

# 強相関電子系における光励起状態の数値的研究

前島展也、日野健一

## 1. 研究背景

光誘起相転移とは、光の照射によって生じる巨視的な状態変化(相転移)を指し、古くはポリジアセチレンやスピנקロスオーバー錯体などの有機化合物から最近の遷移金属酸化物をはじめとする強相関電子系まで、多様な物質群で観測されている。光誘起相転移は、超高速光スイッチングデバイスの動作原理として期待されるほか、量子多体系における非平衡現象の典型的な題材であるため、その発現メカニズムの解明は応用・基礎の両面から極めて重要な研究課題である。

## 2. 研究目的

光誘起相転移現象においては、まず光照射直後に電子移動を伴う光励起状態が生成され、それが一種の種となってマクロな相変化が生じると考えられている。しかしこの最初に生じる光励起状態がどのようなものであるかについては不明な点が多かった。そこで我々は特に遷移金属酸化物など軌道自由度を有する系の最も単純な理論模型である2軌道縮退ハバード模型における光励起状態の性質について数値対角化により調べた。

## 3. 研究結果

1) 2軌道縮退ハバード模型における光励起状態のスピンの軌道相関に関する解析: 近年、ペロブスカイト型遷移金属酸化物における光誘起現象に関する実験的研究が数多く行われている。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) に対する研究がある。 $LaVO_3$  に対する実験では、光照射直後の反射率スペクトルにおける低エネルギー成分の増大などの過渡的变化が明らかにされたが、同物質の特徴である低温領域でのスピン・軌道秩序の変化については今まで明確に議論されていなかった。そこで  $2 \times 2 \times 2$  クラスタ上での2軌道ハバード模型に対する厳密対角化計算を行い、光キャリアがドーピングされた状態では、支配的なスピン・軌道相関が基底状態のものとは全く異なることを明らかにした。ここで励起光の偏光は実験の状況に対応させて  $z$  軸に平行にとるものとしている。図 2(a) に示すように、基底状態においては広いパラメータ領域で C-AF スピン相関・G-AF 軌道相関が支配的となる。この結果は  $LaVO_3$  で観測される長距離秩序と矛盾しない。一方光励起状態の結果[図 2(b)]が示す通り、広いかつ現実的なパラメータ領域で支配的となるのは A-AF スピン相関・ $C_{xy}$ -AF 軌道相関である。ここで  $C_{xy}$ -AF とは軌道相関関数の構造因子の中で、波数  $k/\pi=[101]$  または  $[011]$  に対応する成分が支配的となる状況を意味している。この結果は光照射によってスピン・軌道秩序が大きく変化する可能性があることを示唆している。またなぜこのように基底状態と光励起状態とで大きく性質が異なるかを調べるために、 $z$  方向の飛び移り積分( $t_z$ )と  $xy$  平面内で飛び移り積分( $t_{xy}$ )の大きさの異なる tetragonal な  $2 \times 2 \times 2$  クラスタ上での厳密対角化計算を行いスピン・軌道相関関数を調べた結果、基底状態は、cubic な場合( $t_z = t_{xy}$ )を含む広い領域で、系のスピン・軌道相関 dimer 的( $t_z > t_{xy}$ )な状況になっているのに対し、光励起状態では cubic な場合でも layer 的( $t_z > t_{xy}$ )な系に近いことが分かった。そしてその原因が  $xy$  平面内を遍歴する光励起キャリアにあることを示した。

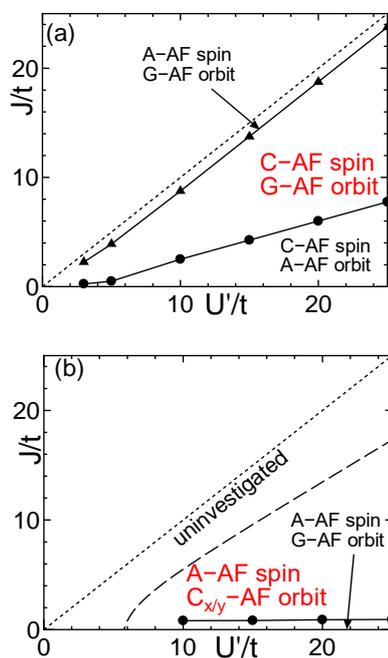


図 1: (a) 基底状態における相図と (b) 光励起状態における相図

謝辞

本研究は、JSPS KAKENHI Grants (No. JP26800163) による研究費支援の基に行われた。

関連論文

- [1] Hikaru Takenaka, Nobuya Maeshima and Ken-ichi Hino, “Spin and Orbital Correlations in Photoexcited States of Multi-Orbital Hubbard Models”, JPS Conf. Proc. **3**, 017026 (2014).
- [2] Fumihiro Imoto, Hikaru Takenaka, Nobuya Maeshima, and Ken-ichi Hino, “Spin and Orbital Correlations of a Photoexcited State of a Two-Orbital Hubbard Model”, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 124705 (2015).