

学位論文  
電荷密度波－スピン密度波相転移点近傍における  
特異な光励起状態

福井 隆生  
奈良先端科学技術大学院大学  
物質創成科学研究科 複雑系解析学講座  
(相原 正樹 教授)

# 目次

第1章 緒言	1
第2章 モデルと計算方法	4
2.1 PPP モデル	4
2.2 光吸収スペクトル	4
2.3 スタッガード電荷相関関数、スピン相関関数	5
第3章 結果と考察	6
3.1 1次元系—より相互作用が強い場合—	6
3.1.1 光吸収スペクトル	6
3.1.2 $ \psi_1\rangle$ の電子構造	9
3.1.3 強相関モデルに基づく計算結果の解釈	14
3.1.4 エキシトンストリング状態との違い	23
3.2 1次元系—より相互作用が弱い場合—	24
3.3 $\kappa$ 依存性	26
3.4 システムサイズ依存性	34
3.5 2次元系	41
3.5.1 光吸収スペクトル	42
3.5.2 $ \psi_1\rangle$ の電子構造	43
3.5.3 強相関モデルに基づく計算結果の解釈	47
3.5.4 有限サイズ効果	50
3.6 結論	50
付録A $ \phi_1^{(0)}\rangle$ の電荷相関関数、スピン相関関数	52
付録B 周期的境界条件について	54
付録C 吸収係数の定義式	55
付録D 線型応答理論	57
付録E Lanczos 法による吸収強度の計算方法	59
付録F Dynamical properties	61

# 第1章 緒言

量子相転移とは、基底状態が物質パラメーターの変化などにより交差したり、新しい対称性の破れを獲得したりすることによって発生するものであり、熱による相転移とは本質的に異なる起源を持つ。量子相転移は、量子揺らぎ、量子的核形成などの重要な物理と密接に関連があり、長きにわたり多くの研究者を引き付けてきた [1–4]。歴史的には液体  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  の混合物の量子相転移が有名であり、最近でも高温超伝導との関連や、有機電荷移動錯体での臨界点など、盛んに実験的研究が行われている。

1次元拡張ハバードモデルにおける電荷密度波 (CDW) とスピン密度波 (SDW) との間の量子相転移は、実験で観測されているわけではないが、最も単純な量子相転移のひとつであり、量子相転移を理解する重要な舞台であると考えられており、これまで広く研究されてきた [5–24]。1次元拡張ハバードモデルは同一サイト上の電子間クーロン相互作用（その相互作用エネルギーを  $U$  とする）および最近接サイトにある電子間クーロン相互作用（その相互作用エネルギーを  $V$  とする）のみを取り入れたモデルであり、CDW 状態は最近接サイト間クーロン相互作用により安定化され、同一サイト間クーロン相互作用によって不安定化される。その結果、 $U - V$  空間において  $V \gtrsim U/2$  ( $V \lesssim U/2$ ) の領域が CDW(SDW) 基底状態となる。これまで、この転移は、強相関領域  $U > 2$  では1次の転移であり、弱～中相関領域  $U < 2$  ではボンド密度波 (BOW) 状態が CDW-BOW-SDW のように間に介在した2次の転移であることなどが明らかになってきている [15–23]。

しかし、これらの研究には避けることができない本質的困難がある。これらの研究が考察する低次元強相関電子系においては、電子相関効果が極めて強く、この強い電子相関効果を十分に取り入れる近似法はいまだに確立していない。そのため、信頼できる結果は少数サイトでの数値計算に限られてしまう。一方、そもそも無限系特有の現象である相転移の有無や転移の次数を、有限サイズにおける数値計算に基づいて決定することは、極めて難しい。無限系ならば、相転移が起き、特定の物理量が転移点で不連続に変化する場合でも、有限系では、有限サイズ効果の結果、これらの物理量が転移点においても連続的に変化することがあり得るからである。そのため、通常は、転移点付近での連続的変化のサイズ依存性を詳細に調べる有限サイズスケーリング法などを用いて相転移の有無や次数などは結論づけられる。しかし、電子相関効果を十分に取り入れることができる数値的手法は、少数サイトでのみ適用可能であり、サイト数無限の場合に結果を外挿できるだけの十分なデータが得られない。この困難のため、基底状態の相図に関しても、いまだに完全には決着はついていないのが現状である。

さらに、どのような量子揺らぎが相境界付近で重要になるのかは、まだ明らかになっていない。相境界付近においては、励起状態は、巨大な量子揺らぎの効果により特異な性質を示す可能性がある。さらには、励起状態の物理的性質から、相境界付近の量

子揺らぎに対しての新しい知見が得られる可能性がある。

現実の物質において  $V$  をコントロールすることは極めて難しく、これにより CDW-SDW 量子相転移を引き起こすのは現実的ではないと考えられる。しかし、以下に述べる TTF-CA およびハロゲン架橋 Pd 錯体では、類似した量子相転移が見出される可能性がある。TTF-CA は TTF 分子と CA 分子が 1 次元方向に積層した物質であり、Fig. 1.1 に示したように、低温では TTF 分子から CA 分子に電子が遷移したイオン相が、高温では移動のない中性相が実現されることが、実験的にわかっている。TTF-CA の中性相では、主にサイトエネルギーが交替している事により、電子密度もまた交替している。一方、イオン相は反強磁性状態に類似したスピンパイエルス状態となる。ハロゲン架橋錯体は、Fig. 1.2 に示したように、遷移金属とハロゲンが 1 次元方向に結合した物質である。遷移金属、ハロゲン、その他の修飾分子原子を変えることにより、電子-格子相互作用強度などの物質パラメーターを変えることができる。電子-格子相互作用が強い場合には、格子変位により遷移金属のサイトエネルギーが交替し、CDW 状態が実現される。電子-格子相互作用が弱く格子変位がない場合には、反強磁性的磁気秩序をもつモット絶縁体が発現される。

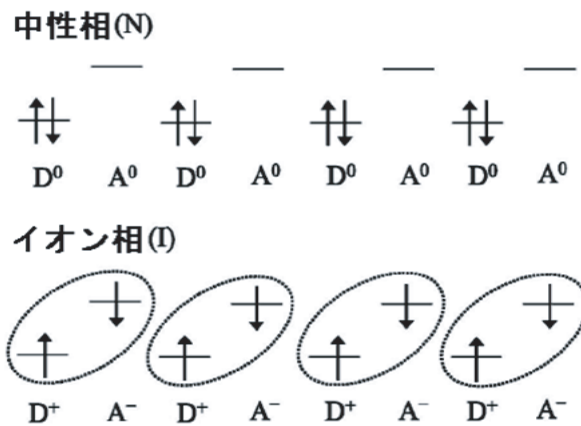


Fig. 1.1. TTF-CA における中性相とイオン相における TTF 分子 (D と表す) と CA 分子 (A と表す) の価電子準位の電子分布。

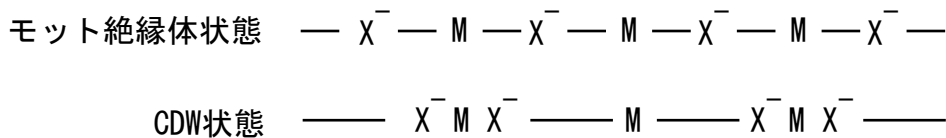


Fig. 1.2. ハロゲン架橋錯体の、CDW 状態とモット絶縁体状態。M は遷移金属、X はハロゲン原子を表す。

TTF-CA では中性相とイオン相間の光誘起相転移が観測されている [25-29]。また、ハロゲン架橋 Pd 錯体では、CDW 状態とモット絶縁体間の光誘起相転移が観測されて

いる [30]。しかし、これらの光誘起相転移現象の起源は明らかになっていない。これらの物質の CDW 状態は、異なるサイト間のクーロン相互作用によって安定化される本論文で考察する CDW 状態とは起源が異なっているが、TTF-CA およびハロゲン架橋 Pd 錯体の光誘起相転移は、一種の CDW-SDW 相転移と見なすことが可能である。これらの物質では、CDW 状態と SDW 状態はエネルギーがほぼ縮退しており、これが光誘起相転移に本質的であると考えられている。それゆえ、これらの光誘起相転移の起源を理解するためには、相境界付近の励起状態の物理的特性について理解する事が必要となる。

これらの点を考慮にいれ、本論文では、1次元および2次元 CDW-SDW 相転移において、相境界をまたいで光励起状態の物理性質がどのように変化するか、さらにこの物理性質がどのような量子揺らぎに由来するものであるか、を明らかにすることを試みた。Jeckelman [31] と Iwano [32] は、1次元拡張ハバードモデルにおける CDW-SDW 相境界付近においては高エネルギー相のドメインが低エネルギー相のなかにできた状態が、光吸収スペクトルを支配していることを明らかにした。しかしながら、これらの研究においては、相境界をまたいだときの性質の変化については研究されていない。さらに、本論文で示すように、最近接より遠いサイト間におけるクーロン相互作用は相境界付近の光励起状態に重要な影響を及ぼす。それゆえ、彼らの用いた拡張ハバードモデルの結果を単純に一般化することは不適切であり、この問題を考えるには、最近接より遠いサイト間におけるクーロン相互作用を取り入れた Pariser-Parr-Pople (PPP) モデルが必要となる。

また、1次元 CDW-SDW 相転移の本質を理解するためにも、次元性の影響を考えることは重要である。本研究では、2次元系でも同様の研究を行い、次元性が相転移の性質に大きな影響を与えることを示す。

## 第2章 モデルと計算方法

### 2.1 PPP モデル

以下のような1次元、2次元PPPハミルトニアンを考える

$$H = -t \sum_{n,m,\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma} + U \sum_n c_{n,\uparrow}^\dagger c_{n,\uparrow} c_{n,\downarrow}^\dagger c_{n,\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} V(r_{n,m}) d_n d_m. \quad (2.1.1)$$

第1項は最近接サイトへの電子の遷移を記述する項であり、 $t$ は最近接サイト間の遷移積分の大きさである。 $\sum^{\text{NN}}$ は、最近接サイトについての和、 $c_{n,\sigma}$ はサイト $n$ 、スピン $\sigma$ の電子の消滅演算子である。第2項はオンサイトクーロン相互作用を記述する項であり、 $U$ は同一サイトでのクーロン相互作用エネルギーである。第3項は異なるサイト間クーロン相互作用を記述する項であり、 $d_n = 1 - \sum_\sigma c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma}$ はサイト $n$ における、電荷密度演算子、そして $r_{n,m}$ はサイト $n$ 、 $m$ 間の距離である。距離 $r$ 離れたサイト間クーロン相互作用エネルギー $V(r)$ は、以下のように与えられる。

$$V(r) = \frac{V}{r} e^{-\kappa(r-1)}, \quad (2.1.2)$$

ここで $\kappa$ はスクリーニングパラメータであり、 $V$ は最近接サイト間のクーロン相互作用エネルギーである。また、 $c = e = \hbar = 1$ という原子単位系を採用する。ここで、 $c$ は光速、 $e$ は素電荷であり、距離の単位としては格子長を用いる。

電子-光子相互作用ハミルトニアン $H_{e-p}$ は以下のように与えられる、

$$H_{e-p} = -\mathbf{A} \cdot \mathbf{J}, \quad (2.1.3)$$

$$\mathbf{J} = it \sum_{n,m,\sigma} (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m) c_{m,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma}, \quad (2.1.4)$$

ここで、 $\mathbf{A}$ は光のベクトルポテンシャル、 $\mathbf{J}$ は電流演算子、 $\mathbf{r}_n$ は、サイト $n$ の位置ベクトルである。本論文では、光の波長はシステムサイズよりも十分大きいとし、 $\mathbf{A}$ は位置に依存しないと近似する。

### 2.2 光吸収スペクトル

基底状態 $|\psi_0\rangle$ からの光吸収スペクトル $\alpha(\omega)$ は以下のように与えられる、

$$\alpha(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ \langle \psi_0 | J^\dagger \frac{1}{\omega + E_0 + i\epsilon - H} J | \psi_0 \rangle \right], \quad (2.2.1)$$

ここで、 $\omega$  は光の振動数であり、 $E_0$  は基底状態のエネルギー固有値、 $\epsilon$  は計算を収束させるための有限の幅であり、 $J$  は  $\mathbf{J}$  の光の偏光方向成分である。Eq. (2.2.1) は、ランチョス法により数値的に厳密に求める事ができる。光の分極に関しては、1次元系においては1次元鎖方向に、2次元系においては正方格子の1辺の方向に、分極しているものとした。

## 2.3 スタッガード電荷相関関数、スピン相関関数

基底状態  $|\psi_0\rangle$  をランチョス法で、 $\alpha(\omega)$  を支配するいつかのエネルギー固有状態  $|\psi_p\rangle$  ( $p \geq 1$ ) を拡張ランチョス法を用いて数値的に厳密に計算する。これらのエネルギー固有状態の物理性質を調べるために、電荷相関関数  $\xi(r)$ 、スピン相関関数  $\eta(r)$  スタッガード電荷相関関数  $\xi'(r)$  およびスタッガードスピン相関関数  $\eta'(r)$  を求める。電荷およびスピン相関関数は以下の式で与えられる

$$\xi(r) = \langle \psi_p | d_n d_m | \psi_p \rangle, \quad (2.3.1)$$

$$\eta(r) = \langle \psi_p | \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m | \psi_p \rangle, \quad (2.3.2)$$

ここで、 $\mathbf{S}_n$  は  $n$  番目のサイトのスピン演算子、 $r$  はサイト  $n$ 、 $m$  間の距離である。CDW および SDW 秩序を考察する際には、スタッガード電荷相関関数  $\xi'(r)$  およびスタッガードスピン相関関数  $\eta'(r)$  が便利である。これらは以下の式で与えられる

$$\xi'(r) = \tau \xi(r), \quad (2.3.3)$$

$$\eta'(r) = \tau \eta(r), \quad (2.3.4)$$

ここで、サイト  $n$ 、 $m$  が同一 (異なる) 副格子の時、 $\tau = 1$  ( $-1$ ) となる。

状態  $|\psi_p\rangle$  が CDW (SDW) 秩序を持つ場合には、すべての  $r$  に対して  $\xi'(r) > 0$  ( $\eta'(r) > 0$ ) となり、量子揺らぎのために短距離 CDW (SDW) 秩序のみが存在する場合には、 $r$  が増大するとともに  $\xi'(r)$  ( $\eta'(r)$ ) はゆるやかに減少し、 $r = \infty$  でゼロとなる。

## 第3章 結果と考察

電子数に関しては half-filled の場合のみを考察する。1次元系においては、周期的境界条件を用いた1次元鎖を考察し、サイト数  $N = 14$  の結果を主に示す。有限サイズ効果をチェックするために、一部の計算を  $N = 12, 16$  でも行なったが、本質的な違いはまったくなかった。この点について、後で詳しく述べる。2次元系は周期的境界条件を用いた  $4 \times 4$  ( $N = 16$ ) 2次元正方格子を用いる。スクリーニングパラメーターに関しては、 $\kappa = 0.5$  における結果を主に示す。結果の  $\kappa$  依存性に関しては、後で詳しく述べるが、本論文の結論は  $\kappa$  の値によって変わることはなく、ここで得られた結果は、PPP モデルにおいて一般的に成り立つものである。エネルギーの単位に関しては、 $t = 1$  の単位系を採用する。

### 3.1 1次元系—より相互作用が強い場合—

様々な値で同一サイト間クーロン相互作用エネルギー  $U$  を固定し、光吸収スペクトル  $\alpha(\omega)$ 、基底状態  $|\psi_0\rangle$ 、および光吸収スペクトルを支配するエネルギー固有状態  $|\psi_p\rangle$  のスタッガード電荷相関関数  $\xi'(r)$  と スタッガードスピン相関関数  $\eta'(r)$  が、異なるサイト間のクーロン相互作用エネルギーを決めるパラメーターである  $V$  にどのように依存するかを計算し、これらの物理量が相境界をまたいでどのように変化するかを調べた。その結果、より相互作用が強い場合  $U \gtrsim 10$  とより弱い場合  $U \lesssim 5$  では異なる結果が得られた。この節ではより相互作用が強い場合の結果を述べる。ただし、これらの物理量の相境界付近での振舞いは  $U$  に対して緩やかに変わるものであり、転移的な変化はみられなかった。

#### 3.1.1 光吸収スペクトル

Fig. 3.1 に、基底状態の  $\xi'(1)$ 、 $\eta'(1)$ 、 $\xi'(2)$  および  $\eta'(2)$  の  $V$  依存性を示す。この図からわかるように、より相互作用が強い領域  $U \gtrsim 10$  において、基底状態の電荷相関関数およびスピン相関関数は非常に狭い  $V$  の範囲で急激に変化しており、それ以外の領域ではゆっくりと変化している。この結果は、CDW-SDW 量子相転移が起こっていることを強く示唆している。緒言で述べたように、相転移の有無を有限サイズにおける数値計算に基づいて決定することは、極めて難しい。後で詳しく述べるが、 $N$  が増大するにつれて、相関関数の狭い領域での変化はより急激になる。このことは CDW-SDW 量子相転移が起こっていることを強く支持する。電荷相関関数及びスピン相関関数が最も急激に変化している  $V$  の値を  $V_c$  と表し、この点を相転移点とみなすことにする。 $U = 50, 10, 5$  においてそれぞれ  $V_c = 32.0, 6.59, 3.39$  である。



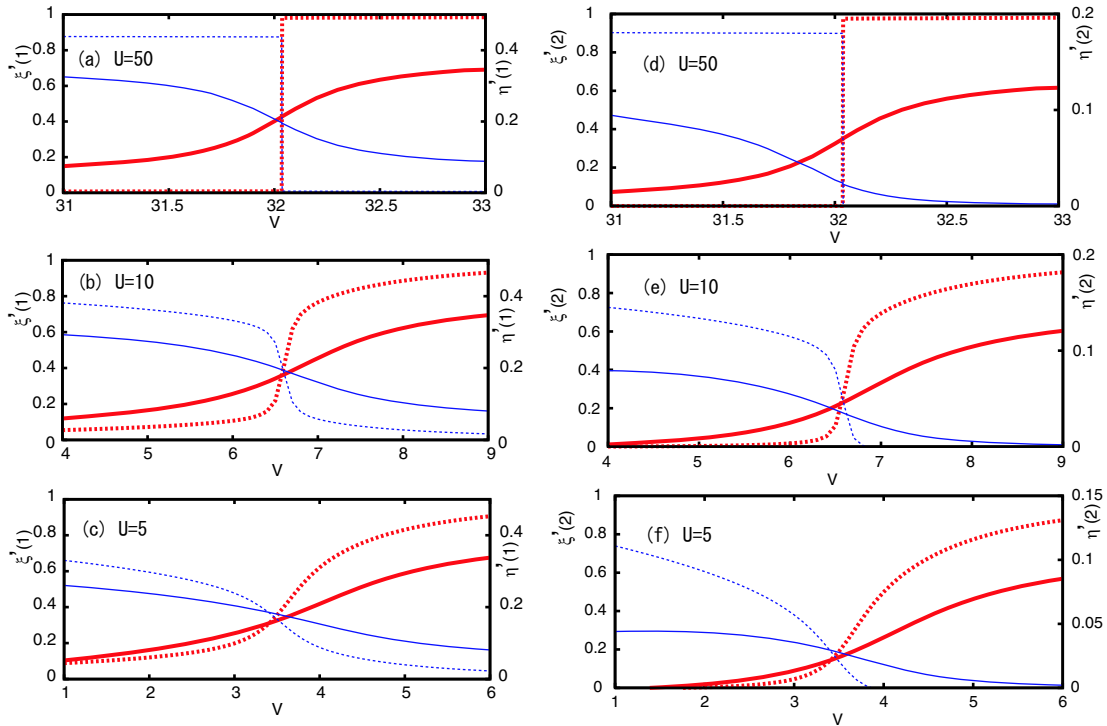


Fig. 3.1. 1次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、(c)  $U = 5$  での  $\xi'(1)$  および  $\eta'(1)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。1次元系における、(d)  $U = 50$ 、(e)  $U = 10$ 、(f)  $U = 5$  での  $\xi'(2)$  および  $\eta'(2)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。点線は基底状態、実線は  $|\psi_1\rangle$  の相関関数を表す。

Fig. 3.2 に、光吸収スペクトル  $\alpha(\omega)$  の  $V$  依存性を示す。この図からわかるように、 $V$  の値に応じて、光吸収スペクトルは4つの異なるパターンのスペクトルを示す。 $V \lesssim 2$  において、1次元強相関係に特有の離散的なピークが見られ、遷移モーメントはこれらのピークに分散している [33]。  $2 \lesssim V \lesssim V_c - 1$  において、遷移モーメントは最低エネルギーピークに集中し、このピークが支配的となる。このピークが単一のエネルギー固有状態  $|\psi_1\rangle$  への励起によるものであることが、数値計算によって確かめることができる。このエネルギー固有状態  $|\psi_1\rangle$  は、これまでの多くの研究で明らかにされてきたように、ホロン・ダブロン対が束縛されたエキシトンの状態である [31, 34–38]。

ここで、ホロンおよびダブロンの意味について明確にしておく。この論文では、空サイトおよび二重占有サイトの電荷をそれぞれホロン、ダブロンと呼ぶ。1次元モット絶縁体において光励起により生成される電荷は、スピン電荷分離の結果、スピンをもたない。それゆえ、このような電荷を、スピンと電荷をともに持つホールや励起電子として記述することはできない。そこで、このような電荷を、ホロンやダブロンと記述することにする。

$V \lesssim V_c + 1$  においては、最低エネルギーピークが常に支配的になっている。この

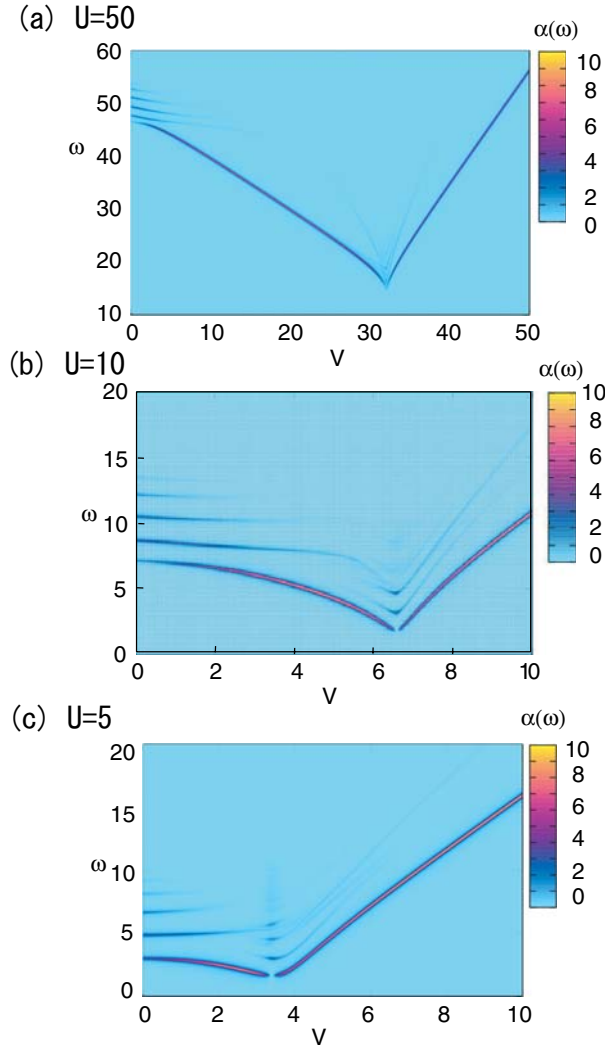


Fig. 3.2. 1次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、(c)  $U = 5$  での光吸収スペクトル  $V$  依存性。光吸収強度は色で表し、 $\epsilon = 0.1$  を用いている。

ピークもまた、単一のエネルギー固有状態  $|\psi_1\rangle$  への励起によるものであることが、数値計算によって確かめることができる。 $V_c - 1 \lesssim V \lesssim V_c + 1$  においては、 $V$  が  $V_c$  に近づくとつれて最低エネルギーピークが小さくなり、相境界  $V = V_c$  で消失し、相境界付近では、 $\alpha(\omega)$  は、いくつかの主要なピークから成るようになる。この最低エネルギーピークの消失は、Fig. 3.3 においてより明確に見ることができる。ここで重要なことは、より相互作用が強い領域  $U \gtrsim 10$  においては、最低エネルギーピークの著しい減少が見られる  $V$  の領域は、基底状態の相関関数が急激に変化している領域に比べはるかに広いことである。今後、前者の領域を「相境界付近」、それ以外の領域を「相境界から離れた領域」と表すことにする。

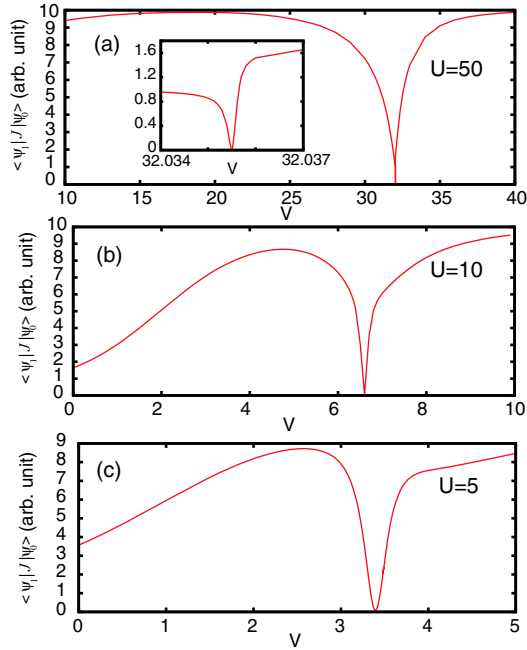


Fig. 3.3. 1次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、(c)  $U = 5$  での、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  間の遷移モーメント  $V$  依存性。

### 3.1.2 $|\psi_1\rangle$ の電子構造

この特徴的な  $\alpha(\omega)$  の  $V$  依存性を理解するために、ほとんどの  $V$  領域で、 $\alpha(\omega)$  を支配する  $|\psi_1\rangle$  の電子構造について考察する。まず、強相関の場合の特徴がよりはっきりと見える  $U = 50$  での結果を主に議論するが、 $U \gtrsim 10$  においては、定性的に同じ結果が得られる。Fig. 3.1 (a) からわかるように、基底状態の電荷およびスピン相関関数が相境界において急激に変化しているのに対して、 $|\psi_1\rangle$  のそれは、相境界においても変化が急激になることはない。

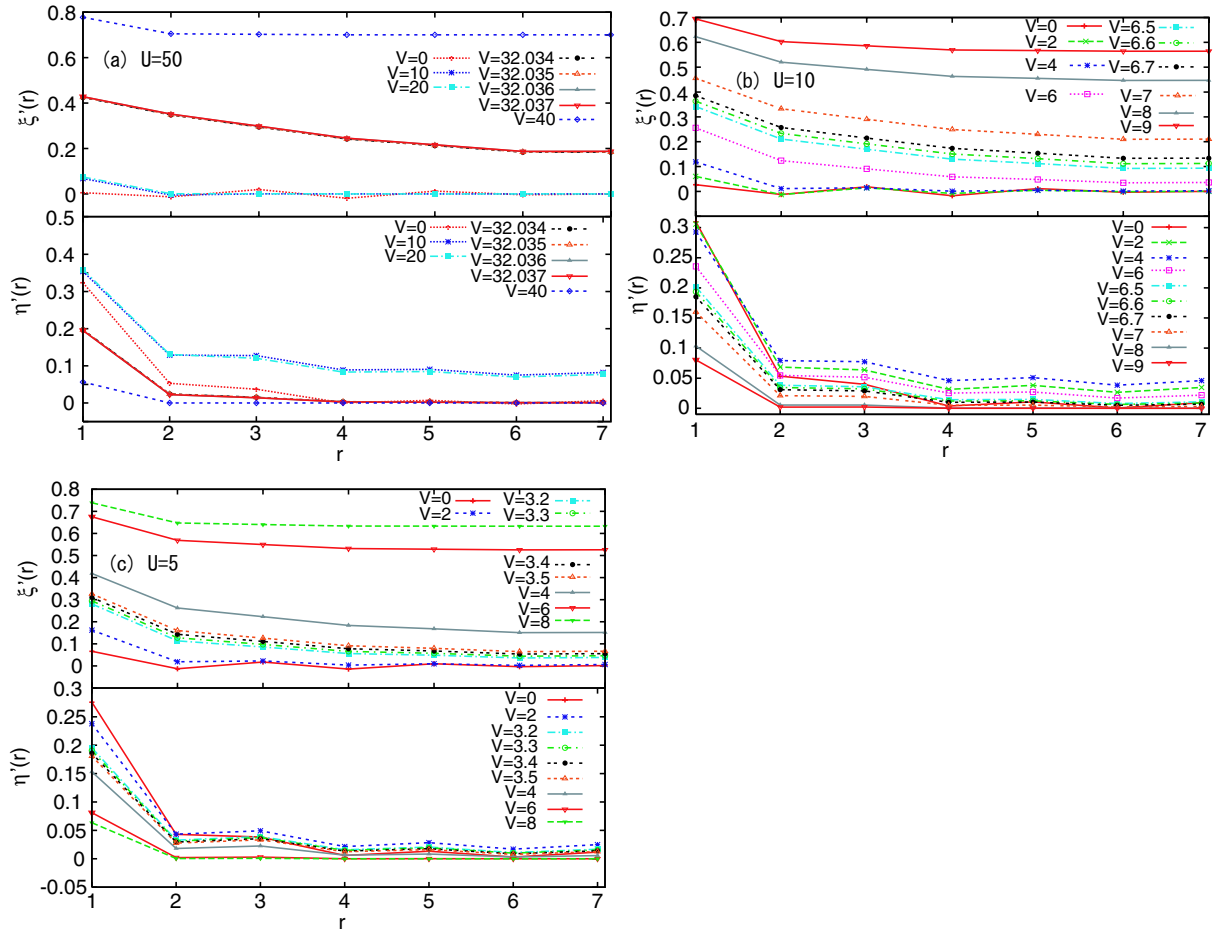


Fig. 3.4. 1次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、および(c)  $U = 5$ での様々な  $V$  の値における、 $|\psi_1\rangle$  のスタaggerド電荷相関関数とスタaggerドスピン相関関数。

Fig. 3.4に、様々な  $V$  の値における、 $|\psi_1\rangle$  のスタaggerド電荷相関関数  $\xi'(r)$ 、スタaggerドスピン相関関数  $\eta'(r)$  を示す。この図からも、 $|\psi_1\rangle$  が相境界においても急激に変化していないことがわかる。

Fig. 3.5に、相境界から離れた、基底状態がSDW状態となる  $V$  領域 (SDW基底領域) における、 $|\psi_1\rangle$  の  $\xi'(r)$  および  $\eta'(r)$  を示す。 $V = 0$  の場合、すべての  $r$  に対して  $\xi(r) < 0$  であること、かつ  $\sum_{n,m}^{n \neq m} \xi(r_{n,m}) = -2$  が満たされており、Appendix A で示したように、このことからホロン・ダブロン対が一对光生成されていることがわかる。さらに、すべての  $r$  に対して  $\xi(r) < 0$  であり、このことから、これらの電荷が束縛されず運動していることがわかる。 $V \gtrsim 10$  においては、 $\xi(1) \simeq -1/N$  かつ  $r \geq 2$  において  $\xi(r) \simeq 0$  となっている。Appendix A で示したように、このことから一組のホロン・ダブロン対が光生成されており、この対が最近接サイトに完全に束縛されていることがわかる。 $V \simeq 5$  においては、ホロン・ダブロン対は束縛されているが、ホロン・ダブロン間距離が2の電荷配置の量子力学的重みも無視できなくなっている。スピン構造に関しては、いずれの  $V$  でも、すべての  $r$  において  $\eta'(r) > 0$  であり、かつ

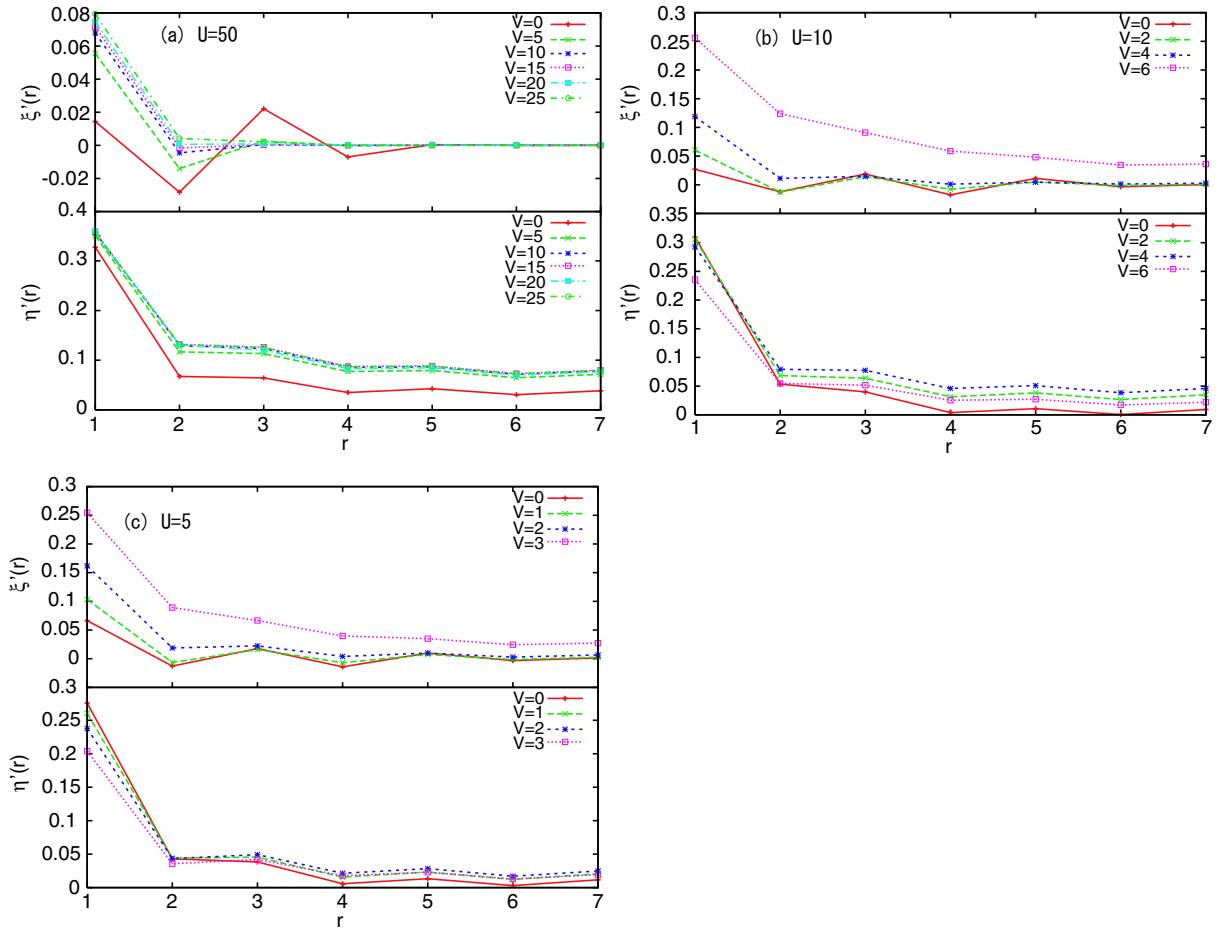


Fig. 3.5. 1次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、および(c)  $U = 5$ でのSDW基底領域での様々な  $V$  の値における、 $|\psi_1\rangle$  のスタaggerド電荷相関関数とスタaggerドスピン相関関数。

$\eta'(r)$  はゆるやかな減少関数になっており、 $|\psi_1\rangle$  も基底状態と同様、短距離SDW秩序をもっていることがわかる。SDW秩序の強度を表す  $\eta'(r)$  の大きさに関しては、 $V$  が大きくなるにしたがって、大きくなっていることがわかる。これは、ホロン・ダブロン対が強く束縛したためである。束縛した場合の  $\eta'(r)$  の大きさは、基底状態のそれよりも約25%小さくなっている。これらの結果をまとめると、相境界から離れ、かつホロン・ダブロン対が強く束縛したSDW基底領域での  $|\psi_1\rangle$  の電子構造はFig. 3.6 (a)のように表すことができることがわかる。ここでFig. 3.6のスピンの状態は長距離SDW秩序を持つことを意味しているのではない。1次元系の場合、スピン揺らぎは大きく、長距離SDW秩序は存在しない。

Fig. 3.7に、相境界から離れた、基底状態がCDW状態となる  $V$  領域 (CDW基底領域) における、 $|\psi_1\rangle$  の  $\xi'(r)$  および  $\eta'(r)$  を示す。すべての  $r$  に対して  $\xi'(r) > 0$  であり、 $|\psi_1\rangle$  はCDW秩序を持っていることがわかる。相境界に近づくにつれて、 $\xi'(r)$  は小さくなり、CDW秩序は弱くなる。スピン構造に関しては、 $\eta(1) \simeq -3/(4N)$  かつ

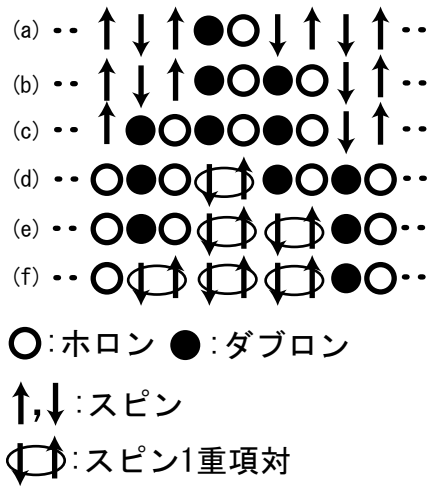


Fig. 3.6. 1次元SDW基底状態領域における (a) ホロン・ダブロン対状態 (b) 2個のホロン・ダブロン対のストリング状態 (c) 3個のホロン・ダブロン対のストリング状態、およびCDW基底状態領域における (d) スピン1重項対状態 (e) 2個のスピン1重項対のストリング状態 (f) 3個のスピン1重項対のストリング状態の概略図。

$r \geq 2$ において  $\eta(r) \simeq 0$  となっている。Appendix A で示したように、 $\eta(r)$  は、一組のスピン1重項対が最近接サイトに形成されている場合の電荷相関関数とほぼ等しいことがわかる。これらの結果をまとめると、相境界から離れたCDW基底領域での  $|\psi_1\rangle$  の電子構造は Fig. 3.6 (d) のように表すことができることがわかる。

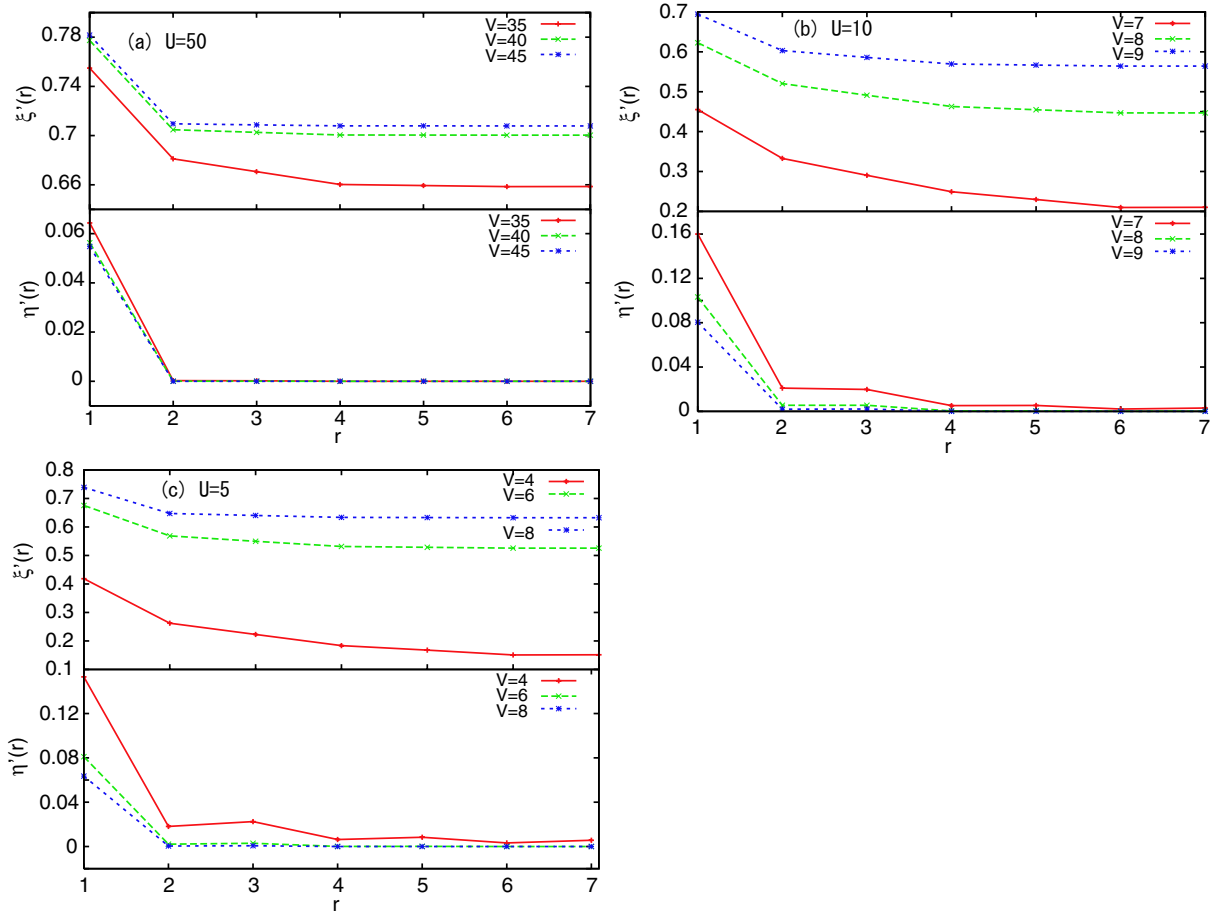


Fig. 3.7. (a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、および (c)  $U = 5$  での CDW 基底領域での様々な  $V$  の値における、 $|\psi_1\rangle$  のスタッガード電荷相関関数とスタッガードスピン相関関数。

Fig. 3.8 に、相境界付近での、 $|\psi_1\rangle$  の  $\xi'(r)$  および  $\eta'(r)$  を示す。電荷構造に関しては、 $\xi(1) \gg -1/N$  であり、このことは、多数のホロン・ダブロン対が形成されていることを示している。すべての  $r$  に対して  $\xi'(r) > 0$  であり、さらに、 $\xi'(r)$  はゆるやかな減少関数であり、 $r \geq 2$  における  $\xi'(r)$  の値は  $\xi'(1)$  と較べても半分程度の大きさである。このことは、 $|\psi_1\rangle$  が短距離 CDW 秩序を持つことを示している。一方、スピン構造に関しては、 $\eta(1) \gg -3/(4N)$  であり、このことは、反強磁性磁気秩序が形成されているか、多数のスピン 1 重項対が形成されていることを示している。また、 $r \geq 2$  においては、 $\eta'(1) \gg \eta'(r)$  となっており、このことは、SDW ではなく多数のスピン 1 重項対からなるバレンスボンド状態のドメインが  $|\psi_1\rangle$  において形成されていることを示している。短距離 SDW 秩序が形成された場合、 $\eta'(r)$  はよりゆるやかな減少関数になり、 $\eta'(1)$  のみが突出して大きい値をもつことはない。これらの結果をまとめると、相境界付近での SDW(CDW) 基底領域では、CDW (スピン 1 重項対) ドメインが光生成されることがわかる。

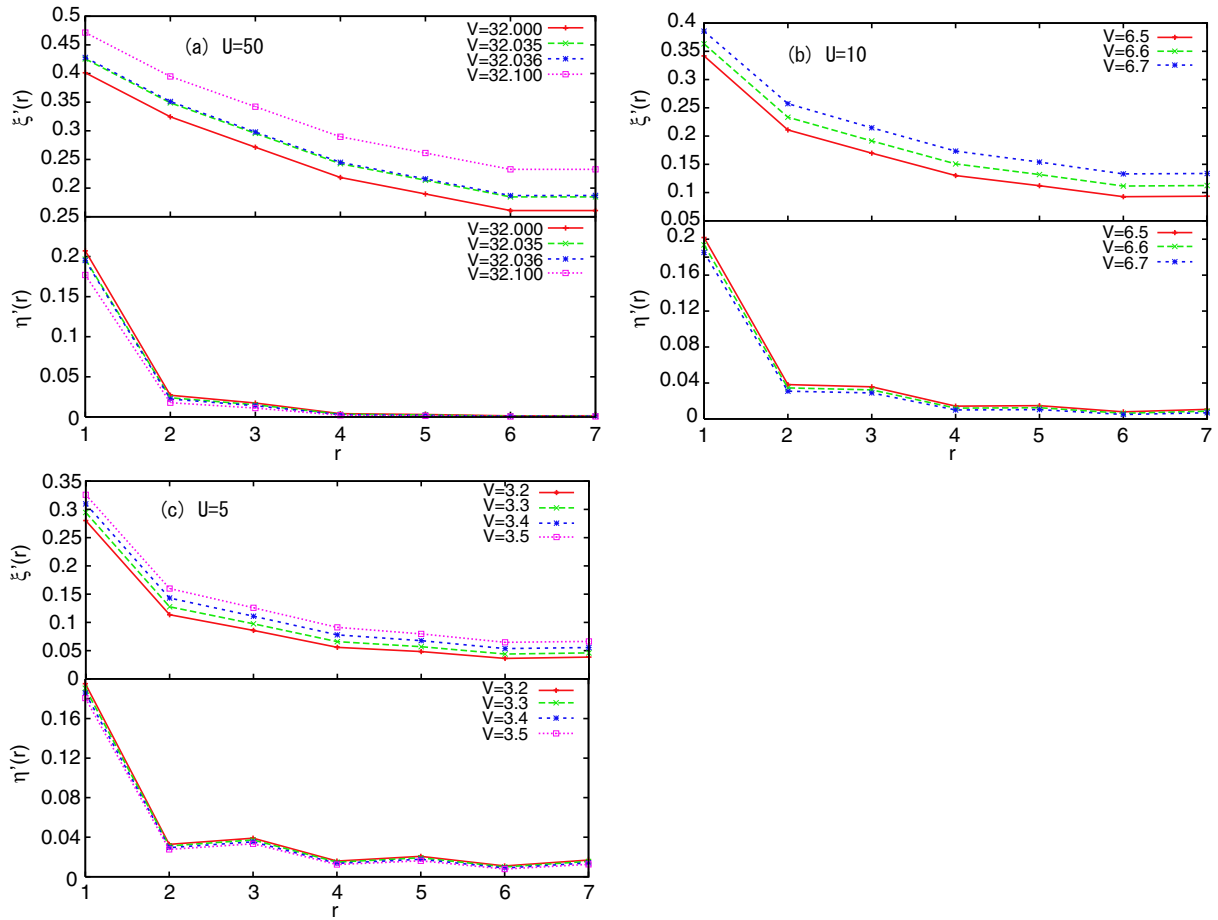


Fig. 3.8. 1次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、および(c)  $U = 5$ での相境界付近での様々な  $V$  の値における、 $|\psi_1\rangle$  のスタッガード電荷相関関数とスタッガードスピン相関関数。

### 3.1.3 強相関モデルに基づく計算結果の解釈

これらの結果を理解するために、摂動論に基づいた考察を行なう。ハミルトニアン  $H$  をクーロン相互作用を記述する項  $H_0$  と電子の遷移を記述する項  $H_1$  に分け、クーロン相互作用が極めて強い場合  $U > V \gg t$  を考え、 $H_1$  を摂動として扱い、 $H$  のエネルギー固有状態の物理的性質を理解することを試みる。 $H_0$  の固有値は電荷配置のみによって決まり、固有状態を簡単に求めることができる。スピン状態は  $H_1$  の2次以上の効果を考えた場合にエネルギーに寄与する。 $H_0$  の固有状態は、 $H_1$  の非対角要素を通じて重ねあわされる。非対角要素の大きさは  $t$  程度であるので、 $H_0$  の固有値の差が  $t$  程度もしくは  $t$  以下の固有状態のみが、強く混成することになる。

まず SDW 基底領域を考える。最初に基底状態を考える。2重占有サイトをもたない(ホロン・ダブロン対数はゼロの)すべての状態は、 $H_0$  の最低固有値  $E_0^{(0)} = 0$  をもつ固有状態である。一方、ホロン・ダブロン対を持つ状態のうち最も固有値が小さい



のは、一対のホロン・ダブロン対が最近接サイトに束縛された状態（その電子構造を Fig. 3.6 (a) に模式的に表す） $|\phi_1^{(0)}\rangle$  であり、その固有値  $E_1^{(0)}$  は  $E_1^{(0)} = U - V(1)$  である。相互作用が強い場合には、 $U - V(1) \gg t$  であるから、基底状態におけるホロン・ダブロン対を持つ状態の量子力学的重みはほとんどゼロになり、基底状態はホロン・ダブロン対数がゼロの状態のみの重ね合わせにより極めて良い近似で記述できることになる。

次に  $|\psi_1\rangle$  を考える。ここで、電子遷移がどのような電子状態の変化をもたらすかをまとめておく。1 重占有サイト間で電子遷移が起きた場合、一対のホロン・ダブロン対が生成される。ダブロンからホロンへ電子が遷移した場合、一対のホロン・ダブロン対が消滅する。ダブロンから 1 重占有サイトへ、もしくは 1 重占有サイトからホロンへ電子が遷移した場合、ダブロンもしくはホロンの遷移が起き、ホロン・ダブロン対数は変化しない。Eq. (2.1.4) からわかるように、電流演算子  $J$  は電子を最近接サイトへ遷移させる。したがって、 $|\phi_1^{(0)}\rangle$  の電子構造をもつ状態のみが、基底状態からの遷移モーメントがゼロでなくなる。このことから、 $|\psi_1\rangle$  の第ゼロ次の近似は  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  によって与えられることがわかる。 $|\psi_1\rangle$  に対する、摂動項  $H_1$  の効果を次に考えてみる。 $H_1$  は、電子を最近接サイトに遷移させる。そのため、以下の 3 種類の  $H_0$  の固有状態のみが第ゼロ次の近似状態である  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  との  $H_1$  の非対角要素がゼロでなくなる：(i) ホロン・ダブロン対数がゼロの状態、(ii) 1 対のホロン・ダブロン対を持ち、そのホロン・ダブロン対が距離 2 だけ離れている状態、(iii) 2 対のホロン・ダブロン対を持つ状態。(i) の固有状態の固有値はすべて 0、(ii) の固有状態の固有値は  $U - V(2)$ 、(iii) の固有状態は様々な固有値を持つが、あとで詳しく述べるように、そのなかで最も低い固有値は  $2U - 3V(1) + 2V(2) - V(3)$  となる。

相境界から離れた領域では、(ii) の固有状態の固有値が  $E_1^{(0)}$  に最も近く、その差は  $V(1) - V(2) = (1 - e^{-\kappa}/2)V$  となっている。 $V(1) - V(2) \lesssim t$  が成り立つ場合には、様々な距離の 1 対のホロン・ダブロン対を持つ状態が  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  に強く混成することになる。 $V(1) - V(2) \gg t$  が成り立つ場合には、 $|\phi_1^{(0)}\rangle$  が  $|\psi_1\rangle$  における量子力学的重みをほとんど独占し、極めて強くホロン・ダブロン対は束縛される。この議論により Fig. 3.5 に示した結果をよく説明できる。 $V = 5$  においては、ホロン・ダブロン間距離が 1 以外の電荷配置に寄与が無視できないが、 $V \gtrsim 10$  においては、距離 1 の電荷配置が量子力学的重みを独占している。

相境界付近では、ホロン・ダブロン対ストリング状態が電荷揺らぎとして重要となる。この考えは、光励起状態に関しては Jeckelmann [31] や Iwano [32] によって、基底状態に関しては Hirsch [7] や Tomita [24] によって既に議論されている。 $n$  対のホロン・ダブロン対からなるホロン・ダブロン対ストリング状態を  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  と表す。 $|\phi_2^{(0)}\rangle$  および  $|\phi_3^{(0)}\rangle$  の電子構造を、それぞれ Fig. 3.6 (b) および (c) に模式的に表す。ストリング状態  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  は  $H_0$  の固有状態であり、 $n$  対のホロン・ダブロン対を持つ状態のうちで、最も低い固有値  $E_n^{(0)}$  を持つ。

簡単のため、以下無限系において  $E_n^{(0)}$  を求めてみる。相互作用が極めて強い場合  $U > V \gg t$  には、単位胞（この場合 2 サイト）あたりの SDW 状態と CDW 状態のエ

エネルギー差  $\Delta$  は以下の式で与えられる。

$$\Delta = |U + 2 \sum_{i=1}^{\infty} V(i)(-1)^i|. \quad (3.1.1)$$

CDW-SDW 相境界は、 $U - V$  平面上において式  $\Delta = 0$  で表される線上にある。この  $\Delta$  を用いれば、ストリング状態  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  の固有値の差を以下のように表すことができる：

$$E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)} = \Delta - \sum_{i=2n+1}^{\infty} \{V(i) - V(i+1)\}(-1)^i. \quad (3.1.2)$$

ここで重要なことは、異なるサイト間クーロン相互作用エネルギーに系統的な打ち消しあいが見られることである。 $n$  が十分大きい場合には  $E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)} \simeq 0$  となる。 $E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)} > 0$  であるので、 $|\phi_1^{(0)}\rangle$  と  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  の最大のエネルギー差は相境界  $\Delta = 0$  において

$$E_{\infty}^{(0)} - E_1^{(0)} = -\frac{e^{-\kappa}(1 - e^{-\kappa})}{2(1 + e^{\kappa})}V + \sum_{i=2}^{\infty} \{V(i) - V(i+1)\}(-1)^i, \quad (3.1.3)$$

となる。この値はスクリーニングパラメーター  $\kappa$  に強く依存し  $\kappa = 0, 0.5$ , および  $\infty$  ( $\kappa = \infty$  のとき PPP モデルは拡張ハバードモデルと一致する) に対し、それぞれ  $(E_{\infty}^{(0)} - E_1^{(0)})/V_c = 0.11, 0.059$ , および  $0$  となる。上述の打ち消しあいの結果、極端に相互作用が強い場合を除いて  $E_{\infty}^{(0)} - E_1^{(0)} \lesssim t$  となることがわかる。

$|\langle \phi_{n+1}^{(0)} | H_1 | \phi_n^{(0)} \rangle| \sim t$  であるので、 $E_n^{(0)} - E_1^{(0)} \lesssim t$  を満たす  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  が  $|\psi_1\rangle$  を含む低エネルギー光励起状態における量子的重みを独占することになる。それゆえ、低エネルギー光励起状態  $|\psi_p\rangle$  は以下のようにホロン・ダブロン対ストリング状態の線型結合で近似できる

$$|\psi_p\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_{p,n} |\phi_n^{(0)}\rangle. \quad (3.1.4)$$

$\Delta$  が小さくなるにつれて、量子的重み  $|c_{p,n}|^2$  はより広い  $n$  の範囲に分布し、相境界  $\Delta = 0$  では、 $E_{\infty}^{(0)} - E_1^{(0)} \lesssim t$  となり分布範囲は発散することがわかる。大きな  $n$  の  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  は、SDW 中に CDW ドメインが存在する電子構造を持っている。そこで、Eq. (3.1.4) で表される低エネルギー光励起状態で幅広く分布した量子的重み  $|c_{p,n}|^2$  を持つものを CDW ドロプレット状態と呼ぶことにする。Fig. 3.8 に示された、相境界付近での  $|\psi_1\rangle$  の特徴はこのように理解することができる。

次に CDW 基底領域を考える。最初に基底状態を考える。電荷密度が 2 サイトごとに 2020 と交替する電荷揺らぎのない CDW 状態は  $H_0$  の最低エネルギー固有関数でありその固有値を  $E_0^{(0)}$  と表す。この電荷揺らぎのない CDW 状態と  $H_1$  を通じて結合するのは、その電子構造を Fig. 3.6 (d) に模式的に表した、CDW バックグラウンドのなかに最近接サイトに束縛されたスピン 1 重項対が存在する状態  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  のみである。 $H_1$  はスピン回転対称であるので、全スピンのゼロである CDW 状態からは、スピン 1 重

項対のみが結合することになる。 $J$  についても同様の議論が成り立つ。 $|\phi_1^{(0)}\rangle$  は  $H_0$  の固有状態であり、その固有値を  $E_1^{(0)}$  と表す。 $\Delta$  を用いれば、 $E_1^{(0)} - E_0^{(0)} = \Delta + V(1)$  と表すことができる。相互作用が強い場合には、 $E_1^{(0)} - E_0^{(0)} \gg t$  であるから、基底状態は  $H_0$  の最低エネルギー固有関数である電荷揺らぎのない CDW 状態で極めて良い精度で近似きることがわかる。

次に  $|\psi_1\rangle$  を考える。前述のように電流演算子  $J$  は電子を最近接サイトへ遷移させる。したがって、 $|\phi_1^{(0)}\rangle$  の電子構造をもつ状態のみが、基底状態からの遷移モーメントがゼロでなくなる。このことから、 $|\psi_1\rangle$  の第ゼロ次の近似は  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  によって与えられることがわかる。 $|\psi_1\rangle$  に対する、摂動項  $H_1$  の効果を次に考えてみる。 $H_1$  は、電子を最近接サイトに遷移させる。そのため、以下の3種類の  $H_0$  の固有状態のみが第ゼロ次の近似状態である  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  との  $H_1$  の非対角要素がゼロでなくなる：(i) 電荷揺らぎのない CDW 状態、(ii) 1 対のスピン 1 重項対を持ち、そのスピン 1 重項対が距離 2 だけ離れている状態、(iii) 2 対のスピン 1 重項対を持つ状態。(i) の固有状態の固有値は  $E_1^{(0)}$  と大きく離れており量子揺らぎとしては重要ではない、(ii) の固有状態の固有値は  $E_1^{(0)} + \Delta + 2U - 3V(1) + V(2)$ 、であり  $E_1^{(0)}$  との差は  $t$  よりもはるかに大きく、この状態も量子揺らぎとしては重要ではない。(iii) の固有状態は様々な固有値を持つが、あとで詳しく述べるように、そのなかで最も低い固有値は  $\Delta - \sum_{i=3}^{\infty} V(i) - V(i+1)\}(-1)^i$  となる。

相境界から離れた領域では、 $E_1^{(0)}$  に近接した固有値をもつ  $H_0$  の固有関数は存在せず、 $|\phi_1^{(0)}\rangle$  が  $|\psi_1\rangle$  における量子力学的重みをほとんど独占する。この議論により Fig. 3.7 に示した結果をよく説明できる。

相境界付近の量子揺らぎはスピン 1 重項対ストリング状態によって記述できる。 $n$  対のスピン 1 重項対からなるスピン 1 重項対ストリング状態を  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  と表す。 $|\phi_2^{(0)}\rangle$  および  $|\phi_3^{(0)}\rangle$  の電子構造を、それぞれ Fig. 3.6 (e) および (f) に模式的に表す。ストリング状態  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  は  $H_0$  の固有状態であり、 $n$  対の中性サイト対を持つ状態のうちで、最も低い固有値  $E_n^{(0)}$  を持つ。

ストリング状態  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  の固有値の差は SDW 基底領域におけるそれ Eq. (3.1.2) とまったく同じ式で与えられる。ここでも、異なるサイト間クーロン相互作用エネルギーに系統的な打ち消しあいが見られる。その結果、相境界  $\Delta = 0$  において、極端に相互作用が強い場合を除いて  $E_{\infty}^{(0)} - E_1^{(0)} \lesssim t$  となることがわかる。

CDW 基底領域においても  $|\langle \phi_{n+1}^{(0)} | H_1 | \phi_n^{(0)} \rangle| \sim t$  であるので、 $E_n^{(0)} - E_1^{(0)} \lesssim t$  を満たす  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  が  $|\psi_1\rangle$  を含む低エネルギー光励起状態における量子的重みを独占することになる。それゆえ、低エネルギー光励起状態  $|\psi_p\rangle$  は Eq. (3.1.4) のようにスピン 1 重項対ストリング状態の線型結合で近似できる。この場合も  $\Delta$  が小さくなるにつれて、量子的重み  $|c_{p,n}|^2$  はより広い  $n$  の範囲に分布し、相境界  $\Delta = 0$  では、 $E_{\infty}^{(0)} - E_1^{(0)} \lesssim t$  となり分布範囲は発散することがわかる。大きな  $n$  の  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  は、CDW 中にスピン 1 重項対のドメインが存在する電子構造を持っている。そこで、Eq. (3.1.4) で表される低エネルギー光励起状態で幅広く分布した量子的重み  $|c_{p,n}|^2$  を持つものをスピン 1 重項ドロプレット状態と呼ぶことにする。Fig. 3.8 に示された、CDW 基底領域での相境界付近

での  $|\psi_1\rangle$  の特徴もこのように理解することができる。

ここで、ドロプレット状態のスピンの構造について述べる。相境界付近において、 $V$  を減少させるにつれて、 $r \geq 2$  における  $\eta(r)$  が連続的に顕著に増加することが、Fig. 3.8 からわかる。このことは、中性ドメインの電子構造が、スピン1重項対ドメインから SDW ドメインへと変化していることを示している。この変化は以下のように理解することが可能である。前述のように、最近接サイトにあるホロン・ダブロン対は、 $H_1$  を作用させることにより、スピン1重項対に変換される。その結果、CDW バックグラウンド中に SDW ドメインをもつ状態よりも、スピン1重項対ドメインをもつ状態のほうが、 $H_1$  を通じた  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  ( $|\psi_1\rangle$  に対する第ゼロ近似状態) との結合がより強い。したがって、この重ね合わせによるエネルギー低下は、スピン1重項対ドロプレット状態のほうがより大きくなる。しかし、スピン1重項対からなるバレンスバンド状態は SDW 状態よりもエネルギーが高いため、中性ドメインの濃度が増すにつれて、重ね合わせによるエネルギー低下よりも、このエネルギー差がより優勢になる。その結果、中性領域の濃度が増すにつれて、この領域の電子状態はスピン1重項対的なものから SDW 的なものへと変化していくのである。

Fig. 3.1 や Fig. 3.8 からわかるように、 $|\psi_1\rangle$  における電荷およびスピン相関関数は、 $U = 50$  の相互作用が極めて強い場合でも、相境界において変化が急激になることはない。この相境界における特徴的な振る舞いは以下のように理解することができる。相境界から離れた CDW 基底領域では、 $|\psi_1\rangle$  は CDW バックグラウンド中の最近接サイトに一对のスピン1重項対ができた状態である。 $V$  を減少させ相境界に近づくにつれて、スピン1重項対のドメインが成長し  $|\psi_1\rangle$  はスピン1重項対ドロプレット状態となる。さらに  $V$  が減少し相境界に近づくにつれて、この中性ドメインはより大きくなると同時に、電子構造がスピン1重項対ドメインから SDW 状態へと変化していく。相境界をまたいで  $V$  を減少させると、中性状態の領域の割合が CDW 状態のそれよりも大きくなり、さらに中性状態の電子構造は SDW 状態に近づき、CDW ドロプレット状態が形成される。このようにして、 $|\psi_1\rangle$  は相境界をまたいで、スピン1重項対ドロプレット状態から CDW ドロプレット状態へ連続的に変化し、クロスオーバー的变化を示すのである。

これに対して、基底状態においては、相境界付近でも  $E_1^{(0)} - E_0^{(0)} \gg t$  であるために、ホロン・ダブロン対ストリング状態もしくはスピン1重項対ストリング状態の量子揺らぎとしての寄与はほとんどゼロとなる。その結果、 $H_1$  を通じて強く結合し、かつ CDW 状態と SDW 状態をつなぐ、一連の状態が存在しないことになる。そのために、基底状態はクロスオーバー的な変化を示さず、相転移がおきると考えられる。Fig. 3.9 に、 $U = 50$  における、相境界から十分離れた SDW 基底領域 ( $V = 10$ ) と CDW 基底領域 ( $V = 35$ ) での基底状態と、各  $V$  での基底状態の重なり積分の  $V$  依存性を示す。この図からわかるように、 $|\langle \psi_0(V) | \psi_0(10) \rangle|^2 + |\langle \psi_0(V) | \psi_0(35) \rangle|^2 \simeq 1$  となっており、相境界付近では、基底状態は SDW 状態と CDW 状態の線型結合により極めて良い近似で表され、ドロプレット状態の寄与がほとんどないことを確認することができる。ここで、 $|\psi_0(V)\rangle$  は  $V$  での基底状態を表す。

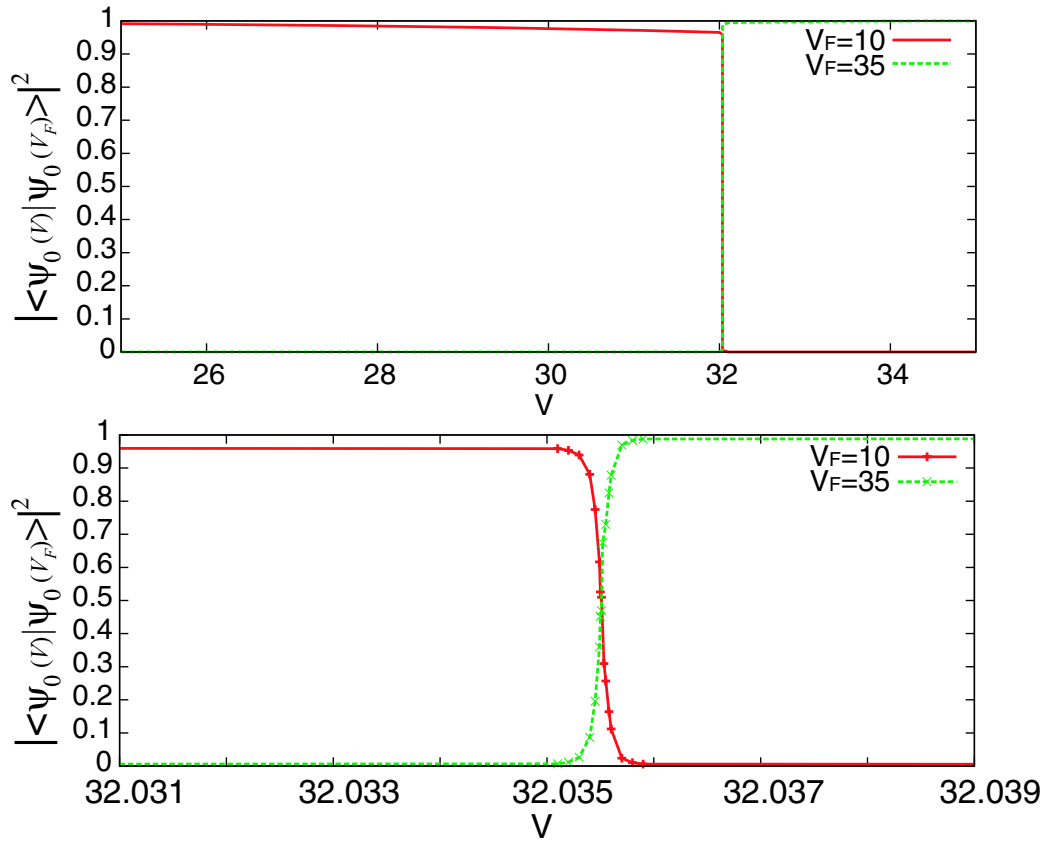


Fig. 3.9. 1次元系における、 $U = 50$  での、SDW 基底領域 ( $V_F = 10$ ) と CDW 基底領域 ( $V_F = 35$ ) での基底状態と、各  $V$  での基底状態の重なり積分  $|\langle \psi_0(V) | \psi_0(V_F) \rangle|^2$  の  $V$  依存性。

次に相境界付近での光吸収スペクトルについて考察する。前に述べたように、相境界付近では、最低エネルギーピークの強度は著しく低下し、数個の低エネルギーピークが発生する。これを良く見るために、Fig. 3.10 に相境界における光吸収スペクトルを示す。この図からわかるように、最低エネルギーピークが独占的な相境界から離れた領域とはまったく異なるスペクトルが見られる。

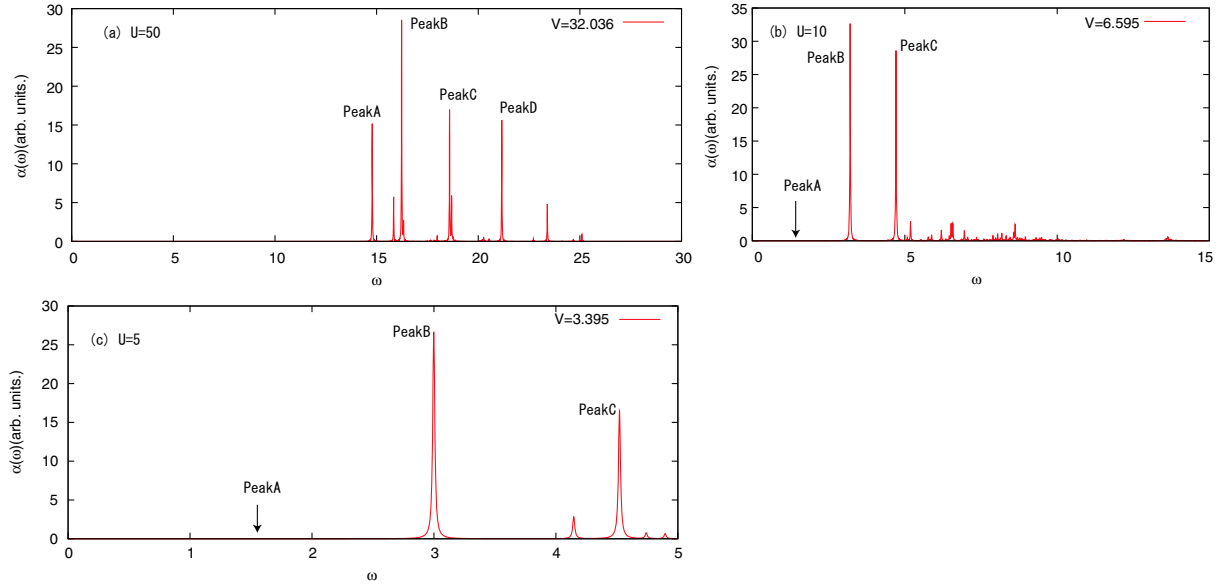


Fig. 3.10. 1次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、(c)  $U = 5$  での相境界における光吸収スペクトル。

まず最低エネルギーピークの強度が著しく低下する理由について考察する。前に述べたように、基底状態からの遷移モーメントがゼロでないのは  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  のみである。相境界から離れた領域では、 $|\psi_1\rangle \simeq |\phi_1^{(0)}\rangle$  であるので、 $|\psi_1\rangle$  は基底状態からの遷移モーメントをほとんど独占している。相境界付近では、CDW もしくはスピン1重項対ドロレット状態への遷移モーメントは Eq. (3.1.4) より  $\langle\psi_0|J|\psi_p\rangle = c_{p,1}\langle\psi_0|J|\phi_1^{(0)}\rangle$  となることからわかる。相境界に近づき、各ストリング状態の量子力学的重みがより幅広く分布するようになるにつれて、 $|c_{p,1}|$  は小さくなり、遷移モーメントが小さくなるのである。

しかし、最低エネルギーピークは相境界で消失することは、上記の議論から説明することはできない。総サイト数  $N = 14$  を用いているため、ストリング状態の数は6に限定され、量子力学的重みが完全に均一に分布したとしても、 $|c_{p,1}|^2 \simeq 1/6$  となるからである。この消失の原因について考察する。Fig. 3.11において、相境界の近傍での、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  の遷移モーメントと、基底状態の  $\xi'(1)$  および  $\eta'(1)$  の  $V$  依存性を比較した。 $U = 50$  の場合には、遷移モーメントは相境界近傍において、相境界付近の極狭い領域（中0.001程度）を除けば、ピーク値の1/10程度まで減少し、ほぼ一定の値をとっている。この極狭い領域において、遷移モーメントは急激に変化し、相境界においてほとんどゼロとなる。Fig. 3.11からわかるようにこの遷移モーメントが急激に変化する領域は、基底状態が急激に変化する領域と一致している。前述のように  $|\psi_1\rangle$  は相境界においても特に急激な変化は示さない。この遷移モーメントの消失は基底状態の変化に由来するものである。前述のように、この基底状態が急激に変化する領域において、基底状態はSDW状態とCDW状態との線型結合となっている。SDW状態およびCDW状態と  $|\psi_1\rangle$  との間の遷移モーメントは消失しないが、逆の符号をもって

おり、互いにちょうど打ち消しあう線型結合係数において、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  との遷移モーメントが消失するのである。

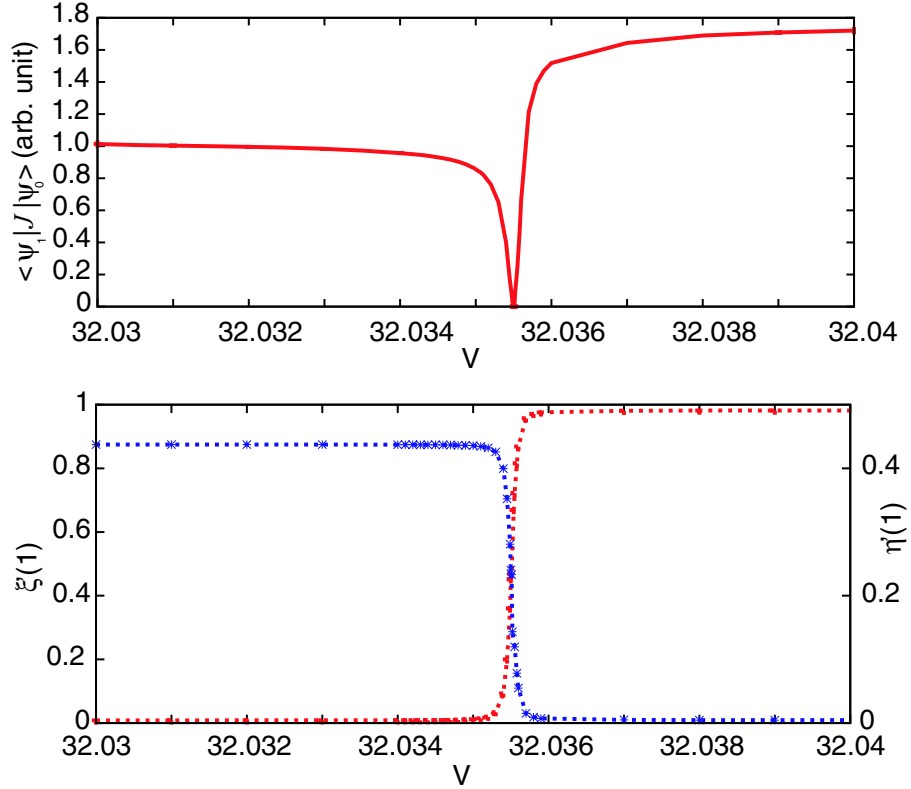


Fig. 3.11. 1次元系における、 $U = 50$ での基底状態と  $|\psi_1\rangle$  の遷移モーメント、基底状態の  $\xi(1)$  および  $\eta'(1)$  の  $V$  依存性。

相境界における光吸収スペクトルもスピン1重項対もしくはCDWドロプレット状態の特徴である。Eq. (3.1.4)をシュレディンガー方程式に代入して永年方程式をとけば、多くのCDWもしくはスピン1重項対ドロプレット状態である低エネルギー光励起状態が得られる。これらの多数のエネルギー固有状態に遷移モーメントが分散し、多数のピークが出現すると考えられる。

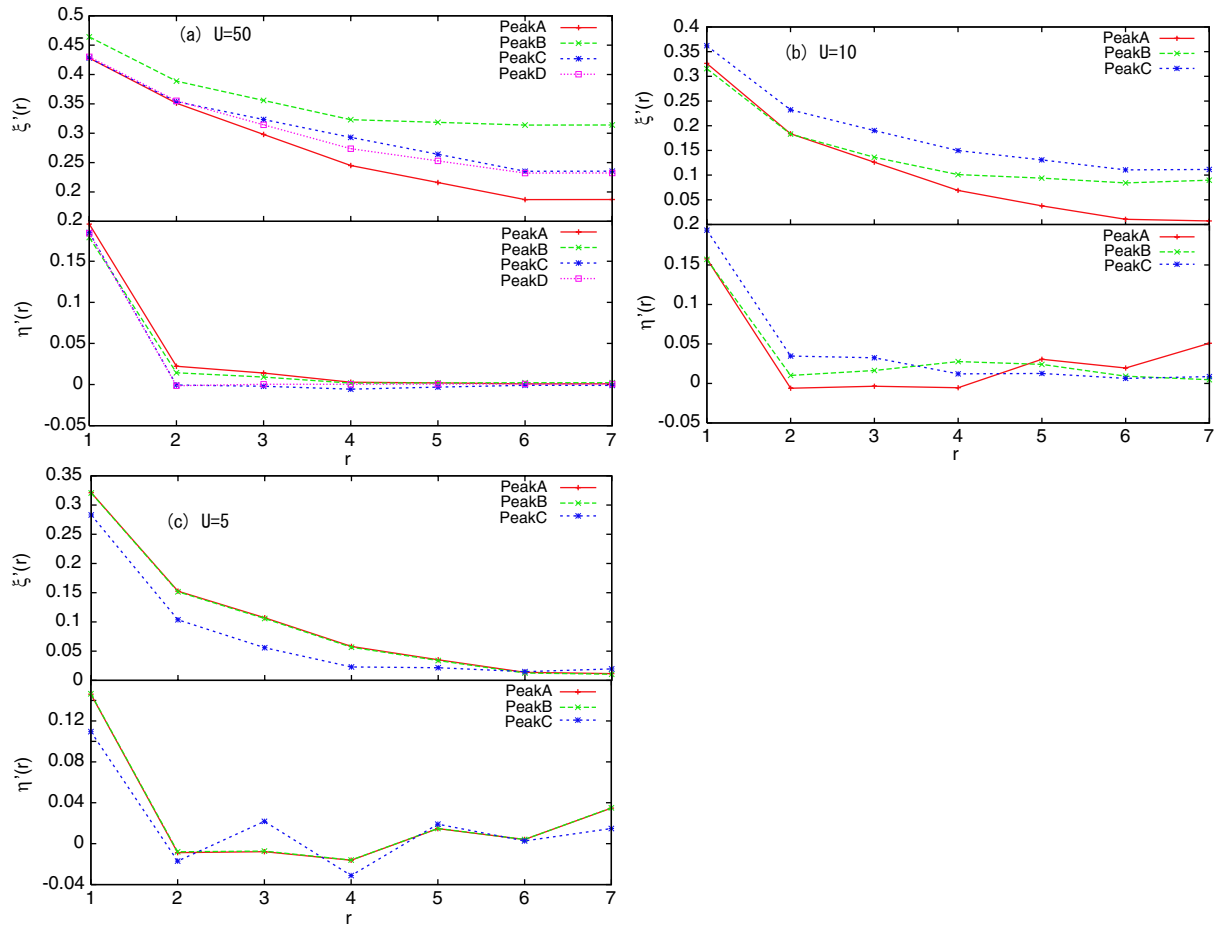


Fig. 3.12. 1次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、(c)  $U = 5$  での相境界での光吸収スペクトルの主要なピークに対応するエネルギー固有状態のスタaggerド電荷相関関数とスタaggerドスピン相関関数。ピークとの対応は Fig. 3.10 に図示。

次に相境界での光吸収スペクトルにおける主要なピーク (Fig. 3.10 に図示) に対応するエネルギー固有状態を求めた。これを Fig. 3.12 に示す。この図からわかるようにいずれのピークに対応する状態も CDW もしくはスピン 1 重項対ドロプレット状態の特徴を示しており、上述の議論が正しいことを示している。



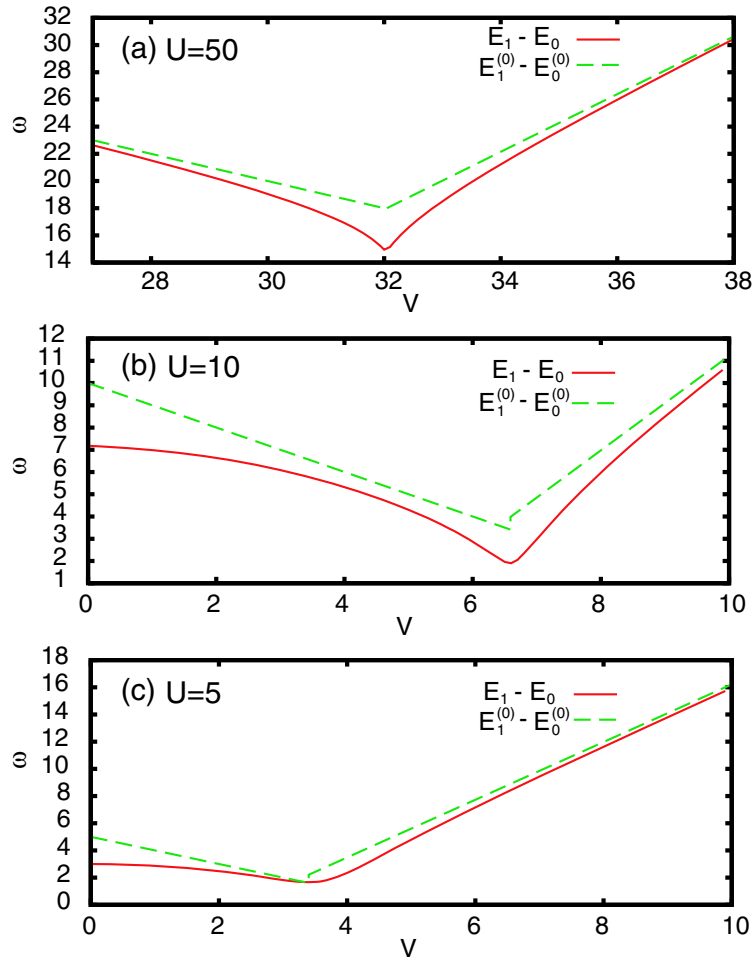


Fig. 3.13. 1次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、(c)  $U = 5$  での  $E_1 - E_0$  および  $E_1^{(0)} - E_0^{(0)}$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および緑の線で表す。

Fig. 3.13 (a) に最低エネルギー光励起状態の励起エネルギー  $E_1 - E_0$  および、 $H_0$  のみを考慮した場合の対応する励起エネルギー  $E_1^{(0)} - E_0^{(0)}$  の  $V$  依存性を示す。この図からわかるように相境界から離れた場合には、 $E_1 - E_0 \simeq E_1^{(0)} - E_0^{(0)}$  であり、相境界付近では  $E_1 - E_0$  は  $E_1^{(0)} - E_0^{(0)}$  よりも  $3t$  程度小さくなっており、これは、ホロン・ダブロン対もしくはスピン1重項対ストリング状態の混成によるエネルギー低下であると理解することができる。

### 3.1.4 エキシトンストリング状態との違い

分子性固体などで観測される、CDW ドロプレット状態に類似した、エキシトンストリング状態では、 $n$  個のエキシトンからなるエキシトンストリング状態は  $n$  光子励起によって生成される。CDW もしくはスピン1重項対ドロプレット状態は1光子励起によって生成されるのであって、エキシトンストリング状態とは生成メカニズムが

根本的に異なっていることは強調されるべきである [39–45]。SDW 基底領域での光励起過程を例にしてこのことを考察する。Eqs. (2.1.3) および (2.1.4) からわかるように、 $H_{e-p}$  を基底状態に作用させると、一對のホロン・ダブロン対が形成されるのみである。それにもかかわらず、CDW ドロプレット状態が 1 光子励起によって生成される理由を理解するには、 $|\psi_1\rangle$  を共鳴的に励起する場合のダイナミクスを見てみるのが良い。ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}(t)$  で記述される光で基底状態を励起した場合の、時刻  $t$  での光励起状態  $|\psi(t)\rangle$  は以下のように与えられる

$$|\psi(t)\rangle = -i \int_{-\infty}^t d\tau e^{-iH(t-\tau)} (-\mathbf{A}(\tau) \cdot \mathbf{J}) |\psi_0\rangle, \quad (3.1.5)$$

ここで、弱励起の極限を考え、 $\mathbf{A}(t)$  に関して 1 次 (1 光子励起) の項のみを考えている。共鳴的に励起する場合は、時間とエネルギーの不確定関係から、パルスの持続時間は、エネルギー準位の間隔の逆数よりもはるかに大きくなければならない。Eq. (3.1.5) からわかるように、 $|\psi(t)\rangle$  は異なる吸収時刻 ( $\tau$ ) での寄与が足し合わせにより与えられる。電子系が光を吸収した直後の状態ベクトルは  $J|\psi_0\rangle$  となり、この状態は一對のホロン・ダブロン対のみを持つ。前に述べたように、ホロン・ダブロン対数は  $H$  が作用することにより 1 個増える、1 個減る、変わらないのいずれかである。もし、 $t-\tau$  が十分大きければ、 $e^{-iH(t-\tau)} J|\psi_0\rangle$  には多数のホロン・ダブロン対を持つ状態が含まれることになる。 $t-\tau$  が十分大きな項が大きな寄与を与えることから、共鳴的に  $|\psi_1\rangle$  を励起した場合、 $|\psi_1\rangle = |\psi(\infty)\rangle$  には、1 光子励起によるにもかかわらず多数のホロン・ダブロン対を持つ状態が大きな寄与を持ちえるのである。

### 3.2 1次元系—より相互作用が弱い場合—

この節では、 $U = 5$  付近のより相互作用が弱い場合の結果について述べる。最低エネルギー光励起状態  $|\psi_1\rangle$  に関しては、より相互作用の強い場合と定性的には同じ結果が得られている。より相互作用の強い場合と異なるのは基底状態の振る舞いである。Fig. 3.1 (c) からわかるように、 $U = 5$  での基底状態の電荷およびスピン相関関数は、相境界においてもゆるやかに変化している。Fig. 3.14 に  $U = 5$  での様々な  $V$  の値における、基底状態のスタaggerド電荷相関関数  $\xi'(r)$  とスタaggerドスピン相関関数  $\eta'(r)$  を示す。相境界付近でも  $r \geq 2$  での  $\eta'(r)$  は十分大きく、拡張ハバードモデルの弱相関領域で見出された、BOW 状態が現われている兆候は見えず、CDW もしくは SDW ドメインが生成されていることがわかる。このことは以下のように理解することができる。この場合、 $U - V_c \simeq t$  となるために、基底状態において  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  (最近接サイトに束縛されたホロン・ダブロン対もしくはスピン 1 重項対が存在する状態) は大きな量子力学的重みをもつようになり、その結果  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  (ホロン・ダブロン対もしくはスピン 1 重項対ストリング状態) もまた大きな量子力学的重みをもつようになる。その結果、 $|\psi_1\rangle$  の場合と同様に連続的な変化が可能になるものと考えられる。連続的な変化が起きるか起きないかを定める基準は  $U - V_c$  の大きさであると考えられる。

拡張ハバードモデルにおける過去の多くの研究では、 $U \lesssim 2$  において BOW 状態を

はさんだ連続的な変化が見られており、PPPモデルでの本研究とは異なる結果が得られている。これは以下のように理解することができる。長距離クーロン相互作用の結果、極端に大きな $k$ を用いるのであればPPPモデルでの $V_c$ は拡張ハバードモデルでのそれよりもはるかに大きい。その結果拡張ハバードモデルよりもはるかに大きな $U = 5$ 付近で、 $U - V_c \simeq t$ となる。 $U$ が大きい場合には、BOW状態はSDW状態に比べてエネルギーがはるかに大きくなり、基底状態となることはなくなる。これが、これら二つのモデルによる結果の違いの原因であると考えられる。

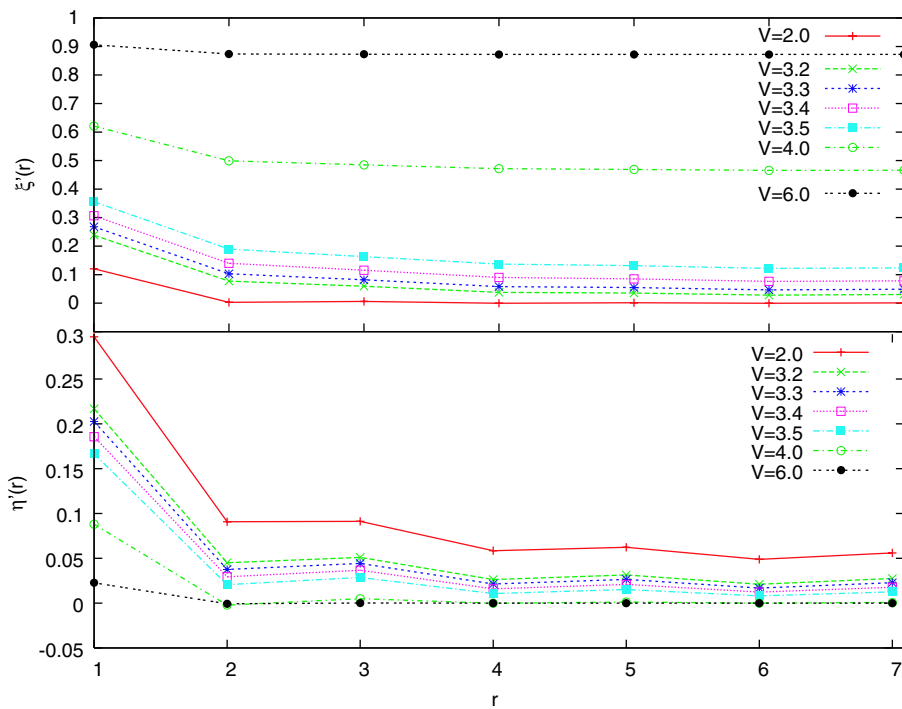


Fig. 3.14. 1次元系における、 $U = 5$ での様々な $V$ の値における、基底状態のスタッガード電荷相関関数とスタッガードスピン相関関数。

### 3.3 $\kappa$ 依存性

これまで、長距離スクリーニングパラメーター  $\kappa = 0.5$  に固定して議論を進めてきた。この節において、結果の  $\kappa$  依存性を議論し、 $\kappa = 0.5$  での結果にどれだけ一般性があるかを考える。

まず、Eq. (3.1.1) から、 $\kappa$  が増大するにつれて  $V_c$  が減少することを簡単に示すことができる。

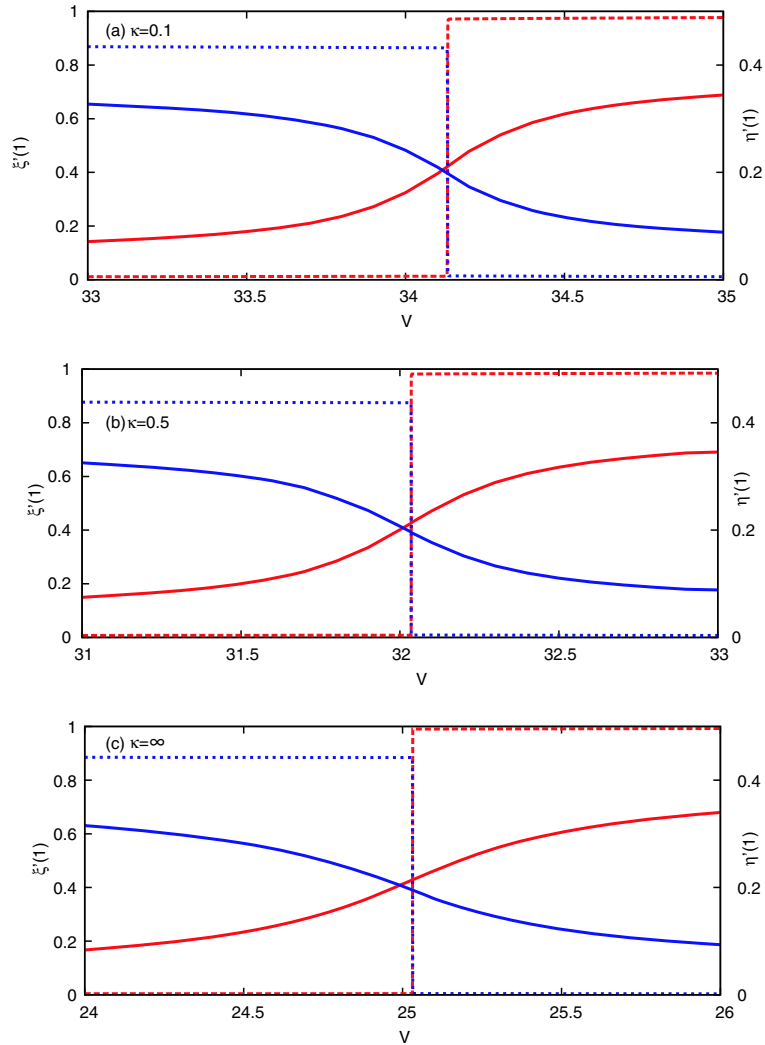


Fig. 3.15. 1次元系における、 $U = 50$ での (a)  $\kappa = 0.1$ 、(b)  $\kappa = 0.5$ 、(c)  $\kappa = \infty$ での、 $\xi'(1)$  および  $\eta'(1)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。点線は基底状態、実線は  $|\psi_1\rangle$  の相関関数を表す。

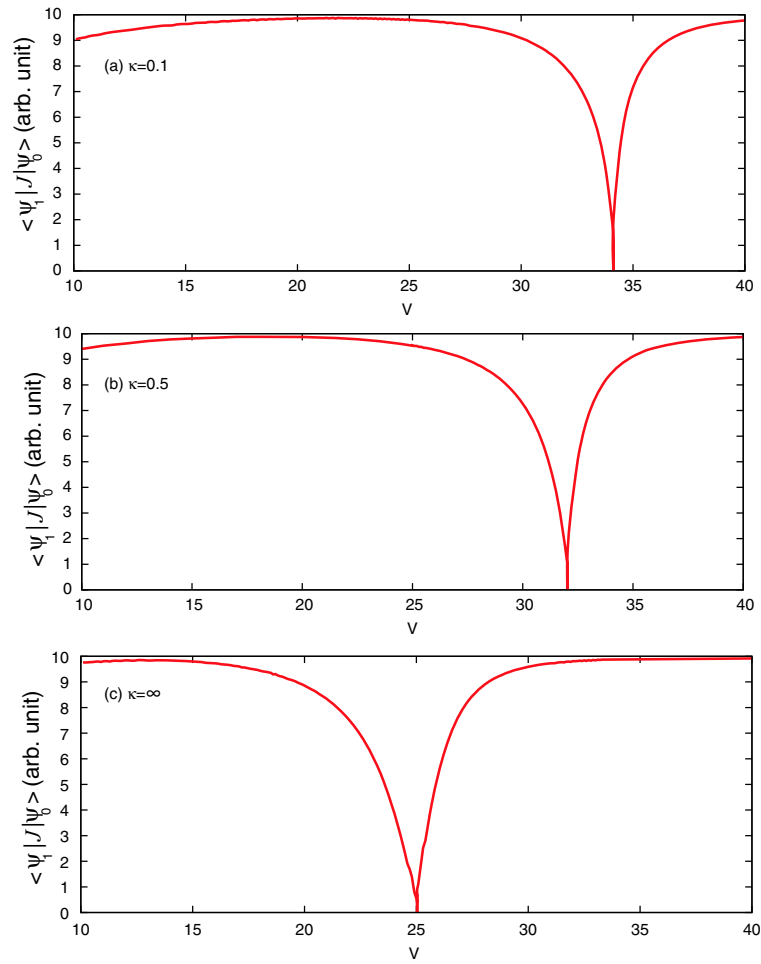


Fig. 3.16. 1次元系における、 $U = 50$ での (a)  $\kappa = 0.1$ 、(b)  $\kappa = 0.5$ 、(c)  $\kappa = \infty$ での、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  間の遷移モーメント  $V$  依存性。

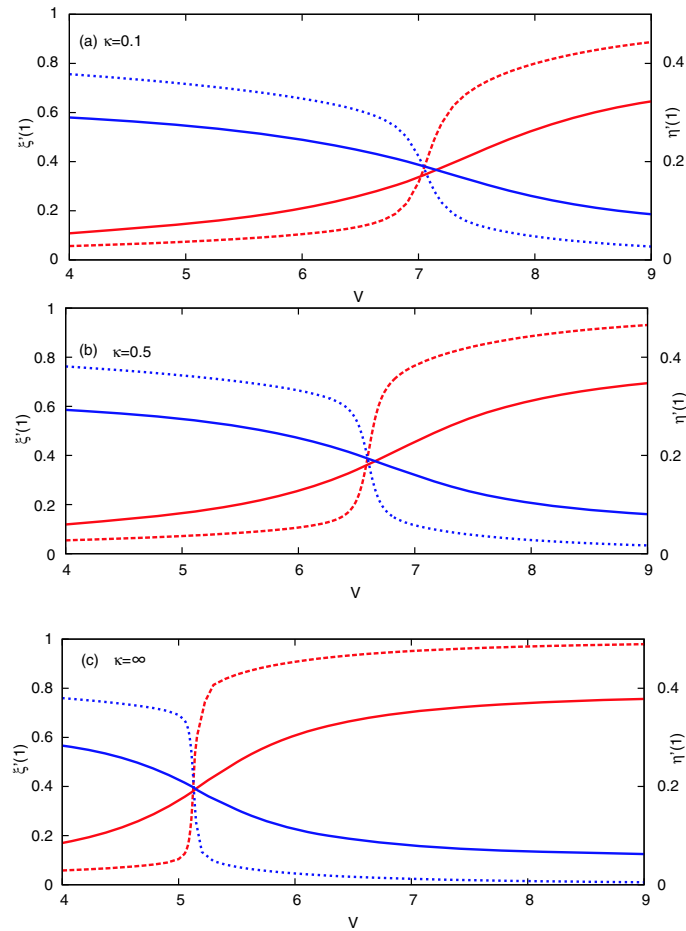


Fig. 3.17. 1次元系における、 $U = 10$ での (a)  $\kappa = 0.1$ 、(b)  $\kappa = 0.5$ 、(c)  $\kappa = \infty$ での、 $\xi'(1)$  および  $\eta'(1)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。点線は基底状態、実線は  $|\psi_1\rangle$  の相関関数を表す。

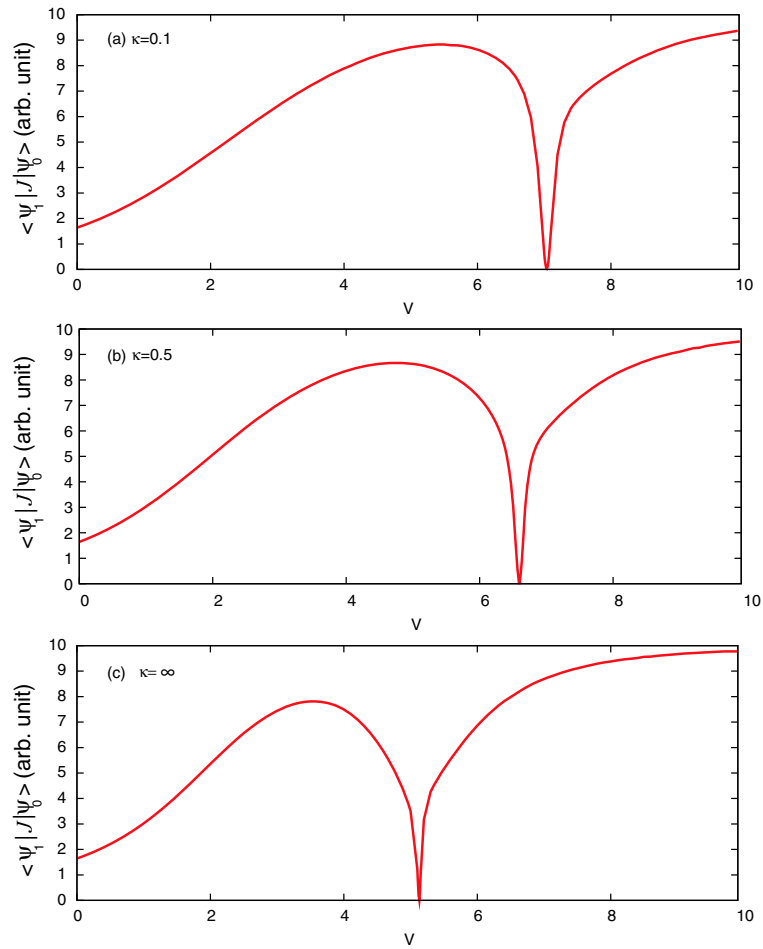


Fig. 3.18. 1次元系における、 $U = 10$ での (a)  $\kappa = 0.1$ 、(b)  $\kappa = 0.5$ 、(c)  $\kappa = \infty$ での、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  間の遷移モーメント  $V$  依存性。

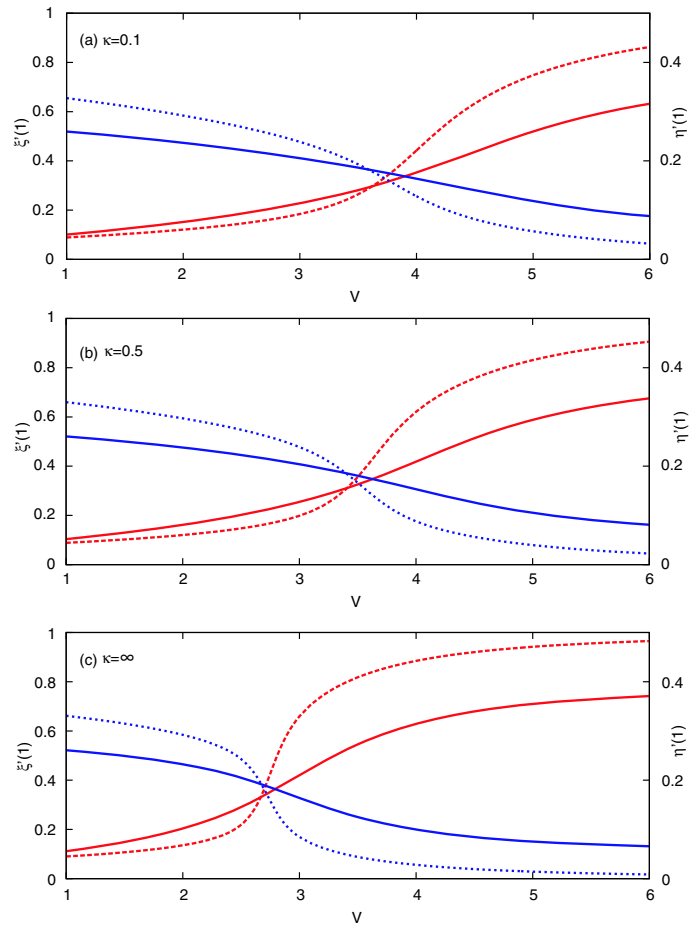


Fig. 3.19. 1次元系における、 $U = 5$ での (a)  $\kappa = 0.1$ 、(b)  $\kappa = 0.5$ 、(c)  $\kappa = \infty$  での、 $\xi'(1)$  および  $\eta'(1)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。点線は基底状態、実線は  $|\psi_1\rangle$  の相関関数を表す。



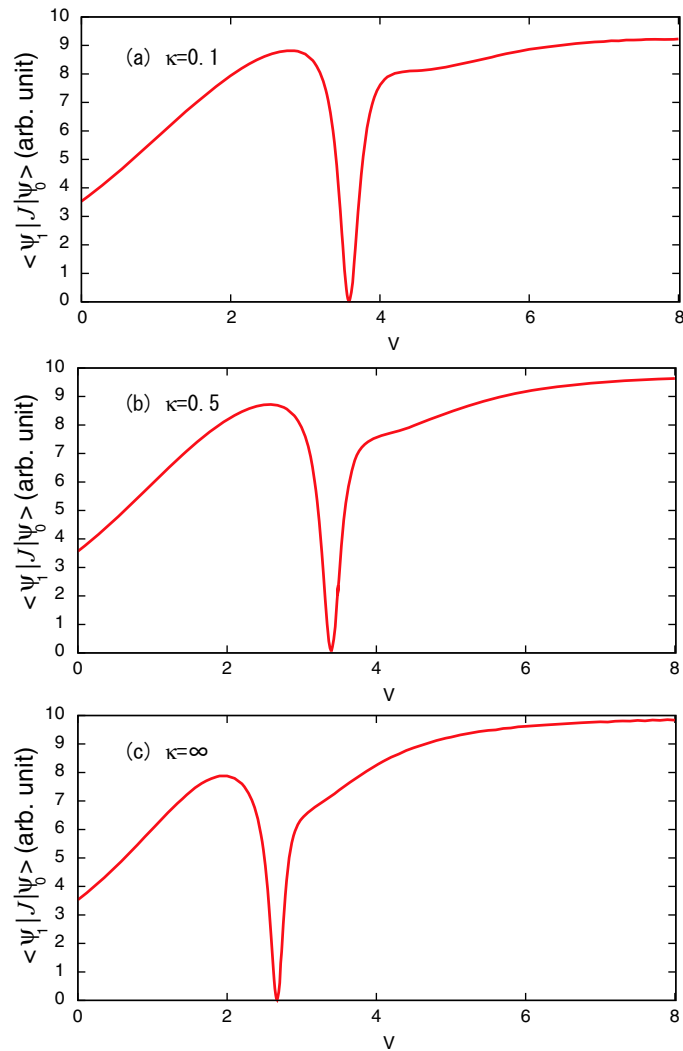


Fig. 3.20. 1次元系における、 $U = 5$ での (a)  $\kappa = 0.1$ 、(b)  $\kappa = 0.5$ 、(c)  $\kappa = \infty$ での、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  間の遷移モーメント  $V$  依存性。

Fig. 3.15- 3.20に、様々な  $\kappa$  の値での、電荷およびスピン相関関数、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  間の遷移モーメントの  $V$  依存性を示す。これら図からわかるように、 $U = 5$  においては、 $\kappa$  が増大するにつれて、ドロプレット状態が光吸収スペクトルを支配し、遷移モーメントが著しく減少する  $V$  の範囲が増大することがわかる。このことは、前に議論した、ドロプレット状態特有の量子揺らぎから説明できる。Fig. 3.21に、 $E_n^{(0)} - E_1^{(0)}$  の  $n$  依存性の模式図を示す。Eq. (3.1.2)からわかるように、相境界におけるストリン

グ状態の  $H_0$  の固有値の差  $E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)}$  は、この図に示したように  $\kappa$  が増大するにつれて減少し、 $\kappa = \infty$  では相境界において  $E_n^{(0)} - E_1^{(0)} = 0$  となる。相境界付近では、相境界での  $E_n^{(0)} - E_1^{(0)}$  に  $\Delta n$  が足しあわされる。前に議論したように、 $E_n^{(0)} - E_1^{(0)} \lesssim t$  を満たすストリング状態  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  のみが、 $|\psi_1\rangle$  に強く混成する。この図からわかるように、 $\kappa$  が増大するにつれて、 $E_n^{(0)} - E_1^{(0)}$  の  $n$  依存性が弱くなり、より大きな  $n$  の  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  も  $|\psi_1\rangle$  において無視できない量子的重みを持つことになる。また、 $\kappa$  がより大きい場合には、 $\Delta$  がより大きくても  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  の量子的重みの分布が  $\kappa$  がより小さい場合と同程度になることがわかる。このようにして、上述の  $\kappa$  依存性を説明することができる。 $U = 10$  においても、同様の  $\kappa$  依存性が見られる。

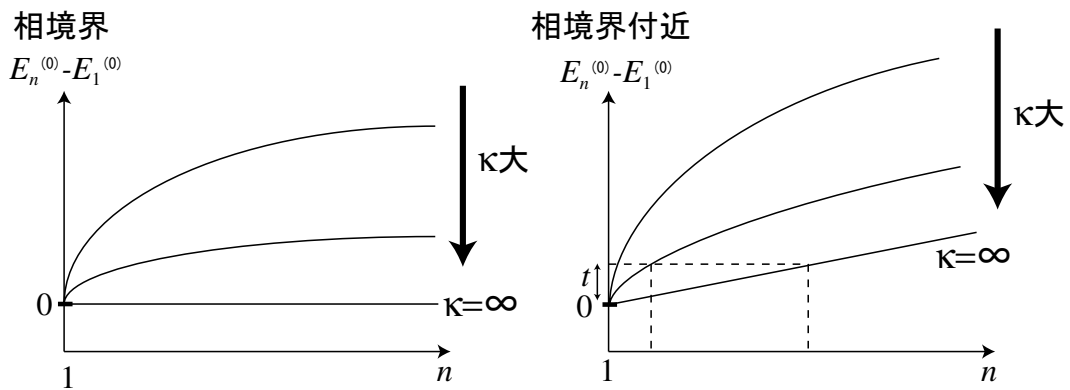


Fig. 3.21.  $E_n^{(0)} - E_1^{(0)}$  の  $n$  依存性の模式図。

次に  $U = 5$  の場合についてのべる。Fig. 3.19 からわかるように、基底状態の相関関数の相境界における変化が、 $\kappa$  が増大するにつれて急激になっている。これも、前述の基底状態の揺らぎの性質から理解することができる。 $\kappa$  が増大するにつれて、 $V_c$  が減少し、その結果、 $E_1^{(0)} - E_0^{(0)} = U - V_c$  が増大する。 $E_1^{(0)} - E_0^{(0)}$  が大きくなるにつれて、基底状態に混成するホロン・ダブロン対もしくはスピン1重項対ストリング状態の量子力学的重みが減少し、相境界での変化がより急激になるのである。

ここで、多くの CDW-SDW 量子相転移研究で用いられてきた  $\kappa = \infty$  の拡張ハバードモデルの特殊性について記しておく。前述のようにこのモデルでは、相境界においてすべての  $n$  に対して  $E_n^{(0)}$  は完全に等しくなり、どれだけクーロン相互作用が強くて、 $|\psi_1\rangle$  においてホロン・ダブロン対もしくはスピン1重項対ストリング状態の混成が強くおきる。一方、十分に  $U$  を大きくすれば、 $\kappa$  が有限の PPP モデルでは、大きな  $n$  のストリング状態  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  の混成は起きない。このようにして、 $U$  が極めて大きい場合には、 $\kappa = \infty$  と  $\kappa$  が有限の場合に、質的な違いが現われる。また、PPP モデルでは、相境界においても、 $n$  がより大きくなれば  $E_n^{(0)}$  もより大きくなり、大きな  $n$  のストリング状態の量子力学的重みはより小さくなる。このようなことは拡張ハバードモデルでは起きない。相境界において、すべての  $n$  に対して  $E_n^{(0)}$  が完全に等しくなる拡張ハバードモデルでは、Eq. (3.1.4) の永年方程式の解のエネルギー固有値は巾  $2t$  のバンドを形成することがわかる。それに対して PPP モデルでは、 $E_n^{(0)}$  が異なるために、離散的なエネルギー固有値が得られる可能性がある。本論文で得られた離散的なピークは、有限サイズ効果によるものではなく、 $E_n^{(0)}$  値の変動によるものであると考えられる。なぜならば、有限サイズ効果に由来するならば、Fig. 3.10 に見ることができる、相境界付近での主要なピークの数の  $U = 50$  と  $U = 10$  での違いは説明できないからである。このように、拡張ハバードモデルはこの重ね合わせの効果を特異な形でとりいれた特殊なモデルであると結論づけることができる。この問題を考慮する際には、拡張ハバードモデルの結果を安易に一般化することはできないことに注意すべきである。

この節で述べたように、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  の相境界での振る舞いは定量的には  $\kappa$  に依存するが、 $U \leq 50$  の範囲では、定性的に同じ振る舞いを示す。さらに、この  $\kappa$  の依存性は、前に得られた結論に基づいて理解することができる。従って、本論文で得られた結論は、極端に  $U$  が大きい場合を除き特殊な  $\kappa$  の値でのみ成立するのではなく、長距離相互作用を取り入れたモデルに一般的に成り立つものであると言える。

### 3.4 システムサイズ依存性

緒言で述べたように、相転移を議論するためには、システムサイズ依存性を解析することが重要である。特に、本研究のように少数サイトでの研究結果は、有限サイズ効果によるアーティファクトについて注意する必要がある。

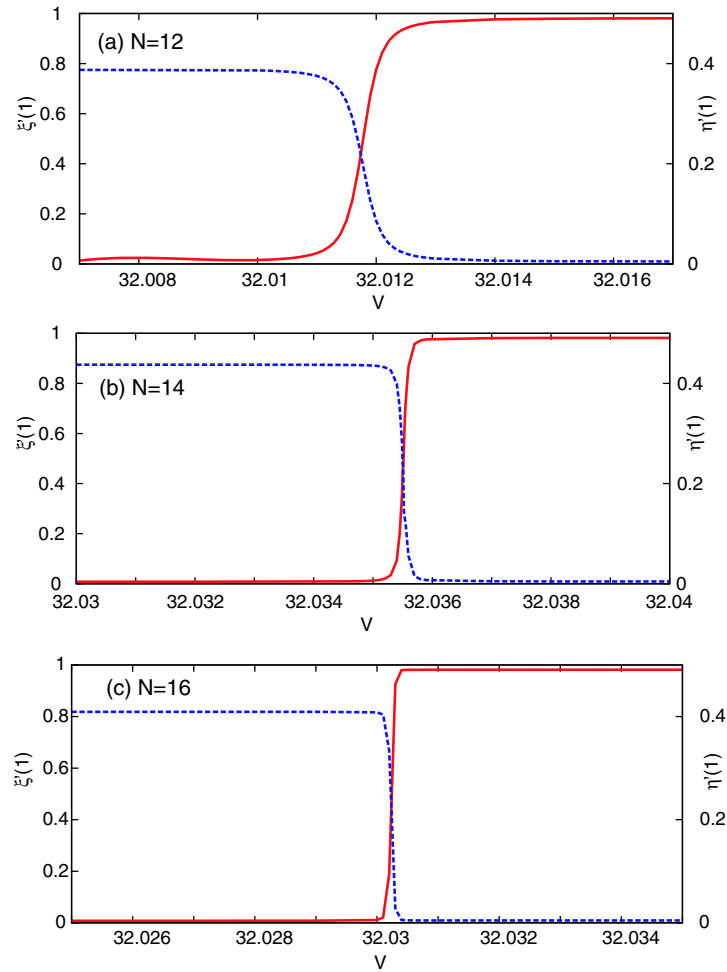


Fig. 3.22. 1次元系における、 $U = 50$ 、 $\kappa = 0.5$ での (a)  $N = 12$ 、(b)  $N = 14$ 、(c)  $N = 16$ での、基底状態における  $\xi(1)$  および  $\eta(1)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。

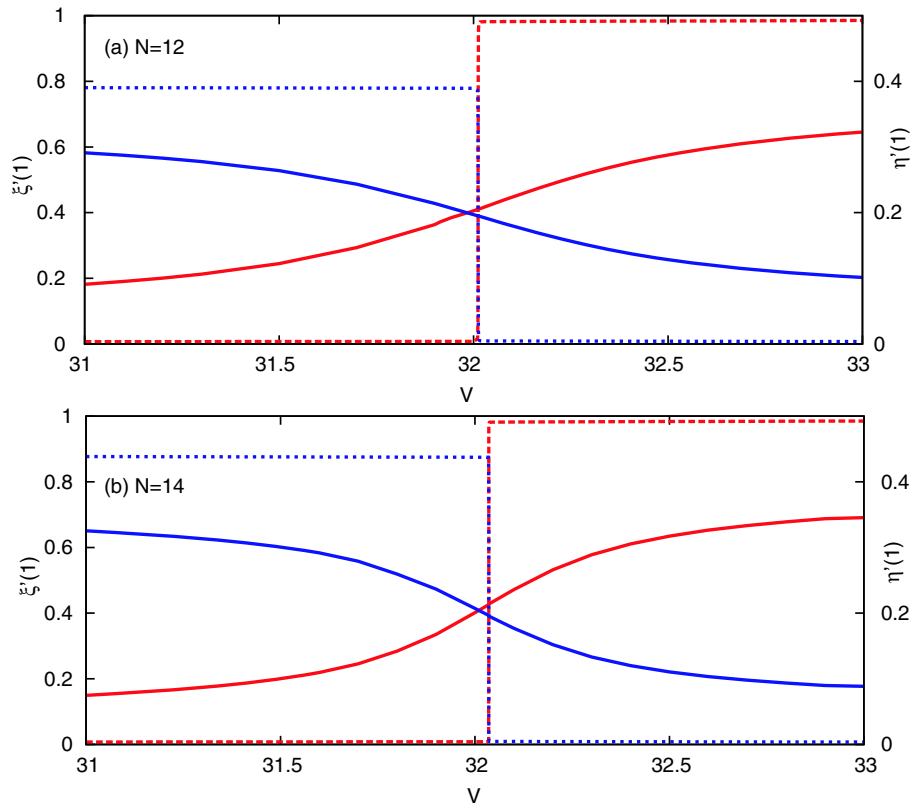


Fig. 3.23. 1次元系における、 $U = 50$ 、 $\kappa = 0.5$ での (a)  $N = 12$ 、(b)  $N = 14$ での、 $\xi'(1)$  および  $\eta'(1)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。点線は基底状態、実線は  $|\psi_1\rangle$  の相関関数を表す。

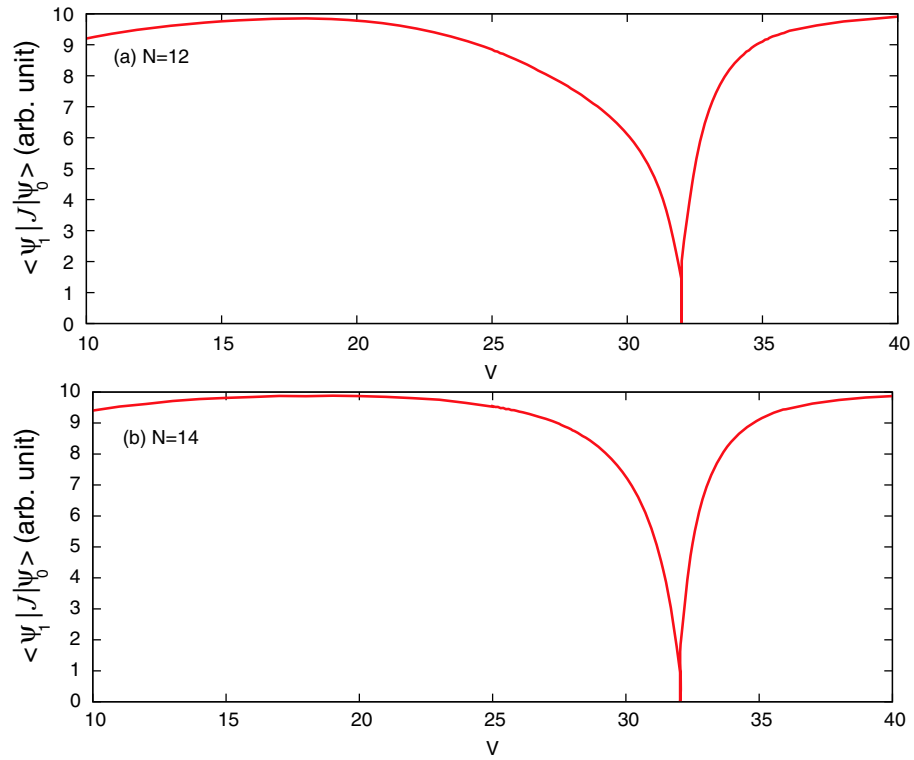


Fig. 3.24. 1次元系における、 $U = 50$ 、 $\kappa = 0.5$ での (a)  $N = 12$ 、(b)  $N = 14$ での、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  間の遷移モーメント  $V$  依存性。

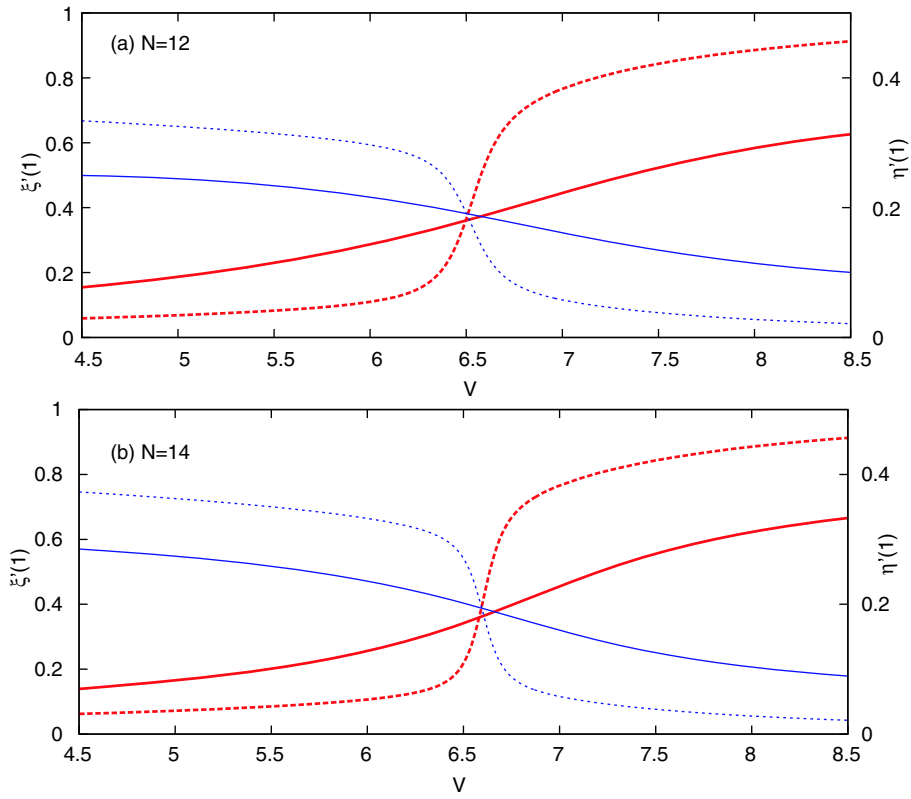


Fig. 3.25. 1次元系における、 $U = 10$ 、 $\kappa = 0.5$ での (a)  $N = 12$ 、(b)  $N = 14$ での、 $\xi'(1)$  および  $\eta'(1)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。点線は基底状態、実線は  $|\psi_1\rangle$  の相関関数を表す。

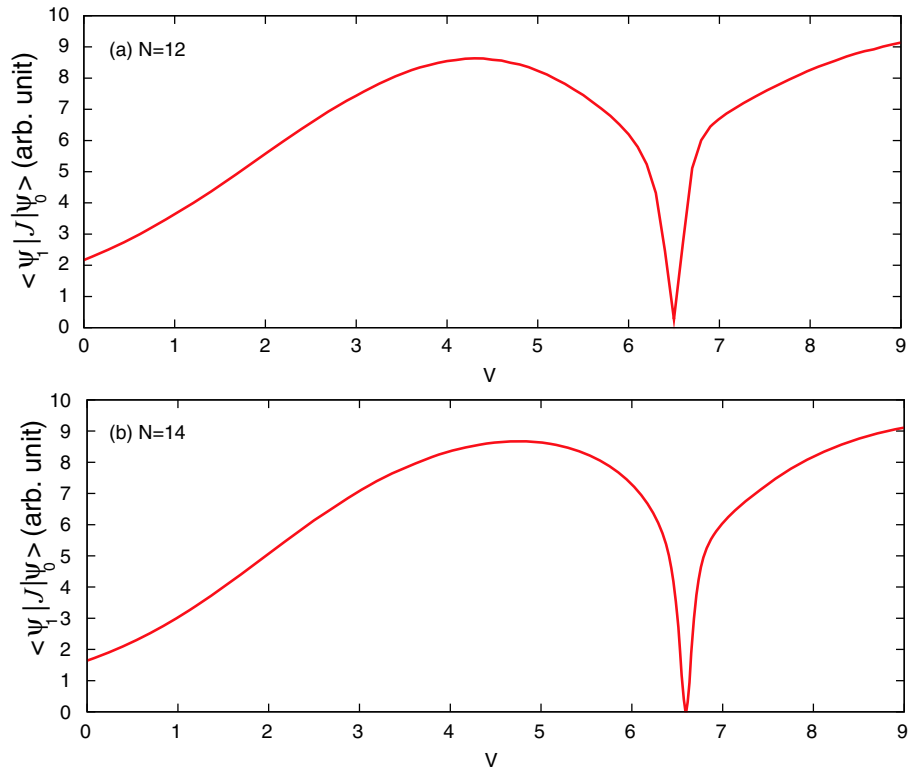


Fig. 3.26. 1次元系における、 $U = 10$ 、 $\kappa = 0.5$ での (a)  $N = 12$ 、(b)  $N = 14$ での、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  間の遷移モーメント  $V$  依存性。



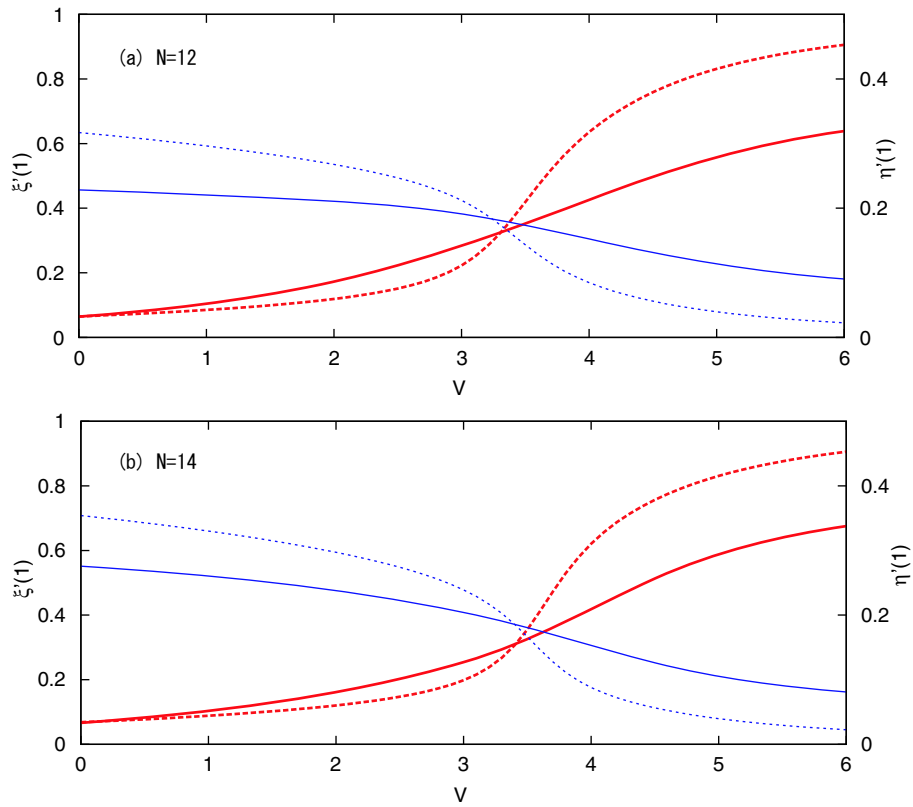


Fig. 3.27. 1次元系における、 $U = 5$ 、 $\kappa = 0.5$ での (a)  $N = 12$ 、(b)  $N = 14$ での、 $\xi'(1)$  および  $\eta'(1)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。点線は基底状態、実線は  $|\psi_1\rangle$  の相関関数を表す。

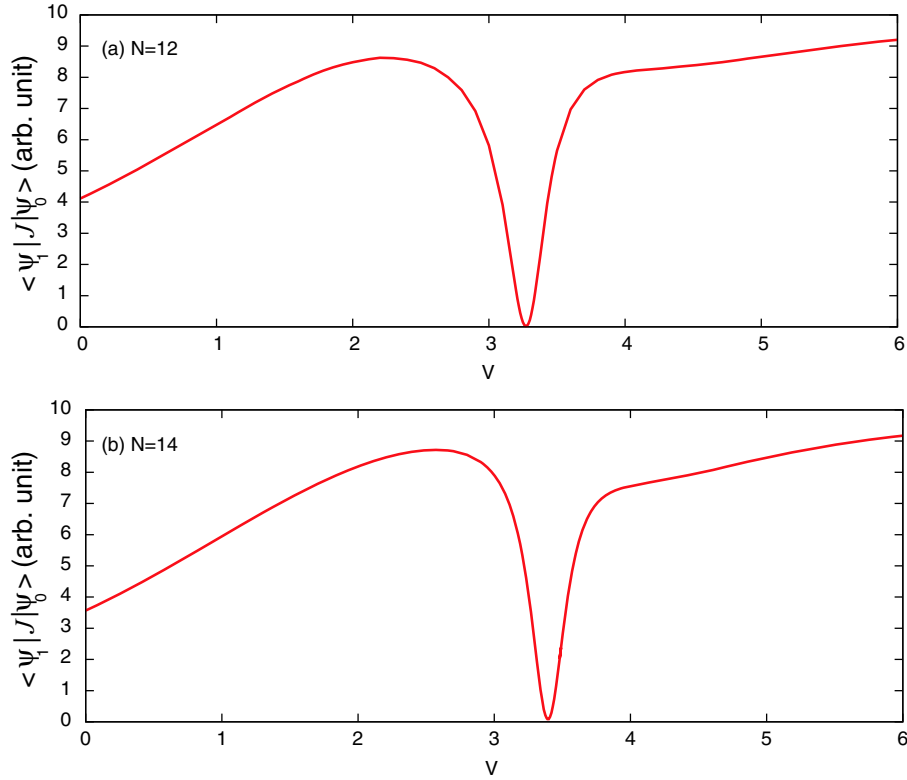


Fig. 3.28. 1次元系における、 $U = 5$ 、 $\kappa = 0.5$ での (a)  $N = 12$ 、(b)  $N = 14$ での、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  間の遷移モーメント  $V$  依存性。

Fig. 3.22- 3.28において主に、 $N = 12$ と $N = 14$ での、 $|\psi_1\rangle$ と基底状態の相関関数、これらの状態間の遷移モーメントの $V$ 依存性を比較した。 $U = 50$ において、 $N$ が増大するにつれて、基底状態の相境界での変化がより急激になっていることがわかる。このことは、相境界での変化が相転移であることを強く支持するものである。 $U = 10$ の基底状態に関しても $U = 50$ の場合ほどはっきりしないが、同様のことが言える。それに対して $U = 5$ における、基底状態の相境界での変化の $N$ 依存性ははるかに弱い。このことは、 $U = 5$ における、基底状態の相境界での変化は相転移ではないという、本論文の結論を支持するものである。

$|\psi_1\rangle$ の相境界での変化、およびそれに伴う遷移モーメントの変化の $N$ 依存性も極めて弱いと言える。このことは、 $|\psi_1\rangle$ の相境界での変化は相転移ではないという、本論文の結論を支持するものである。

### 3.5 2次元系

この節では、2次元系の結果について述べる。Fig. 3.29 に、基底状態の  $\xi'(1)$ 、 $\eta'(1)$ 、 $\xi'(2)$  および  $\eta'(2)$  の  $V$  依存性を示す。この図からわかるように、すべての場合において、基底状態の電荷相関関数およびスピン相関関数は非常に狭い  $V$  の範囲で急激に変化しており、それ以外の領域ではゆっくりと変化している。このことから、CDW-SDW 量子相転移が起きていることがわかる。 $U = 50, 10, 5$  においてそれぞれ  $V_c = 23.32, 4.72, 2.36$  である。

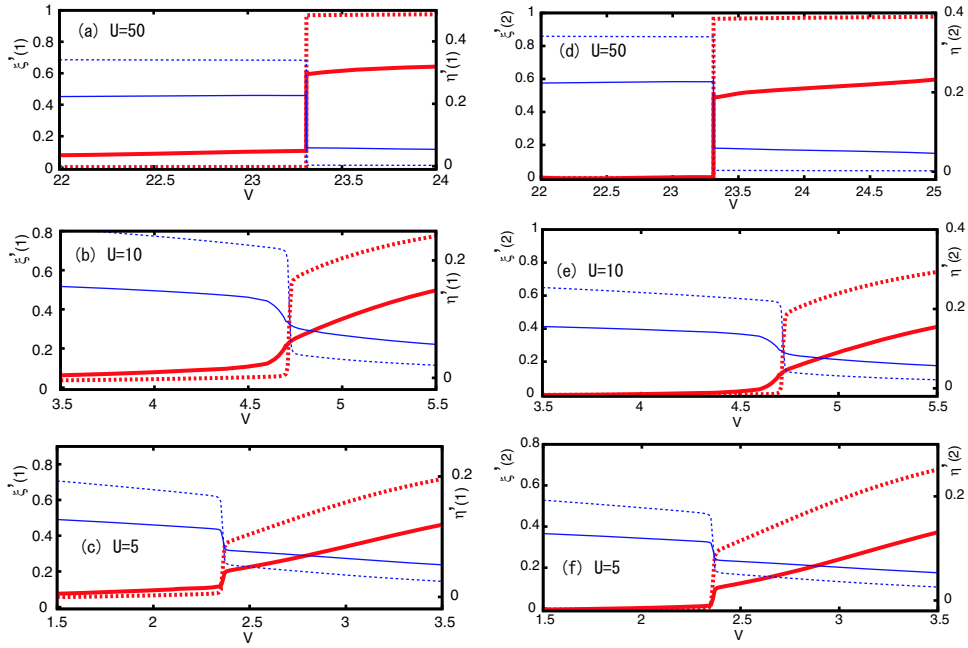


Fig. 3.29. 2次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、(c)  $U = 5$  での  $\xi'(1)$  および  $\eta'(1)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。1次元系における、(d)  $U = 50$ 、(e)  $U = 10$ 、(f)  $U = 5$  での  $\xi'(2)$  および  $\eta'(2)$  の  $V$  依存性を、それぞれ赤および青線で表す。点線は基底状態、実線は  $|\psi_1\rangle$  の相関関数を表す。

## 3.5.1 光吸収スペクトル

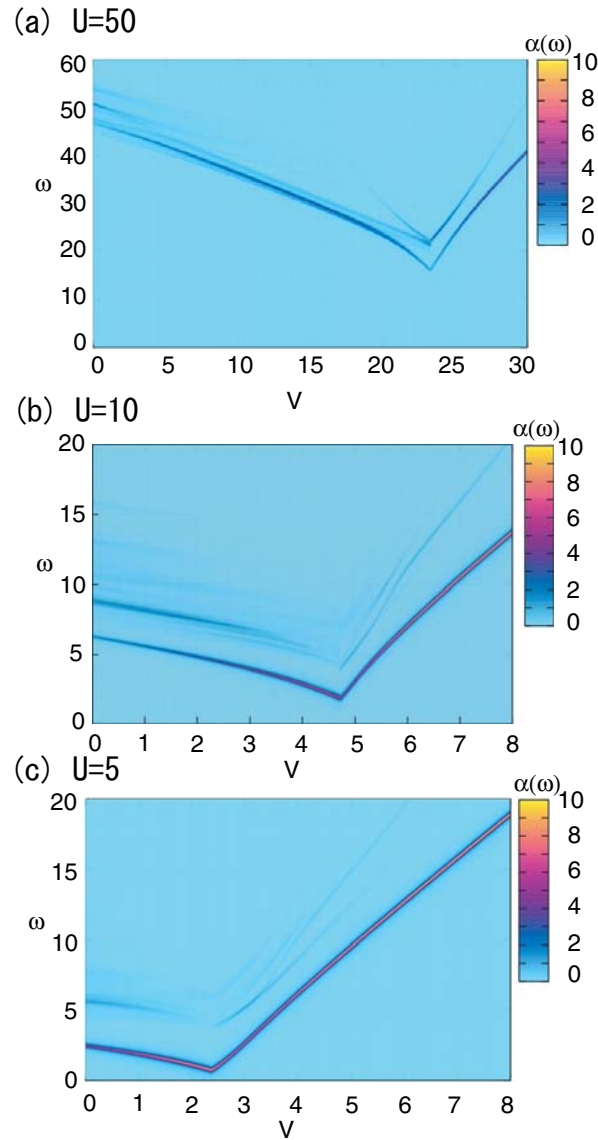


Fig. 3.30. 2次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、(c)  $U = 5$  での光吸収スペクトル  $V$  依存性。光吸収強度は色で表し、 $\epsilon = 0.1$  を用いている。

Fig. 3.30 に、光吸収スペクトル  $\alpha(\omega)$  の  $V$  依存性を示す。この図からわかるように、相境界から離れた SDW 基底領域では、最低エネルギーピークが最大であり、その高エネルギー側に幅広いバンドが見られる。 $V$  が大きくなるにつれて 遷移モーメントは最低エネルギーピークに集中し、このピークが支配的となる。このピークが単一のエネルギー固有状態  $|\psi_1\rangle$  への励起によるものであることが、数値計算によって確かめることができる。相境界から離れた CDW 基底領域では、最低エネルギーピークが支配的であり、このピークも単一のエネルギー固有状態  $|\psi_1\rangle$  への励起によるものである。

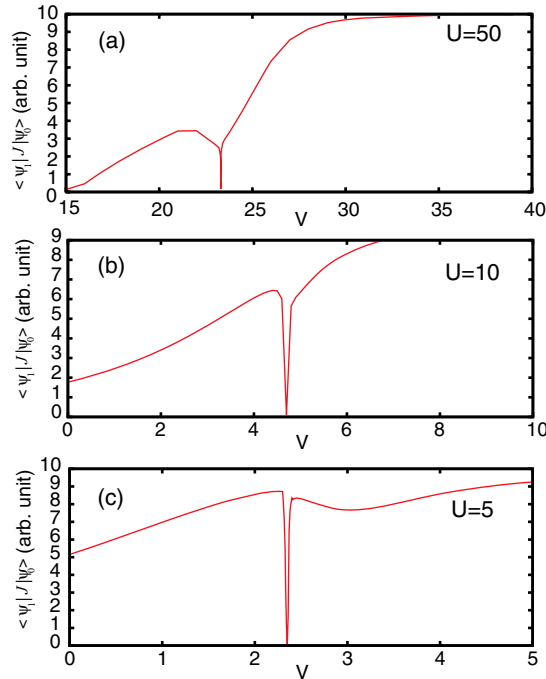


Fig. 3.31. 2次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、(c)  $U = 5$  での、基底状態と  $|\psi_1\rangle$  間の遷移モーメント  $V$  依存性。

Fig. 3.31 に基底状態と  $|\psi_1\rangle$  間の遷移モーメントの  $V$  依存性を示す。この図からわかるように、相境界付近では、 $V$  が  $V_c$  に近づくにつれて最低エネルギーピークが小さくなり、相境界  $V = V_c$  で消失する。最低エネルギーピークの著しい減少が見られる  $V$  の領域は、1次元系でのそれよりもはるかに狭い。そのため、Fig. 3.30 においては、この消失を認めることができない。

### 3.5.2 $|\psi_1\rangle$ の電子構造

この特徴的な  $\alpha(\omega)$  の  $V$  依存性を理解するために、ほとんどの  $V$  領域で、 $\alpha(\omega)$  を支配する  $|\psi_1\rangle$  の電子構造について考察する。強相関の場合の特徴がよりはっきりと見える  $U = 50$  での結果を主に議論するが、 $U \gtrsim 5$  において、定性的に同じ結果が得られる。Fig. 3.29 からわかるように、 $|\psi_1\rangle$  の電荷およびスピン相関関数も相境界において極めて急激に変化しており、1次元系とは対照的な振る舞いが見られる。

この次元性による違いを理解するために、Fig. 3.32 に、様々な  $V$  の値における、 $|\psi_1\rangle$  のスタッガード電荷相関関数  $\xi'(r)$ 、スタッガードスピン相関関数  $\eta'(r)$  を示す。この図からも、 $|\psi_1\rangle$  が相境界をまたいで極めて急激に変化していることがわかる。

Fig. 3.33 に、相境界から離れた SDW 基底領域における、 $|\psi_1\rangle$  の  $\xi'(r)$  および  $\eta'(r)$  を示す。スピン構造に関しては、いずれの  $V$  でも、すべての  $r$  において  $\eta'(r) > 0$  であり、かつ  $\eta'(r)$  はゆるやかな減少関数になっており、 $|\psi_1\rangle$  も基底状態と同様、短距離 SDW 秩序をもっていることがわかる。SDW 秩序の強度を表す  $\eta'(r)$  の大きさに関し

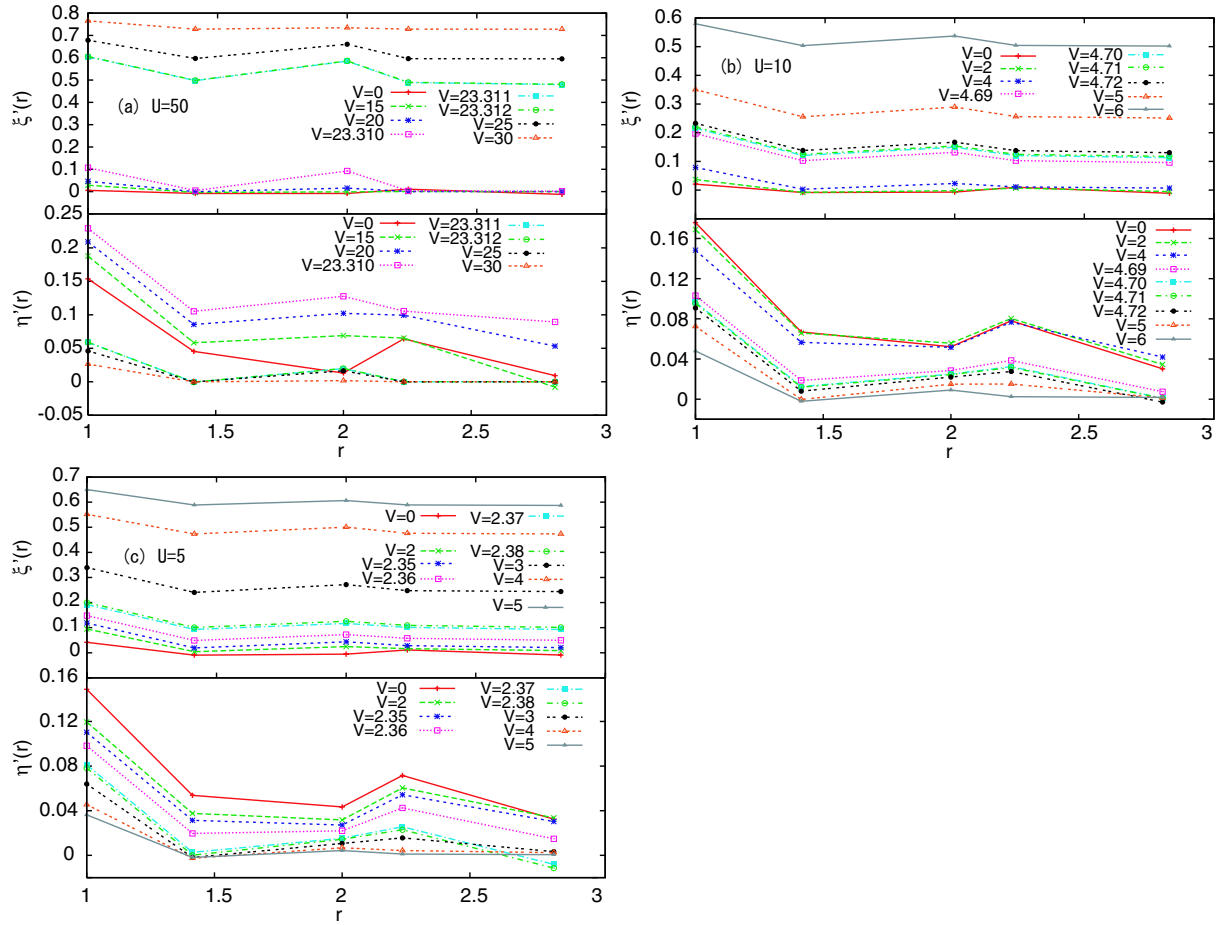


Fig. 3.32. 2次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、および(c)  $U = 5$ での様々な  $V$  の値における、 $|\psi_1\rangle$  のスタッガード電荷相関関数とスタッガードスピン相関関数。

では、 $V$  が大きくなるにしたがって、大きくなっていることがわかる。これは、後述するようにホロン・ダブロン対が強く束縛したためである。2次元系においては、ホロン、ダブロン、もしくは束縛したホロン・ダブロン対の並進運動はSDW秩序を破壊する。ホロン・ダブロン対が強く束縛すると、これらすべての並進運動が強く抑えられるのである。束縛した場合の  $\eta(r)$  の大きさは、基底状態のそれよりも約30%小さくなっている。電荷構造に関しては、 $V \lesssim 15$  においてはすべての  $r$  に対して  $\xi(r) < 0$  であること、かつ  $\sum_{n,m}^{n \neq m} \xi(r_{n,m}) \simeq -2$  であること、から Appendix A で示したように、一対のホロン・ダブロン対が生成されていることがわかる。さらに、 $V$  が小さい領域 ( $V \lesssim 5$ ) を除けば、 $|\xi(r)|$  は  $r$  に対してゆるやかな減少関数となっており、 $r \geq \sqrt{5}$  において  $|\xi(r)| \simeq 0$  となっている。これは、光生成されたホロン・ダブロン対が束縛されていることを示している。しかし、 $r > 1$  における  $|\xi(r)|$  は、同じ  $V$  での1次元系のそれと較べると、はるかに大きく、電荷束縛効果は2次元系のほうが弱いことがわかる。 $V = 15$  付近で、 $\xi(1) \simeq -1/(2N)$  かつ  $r > 1$  において  $\xi(r) \simeq 0$  となる。このことは、Appendix A で示したように、Fig. 3.34 (a) にその電子構造の模式図を示し

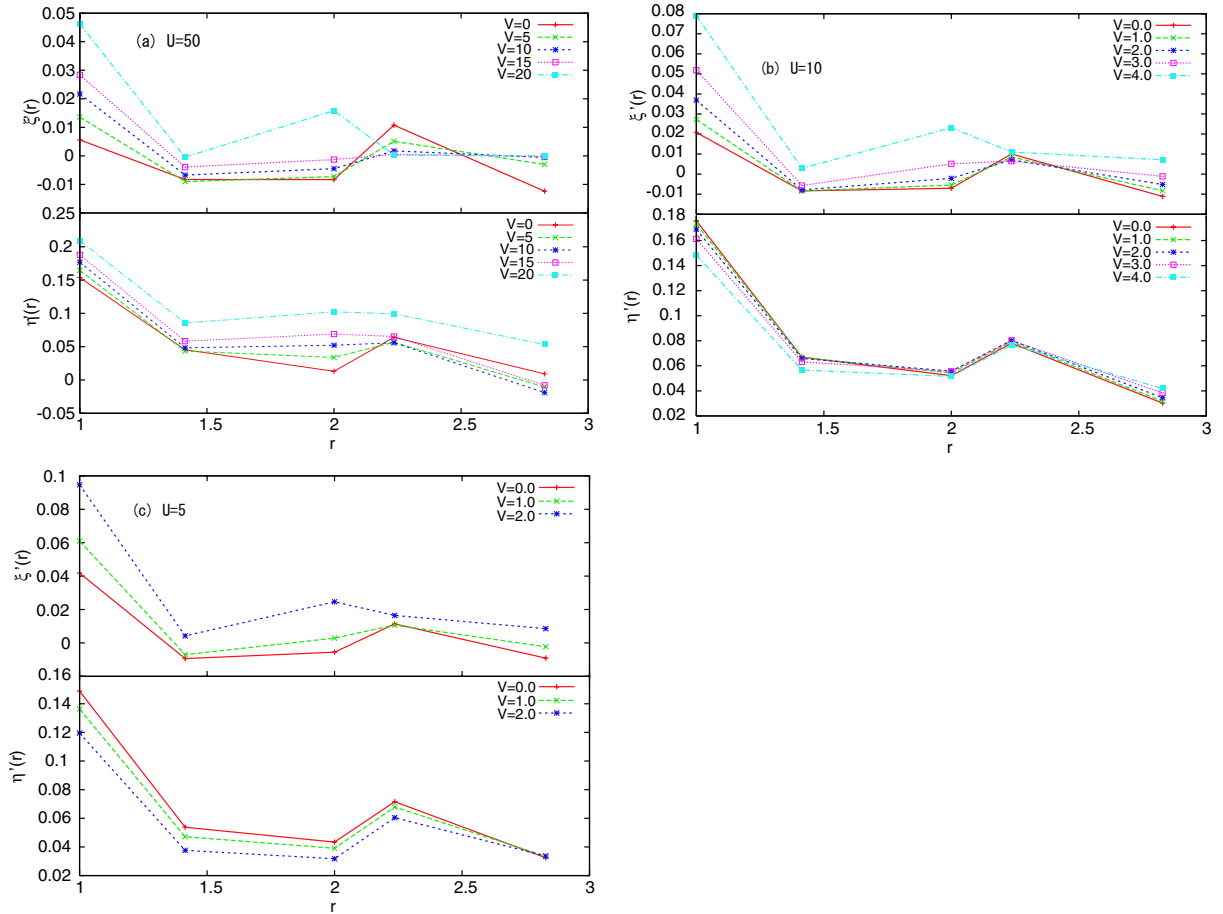


Fig. 3.33. 2次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、および(c)  $U = 5$ でのSDW基底領域での様々な  $V$  の値における、 $|\psi_1\rangle$  のスタッガード電荷相関関数とスタッガードスピンの相関関数。

た、SDW バックグラウンド中の最近接サイトにホロン・ダブロン対が生成された状態  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  が、 $|\psi_1\rangle$  において独占的な量子力学的重みを持つことを示している。

Fig. 3.33 および Fig. 3.35 からわかるように、SDW 基底状態領域で相境界に近づくとしたがつて、 $\xi'(1)$  および  $\xi'(2)$  が著しく大きくなっている。これは、後述するように、有限サイズ効果の結果であると考えられる。この重要ではない点を除けば、 $|\psi_1\rangle$  の電子構造に関して、相境界付近と相境界から離れた領域での違いはない。 $|\psi_1\rangle$  は相境界付近においても、1次元系においてみられたCDWドロプレット状態にはならないことがわかる。

次にCDW基底状態領域について述べる。Fig. 3.36にCDW基底状態領域での  $|\psi_1\rangle$  のスタッガード電荷相関関数とスタッガードスピンの相関関数を示す。まず、相境界から十分離れた領域 ( $U = 50$  のときは  $V \gtrsim 30$ ) を考える。この図からわかるように、 $\xi'(r)$  はほとんど  $V$  に依存せず、その大きさは基底状態のそれよりも約30%小さい。スピンに関しては、 $\eta(1) \simeq -1/(2N)(3/4)$  であり、かつ  $r > 1$  において、 $\eta(r) \simeq 0$  となっ

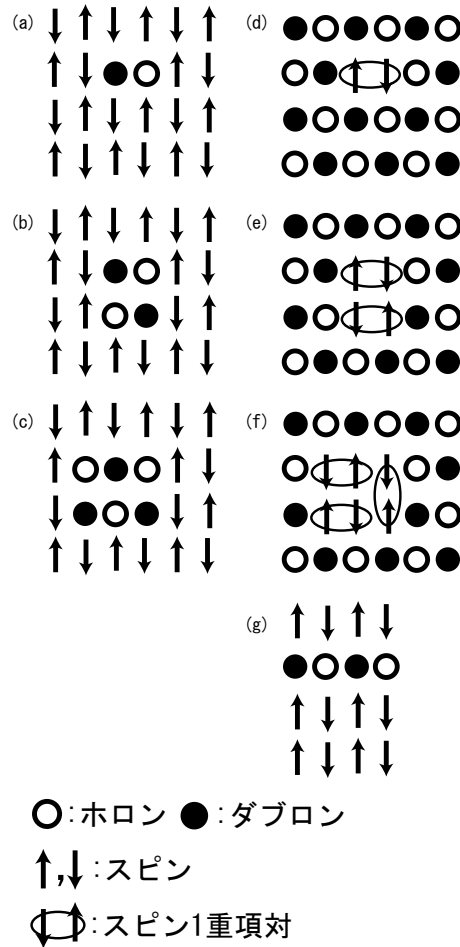


Fig. 3.34. 2次元SDW 基底状態領域における (a) ホロン・ダブロン対状態 (b) 2個のホロン・ダブロン対のクラスター状態 (c) 3個のホロン・ダブロン対のクラスター状態、およびCDW 基底状態領域における (d) スピン1重項対状態 (e) 2個のスピン1重項対のクラスター状態 (f) 3個のスピン1重項対のクラスター状態の概略図。

ている。このことは、Appendix A で示したように、Fig. 3.34 (d) にその電子構造の模式図を示した、CDW バックグラウンド中の最近接サイトにスピン1重項対が生成された状態  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  が、 $|\psi_1\rangle$  において独占的な量子力学的重みを持っていることを示している。このようなスピン対の並進運動は、CDW 秩序を破壊する。この場合は、スピン対は強く結合しているために、並進運動が強く抑制される。その結果、 $\xi'(r)$  は約30%減少するが、CDW 秩序は破壊されない。

つぎに相境界付近でのCDW 基底状態領域 ( $U = 50$  のときは  $V_c < V \lesssim 30$ ) について述べる。 $\xi'(r)$  は  $V$  が減少するとともに減少するが、 $V = V_c + 0^+$  においても、すべての  $r$  に対して  $\xi'(r) \gtrsim 0.5$  となっている。相境界付近でも、 $|\psi_1\rangle$  はCDW 秩序を持つ。 $\xi'(1)$  と  $\xi'(2)$  が他の  $r$  での値よりも顕著に大きくなっているが、これは、後述するように、有限サイズ効果の結果であると考えられる。スピン構造に関しては、 $V$  が



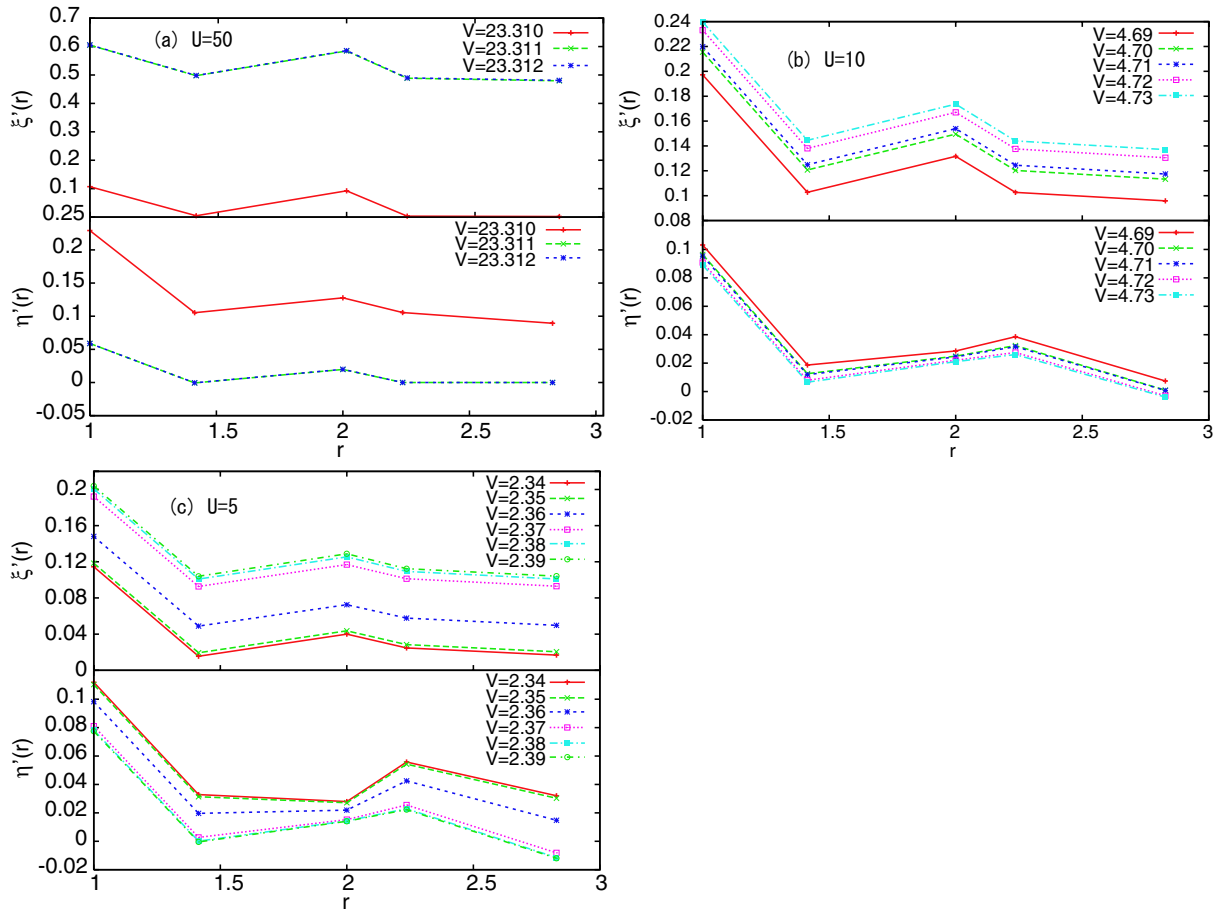


Fig. 3.35. 2次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、および (c)  $U = 5$  での相境界付近での様々な  $V$  の値における、 $|\psi_1\rangle$  のスタッガード電荷相関関数とスタッガードスピン相関関数。

$V_c$  に近づくにつれて、 $\eta'(1)$  と  $\eta'(2)$  が顕著に増加する。これも、後述するように、有限サイズ効果の結果であると考えられる。この重要ではない点を除けば、 $|\psi_1\rangle$  の電子構造に関して、相境界付近と相境界から離れた領域での違いはない。 $|\psi_1\rangle$  は相境界付近においても、1次元系においてみられたスピン1重項対ドロプレット状態にはならないことがわかる。

### 3.5.3 強相関モデルに基づく計算結果の解釈

これらの結果を理解するために、1次元の場合と同様に、クーロン相互作用が極めて強い場合  $U > V \gg t$  を考え、 $H_1$  を摂動とした、摂動論に基づいた考察を行なう。まずSDW基底領域を考える。1次元の場合と同じ議論から、基底状態はホロン・ダブロン対数がゼロの状態のみの重ね合わせにより極めて良い近似で記述できること、Fig. 3.34 (a) にその電子構造の模式図を示した  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  のみが、このような基底状態からの遷移

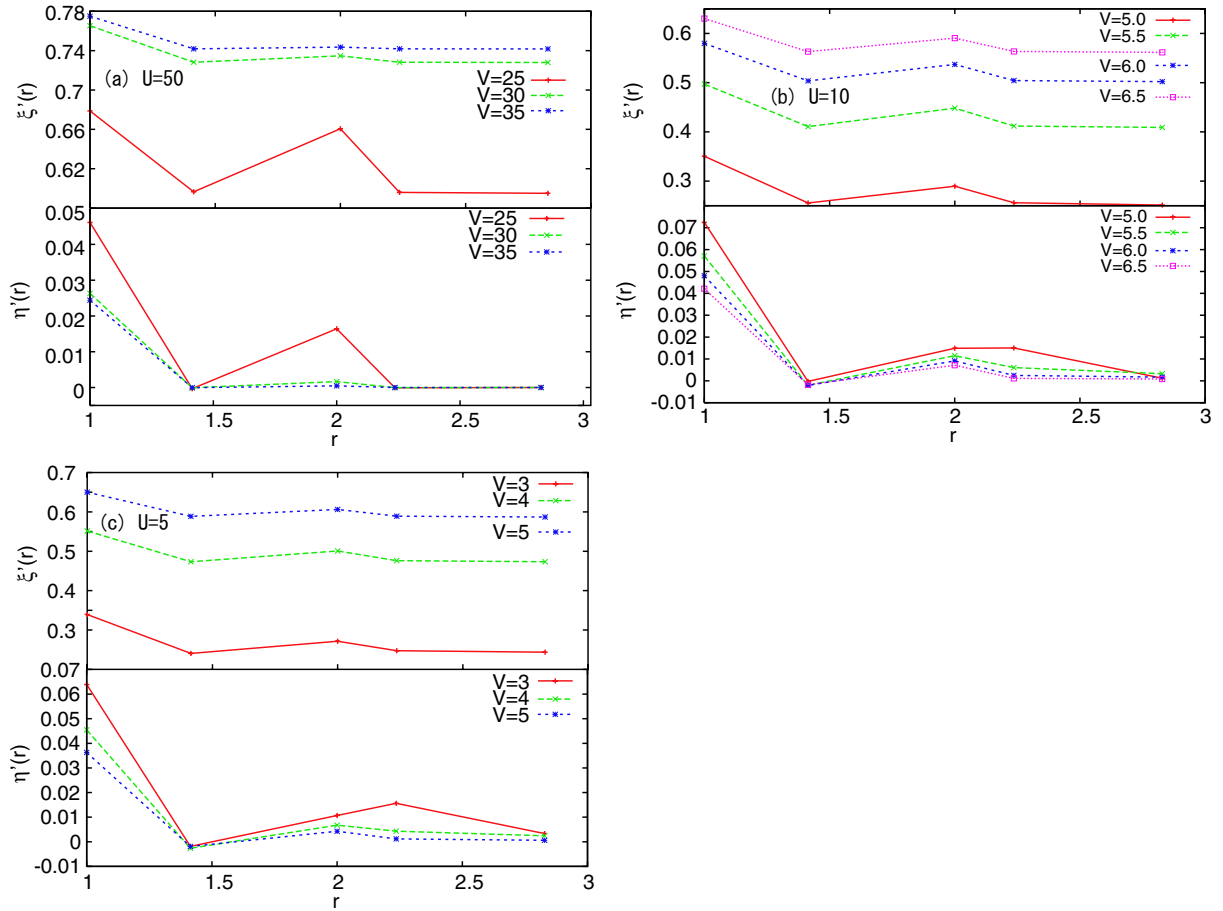


Fig. 3.36. 2次元系における、(a)  $U = 50$ 、(b)  $U = 10$ 、および(c)  $U = 5$ でのCDW基底領域での様々な  $V$  の値における、 $|\psi_1\rangle$  のスタッガード電荷相関関数とスタッガードスピンの相関関数。

モーメントがゼロでなくなることを、したがって、 $|\psi_1\rangle$  の第ゼロ次の近似は  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  によって与えられること、がわかる。 $|\phi_1^{(0)}\rangle$  は  $H_0$  の固有状態で、固有値  $E_1^{(0)} = U - V(1)$  である。

次に  $|\psi_1\rangle$  に対する、摂動項  $H_1$  の効果を考察する。1次元の場合と同じ議論から、以下の3種類の  $H_0$  の固有状態のみが、第ゼロ次の近似状態である  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  との  $H_1$  の非対角要素がゼロでなくなる：(i) ホロン・ダブロン対数がゼロの状態、(ii) 1対のホロン・ダブロン対を持ち、そのホロン・ダブロン対が距離  $\sqrt{2}$  もしくは2だけ離れている状態 (iii) 2対のホロン・ダブロン対を持つ状態。(i) の固有状態の固有値はすべて0、(ii) の固有状態の固有値は  $U - V(\sqrt{2})$  もしくは  $U - V(2)$ 、(iii) の固有状態は様々な固有値を持つが、あとで詳しく述べるように、そのなかで最も低い固有値は  $2U - 4V(1) + 2V(\sqrt{2})$  となる。

相境界から離れた領域では、(ii) の固有状態の固有値が  $E_1^{(0)}$  に最も近く、その最小差は  $V(1) - V(\sqrt{2}) = (1 - e^{-\kappa(\sqrt{2}-1)}/\sqrt{2})V$  となっている。 $V(1) - V(\sqrt{2}) \lesssim t$  が成

り立つ場合には、様々な距離の1対のホロン・ダブロン対を持つ状態が  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  に強く混成し、 $V(1) - V(\sqrt{2}) \gg t$  が成り立つ場合には、 $|\phi_1^{(0)}\rangle$  が  $|\psi_1\rangle$  における量子力学的重みをほとんど独占し、極めて強くホロン・ダブロン対は束縛される。この議論により Fig. 3.33 に示した結果をよく説明できる。 $U = 50$  の場合には、 $V \gtrsim 15$  においては、距離1の電荷配置が量子力学的重みを独占している。

相境界付近では、 $V$  が大きく、(ii) の状態の寄与は無視できる。そこで (iii) の状態について考察する。 $n$  対のホロン・ダブロン対を持つ状態のうちで、最も低いエネルギーを持つのがホロン・ダブロン対クラスター状態である。 $n$  対のホロン・ダブロン対からなるホロン・ダブロン対クラスター状態を  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  と表す。 $|\phi_2^{(0)}\rangle$  および  $|\phi_3^{(0)}\rangle$  の電子構造を、それぞれ Fig. 3.34 (b) および (c) に模式的に表す。クラスター状態  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  は  $H_0$  の固有状態であり、その固有値を  $E_n^{(0)}$  と表す。

簡単のため、以下無限系において  $E_n^{(0)}$  を求めてみる。相互作用が極めて強い場合  $U > V \gg t$  には、単位胞（この場合2サイト）あたりの SDW 状態と CDW 状態のエネルギー差  $\Delta$  は以下の式で与えられる。

$$\Delta = |U - 4\tilde{V}|, \quad (3.5.1)$$

ここで

$$\tilde{V} = V(1) - V(\sqrt{2}) - V(2) + 2V(\sqrt{5}) - V(2\sqrt{2}) + \dots \quad (3.5.2)$$

である。CDW-SDW 相境界は、 $U - V$  平面上において式  $\Delta = 0$  で表される線上にある。この  $\Delta$  を用いれば、クラスター状態のエネルギー固有値の差は以下ようになる：

$$E_1^{(0)} - E_0^{(0)} = \Delta + 4\tilde{V} - V(1), \quad (3.5.3)$$

$$E_2^{(0)} - E_1^{(0)} = \Delta + 4\tilde{V} - 3V(1) + 2V(\sqrt{2}), \quad (3.5.4)$$

$$E_3^{(0)} - E_2^{(0)} = \Delta + 4\tilde{V} - 3V(1) + 2V(\sqrt{2}) + 2V(2) - 2V(\sqrt{5}). \quad (3.5.5)$$

1次元の場合と異なり、異なるサイト間のクーロン相互作用エネルギーの系統的な打ち消しあい起きていないことがわかる。これは、クラスターの界面のエネルギーによるものであると解釈することができる。界面付近のホロンやダブロンは近接するサイトの一部が中性サイトとなっており、CDW 状態を安定化させる異なるサイト間クーロンエネルギーによる利得が十分に得られない。その結果、界面エネルギーが発生する。相境界  $\Delta = 0$  において、 $\kappa = 0, 0.5$ , および  $\infty$  において  $(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})/V_c = 0.030, 0.075$ , および  $1$ ,  $(E_3^{(0)} - E_2^{(0)})/V_c = 0.14, 0.20$ , および  $1$ , となる。1次元系においては、ストリングのドメインが十分大きければドメインの大きさが変化しても界面エネルギーは変化しない。これが、異なるサイト間クーロン相互作用エネルギーに系統的な打ち消しあいがみられ、 $n$  が十分大きい場合には  $E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)} \simeq 0$  となる原因である。これに対して2次元系においては、クラスターのドメインが成長するにつれて、界面付近に存在するホロンやダブロンの数が増えていく。その結果、 $E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)} \simeq 0$  とはならず、 $E_n^{(0)}$  は一貫して  $n$  に対して単調に増加する。その結果  $E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)}$  の値は  $\kappa$  に強く

依存し、比較的小さな値をとることがあるが、クーロン相互作用が強い場合には、比較的小さな  $n$  においても、 $E_n^{(0)} - E_1^{(0)}$  が  $t$  よりもはるかに大きくなる。

CDW 基底領域でも同じ議論が成り立つ。 $n$  対のスピンの重項対を持つ状態のうちで、最も低いエネルギーを持つのがスピンの重項対クラスター状態である。 $n$  対のスピンの重項対からなるスピンの重項対クラスター状態を  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  と表す。 $|\phi_2^{(0)}\rangle$  および  $|\phi_3^{(0)}\rangle$  の電子構造を、それぞれ Fig. 3.34 (e) および (f) に模式的に表す。クラスター状態  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  は  $H_0$  の固有状態であり、その固有値を  $E_n^{(0)}$  と表す。相境界付近では、スピンの重項対クラスター状態のエネルギーが著しく低下するが、クーロン相互作用が強い場合には、比較的小さな  $n$  においても、 $E_n^{(0)} - E_1^{(0)}$  が  $t$  よりもはるかに大きくなる。

その結果、相境界においても、幅広い  $n$  を持つ  $|\phi_n^{(0)}\rangle$  が重なり合う CDW もしくはスピンの重項対ドロプレット状態が実現されないことになる。ドロプレット状態のような、 $H_1$  を通じて強く結合し CDW 状態と SOW 状態をつなぐ状態が存在しないために、 $|\psi_1\rangle$  は相境界で不連続的に変化するのである。

### 3.5.4 有限サイズ効果

最後に有限サイズ効果について述べる。 $V$  が  $V_c$  に近づくとつれて、SDW (CDW) 基底領域において、 $|\xi(1)|$  と  $|\xi(2)|$  ( $|\eta(1)|$  と  $|\eta(2)|$ ) が顕著に増加する。このことは、例えば SDW 基底領域においては、Fig. 3.34 (g) に表された状態の量子力学的重みが増加していることを示す。しかし、これは有限サイズ効果である。本研究で用いた  $4 \times 4$  正方格子において、距離 3 だけ離れたホロン・ダブロン対は、周期境界条件のため、境界をまたぎ最近接サイトに位置することになり、この有限サイズ効果に由来する相互作用によって、Fig. 3.34 (g) に表された状態は著しく安定化されるのである。

## 3.6 結論

1次元および2次元 PPP モデルを用いて、光吸収スペクトルを支配する重要な光励起状態の波動関数を数値的に厳密に計算し、これらの状態が CDW-SDW 相境界をまたいでどのように変化するかを、理論的に研究した。1次元系においては、相境界付近の SDW (CDW) 基底領域において、CDW (スピンの重項対) ドロプレット状態が光吸収スペクトルを支配する。これらの光励起状態は、相境界をまたいで、以下のようにクロスオーバー的に変化する。CDW 基底領域において、 $V$  が小さくなるにつれて、スピンの重項対ドロプレット状態の中性部分の割合が増してゆき、さらに中性部分の電子構造はスピンの重項対的なものから SDW 的なものへ連続的に変化してゆく。相境界を超えると、中性部分の割合が CDW 部分の割合よりも大きくなり、スピンの重項対ドロプレット状態は連続的に CDW ドロプレット状態に変化していく。2次元系においては、相境界付近でも、CDW もしくはスピンの重項対ドロプレット状態は、クラスターの界面エネルギーのため、電荷揺らぎとして重要な役割を果たさず、SDW (CDW) 中に束縛されたホロン・ダブロン (スピンの重項) 対がひとつできた状態が、光吸収スペクトルを支配する。その結果、この光吸収スペクトルを支配する光励起状

態は相境界で不連続に変化する。

## 付録 A $|\phi_1^{(0)}\rangle$ の電荷相関関数、スピン相関関数

中性のバックグラウンドに一对のホロン・ダブロン対が生成された状態においては、すべてのサイト対のうちひとつだけがホロン・ダブロン対となり、そのサイト対における電荷相関関数  $\xi(r) = -1$  となり、他のサイト対においては  $\xi(r) = 0$  となる。このことから、すべての  $r$  に対して  $\xi(r) < 0$  であり、かつ以下の式が成立することがわかる

$$\sum_{\substack{n \neq m \\ n, m}} \xi(r_{n,m}) = -2. \quad (\text{A.0.1})$$

この式においては、ひとつのサイト対に関して二重に足しあわされていることに注意。さらに、このホロン・ダブロン対が最近接サイトに束縛されている場合には、当然  $r > 1$  において  $\xi(r) = 0$  である。1(2)次元系においては、最近接サイト対は  $N(2N)$  対あることから Eq. (A.0.1) を満たすためには、 $\xi(1)$  は以下の式を満たさなければならない。1次元系においてホロン・ダブロン対が最近接サイトに束縛されている場合

$$\xi(1) = -\frac{1}{N}, \quad (\text{A.0.2})$$

2次元系においてホロン・ダブロン対が最近接サイトに束縛されている場合

$$\xi(1) = -\frac{1}{2N}, \quad (\text{A.0.3})$$

となる。CDW バックグラウンドに一对の1重項スピン対が生成された状態においては、すべてのサイト対のうちひとつだけが1重項スピン対となり、そのサイト対におけるスピン相関関数は  $\eta(r) = -3/4$  となり、他のサイト対においては  $\xi(r) = 0$  となる。このことから以下の式が成立することがわかる

$$\sum_{\substack{n \neq m \\ n, m}} \eta(r_{n,m}) = -\frac{3}{2}. \quad (\text{A.0.4})$$

さらに、この1重項スピン対が最近接サイトに束縛されている場合には、当然  $r > 1$  において  $\eta(r) = 0$  である。1(2)次元系においては、最近接サイト対は  $N(2N)$  対あることから Eq. (A.0.4) を満たすためには、 $\eta(1)$  は以下の式を満たさなければならない。1次元系において1重項スピン対が最近接サイトに束縛されている場合

$$\eta(1) = -\frac{1}{N} \frac{3}{4}, \quad (\text{A.0.5})$$

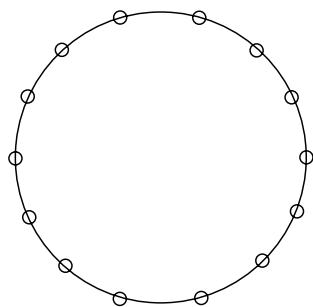
2次元系において1重項スピン対が最近接サイトに束縛されている場合

$$\xi(1) = -\frac{1}{2N} \frac{3}{4}, \quad (\text{A.0.6})$$

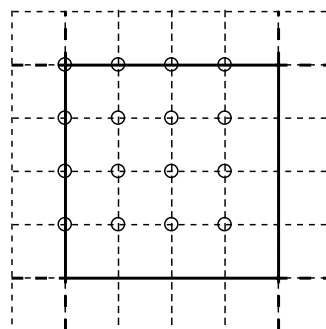
となる。

## 付録B 周期的境界条件について

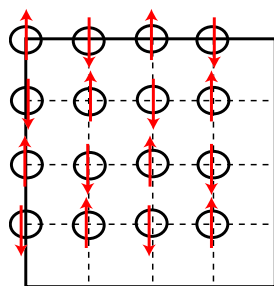
周期的境界条件を満たす1次元14サイト、2次元16サイトにおけるサイトの形状を以下に示す。



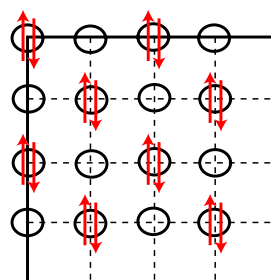
14 site



16 site



SDW



CDW



## 付録C 吸収係数の定義式

自由電荷の存在しない媒質における Maxwell の方程式は以下の式になる。(MKSA 有理化単位)

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad (\text{C.0.1a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (\text{C.0.1b})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (\text{C.0.1c})$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \left( \mathbf{J} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right). \quad (\text{C.0.1d})$$

$\mathbf{E}$  は電場、 $\mathbf{B}$  は磁束密度、 $\mathbf{J}$  は電流密度、 $\mu_0$  は真空中の透磁率、 $\varepsilon_0$  は真空中の誘電率である。 $z$  方向に進行し、角周波数  $\omega$  の電場を考え、複素数による表示を用いる。

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(z, t) = \mathbf{E}_0 \exp[i(Kz - \omega t)], \quad (\text{C.0.2})$$

ここで  $\mathbf{E}_0$  は定ベクトル、 $K$  は未知数であり、これを求めることを目的とする。

外場が弱い時、この電場によって誘起される媒質の分極  $\mathbf{P}$  は電場と以下の関係を満たす。

$$\mathbf{P}(\omega) = \varepsilon_0 \chi(\omega) \mathbf{E}(\omega) \quad (\text{C.0.3})$$

ここで  $\mathbf{P}(t) = \mathbf{P}(\omega) \exp(i\omega t)$ 、 $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}(\omega) \exp(i\omega t)$  であり、 $\chi(\omega)$  は光学複素感受率である。 $\mathbf{J}$  は分極  $\mathbf{P}$  の時間微分で以下のように表すことが出来る。

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = \varepsilon_0 \chi \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (\text{C.0.4})$$

Eq. (C.0.4) を、Eq. (C.0.1d) に代入すると、

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{B} &= \mu_0 \left( \varepsilon_0 \chi \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \\ &= \mu_0 \varepsilon_0 (1 + \chi) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (\text{C.0.5})$$

が得られ、両辺の時間微分を取ると、

$$\nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mu_0 \varepsilon_0 (1 + \chi) \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad (\text{C.0.6})$$

となり、Eq. (C.0.1c) を利用すると、

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \mu_0 \varepsilon_0 (1 + \chi) \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad (\text{C.0.7})$$

が得られる。Eq. (C.0.2) を (C.0.6) に代入し、

$$\begin{aligned} -K^2 \mathbf{E} &= -\mu_0 \varepsilon_0 (1 + \chi) \omega^2 \mathbf{E} \\ &= -\frac{1}{c^2} (1 + \chi) \omega^2 \mathbf{E}, \\ c &\equiv \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}}, \end{aligned} \quad (\text{C.0.8})$$

が得られる。Eq. (C.0.8) において、 $\mathbf{E} \neq 0$  より、 $K$  が満たすべき条件式は、

$$K^2 = \frac{\omega^2}{c^2} (1 + \chi), \quad (\text{C.0.9})$$

となる。ここで  $\chi \ll 1$  と仮定し、Taylor 展開で1次まで取ると  $K$  は近似的に、

$$K \simeq \frac{\omega}{c} \left(1 + \frac{\chi}{2}\right), \quad (\text{C.0.10})$$

となる。ここで  $\chi$  を実部と虚部に分けて表すと、

$$\chi = \chi' + i\chi'', \quad (\text{C.0.11})$$

となり、Eq. (C.0.2) と Eq. (C.0.10) から、

$$\begin{aligned} K &\simeq k \left(1 + \frac{1}{2}(\chi' + i\chi'')\right), \\ E(z, t) &= E_0 \exp\left[i\left(k\left(1 + \frac{1}{2}(\chi' + i\chi'')z - \omega t\right)\right)\right] \\ &= E_0 \exp\left[-\frac{\alpha}{2}z\right] \exp\left[ik'\left(z - \frac{\omega}{k'}t\right)\right], \end{aligned} \quad (\text{C.0.12})$$

が得られる。ここで、 $\alpha \equiv k\chi''$ ,  $k' \equiv k\left(1 + \frac{\chi'}{2}\right)$  とした。電場強度  $I(z) \propto |E(z, t)|^2$  は、次式で与えられる。

$$\begin{aligned} I(z) &\propto E \cdot E^* \\ &= |E_0|^2 \exp(-\alpha z), \end{aligned} \quad (\text{C.0.13})$$

Eq. (C.0.13) で与えられる  $\alpha$  が吸収係数で、これは1次の  $\chi$  の虚数部になっている。この  $\alpha$  を計算することで、吸収強度が得られる。

## 付録D 線型応答理論

線型応答理論  $\hat{O}_H$  の一般的な定義式は次式で与えられる。

$$\delta\langle\hat{O}_H(t)\rangle = i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t dt' \langle\psi_0 | [\hat{\mathcal{H}}_H^{\text{ex}}(t'), \hat{O}_H(t)] | \psi_0\rangle. \quad (\text{D.0.1})$$

$\hat{O}$  は任意の演算子、 $|\psi_0\rangle$  は  $\hat{\mathcal{H}}_e$  の基底状態の状態ベクトルである。 $\hat{\mathcal{H}}_H^{\text{ex}}$  に electron-photon interaction を用いるので、

$$\hat{\mathcal{H}}_H^{\text{ex}} = -A(t) \cdot J, \quad (\text{D.0.2a})$$

$$\hat{O}_H(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}_e t/\hbar} \hat{O} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_e t/\hbar}, \quad (\text{D.0.2b})$$

とする。簡単のため電場の方向を固定し、 $\hat{J}$  を  $\hat{J}$  の電場の方向成分とする。 $\delta\langle\hat{O}\rangle$  は  $\hat{\mathcal{H}}_H^{\text{ex}}$  に関する摂動の1次まで取り入れた場合と、0次の場合での  $\delta\langle\hat{O}\rangle$  の期待値の差である。また  $\hbar = 1$  の単位系を用いる。すると、次式が得られる。

$$\begin{aligned} \delta\langle J(t)\rangle &= i \int_{t_0}^t dt' (-A(t')) e^{iE_0(t'-t)} \langle\psi_0 | J e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t'-t)} J | \psi_0\rangle \\ &\quad - i \int_{t_0}^t dt' (-A(t')) e^{iE_0(t-t')} \langle\psi_0 | J e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t-t')} J | \psi_0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{D.0.3})$$

ここで単色光を考え、 $A(t) = \tilde{A}(\omega) e^{i\omega t}$  とし、右辺を各項に分けて解く。右辺第一項を Aterm とし、第二項を Bterm とすると、

$$\begin{aligned} \text{Aterm} &= -i \int_{t_0}^t dt' \tilde{A}(\omega) e^{i\omega t'} e^{iE_0(t'-t)} \langle\psi_0 | J e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t'-t)} J | \psi_0\rangle \\ &= -i \int_{t_0}^t dt' \tilde{A}(\omega) e^{i\omega(t'-t)} e^{i\omega t} e^{iE_0(t'-t)} \langle\psi_0 | J e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t'-t)} J | \psi_0\rangle \\ &= -i \int_{-\infty}^0 d\tau \tilde{A}(\omega) e^{i\omega\tau} e^{i\omega t} e^{iE_0\tau} \langle\psi_0 | J e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t'-t)} J | \psi_0\rangle \\ &= -i \int_{-\infty}^0 d\tau \tilde{A}(\omega) e^{i\omega t} \langle\psi_0 | J e^{i(\omega - i\gamma + E_0 - \hat{\mathcal{H}})\tau} J | \psi_0\rangle \\ &= -\tilde{A}(\omega) e^{i\omega t} \langle\psi_0 | J \frac{1}{\omega - i\gamma + E_0 - \hat{\mathcal{H}}} J | \psi_0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{D.0.4})$$

となる。ここで、 $t' - t = \tau$  とし、さらに収束因子として、 $\gamma$  という正の極めて小さい値を導入している。同様に計算すると Bterm は、

$$\text{Bterm} = -\tilde{A}(\omega)e^{i\omega t}\langle\psi_0|J\frac{1}{\omega+i\gamma+E_0-\hat{\mathcal{H}}}J|\psi_0\rangle, \quad (\text{D.0.5})$$

となる。Eq. (C.0.4) より

$$\mathbf{J} = -\varepsilon_0\chi\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2} \quad (\text{D.0.6})$$

となり、この式と  $\chi$  の虚数部が吸収係数に比例することより、Eq. (D.0.4),(D.0.5) より

$$I(\omega) = -\text{Im}\left[\langle\psi_0|J\frac{1}{\omega+i\gamma+E_0-\hat{\mathcal{H}}}J|\psi_0\rangle\right] \quad (\text{D.0.7})$$

である。ここで  $\omega > 0$  とし、その場合 Bterm は吸収に寄与しないため、Aterm のみを残し、重要でない比例係数についてはこれを省いた。これを求めれば吸収強度が求められる。

## 付録E Lanczos法による吸収強度の計算方法

Lanczos法の基本的なアイデアは特定の基底を作ることによりハミルトニアンを tridiagonal 表現にすることである。まず最初に、ヒルベルト空間における任意のベクトル  $|\phi_0\rangle$  を選ぶ、次に最初のベクトルにハミルトニアンを作用させて新しいベクトルを作る。

$$|\phi_1\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\phi_0\rangle - \frac{\langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_0\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}|\phi_0\rangle, \quad (\text{E.0.1})$$

ここで  $\langle\phi_0|\phi_1\rangle$  は

$$\begin{aligned} \langle\phi_0|\phi_1\rangle &= \langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_0\rangle - \frac{\langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_0\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}\langle\phi_0|\phi_0\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{E.0.2})$$

を満足する。ここで複素共役をとれば同様に  $\langle\phi_1|\phi_0\rangle = 0$  であることも確かめられる。そして上記のベクトルを使って新たにベクトルを作る。

$$|\phi_2\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle}{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}|\phi_0\rangle, \quad (\text{E.0.3})$$

ここでも

$$\begin{aligned} \langle\phi_0|\phi_2\rangle &= \langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle}{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}\langle\phi_0|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}\langle\phi_0|\phi_0\rangle \\ &= \langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle - \langle\phi_1|\phi_1\rangle \\ &= \langle\phi_1|\phi_1\rangle + \frac{\langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_0\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}\langle\phi_0|\phi_1\rangle - \langle\phi_1|\phi_1\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{E.0.4})$$

$$\begin{aligned} \langle\phi_1|\phi_2\rangle &= \langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle}{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}\langle\phi_1|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}\langle\phi_1|\phi_0\rangle \\ &= \langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle - \langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{E.0.5})$$

が確かめられる。さらに以下のように、循環的に基底ベクトルを定義する。

$$\begin{aligned} |\phi_{n+1}\rangle &= \hat{\mathcal{H}}|\phi_n\rangle - a_n|\phi_n\rangle - b_n^2|\phi_{n-1}\rangle, \\ a_n &= \frac{\langle\phi_n|\hat{\mathcal{H}}|\phi_n\rangle}{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}, \\ b_n^2 &= \frac{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}{\langle\phi_{n-1}|\phi_{n-1}\rangle}, \end{aligned} \quad (\text{E.0.6})$$

ここで  $n = 0, 1, 2, 3 \dots$  の整数であり、係数  $a_n, b_n^2$  は上記で与えられる。これらは  $\hat{\mathcal{H}}$  のエルミート性などから実数である。補足として  $b_0 = 0, |\phi_{-1}\rangle = 0$  である。この操作を繰り返し、 $n = N + 1$  において、初めて  $|\phi_n\rangle = 0$  となったとする。ここで、 $|\phi_n\rangle, n \leq N$  を規格化した

$$|\tilde{\phi}_n\rangle = \frac{|\phi_n\rangle}{\sqrt{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}}, \quad (\text{E.0.7})$$

を定義する。ここで  $N_n = \langle\phi_n|\phi_n\rangle$  とする。

$n, m \leq N$  において

$$\langle\tilde{\phi}_n|\tilde{\phi}_m\rangle = \delta_{n,m}, \quad (\text{E.0.8})$$

$$\mathbf{H}_{n,m} = \langle\tilde{\phi}_n|\hat{\mathcal{H}}|\tilde{\phi}_m\rangle = 0 \quad |n - m| \geq 2 \text{ の場合}, \quad (\text{E.0.9})$$

が、数学的帰納法を用いると証明出来る。Eq. (E.0.8),(E.0.9)を用いると、Eq. (E.0.7)を基底としたときのハミルトニアン行列は以下のようなになる。

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \cdots \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & \cdots \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & \cdots \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{E.0.10})$$

このような tridiagonal の形にすることができれば、基本的な Fortran の subroutine のライブラリーによって対角化することができる。

## 付録F Dynamical properties

Lanczos 法の特徴は与えられたハミルトニアン  $\hat{H}$  の dynamical property を計算することができるということである。近年 Lanczos 法は dynamical responses などの計算において非常に頼もしいものとして認識されている。以下に中心的な Formalism を述べる。我々が注目しているのは、以下のような方程式で与えられる吸収強度の問題である。

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ \langle \psi_0 | \hat{O}^\dagger \frac{1}{\omega + E_0 + i\epsilon - \hat{H}} \hat{O} | \psi_0 \rangle \right]. \quad (\text{F.0.1})$$

$\epsilon$  は極小さな正の数であり、複素平面においてグリーン関数の pole のシフトを計算するために導入された、人工的な幅である。演算子  $\hat{O} = \hat{J}$  とすれば  $I(\omega)$  は吸収強度を表す。そこで Eq. (F.0.1) を完全形  $\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1$  で展開し、以下の

$$\frac{1}{x + i\epsilon} = P \left[ \frac{1}{x} \right] - i\pi\delta(x), \quad (\text{F.0.2})$$

で表される主値積分を用いると Eq. (F.0.3) のように変形することができる。

$$I(\omega) = \sum_n |\langle \psi_n | \hat{O} | \psi_0 \rangle|^2 \delta(\omega - (E_n - E_0)), \quad (\text{F.0.3})$$

$E_n$  は  $\hat{H}$  のエネルギー固有値で、 $|\psi_n\rangle$  は固有値  $E_n$  の固有関数である。

方程式 Eq. (F.0.1) を計算するために Lanczos 法を用いる。Lanczos 法は初期ベクトルを任意に選んでいたが、この場合は以下のように初期ベクトルを選ぶ。

$$|\tilde{\phi}_0\rangle = \frac{\hat{O}|\psi_0\rangle}{\sqrt{\langle \psi_0 | \hat{O}^\dagger \hat{O} | \psi_0 \rangle}}, \quad (\text{F.0.4})$$

次に行列  $(z - \mathbf{H})$  を考える。行列は  $(z - \mathbf{H})(z - \mathbf{H})^{-1} = \mathbf{I}_0$  の恒等式を満たす。ここで  $z = \omega + E_0 + i\epsilon$  である。 $\mathbf{H}$  は Eq. (F.0.4) によって定義されている初期ベクトルを用いて Eq. (E.0.6) で定義される  $|\tilde{\phi}_n\rangle$  を基底とする  $\mathbf{H}$  の行列表示である。

$$\sum_n (z - \mathbf{H})_{mn} (z - \mathbf{H})_{np}^{-1} = \delta_{mp}, \quad (\text{F.0.5})$$

ここである特定の場合  $p = 0$  を考える。そうすれば

$$\sum_n (z - \mathbf{H})_{mn} x_n = \delta_{m0}, \quad (\text{F.0.6})$$

が得られる。ここで  $x_n = (z - \mathbf{H})_{n0}^{-1}$  であり、この式は  $x_n$  に関する方程式になっており、とりわけ  $n = 0$  の場合を書き出すと以下の式に対応する。

$$x_0 = \langle \tilde{\phi}_0 | \frac{1}{z - \mathbf{H}} | \tilde{\phi}_0 \rangle, \quad (\text{F.0.7})$$

ここで、この方程式を解くことを考える。解法にクラメールの公式を使うと解は以下のようなになる。

$$x_0 = \frac{\det B_0}{\det(z - \mathbf{H})}, \quad (\text{F.0.8})$$

ここで

$$z - \mathbf{H} = \begin{pmatrix} z - a_0 & -b_1 & 0 & 0 & \cdots \\ -b_1 & z - a_1 & -b_2 & 0 & \cdots \\ 0 & -b_2 & z - a_2 & -b_3 & \cdots \\ 0 & 0 & -b_3 & z - a_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\text{F.0.9})$$

$$B_0 = \begin{pmatrix} 1 & -b_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & z - a_1 & -b_2 & 0 & \cdots \\ 0 & -b_2 & z - a_2 & -b_3 & \cdots \\ 0 & 0 & -b_3 & z - a_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\text{F.0.10})$$

のようになり、係数  $a_n, b_n$  が Lanczos 法で導入したものである。

次に以下のような行列を定義する

$$D_n = \begin{pmatrix} z - a_n & -b_{n+1} & 0 & 0 & \cdots \\ -b_{n+1} & z - a_{n+1} & -b_{n+2} & 0 & \cdots \\ 0 & -b_{n+2} & z - a_{n+2} & -b_{n+3} & \cdots \\ 0 & 0 & -b_{n+3} & z - a_{n+3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\text{F.0.11})$$

ここで  $D_n$  を用いると  $z - \mathbf{H} = D_0$  である。

次に  $D_n$  の 1 列目を余因子展開を行うことにより



$$\begin{aligned}
\det D_n &= \det \begin{pmatrix} z - a_n & -b_{n+1} & 0 & 0 & \cdots \\ -b_{n+1} & z - a_{n+1} & -b_{n+2} & 0 & \cdots \\ 0 & -b_{n+2} & z - a_{n+2} & -b_{n+3} & \cdots \\ 0 & 0 & -b_{n+3} & z - a_{n+3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\
&= (z - a_n) \begin{pmatrix} z - a_{n+1} & -b_{n+2} & 0 & \cdots \\ -b_{n+2} & z - a_{n+2} & -b_{n+3} & \cdots \\ 0 & -b_{n+3} & z - a_{n+3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\
&\quad - b_{n+1}^2 \det \begin{pmatrix} z - a_{n+2} & -b_{n+3} & \cdots \\ -b_{n+3} & z - a_{n+3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\
&= (z - a_n) \det D_{n+1} - b_{n+1}^2 \det D_{n+2}, \tag{F.0.12}
\end{aligned}$$

とする。この関係式 Eq. (F.0.12) を使うと  $x_0$  は以下のようなになる。

$$x_0 = \frac{\det D_1}{\det D_0} = \frac{1}{z - a_0 - b_1^2 \frac{\det D_2}{\det D_1}}, \tag{F.0.13}$$

同様の議論より Eq. (F.0.13) に出てくる行列式の比は一般的に表すと

$$\frac{\det D_{n+1}}{\det D_n} = \frac{1}{z - a_n - b_{n+1}^2 \frac{\det D_{n+2}}{\det D_{n+1}}}, \tag{F.0.14}$$

となり再帰的に係数を作ってゆくことができ最終的には

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[ \frac{\langle \psi_0 | \hat{O}^\dagger \hat{O} | \psi_0 \rangle}{z - a_0 - \frac{b_1^2}{z - a_1 - \frac{b_2^2}{z - a_2 - \cdots}}} \right], \tag{F.0.15}$$

を計算すればよいことになる。

## 参考文献

- [1] see for example, I. M. Lifshitz and Yu. Kagan: *Sov. Phys. JETP* **35** (1972) 206.
- [2] D. O. Edwards, D. F. Brewer, P. Seligman, M. Skertic, and M. Yaqub: *Phys. Rev. Lett.* **15** (1965) 773.
- [3] G. E. Watson, J. O. Reppy, and R. C. Richardson: *Phys. Rev.* **188** (1969) 384.
- [4] S. Horiuchi, Y. Okimoto, R. Kumai, and Y. Tokura: *Science* **299** (2003) 229.
- [5] D. Cabib and E. Callen: *Phys. Rev.* **B 12** (1975) 5249.
- [6] F. D. M. Haldane: *J. Phys.* **C 14** (1981) 2585.
- [7] J. E. Hirsch: *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 2327.
- [8] B. Fourcade and G. Spronken: *Phys. Rev.* **B 29** (1984) 5096.
- [9] L. M. del Bosch and L. M. Falicov: *Phys. Rev.* **B 37** (1988) 6073.
- [10] J. W. Cannon, R. T. Scalettar, and E. Fradkin: *Phys. Rev.* **B 44** (1991) 5995.
- [11] J. Voit: *Phys. Rev.* **B 45** (1992) 4027.
- [12] T. Nishino: *J. Phys. Soc. Jpn.* **61** (1992) 3651.
- [13] P. G. J. van Dongen: *Phys. Rev.* **B 49** 7904 (1994).
- [14] G. I. Japaridze and A. P. Kampf: *Phys. Rev.* **B 59** 12822 (1999).
- [15] M. Nakamura: *Phys. Rev.* **B 61** 16377 (2000).
- [16] M. Tsuchiizu and A. Furusaki: *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) 056402.
- [17] P. Sengupta, A. W. Sandvik, and D. K. Campbell: *Phys. Rev.* **B 65** (2002) 155113.
- [18] E. Jeckelmann: *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 236401.
- [19] M. Aichhorn, H. G. Evertz, W. von der Linden, and M. Potthoff: *Phys. Rev.* **B 70** (2004) 235107.
- [20] A. W. Sandvik, P. Sengupta, and D. K. Campbell: *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 089701.

- 
- [21] G. P. Zhang: Phys. Rev. **B 68** (2003) 153101.
- [22] A. W. Sandvik, L. Balents, and D. K. Campbell: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 236401.
- [23] Y. Z. Zhang: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 246404.
- [24] N. Tomita: Phys. Rev. **B 73** (2006) 115105.
- [25] S. Koshihara, Y. Tokura, T. Mitani, G. Saito, and T. Koda: Phys. Rev. **B 42** (1990) 6853.
- [26] S. Iwai, S. Tanaka, K. Fujinuma, H. Kishida, H. Okamoto, and Y. Tokura: Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 057402.
- [27] H. Okamoto, Y. Ishige, S. Tanaka, H. Kishida, S. Iwai, and Y. Tokura: Phys. Rev. **B 70** (2004) 165202.
- [28] K. Tanimura: Phys. Rev. **B 70** (2004) 144112.
- [29] S. Iwai, Y. Ishige, S. Tanaka, Y. Okimoto, Y. Tokura, and H. Okamoto: Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 057403.
- [30] H. Matsuzaki, H. Ohta, S. Takaishi, M. Takamura, M. Yamashita, and H. Okamoto: private communication.
- [31] E. Jeckelmann: Phys. Rev. **B 67** (2003) 075106.
- [32] K. Iwano: Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 226404.
- [33] A. Takahashi, H. Itoh, and M. Aihara: Phys. Rev. **B 77** (2008) 205105.
- [34] F.B. Gallagher and S. Mazumdar: Phys. Rev. **B 56** (1997) 15025.
- [35] F. Gebhard, K. Bott, M. Scheidler, P. Thomas, and S. W. Koch: Philos. Mag. **B 75** (1997) 13.
- [36] F. Gebhard, K. Bott, M. Scheidler, P. Thomas, and S.W. Koch: Philos. Mag. **B 75** (1997) 47.
- [37] F. H. L. Essler, F. Gebhard, and E. Jeckelmann, Phys. Rev. **B 64** (2001) 125119.
- [38] H. Matsueda, T. Tohyama, and S. Maekawa: Phys. Rev. **B 70** (2004) 033102.
- [39] M. Kuwata-Gonokami, N. Peyghambarian, K. Meissner, B. Fluegel, Y. Sato, K. Ema, R. Shimano, S. Mazumdar, F. Guo, T. Tokihiro, H. Ezaki, and E. Hanamura: Nature (London) **367** (1994) 47.

- 
- [40] S. Mazumdar, F. Guo, K. Meissner, B. Fluegel, N. Peyghambarian, M. Kuwata-Gonokami, Y. Sato, K. Ema, R. Shimano, T. Tokihiro, H. Ezaki, and E. Hanamura: *J. Chem. Phys.* **104** (1996) 9283.
- [41] E. Collet, M. H. Lemee-Cailleau, M. Buron-Le Cointe, H. Cailleau, S. Ravy, T. Luty, J. F. Berar, P. Czarnecki, and N. Karl: *Europhys. Lett.*, **57** (2002) 67.
- [42] H. Ezaki, T. Tokihiro, M. Kuwata-Gonokami, R. Shimano, K. Ema, E. Hanamura, B. Fluegel, K. Meissner, S. Mazumdar, and N. Peyghambarian: *Solid State Commun.* **88** (1993) 211.
- [43] H. Ezaki, T. Tokihiro, and E. Hanamura: *Phys. Rev. B* **50** (1994) 10506.
- [44] S. Pleutin: *Phys. Rev. B* **61** (2000) 4554 .
- [45] H. Gomi, A. Takahashi, T. Ueda, H. Itoh, and M. Aihara: *Phys. Rev. B* **71** 045129 (2005).
- [46] H. Itoh, A. Takahashi, and M. Aihara, *Phys. Rev. B* **73**, 075110 (2006).

# 謝辞

本論文の研究は、奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究科 物質創成科学専攻 複雑系解析学講座 相原 正樹 教授のご指導のもとに行われたものです。ご指導いただきました相原 正樹 教授には本研究のみならず、進学など様々な局面において多大なるご助言、ご協力を頂きました。ここに、深く感謝の意を表します。高橋 聡准教授には博士前期課程から5年間にもわたり本研究を先導して頂きました。また、物質科全般における幅広い視野からの理論的解釈及びその考察を含め、研究を行う姿勢など、実に多大なる部分において懇切丁寧なご指導並びにご鞭撻を頂きました事に、深く感謝の意を表します。

凝縮系物性学講座 服部 賢 准教授には、本研究における副指導教官として多大なるご協力をして頂きました。凝縮系物性学講座 大門 寛 教授, 量子物性科学講座 山本 愛士准教授には実験的立場からの貴重な意見、ご助言と本論文の査読をして頂きました。お三方に対して、深く感謝致します。

また、ゼミなどを通して討論並びに適切且つ貴重なご意見を頂いた本講座の稲垣 剛 助教に深く感謝致します。

本研究において、いくつかのデータを提供して頂きました、博士後期課程修了生の五味 広喜氏、伊東 久氏に深く感謝します。氏が在学中の時は時間を問わず議論して頂きました。重ねて感謝の意を表します。加えて本講座の方々にも公私ともに非常に多くのご協力を頂きましたことに、ここでお礼を申し上げます。この5年間はよい縁に恵まれ、公私とも充実した研究生生活を送ることができました。

最後に、私の博士後期課程修了まで研究をつづけるというわがまを暖かい目で見守ってくれた両親に最大限の感謝の意を表したいと思います。

末筆ながら、以上をもって謝辞とさせていただきます。

2009 春  
福井 隆生

# 業績一覽

## 論文

- (1) “ Absence of Transition in Photoexcited States across the CDW-SDW Phase Boundary ”, Takao Fukui, Taku Konishi, Akira Takahashi, and Masaki Aihara, Journal of the Physical Society of Japan. (in press)

## 国際学会発表

- (1) ” Absorption spectrum near CDW-SDW phase boundary ”, Takao Fukui, Taku Konishi, Hisashi Itho, Akira Takahashi, and Masaki Aihara, International Conference on Luminescence (ICL ’ 05), Beijing, China, July 2005.
- (2) ” Absorption spectrum near CDW-SDW phase boundary in strongly correlated electron systems ”, Takao Fukui, Taku Konishi Hisashi Itho, Akira Takahashi, and Masaki Aihara, International Conference on Dynamical Processes in Excited states of solids (DPC ’ 07), Segovia, Spain, June 2007

## 国内学会発表

- (1) ” SDW-CDW 相境界における光吸収スペクトル ”, 福井隆生, 小西卓, 伊東久, 高橋聡, 相原正樹, 日本物理学会 2005 年秋季大会, 同志社大学 2005 年 9 月
- (2) ” SDW-CDW 相境界における光吸収スペクトル ”, 福井隆生, 小西卓, 伊東久, 高橋聡, 相原正樹, 日本物理学会 2007 年春季大会, 鹿児島大学 2007 年 3 月
- (3) ” SDW-CDW 相境界における光吸収スペクトル 2 ”, 福井隆生, 小西卓, 伊東久, 高橋聡, 相原正樹, 日本物理学会第 62 回年次大会, 北海道大学 2007 年 9 月
- (4) ” SDW-CDW 相境界における光吸収スペクトル 3 ”, 福井隆生, 小西卓, 伊東久, 高橋聡, 相原正樹, 日本物理学会第 63 回年次大会, 近畿大学 2008 年 3 月