

一次元多軌道模型の実時間ダイナミクス

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

近年、強相関エレクトロニクスの観点から、強相関電子系の絶縁体相や金属相、超伝導相といった特性が劇的に異なる電子相を、外部磁場やキャリアドープによって系統的に制御する研究が精力的に行われている。その典型として、巨大磁気抵抗を示すマンガン酸化物の電荷・スピン・軌道状態の複雑な相図が挙げられる。さらに最近では、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]、光誘起による動的相制御と超高速ダイナミクスの特性が議論されている。

本研究では、強相関軌道縮退系の電荷・スピン・軌道が絡み合う励起状態の非平衡ダイナミクスの基礎的性質を、実空間・実時間ダイナミクスの観点から明らかにするために、一次元 e_g 軌道ハバード模型の電荷励起状態の実時間発展を時間依存密度行列繰り込み群によって解析する [2,3]。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の場合を考える。まず、基底状態では、軌道の空間異方性を反映して、一次元鎖方向に伸びた $3z^2-r^2$ 軌道が占有された強軌道状態を取り、スピンは反強磁性交換相互作用のために反強磁性準長距離秩序を示す。そして、電荷励起状態として、ホロン・ダブロン対の波束を生成させた状態を考える。ホロン・ダブロン対の波束は、初期時刻では局在しており、ダブロンサイトでは $3z^2-r^2$ 軌道内に二電子が詰まった状況になっている。そして、時間発展とともにホロンとダブロンがそれぞれ伝播していく様子が観測される。ホロンはサイト間ホッピングを通して伝播するのに対して、ダブロンの伝播機構としては、サイト間ホッピングに加えて、オンサイトでの軌道間ペアホッピングが有効となる。そのため、ダブロンの有効サイト間ホッピングが減少して、ホロンに比べて伝播速度が遅くなることが分かった。特に、ペアホッピングが大きい極限では、ダブロンの伝播速度はホロンの伝播速度の半分になることが分かった。講演では、振動電場による電荷励起状態の実時間ダイナミクスについても議論する。

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] 密度行列繰り込み群全般のまとまったレビューとして、U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005); K. A. Hallberg, Adv. Phys. **55**, 477 (2006).
- [3] H. Onishi, To appear in J. Phys.: Conf. Series; Bussei Kenkyu **91**, 726 (2009).

¹E-mail: onishi.hiroaki@jaea.go.jp