

課題名 (タイトル) :

## 多軌道強相関電子系における電子状態の研究

利用者氏名 : 渡部 洋

所属 : 和光研究所 基幹研究所 柚木計算物性物理研究室

## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年、遷移金属酸化物において、軌道自由度が重要な役割を果たす物質の研究がさかんに行われている。これらの物質が示す興味深い現象を、単純な理論モデルを構築し、解析することで明らかにするのが本研究の目的である。具体的には、5d 系遷移金属酸化物に特有な強いスピン軌道相互作用がもたらす、新たな金属絶縁体転移と磁気秩序についての解析を行った。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

層状ペロブスカイト構造を有する遷移金属酸化物である  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  と  $\text{Sr}_2\text{RhO}_4$  を記述する 3 軌道ハバードモデルを構築し、変分モンテカルロ法を用いて基底状態の性質を解析した。スピン軌道相互作用を含んだ一体部分にグッツヴィラー因子と電荷に関するジャストロー因子を作用させた試行波動関数を用い、変分パラメータを最適化することで基底状態の波動関数を決定した。これには数十個のパラメータを同時に最適化する必要があるが、一般には困難であるが、stochastic reconfiguration という計算手法を用いてこれを可能にした。

さらにこの波動関数を用いて軌道・スピン・電荷の構造因子、自発磁化などを計算することで電子状態を明らかにし、実験結果との比較を行いながら理論の妥当性を検証した。

## 3. 結果

電子間のクーロン相互作用とスピン軌道相互作用をパラメータとした基底状態相図を得ることが出来た。その結果、スピン軌道相互作用がクーロン相互作用と協力的に働いて、新たなタイプのモット転移 (金属-絶縁体転移) を引き起こすことがわかった。これにより、スピン軌道相互作用が大きい状況では電子間のクーロン相互作用が小さくても絶縁体になり得ることを示すことが出来た。これは Ir 系酸化物に対する実験結

果と一致している。

また、計算から得られた各種物理量は実験で観測された電子状態や磁気構造を定量的にもよく再現しており、計算の妥当性を支持している。

## 4. まとめ

数値シミュレーションを用いて 3 軌道ハバードモデルを解析し、スピン軌道相互作用がもたらす新たなタイプの金属絶縁体転移の存在を示すことが出来た。これはスピン軌道相互作用が大きい  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  が絶縁体、小さい  $\text{Sr}_2\text{RhO}_4$  が金属であるという実験事実とよく一致している。本研究結果は、強相関電子系における軌道自由度の役割を明らかにし、さらなる進展に貢献すると期待される。

## 5. 今後の計画・展望

スピン軌道相互作用によって顕在化するようになった軌道自由度を利用した、新たな超伝導状態を理論的に探索し、実験グループへの新規物質創成を提案する。また、同様に軌道自由度が重要とされている鉄系超伝導体の発現機構を明らかにする。これらを通じて多軌道系における超伝導機構の普遍的な理解を得ることを目標とする。

## 6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

多軌道系における金属-絶縁体に関しては、これまでに一定の成果を上げることが出来た。ただし、超伝導状態に関してはより詳細で大規模な計算が必要になると考えられる。今後は並列化プログラミングを利用することで計算時間を短縮し、それらを可能にする予定である。

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

論文

1. Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, and Seiji Yunoki,  
“Microscopic Study of a Spin-Orbit-Induced Mott Insulator in Ir Oxides”,  
Physical Review Letters **105**, 216410 (2010).

【国際会議などの予稿集、proceeding】

proceeding

2. Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, and Seiji Yunoki,  
“Variational Monte Carlo study of two-dimensional strong spin-orbit coupling system:  
Novel Mott insulating state in Ir oxide”, to be appeared in Journal of Physics: Conference Series.
3. Tomonori Shirakawa, Hiroshi Watanabe, and Seiji Yunoki,  
“Variational cluster approximation study of Mott transition with strong spin-orbit coupling”,  
to be appeared in Journal of Physics: Conference Series.

【国際会議、学会などでの口頭発表】

4. Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, and Seiji Yunoki:  
“Microscopic study of spin-orbit-induced Mott insulator in Ir oxides”  
New Developments in Spintronics, oral session, RIKEN, Wako, Japan, August 11, 2010.
5. 渡部洋, 白川知功, 柚木清司:  
「Ir 酸化物におけるスピン軌道相互作用誘起モット転移」  
日本物理学会 2010 年秋季大会, 25aXP-4 (口頭発表), 大阪府立大学, 2010 年 9 月 23~26 日.

【その他】

ポスター発表

6. Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, and Seiji Yunoki:  
“Variational Monte Carlo study of two-dimensional strong spin-orbit coupling system:  
Novel Mott insulating state in Ir Oxide”  
The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, M099 (poster session),  
Santa Fe, New Mexico, USA, June 28-July 2, 2010.
7. 渡部洋, 白川知功, 柚木清司:  
「Ir 酸化物におけるスピン軌道相互作用誘起モット絶縁体の理論的研究」  
第 4 回物性科学領域横断研究会, P1-29 (ポスター発表), 東京大学武田ホール, 2010 年 11 月 13 日~11 月 15 日.
8. Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, and Seiji Yunoki:  
“Theoretical study of a novel spin-orbit-induced Mott insulator in Ir oxides”  
The 4<sup>th</sup> Indo-Japan Seminar, No.8 (poster), University of Tokyo, Japan, February 1-2, 2011.