

低次元分子性導体の物性理論



米満 賢治（准教授）

1985年東京大学理学部卒 1990年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了、理学博士 Los Alamos 国立研究所、国際理論物理センター（Trieste）、Georgia 大学で博士研究員、東北大学大学院情報科学研究科助手、同工学部助教授を経て1996年2月より現職
TEL: 0564-55-7312 FAX: 0564-53-4660
電子メール: kxy@ims.ac.jp
ホームページ: <http://magellan.ims.ac.jp/>

有機導体や集積型金属錯体などには分子が集合することによって生じる多様な電子的機能がある。磁性、伝導性、光物性、構造物性などが絡み合い、分子性特有の異方性と柔らかさを使って制御することができる。例えば、組成変化、加圧、光照射などで環境をわずかに変えると、結晶構造、色や磁性が変わることがある。こうした変化の前兆領域は競合し、新しい領域が成長・増殖して、もの全体の性質を変えてしまうこともある。これらの物性の発現機構やダイナミクスを理論的に研究する。

電子相の基底状態や平衡状態で現れる静的性質と励起状態や非平衡で現れる動的性質を系統的に記述する。そのためには結合の強弱各極限からの摂動論、繰り込み群、数値的な電子状態計算、決定論的または確率論的な時間発展を求める方法論などを用いて多面的に考える必要がある。

擬1次元有機導体の電荷秩序の光誘起秩序形成

有機導体の電荷秩序はクーロン相互作用と電子格子相互作用の競合や協力で生じる。対象を選べば、光照射でのみ新たな電荷秩序が得られることや、電子の波動性／粒子性の異なる側面を観測エネルギー次第で引き出せることができた。照射直後の電子とフォノンの役割を探るために、平衡状態の物性に現れない軌道や振動モードを含めた多自由度量子解析を行う。

量子相転移近傍の光誘起ダイナミクス

交互積層型の電荷移動錯体の中に、極低温で常誘電中性相と反強誘電イオン性相の間で量子相転移するものがある。通常の中性イオン性相間の光誘起ダ

イナミクスとは異なる挙動が、量子相転移近傍で観測されている。その光誘起ダイナミクスを解析するため完全に量子的な多自由度の時間発展を扱う。各種振動のコーリレンスや応答の非線形性における量子効果を調べる。

擬2次元有機導体の電荷秩序の光誘起融解ダイナミクス
有機導体では絶縁相において非常に似た電荷秩序をもつものでも、光照射により秩序を融解して金属化する過程が全く異なるものがあることが知られている。これらは光照射により平衡状態から遠く離れた状況をつくることで、相互作用によって秩序安定化への寄与が違うことが明確化される一例である。詳しい解析を通して、相互作用の競合・協力関係を解明する。

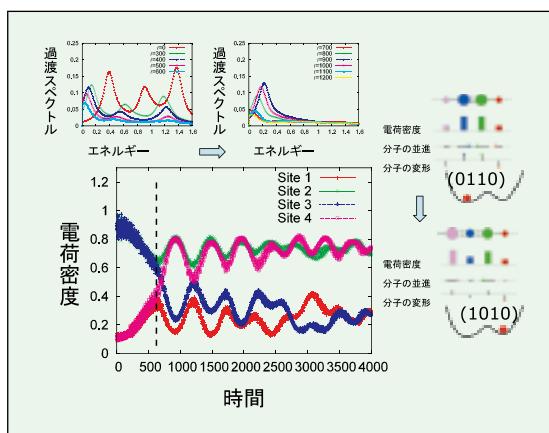
金属半導体界面を通した電荷輸送と秩序変化

電子相関が強い絶縁体に金属との界面を通して電流を流すと、特徴的な輸送特性が現れることがある。時間発展を直接解く方法や非平衡グリーン関数を使う方法で輸送機構を明らかにする。このような定常バイアス下では、平衡状態とは異なる電荷秩序や電荷相関が現れることが知られている。その様子を解明するため、これまで発展させてきた非平衡物性理論を適用する。

これらの問題を、解析的あるいは数値的な方法により研究する。量子力学、統計力学、物理数学などの基礎学力を十分に備えていることが必要不可欠である。

参考文献

- 1) K. Yonemitsu and K. Nasu, "Theory of Photoinduced Phase Transitions in Itinerant Electron Systems," *Phys. Rep.* **465**, 1 (2008).
- 2) K. Yonemitsu, "Enhanced Coherent Dynamics near a Transition between Neutral Quantum-Paraelectric and Ionic Ferroelectric Phases in the Quantum Blume-Emery-Griffiths Model," *Phys. Rev. B* **78**, 205102 (2008).
- 3) K. Yonemitsu, "Nonequilibrium Green's-Function Approach to the Suppression of Rectification at Metal-Mott-Insulator Interfaces," *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 054705 (2009).



機能分子科学専攻