

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、モット絶縁体と呼ばれている。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、ポンプ・プローブ分光法がある。ポンプ光照射後にモット絶縁相の光学伝導度スペクトルがどのように変化するか明らかにすることで、元となるモット絶縁体の電子状態とともに、光励起後に生じる新たな電子状態の振る舞いを知ることができる。そのためには、大規模数値計算による理論研究が要求される。本研究では、多軌道モット絶縁相のポンプ・プローブ分光法を理解する第一歩として、二本脚梯子格子構造をもつモット絶縁相のポンプ・プローブスペクトルに焦点を当てた。この系は梯子の一つの横木(rung)に対して二つの格子点が存在しており、次元鎖とみなすと二個の軌道をもつ系とみることもできる。この梯子系に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)のもとでのポンプ・プローブスペクトルの解析を目的として研究を行った。なお、この課題は、HPCIシステム利用研究課題「光励起されたモット絶縁体の光学応答の数値シミュレーション」(課題番号 hp220048)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 [1]。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 [2]。本計算では動的物理量であるポンプ・プローブ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ホッピング t 、オンサイトクーロン相互作用 U を持つ二本脚梯子格子上のハバードハミルトニアンを採用した。モット絶縁体を想定しているので、 t をエネルギー単位として、 $U=10$ という大きな値に設定した。ハーフフィリングのもとで梯子の脚 (leg) 方向には自由境界条件、rung 方向には周期境界条件をもつ 16×2 格子点の系を準備し、leg 方向にポンプ光とを印加した。パルス光終了後に微小プローブパルスを加えた後、そのプローブ光によって誘起された電流の時間変化を計算した。ポンプ光、プローブ光ともに、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。誘起電流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、ポンプ光照射後の光学伝導度スペクトルを得た。

3. 結果

振動周期が1サイクル以下のサブサイクルと呼ばれるテラヘルツパルスを照射したとき、弱励起領域では金属的な応答を特徴付けるドルーデ重みとともに、モット・ギャップ内の有限振動数領域に吸収スペクトルが現れた。パルス光の励起強度を増加させて、量子トンネル効果によるキャリア生成が顕著となる領域になると、ギャップ内の吸収強度が大きく減少し負となる傾向がみられた。同様な傾向は、 U よりも少し高エネルギー側にある吸収ピーク [3] をパルス光で励起したときにも見られた。そのため、そのピーク構造と密接に関係している二本脚梯子のもつ磁気ダイマー状態が重要な役割を果たしていると考えられる。そこで、次元モ

ット絶縁体でも基底状態で磁気ダイマー状態をもつ場合 (Majumdar-Ghosh 模型に対応) についても計算を行ったが、二本梯子系と同様な振る舞いは得られなかった。したがって、二本脚梯子系特有の磁気ダイマー相関がギャップ内の吸収強度の振る舞いと関係していることが明らかとなった。

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二本脚梯子ハバード模型のポンプ・プローブスペクトルを計算した。パルス光の振動数や強度を特定の条件に調整すると、ギャップ内の吸収強度が大きく減少し負となる傾向がみられた。この現象は二本脚梯子のもつ磁気ダイマー状態と関連している可能性がある。

5. 今後の計画・展望

今後は、二本脚梯子格子系に類似した振る舞いが一次元多軌道系のような系に対するポンプ・プローブスペクトルにも現れるかどうか明らかにしていく。

参考文献

- [1] https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cms/DMRG/2D_DMRG.html
- [2] S. Sota and T. Tohyama, Phys. Rev. B **82**, 195130 (2010).
- [3] K. Shinjo, Y. Tamaki, S. Sota, and T. Tohyama, Phys. Rev. B **104**, 205123 (2021).

2022年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

遠山貴巳, 新城一矢, 曾田繁利, 柚木清司, “ダイマー相関が強いモット絶縁体の光誘起吸収スペクトル”, 日本物理学会分科会, 2023年3月24日オンライン