

課題名(タイトル):

強相関電子系のスピン・電荷ダイナミクス

○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. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係
カゴメ格子構造を持つ物質はその構造に起因する強い幾何学フラストレーションのため多彩な磁気状態や電荷秩序を示す。近年、バナジウム原子を含む層状カゴメ金属系 AV_3Sb_5 ($A=Cs, Rb, K$) において電荷秩序相が発見された。電荷秩序の起源は電子相関であると考えられている。カゴメ格子上的ハバード模型において、ダビデの星 (star of David) 型ボンド秩序が最安定化することを指摘している理論研究はあるが、その模型の基底状態を厳密な数値計算により調べる研究は少ない。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、3 格子点を単位胞に持つカゴメ格子上的ハバード模型の基底状態を調べ、上記物質群の電子密度に対応するところで電荷秩序やボンド秩序が出現するか明らかにすることを目的とした。

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基底状態やスピン・電荷励起スペクトル(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]。本年度は、まずは基底状態の性質を調べた。動的構造因子の計算は次年度以降に行う。

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 を持つカゴメ格子上的ハバードハミルトニアンを採用した。強相関効果により出現する現象を念頭において、 t をエネルギー単位として、 $U=6, 10$ という大きな値に設定した。star of David 型秩序の有無を確認したいの

で、その形状を含むことができる格子系を採用した。具体的には、基本となる三角格子が(1,0)方向に 6 単位、(1,1)方向に 4 単位となる系(合計 24 単位)を採用し、(1,0)方向には自由境界条件、(1,1)方向には周期境界条件を施した。さらに、(1,1)軸に関して対称となるように、系の左端に 4 格子点を加えた。その結果、76 格子点のシリンダー形状の系となる。DMRG の計算では、系を一次元的な形状に焼き直し、スウィープと呼ばれる最適化の繰り返しを行うことで基底状態を求めていく。今回は(1,1)方向が鎖を形成する一筆書きで一次元形状を構成した。その結果、最近接格子点間のホッピングが長距離のホッピングに焼き直されることになり、DMRG で最適化すべき状態数 m は大きくとる必要がある。本計算では、 $m=12000$ とした。 $m=8000$ と $m=12000$ の結果を比較して基底状態のエネルギーや物理量の m 依存性は確認している。基底状態が得られたのち、電荷密度やボンド密度(ハバード模型のホッピング項の期待値に対応)を計算した。

3. 結果

バナジウム原子を含む層状カゴメ金属系では電子濃度が、格子点当たり 0.8 程度と考えられている。相互作用がないときのバンド構造をみると、フェルミ準位近傍に状態密度が極大値を持つようなファン・フォーベ特異点が存在している。本研究では、その電子密度を中心として、電子密度の変化による物理量の変化を調べた。その結果、層状カゴメ金属系の電子濃度に対応するところ、つまり、ファン・フォーベ特異点近傍の電子濃度で、各格子点の電荷密度が周期的に分布することを見出した。それ以外の電子濃度では電荷密度の周期性は見られなかった。ボンド密度を調べると、その電子濃度で、以前の理論研究とは異なる逆 star of David 型ボンド秩序が形成されることを発見した。そして、電子密度の周期的な分布はボンド秩序と対応する領域に現れること

を見出した。また、そのボンド秩序はオンサイトクーロン相互作用の大きさに依存することを示した。逆 star of David 型の格子変調が実際に起こっているという実験結果も報告されており、本研究の結果は、カゴメ格子上的電荷秩序に関する新たな視点をもたらすものとなっている。

4. まとめ

2D-DMRG を用いて、カゴメ格子上的ハバードモデルの基底状態を調べ、バナジウム原子を含む層状カゴメ金属系物質の電子密度に対応するところで電荷秩序や逆 star of David 型ボンド秩序が出現することを明らかにした。一方、その電子密度から外れた領域では、そのような秩序は見られなかった。

5. 今後の計画・展望

今回見いだされた秩序は有限系で得られたものであり、大きな電荷揺らぎが有限サイズ効果と計算精度の不十分さのため秩序化した可能性もある。 m の値や格子サイズを大きくした計算を行っていく必要がある。また、電荷揺らぎが動的構造因子にどのように出現するかも、次年度以降明らかにしていくべき課題である。

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).