

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

理研における所属研究室名:

計算科学研究センター 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、多種多様の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。

銅酸化物高温超伝導体にはホールキャリアのもの(ホールドーピング系)と電子キャリア(電子ドーピング系)のものがある。電子ドーピング系の場合は、キャリアが入っても反強磁性相関がしぶとく生き残ることが知られている。その結果、磁気励起に関していろいろな違いが両者に現れることが期待される。実際、ホールドーピング系では反強磁性磁気ブラック点近傍で格子不整合な磁気励起が非弾性中性子散乱スペクトルに現れるが、電子ドーピング系では常に磁気ブラック点を中心とした磁気励起のみが現れる。最近の非弾性 X 線共鳴散乱実験の発展により、運動量ゼロの近傍における磁気励起の特徴も明らかになってきている。特に、運動量 $\mathbf{q}=(0,0)$ から $(\pi,0)$ にかけての磁気励起がよく調べられている。しかし、ホールドーピング系と電子ドーピング系の振る舞いに違いがあるのかは実験結果からは議論されていない。そこで本研究では、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を計算することで、ホールドーピング系と電子ドーピング系の $(\pi,0)$ の磁気励起の違いを理論的に明らかにして実験に対する情報を与えることを目的とする。本研究は H29 年度簡易利用からの継続研究であるとともに、H29 年度京一般利用での研究と相補的である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

4本の桁を持つ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(シリンダー境界条件)。この模型のホールドーピング系と電子ドーピング系に対して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。なお、電子ドーピング系を記述するには t , t' の符号を反転させる必要がある。

キャリアを導入したときの $(\pi,0)$ 方向の動的スピン構造因子を計算した結果、以下のことが分かった。ホールドーピング系では基底状態で電荷ストライプが安定化するため、 $(\pi/2,0)$ 近傍にスペクトル分散の飛びが見られるものの、励起エネルギーは単調に増加する。一方、電子ドーピング系では $(\pi/2,0)$ を越えたあたりから励起エネルギーが減少する傾向が見られる [1]。

このようなホールドーピング系と電子ドーピング系の非対称な振る舞いは、非弾性 X 線共鳴散乱実験からは指摘されてこな

かった。エネルギー分解能が十分ではなく、かつ理論からの指摘がなかったため、そのような観点で実験データを解析してこなかったことが原因と思われる。実際、電子ドープ系の実験データを注意深く見ると、磁気励起ピークのエネルギーの減少こそ明確に見えないものの、エネルギー分散が平坦になっていることが見て取れる [2]。計算結果の特徴が表れているのではないかと考えられる。

4. まとめ

ホールドープ系と電子ドープ系の銅酸化物高温超伝導体の磁気励起の違いを明確にするため、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。特に、 $\mathbf{q}=(0,0)$ から $(\pi,0)$ にかけての磁気励起スペクトルに注目した。その結果、計算ではホールドープ系と電子ドープ系の間に明瞭な違いが現れること、対応する共鳴非弾性 X 線散乱スペクトルには計算結果を示唆する特徴が現れていることが明らかとなった。

5. 今後の計画・展望

今後は、梯子形状を正方格子に近づけていったとき、上記の性質が定量的にどのように変化するのか明らかにする。そして、磁気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。

参考文献

- [1] T. Tohyama, M. Mori, and S. Sota, Phys. Rev. B **97**, 235137 (2018).
- [2] K. Ishii, M. Fujita, T. Sasaki, M. Minola, G. Dellea, C. Mazzoli, K. Kummer, G. Ghiringhelli, L. Braicovich, T. Tohyama, K. Tsutsumi, K. Sato, R. Kajimoto, K. Ikeuchi, K. Yamada, M. Yoshida, M. Kurooka, and J. Mizuki, Nat. Commun. **5**, 3714 (2014).

平成 30 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

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

【会議の予稿集】

該当なし

【口頭発表】

1. T. Tohyama, “Theory of RIXS in strongly correlated electron systems”, Correlated electron systems in, near, and far from equilibrium, June 6-8, 2018, Ljubljana, SLOVENIA
2. T. Tohyama, “Theory of Resonant Inelastic X-Ray Scattering in Cuprate Superconductors”, The 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M2S2018), August 20-24, 2018, Beijing, CHINA
3. T. Tohyama, “Spin and charge excitations along the direction perpendicular to charge stripes in cuprates”, Workshop on Resonant Inelastic and Elastic X-Ray Scattering 2018 (RIXS-REXS2018), June 25-27, 2018, Diamond Light Source, UK
4. T. Tohyama, “Spin and Charge Excitations along the Direction Perpendicular to Charge Stripes in Cuprates”, The 31st International Symposium on Superconductivity (ISS2018), December 12-14, 2018, Tsukuba, JAPAN
5. 遠山貴巳、「4 本足梯子 $t-t'$ 模型のスピン励起と電荷ストライプ」、基研研究会「電子相関が生み出す新規な秩序と超伝導現象:トポロジー、液晶状態、動的現象」、2018 年 5 月 7-9 日、京都大学基礎物理学研究所

【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