

課題名 (タイトル) :

スピン軌道相互作用が強い強相関電子系における電子状態の数値的研究

利用者氏名 : 佐藤 年裕

所属 : 和光研究所 柚木計算物性物理研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年、多くの 5d 遷移金属 Ir 酸化物において、さまざまな新奇な物性が発見され、注目を浴びている。その代表的な物質として、 K_2NiF_4 タイプ層状ペロブスカイト構造の電子密度 5 を持つ(t_{2g})⁵ 電子配置を持つ Sr_2IrO_4 が挙げられ、強いスピン軌道相互作用により実現した絶縁体であることが理論的・実験的両面で確認されている。この理解としては、元の t_{2g} 軌道が強いスピン軌道相互作用により 4 電子が詰まった 4 重縮退した有効全角運動量 $j=3/2$ バンドと 1 電子が詰まった 2 重縮退した $j=1/2$ バンドを形成し、この $j=1/2$ バンドのギャップが開いた $j=1/2$ 反強磁性絶縁体であると考えられる。しかしながら、電子相関とスピン軌道相互作用の 2 つの効果が競合し合う際、どのような電子状態が実現するのかは系統的にはこれまで調べられていない。スピン軌道相互作用が十分大きければ、 $j=1/2$ 、 $3/2$ バンドが十分分離して $j=1/2$ シングルバンド描写が良さそうであり、その結果、 $j=1/2$ 反強磁性絶縁体を実現するだろうとは予測できる。一方、スピン軌道相互作用が小さい場合、電子状態に対して $j=1/2$ 、 $3/2$ バンドにおける多バンド性が効いてくる。その場合、どのような電子状態が実現するのかは非自明な問題である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

動的平均場理論+強結合展開における連続時間量子モンテカルロ法の数値計算手法(CDMFT+CTQMC 法)は、低温・強相関領域まで精度よく計算ができ、フラストレーション系や超伝導などの強相関電子系の理論的研究の強力な手段として適用され始めている。本研究では、電子密度 5 を持つ(t_{2g})⁵ 電子配置を持つスピン軌道相互作用を含む 3 軌道ハバード模型に対し、CDMFT+CTQMC 法を適用し、大規模な数値計算を実行することで有限温度下での電子状態を調べた。

CDMFT+CTQMC 法を用いて本研究で扱うモデルの計算を実行する場合、負符号問題が深刻となる。本研究では、負符号問題の改善のための計算手法の開発を行

うことで、フロント結合項やペアホッピング項を真面目に取り扱えらると共に低温・強相関、強いスピン軌道相互作用領域まで精度よく計算が可能となった。実際の計算規模としては、計算実行した最低温度一定下で軌道内クーロン相互作用とスピン軌道相互作用のパラメータ空間の 1 点について、256 コア×72 時間=17932 コア時間の演算時間を要し、得られた軌道内 Green 関数の虚時間 $\tau=0$ における相対誤差はおよそ 5% の精度で計算ができています。

3. 結果

温度一定下においてスピン軌道相互作用の変化に伴う電子状態を解析すると、スピン軌道相互作用の増加により、金属から理論的・実験的先行研究から期待される $j=1/2$ 反強磁性絶縁体への移り変わりが確認できた。さらに、軌道内クーロン相互作用の変化に伴う電子状態の変化についての解析を進めると、より強い軌道内クーロン相互作用を持つ領域において、金属と反強磁性絶縁体に加えて、 $j=1/2$ と $3/2$ 軌道間の電子・空孔ペアに起因する励起子絶縁体が新たに実現することが明らかになった。

4. まとめと今後の計画・展望

本研究では、CDMFT+CTQMC 法の負符号問題の改善に取り組み、電子密度 5 を持つスピン軌道相互作用を含む 3 軌道ハバード模型における有限温度下での電子状態の解析がよい精度でできた。現在、これらの系の電子状態のより高精度の解析ができるためのコード開発と共に、電子密度 4 を持つ(t_{2g})⁴ 電子配置をしたスピン軌道相互作用を持つ 3 軌道ハバード模型における電子状態の解析を進めている。本研究での研究成果により、スピン軌道相互作用を持つ多軌道強相関電子物質での新奇な現象の開拓となることが期待される。

平成 26 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

- [1] T. Sato, T. Shirakawa, and S. Yunoki : “Spin-orbit-induced exotic insulators in a three-orbital Hubbard model with $(t_{2g})^5$ electrons”, accepted for publication in Phys. Rev. B
- [2] T. Sato and H. Tsunetsugu : “Doublon dynamics of the Hubbard model on a triangular lattice”, Phys. Rev. B 90, 115114 (2014)

【国際会議、学会などでの口頭発表】

(国際会議)

- [1] T. Sato, T. Shirakawa, and S. Yunoki : “Exotic insulating states of multi-orbital electronic systems with a spin-orbit coupling”, The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Campus Saint Martin d’Hères, Grenoble, France, July (2014)
- [2] T. Sato : “Dynamics change at the Mott transition: examination of doublon dynamics in a triangular-lattice Hubbard model”, New Horizon of Strongly Correlated Physics (NHSCP2014), ISSP, The University of Tokyo, Chiba, Japan, June (2013)

(国内学会等)

- [1] 佐藤年裕 : “三角格子構造を持つ強相関電子系における電気伝導特性の研究” , 「分子システム研究」第 3 回春合宿, 滋賀, 4 月 (2014)
- [2] 佐藤年裕, 白川知功, 柚木清司 : “ $(t_{2g})^4$ 電子配置を持つ 5d 遷移金属酸化物における電子状態の数値的研究” , 日本物理学会 2014 年秋分大会, 名古屋, 9 月 (2014)
- [3] 佐藤年裕, 常次宏一 : “正方格子ハバード模型における磁気転移近傍の光学伝導度の数値的研究” , 日本物理学会 2015 年年次大会, 東京, 3 月 (2015)