

課題名 (タイトル) :

スピン軌道相互作用が強い強相関電子系における電子状態の数値的研究

利用者氏名 : ○佐藤 年裕

所属 : 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

強いスピン軌道相互作用を含む多軌道強相関電子物質では、電子相関とスピン軌道相互作用の 2 つの効果が競合し合い、さまざまな興味深い新奇な現象が観測されている。これらの現象の理論的解明が求められている一方、有限温度におけるスピン軌道相互作用の効果を取り入れた強相関電子模型の数値的研究は、非常にチャレンジングである。

本研究では、強いスピン軌道相互作用を含む多軌道強相関電子物質 5d 遷移金属 Ir 酸化物を念頭に置き、スピン軌道相互作用が電子状態に対してどのような効果をもたらすのか?、さらに新奇な電子状態の実現性について、有限温度におけるスピン軌道相互作用を含む多軌道強相関電子模型の大規模数値計算を実行することでその問題に取り組む。

2. 具体的な利用内容、計算方法

動的平均場理論+強結合展開における連続時間量子モンテカルロ法の数値計算手法 (CDMFT+CTQMC 法) は、低温・強相関領域まで精度よく計算ができ、フラストレーション系や超伝導などの研究の強力な手段として適用され始めている。本研究では、強いスピン軌道相互作用を持つ 5d 遷移金属 Ir 酸化物 Sr_2IrO_4 を念頭に置き、電子密度 5 のスピン軌道相互作用を含む 3 軌道ハバード模型に対して CDMFT+CTQMC 法を適用し、大規模な数値計算を実行することで有限温度下での電子状態を調べた。

3. 結果

CDMFT+CTQMC 法を用いてスピン軌道相互作用を含む 3 軌道ハバード模型の計算を実行する場合、負符号問題が深刻となる。本研究ではまず始めに、負符号問題の改善のための計算手法の開発を行い、期待される金属絶縁体転移が実現する低温・強相関領域まで精

度よく計算ができた。実際の計算規模としては、期待する温度で軌道内クーロン相互作用-スピン軌道相互作用のパラメータ空間の 1 点について、64 コア×96 時間=6144 コア時間の演算時間を要し、得られた Green 関数の虚時間 $\tau=0$ における相対誤差はおよそ 5% の精度で計算ができています。

温度一定下でのスピン軌道相互作用の変化に伴う電子状態を解析した結果、スピン軌道相互作用の増加により、金属から先行研究から期待される磁気秩序を持つ絶縁体への移り変わりが確認できた。この絶縁体は、強いスピン軌道相互作用の効果により、 t_{2g} 軌道が 4 重縮退した有効全角運動量 $J=3/2$ 軌道と 2 重縮退した $J=1/2$ 軌道への分裂を起こし、1 電子が $J=1/2$ 軌道に詰まった反強磁性絶縁体状態を示す。さらに、軌道内クーロン相互作用の変化に伴う電子状態の変化について調べると、より強い軌道内クーロン相互作用を持つ領域において反強磁性絶縁体に加えて新たな絶縁体として励起子絶縁体がスピン軌道作用の効果により実現することがわかった。

4. まとめ

本研究では、CDMFT+CTQMC 法の負符号問題の改善に取り組み、電子密度 5 を持つスピン軌道相互作用を含む 3 軌道ハバード模型における有限温度下での電子状態の解析がよい精度でできた。その結果、先行研究で期待される結果に加えて新しい電子状態の発見ができた。

5. 今後の計画・展望

現在、他のスピン軌道相互作用を持つ多軌道強相関電子物質の電子状態、さらに量子伝導特性のより精度のよい解析ができるためにコードの開発を行っている。本研究での研究成果により、強いスピン軌道相互作用を持つ多軌道強相関電子物質での新奇な現象の開拓となることが期待される。

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

【国際会議、学会などでの口頭発表】

[1] 佐藤年裕, 白川知功, 柚木清司 : “動的平均場理論によるスピン軌道相互作用が強い多軌道電子系の電子状態の解析”, 日本物理学会 2013 年秋分大会, 徳島大, 9 月(2013)

[2] 佐藤年裕, 白川知功, 柚木清司 : “スピン軌道相互作用を持つ多軌道強相関電子系における絶縁相の性質”, 日本物理学会 69 回年次大会, 東海大, 3 月(2014)