

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) 電荷秩序の光誘起融解の初期過程における電荷移動と分子振動の量子干渉
- b) 1次元絶縁体のサイズに依存して連続変化する絶縁破壊機構と伝導特性
- c) 光誘起ダイナミクスが示す中性イオン性相転移に対する分子振動の役割

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電荷秩序を有し、光誘起融解ダイナミクスがよく調べられている α -(BEDT-TTF)₂I₃ の初期過程に注目した。電荷秩序を安定化するのに最も重要なのはクーロン相互作用である。光照射後数百フェムト秒の時間スケールでは分子配置の変化に対応する格子振動との結合が見えていた。光照射直後数十フェムト秒では、相関をもつ多電子の運動と分子変形に対応する分子振動が見えることがわかった。これは分子間の電子移動と分子振動の励起が同程度のエネルギーで起こるためであり、これらが量子的に干渉してファノ反共鳴を起こす。従来の異方的三角格子上の拡張パイエルス・ハバード模型に分子振動とのホルシュタイン結合を加えて計算を行った。多電子・フォノン系の厳密な波動関数の時間発展から、この干渉挙動を求めて実験結果とよい一致をみた。光照射は分子間の電子移動を駆動し、分子振動を励起する。これらの位相が逆になって弱め合った後に分子振動に相当する周期で電子が分子間で揺さぶられる。これらの位相がずれた後に金属への相転移が起きる。光照射前の電荷秩序を主に安定化しているのはクーロン相互作用だが、分子振動との結合もかなり安定化に寄与していることがわかった。
- b) 絶縁破壊による非線形伝導機構として、ランダウ・ツェナーの議論したものと、一方の金属電極から物質の準位を通して他方の金属電極に電子が移動するものがある。これらは文献でしばしば混同されているが本来は違う現象である。これらの関係を見るため非平衡グリーン関数法を用い、絶縁体と金属電極の結合を顕わに取り入れて電流電圧特性を計算した。トランスファー積分交替によるバンド絶縁体とオンサイト斥力によるモット絶縁体のそれぞれの模型に、界面付近のポテンシャル変調を生む長距離クーロン相互作用を加え、ハートリー近似で非平衡定常状態を求めた。系が小さいとき左右の金属の化学ポテンシャルが伝導帯と価電子帯に位置して電子が流れ始めるのに対し、系が大きいときはランダウ・ツェナーの絶縁破壊が起きる。前者は閾値電圧を、後者は閾値電場を持つ。つまり後者では電場下で電子正孔対が絶縁体の相関長だけ離れて得るエネルギーが電荷ギャップを超えたときに電子が流れる。これらの間の移り変わりは連続的で、それを再現するにはポテンシャル変調および電極付近の電子状態変調を考慮する必要があることを示した。
- c) 擬1次元 1/2 フィリングの交互積層型電荷移動錯体の TTF-CA はその光誘起中性イオン性相転移のダイナミクスが以前から実験と理論で研究されている。最近格段に上がった時間分解能により、その初期ダイナミクスに分子振動が観測されている。1次元拡張パイエルス・ハバード模型に準位交替を考慮した模型では、中性相とイオン性相での電荷移動量と光学伝導度を矛盾なく説明することができなかった。分子振動とのホルシュタイン結合を考慮して初めて、イオン性相がモット絶縁相であることを再現でき、光学伝導度の平衡状態でのスペクトルとその光誘起時間変化を矛盾なく説明できることがわかった。

B-1) 学術論文

Y. TANAKA and K. YONEMITSU, “Growth Dynamics of Photoinduced Domains in Two-Dimensional Charge-Ordered Conductors Depending on Stabilization Mechanisms,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 024712 (8 pages) (2010).

S. MIYASHITA, Y. TANAKA, S. IWAI and K. YONEMITSU, “Charge, Lattice, and Spin Dynamics in Photoinduced Phase Transitions from Charge-Ordered Insulator to Metal in Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 034708 (9 pages) (2010).

N. MAESHIMA, K. HINO and K. YONEMITSU, “Photoinduced Coherent Oscillations in the One-Dimensional Two-Orbital Hubbard Model,” *Phys. Rev. B* **82**, 161105 (4 pages) (2010).

Y. KAWAKAMI, T. FUKATSU, Y. SAKURAI, H. UNNO, H. ITOH, S. IWAI, T. SASAKI, K. YAMAMOTO, K. YAKUSHI and K. YONEMITSU, “Early-Stage Dynamics of Light-Matter Interaction Leading to the Insulator-to-Metal Transition in a Charge-Ordered Organic Crystal,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 246402 (4 pages) (2010).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

N. MAESHIMA, K. YONEMITSU and K. HINO, “Photoinduced Dynamics in the One-Dimensional Two-Orbital Degenerate Hubbard Model,” *J. Phys.: Conf. Series* **200**, 012109 (4 pages) (2010).

Y. TANAKA and K. YONEMITSU, “Theory of I–V Characteristics for Two-Dimensional Charge-Ordered Electron Systems at Quarter Filling,” *Physica B* **405**, S211–S213 (2010).

K. YONEMITSU, S. MIYASHITA and Y. TANAKA, “Frustration and Lattice Effects on Photoinduced Melting of Charge Orders in Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” *Physica B* **405**, S369–S372 (2010).

B-3) 総説, 著書

K. YONEMITSU, “Theory of Photoinduced Phase Transitions in Quasi-One-Dimensional Organic Conductors,” in *Molecular Electronic and Related Materials—Control and Probe with Light*, T. Naito, Ed., Research Signpost/Transworld Research Network; Trivandrum, 305–320 (2010).

B-4) 招待講演

米満賢治, 「光誘起相転移ダイナミクスの理論: 低次元の電気伝導性をもつ化合物を光で物性変化するための相互作用と構造の模型解析」第23期CAMMフォーラム本例会, 東京, 2010年4月.

米満賢治, 「有機導体の光誘起絶縁体金属転移における量子フォノンと干渉効果」物性研短期研究会「外部場の時間操作と実時間物理現象」東京大学, 2010年6月.

田中康寛, 「二次元有機導体における電荷秩序の光誘起融解ダイナミクスの理論」物性研短期研究会「外部場の時間操作と実時間物理現象」東京大学, 2010年6月.

K. YONEMITSU, S. MIYASHITA and N. MAESHIMA, “Photoinduced Modulation of Effective Interactions and Carrier Densities in Organic Mott Insulators,” International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010, Kyoto (Japan), July 2010.

K. YONEMITSU, Y. TANAKA, S. MIYASHITA and N. MAESHIMA, “Photoinduced Insulator-to-Metal Transition Dynamics in Models for Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” The 9th International Conference on Excitonic and Photonic Processes in Condensed and Nano-Materials, Brisbane (Australia), July 2010.

K. YONEMITSU, Y. TANAKA and N. MAESHIMA, “Quantum Phonon Effects on Photoinduced Insulator-to-Metal Transition Dynamics in Organic BEDT-TTF Salts,” The 10th Japan–China Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena, Kyoto (Japan), October 2010.

米満賢治, 「BEDT-TTF 塩の電荷秩序の光誘起融解過程からみえる分子振動と格子変位の役割」研究会「関連電子系における電荷秩序と誘電異常——遷移金属酸化物と分子性化合物の最近の展開」青山学院大学, 2010年11月.

米満賢治, 田中康寛, 「有限バイアス下における電荷秩序の挙動と非線形伝導」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目指して」東北大学, 2010年12月.

田中康寛, 「光と電流による物質の相変化：非平衡状態の理論的研究」有機固体若手の会・冬の学校 2010：有機物質科学博覧会, 諏訪, 2010年12月.

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–).

学会の組織委員等

第4回光誘起相転移と協力現象国際会議「国際科学委員会」委員 (2010–).

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–).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2008–2010).

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) 競争的資金

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).

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).

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).

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

光誘起相転移の動的挙動の実験および理論研究が進むにつれて, 電子間や電子と格子振動および電子と分子振動の相互作用や分子配置の幾何学的性質がどのように相転移に関わっているかがわかってきた。現時点で, 光誘起電子状態が平衡状態で実現される電子相のどれとも異なることや, 供給されたエネルギーが異なる自由度の間で遷移する状況がわかってきている。これまでの実験では, 異なる時間スケールやプローブによる情報を解釈する時点で, 平衡状態で成立する関係がし

ばしば暗黙に仮定された。しかし今や変遷する非平衡状態をそのまま観測し理論的に記述することが必要である。平衡状態では表に出なかった、分子内の軌道および振動の自由度が、光誘起相転移に限らず平衡状態の記述をも変えつつある。これらを含めて広い時空スケールで相転移挙動を説明できて初めて非平衡の動的制御を論じられる。相関電子系の電圧や電場に誘起される非平衡過程においても、相互作用の競合・協力が生む現象の理解を深める。