

米 満 賢 治 (助教授) (1996 年 2 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：物性理論

A-2) 研究課題：

- a) 光誘起イオン性中性相転移における鎖間相互作用とコヒーレンス
- b) 1次元強相関電子系における光誘起ダイナミクス
- c) 有機導体の電荷秩序転移におけるクーロン相互作用と電子格子相互作用の協力効果
- d) 中性イオン性量子相転移近傍の量子常誘電性と電荷移動揺らぎ
- e) 有機電荷移動錯体と金属の界面を通じた電荷輸送における電子相関効果

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 交互積層型電荷移動錯体TTF-CAの光誘起相転移についてこれまで1次元モデルでダイナミクスを示したが、現実の物質には鎖間相互作用がある。イオン性相での鎖間引力が相図や格子定数の挙動に本質的な役割を果たしている。そこで鎖間相互作用を取り入れた拡張パイエルス・ハバードモデルの時間依存シュレディンガー方程式を解き、相転移ダイナミクスを調べた。イオン性相を照射すると電荷移動が光密度に対して閾値を示すのに対し、中性相を照射すると線型挙動を示すことは、孤立鎖と同様だった。前者ではモット絶縁体における電子相関のためになかなか動き出せない電子が閾値を越えて一斉に動く。後者ではバンド絶縁体における電子の運動が個別的で協調性を持たない。鎖間相互作用の大きさによって、光誘起イオン性中性相転移の動的挙動が大きく異なることもわかった。弱結合の場合、それぞれの鎖が初期格子揺らぎに依存して異なる光密度で相転移を開始するために、中途半端な光密度ではイオン性鎖と中性鎖が混在した終状態になる。TTF-CAにおけるような強結合の場合、最初の中性ドメイン形成は周囲のイオン性背景により抑制される。しかし一度中性ドメインが形成されると周囲にも中性ドメインを作ってこれらが位相をそろえて成長し、全体が中性になって終わる。実験で観測される巨視的相境界のコヒーレント運動には十分に強い鎖間相互作用が必要なことがわかった。
- b) 遷移金属(M)とハロゲン(X)が交互に並んだ1次元ハロゲン架橋金属錯体(MX鎖)は、M = Niの場合、電子相関に由来するモット絶縁体である。光照射直後の光学伝導度に金属的なドルーデ成分が観測されている。1次元ハバードモデルを厳密対角化してこの光誘起金属相を調べた。モット絶縁体を光照射するとホロンとダブロンとよばれる2種類のキャリアが生成され、それらが系を自由に動きまわることによって金属的な性質が現われた。このホロン・ダブロンの光生成は化学ドーピングによるキャリア注入と極めて類似していることを明らかにした。電子相関が弱いM = Pdの場合、CDW転移により並進対称性が破れてバンド絶縁体になるが、光を照射しても絶縁体のままである。Ni錯体とPd錯体の違いを説明するために電子間クーロン相互作用を最近接Mサイト間まで取り入れた1次元拡張ハバードモデルを用いて理論的解析を行った。M = Pdの場合は最近接サイト間クーロン相互作用が光生成キャリア間引力として強く作用するために励起子を形成して電流の流れにくい状態を作る。M = Niの場合は光生成キャリア間引力効果が相対的に弱くなるために金属状態を維持できる。この効果の違いはPd錯体とNi錯体における電子相関の強さの違いに起因した。
- c) バンド充填率が1/4の2次元有機導体で電荷秩序転移の研究が進んでいる。電荷整列状態が常磁性を示すため電子間相互作用が主役であることが明らかだが、転移は不連続で結晶構造に敏感である。そこで拡張ハバードモデルの

基底状態を厳密対角化により求めつつ、電子格子相互作用の効果を調べた。 θ 型で強い電荷不均化が知られている結晶の低対称構造に基づいた分子軌道重なりを用いると、高対称構造に基づいたものよりも弱いクーロン相互作用で電荷整列が起こる。また、適当な電子格子相互作用を用いれば、低温構造を仮定しなくともその構造がほぼ再現できることがわかった。このような電子間と電子格子間の相互作用の協力効果は、電荷秩序に有利な電荷揺らぎとスピン揺らぎを増強することにより起こる。さて、 α 型で電荷秩序転移における構造変化が小さいものについては、電子格子相互作用の効果も実際に小さい。これら格子効果の強さの傾向は最近の実験で観測された電荷融解の起こりにくさの傾向と一致している。

- d) 交互積層型電荷移動錯体DMTTF-QBr_nCl_{4-n}では組成や圧力により絶対零度で中性イオン性相転移が起きる。転移温度の圧力依存性とバレット公式的常誘電挙動から量子相転移とみなされている。一般に量子常誘電性は局所的な分極が量子揺らぎにより秩序化されないときに現れる。当該物質ではイオン性相において分極が現れるが、中性相においてのみ量子常誘電性が観測されている。この起源を考察するためにイオン性相の分極の向きを $S^z = +1$ と $S^z = -1$ で中性相を $S^z = 0$ で表し、量子ブルーム - エメリー - グリフィスモデルの平均場解を求めた。この擬1次元古典版はTTF-CAの強誘電および常誘電のイオン性相と中性相を再現する際の基礎となる。量子項のため電荷移動揺らぎが発生して電荷移動量は0でも1でもない中間の値をとる。その結果として、量子相転移点近傍の中性相でバレット公式的常誘電挙動が現れることがわかった。
- e) 有機電荷移動錯体結晶上に電界効果トランジスタを作成すると、その電流 - ゲート電圧特性は結晶の電子状態による。モット絶縁体であれば両極的特性が、バンド絶縁体であれば単極的特性が観測されている。この起源をチャンネルとソース / ドレイン電極を含め1次元化して考えた。界面での障壁形成に必要な静電ポテンシャルはポワソン方程式により求める。物質間の仕事関数差を考慮したハバードモデルの電流を計算し、この特性を再現した。しかしゲート電極は絶縁膜をととしてチャンネルに効果を及ぼすので、ポワソン方程式の境界条件として扱うには限界がある。もしチャンネルとソース / ドレイン電極の界面が本質的であればゲートをはずし、2つの電極にそれぞれ仕事関数の大きく異なる別の金属を使えばよい。この電流 - 電圧特性を調べれば、電子相関と界面障壁の絡み合いをみることができる。実際に結晶がバンド絶縁体のときのみ整流作用が得られることが実験で観測され、理論計算でも再現してこれを実証できた。モット絶縁体の場合、界面での障壁が高くて後方散乱が強くなるに応じて、結晶中のバンド充填率が半分からずれてウムクラップ散乱が弱くなる。その結果、電圧の符号でなく絶対値に応じた電流が流れることがわかった。

B-1) 学術論文

K. YONEMITSU, “Mechanism of Ambipolar Field-Effect Carrier Injections in One-Dimensional Mott Insulators,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 2544–2553 (2005).

N. MAESHIMA and K. YONEMITSU, “Photoinduced Metallic Properties of One-Dimensional Strongly Correlated Electron Systems,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 2671–2674 (2005).

M. INDERGAND, Y. YAMASHITA, H. KUSUNOSE and M. SIGRIST, “Effective Interaction between the Interpenetrating Kagome Lattices in Na_xCoO₂,” *Phys. Rev. B* **71**, 214414 (19 pages) (2005).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. YONEMITSU, “Theory of Photoinduced Phase Dynamics in Organic Charge-Transfer Complexes,” *J. Lumin.* **112**, 279–282 (2005).

J. KISHINE, T. OHARA, T. LUTY and K. YONEMITSU, “Interchain Coulomb-Lattice Relaxation and Multicriticality in Charge-Transfer Organic Complexes,” *Synth. Met.* **154**, 257–260 (2005).

K. YONEMITSU, “Photoinduced Dynamics and Nonequilibrium Characteristics in Quasi-One-Dimensional Electron Systems: Mott Insulators vs. Band Insulators,” *J. Phys.: Conf. Series* **21**, 30–37 (2005).

N. MAESHIMA and K. YONEMITSU, “Optical Responses of Photoexcited States in the One-Dimensional Ionic Hubbard Model,” *J. Phys.: Conf. Series* **21**, 183–188 (2005).

Y. YAMASHITA and K. YONEMITSU, “Quantum Ising Model Coupled with Conducting Electrons,” *J. Phys.: Conf. Series* **21**, 232–236 (2005).

N. MAESHIMA, K. OKUNISHI, K. OKAMOTO, T. SAKAI and K. YONEMITSU, “Field-Induced Phase Transitions and Long-Range Orders in the $S = 1/2$ Spin Bond-Alternating Chain with Frustrating Interaction,” *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.* **74**, 63–66 (2005).

A. MATSUO, K. HOSOKAWA, Y. NARUMI, K. OKUNISHI, N. MAESHIMA, T. ASANO, Y. AJIRO, N. ISHIDA, T. NOGAMI and K. KINDO, “Effect of Staggered Field on the Magnetization Process of $S = 1/2$ Antiferromagnetic Chains,” *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **159**, 158–162 (2005).

K. UEDA and Y. YAMASHITA, “Magnetism in Strongly Correlated and Frustrated Systems,” *Physica B* **359**, 626–632 (2005).

B-4) 招待講演

米満賢治, 「分子集合体の協調的電荷移動と非平衡物性」, 平成16年度第2期菅野シンポジウム, 東京大学駒場キャンパス, 2005年3月.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Dynamics and Nonequilibrium Characteristics in Quasi-One-Dimensional Electron Systems: Mott Insulators vs. Band Insulators,” Second International Conference on Photo-induced Phase Transitions; Cooperative, Nonlinear and Functional Properties, Rennes (France), May 2005.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Neutral-Ionic Transition Dynamics in Quasi-One-Dimensional Electron-Lattice Systems: Effects of Interchain Interactions,” International Symposium on Molecular Conductors—Novel Functions of Molecular Conductors under Extreme Conditions—, Hayama (Japan), July 2005.

前島展也, 「フラストレートした擬一次元系の磁場誘起非整合秩序」, 日本物理学会 2005年秋季大会 シンポジウム「低次元量子スピン系の新しい非整合秩序——スピンのスーパーソリッド——」, 同志社大学京田辺キャンパス, 2005年9月.

K. YONEMITSU, “Mechanism of Ambipolar Field-Effect Transistors on One-Dimensional Organic Mott Insulators,” The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本物理学会名古屋支部委員 (1996-97, 98-2000).

日本物理学会第56期代議員 (2000-01).

日本物理学会領域(分子性固体・有機導体分野)世話人 (2003-04).

学会誌編集委員

日本物理学会誌, 編集委員 (1998-99).

B-10) 外部獲得資金

重点領域研究(公募研究), 「半充填近傍のスピンギャップと束縛対生成に対するフォノンの効果」, 米満賢治 (1996年).

重点領域研究(公募研究), 「微小磁性体中の束縛された電子の運動と伝導性, トンネル現象の研究」, 米満賢治 (1997年).

奨励研究(A), 「二バンド系における強相関電子相と次元クロスオーバー」, 米満賢治 (1998年-1999年).

基盤研究(C), 「低次元分子性導体の電荷秩序と絶縁機構, 光誘起非線型ダイナミクス」, 米満賢治 (2000年-2002年).

基盤研究(C), 「分子性物質の光誘起相転移と非平衡秩序形成」, 米満賢治 (2003年-2006年).

特定領域研究(計画研究), 「極限環境下の分子性導体における集団的な電荷ダイナミクスの理論」, 米満賢治 (2003年-2007年).

産学連携等研究費(NAREGI ナノ磁性班), 「分子性物質におけるナノ構造からの非平衡相転移と電子物性」, 米満賢治 (2003年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

分子性物質を平衡状態から遠くにもっていったときの現象を理論的に研究している。そのうち光誘起相転移については、時間分解能の飛躍を伴った実験技術の進歩とともに、古典統計模型による確率論的時間発展から遍歴電子模型による決定論的時間発展へと理論的にも進展してきた。さらに物質及び電子状態に応じてかなり定量的に解析できるようになった。この中で今後飛躍的な進展が望める課題として、電子相関効果が特徴的に現れる1次元電子系における励起子効果や格子効果と光照射後超高速応答・緩和現象、広い時間スケールでの電荷揺らぎと電荷秩序化が観測されている2次元電子系における長距離クーロン相互作用と電子格子相互作用の協力効果と低温結晶構造及び光誘起電荷融解・臨界緩和現象、量子相転移近傍の光誘起巨大応答と量子臨界性の関連性などを挙げている。非線型感受率を通して初めて低次元有機導体とペロブスカイト酸化物における量子臨界性を統一的に理解できると考えている。これらとは別に、分子性物質と金属界面を通した電荷輸送における電子相関と集団運動の問題を、緩和過程から明らかにする。