

氏 名 吉 凱

学位（専攻分野） 博士(理学)

学位記番号 総研大甲第744号

学位授与の日付 平成16年3月24日

学位授与の要件 数物科学研究科 物質構造科学専攻

学位規則第4条第1項該当

学位論文題目 Path-Integral Theory for Photoemission

Spectra of Electron-Phonon Coupled Systems

論文審査委員

主査 教授

門野 良典

教授

安藤 正海

教授

那須 奎一郎

教授

河田 洋

助教授

岩住 俊明

講師

鈴木 正人 (大阪市立大学)

## Abstract

It has been a long-standing question in solid state physics, how the electron-phonon (e-ph) interaction influences the electronic energy band structures, and finally determines a material to become an insulator, metal or superconductor. Since the photoemission spectrum can directly probe this structure of electronic energy bands and topology of Fermi surface, it has become one of the most important measurements for the experimental studies. In the angle resolved photoemission spectra (ARPES), the binding energy can now be measured as a function of each given momentum. With the rapid progress of this high resolution ARPES, the electronic energy band structure can now be discerned in the scale of a few meV. Based on this technical development, quite a lot of new properties associated with e-ph interaction have been discovered in the normal metallic states as well as in the superconducting (SC) ones, signifying direct and clear evidences for the importance of the e-ph interactions. On the other hand, theoretical studies for this e-ph coupling already have a long history. In the case of a single electron coupled with phonons, it has been investigated in detail, by the ordinary perturbation theory, and also by the unitary transformation methods. As for the many-electron system coupled with phonons, the so-called Migdal-Eliashberg (ME) theory, and also adiabatic or mean field approximation are often used to clarify the energy band structures, in connection with various phase transition phenomena, such as the charge density wave (CDW) states and superconductor ones from metallic states. In some cases, systematic theoretical methods have already been devised to take into account high order corrections, which are not included in the ordinary perturbation theories. However, these existing theories seem to be not so useful to clarify the aforementioned ARPES, since it spans the whole momentum region from the Fermi level ( $\equiv E_F$ ) to the bottom of the valence band. According to recent experimental results, it has become clear that the ARPES evolve quite drastically as the momentum changes from  $E_F$  to the band bottom. This spectral evolution appears quite universal for a wide varieties of e-ph systems, especially the intermediately coupled metallic ones. However, its origin seems beyond the conventional approximation theories mentioned above. Thus, the problem how e-ph interaction dominates the spectral shape has now emerged as a new challenge for the theory of solid state physics.

In this work, we present a new path-integral theory to calculate the ARPES of e-ph coupled systems. Our main purpose of this paper is to clarify the impact of e-ph interaction on the lineshape of ARPES. We consider a many-electron system coupled with Einstein phonons, which is often called Holstein model. This model has been studied extensively, with various interests ranging from the

competition between metallic, CDW and SC phases, to the energy gap opening, by perturbative and non-perturbative methods. In our numerical calculation, the path-integral is performed by the quantum Monte Carlo (QMC) simulation. Thus it is completely free from any other approximations. Given the QMC data of imaginary time Green's function, we reproduce the spectral function by the analytic continuation. By this means, we systematically study the spectral properties of the e-ph coupled systems based on the one-dimensional and two-dimensional (2D) Holstein models under various conditions. We find the band structure is greatly modified by the multiple scattering effect of electron with phonons, even if the whole system is still metallic and the e-ph coupling strength is intermediate. Around the band bottom, the spectrum takes a broad Gaussian, indicating the electron in this state is nearly localized and incoherent. While near the  $E_F$ , the spectral shape is characterized by an asymmetric two-headed Lorentzian, which means the electron in this state is almost coherent with a plane wave nature, extending over all the crystal. There are also dimensionality effects on the phonon peaks, which make them most clearly observed in the 2D non-half-filled cases with no CDW gap. Our results qualitatively agree with recent experiments of high resolution ARPES on Be(0001) surface and  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ .

## 論文審査結果の要旨

固体電子論の究極の目的は、Fermi 準位近傍にいる電子のエネルギーと運動量の関係（つまり、バンド構造）を知る事にある、と言っても過言ではない。従来から汎用されている平均場理論でこのバンド構造を計算すると、通常は、Fermi 準位を上から下へ過ぎる一本の線のみが得られる。しかし、最近の角度分解光電子分光法の急速な進歩により、このような単純な“一筆書き”の描象は否定されようとしている。典型的な単純金属と目される Be の表面電子系に関する光電子測定によれば、スペクトル形状は、Fermi 準位近傍では、二重ピークを持つ非対称ローレンツ型となるが、バンドの底では幅の広いガウス型になる。しかも、このような、二重ピークからガウス形への変化は、高温超伝導体として知られる銅酸化物等でも観測されており、金属状態にある多電子系に普遍的に見られる現象である事が判明してきた。

この状況に鑑み、吉凱君は、上記の現象が格子振動と結合した巨視的多電子系の特徴であると考え、この系を対象にして経路積分法により光電子スペクトルを計算する事を試みた。経路積分法は、他に如何なる近似をも使わない方法ではあるが、実際にこの方法で数値計算を実行する際は、統計的重率の高い経路を効率よく集める事が肝心となる。

これに関し同君はまず、従来から汎用されて来たメトロポリス法が、今回の問題に対し収束が遅く不十分である事を示した。そして、その代わりに格子の古典的運動を記述する仮想的速度場を新たに導入し、これと電子系とを結合させてニュートン力学を解き、逐次的に経路を発生させる、と云う古典・量子混成法が最適である事を明らかにした。

経路積分法の結果では、通常はスペクトルが虚時間表示で得られる。従って、実験と直接比較するには、虚時間表示からエネルギー表示へ正確に変換する事も要求される。これには、従来最小二乗法や最大エントロピー法等が使われて来たが、同君は、今回の問題にはこれらの既存の方法は大変効率が悪く不相当である事を示し、その代わりにスペクトルそのものを乱数と見做し、最適なものを試行錯誤で決定していく「乱雑スペクトル法」が最適である事を見出した。

同君は、このようにして現存する経路積分理論の種々の難点を克服し、角度分解光電子スペクトルを計算する事に成功した。その結果、金属的状态にある多電子系が中間的強度の電子・格子相互作用を有する場合、その光電子スペクトルは、Fermi 準位近傍では、二重ピークを持つ非対称ローレンツ型となり、この領域の電子は、コーヒーレントな平面波的状态にある事が示された。一方、バンドの底では、スペクトル形状は、幅の広いガウス型になり、この領域の電子はイン・コーヒーレントな擬局在状態にある事が示された。これらの結果は、世界に先駆けた理論的成果であり、ごく最近 ALS のランザーラ等によって得られた銅酸化物に関する実験結果とも良く整合する。

以上、本論文により得られた知見は、専門的にも総合的にも極めて水準の高い研究であると認められる。従って、数物科学研究科物質構造科学専攻の博士学位論文としてふさわしい内容を持つと判断した。