

受付 ID	17a57
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

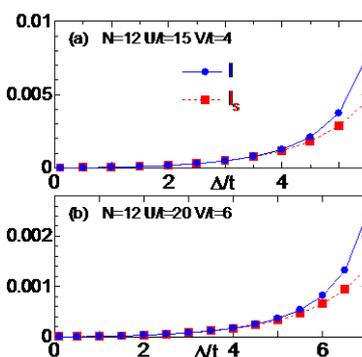
1. 研究目的

電子間クーロン斥力がその物性に大きな影響を与えている系である強相関電子系は、キャリアドーピング、外場・圧力印加、光照射などにより物性を大きく変化させることから活発な研究の対象となってきた。中でも光誘起相転移などの光誘起現象は近年特に注目されている。多くの光誘起現象では、最初に光学活性な励起状態である光励起状態が誘起され、そこから各種非平衡ダイナミクス等の興味深い現象が発現すると考えられている。故に初期過程である光励起状態の性質を明らかにすることは光誘起現象を理解する上で極めて重要である。強相関電子系の中でも多くの光誘起現象の舞台であるモット絶縁体では、光照射によりホロンとダブロンと呼ばれるキャリアが生成された電荷励起状態が典型的な光励起状態とみなされてきた。

しかし、強相関電子系を記述する理論模型の一種である1次元イオン性ハバード模型では、キャリアではなく電子のスピン自由度が励起されたスピン励起状態が光学活性となり得ることが示された。ただ上述の先行研究は強相関極限からのアプローチによるものであり、現実の物質などで重要となる領域に対する理解などまだ不十分な点が多い。そこで本研究においては1次元イオン性ハバード模型の光学活性なスピン励起状態を中心とする低エネルギー領域の励起状態の性質を広いパラメータ領域において厳密対角化法を中心とする数値的手法により明らかにすることを目的とした。

2. 研究成果の内容

1次元イオン性ハバード模型およびそのスピン自由度に対する有効模型である1次元ハイゼンベルグ模型に対し厳密対角化法による数値的解析を行った結果、モット絶縁体相全域にわたって光学活性なスピン励起状態が存在すること、但しモット絶縁体相とバンド絶縁体相のとの相転移点に近づくにつれ、光学伝導度スペクトルのスペクトル強度が増大し始め



ることを見出した。前ページ右下にスペクトルの積分強度の計算結果を示すが、横軸に示すバンド交替ポテンシャル Δ が増大し相転移点に接近すると1次元イオン性ハバード模型における積分強度(青線)が増加することが分かる。更に、それらの原因が中性イオン性相ドメインウォール(NIDW) 励起状態からの寄与の増大にあることを示した。

3. 学際共同利用として実施した意義

1次元イオン性ハバード模型はTTF-CAなど現実の擬1次元有機物質の電子物性を記述する理論模型として知られている。よって本研究成果により明らかとなった光励起状態の性質が同物質や類縁物質でも実験的に確認される可能性があるほか、同物質で観測される光誘起相転移現象、更には後述の動的構造因子との関係など今後の研究の進展が期待される。

4. 今後の展望

光学伝導度で観測されるものと類似の励起状態を観測できるスペクトル量である動的電荷構造因子においても同様のスピン励起が観測可能であるのかという点について現在研究途中であり、その一部成果については学会等で報告済みである。今後更に赤外レーザーなどで同励起を揺り動かした場合の非平衡ダイナミクスに対する研究を検討中である。

5. 成果発表

(1) 学術論文

・“Low-lying Photoexcited States of a One-Dimensional Ionic Extended Hubbard Model”, Kota Yokoi, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, *J. Phys. Soc. Jpn.* 86, 104708_1-6 (2017).

(2) 学会発表

・"1次元イオン性ハバード模型の動的構造因子", 前島展也, 柳松聖吾, 牟田純志, 日野健一, 日本物理学会 2017年秋季大会(岩手大) 2017年9月21日-24日
 ・"1次元イオン性ハバード模型の動的構造因子 II", 前島展也, 駒木悠平, 日野健一, 日本物理学会 第73回年次大会(東京理科大) 2018年3月22日-25日

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース*	
		当初配分	追加配分
HA-PACS/TCA			
COMA	○	28800	
Oakforest-PACS	○	16000	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			