

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) 1 次元 $1/4$ フィルド有機塩の光誘起電荷秩序融解ダイナミクス
- b) 二量化した 1 次元モット絶縁体の光誘起逆スピン・パイエルズ転移過程
- c) 2 次元 $1/4$ フィルド α 型および θ 型有機塩の電荷秩序に対する格子効果の違い
- d) 中性イオン性転移近傍の量子フォノンと結合した 1 次元電子状態

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 1 次元 $1/4$ フィリング系の有機塩 (EDO-TTF) $_2$ PF $_6$ は低温で (0110) 型の電荷秩序をもつことが知られ、サイト・エネルギー変調型とトランスファー変調型の電子フォノン相互作用が効いている。光学伝導度の主な 2 つのピークは (0200) および (1010) への電荷移動励起によるもので、対応する励起状態の断熱ポテンシャルの形状は大きく異なり、光誘起融解ダイナミクスも異なる。古典的なフォノンと結合した厳密な多電子波動関数の発展を、時間依存シュレディンガー方程式を解くことで求めた。(0200) 励起ではトランスファーを変調する変位をまず小さくし、融解効率は 2 種類のフォノンの周波数比に大きく依存する。一方、(1010) 励起では両変位を同時に小さくし、融解効率はむしろ励起エネルギーに依存する。電荷秩序の光誘起融解にどちらの励起が効率的かはこれらの条件による。
- b) 1 次元 $1/2$ フィリング系の有機錯体 K-TCNQ は室温でスピン・パイエルズ相にあって、非磁性で二量化している。ダイマー内とダイマー間の電荷移動励起について、二量化ハバード模型を使って厳密対角化による数値計算と二量化の強い極限からの摂動計算を行った。ダイマー間励起で電子と正孔が離れるときにスピン交替が著しく減少し、断熱ポテンシャルは二量化を解くほうに下がり、光誘起融解を引き起こす。光照射でダイマー間電荷移動励起をした直後の光学伝導度に、荷電ダイマー内の励起によるギャップ内準位が存在する。これは格子緩和を必要としないので光照射後瞬時に現れ、実験結果と矛盾しない。
- c) 2 次元 $1/4$ フィリング系の α 型および θ 型の BEDT-TTF 塩は低温で水平ストライプ型の電荷秩序をもつことが知られ、長距離クーロン斥力が主な起源とされている。しかしクーロン斥力だけでは異なる型の電荷秩序をもつこと、実際には電荷秩序転移に結晶構造の変化が伴うことなどから、電子格子相互作用の重要性を指摘してきた。しかし α 型と θ 型では格子との結合が同程度でも格子変位は大きく異なり、後者のほうがずっと大きい。異方的三角格子上の拡張ハバード模型にトランスファー変調型の相互作用を取り入れ、厳密対角化による少数系の数値計算、強結合極限からの摂動計算、無限系の有限温度を含めた平均場計算でこれを説明した。 α 型の結晶構造は高温でも対称性が低いために既に電荷不均化があるので、低温の電荷秩序に対する格子変位の寄与は小さい。
- d) 中性イオン性転移を示す交互積層型電荷移動錯体の中で、化学圧力効果などで相転移を零度付近に抑えたものでは、量子相転移が起こることと近傍で量子常誘電相が現れることを、量子スピン 1 の模型で説明してきた。しかし電子系としての誘電応答を議論するため、量子スピンで表現した量子フォノンと結合した 1 次元イオン性拡張ハバード模型の多体波動関数を数値的に厳密に求めた。フォノンの量子性を大きくすると、相転移が不連続から連続に変わり、イオン性相が抑制されることがわかった。

B-1) 学術論文

K. YONEMITSU and K. NASU, “Theory of Photoinduced Phase Transitions,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 011008 (8 pages) (2006).

K. YONEMITSU, “Interchain Coupling Effects on Photoinduced Phase Transitions between Neutral and Ionic Phases in an Extended Hubbard Model with Alternating Potentials and an Electron-Lattice Coupling,” *Phys. Rev. B* **73**, 155120 (7 pages) (2006).

N. MAESHIMA, K. OKUNISHI, K. OKAMOTO, T. SAKAI and K. YONEMITSU, “Possibility of Field-Induced Incommensurate Order in a Quasi-One-Dimensional Frustrated Spin System,” *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 4819–4826 (2006).

N. MAESHIMA and K. YONEMITSU, “Dynamics of Photoexcited States in One-Dimensional Dimerized Mott Insulators,” *Phys. Rev. B* **74**, 155105 (11 pages) (2006).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

B. HÜLSEN, F. X. BRONOLD, H. FEHSKE and K. YONEMITSU, “Phase Diagram of the Excitonic Insulator,” *Physica B* **378-380**, 267–268 (2006).

K. YONEMITSU, “Interchain-Coupling Effects on Photoinduced Neutral-Ionic Transition Dynamics in Mixed-Stack Charge-Transfer Complexes,” *J. Low Temp. Phys.* **142**, 499–502 (2006).

B-4) 招待講演

米満賢治, 「分子性半導体 / 金属界面のキャリア輸送(理論)」日本物理学会第61回年次大会領域7シンポジウム「分子性半導体素子の新展開」松山大学, 2006年3月.

K. YONEMITSU and N. MAESHIMA, “Correlated Charge Transport through Mott-Insulator-Metal Interfaces,” International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM2006), Dublin (Ireland), July 2006.

米満賢治, 「有機半導体における電子相関に依存した光誘起相転移ダイナミクス」日本物理学会2006年秋季大会領域5領域7合同シンポジウム「強相関電子系における光誘起相転移の超高速ダイナミクス」千葉大学, 2006年9月.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Phase Transition Dynamics Depending on Correlations in Quasi-One-Dimensional Organic Systems,” Universite de Rennes 1, Rennes (France), October 2006.

Y. YAMASHITA and K. YONEMITSU, “Quantum Paraelectricity near the Neutral-Ionic Critical Point,” Universite de Rennes 1, Rennes (France), October 2006.

S. MIYASHITA and K. YONEMITSU, “Cooperative Effects of Electron Correlations and Lattice Distortions on Charge Ordering in 1/4-Filled-Band Organic Salt, θ -(BEDT-TTF) $_2$ RbZn(SCN) $_4$,” Universite de Rennes 1, Rennes (France), October 2006.

米満賢治, 「光による秩序融解の理論: 電荷移動 / 振動過程に依存するダイナミクス」ナノ光制御による巨視的秩序形成と物性発現に関する研究会, 名古屋大学, 2006年12月.

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7 (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).

Journal of the Physical Society of Japan, 編集委員 (2006-).

B-10) 外部獲得資金

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-2005年).

産学連携等研究費(ナノ統合拠点ナノ電子系)「光誘起集団電荷移動と伝導の制御」米満賢治 (2006年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

分子性物質を意図的に非平衡の環境下においたときの電子物性の変化や機能を理論的に研究している。そのなかで光誘起相転移とダイナミクスについて調べてきたが, 光励起のしかたによって異なるダイナミクスがかなり明らかになってきた。特に, 励起された荷電体の振舞いや, 関わっている振動モードの周波数比に依存して, 光誘起状態変化が巨視的なものになるかどうか, 最終状態が大きく異なってくることが計算でみえてきた。また, 電子間相互作用が優勢であっても格子との弱い結合が状況によっては電子状態に大きな影響を及ぼすこと, それは非平衡ダイナミクスで顕著になることもわかってきた。これはかつて平衡状態の電子物性で理解が進んできた, 競合する相互作用のもたらす現象の非平衡への展開のなかで初めてみえてきたことである。相互作用の直接的な帰結である多電子と互いに結合したフォノンの協働性が量子統計力学の中でどう発現するかが問題となる。この協調的な運動が顕著になるコヒーレンスが量子の世界でどう振舞うかを追求する。