

## 論文内容の要旨

### 論文題目 Non-Linear Responses of Correlated Electron Systems in Strong Electric Fields

(強電場中の相関電子系の非線形応答)

氏名： 岡 隆史

本論文では低次元強相関電子系、特に一次元モット絶縁体の非線形輸送、非線形光応答について理論的に研究した。

強相関系とは、電子間に強いクーロン相互作用がはたらく物質の総称であり、遷移金属化合物、有機 $\pi$ 電子錯体などの物質群が属する。これらの強相関系は、興味深い伝導性や磁性を示すことから、近年、活発な研究がなされてきた。二次元銅酸化物の高温超伝導や一次元物質のスピン電荷分離などはその代表例である。しかし、これまでの研究は基底状態の性質に関するものが中心であり、非平衡状態に関する研究はほとんど行われてこなかった。

ところが最近になって一次元モット絶縁体の非線形伝導、非線形光応答に関する興味深い実験が報告され始めた。モット絶縁体では電子間斥力の非摂動効果で絶縁体化しており、高温超伝導体の母体物質としても注目を集めている。まず、一次元銅酸化物の非線形  $I$ - $V$  特性が計測され(Taguchi *et al.* Phys. Rev. B 62)、しきい値を越える巨大電場をかけると絶縁破壊現象が起きることが発見された。また、絶縁破壊で生じた金属的励起状態が電荷移動型絶縁体で観察された(Kumai *et al.* SCIENCE 284)。一方、光学的性質としては、ハロゲン架橋ニッケル錯体、一次元銅酸化物、等において三次の非線形光学応答が通常の一次元バンド絶縁体と比較して数桁も大きいことが明らかになった(Kishida *et al.* Nature 405)。これらの発見は基礎科学のみならず、将来の強相関電子系を用いた電子技術の構築という観点からも

非常に注目を集めている。ところが、強相関電子系の非線形応答に関する理論的研究はこれまであまり進展してこなかった。その大きな要因として、電子間斥力と電場( $F$ )の二つの非摂動効果を同時に扱うことの困難が挙げられる。これまで輸送問題で大きな役割を果たしてきた線形応答理論、あるいは、単純な摂動計算は不十分である。

本論文では、1930年代に Zener によって提案され、バンド絶縁体の絶縁破壊を理解する上で重要な役割を果たした量子トンネル効果(Zener tunneling)に注目し、Zener 理論のモット絶縁体への拡張を行った。その結果、多体準位間の Landau-Zener 遷移によって絶縁破壊が良く説明できることを示した。その過程で、電場下のモット絶縁体ではバンド絶縁体とは異なる、多体電子系特有の現象が起きることが明らかになった。一例として、電子間相互作用が引き起こす緩和現象が挙げられる。このため、一度トンネル効果で励起した電子が周囲の電子と散乱することにより局在化し、電気伝導に寄与しなくなるという絶縁破壊の抑制効果が引き起こされる。この局在現象は、エネルギー空間上で考察するとアンダーソン局在と類似の量子干渉効果の帰結と、とらえられることが分かった。さらに、強電場下のモット絶縁体の光学応答関数を計算することにより、絶縁破壊の光吸収スペクトルへの影響を明らかにした。

本論文の構成は、以下のようになっている。

- 第1章 Introduction
- 第2章 電場中の格子系
- 第3章 バンド絶縁体における量子トンネル効果と電子輸送
- 第4章 モット絶縁体の絶縁破壊現象
- 第5章 外場に駆動された量子系の動力学
- 第6章 一次元強相関電子系の光学応答
- 第7章 まとめと今後の課題

第3章ではバンド絶縁体の絶縁破壊現象を考察し、Zener の一次元系に対する理論を高次元の分散を持つバンド絶縁体に拡張し、電気伝導度の計算を行う。この拡張を行う際、基底状態のトンネル確率  $\Gamma(F)$  が伝導度と密接に関係していることを見る。また  $\Gamma(F)$  が基底状態の残存確率(survival probability)から計算できることを説明し、一次元 tight-binding モデルを用いた数値計算により結果の妥当性を検討する。

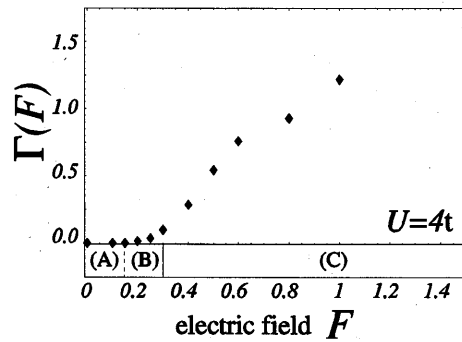


Fig 1: Plot of groundstate decay rate

第4章では一次元モット絶縁体の絶縁破壊現象を解析する。Half-filled Hubbard モデルの基底状態に静電場をかけて基底状態の残存確率を数値的に計算し、その漸近的振る舞いからトンネル確率  $\Gamma(F)$  を見積もる (Fig.1)。計算手法としては時間依存 DMRG (密度行列繰り込み群) および厳密対角化法を用いる。その結果、電場をかけた時の振る舞いがおおよそ三つの領域 (Fig 1 の(A)から(C)) に分類できることを示す。(A)では電場が弱く、トンネル効果が起きないため、断熱的な時間発展が行われる。(B)では、電場をかけた当初はトンネル効果が起きるものの、徐々にトンネル効果が抑制されて最後には残存確率が下げ止まる。しかし、さらに電場を強くした(C)ではトンネル効果が非常に強くて(B)で見られた抑制効果を振り切って基底状態は指数関数的に崩壊していく。ここで述べた抑制効果とは、物理的には、励起した電子と周囲の電子の散乱過程により生じる緩和の効果である。

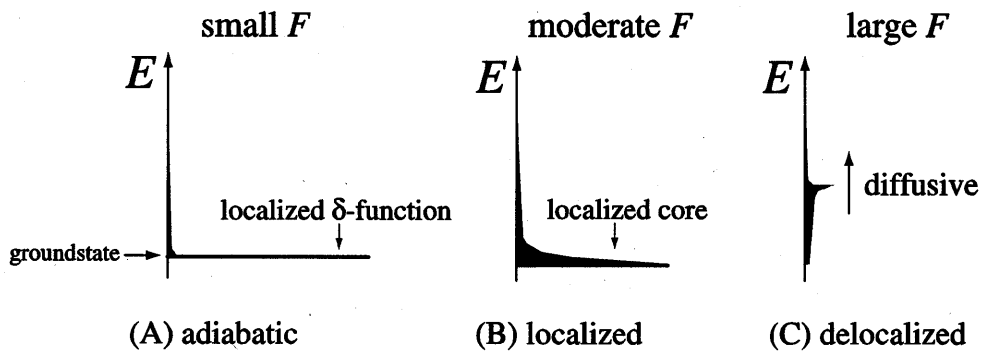


Fig 2: Plot of asymptotic wave function in energy space

第5章では第4章で見いだされた緩和現象を、エネルギー準位内の動力学を表す有効モデルを用いて解析する。静電場を時間に依存する Aharonov-Bohm 位相を用いて表現した場合、絶縁破壊の問題はエネルギー準位の空間の中の拡散現象、すなわち、量子ウォークの問題と等価になることにまず注目する。量子ウォークはランダムウォークの量子版として近年、量子物理、量子情報、さらに確率論の分野で注目を浴びているモデルである。ここでは、波動関数の長時間漸近分布を時間発展の母関数を求めることにより調べる。解析の結果、第4章同様、電場の強さに応じて三つの領域が出現することが明らかになった。そして、緩和現象の原因が異なる遷移経路同士の位相干渉効果であること、そして、中間領域(B)においては動的局在現象が起きることを示す。さらに、(B)、(C)の境界では電場誘起

の局在=非局在転移がエネルギー空間内で起きることが示される。

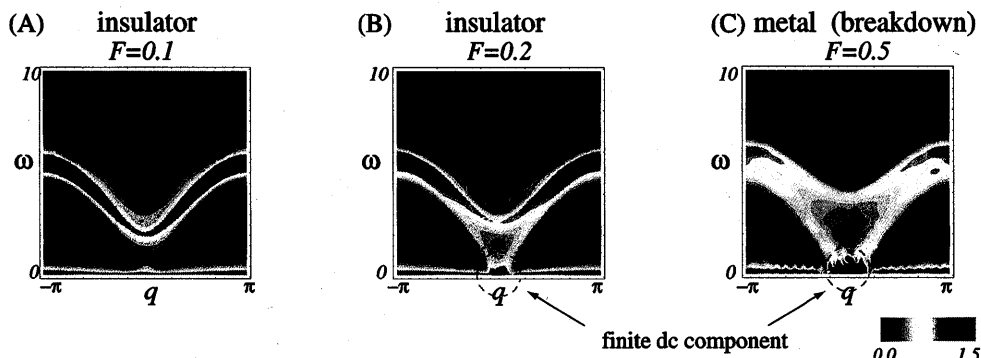


Fig 3: Plot of optical conductivity in finite  $F$

第 6 章では絶縁破壊等の非線形効果を応答関数を用いて統一的に解析する。まず、電場変調分光（電場のある時と無い時との線形応答関数の変化から非線形応答を見積もる実験手法）のアイデアを用いて一次元モット絶縁体およびバンド絶縁体の非線形光学応答を見積もる。計算手法としては時間依存 DMRG を用いる。その結果、まず、巨大非線形光学応答に関しては、実験結果 (Kishida *et al.* Nature 405) と整合した形状が得られるが、光学吸収とラマン吸収スペクトルの形状を比較して、両者の縮退からこの結果が説明できることを示す。

次に、絶縁破壊が光学応答に及ぼす変化を見るために、過渡相関関数 (transient correlation function) の計算を行う。その結果、トンネル率の解析同様、やはり、三つの領域(A)-(C)を得る(Fig.3)が、興味深いことに動的局在現象のために絶縁体となっているはずの(B)相で光学伝導率の dc 成分が有限(金属的)になっていることが示される。これは、輸送(トンネル電流)と光応答を結びつける非線形応答理論が、量子トンネルがある場合には必ずしも一致しないことを示唆しており興味深い。最後に(A)から(C)までの領域がパラメータ空間( $U, F$ )でどのように出現するかを示す“誘電相図”を Fig.4 に与える。この相図は実験結果と同程度の絶縁破壊の臨界電場を与える。

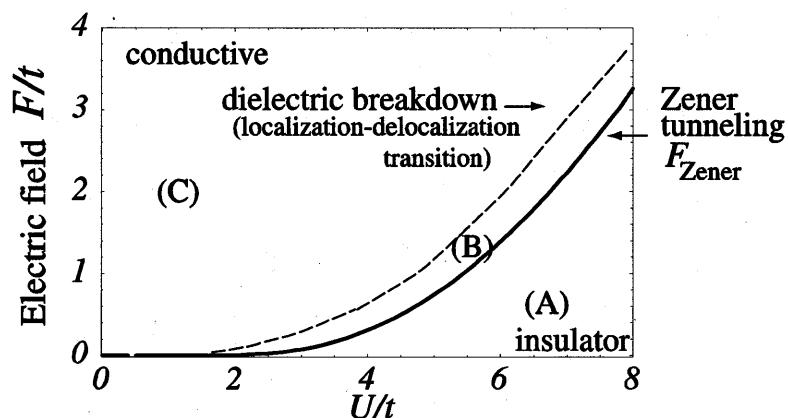


Fig 4: Plot of  $(F, U)$  dielectric phase diagram