

課題名 (タイトル) :

キャリアドーピングされたモット絶縁体の励起スペクトル

利用者氏名 :

遠山 貴巳

理研での所属研究室名 :

計算科学研究機構量子系物質科学研究チーム

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。その結果、スピン配列にも変調構造が現れ「砂時計型」磁気励起が生じる。しかし、銅酸化物を記述するミクロな模型に対するバイアスのない数値計算によって、このシナリオを示した例はない。

そこで本研究では、電荷ストライプ状態が基底状態になりやすい梯子格子系 $t-t'-J$ 模型に対して、動的密度行列繰り込み群 (DDMRG) を適用し、動的スピン構造因子のホールキャリア濃度依存性を調べ、「砂時計型」磁気励起の本質に迫ることを目的とする。なお、このプロジェクトは利用者が代表者となっている H29 年度京一般利用と相補的である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

4本の足を持つ4本足梯子格子系 $t-t'-J$ 模型を設定する。足方向には自由境界条件を課し、24格子点を置く。桁方向には周期境界条件として4格子点を取る。この模型にホールキャリアを導入すると、それらはストライプ状に並びたがることが分かっている。そのような基底状態のもとでの動的スピン構造因子を計算する。計算には DDMRG を用いる。我々の用いている 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、 24×4 格子点の4本足梯子 $t-t'-J$ 模型のパラメータとして、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 0.35eV 程度である。キャリアが無いモット絶縁体から、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。電荷がストライプ秩序を持つときに期待されるような、磁気ブラッグ点から $2\pi\pi$ だけ離れたところに低エネルギー励起が得られた。また、磁気ブラッグ点の J よりも低いエネルギー位置にスペクトル強度が強くなる領域が現れた。また、その点からさらに高エネルギーにわたってスペ

クトル構造が続く。これらの振る舞いは定性的には、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 模型を用いてこのような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、電荷ストライプ状態が基底状態となりやすい4本足梯子格子系 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。その結果、実験に対応する磁気励起構造が出現することを、近似を用いない計算として初めて明らかにした。

5. 今後の計画・展望

今後は、磁気ブラッグ点近傍だけでなく、運動量の小さな領域での動的スピン構造因子や動的電荷構造因子の詳細な計算を行い、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。そして、電荷ストライプ状態が出現しやすい系でのスピン・電荷励起の全貌を明らかにして、銅酸化物高温超伝導研究の発展に寄与する。

平成 29 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

該当無し

【国際会議などの予稿集、proceeding】

該当無し

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. 発表者名：遠山貴巳、曾田繁利

講演題名： $t-t'-J$ 模型の磁気励起と電荷ストライプ：動的密度行列繰り込み群法による計算

会議名：日本物理学会第 73 回年次大会、発表年月：2018 年 3 月 22 日

場所：東京理科大学野田キャンパス

【その他（プレスリリース、学術会議以外の一般向けの講演など）】

該当無し