

課題名(タイトル):

動的密度行列繰り込み群法による多軌道ハバード模型の電荷・スピン励起スペクトルの研究

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

鉄砒素化合物における高温超伝導の発見以来、鉄系超伝導は物性物理学の一大トピックスとなっている。鉄系超伝導体の物性を理解する上で重要なポイントは何であろうか？この物質系は高温超伝導体としてだけでなく、多軌道系金属としても興味深い研究対象である。これらの物質では、複数の鉄 $3d$ 電子軌道がフェルミ準位の周りのエネルギーバンドを構成しており、複数軌道によるマルチバンドの性質が様々な物性にも影響を与えている。例えば、常磁性状態ではフェルミ面は複数のバンドが顔を出すことで電子ポケットやホールポケットを作る。これらは母物質における反強磁性金属状態や超伝導状態の形成とも関係してくる。

鉄系超伝導物質では、多軌道性のほかに電子間相互作用も電子物性にとっては重要である。現在注目を集めている軌道ネマティック状態出現にも電子間相互作用は本質的である。電子間相互作用とともに多軌道性まで含めた量子格子模型は多軌道ハバード模型と呼ばれる。通常のハバード模型は単一軌道であり、銅酸化物高温超伝導体の模型として本研究で用いる密度行列繰り込み群(DMRG)法を用いた多くの数値的研究がなされている。一方、鉄系超伝導体の模型である多軌道ハバード模型の DMRG による数値的研究は限られている [1]。

鉄系超伝導体の一つとして梯子型鉄系化合物 BaFe_2S_3 がある。この系は高压下で超伝導が出現することが知られており、鉄系超伝導の起源を明らかにする上でも重要な物質系となっている [2]。常圧下ではストライプ状に鉄原子上のスピンが並んだ反強磁性絶縁体だが、圧力を印加すると金属状態となり超伝導が現れる。常圧化のストライプ型反強磁性がスピン励起構造にどのような効果を及ぼすか、また圧力を印加して金属状態になったときに電荷励起がどのように出現するは、超伝導の起源を明らかにする上でも重

要な課題となっている。さらに、 BaFe_2S_3 の S を Se に置換した BaFe_2Se_3 は 4 つの鉄原子上のスピンが同じ向きを向いてブロック構造を構成し、隣り合うブロックのスピンは逆になるというブロック型反強磁性磁気構造をとることが知られている [2]。実際、スピン励起構造の詳細は J-PARC 等での非弾性中性子散乱実験によって調べられている [3]。

以上のような背景のもと、本研究では梯子型鉄系化合物 BaFe_2Se_3 を記述する多軌道ハバード模型を設定し、その模型の基底状態におけるスピン構造と動的スピン構造因子を計算することで、梯子型鉄系化合物の磁性と磁気励起の特徴を明らかにすることを目的とする。そのために、本課題グループが開発している二次元 DMRG (2D-DMRG) の動的に拡張されたモード(動的 2D-DMRG)を用いる。

本利用報告書では BaFe_2Se_3 を念頭に、梯子格子上の各原子に 3 軌道を配置した多軌道ハバード模型に対するスピン構造因子と動的スピン構造因子の結果を報告する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本課題で用いた動的 2D-DMRG は、量子格子模型に対するスピンや電荷の励起スペクトル(動的構造因子)を計算することができる。動的性質の計算のコア部分である補正ベクトルの計算には、独自開発したルジャンドル関数による多項式展開を使用している [4]。

本計算では梯子の長手方向(足方向と呼ぶ)に 16 原子、桁方向に 2 原子の計 32 原子の梯子格子系を採用した。この 16×2 梯子格子の足方向の境界条件は開放端条件、桁方向は周期的境界条件とする。各原子当たり、 d_{xz} , d_{yz} , d_{xy} の 3 個の $3d$ 軌道を割り当てる。異なる原子間の電子のホッピングは、鉄系超伝導体を 3 軌道で表現した強束縛模型の値を採用した [5]。同じ種類の軌道間だけでなく異なる種類の軌道間のホッピングも考慮されている。電子間相互作用については、同じ原子上だけに働くことと仮定し、3 軌道間の

クーロン・交換積分と、それらの関係を金森パラメータとして導入する。クーロン積分は 3.2eV, 交換積分は 0.8eV とした。 d_{yz} 軌道と d_{xy} 軌道は縮退していると仮定した。また、 d_{xy} 軌道のエネルギー準位は前者の軌道エネルギーとは異なっていると考え、その差 Δ_{xy} を可変とした。本計算では後述するブロック型反強磁性構造に注目していたため、その構造が現れるように $\Delta_{xy}=0.2\text{eV}$ と設定した。そのときの電子数は1原子当たり2個とした。

運動量 \mathbf{q} に依存するスピンの z 成分に対するスピン構造因子 $S_z(\mathbf{q})$ を調べると、基底状態におけるスピン配置の様子を知ることができる。また磁気励起は運動量とエネルギーに依存する動的スピン構造因子 $S_z(\mathbf{q}, \omega)$ によってその振る舞いを理解することができる。それらの計算で用いた2D-DMRGにおいて計算精度を決めるのは、縮約密度行列の大きさ m である。本研究では $m=4000$ としたが、より精度の高い計算のためにはより大きな m が必要である。

3. 結果

図1は 16×2 梯子格子3軌道ハバード模型のスピン構造因子 $S_z(\mathbf{q})$ の q_x 依存性を示す。ここで、 q_y は結合状態($q_y=0$)と反結合状態($q_y=\pi$)に分かれるが、図1は強度が強い $q_y=0$ の場合を示している。 $q_x=0.4\pi$ 近傍で $S_z(q_x, q_y=0)$ は最大となっている。この運動量は、4つの鉄原子上のスピンの同じ向きを向いて強磁性的ブロック構造を構成し、隣り合うブロックのスピンは逆になるというブロック型反強磁性磁気構造から期待されるものである。 $q_x=0.6\pi$ でも $S_z(q_x, q_y=0)$ がピーク構造をもつが、これが計算精度の問題かどうかは m を大きくした計算を系統的に行いチェックする必要がある。

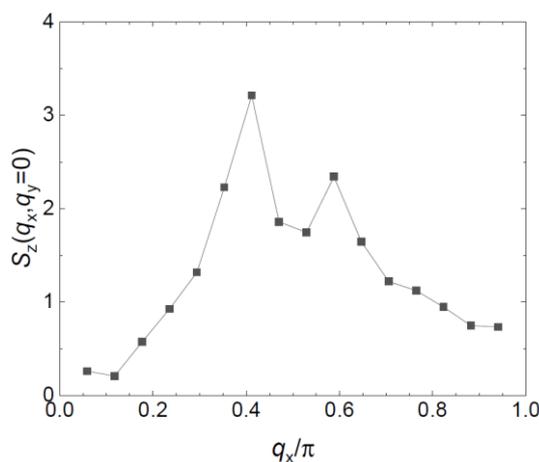


図1: 16×2 梯子格子3軌道ハバード模型のスピン構造因子の2D-DMRGによる計算結果。 $q_y=0$ とし q_x を変化させている。

図2は、図1の場合と同じ 16×2 梯子格子で同じパラメータの場合の動的スピン構造因子 $S_z(\mathbf{q}, \omega)$ ($\mathbf{q}=(q_x, q_y=0)$)の計算結果である。 $S_z(q_x, q_y=0)$ から期待されるように、 $q_x=0.4\pi$ 近傍で低エネルギー強度が強くなっている。しかし、反強磁性秩序があれば期待されるスピン波的な明瞭な分散構造は現れず、スペクトル強度は 40meV 以下で広い運動量領域に広がっている。これは、基底状態においてブロック型反強磁性相関が長距離まで及んでいないことを示唆しており、実際、図1の $S_z(q_x, q_y=0)$ が一本の明確なピーク構造となっていないことと整合している。

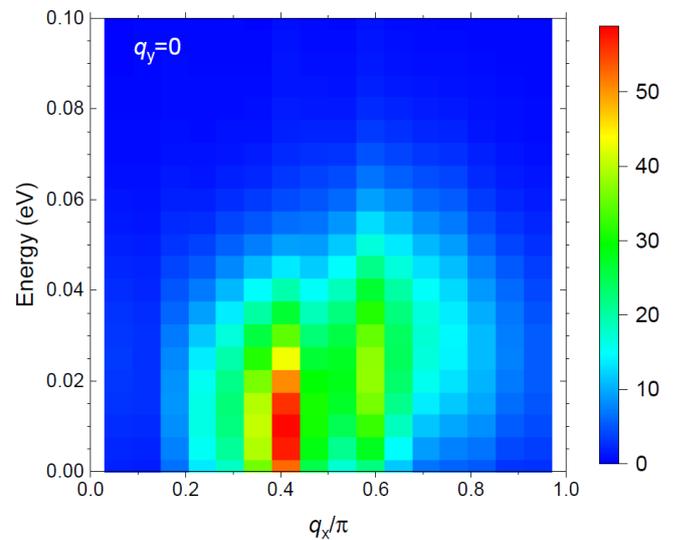


図2: 16×2 梯子格子3軌道ハバード模型の動的スピン構造因子 $S_z(\mathbf{q}, \omega)$ ($\mathbf{q}=(q_x, q_y=0)$)の動的2D-DMRGによる計算結果。

4. まとめ

本研究では、梯子型鉄系化合物 BaFe_2Se_3 で観測されているブロック型反強磁性磁気構造が3軌道ハバード模型で再現される可能性があることを明らかにした。以前の研究ではブロック型反強磁性磁気構造の起源として軌道選択型モット転移という考え方が提唱されていた [1]。そこでは異なる軌道間のホッピングは小さい状況が検討されてきた。一方、本研究では、現実の鉄系化合物に対応した異なる軌道間のホッピングも同等に取り入れた模型を採用している。今回3軌道ハバード模型の計算から明らかとなったブロック型反強磁性磁気構造の兆候は、その起源に対する新たな情報を提供している可能性がある。

5. 今後の計画・展望

本計算では、2D-DMRGの計算精度を決める m の値を固定して計算した。スピン構造因子のピークが単一にならな

いなど、計算精度の不十分による可能性もあるので、今後は m を増大させた計算も実行していく必要がある。その結果、中性子非弾性散乱で報告されている磁気励起 [3] との定量的な比較も可能になっていくものと期待される。

参考文献

[1] 例えば、J. Herbrych, J. Heverhagen, N.D. Patel, G. Alvarez, M. Daghofer, A. Moreo, and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **123**, 027203 (2019).

[2] 例えば解説として、山内 徹, 高橋 博樹, 南部 雄亮, 佐藤 卓, 平田 靖透, 大串 研也, 固体物理 **54**, 27 (2019).

[3] M. Mourigal, Shan Wu, M. B. Stone, J. R. Neilson, J. M. Caron, T. M. McQueen, and C. L. Broholm, Phys. Rev. Lett. **115**, 047401 (2015) ; T. J. Sato, private communications.

[4] S. Sota and T. Tohyama, Phys. Rev. B **82**, 195130 (2010).

[5] M. Daghofer, A. Nicholson, A. Moreo, and E. Dagotto, Phys. Rev. B **81**, 014511 (2010).

2020年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

K. Shinjo, S. Sota, and T. Tohyama, “Effect of phase string on single-hole dynamics in the two-leg Hubbard ladder”, Phys. Rev. B **103**, 035141(1-12) (2021).

T. Tohyama, S. Sota, and S. Yunoki, “Spin dynamics in the t - t' - J model: Dynamical density-matrix renormalization group study”, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 124709(1-7) (2020).

T. Tohyama, M. Mori, and S. Sota, “Dynamical density matrix renormalization group study of spin and charge excitations in the four-leg t - t' - J ladder”, Phys. Rev. B **97**, 235137(1-7) (2018).