

平成21年 5月29日現在

研究種目：基盤研究(B)
 研究期間：2006～2008
 課題番号：18340097
 研究課題名(和文) キャリアドーピングされたモット絶縁体に対するスペクトロスコピーの理論
 研究課題名(英文) Theory of Spectroscopies for Doped Mott Insulators
 研究代表者
 遠山 貴巳 (TOHYAMA TAKAMI)
 京都大学・基礎物理学研究所・教授
 研究者番号：70237056

研究成果の概要：

固体中の電子間に働くクーロン相互作用が強い系では、光を用いた各種のスペクトロスコピーがその物性研究に威力を発揮している。本グループが開発・発展させている多体電子系に対する数値計算法を用いて、銅酸化物に対する共鳴非弾性X線散乱スペクトル、光学伝導度スペクトル、角度分解光電子分光スペクトルなどを計算し、電子のもつ電荷及びスピンの自由度がスペクトロスコピーに及ぼす効果や電子状態に果たす役割を解明した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	8,800,000	0	8,800,000
2007年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2008年度	1,400,000	420,000	1,820,000
年度			
年度			
総計	11,500,000	810,000	12,310,000

研究分野：物性理論

科研費の分科・細目：物理学・物性II

キーワード：強相関電子系、スペクトロスコピー、厳密対角化法、密度行列繰り込み群法

1. 研究開始当初の背景

近年、高温超伝導体の電子状態を調べる手法として、走査トンネル分光、角度分解光電子分光、共鳴非弾性X線散乱といった様々な種類のスペクトロスコピーが発展している。その結果、キャリアドーピング量の少ない領域での電荷秩序状態の存在や、フェルミアークと呼ばれるその両端が不連続に切断されているフェルミ面の存在が明らかとなってきた。また、共鳴非弾性X線散乱ではキャリアドーピングによって生じる電荷励起の運動量依存性が観測され始めている。一方、磁氣的にフラストレートしたモット絶縁体へのキャリアド

ーピングも最近注目を集めており、今後そのような系に対する分光学的研究が発展するものと思われる。したがって、ドーピングされたモット絶縁体の電子状態を理解するため、発展が著しいスペクトロスコピーに対する理論サイドからの寄与が求められている。申請者のグループは厳密対角化法や密度行列繰り込み群法を用いたハバードモデルやその有効モデルに対する大規模数値計算により、銅酸化物モット絶縁体や銅酸化物高温超伝導体のスペクトロスコピーに関する数多くの理論的研究を行ってきた。特に電子の内部自由度である電荷とスピンの各種スペクトルに与え

る効果について焦点を当ててきた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、本グループが開発・発展させている多体電子系に対する数値計算法を用いて、ドーピングされたモット絶縁体に対するスペクトロスコピーの理論を構築し、電子のもつ電荷及びスピン自由度がスペクトロスコピーに及ぼす効果や電子状態に果たす役割を解明することにある。

3. 研究の方法

申請者のグループは、近似を含まない数値的手法（厳密対角化法、密度行列繰り込み群法）を用いて強相関効果を正確に取り扱っている。本研究では大容量クラスター計算機を導入してドーピングされたモット絶縁体のスペクトロスコピーの大規模数値計算を上記の手法を用いて行う。更に、現実の強相関物質に即したモデルを採用して様々なスペクトロスコピーの計算を行い、国内外の実験グループとの共同研究や協力関係を維持、発展させる。

4. 研究成果

上記の目的を達成するため、以下のような成果を得た。

(1) 銅酸化物絶縁体の銅 L 端共鳴非弾性 X 線散乱スペクトルの理論： 当申請グループが精力的に研究を進めてきた遷移金属酸化物に対する共鳴非弾性 X 線散乱の研究を進展させ、銅 L 端のスペクトルの特徴を明らかに

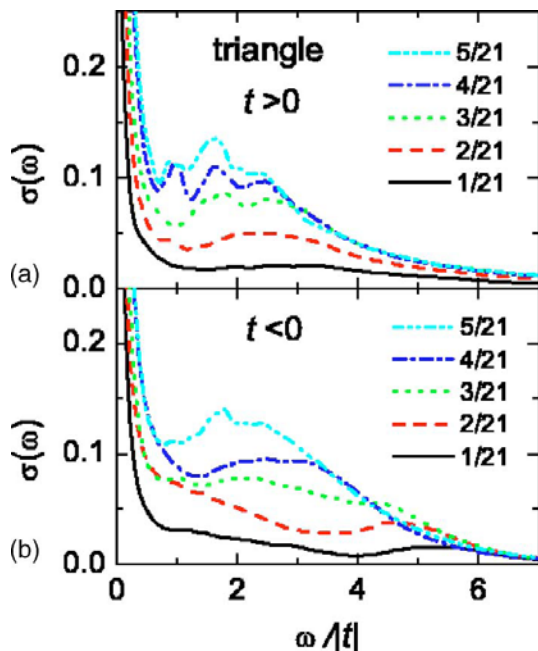


図1 三角格子ハバード模型の光学伝導度

した。これは実験への提案を含んだ成果である。

(2) 三角格子ハバード模型の磁氣的性質と光学伝導の計算： フラストレートした格子である三角格子ハバード模型の磁氣的性質、化学ポテンシャル、光学伝導度などのキャリア濃度依存性を厳密対角化法を用いて計算した。磁氣的性質を見ると、スピンと電荷の自由度が弱く結合しているように見えるが、光学伝導度のような電荷励起はスピンと強く結合したインコヒーレントな構造を持つことが明らかとなった。図1に示された光学伝導度スペクトルからその特徴が分かる。

(3) 一次元モット絶縁体の一粒子励起スペクトルに対する電子格子相互作用の効果： 強相関電子系における電子格子相互作用の効果を明らかにするため、当グループが開発した動的に拡張した密度行列繰り込み群法を用いて、一次元モット絶縁体の一粒子励起スペクトルを計算した。図2に電子格子相互作用がない場合(a)とある場合(b)の結果を示す。(b)の $w/t = -3.5$ 付近のディップ構造が電子格子相互作用による特徴であり、一次元に特徴的なスピン電荷分離の概念を用いて理解できることを明らかにした。

(4) 銅酸化物絶縁体の角度分解光電子分光スペクトルや光学伝導度の理論： 電子ドーピング型高温超伝導体の角度分解光電子分光スペクトル及び光学伝導度の温度変化について調べ、電子状態と磁氣的相関の関係について解明した。また、角度分解光電子分光スペクトルに見られる高エネルギー領域のキック構造についてその起源を厳密対角化法による数値計算で明らかにした。

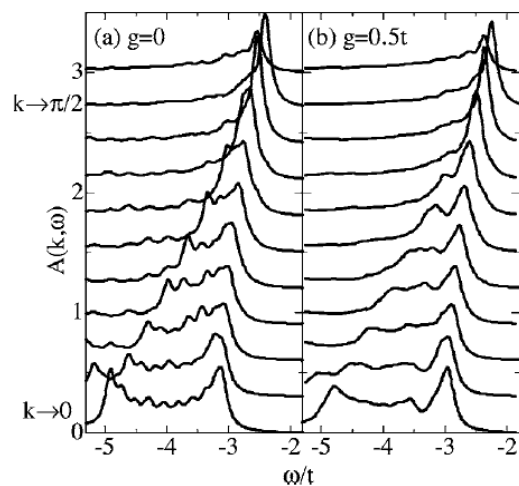


図2 電子格子相互作用がない場合(a)とある場合(b)の一次元モット絶縁体の一粒子励起スペクトル

(5) 梯子型銅酸化物に対する共鳴非弾性X線散乱の理論： 梯子構造を持つ銅酸化物に対する共鳴非弾性X線散乱のスペクトルの計算を厳密対角化法を用いて行い、実験結果との対応を明らかにした。特に、スピギャップがスペクトル形状に与える効果が大きいことが分かった。この研究は日本原子力研究開発機構の実験グループとの共同研究として成果が発表された。

(6) 一次元モット絶縁体の光学応答に対する電子格子相互作用の効果： 強相関電子系における電子格子相互作用の効果を明らかにするため、当グループで開発した動的に拡張した密度行列繰り込み群法を用いて、一次元モット絶縁体の光吸収スペクトルを計算した。その結果を図3に示す。電子格子相互作用の大きさ g を増加させるにつれて、それに起因する特長的な2ピーク構造を得た。また、動的密度行列繰り込み群法を応用して、レーザー光により励起されたモット絶縁体の励起状態の時間変化を計算し、その緩和プロセスについてのスピン・電荷・格子の自由度に関する知見を得た。

(7) 不純物を含む強相関電子系の共鳴非弾性X線散乱の理論： 遷移金属酸化物に対する共鳴非弾性X線散乱の研究を、不純物が存在する場合に拡張した。特に、銅酸化物中のニッケル不純物についての検討を進め、ドーパされたホールがニッケルの周りの酸素サイトに入ることによってスピン二重項状態作ることがわかった。また厳密対角化による非共鳴非弾性X線散乱のスペクトル計算を行った。現在、論文執筆中である。

(8) 有限温度での動的密度行列繰り込み群法の開発： 多項式展開法と基底ベクトルに対するサンプリングの手法を応用して、有限温度での動的密度行列繰り込み群法を開発した。この手法は低温領域で有効である。電

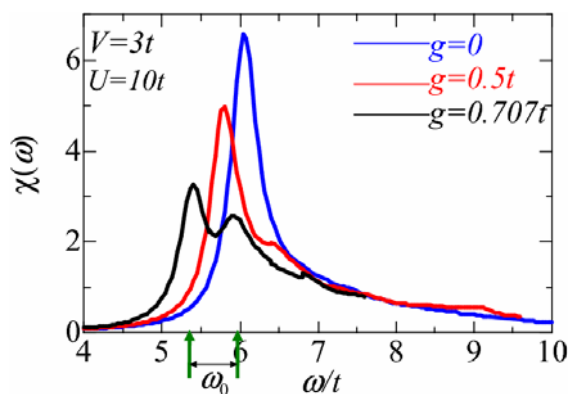


図3 電子格子相互作用を含む一次元モット絶縁体の光吸収スペクトル

子格子相互作用を持つハバード模型に適用して一次元モット絶縁体の光学吸収スペクトルを計算するプログラムを開発した。この手法を用いた様々な一次元系に対する今後の成果が期待される。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 23 件)

- ① S. Sota and T. Tohyama, Low-temperature density matrix renormalization group using regulated polynomial expansion, *Physical Review B*, 78, 113101(1-4) (2008), 査読有
- ② H. Matsueda, A. Ando, T. Tohyama and S. Maekawa, Enhancement of phonon effects in photoexcited states of one-dimensional Mott insulators, *Physical Review B*, 77, 193112(1-4) (2008), 査読有
- ③ J. Bonča, S. Maekawa T. Tohyama and P. Prelovšek, Spectral properties of a hole coupled to optical phonons in the generalized t-J model, *Physical Review B*, 77, 054519(1-6) (2008), 査読有
- ④ M. M. Zemljic, P. Prelovšek and T. Tohyama, Temperature and Doping Dependence of the High-Energy Kink in Cuprates, *Physical Review Letters*, 100, 036402(1-4) (2008), 査読有
- ⑤ K. Ishii, K. Tsutsui, T. Tohyama, 以下 8 名, Momentum-dependent charge excitations of a two-leg ladder: Resonant inelastic x-ray scattering of $(\text{La,Sr,Ca})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$, *Physical Review B*, 76, 045124(1-7) (2007), 査読有
- ⑥ J. Bonča, S. Maekawa and T. Tohyama, Numerical approach to the low-doping regime of the t-J model, *Physical Review B*, 76, 031521(1-6) (2007), 査読有
- ⑦ M. M. Zemljic, P. Prelovšek and T. Tohyama, Fermi surface and pseudogap of electron-doped cuprate superconductors: Numerical study of the t-t-J model, *Physical Review B*, 76, 044706(1-4) (2007), 査読有
- ⑧ H. Matsueda, T. Tohyama and S. Maekawa, Electron-phonon coupling and spin-charge separation in one-dimensional Mott insulators, *Physical Review B*, 74, 241103(R) (1-4) (2006), 査読有
- ⑨ N. Bulut, H. Matsueda, T. Tohyama and

S. Maekawa, Anomalous temperature dependence of the single-particle spectrum in the organic conductor TTF-TCNQ, Physical Review B, 74, 113106 (1-4) (2006), 査読有

- ⑩ T. Tohyama, Effect of frustration on charge dynamics for a doped two-dimensional triangular Hubbard lattice, Physical Review B, 74, 113108 (1-4) (2006), 査読有

[学会発表] (計 30 件)

- ① T. Tohyama, Dynamical DMRG study of one-dimensional Hubbard-Holstein model, International Workshop on "Inelastic Neutron and X-Ray Scattering in Strongly Correlated Electron Systems", 2009. 2. 18, Univ. of Tokyo
- ② 遠山貴巳, 動的密度行列繰り込み群法の開発と電子・格子結合系への適用, 自然科学研究機構計算化学研究センタースーパーコンピューターワークショップ 2009, 2009. 1. 20, 岡崎コンファレンスセンター
- ③ 松枝宏明, 一次元モット絶縁体の緩和ダイナミクスの研究, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008. 9. 20, 岩手大学
- ④ 筒井健二, ドープされた二次元ニッケル酸化物の共鳴非弾性 X 線散乱と励起状態, 日本物理学会第 63 回年次大会, 2008. 3. 26, 近畿大学
- ⑤ T. Tohyama, RIXS and Charge Dynamics in Cuprates, The 12th APCTP Winter Workshop on Strongly Correlated Electron Systems, 2008. 1. 20, Pohang
- ⑥ T. Tohyama, RIXS and Charge Response Function in Cuprates, 6th International Conference on Inelastic X-ray Scattering, 2007. 5. 8, 淡路島
- ⑦ T. Tohyama, Resonant Inelastic x-ray scattering in cuprates, International Seminar and Workshop "Strong Correlations and Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy", 2007. 4. 18, Dresden
- ⑧ T. Tohyama, Momentum-Dependent Charge Dynamics in High-Tc Cuprates, International Conference on Stripes (STRIPES2006), 2006. 12. 22, Roma

6. 研究組織

(1) 研究代表者

遠山 貴巳 (TOHYAMA TAKAMI)
京都大学・基礎物理学研究所・教授
研究者番号： 70237056

(2) 研究分担者

筒井 健二 (TSUTSUI KENJI)

日本原子力研究開発機構・量子ビーム応用部門・副主任研究員

研究者番号： 80291011

松枝 宏明 (MATSUEDA HIROAKI)

仙台電波工業専門学校・助教

研究者番号： 20396518

(3) 連携研究者

なし