

課題名(タイトル):

**銅酸化物高温超伝導体の磁気励起:  
動的密度行列繰り込み群法による  $t-t'-J$  模型の動的スピン構造因子の計算**

利用者氏名:

○遠山 貴巳(1)、曾田 繁利(1)、柚木 清司(1,2,3)

理研における所属研究室名:

(1) 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

(2) 柚木計算物性物理研究室

(3) 創発物性科学研究センター 計算量子物性研究チーム

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

銅酸化物高温超伝導体は典型的な二次元強相関電子系であり、金属および超伝導状態はモット絶縁体にキャリアをドーピングすることにより実現する。低次元性のためモット絶縁体の反強磁性は非常に強い量子ゆらぎを持っている。そこに入ったキャリアは、量子ゆらぎを生み出している様々なスピン状態と結合可能であり、その結果、多種多様な量子状態を生み出す。最終的には  $d$  波対称性をもつ超伝導が基底状態として現れるが、どのようなスピン状態と結合しているのか未だ完全な理解は得られていない。そのため、スピン状態の揺らぎが現れる磁気励起を理解することが重要である。

磁気励起の特徴の一つはホールドーピング系銅酸化物高温超伝導体で見られる「砂時計型」磁気励起である。磁気ブラッグ点近傍の格子非整合な磁気励起 40meV 付近で格子整合になり、スピン波のようにゾーン境界へ広がっていく様子が非弾性中性子散乱実験によって報告されている。この特徴的な磁気励起の機構は、高温超伝導の起源とも関わって未解決の問題として残っている。

この振る舞いを記述する一つの考え方として電荷がストライプ状に並ぶ不均一状態を出発点とするものがある。実際、課題メンバーらは H29 年度の簡易利用課題や京の一般利用課題により、最近接ホッピング  $t$  だけでなく第二近接ホッピング  $t'$  まで考慮した  $24 \times 4 = 96$  格子点を持つ 4 本足梯子型  $t-t'-J$  模型の動的スピン構造因子を計算し、基底状態がストライプ状態となるとき「砂時計型」のような磁気励起が現れることを示した [1]。しかし、非弾性中性子散乱で観測されている実験との不一致点が二点あった。一つ目は、格子非整合点から  $q=(0,\pi)$  へ向かう磁気励起構造が実験では観測されていないが、計算では大きな強度が現れること、

二つ目は、格子整合となるエネルギーが実験より 2 倍ほど高いことである。そのため、ストライプ状態の出現が実験を完全に説明する条件とは言い切れない。

文献[1]の計算は 4 本足梯子形状に対するものであり、現実の正方格子に対するものではない。そのため、上記の不一致点が、形状効果によるものかどうか明らかにするため、正方格子により近い  $t-t'-J$  模型の動的スピン構造因子の計算が必要である。そこで本研究では、4 本足梯子格子系から梯子の数を徐々に増やすことで上記の不一致点が解消されるか調べた。

2. 具体的な利用内容、計算方法

6 本および 8 本の桁を持つ梯子格子系  $t-t'-J$  模型を設定する。足方向には自由境界条件を課し、それぞれ 16 格子点、12 格子点を置く(全格子点数は 96 に固定)。桁方向には周期境界条件を課す(シリンダー境界条件)。この模型にホールキャリアを導入して、動的スピン構造因子を計算する。計算には動的密度行列繰り込み群法(DDMRG)を用いる。我々の用いる DDMRG では、ターゲットと呼ばれる状態に対して、基底状態といくつかのエネルギーに対応する励起状態を採用している(マルチ・ターゲット)。基底状態をターゲットするため、別途、ランチョス法によって基底状態を準備している。また、そのターゲットされた励起状態の計算では非線形方程式の解を求める必要がある。その部分には、直交多項式展開法を用いた独自のアルゴリズムを採用している。MPI+OpenMP が実装されており効率的な並列計算を行うことが可能である。

3. 結果

上記、 $16 \times 6$ 、 $12 \times 8$  格子点のシリンダー形状  $t-t'-J$  模型のパラメータとして、ホール型銅酸化物高温超伝導体を念

頭に、最近接格子点ホッピング  $t$  をエネルギー単位として ( $t=1$ )、次近接格子点ホッピング  $t'=-0.25$ 、最近接スピン間交換相互作用  $J=0.4$  を採用する。銅酸化物高温超伝導体では実際の  $t$  の値は  $0.35\text{eV}$  程度である。ホールキャリア濃度  $x$  を増加させながら、動的スピン構造因子を計算した。 $x=12/96=0.125$  のときの  $12\times 8$  格子点の結果を図に示す。 $24\times 4$  格子点で見られた実験との二つの不一致点が解消されていることがわかる。一つは格子非整合点 [ $\mathbf{q}\sim(0.75\pi, \pi)$ ] から  $\mathbf{q}=(0, \pi)$  へ向かう励起構造が逆方向に比べて弱くなり実験と対応する点、もう一つは格子整合となるエネルギーが  $\omega\sim 0.2t\sim 50\text{meV}$  であり、実験とよく対応している点である。 $16\times 6$  格子点の場合も同様な結果となっている。

以上の結果は、非弾性中性子散乱で観測されている「砂時計型」磁気励起と一致している。これまで、 $t-t'-J$  模型を数値的に厳密に取り扱うことによって磁気励起構造の詳細な特徴を明らかにした研究はなく、オリジナルの結果となっている。

#### 4. まとめ

ホールドーブ系銅酸化物高温超伝導体に対して非弾性中性子散乱から報告されている「砂時計型」磁気励起の起源を明らかにするため、 $16\times 6$  格子点と  $12\times 8$  格子点のシリンダー形状  $t-t'-J$  模型の動的スピン構造因子を独自に開発している DDMRG により計算した。以前の  $24\times 4$  格子点の結果[1]と比較することで、今回の格子形状のほうが、非弾性中性子実験で得られている磁気励起構造をよく再現することが明らかとなった。

#### 5. 今後の計画・展望

本年度の成果を現在論文としてまとめており、なるべく早く出版する。今後は、磁気ブラッグ点近傍だけでなく、運動量のゼロ点から見た動的スピン構造因子の方向依存性を計算し、その運動量領域でスピン・電荷励起構造を観測できる共鳴非弾性 X 線散乱との比較を試みていく。そのため、これまで行ってきた自由境界条件での  $8\times 8$  格子点の計算をさらに進めていく。そして、ドーブされたモット絶縁体のスピン・電荷励起の全貌を明らかにする。

#### 参考文献

[1] T. Tohyama, M. Mori, and S. Sota, Phys. Rev. B **97**, 235137 (2018).

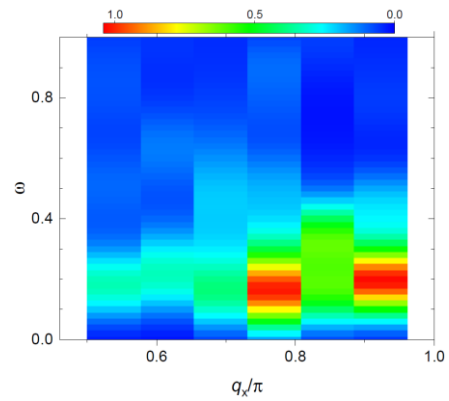


図:  $12\times 8$  格子点のシリンダー形状  $t-t'-J$  模型における動的スピン構造因子の強度マップ。ホールキャリア濃度  $x=12/96=0.125$  で  $q_y=\pi$  に固定。

平成 30 年度 利用研究成果リスト

**【雑誌に受理された論文】**

該当なし

**【会議の予稿集】**

該当なし

**【口頭発表】**

発表者名:遠山貴巳; 講演題名: $t-t'-J$  模型の磁気励起; 会議名:科研費合同研究会「真性 T'構造銅酸化物における電子状態とバンド超伝導機構の解明」「中性子スピンプリズム法の確立と超伝導体の電子多自由度マルチダイナミクスの研究»; 発表年月:2018 年 12 月 23 日; 場所:登別温泉

**【ポスター発表】**

該当なし

**【その他(著書、プレスリリースなど)】**

該当なし