

米 満 賢 治 (准教授) (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) 有機塩 (EDO-TTF)₂PF₆ の光誘起電荷新秩序とコヒーレンスのプローブ依存
- b) スピン・パイエルス絶縁体の光誘起ポラロン状態とスピン電荷結合励起
- c) α 型および θ 型有機塩 (BEDT-TTF)₂X の電荷秩序相転移の詳細比較
- d) 金属絶縁体界面を通した電荷輸送特性の絶縁機構による違い

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 擬 1 次元 1/4 フィリング系の有機塩 (EDO-TTF)₂PF₆ は、(0110) 型電荷秩序をもつ絶縁相において光照射すると伝導度が桁違いに上がるため、光誘起絶縁体金属転移とみなされてきた。しかし、光誘起伝導度スペクトルの形状は高温金属相のそれと大きく異なり、謎であった。そこで従来のパイエルス・ホルシュタイン・ハバードモデルを拡張し、 π 電子間の長距離クーロン相互作用とアニオンによる電子格子相互作用を考慮した。これらは、平衡状態の性質をほとんど変えないように繰り込むことが可能だが、光誘起ダイナミクスを本質的に変える。観測されている過渡スペクトルを再現するパラメタでは、(1010) 型の新たな電荷秩序とキャリアーが光照射により生成されていた。スペクトルは高エネルギーではコヒーレントに、低エネルギーではインコヒーレントに振動しており、これも実験を再現する。これは観測するエネルギーに対応して、電子運動のスケールが違うことによる。
- b) 1 次元スピン・パイエルス絶縁体の K-TCNQ は、光照射により二量化が弱まりギャップが減少する様子が理論的によく説明されていたが、光照射直後に現れるギャップ内状態の起源が謎であった。格子緩和を必要としない純粋に電子的な瞬時の変化だとすると、伝導度スペクトルのドルーデ成分がないことと矛盾する。そこで、パイエルス型とホルシュタイン型の電子格子相互作用を考慮し、格子緩和の強さを変えながら伝導度スペクトルを計算した。ギャップ内状態のエネルギーを再現するにはパイエルス型の格子歪みが必要なことをつきとめた。ギャップ内状態は、格子自由度がなければ分離しているスピンと電荷の結合した励起状態であることを、励起エネルギーおよびスピン密度と電荷密度の相対分布の解析評価から示した。
- 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、ともに長距離クーロン相互作用が効いて、低温で電荷秩序をもつ。しかし θ 型は電子格子相互作用なしでは、低温での結晶構造も水平ストライプ型の電荷秩序も再現されないこと、特に分子回転によるトランスファー積分の変調が効くこと、α 型は電子格子相互作用の影響が小さいことを示してきた。どちらの塩も不連続転移をするが、θ 型はとびが大きく、α 型はとびが小さいことも理論的に再現できた。θ 型では高温で 3 倍周期の電荷相関をもつことと関係している。これらにより電荷秩序の光誘起融解ダイナミクスにおける格子効果を計算するための基礎データを得られた。
- d) 金属と絶縁体を接すると一般に仕事関数が異なるためにショットキー障壁が生じる。通常のバンド絶縁体の場合は、電圧の向きによって電流の絶対値が大きく変わる整流作用が現れ、モット絶縁体の場合は、整流作用が抑制されることを示してきた。しかし、界面付近のポテンシャル変化を求める際に、これまで収束が悪く電流を過小評価していた。これを回避するため、ポワソン方程式を解く際に電子密度とポテンシャルの関係を仮定することにより解析的に解を求め、それをを用いた量子的時間発展計算を行った。バンド絶縁体とモット絶縁体の電流電圧特性を実験結果と比較し、非常に良い一致をみた。

B-1) 学術論文

- Y. TANAKA and K. YONEMITSU**, “Effects of Electron-Lattice Coupling on Charge Order in θ -(ET)₂X,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 053708 (5 pages) (2007).
- S. MIYASHITA and K. YONEMITSU**, “Charge Ordering in θ -(BEDT-TTF)₂RbZn(SCN)₄: Cooperative Effects of Electron Correlations and Lattice Distortions,” *Phys. Rev. B* **75**, 245112 (6 pages) (2007).
- N. MAESHIMA and K. YONEMITSU**, “Charge-Transfer Excitations in One-Dimensional Dimerized Mott Insulators,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 074713 (5 pages) (2007).
- H. INOUE and K. YONEMITSU**, “Relaxation Process in the Photoinduced Neutral-Ionic Paraelectric–Ferroelectric Phase Transition in Tetrathiafulvalene-*p*-Chloranil,” *Phys. Rev. B* **75**, 235125 (13 pages) (2007).
- K. YONEMITSU and N. MAESHIMA**, “Photoinduced Melting of Charge Order in a Quarter-Filled Electron System Coupled with Different Types of Phonons,” *Phys. Rev. B* **76**, 075105 (6 pages) (2007).
- K. YONEMITSU, N. MAESHIMA and T. HASEGAWA**, “Suppression of Rectification at Metal–Mott-Insulator Interfaces,” *Phys. Rev. B* **76**, 235118 (7 pages) (2007).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- N. MAESHIMA and K. YONEMITSU**, “Theory of Optical Responses of Photoexcited Halogen-Bridged Metal Complexes in Different Insulating Phases,” *Multifunctional Conducting Molecular Materials*, G. Saito, F. Wudl, R. C. Haddon, K. Tanigaki, T. Enoki, H. E. Katz and M. Maesato, Eds., RSC; Cambridge, 185–188 (2007).
- K. YONEMITSU**, “Mechanism of Ambipolar Field-Effect Transistors on One-Dimensional Organic Mott Insulators,” *Multifunctional Conducting Molecular Materials*, G. Saito, F. Wudl, R. C. Haddon, K. Tanigaki, T. Enoki, H. E. Katz and M. Maesato, Eds., RSC; Cambridge, 276–281 (2007).

B-3) 総説、著書

- 米満賢治, 「光で電子を一斉に動かし物性を変えるしくみの理論」*光アライアンス (Optical Alliance)* **18**, No.7, 29–33 (2007).

B-4) 招待講演

- 米満賢治, 「強相関電子系としての分子性物質の非平衡協力現象」第22回日本原子力研究開発機構・兵庫県立大学合同コロキウム, SPring-8, 2007年2月.
- K. YONEMITSU**, “Theoretical Approaches to Photoinduced Phase Transition Dynamics,” 2nd France-Japan Advanced School on Chemistry and Physics of Molecular Materials, Tokyo (Japan), March 2007.
- K. YONEMITSU and N. MAESHIMA**, “Photoinduced Melting Dynamics in Spin-Peierls and Charge-Ordered Systems,” 4th Japan-France Symposium on Molecular Materials: Electronics, Photonics and Spintronics, Tokyo (Japan), March 2007.
- 米満賢治、前島展也, 「1/4 フィルド電子系の電荷秩序に対する異なるフォノンの役割と光誘起融解ダイナミクス」物質科学セミナー, 東京工業大学, 2007年4月.
- 米満賢治, 「光誘起相転移ダイナミクスの理論: 秩序の融解と過渡スペクトル」分子性導体の機能・構造に関する研究と放射光利用研究会, SPring-8, 2007年6月.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Melting of Charge and Lattice Orders Viewed from Theoretical Transient Spectra,” Pre-conference “Photoinduced Phase Transition” Seminar, Wroclaw (Poland), June 2007.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Charge Order and Melting Dynamics in Quarter-Filled Organic Conductors,” 9th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena, Beijing (China), October 2007.

K. YONEMITSU, “Suppressed Rectification and Ambipolar Field-Effect Injections through Metal–Mott-Insulator Interfaces,” Oak Ridge National Laboratory Materials Science and Technology Seminar, Oak Ridge (U.S.A.), November 2007.

K. YONEMITSU, “Photoinduced Charge Order and Melting Dynamics in 1/4-Filled Organic Conductors,” International Meeting of Japan-France Core-to-Core Project, Rennes (France), December 2007.

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 (1996–1997, 1998–2000).

日本物理学会第56期代議員 (2000–2001).

日本物理学会領域7 (分子性固体・有機導体分野)世話人 (2003–2004).

日本物理学会第63期～第64期代議員 (2007–).

学会誌編集委員

日本物理学会誌, 編集委員 (1998–1999).

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

B-10) 外部獲得資金

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).

基盤研究(C), 「分子性低次元導体の光誘起相転移動力学の理論」米満賢治 (2007年–2010年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで強相関電子系としての分子性物質が非平衡状態において発現する機能やダイナミクスを中心に研究してきた。現実には重要でありながら強相関電子系としては取り扱いが難しいものとして緩和過程がある。系と熱浴の結合でなく、系そのものの性質が緩和速度に影響している可能性が、光誘起ダイナミクスに関して示唆されながら、まだ誰も答えられていない。また、金属絶縁体界面を通した電荷輸送について、これまで量子的時間発展に基づいた計算を行ってきた。しかし、定常状態を扱うには金属電極や摂動の導入に無限大を考慮する必要がある。これらに共通の課題は、数値計算の可能な有限系での非平衡ダイナミクスと無限系との関係である。これらにアプローチすべく、解析的な方法と数値計算を組み合わせることを考えている。界面を通した輸送については電流のほか熱流を、非平衡環境を与えるものとして電場のほかに温度勾配をも含め、より広い視点から電子系の非平衡ダイナミクスを研究していく。