

論文内容の要旨

博士論文題目

低次元モット絶縁体における光吸収スペクトル

氏 名

伊東 久

(論文内容の要旨)

低次元強相関電子系は、高温超伝導、巨大な非線形光学応答、極めて速い緩和現象、絶縁体から金属状態への光誘起相転移などの様々な興味深い物性を示す。これらの特異な現象は、強い電子相関効果に由来していると考えられているが、その起源についてはいまだ解決に至っていない。低次元強相関電子系は、半充填状態において、強い電子相関効果のためにモット絶縁体になっている。それは通常の半導体や絶縁体とは本質的に異なった起源を持つ特異な絶縁体であるために、その光励起状態の性質は電子相関効果を敏感に反映していると考えられる。従って、光吸収スペクトルを調べることにより、モット絶縁体における電子相関効果を明らかにすることができると期待される。本論文は、このような背景から、低次元モット絶縁体における光吸収スペクトルの理論的研究を行った。

最近接サイト間の電子の遷移(重なり積分 t) および同一サイト上の電子間クーロン相互作用(大きさ U)のみが取り入れたハバードモデルは、低次元強相関電子系を記述する標準的なモデルとして広く認められている。しかしながら、光励起状態においては、正負の電荷が同時に生成されるため、異なるサイト間クーロン相互作用による正負の電荷の結合効果を考慮することが重要である。この効果は、強い電子相関効果のために単純な励起子理論では記述できない。なぜならば、低次元強相関電子系における電荷の運動は全系のスピン自由度と相関があるからであり、光生成された電荷とスピンの間の相互作用はモット絶縁体の光学特性を理解するための鍵となる。そこで、最近接クーロン相互作用(大きさ V)を考慮した拡張ハバード模型を用い、相関の非常に強い場合において成立する有効ハミルトニアンを用いて解析を行なった。数値厳密対角法により光吸収スペクトルを計算し、電子相関効果、および電荷結合効果の解析を行った。まず $V = 0$ の場合における2次元系モット絶縁体における光吸収スペクトルの解析結果について述べる。非常に相関の強い場合 $t/U \leq 0.01$ においては、光吸収スペクトルは約16の幅広いバンド、およびその中心付近に鋭いピークを持つことが示された。この場合の光励起状態においては、電荷の運動のために反強磁性スピン秩序を持っていない。 U を減少させるにしたがってスピン間相互項の寄与が大きくなり、低エネルギー側の光励起状態は反強磁性スピン秩序を持つようになる。 V が大きい場合には、低エネルギー領域に吸収ピークが現れるが、これは多数のスピン配置が関与しており、通常の半導体における励起子とは異なる状態である。1次元モット絶縁体においては、スピン・電荷分離を反映した離散的な吸収スペクトルが得られた。これらの光吸収スペクトルの解析によって、1次元系と2次元系の強相関電子系におけるスピンと電荷の結合の違いが明らかにされた。

(論文審査結果の要旨)

低次元強相関電子系は、高温超伝導を初めとする特異な物性を示すことにより、物性物理学の中心的な研究対象の一つとなっている。しかしながら、これまでの研究は、主に電気伝導などの低エネルギー現象に限られており、低次元強相関電子系が持つ新しい電子材料としての可能性を十分に引き出すまでには至っていない。本論文は、その光励起状態に着目し、光吸収スペクトルを詳細に解析することにより、強相関電子系の特徴を明らかにすることを目的としたもので、以下のような重要な結果を得ている。

まず、2次元モット絶縁体の光吸収スペクトルを数値厳密対角化法によって計算した。同一サイトクーロン相互作用と最近接サイト間のクーロン相互作用を考慮した拡張ハバードモデルを用い、電子相関の非常に強い場合において成立する有効ハミルトニアンを用いて解析を行なった。電子相関が非常に強い場合には、電子の重なり積分で決まる広い吸収バンドの他に、その中心に非常に狭い吸収線が見出された。これは、強相関系に特有なスピンの無い正負の電荷（ホロンとダブロン）が異なった副格子に配置する特異な電子状態に起因するもので、本論文で始めて見出されたものである。このピークは、電子相関が弱くなるに従って消失するが、その様相を定量的かつ詳細に調べた。光励起状態においては、ホロンとダブロンが共存するために異なったサイト間のクーロン相互作用が重要になる。最近接サイト間クーロン相互作用を大きくするに従い、低エネルギー側にホロンとダブロンの束縛状態に起因する吸収ピークが成長することが見出された。これは、通常の半導体の励起子と異なり、系全体のスピン状態が関与する特異な電荷束縛状態で、その特徴が詳細な解析により明らかにされた。

更に、1次元モット絶縁体の光吸収スペクトルも解析され、スピンと電荷の分離を反映した離散的なスペクトルが生ずることが明らかにされた。スピンと電荷の分離は、1次元強相関系の特異な性質として着目され、光電子分光により実験的にその兆候が観測されているが、それは決して明瞭なものではない。本論文は、ナノスケールの強相関電子材料の光吸収スペクトルの離散性を実験的に見出すことにより、スピン電荷分離をより明瞭に見出すことができる事を示した点に意義がある。

以上のように、本論文は、低次元強相関電子系の光学スペクトルを広範囲のパラメータ領域で詳細に解析しその特徴を明らかにしたもので、今後のこの分野の基礎研究の重要な指針となるものである。よって、審査員一同は、本論文が博士（理学）の学位論文として価値のあるものと評価し、審査結果を合格と認めた。