

多軌道系のスピン軌道ダイナミクス

日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター 大西 弘明¹

軌道自由度が活性な強相関電子系では、電荷・スピン・軌道の多自由度が絡み合う多体効果が、磁性や超伝導などの多彩な電子物性現象の源となっている。そこで発現する絶縁体相や金属相などの劇的に特性が異なる相を、磁場や圧力などの外場によって制御する試みが盛んになされている。とりわけ最近、マンガン酸化物において、レーザー光照射による電荷・スピン・軌道秩序絶縁状態の融解と強磁性金属状態の発現が見出され [1]、軌道秩序の動的な融解と回復の形成機構に高い関心が寄せられている。

本研究では、電荷・スピン・軌道状態が外部からの摂動にどのような応答を示すのかを、波束の実時間発展という視覚的観点から理解する試みとして、一次元二軌道ハバード模型の実時間ダイナミクスについて、時間依存 DMRG 法を用いて解析を行う [2]。ここで、一次元鎖の方向は z 軸方向とし、サイト当たりの電子数が一個 (quarter-filling) および二個 (half-filling) の場合を考える。具体的な解析の処方箋は、以下の通りである。

- (1) 基底状態 $|\psi_0\rangle$ を、DMRG 法により求める。
- (2) $|\psi_0\rangle$ に演算子をかけて、励起状態 $|\psi_1\rangle$ を求める。例えばホールを一個加える場合、電子の消滅演算子 $c_{j,\downarrow}$ を適用して、ホール波束状態 $|\psi_1\rangle = c_{j,\downarrow}|\psi_0\rangle$ が得られる。
- (3) $|\psi_1\rangle$ の実時間発展を、時間依存 DMRG 法を用いて計算する。

まず、 e_g 軌道 quarter-filling の基底状態では、一次元鎖方向に伸びた遍歴 $3z^2-r^2$ 軌道が占有された強軌道状態を取り、スピンは反強磁性準長距離秩序を示す。つまり、一軌道 half-filling の基底状態と同等の状態が実現している。そこにホールを一個加えると、一次元強相関電子系に特有のスピン・電荷分離を反映して、スピン密度とホール密度の波束が異なる速度で伝播していく様子が観測される。講演では、スピン励起状態や軌道励起状態の実時間発展の解析結果も合わせて示し、軌道の種類やフント結合の大きさの変化に応じて、電荷・スピン・軌道状態の実時間発展にどのような特徴が現れるのかを議論する。

参考文献

- [1] K. Miyano, T. Tanaka, Y. Tomioka, and Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. **78**, 4257 (1997); M. Fiebig, K. Miyano, Y. Tomioka, and Y. Tokura, Science **280**, 1925 (1998).
- [2] S. R. White and A. E. Feiguin, Phys. Rev. Lett. **93**, 076401 (2004). DMRG 法全般のまとめたレビューとして、U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).

¹E-mail: onishi hiroaki@jaea.go.jp