

論文内容の要旨

博士論文題目

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

氏名

福井 隆生

(論文内容の要旨)

量子相転移とは物質パラメータの変化により基底状態の交差が起きることに起因し、温度変化による熱的な相転移とは機構が本質的に異なるものである。量子相転移の相境界付近では量子揺らぎが大きくなり、興味深い物理現象が起きることが期待されている。量子相転移の一例として、電荷密度波 (CDW)-スピン密度波 (SDW) 量子相転移が注目されており、これまで多くの理論研究がなされてきた。従来の CDW-SDW 相転移の研究においては、基底状態の性質の変化に関してのみ研究が行われてきた。しかし、相転移点近傍では、巨大な量子揺らぎにより興味深い励起状態が現れることが期待される。さらに、近年、電荷移動錯体 TTF-CA において SDW 的イオン状態から CDW 的中性状態への光誘起相転移 (PIPT) が、またハロゲン架橋錯体において SDW 的モット絶縁体から CDW 状態への PIPT が報告されている。これらは、通常熱的相転移と異なり非平衡状態における動的相転移であり、そのメカニズムは未解明である。PIPT の機構解明にはその核となる量子相転移点近傍での光励起状態の理解が不可欠となる。本研究は、低次元強相関電子系の光励起状態に注目し、相転移点を跨いで光励起状態がどのように変化するかを調べ、更にその知見を基にして相転移点近傍の量子揺らぎの様相を明らかにすることを目的としたものである。

CDW および SDW 状態をともに記述可能なモデルである PPP モデルを用い、半充填状態の 1 次元および 2 次元電子系について、同一サイトクーロンエネルギー U が重なり積分に比べて十分に大きい強相関の場合について解析した。まず 1 次元系での結果について述べる。最近接サイト間クーロン相互作用の大きさ V がある臨界値以下では基底状態は SDW 状態、それ以上では CDW 状態となる。相境界から十分にはなれた V 領域では、光吸収スペクトルは最も低周波側のピークが支配的であり、このピークが単一のエネルギー固有状態への励起によることが数値的に確かめられた。この励起状態の物理的性質を調べるために、それに対する電荷相関関数とスピン相関関数を計算した。その結果、相転移点近傍以外の SDW (CDW) 基底状態においては、ホロン・ダブロンペア (スピン 1 重項ペア) 状態が量子的重みをほぼ独占していることがわかった。相転移点近傍の SDW (CDW) 基底状態からの光励起状態では、様々な長さのホロン・ダブロンペア (ス

ピン1重項ペア) ストリング状態が量子揺らぎとして大きな寄与をし、SDW (CDW) 中に CDW (スピン1重項ペア) ドメインが存在する電子構造を持つようになるこのような特徴的な量子揺らぎの結果、相境界で急激に変化する基底状態とは対照的に、光励起状態はゆるやかにクロスオーバーすることが見出された。

2次元系においては、相転移点近傍の SDW (CDW) 基底状態からの光励起状態においても、ホロン・ダブロンペア (スピン1重項ペア) 状態が支配的である。これは、相転移点近傍の量子揺らぎの性質が1次元と2次元系では大きく異なることを示すものである。

以上のように、本論文において低次元強相関電子系の電荷密度波-スピン密度波相転移点近傍における特異な光励起状態が理論的に明らかにされた。

(論文審査結果の要旨)

低次元強相関電子系は、物質パラメータの変化により様々な電氣的磁氣的性質を有する物質相を形成するが、それらの間には量子揺らぎに起因する量子相転移が存在し、物性研究の主要なテーマの一つになっている。量子相転移は物質パラメータの変化により基底状態の交差が起きることに起因し、温度変化による熱的な相転移とはメカニズムが本質的に異なるものである。量子相転移の一例として、電荷密度波 (CDW) - スピン密度波 (SDW) 量子相転移が注目されているが、従来は基底状態の性質の変化について研究が行われてきた。しかし、相転移点近傍では、巨大な量子揺らぎにより興味深い励起状態が現れることが期待される。さらに、近年、電荷移動錯体 TTF-CA において SDW 的イオン状態から CDW 的中性状態への光誘起相転移 (PIPT) が、またハロゲン架橋錯体において SDW 的モット絶縁体から CDW 状態への PIPT が報告されている。これらは、通常の熱的な相転移と異なり非平衡状態における動的相転移であるが、そのメカニズムは未解明である。PIPT は強い電子相関と相転移の動力学がかかわる難問であるが、その解決には量子相転移点近傍での光励起状態の理解が不可欠となる。本研究は、低次元強相関電子系の光励起状態が電子間クーロン相互作用の大きさにどのように依存するかを理論的に解析し、更にその知見を基にして相転移点近傍の量子揺らぎの様相を明らかにすることを目的としたものである。

クーロンエネルギーの大きさがエネルギーバンド幅より十分に大きい強相関電子系(半充填状態)について、長距離クーロン相互作用を取り入れたモデル (PPP モデル) を用いて解析した。まず 1 次元系での結果について述べる。最近接サイト間クーロン相互作用の大きさがある臨界値以下では基底状態は SDW 状態、それ以上では CDW 状態となる。相境界から十分に離れた領域では、光吸収スペクトルは最も低周波側のピークが支配的である。このピークに対応する SDW (CDW) 基底状態からの光励起状態は、SDW (CDW) バックグラウンド中に束縛されたホロン・ダブロンペア (スピン 1 重項ペア) がひとつ形成された状態であることがわかった。相転移点近傍では、様々な長さのホロン・ダブロンペア (スピン 1 重項ペア) スtring 状態が量子揺らぎとして大きな寄与をし、SDW (CDW) 中に CDW (スピン 1 重項ペア) ドメインが存在する電子構造を持つ状態が光吸収スペクトルを支配すること、その結果多数のピークからなる光吸収スペクトルが現れることがわかった。このような特徴的な量子揺らぎのために、相境界で急激に変化する基底状態とは対照的に、光励起状態はゆるやかにクロスオーバーすることが見出された。

2 次元系においては、相転移点近傍の SDW (CDW) 基底状態からの光励起状態においても、ホロン・ダブロンペア (スピン 1 重項ペア) 状態が支配的であり、これらは相境界で急激に変化することがわかった。これは、量子揺らぎによる励起状態における相転移の消失 (クロスオーバー的状態変化) が 1 次元系に特徴的な現象であることを示すものである。

以上のように、本論文において低次元強相関電子系の電荷密度波 - スピン密度波相転移点近傍における特異な光励起状態が初めて理論的に明らかにされた。本論文で得られた結果は、今後の量子相転移や光誘起相転移の研究の新たな展開に寄与するものであり、学術的に大きな意義を有する。よって、審査員一同、本論文が博士 (理学) の学位論文として価値があるものと認めた。