

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。本年度のプロジェクトでは、我々のグループが開発している密度行列繰り込み群パッケージ(2D-DMRG)を用いて、最近報告された最近接間引力相互作用をもつ一次元ハバード模型のポンプ・プローブスペクトルを理解することを目的とした計算を予定していた。この課題は、HPCI システム利用研究課題「キャリアドーピングされた一次元銅酸化物モット絶縁体の電子状態とスペクトロスコピー」(課題番号 230074)と連携している。

2. 利用がなかった場合の理由

今年度前半は、連携している HPCI システム利用研究課題課題の一粒子スペクトル関数やスピン・電荷動的相関関数の計算を達成するため「富岳」による計算に集中していた。それらの結果が得られた後、ポンプ・プローブスペクトルの計算に進み、HOKUSAI を活用する予定であった。しかし、「富岳」での計算に予定以上に時間がかかり、ポン

プ・プローブスペクトルの計算に取りかかり始めたのが10月であった。この計算には長時間の計算(1カ月のオーダー)が必要なため、途中までの大量の計算結果を一時的にハードディスクに保存しておく必要がある。HOKUSAIは11月末で運用停止となるため、そのような長時間の計算は難しいと判断し、今年度の利用は断念した。なお、当初目標とした計算は現在「富岳」で行っている。

2023年度 利用研究成果リスト

なし