlated systems have a weak inter-site antiferromagnetic coherence. Thus, the situation becomes similar to the infinite dimensional system, although it is qualitative.

Consequently, the effective magnetic field, which comes from eq. (2.5) and applied on an individual electron at each lattice site, has only a weak inter-site coherence. For this



reason, we, here, focus only on a single lattice site, for example,  $m = 0$ , and as a very rough approximation, we assume that the Zeeman field  $x(m, \tau)$  is static and not zero only in this site  $m = 0$ . Within this rough picture, we can regard our system as a single-site magnetic impurity system. In the following, we try to qualitatively explain the origin of the three peaked structure (Fig. 1(b)) in terms of this single impurity model<sup>11</sup>.

Now, we consider the simplified Hamiltonian( $\equiv H$ ) as

$$H = H_0 + H_1, \quad (3.3)$$

$$H_0 \equiv \sum_{k,\sigma} E_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}, \quad a_{k\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{-ik \cdot m} a_{m\sigma}, \quad (3.4)$$

$$H_1 \equiv U_e \sum_{\sigma} a_{0\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma}^z a_{0\sigma}, \quad (3.5)$$

where  $E_k$  is the energy of an electron having a wave-number  $k$ , and  $N$  is the total number of the lattice sites in our system.  $U_e$  is the effective magnetic field at the site  $m = 0$  explained above. We assume that this  $U_e$  is of the same order as that of  $U$ . The lattice Green's function( $\equiv G$ ) corresponding to  $H$  at the site  $m = 0$  is given by

$$G = \frac{1}{G_0^{-1} \pm U_e}, \quad (3.6)$$

where  $G_0$  is the lattice Green's function corresponding to  $H_0$  at  $m = 0$ , and is given by

$$G_0 = \int dE' \frac{\rho(E')}{E + i\epsilon - E'}, \quad (3.7)$$

$$\rho(E) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(E - E_k). \quad (3.8)$$

Figure 6 shows a typical case of eq. (3.6), where, a semi-elliptical DOS is assumed for  $\rho(E)$ . In Fig. 6(a), the solid lines represent  $\text{Re}(G_0)$  and  $\rho(E)$ , and the long- and short-dashed lines represent  $+1/U_e$  and  $-1/U_e$ , respectively. In Fig. 6(b), we can see a three-peak structure arising from the poles of  $G$ . That is, the so-called resonance peak in the continuum and the isolated peak. This resonance peak corresponds to the one-body type plane-wave state extending over the whole crystal. While, the isolated peak corresponds to a localized state within this site  $m = 0$ , and the origin of this localization is the inter-electron repulsion

$U$  itself. Because of the thermal and quantum fluctuations, this resultant DOS will be broadened as schematically shown by the thick line in Fig. 6(b). Thus, by this single impurity model, we can roughly reproduce the three peaked structure. Consequently, the isolated peak corresponds to the aforementioned incoherent peak, while, the resonance peak corresponds to the coherent one.

This single impurity picture is too rough to explain the change from the three peaked structure to the four peaked one. This change is nothing but the metal-insulator transition, being a collective property, and can only be clarified by our present Monte Carlo theory.

Here, we should also note that this scheme mentioned above is completely free from the dimensionality. In this connection, we have already performed the preliminary calculations in the cases of two- and three-dimensional half-filled systems with intermediate correlation strengths, and have confirmed that the multi-peaked structures also appear even in these systems.

Finally, let us compare our results with the experiments. According to the recent experimental results on  $\text{CaVO}_3$  and  $\text{SrVO}_3$ , a new peak structure has been observed around the Fermi level, in addition to the well-known Hubbard-band peaks. That is, the PESs are suppressed just at the Fermi level, but enhanced at slightly below and above it. By our calculation shown in Fig. 3, same characteristic peaks are obtained only in the case of the intermediate correlation strength. These two results agree qualitatively.

#### IV. SUMMARY

We have calculated the momentum-specified Lehmann's spectral functions, as well as the total density of states, for one-dimensional half-filled Hubbard systems, using a quantum Monte Carlo method. In the cases of the intermediate correlation strengths, we have found the DOS has the new characteristic peak(s) near the Fermi level, in addition to the so-called Hubbard-band peaks. Our results predict that the new characteristic peak at the Fermi level splits into two symmetrical ones, as the metal-insulator transition proceeds. We have

also shown that these new peaks correspond to the quasi-coherent states, while the well-known Hubbard-band peaks correspond to the strongly incoherent ones. This multi-peaked structure in the intermediate region is also shown to be insensitive to the dimensionality.

### **ACKNOWLEDGMENTS**

The present study was supported by the Joint Studies Program of The Graduate University for Advanced Studies.

## REFERENCES

- <sup>1</sup> A. Sekiyama, S. Suga *et al.*, private communication.
- <sup>2</sup> R. Eguchi, S. Shin *et al.*, private communication.
- <sup>3</sup> X.Y. Zhang, M.J. Rozenberg and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **70**(1993), 1666.
- <sup>4</sup> O. Sakai and Y. Kuramoto, *Solid State Commun.* **89**(1994), 307.
- <sup>5</sup> Steven R. White, *Phys. Rev. B* **46**(1992), 5678.
- <sup>6</sup> S. Maekawa, T. Toyama and S. Yunoki, *Physica C* **263**(1996), 61.
- <sup>7</sup> N. Tomita and K. Nasu, *Phys. Rev. B* **56**(1997), 3779.
- <sup>8</sup> R.N. Silver, D.S. Sivia and J.E. Gubernatis, *Phys. Rev. B* **41**(1990), 2380.
- <sup>9</sup> S.R. White *et al.*, *Phys. Rev. B* **40**(1989), 506.
- <sup>10</sup> P.D. Landau, K.K. Mon and H.-B. Schüttler, *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics VII* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1994), 113.
- <sup>11</sup> Yu. A. Izyumov, *Theory of an Impurity State in a Crystal, Advances in Physics* (Phil. Mag. Supplement), **14**(1965), 569.
- <sup>12</sup> M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu, to be published in *J. Phys. Chem. Solids*.

## FIGURES

FIG. 1. The DOS at  $t/(k_B T) = 1$  (a),  $t/(k_B T) = 10$  (b),  $t/(k_B T) = 15$  (c),  $t/(k_B T) = 25$  (d) and  $t/(k_B T) = 30$  (e), with fixed  $U/t = 2.0$ .

FIG. 2. The DOS at  $U/t = 1.0$  (a),  $U/t = 2.5$  (b) and  $U/t = 4.0$  (c), with fixed  $t/(k_B T) = 18$ .

FIG. 3. The DOS for  $U/t = 2.0$  and  $t/(k_B T) = 20$ .

FIG. 4. The momentum-specified Lehmann's spectral functions for  $k = 11\pi/24$  (a) and  $k = 0$  (b).  $U/t$  and  $t/(k_B T)$  are the same as in Fig. 3.

FIG. 5. The spin correlation functions for  $U/t = 4.0$ ,  $U/t = 2.0$  and  $U/t = 1.0$ , with fixed  $t/(k_B T) = 10$ , and the inset represents  $f(m - m')/f(0)$ . The system size is 48 sites.

FIG. 6. Schematic representation for the three peaked structure (thick line). (a): the lattice Green's function  $G_0$  (solid lines),  $+1/U_e$  (dashed line) and  $-1/U_e$  (short dashed line). (b): the dashed and short dashed lines represent  $-\frac{1}{\pi}\text{Im}(G)$ .

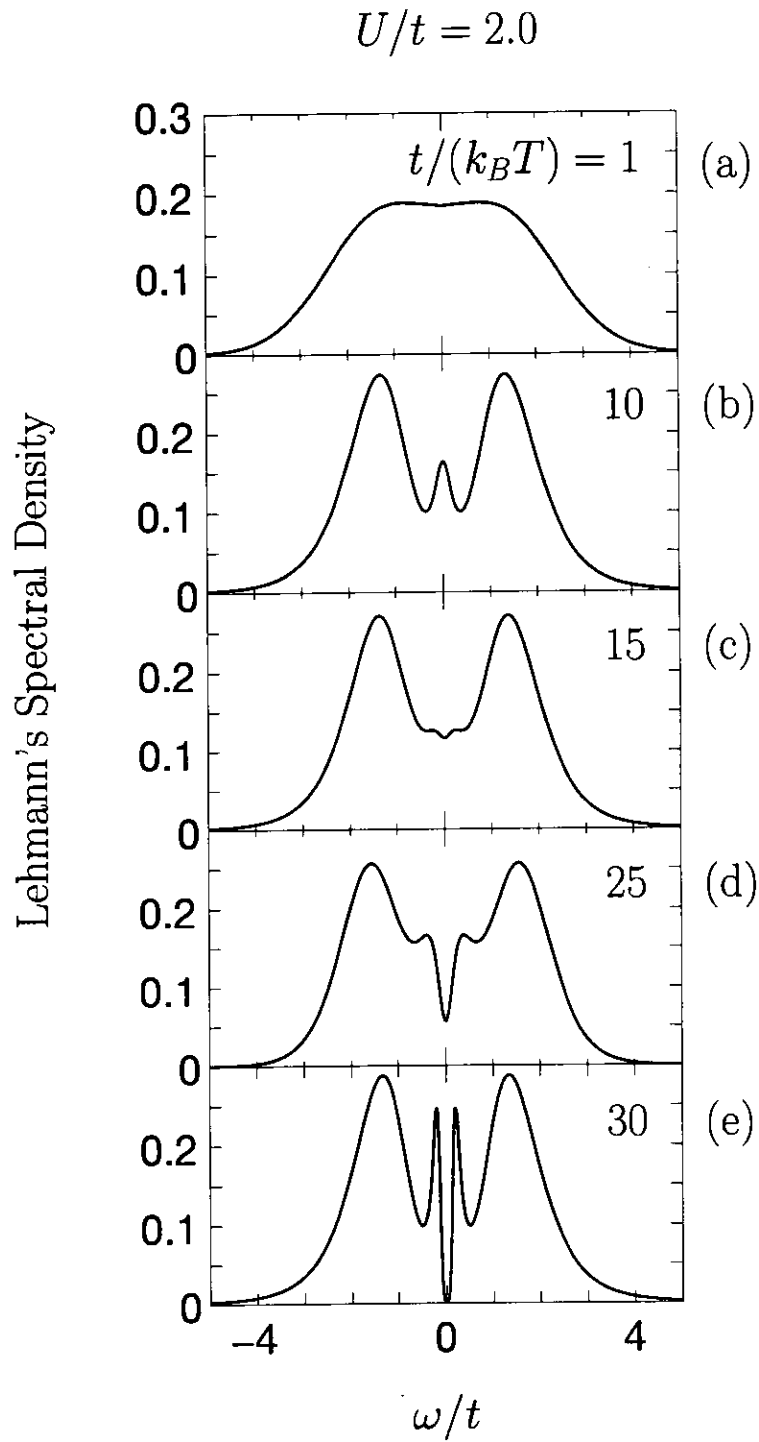


Figure 1 (M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu)

$$t/(k_B T) = 18$$

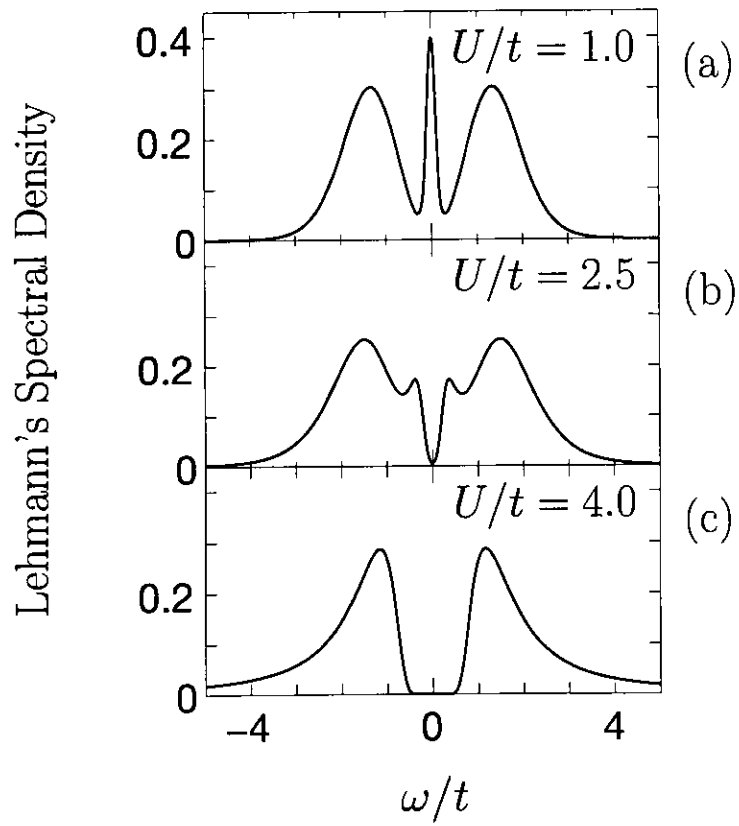


Figure 2 (M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu)

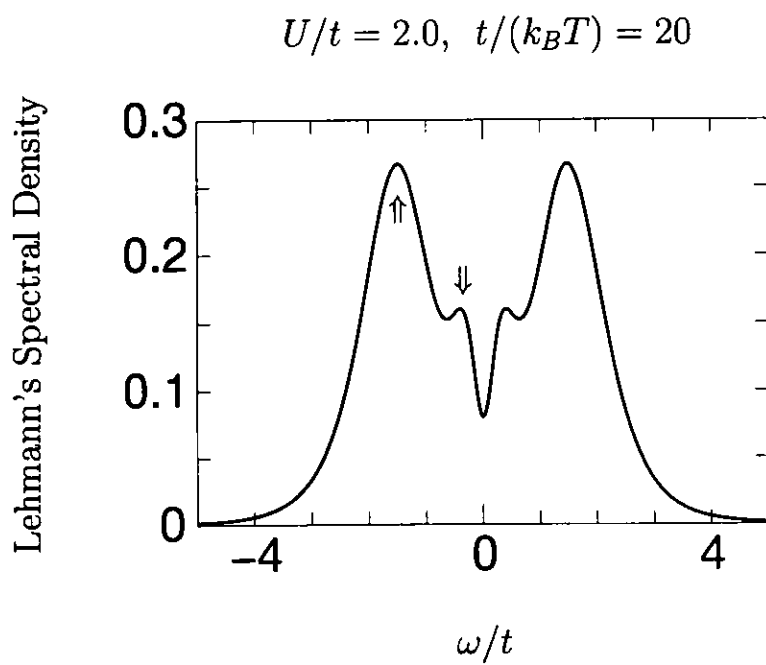


Figure 3 (M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu)



$$U/t = 2.0, \quad t/(k_B T) = 20$$

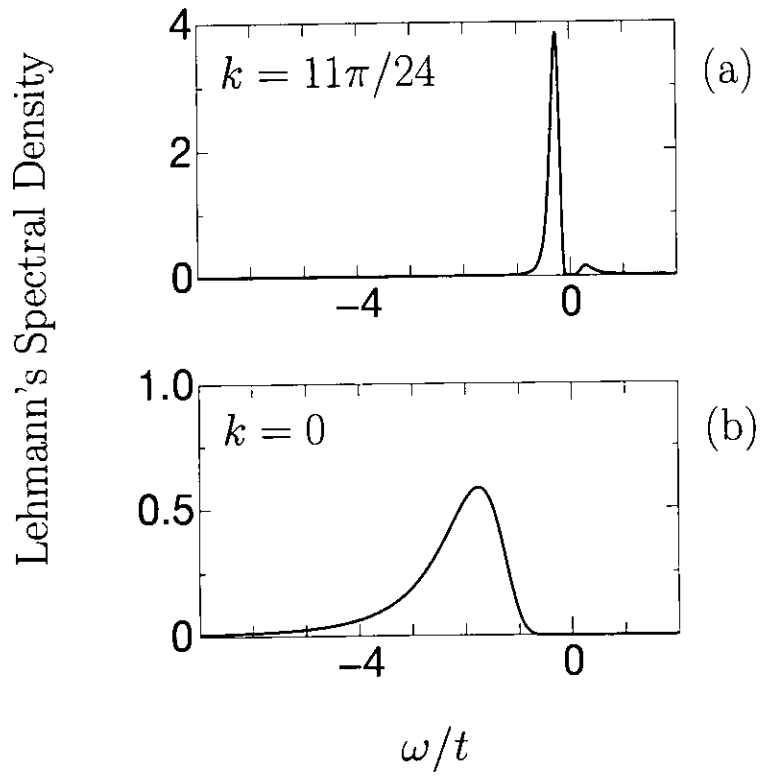


Figure 4 (M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu)

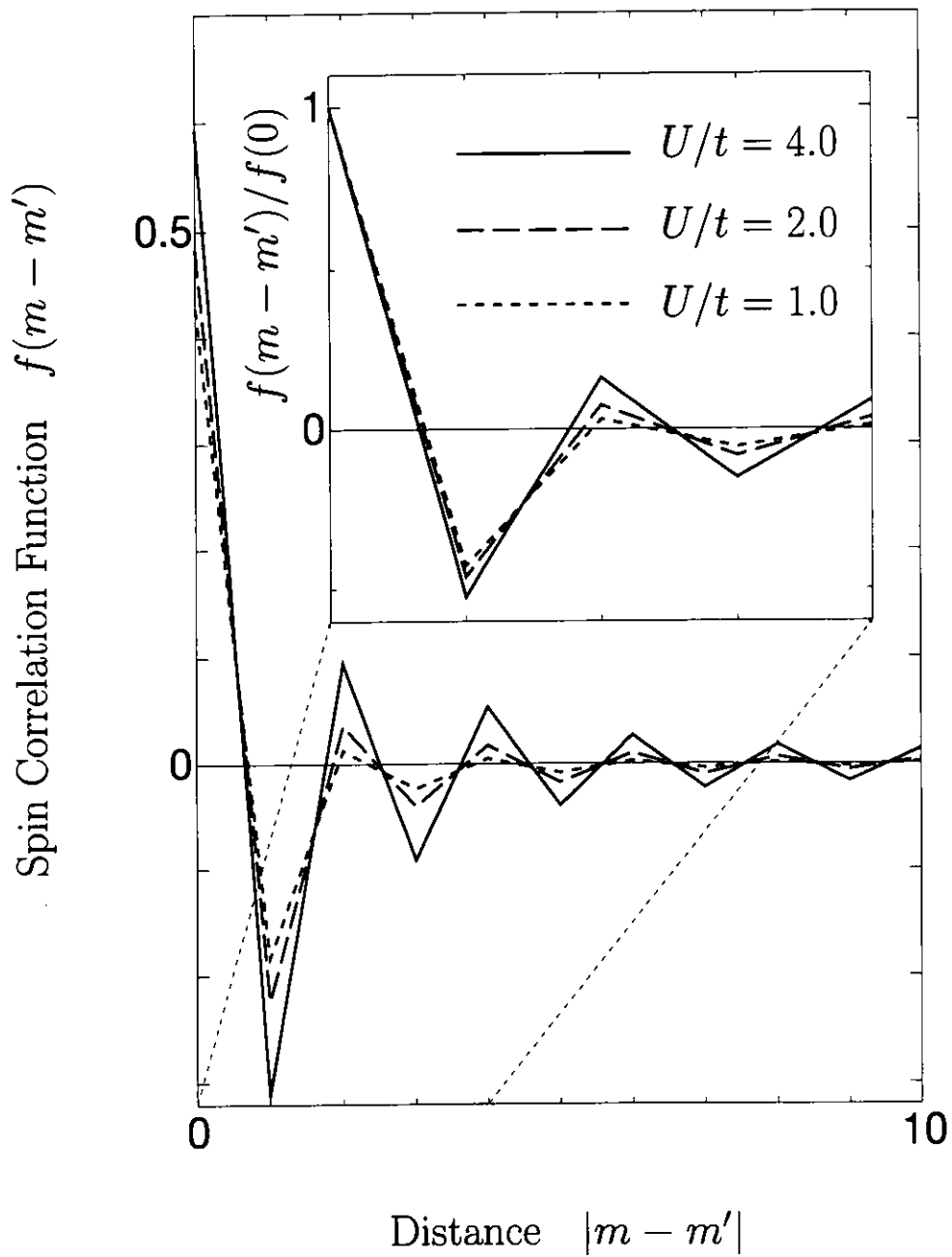


Figure 5 (M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu)

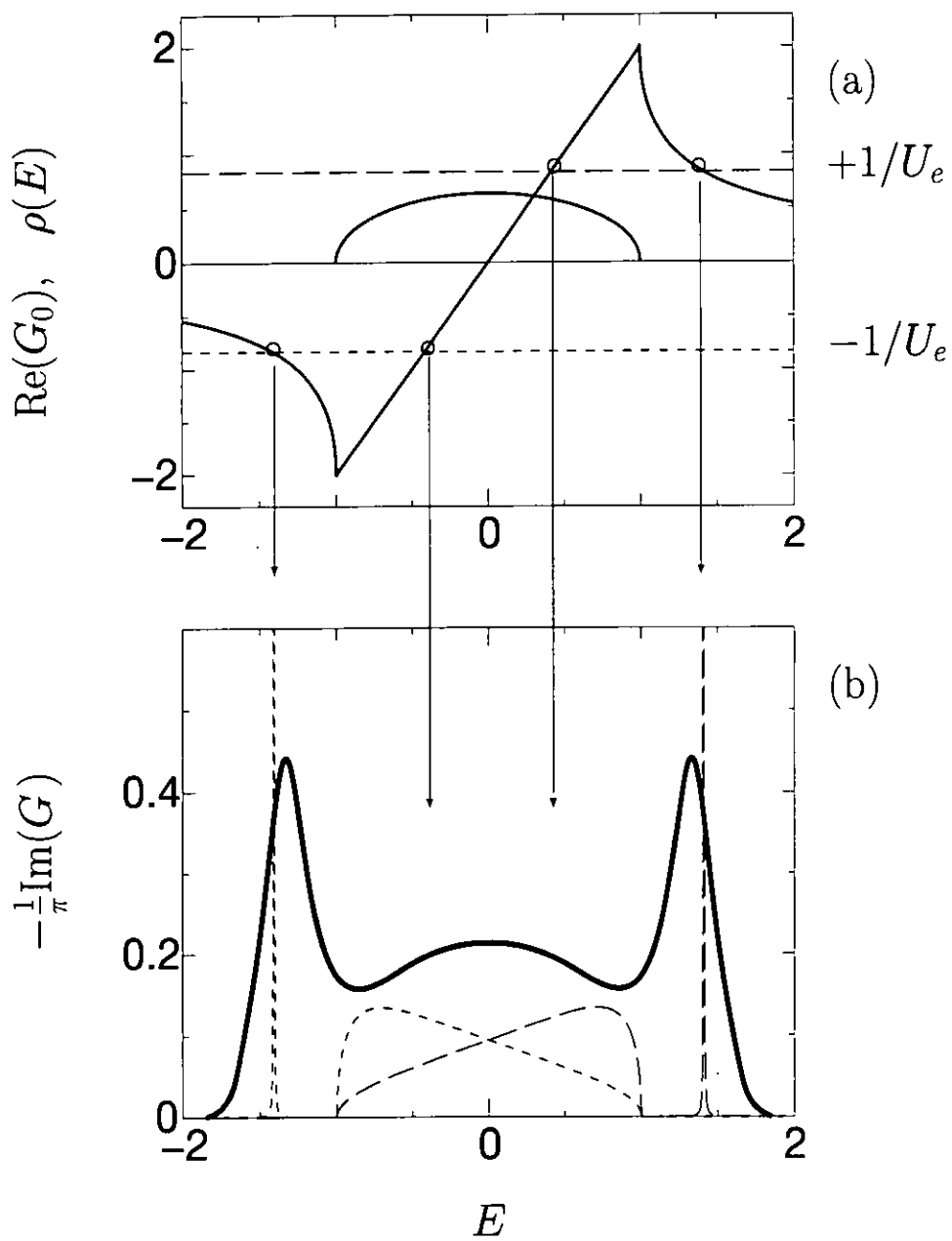


Figure 6 (M. Yamazaki, N. Tomita and K. Nasu)