

プロジェクト名(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. 本プロジェクトの研究の背景、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、3d 軌道系の多軌道強相関電子系の研究が大きく発展している。電子間クーロン相互作用が強く、3d 軌道に存在する電子密度がある条件を満たすときは、絶縁体状態が現れ、モット絶縁体と総称されている。鉄系超伝導体の母物質では多軌道性の影響で軌道ごとに絶縁性や金属性が現れる軌道選択型モット相が注目を集めている。そのような電子状態を探る実験的手法として、光学伝導度測定がある。モット絶縁相の光学応答を理解するには、その光学伝導度スペクトルの形状を理解しなければならない。しかし、その振る舞いは複雑であり、たとえ単一軌道モット絶縁相の場合であってもスペクトル形状の理解には数値計算による理論研究が要求される。そこで、本研究では、多軌道モット絶縁相の光学応答を理解する第一歩として、まずは単一軌道モット絶縁相の光学伝導度スペクトル形状の解析に焦点を当てた。特に、実験的研究が進んでいる銅酸化物高温超伝導体の母物質に着目した。その系は二次元正方格子からなるので、二次元正方格子単一軌道ハバード模型を設定し、電子密度が半充填(ハーフフィリング)のもとでの光学伝導度の形状解析を目的として研究を行った [1]。なお、この課題は、HPCI システム利用研究課題「時間依存密度行列繰り込み群法によるモット絶縁体の光学伝導度のスペクトル形状解析」(課題番号 hp200071)と連携している。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本課題では、理研 R-CCS 量子系物質科学研究チームにより作成・公開されている 2D-DMRG を用いた [2]。2D-DMRG では、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ほか、外場を加えたときの量子系のスピンや電荷自由度の時間

発展を計算できる機能が含まれている。それら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が用いられている [3]。本計算では動的物理量である光学伝導度スペクトルを計算するため、2D-DMRG の時間発展計算モードを用いた。

模型としては最近接と次近接のホッピングを持つ正方格子上のハバードハミルトニアンを採用した。銅酸化物高温超伝導体の母物質を記述するパラメータを参考にして、オンサイトクーロン相互作用  $U$  は最近接ホッピング  $t$  を単位として、 $U=10$  に固定した。このハミルトニアンに対して、ハーフフィリングのもとで  $x, y$  軸方向ともに自由境界条件を持つ  $6 \times 6$  正方格子系を準備し、 $x$  方向に微小電場パルスを加えた後の電流の時間変化を計算した。微小電場パルスはホッピング項にいわゆるパイエルズ位相を付加することでハミルトニアンの中に導入した。電場パルス照射後の  $x$  方向の電流演算子の期待値から  $x$  方向の電流の時間変化を計算したのち、そのフーリエ成分とベクトルポテンシャルのフーリエ成分を用いて、光学伝導度スペクトルを得た。

3. 結果

図には  $6 \times 6$  格子点の正方格子ハバードモデルの光学伝導度をいくつかの次近接のホッピング  $t'$  の値に対して示している。 $t'=0$  のとき励起エネルギー  $\omega=7$  近傍に現れる鋭いピーク構造は励起子ピークを想起させる。しかし、通常の束縛状態としての励起子ピークとは異なり、そのピークの高エネルギー側には束縛エネルギーに対応するギャップ構造がない。その励起子的なピーク構造の起源としては、バックグラウンドで反強磁性的に配列しているスピンのエネルギーを得るように、光吸収によって生成されたホロンとダブルロンという2種類の粒子が束縛するという機構が予想される。 $t'$  が有限のときは励起子的なピーク強度が減少しているが、その振る舞いは上記の機構を裏付けている。なぜな

ら、 $t'$ を導入すると、その符号に関係なく生じる磁氣的フラ  
ストレーション効果によって反強磁性的スピン配列が弱まり、  
その結果ホロンとダブロン束縛力が弱められるからである。  
励起子的なピーク構造が磁氣的な起源によるものであること  
は、最近接反強磁性相互作用をコントロールする  $t$  の値を  
変化させた際の光学伝導度の振る舞いからも確認できる。

光学伝導度全体の形状は銅酸化物モット絶縁体の実験  
結果とよい対応を示している。二次元モット絶縁体の光学  
伝導度の形状と励起子ピークの起源を明らかにした数值的  
研究はほとんどなく、本成果はオリジナルの結果となってい  
る。

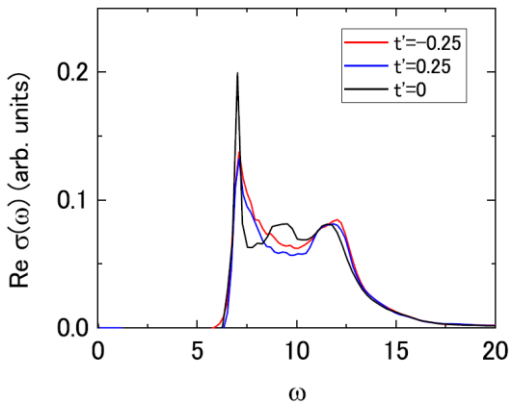


図: 2D-DMRG による  $6 \times 6$  格子点の half-filled 正方格子  
ハバードモデルの光学伝導度の  $t'$  依存性。エネルギーの  
単位は最近接ホッピング  $t$ 。

#### 4. まとめ

2D-DMRG の時間依存モードを用いて、ハーフフィールド  
の正方格子ハバードモデルの光学伝導度スペクトルを計算  
し、二次元モット絶縁体の光学伝導度の形状の特徴を明ら  
かにした。特に、励起子的なピーク構造の起源が磁氣的な  
ものであることを明らかにした。得られた光学伝導度の形状  
は、銅酸化物モット絶縁体の実験結果とよい対応を示して  
いる。

#### 5. 今後の計画・展望

今後は、単一軌道の範囲でキャリアを導入した際の、モ  
ットギャップを超えた領域での光学伝導度の形状変化や、  
モットギャップ内に出現する吸収スペクトルの形状や、多軌  
道系の軌道選択型モット絶縁相の光学伝導度のスペクトル  
の研究を進めていきたい。

#### 参考文献

[1] K. Shinjo, Y. Tamaki, S. Sota, and T. Tohyama, Phys.  
Rev. B **104**, 205123 (2021).

[2] [https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cms/DMRG/  
2D\\_DMRG.html](https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cms/DMRG/2D_DMRG.html)

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

2021 年度 利用研究成果リスト

**【雑誌に受理された論文】**

K. Morita, S. Sota, and T. Tohyama, “Resonating dimer–monomer liquid state in a magnetization plateau of a spin-12 kagome–strip Heisenberg chain”, *Communi. Phys.* **2**, 161 (1–7) (2021).

K. Shinjo, Y. Tamaki, S. Sota, and T. Tohyama, “Density–matrix renormalization group study of optical conductivity of the Mott insulator for two–dimensional clusters”, *Phys. Rev. B* **104**, 205123 (1–9) (2021).

**【口頭発表】**

T. Tohyama, “Numerical simulations of spectroscopic properties in two–dimensional Mott insulator”, The XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2021), August 4, 2021, Coventry, UK, Online