

## 論文内容の要旨

博士論文題目

1次元モット絶縁体における光励起状態のオージェ緩和

氏名

瀬川 真未

1次元強相関電子系は、電子相関効果に由来する高温超伝導、巨大な非線形光学感受率、光誘起相転移などの様々な特異な性質を持つ。半充填の1次元強相関電子系は、バンド理論に基づけば金属になるが、強い同一サイト内のクーロン相互作用のために電子は各サイトに局在し絶縁体となる。これをモット絶縁体と呼ぶ。1次元モット絶縁体においては、スピンと電荷の自由度の分離の結果、荷電キャリアはスピンを持たないホロンとダブロンというスピンを持たない特異な準粒子になる。光励起された1次元モット絶縁体において超高速緩和が観測されているが、その起源は明らかになっていない。1次元モット絶縁体においてはスピンと電荷の分離がほぼ成立しているため、スピン緩和以外の電子緩和を調べるのが重要となる。超高速緩和を支配する重要な物理現象としてはオージェ過程が考えられるが、従来の摂動論による解析が適用できない強相関電子系におけるオージェ過程の研究はこれまで殆ど行われなかった。

本論文では、同一サイト上、および近接サイト間のクーロン相互作用を取り入れた Pariser-Parr-Pople モデルを用いて1次元強相関電子系のオージェ過程について解析を行った。基底状態を数値的に求め、パルス光を照射した場合の波動関数の時間発展を数値的に厳密に解いた。このようにして求めた時間発展解から、光励起状態における、スピン間相互作用エネルギー  $E_{SS}$ 、同一サイト上(近接サイト間)クーロン相互作用エネルギー  $E_U(E_V)$ 、運動エネルギー  $E_K$  の各期待値、およびホロン・ダブロン対が  $n$  個ある確率  $W_n$  の時間変化を解析し、光励起状態の生成と緩和過程を調べた。まず、弱励起における解析結果について述べる。 $E_{SS}$ 、 $E_U$ 、 $E_V$ 、 $E_K$  などの時間変化はクーロンパラメータに強く依存し、急激な変化は極めて狭いパラメータ領域にのみ見られ、時間の経過とともに  $W_1$  が増加し、 $W_{n(>2)}$  が減少していることが分かった。励起光が弱い極限では、 $W_n$  の変化率がホロン・ダブロン対の個数の2乗に比例することから、緩和過程は2個のホロン・ダブロン対が1個のホロン・ダブロン対に崩壊するオージェ過程によるものであることが明らかにされた。更に、強励起の場合は、 $E_{SS}$  の増加率は弱励起の場合よりも顕著に大きくなることが分かった。これは、1次元系においても強励起によってスピン・電荷結合が誘起されていることを示しており、それによるスピン緩和は光誘起金属相に特有のものである。しかし、 $E_U$  の減少や、 $E_K$  と  $E_V$  の増加は  $E_{SS}$  の増加よりも大きく、強励起の場合でも、1次元強相関電子系の光励起状態の緩和機構としては、電荷自由度の緩和がスピン自由度の緩和よりも重要であることが示された。

以上述べたように、本研究により、1次元モット絶縁体における光励起状態のオージェ緩和現象が厳密な数値解析により初めて理論的に明らかにされた。

|    |       |
|----|-------|
| 氏名 | 瀬川 真未 |
|----|-------|

(論文審査結果の要旨)

1次元強相関電子系とは、電子の運動が1次元のみに制限されており、電子間に強いクーロン相互作用が働く物質である。これらの物質は、多数の電子の強い電子相関効果に由来して、巨大かつ超高速な非線形光学効果や光誘起相転移などの特異な性質を持つ。エネルギーバンド幅よりも大きな同一サイト上クーロン相互作用をもつ電子系は、バンド理論に基づけば金属的になる半充填の場合でも、電子は各サイトに局在し絶縁体となる(モット絶縁体)。そこでの電荷キャリアは、通常の半導体のホールと電子とは根本的に異なるスピンを持たないホロン(非占有サイト)とダブロン(2重占有サイト)と呼ばれる準粒子であるために、未だ見解明な多様で新奇な物性を発現する。特に、光励起状態の超高速緩和現象の解明は、基礎物性的にも、また将来の光デバイスのための物質開発の指針を確立するためにも欠かすことができない。

本研究は、1次元強相関電子系において共通に見出されている光励起状態の超高速緩和現象の発現機構を、強いクーロン相互作用によってもたらされるオージェ過程に着目することにより理論的に明らかにすることを目的としている。解析には、近接サイト間相互作用を取り入れたPariser-Parr-Popleモデルを用いた。基底状態を数値的に厳密に求め、基底状態にパルス光を照射した場合の波動関数の時間発展を数値的に厳密に解き、光励起状態における、スピン間相互作用エネルギー、同一サイトクーロン相互作用エネルギー、近接サイト間クーロン相互作用エネルギー、運動エネルギーの各期待値、およびホロン・ダブロン対が $n$ 個ある量子重みの時間変化を求めた。それを基に、光励起状態の生成、緩和過程を調べた。特に、緩和過程の同一サイトクーロン相互作用エネルギー $U$ 依存性と、最近接サイト間クーロン相互作用エネルギー $V$ 依存性を詳細に解析した。

まず弱励起における解析結果について述べる。各エネルギーの時間変化は、有限サイズ効果により $U$ と $V$ に強く依存するが、ホロン・ダブロン対の数の量子重みの変化率がホロン・ダブロン対数の2乗に比例することから、緩和過程はオージェ過程によるものであることが明らかにされた。このオージェ過程は、通常の半導体とは異なる電荷キャリア(ホロンとダブロン)が関与するものであり、従来の理論の枠組みは適用できない。更に、強励起の場合は、スピン間相互作用エネルギーの増加率は弱励起の場合よりも顕著に大きくなることが分かった。これは、1次元系においても強励起によって光誘起金属相に固有なスピン・電荷結合が誘起されていることを示している。しかし、 $EU$ の減少や、 $EK$ と $EV$ の増加は $ESS$ の増加よりも大きく、強励起の場合でも、1次元強相関電子系の光励起状態の緩和機構としては、電荷自由度の緩和がスピン自由度の緩和よりも重要であることが示された。

本論文で得られた結果は、これまで解明されていなかった低次元強相関電子系の光励起状態の高速緩和現象において、オージェ過程が重要であることを厳密な数値解析により初めて明らかにしたものであり、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。