

受付 ID	16a57
分野	物質科学

数値対角化および密度行列繰り込み群による強相関電子系の光物性の研究

Study of optical properties of strongly correlated electron systems by using the numerical diagonalization and the density matrix renormalization method

前島展也

筑波大学計算科学研究センター

1. 研究目的

電子間クーロン斥力が物性に支配的な影響を及ぼしている系である強相関電子系は、高温超伝導などの特異な電子状態が発現しうるため長年に渡り多様な観点から研究が行われてきた。中でも光学応答は、一般に物質中の電荷自由度のダイナミクスに関する情報をもたらす重要なものであり、理論的・数値的研究が行われている。本プロジェクトでは1次元イオン性拡張ハバード模型と呼ばれる模型の光学応答に注目した。この模型は、擬1次元交互積層型電荷移動錯体 TTF-CA やその類縁物質の電子状態を記述する理論模型として知られており、特にこれらの物質の示すイオン性相および中性相、そして両者の間の相転移(中性イオン性転移)の理論的研究に用いられている。また近年、強相関極限に対する理論研究により、同模型のイオン性相では電荷自由度だけではなくスピン自由度の励起(スピン励起)も光学応答で捕らえられる、つまり通常は光学活性ではないスピン励起がこの系では活性となり得る、という提案がなされた[Katsura *et al.*, PRL **103**, 177402 (2009)]。申請者は同模型の低エネルギー光励起状態の性質を厳密対角化法により、強相関極限を含めたイオン性相全域で数値的に調べた。

2. 研究成果の内容

有限クラスターに対する厳密対角化により光学伝導度計算を行った結果、イオン性相全域で低エネルギー領域に光学活性な励起状態が出現することがわかった(Fig.1)。特に中性イオン性(NI)転移点から離れた領域では、スペクトル位置・強度などがスピン自由度に対する低エネルギー有効模型に基づく結果と良い一致を示した。しかしNI転移点に近づくにつれて、低エネルギー有効模型による結果とのずれが大きくなること、そしてそのずれが中性イオン性ドメイン壁(NIDW)と呼ばれる別の素励起から生じて

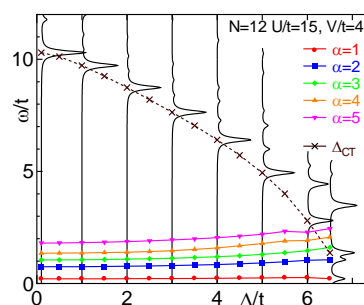


Figure 1 光学伝導度スペクトルと光学活性な励起状態

いることを示した。NIDW は、NI 転移点近傍で有効である素励起描像[N. Nagaosa and Takimoto, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 2745 (1986)]として以前より知られていたものだが、これがいわば断熱的に光学活性なスピン励起状態と繋がっていることを明らかにした。

3. 学際共同利用として実施した意義

研究目的で記述したとおり、この理論模型は TTF-CA などの物質の物性をうまく記述する模型であるため、本プロジェクトの結果で見出された低エネルギー光学励起は実験などによって観測される可能性がある。また、当模型で見られた低エネルギー光学励起がスピン励起として確認されたということは、同模型のスピン自由度に対する新たな側面を明らかにしたものであり、特にその励起状態に関する更なる解析的研究の必要性を示したものと考えられる。

4. 今後の展望

今年度は1次元系の比較的小さいサイズのクラスターに対する計算を行ってきたが、今後はハニカム格子などの2次元系に研究の対象を広げたり、より大きなシステムに対する計算を行い、中性相とイオン性相の間の極めて小さい領域に存在すると考えられているダイマー相での光学励起状態などに対する計算を実施したい。

5. 成果発表

(1) 学会発表

“1次元拡張イオン性ハバード模型の低エネルギー領域における光励起状態 I I”，
横井浩太, 前島展也, 日野健一, 日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、
2016 年 9 月 13 日～16 日)

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS		
HA-PACS/TCA		
COMA	○	960
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		