大型シミュレーション研究・実施報告書

研究題目：低次元電子系における光誘起ドメイン形成

研究代表者　　　　KEK物構研　岩野薫

１．研究組織

研究代表者：岩野薫
分担者：無し

２．実施報告
【１次元 half-filled electron system】
まず代表的な強電子相関系（以下、強相関系）の１つとして １次元 half-filled electron system （以下、１／2系）を扱った。この系は、１次元的にサイトが並び、その各サイトに１個の電子軌道（スピンも含めると２個）があるとし、かつ、サイトあたり１個の電子が存在するシステムである。相互作用としては以下のような拡張ハバードモデルで記述されるとする。

$$H = -t_0 \sum_i (C^\dagger_{i+1\sigma} C_{i\sigma} + \mathrm{h.c.}) + V \sum_i n_i n_{i+1} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \Delta_{eff} \sum_{i=even} n_i$$

ここでtoは最近接サイト間の電子のホッピング、Vは同じく最近接間のクーロン斥力、Uは同じサイト内のクーロン斥力である。数学的には単に「サイト」で良いが、物性としては実際の系に対応していろいろな意味を持つ。例えば分子性結晶では分子軌道であり、また、酸化物などでは金属原子の最外殻のｄ軌道などである。最後のパラメター、Δeffは各サイトのポテンシャルが奇数番目と偶数番目で交互に変化していることを意味する。分子性結晶ならば、1次元鎖上に2種類の分子が交互に並んでいる場合を想定すればよい。

このような系の基底状態は､電子のサイト占拠数が、(A) 1111… と並ぶ場合と、(B) 2020… と並ぶ2種類が考えられ、パラメターの選び方によりどちらかになる。ここではΔeffのみを振って議論するが、このΔeffがある臨界値より大きい（小さい）場合に(B)((A))の状態となる。そして、本研究の主題は、一方の相が基底状態の場合にその背景の中でもう一方の相（ドメイン）を光でいかに生成できるか？と言うことになる。

筆者はこのような本質的にはダイナミックの問題に対してここ数年スペクトロスコピーの立場から取り組んでいる。その理由はリアルなダイナミックスの数値解析は未だ発展途上にあり、現状ではきわめて小さいシステムしか計算できず、その場合どこまで有限サイズ性を排除してダイナミックスの特徴を結論づけられるか自明ではないからである。一方、スペクトロスコピーの場合は大きなサイズに対してもかなり精度良く出来るようになって

きた。スペクトロスコピーなので、ある意味始状態と大きな光励起の行列要素を持つ系を優先的に検知する。従って、光励起後のかなり時間初期の状態にのみ議論が限定され、長い時間後の緩和の様子は議論出来ない。特に格子緩和が絡んで場合がそうである。（格子緩和が生じると原子位置そのものが変化するので通常行列要素はかなり小さくなる。）
そこで本研究ではむしろ純電子的な超高速動力学という観点から研究を行っており、それはむしろ高速スイッチングなどの最近の応用上の関心にも合致している。

平成20年度は、18年度に行った上記の趣旨の研究、特に放射光スペクトルの計算結果の再考察を行った。特に、角度分解光電子分光の場合、単純にドメインのサイズと重心自由度だけ（つまり、電荷の自由度だけ）を考慮した実効モデル（ドメインモデルＩ）ではその角度依存性（＝運動量依存性）を全く説明できない。これは、同じ放射光スペクトルでも非弾性Ｘ線散乱スペクトルが（可視光）光学伝導度スペクトルと同様にほぼドメインモデルＩで説明できることと対照的である。そこで、スピン励起の自由度も取り入れた新しいドメインモデル（ドメインモデルII）を考案し、厳密な結果を定性的に再現することに成功した。（詳しくは、PRL 102 (2009) 106405を参照のこと。）このモデルでは各ドメインサイズに対応してスピン自由度がサイズ分だけ割り付けられるようになっており、全運動量を固定した際、元々は各ドメインサイズに対応して１の状態数しかなかった事と思い起こすと、ヒルベルト空間の自然な拡張になっている。なお、ドメインモデルIは系の空間サイズ（サイト数：数１００で実際は十分）がそのまま対角化の次元であるので極めて簡単である。それと比べると、ドメインモデルIIの場合は、例えば、36サイトの系で次元数は数10万となり、これはランチョス法や連分数展開の方法などにより比較的容易に解くことが出来る。このようにして実効モデルを解いた結果、厳密な結果と同様な定性的な特徴、例えば、k=0 の場合は、バンド中心の周りでカスプになり、k=π/2の場合は直線状になる、ことが示された。これは大雑把に言えば、状態のネットワーク（それは一種の樹上構造になるので、domain tree と表現している）固有のvan hof 特異点の性質と言うことになるが、解析的な解明はまだ行われておらず、今後の課題である。

【２次元 spinless half-filled electron system】
１次元系に対し、２次元系はむしろ現実の物質として例が豊富である。また、ドメイン励起の次元性依存性もきわめて興味深い。そこで、１９年度は２次元系の研究に着手した。モデルは上述のハミルトニアンの自然な等方的拡張であり、同じパラメター名称を以下用いることにする。

まず、計算方法と実際のその振る舞いについて述べる。２次元DMRG法についてはスピン系に対してXiang等によってかなり巧妙な方法が考案された。(PRB, 64, 104414, 2001.) 筆者はこの方法を電子系に適用してプログラム開発を行い基本的なところは１９年度で終える事が出来た。具体的な方法だが、図１にあるように基本的には２次元系を1次元化する。この図では6×6の系を示しているが、４つの部品（block）から全体（super block）が構成されるのは1次元の場合と同じである。なお、各ブロックはまずは一つ小さい系（この場合は5×5）で作られて用意され、それを基にこの系で更新され最

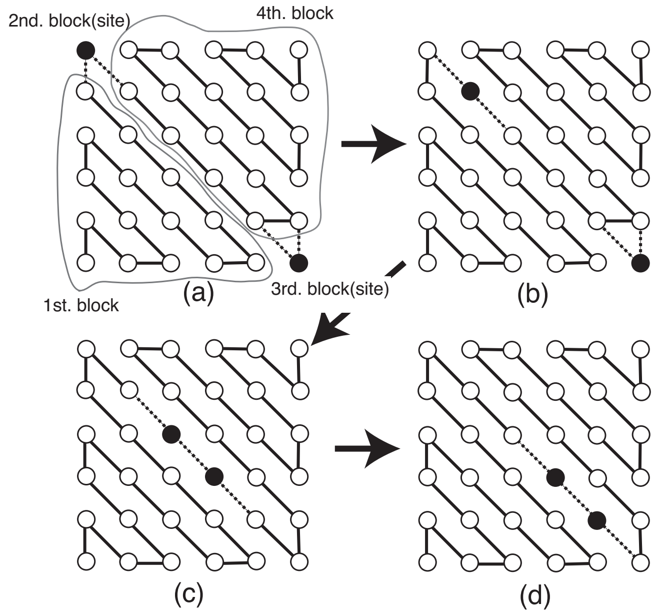

図1：DDMRG法のiterationの一部。6×6の場合。

適化される。なお、以下の計算は計算量を減らすためにすべてopen boundary condition (OBC)を用いている。

このようなやり方で、基底状態エネルギーと以下に定義されるスペクトル強度$\sigma(\omega)$を求めた。

$$\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi\omega}\mathrm{Im}\{\langle 0|\hat{J}\frac{1}{H - E_0 - \omega + i\gamma}\hat{J}|0\rangle\}$$

ここで |0> および E0 は基底状態およびそのエネルギー、Jは電流演算子である。
実際にこのようなやり方でテスト計算をしてみると収束の度合いはωの値やサイズ値にかなり依ることが分かった。計算がまだまだ重く、それほどいろいろな場合を行っていないが、ωが小さいほど収束が速く、また、n×nサイズとしてnが奇数の場合にスムースな収束になることが分かった。後者は、OBCの偶数サイトにおいては２種類の異なる電荷秩序状態が基底状態として縮退し、その混成のために収束が遅れるのに対し、奇数サイトでは縮退が解け一方の状態のみが実現するからと解釈される。そこでnが偶数の場合、正方格子の4隅に比較的小さいサイトポテンシャルを配し、一方の状態のみが選ばれるように調節をした。

このようなやり方で、2次元spinless half-filled electron systemを考察した。なお、今回は簡単のためにスピンレスモデルを用いている。スピンレスなので、各サイトあたり1個の電子のみを収容し、従って、hallf-filled の場合、半分のサイトが電子によって占められている。

さらに、ここでは隣り合ったサイト間のクーロン斥力（V）とトランスファー積分（to）のみを考慮しており、そのような場合、図2に示されるような電荷秩序・無秩序転移が臨

界点（Vc/to）で起こると考えられる。そこで我々は、図2左の系に光を照射し、どのような変化が起きるかをやはりスペクトロスコピーの手法により考察した。

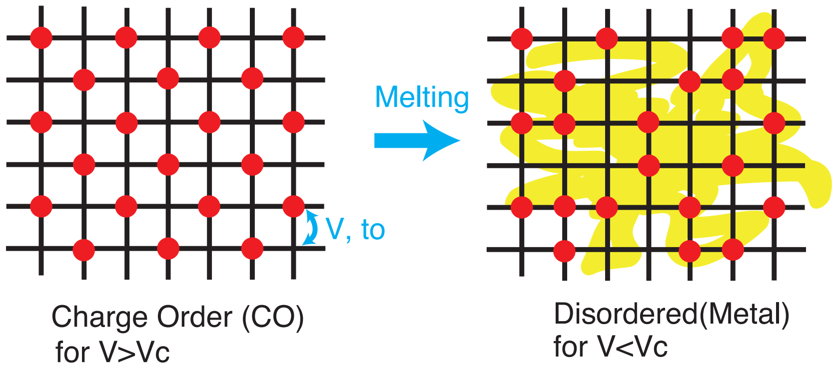

図2：2次元電荷秩序の概念図。

得られたスペクトル（5×5および6×6の系）をそれぞれ図３と４に示す。

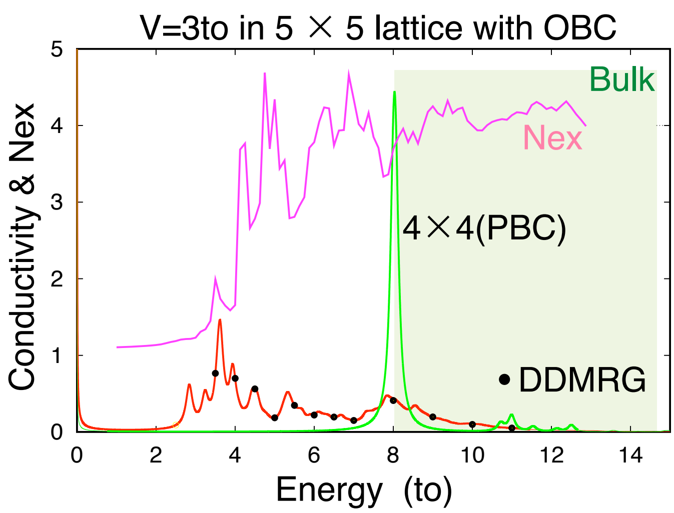

図3：5×5の系の計算結果。黒点=DDMRGにより求められた光学伝導度、赤線=厳密対角化による光学伝導度、紫線=DDMRGによるNex(励起電子数)。緑線は、周期的境界条件の4×4の結果。

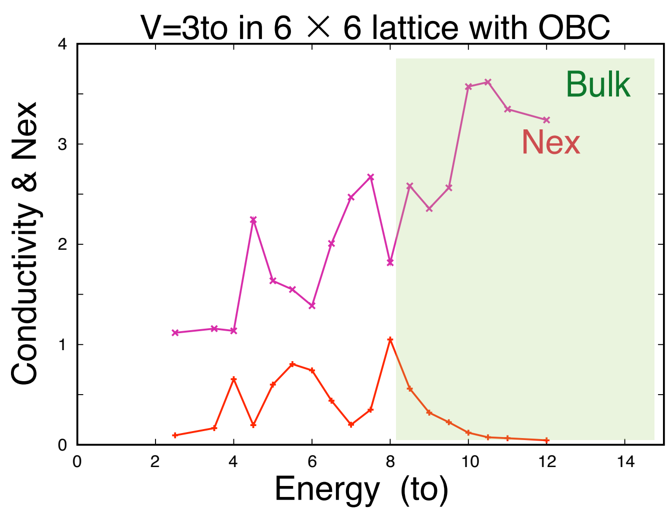

図4：6×6の系の計算結果。赤線=光学伝導度、紫線=Nex。結果はすべてDDMRG法によるもの。

まず、図３において下部の連続線が厳密対角化によって求められたもの、一方、黒丸がＤＤＭＲＧ法により求められたものであり、数値計算的に実際上問題ないほど正確に求められていることが分かる。（なお、厳密対角化によって求められる正方格子はこのサイズまでである。）次に物理的な側面に注意を向けると、E=8以上がbulkな寄与に対応し、それ以下は境界（＝coners+edges）の寄与となることが、4×4の系（周期的境界条件（ＰＢＣ）付き）の結果との比較から分かる。さらに、励起電子数（Nex）が境界もさることながら、bulkな部分で1から大きく増加している。この励起電子数は、１個の光子で励起できる電子数を意味しており、これ外から大きく増加しているのが多体効果､つまり、ドメイン励起である。

次にサイズ依存性を議論するために6×6の系を図4において詳しく見る。5×5の系と比較して、bulk のE~8の最低光学励起のNexが小さくなっていることが分かる。この事から、最低光学励起はドメイン励起ではなく、励起子的ではないかと推測できる。この事は厳密対角化（8×4の系）でパラメターＶを振り、予想される臨界値（Vc~2）までＶ＝５から連続的に系を変化させた場合も同じ事が確認できた。すなわち、1次元系では相境界に近づくにつれて励起状態全体がドメイン的になるのに対し、2次元系では

「最低光学励起は励起子的、それより上はドメイン的」

という励起状態構造を持つように思われる。5×5の系では最低光学励起でもNexが1より大きな値を有していたが、それはより低い境界の寄与が重なっていたから、と解釈する。

３．今後の課題
まず、モデル的なことだが、今回の1次元系のそれは相転移次数が1次であった。一方、2次元系の現モデルでは次数は2次、或いはそれ以上になっており、その意味で相境界付近の励起状態の性質が基底状態とそれと分離して議論しにくい。現モデルはスピン自由度を最初から排除しており、ドメインの電荷自由度のみに注目できる、また、状態数も少なくでき数値計算的により安定するという長所があるが、この点は改善の余地があるように考える。

次に、現モデルに話を限っても幾つか課題がある。**（１）**まず、サイズはもう少し大きくしたい。計算にかけるＣＰＵ時間をどこまで許すかによるが7×7までは出来る範囲内である。**（２）**また、現在はシステムＡのみを用いている。システムＢを用いない理由は、ノードあたり最低でも２〜３ＧＢのメモリーが必要で、現システムＢでは不足してしまうからである。しかしながら、今後の展望を考えると超並列機の利用は不可欠であり、その意味での工夫を今後考えていきたい。**（３）**また、ＯＢＣを用いた現計算では境界の影響が強く見えすぎる。ＯＢＣのままでも境界が見にくくする工夫（自己無撞着な環境の中に埋め込む）や周期的境界条件（ＰＢＣ）の適用を考えていきたい。特にＰＢＣの場合はブロック間の相互作用が増えるために計算量が必然的に増える。なお一層のプログラムチューニングが必要とされている。