

## 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) ダイマー・モット絶縁相から金属相への光励起エネルギーに依存した相転移経路
- b) 三角格子を持つ有機導体におけるストライプ型電荷秩序の融解と非線形伝導
- c) 強く二量化した集積型金属錯体の電荷分離相における分子内軌道と結合した振動状態

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) モット絶縁相をもつ擬 2 次元有機導体にはバンド充填率が本来の 3/4 ではなく、二量体をひとつの単位としてバンド充填率が実質的に 1/2 になるものが多い。したがって模型計算では二量体を単位とすることがしばしば行われる。このモット絶縁体を光照射により金属にする場合、キャリア導入による方法と相互作用を弱める方法がある。これらの異なる相転移経路を記述するには、二量体内の分子自由度が重要であり、バンド充填率が 3/4 の系として扱う必要がある。絶縁相に導く相互作用は二量体に対するオンサイト斥力であるが、それは二量体内の分子間軌道重なりによって変化する。この重なりを決める格子は電子状態によって安定な変位が異なり、光照射により変えられる。格子変位に働く力は光励起エネルギーにほとんど依存しないことを解析的に示した。時間依存シュレディンガー方程式を異なる光励起エネルギーに対して解く。相互作用の弱まり方は吸収光子密度に比例するが、その比例係数は励起エネルギーにほとんど依存しない。しかしキャリアはダイマー間電荷移動励起でのみ高効率で導入されることが、スペクトル重みの変化量からわかった。相転移経路を選ぶことができるのは、励起エネルギーに敏感なキャリア導入が瞬時に起きることと、相互作用は遅く変調することのためである。
- b) 三角格子を持つ擬 2 次元有機導体では、フェルミ準位付近の状態密度を大きく減らして安定化に寄与する二倍周期の電荷秩序と、三角格子に由来する三倍周期の電荷秩序が共存することがある。これらの秩序の起源は異なり、外場に対して一般に異なる応答をする。型有機塩でサイリスタ現象が発見されてから、非線形伝導に対する電荷秩序の効果が興味を持たれていた。有限バイアスのもとでの電子格子状態を、非平衡グリーン関数を使って求めた。型塩は高温金属相では対称性の高い結晶構造をもつために、電荷がフラストレートした状態にある。低温でストライプ型の 2 倍周期の電荷秩序を安定化するために、正孔密度の増減に対応してそれぞれ逆向きに分子面が回転する。この格子変位が維持される限り、2 倍周期の電荷秩序が残り、電流が流れにくい。十分に大きなバイアスのもとで 2 倍周期由来の構造因子が消えると、この格子変位も消える。しかし三倍周期由来の構造因子は電流が大きく流れても生き残り、実験で観測された状況を再現することが分かった。
- c) 光誘起相転移は本質的に非平衡環境で進むので、過渡的な電子状態と振動状態の関係は平衡におけるものと異なっている。平衡状態において、たとえば分子内の C=C 伸縮振動の周波数は、分子の価数によって変化する。その関係と過渡的な周波数から期待される価数と、実際の分子の価数は一般にずれている。このずれ具合を解析すれば、光照射により吸収されたエネルギーの伝達経路について知見を得られる。このような解析をするため、分子内の軌道自由度と分子間の電荷移動自由度と、それぞれと結合する分子振動と格子振動を取り入れた遍歴電子模型を採用する。電子格子相互作用が効いて電荷分離相になる  $\text{Et}_2\text{Me}_2\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$  を考える。ハートリー・フォック近似の範囲内で、電荷秩序および分子振動と格子振動の周波数を再現できた。分子および二量体をもつ対称性のために、それぞれの振動は分子内電子励起と選択的に結合する。

B-1) 学術論文

**K. YONEMITSU, Y. TANAKA, S. MIYASHITA and N. MAESHIMA**, “Photoinduced Insulator-to-Metal Transition Dynamics in Models for Quasi-Two-Dimensional Organic Conductors,” *Phys. Status Solidi B* **248**, 486–490 (2011).

**Y. TANAKA and K. YONEMITSU**, “Crossover from Bias-Induced to Field-Induced Breakdown in One-Dimensional Band and Mott Insulators Attached to Electrodes,” *Phys. Rev. B* **83**, 085113 (11 pages) (2011).

**K. YONEMITSU**, “Effects of Lattice and Molecular Phonons on Photoinduced Neutral-to-Ionic Transition Dynamics in Tetrathiafulvalene-*p*-Chloranil,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 084707 (7 pages) (2011).

**K. YONEMITSU, S. MIYASHITA and N. MAESHIMA**, “Photoexcitation-Energy-Dependent Transition Pathways from a Dimer Mott Insulator to a Metal,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 084710 (5 pages) (2011).

**Y. TANAKA and K. YONEMITSU**, “Nonlinear Conduction by Melting of Stripe-Type Charge Order in Organic Conductors with Triangular Lattices,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 103702 (4 pages) (2011).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

**N. MAESHIMA, K. HINO and K. YONEMITSU**, “Photoinduced Dynamics of the Multi-Orbital Hubbard Model,” *Phys. Status Solidi C* **8**, 213–216 (2011).

**N. HIRAYAMA, A. ENDO, K. FUJITA, Y. HASEGAWA, N. HATANO, H. NAKAMURA, R. SHIRASAKI and K. YONEMITSU**, “Temperature Distribution in Two-Dimensional Electron Gases under a Strong Magnetic Field,” *J. Electron. Mater.* **40**, 529–532 (2011).

**H. NAKAMURA, N. HATANO, R. SHIRASAKI, N. HIRAYAMA and K. YONEMITSU**, “Quantum Oscillations of Thermoelectric Effects in a Pseudo-one-dimensional Electron Gas with a Spin-orbit Interaction,” *J. Electron. Mater.* **40**, 601–605 (2011).

B-4) 招待講演

米満賢治, 田中康寛, 「絶縁体に電気を流す: ナノとマクロで異なる伝導機構および電気が流れるときの電荷秩序の挙動」, 自然科学研究機構「自然科学における階層と全体」シンポジウム, 名古屋, 2011年1月.

米満賢治, 「光誘起ダイナミクス: 分子内自由度と広域状態の動的相関」, 研究会「固体光誘起状態の非平衡ダイナミクス理論とその今後の展望」, 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所, 2011年2月.

**K. YONEMITSU**, “Photoinduced Phase Transition Dynamics: Interplay between Correlated Electrons and Molecular Vibrations,” International School and Symposium on Multifunctional Molecule-Based Materials, Argonne (U.S.A.), March 2011.

**K. YONEMITSU**, “Theory of Photoinduced Electron-Phonon-Coupled Dynamics in 2D Organic Systems,” Workshop on Ultrafast Dynamics in Strongly Correlated Systems, Zurich (Switzerland), April 2011.

西岡圭太, 「 $\text{Et}_2\text{Me}_2\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ における電荷分離相の光誘起融解の理論」, 理研シンポジウム「金属dmit 錯体による磁性・伝導性研究の最前線」, 理化学研究所和光キャンパス, 2011年5月.

**K. YONEMITSU**, “Interplay between Correlated Electrons and Quantum Phonons in Organic Compounds,” 4th International Conference on Photoinduced Phase Transitions and Cooperative Phenomena, Wroclaw (Poland), June 2011.

K. YONEMITSU, "Interplay between Correlated Electrons and Quantum Phonons in Photoinduced Insulator-to-Metal Transitions," 14th Korea-Japan Molecular Science Symposium on New Visions for Spectroscopy and Computation: Temporal and Spatial Adventures of Molecular Sciences, Busan (Korea), July 2011.

K. YONEMITSU, "Roles of Molecular Vibrations in Photoinduced Insulator-to-Metal and Neutral-to-Ionic Transitions," 9th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets, Gniezno (Poland), September 2011.

米満賢治, 「三角格子上の有機導体の非線形伝導と選択的秩序融解」, 「材料科学国際週間: Material Science Week 2011」研究会「電子自由度による強誘電体最前線」, 東北大学金属材料研究所, 2011年11月.

田中康寛, 「有機導体  $\theta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>X の電圧下での秩序の融解と非線形伝導」, 研究会「強相関電子系理論の最前線——若手によるオープン・イノベーション——」, 那智勝浦, 2011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–).

日本物理学会領域5 (光物性分野)領域運営委員 (2011–2012).

##### 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 (2010–2011).

##### 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 (2008–2011).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員及び国際事業委員会書面審査員 (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-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, 「物性科学概論」, 2011年7月20日–22日.

#### 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).

科研費基盤研究(C), 「分子性導体の外場誘起非線形現象における階層間結合効果の理論」, 米満賢治 (2011年–2015年).

### C) 研究活動の課題と展望

光誘起相転移では非平衡環境下で多電子とフォノンの相関した状態を扱う難しさに加えて、吸収されたエネルギーが分子内外の電荷移動や振動状態に異なる時間スケールで配分されるという意味で、異なる階層をつなぐ難しさがある。実験や理論でカバーできる時間スケールが広がったことで、後者に焦点をあてた研究が可能になってきた。測定された振動状態から期待される電子状態と実際の電子状態とのずれが、今では広く一般に認識されている。つまり従来の断熱ポテンシャル上を“点”が動く描像ではなく、電子状態や振動状態などみる視点によって位置が違えば“広がった雲”が時間とともに変化し移動する描像に変わってきている。これを理論で記述することは困難であるが、実験のプロープが限られているため、理論研究からの支援が大きな役割を果たしている。分子内の電子および振動状態と、分子間の電子および振動状態の相関をつけるということは、いわば分子科学と物性科学の連携をはかるくらいのテーマである。まだまだ時間をかけて、この相関を明らかにしていこうと思う。