

課題名 (タイトル):

多軌道強相関電子系における電子状態の研究

利用者氏名: 渡部 洋

所属: 和光研究所 基幹研究所 柚木計算物性物理研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年、遷移金属酸化物や重い電子系物質において、軌道自由度が重要な役割を果たす物質の研究がさかんに行われている。これらの物質が示す興味深い現象を、単純な理論モデルを構築し、解析することで明らかにするのが本研究の目的である。具体的には

- ①f 電子系における希薄近藤系から重い電子系へのクロスオーバー
- ②遷移金属酸化物における強いスピン軌道相互作用がもたらす新たな金属絶縁体転移と磁気秩序についての解析を行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

①f 電子系を記述する最も単純なモデルである近藤格子模型に対し、変分モンテカルロ法を用いて基底状態の性質を解析する。相互作用の無いアンダーソン模型を対角化した一体部分にグッツヴィラー因子を作用させた試行波動関数を用い、最低エネルギーを与えるように変分パラメータを最適化することで基底状態を探索する。この計算過程を f 電子をランダムに配置した数十パターンのサンプルに対して行い、最後に平均を取ることで物理量を計算する。

②層状ペロブスカイト構造を有する遷移金属酸化物である Sr_2IrO_4 と Sr_2RhO_4 を記述する 3 軌道ハバード模型を構築し、変分モンテカルロ法を用いて基底状態の性質を解析する。スピン軌道相互作用を含んだ一体部分にグッツヴィラー因子とスピン・電荷に関するジャストロー因子を作用させた試行波動関数を用い、最低エネルギーを与えるように変分パラメータを最適化することで基底状態を探索する。これには 3~40 個のパラメータを同時に最適化する必要があり一般には困難であるが、stochastic reconfiguration という計算手法を用いてこれを可能にしている。

3. 結果

①f 電子の密度が伝導電子の密度と同程度になったところで希薄近藤系から重い電子系へのクロスオーバーが起こることを示すことが出来た。この際、f 電子のスクリーニングが伝導電子による個別的なものから f 電子同士による集団的なものに移行していくことがわかり、これが重い電子系における大きな有効相互作用の起源であると考えられる。

②スピン軌道相互作用が、電子間のクーロン斥力と協力的に働いて新たなタイプのモット (金属絶縁体) 転移を引き起こすことがわかった。これにより、スピン軌道相互作用が大きい状況では電子間のクーロン斥力が小さくても絶縁体になり得ることを示すことが出来た。

4. まとめ

①f 電子系を記述する最も単純なモデルである近藤格子模型を用いて、希薄近藤系から重い電子系へのクロスオーバーを記述することが出来た。また、通常用いられる動的平均場近似では計算が困難な f 電子のスクリーニングに関する計算が可能になり、結果を裏付けすることが出来た。さらにこの f 電子の集団的なスクリーニングの性質が、重い電子系を特徴付ける重要な要素であることを提案した。

②3 軌道ハバード模型を用いてスピン軌道相互作用がもたらす新たなタイプの金属絶縁体転移の可能性を示すことが出来た。これはスピン軌道相互作用が大きい Sr_2IrO_4 が絶縁体、小さい Sr_2RhO_4 が金属であるという実験事実とよく一致している。

5. 今後の計画・展望

①に関しては論文を投稿し、現在査読中である。これまでは 2 次元正方格子に関する解析を行ったが、今後は 2 次元三角格子など、幾何学的フラストレーションのある系への適用を考えている。これによって多軌

道系におけるスピン液体状態などの興味深い現象を記述出来ると期待している。②に関しては磁気秩序に関する解析をさらに進めてから論文にする予定である。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況（どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか）や、継続して利用する際に行う具体的な内容

①に関しては幾何学的フラストレーションを適切に取り入れられる試行波動関数の構築を目指す。これにはより多くの変分パラメータを要し、計算機の効率的な並列化も必要になると考えられる。②に関しては金属絶縁体転移の記述にはほぼ成功したと思われるが、絶縁体内での磁気秩序に関してはまだ不十分な点があると考えられる。これには、試行波動関数を改善し、計算のサイズを大きくすることでより発展した結果が得られると考えられる。

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

論文

1. Hiroshi Watanabe and Masao Ogata,

“Crossover from dilute-Kondo system to heavy-fermion system”, arXiv:0911.5202.

【国際会議などの予稿集、proceeding】

proceeding

1. Hiroshi Watanabe and Masao Ogata,

“Ground state properties of randomly-doped Kondo lattice model”, to be appeared in J. Phys. Conf. ser.

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. 渡部洋、柚木清司、小形正男

「f 電子数密度制御による近藤格子モデルの基底状態の変化」

日本物理学会 2009 年秋季大会、熊本大学、2009 年 9 月 25-28 日

【その他】

ポスター発表

1. 渡部洋、柚木清司

“A variational Monte Carlo study of Kondo lattice model”

2009 年度計算科学合同ワークショップ、理研横浜研究所、2009 年 7 月 9-10 日

2. Hiroshi Watanabe and Masao Ogata,

“Ground state properties of randomly-doped Kondo lattice model”,

The International Conference on Magnetism 2009, Karlsruhe, Germany, July 26-31, 2009.

3. 渡部洋、小形正男

「希薄近藤系から重い電子系へのクロスオーバーの理論的研究」

新学術領域研究「重い電子系の形成と秩序化」第 2 回研究会、広島大学、2009 年 8 月 17-18 日

4. 渡部洋、柚木清司、小形正男

「近藤格子モデルを用いた希薄近藤系から重い電子系へのクロスオーバーの理論的研究」

第 3 回物性科学領域横断研究会、東京大学武田ホール、2009 年 11 月 29 日-12 月 1 日

5. Hiroshi Watanabe, Seiji Yunoki, and Masao Ogata,

“Theoretical study of crossover from local Fermi liquid to heavy fermi liquid”

RIKEN Workshop on "Emergent Phenomena of Correlated Materials", RIKEN, Wako, December 2-4.

