

2 軌道縮退ハバード模型における光誘起ダイナミクス

筑波大学大学院 数理物質科学研究科 前島展也¹ 日野健一²

分子科学研究所、総合研究大学院大学 米満 賢治³

光照射によって強相関電子系の物性を制御しようとする実験的試みが近年活発に行われている [1]。強相関電子系では複数の相が競合する状況が多く見られるため、光でその間を遷移させることにより巨大物性変化を引き起こすことが期待されている。そのような例の一つにバナジウム酸化物 RVO_3 (R は Y もしくは希土類) がある。実際に $LaVO_3$ に対する実験が行われ、光照射直後の反射率スペクトルに、光誘起キャリアに伴う低エネルギー成分の増大や電荷移動励起に対応するスペクトル強度の減少が観測されている [2]。この物質は軌道縮退を有する強相関電子系であるため、電荷・軌道等の複数の自由度の効果が光照射後の物性変化やダイナミクスに現れると考えられるが、その詳細については今まで明確に議論されていなかった。

我々は $LaVO_3$ を念頭に置いた強相関電子系における光誘起ダイナミクスについて数値的研究を行った。特にこの系の擬一次元性 [3] や t_{2g} 軌道のうちの yz, zx 軌道と xy 軌道の分裂 [4]、Jahn-Teller フォノン効果を考慮して、古典フォノンと結合した 1 次元 2 軌道縮退ハバード模型

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -t \sum_{l,\alpha,\sigma} (c_{l+1\alpha\sigma}^\dagger c_{l\alpha\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_{l,\alpha} n_{l\alpha\uparrow} n_{l\alpha\downarrow} + U' \sum_l n_{l1} n_{l2} + J \sum_{l,\sigma,\sigma'} c_{l1\sigma}^\dagger c_{l2\sigma} c_{l2\sigma'}^\dagger c_{l1\sigma'} \\ & + J \sum_{l,\alpha\neq\beta} c_{l\alpha\uparrow}^\dagger c_{l\beta\uparrow} c_{l\alpha\downarrow}^\dagger c_{l\beta\downarrow} + g \sum_l Q_l (n_{l2} - n_{l1}) + \frac{K}{2\omega_{JT}^2} \sum_l \dot{Q}_l + \frac{K}{2} \sum_l Q_l^2 \end{aligned} \quad (1)$$

を取り扱った。電子については時間依存シュレディンガー方程式を数値的に解析し、フォノンについては古典的な運動方程式を解くことでその時間発展を追った。また、照射するパルス光についてはパイエルス位相として古典的に導入した。計算の結果、光学伝導度スペクトルに特徴的なコヒーレント振動が電荷移動遷移に対応するエネルギー領域を中心に観測された。また、この振動の起源はラマン過程による軌道波状態の生成によるものであることが分かった。

参考文献

- [1] Y. Tokura, J. Phys. Soc. Jpn. 75 (2006), 011001.
- [2] S. Tomimoto, S. Miyasaka, T. Ogasawara, H. Okamoto, and Y. Tokura, Phys. Rev. B 68 (2003), 035106.
- [3] Y. Motome, H. Seo, Z. Fang, and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. 90 (2003), 146602.
- [4] H. Sawada, N. Hamada, K. Terakura, and T. Asada, Phys. Rev. B 53 (1996), 12742.

¹E-mail: maeshima@ims.tsukuba.ac.jp

²E-mail: hino@bk.tsukuba.ac.jp

³E-mail: kxy@ims.ac.jp