

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) 電荷秩序を持つ 2 次元有機導体のフラストレーション，分子変位と光誘起ダイナミクス
- b) モット絶縁相にある 2 次元有機導体の励起エネルギーに依存する光誘起ダイナミクス
- c) 金属電極に接合された 2 次元電荷秩序系の電位差に依存した電荷分布と電流密度

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2 次元 1/4 フィリングの有機導体で互いにとても似た水平型電荷秩序をもつ 型および 型の $(\text{BEDT-TTF})_2\text{X}$ では、光誘起ダイナミクスが大きく異なることが実験で観測され、昨年まで平衡状態近くを中心に 2 次元拡張パイエルス・ハバード模型に基づき理論研究を進めてきた。ここでは時間依存シュレディンガー方程式を平均場近似の波動関数や電子相関をフルに取り入れた厳密な波動関数に対して解いて、光誘起ダイナミクスを系統的に調べた。金属化しやすい 型塩は、高温金属相ですでに電荷不均化が起きているが、それは低対称な結晶構造がもつトランスファー積分配置によるもので、運動エネルギー由来であり、相互作用由来でない。低温における格子歪みはさらなる電荷不均化を生むが、局所的な現象なので、たとえば光を局所的に照射するだけで解消し全体に波及する。金属化しにくい 型塩は、高温金属相で見られる高対称な結晶構造では、異なる秩序がせめぎ合うフラストレートした状態に近い。低温で分子面の回転に伴って電荷ストライプ全体が強く安定化するため、光励起されたストライプだけが融けて全体に広がらない。全体的に光照射しても、ダイナミクスに顕著な違いが現れる。それは格子歪みが弱まった瞬間に 型塩でのみフラストレーション由来の擬縮退した励起状態が関与するため、 型塩に比べて電荷振動はインコヒーレントになる。
- b) 2 次元 1/4 フィリングの 型 $(\text{BEDT-TTF})_2\text{X}$ では、低温でモット絶縁体になっているが、光照射により金属に転移することが実験で観測されている。伝導性に直接関連する低エネルギーでの反射をみると、励起光のエネルギーに依存して応答時間が大きく異なることが報告されており、金属へ転移する際の経路が異なることが示唆された。2 次元パイエルス・ハバード模型の時間依存シュレディンガー方程式を電子相関はフルに取り入れて解き、実験結果と矛盾しない電子状態の時間変化を得た。通常は正孔を平均的に 1 個もつ二量体を一つのサイトとみなしているが、二量体の中の分子軌道を明示的に扱うことで、二量体間の電荷移動励起と二量体内の電荷移動励起を区別することが重要である。前者では絶縁相に電荷担体を直接的に超高速に導入することができるが、後者では絶縁相における正孔間の有効相互作用を格子変位により変調するために遅い応答を示すことが分かった。
- c) 静電バイアス下での 2 次元有機導体は多様な非線形伝導や振動を示し、それらの電子的機構を理解することが求められている。そのため、これまで金属絶縁体界面を通した 1 次元電子系の輸送に発展させてきた非平衡グリーン関数法を、相互作用する 2 次元電子系に応用した。準備段階として 2 倍周期の電荷秩序を持つ 2 次元正方格子や 2 または 3 倍周期の電荷秩序をもつ 2 次元異方的三角格子の上で、クーロン相互作用と電子格子相互作用をもつ電子系を考えた。定常な非平衡電子状態を、格子変位とともに自己無撞着に計算した。熱平衡状態において温度や相互作用パラメタなどを変えて起こる通常の相転移が連続であっても、バイアスを変えて起こる相転移は一般に非連続であることがわかった。

B-1) 学術論文

K. YONEMITSU and N. MAESHIMA, “Coupling-Dependent Rates of Energy Transfers from Photoexcited Mott Insulators to Lattice Vibrations,” *Phys. Rev. B* **79**, 125118 (6 pages) (2009).

K. YONEMITSU, “Nonequilibrium Green’s-Function Approach to the Suppression of Rectification at Metal–Mott-Insulator Interfaces,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 054705 (8 pages) (2009).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. YONEMITSU and N. MAESHIMA, “Energy Transfer to Phonons after Photoexcitation in One-Dimensional Correlated Electron-Phonon Systems,” *Phys. Status Solidi C* **6**, 240–243 (2009).

N. MAESHIMA, K. YONEMITSU and K. HINO, “Photogenerated Polaronic State in a One-Dimensional Dimerized Mott Insulator K-TCNQ,” *J. Phys.: Conf. Series* **148**, 012005 (4 pages) (2009).

S. MIYASHITA and K. YONEMITSU, “Effects of Spin Fluctuations, Charge Fluctuations and Lattice Distortions on Charge Orders in θ - and α -Type BEDT-TTF Salts,” *J. Phys.: Conf. Series* **148**, 012006 (3 pages) (2009).

K. YONEMITSU, N. MAESHIMA, Y. TANAKA and S. MIYASHITA, “Photoinduced Melting and Charge Order in Quarter-Filled Organic Conductors: Itinerant Electron Systems with Competing Interactions,” *J. Phys.: Conf. Series* **148**, 012054 (5 pages) (2009).

Y. TANAKA and K. YONEMITSU, “Photoinduced Melting of Charge Order in Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” *J. Phys.: Conf. Series* **148**, 012063 (3 pages) (2009).

S. MIYASHITA, Y. YAMASHITA, K. YONEMITSU, A. KOGA and N. KAWAKAMI, “Mott Insulating State in a Quarter-Filled Two-Orbital Hubbard Chain with Different Bandwidths,” *J. Phys.: Conf. Series* **150**, 042128 (4 pages) (2009).

Y. TANAKA and K. YONEMITSU, “Role of Electron–Lattice Couplings on Charge Order in Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” *J. Phys.: Conf. Series* **150**, 042204 (4 pages) (2009).

B-3) 総説，著書

米満賢治, 「理論が解き明かす光誘起相転移」*化学と工業 (Chemistry & Chemical Industry)* **62**, No. 8, 892–894 (2009).

B-4) 招待講演

米満賢治, 宮下 哲, 田中康寛, 「擬2次元有機導体の電荷秩序の光誘起融解：フラストレーションと格子安定性の違いが生むダイナミクス」強相関フォトエレクトロニクスセミナー，産業技術総合研究所，2009年5月.

田中康寛, 米満賢治, 「有機導体 α -(ET)₂I₃, θ -(ET)₂RbZn(SCN)₄ の電荷秩序，格子歪みと光誘起融解」基礎研究会「分子性導体における質量ゼロのディラック粒子とその新展開」京都大学，2009年7月.

K. YONEMITSU, S. MIYASHITA and Y. TANAKA, “Frustration and Lattice Effects on Photoinduced Melting of Charge Orders in Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” The 64th Yamada Conference, “The 8th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets,” Niseko (Japan), September 2009.

K. YONEMITSU and Y. TANAKA, “Photoinduced Charge-Ordered Insulator-to-Metal Transitions Governed by Frustration and Lattice Effects,” 5th International Symposium on Molecular Materials: Electronics, Photonics and Spintronics, Rennes (France), October 2009.

米満賢治,「電荷秩序絶縁体から金属への光誘起相転移: フラストレーションや格子ひずみに敏感なダイナミクス」知能物理工学科談話会, 横浜国立大学, 2009年11月.

田中康寛, 米満賢治,「二次元有機導体における電荷秩序の光誘起融解の理論」基礎物理学研究所研究会「相関電子系における光誘起現象」京都大学, 2009年12月.

米満賢治,「光に誘起された電子状態変化に対する異なる理論的アプローチ」基礎物理学研究所研究会「相関電子系における光誘起現象」京都大学, 2009年12月.

米満賢治,「電荷秩序絶縁体から金属への光誘起相転移: フラストレーションや格子歪みに敏感なダイナミクス」G-COE 研究会「金属錯体の固体物性科学最前線——錯体化学と固体物性物理と生物物性の連携新領域創成をめざして——」東北大学, 2009年12月.

B-6) 受賞, 表彰

山下靖文, 第3回日本物理学会若手奨励賞 (2009).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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66期代議員 (2007–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会産学協力研究委員会「分子系の複合電子機能第181委員会」委員 (2008–).

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-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「分子集合体論」2009年5月19日–6月9日.

横浜国立大学大学院工学府,「固体物性理工学」2009年11月25日–27日.

B-10) 競争的資金

日本学術振興会科研費基盤研究(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).

日本学術振興会科研費基盤研究(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).

文部科学省科研費特定領域研究(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).

日本学術振興会科研費基盤研究(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

分子性物質の持つ電子的な可能性を開拓するため、熱平衡状態から遠く離れた非平衡かつ協同的な現象として、光誘起相転移とそのダイナミクスを理論的に研究してきた。いまでは分子性物質に限っても既実現されている、絶縁体と金属、電荷秩序と融解、イオン性と中性、強誘電性と常誘電性、非磁性と常磁性などの間の転移を理論的にかなり記述できるようになった。その動的制御可能性を特に超高速で追及するためには、電子の動きも分子の動きも量子的に振る舞う光励起直後の短時間挙動から、それらが古典的あるいは統計的に振る舞う長時間挙動までをつなぐ必要がある。絶縁体を金属にするには異なる経路があり、光励起のしかたによって経路を変えられることが実験で示唆されており、その具体的な挙動を追求する予定である。さらに、異種物質間の界面を通した輸送と光励起を組み合わせた現象は、将来の可能性を秘めているテーマであるが、競合する相互作用を持つ電子系の電子状態の多様性の視点から研究を始めたい。