

研究責任者名 Name	岩野 薫 IWANO Kaoru	所属機関 Affiliation	高エネルギー加速器研究機構 KEK
受理番号 Proposal No.	大型 14/15-09	研究課題名 Program title	強相関電子系における光誘起相転移の数値的研究

研究を終了しましたので、下記の通り報告します。

成果の概要

Abstract

(和文) 前期間に引き続き、2次元スピinlessフェルミオンモデルの光学励起状態を考察した。本モデルには、最近接サイト間のフェルミオンのホッピング効果(t_0)と最近接および次近接フェルミオン間斥力(それぞれ、 V および V')が含まれるが、本期間では特に V/t_0 および V'/t_0 が比較的大きい「強結合領域」に着目し、その基底・光学励起状態の性質について解析を行った。まず、基底状態は今まで同様にチェッカーボード型(市松模様型)電荷秩序が発生する(V, V')の組み合わせを選んだ。次に励起状態においては、 V' が比較的大きく、いわゆるフラストレーション効果の期待出来るケースを選び、光学スペクトルを計算した。その結果、弱結合領域よりも顕著なドメイン励起、すなわち、1光子による複数のフェルミオン多重励起を見出した。

(英文)

Following the research in the previous research period, we investigated the optically excited states of a two-dimensional spinless Fermion model. This model describes the following three effects; the Fermion hopping between nearest-neighboring (t_0) sites, the inter-Fermion repulsion between the nearest-neighboring sites (V) and next-nearest-neighboring sites (V'). In this research period, we particularly analyzed the strong-coupling regime in that the values of V and V' are relatively large compared with that of t_0 . First, we selected the combinations of V and V' that give the so-called checkerboard-type charge ordering (CO). Next, we calculated the excited states above those ground states when the V' value is large enough to make the frustration effect work substantially. As a result, we found more conspicuous domain-excitation effect than those for the weak-coupling case that we dealt with in the previous period. This domain effect means that multi-Fermions are simultaneously excited triggered by only one photon, and this finding is thus expected to give a new possibility to detect new elementary excitations in two-dimensional materials.

研究成果を公開しているホームページアドレス

事務局にて使用	論文 査読有	論文 査読無	講義・発表	招待講演	その他
	1	0	0	0	0

研究課題名「強相関電子系における光誘起相転移の数値的研究」

研究組織(一名) : scpfrq, 代表者 : 岩野薫

1. 序

光によって物質の状態が巨視的に変化する、いわゆる光誘起相転移が多く興味を持たれている。特にその意義としては、物質の熱平衡状態では観察し得ない時間軸方向の変化を直接扱うことであり、それを通していわゆる「隠れた状態」などを解明し物質のより深い理解を得、ひいては光励起下で出現する新しい機能の可能性を探ることを目的としている。

本計画で扱うのは、その中でも特に早い時間領域、すなわち、光パルス照射後数フェムト秒以内の超高速な時間領域である。この時間領域では格子（原子配置）はほとんど動かず、動くのはもっぱら電子であると考えられている。

実際、1次元[1-3]および2次元系物質[4]ではそのような考えを支持する実験結果が幾つかの物質で報告されており、そのような光誘起電子転移ともいべき現象に興味を持っている。

理論的には、1次元の場合にはその光学スペクトル解析を通して上記転移の存在は明瞭に裏付けられ[5]、しかもドメイン状態と言うべき新しい素励起の存在はその実験的検証方法を提唱することが出来た[6]。またごく最近では、そのような素励起のコヒーレントな運動（ドメイン成長）に高速振動（主に分子内振動などから成るエネルギーの高いフォノン）が加わった場合のインコヒーレンス発生や、擬似的な量子摩擦についても議論を行っている[7]。

一方、2次元の場合は、スペクトル計算にしろ実時間動力学にせよ計算は格段に難しくなりこれまで研究が遅れていたが、前期間で励起状態における1種のフラストレーションがドメイン成長に大きな役割を果たしている事が分かってきた。本期間は引き続きそのような現象をより深く解明し、その結果を論文にまとめた[8]。

[1] S. Iwai et al., PRL 96, 057403 (2006).

[2] Uemura and H. Okamoto, Phys. Rev. Lett. 105, 258302 (2010).

[3] H. Matsuzaki et al., JPSJ 75, 123701 (2007).

[4] S. Iwai et al., PRL 98, 097402 (2007).

[5] K. Iwano, PRL 97, 226404 (2006).

[6] K. Iwano, PRL 102, 106405 (2009).

[7] K. Iwano, PRB 84, 235139 (2011).

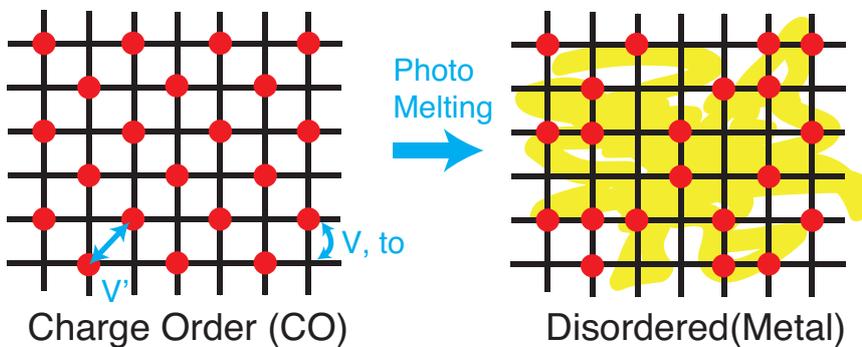
[8] K. Iwano, PRB 91, 115108 (2015).

2. 研究課題の背景

既に比較的小さい2次元格子サイズの系に対しては計算を実施した。用いるモデルは次に示すスピンレスフェルミオンモデルである：

$$H = -t_0 \sum_{\langle l, l' \rangle} (C_{l'}^\dagger C_l + h.c.) + \sum_{(l, l')} V_{repul}(r_l - r_{l'}) n_l n_{l'}$$

ここで、 C はスピンレスフェルミオンの消滅演算子、 n はその数演算子、 t_0 は粒子ホッピングのエネルギーである。（ l は2次元のサイトベクトル。）ここで、第1項は最近接格子点対に対して和を取り、一方第2項は粒子間斥力 ($V_{repul}(r-r')$) の到達範囲内で取ることにする。なお、このモデルは通常の拡張ハバードモデルの U （同じサイト上のクーロン斥力エネルギー）の無限大極限に対応していると考えられ、同じサイト上の異種スピンの同時占拠を排することによって近似的にスピンレスモデルになる。さらに粒子数は元々の拡張ハバードモデルでは（格子点に対して）1/4充填を考えているが、スピンレスになることによって1/2充填となり、結果として、少なくとも最近接相互作用 (V) が次近接斥力 (V') と比十分大きい領域では下図左のチェッカーボード型（市松模様型）の電荷配置（いわゆる電荷秩序）が実現していると考えられている。



このような系の光励起状態と直接関係する物理量の1つが、以下のように定義される光学伝導度スペクトルである。

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{\omega} \sum_j |\langle j | \hat{J} | g \rangle|^2 \delta(E_j - E_g - \omega),$$

ここで、 J は電流演算子、 E_j , E_g はそれぞれ励起状態、基底状態のエネルギーである。現在までの所、最近接 (V) および次近接 (V') 相互作用のみが存在する周期的境界条件を課した空間サイズ 6×6 までの系で結果を得ている。

3. 計算方法の概略

厳密対角化、連分数展開、CG法類似の方法

すべての状態を基底として取り入れたいいわゆる厳密対角化をランチョヨス法を用いて行う。次に各種光学スペクトルをまず連分数展開の方法を用いて形状を決定する。さらに連分数展開では分からない励起状態の性質を共役勾配法 (CG法)を適用して、以下の状態ベクトル(correction vector)を求める事により決定する。

$$|x\rangle = \frac{1}{H - E_g - \omega + i\gamma} O(k) |g\rangle$$

ここで $O(k)$ は各種スペクトルに適当な演算子で、一般には運動量 k に依存するが、電流演算子 J の場合は、 $k=0$ に相当するので、例外的に k に依存しない。 E_g 、 $|g\rangle$ は基底状態エネルギーおよびその状態ベクトルである。特に強調すべき点として、このベクトルの虚部はエネルギー $E_g + \omega$ の周りを幅 γ でスペクトル強度という重みを付けて平均した状態になっており、各状態を個別には見ないがある程度のエネルギー分解能で励起状態を分析できる。なお、このベクトルを用いて別個に ω に対応するスペクトル強度を求めることが出来るので、これは連分数展開の方法による結果の良い検証になっている。

4. 本期間の成果

本期間では特に、次頁のFig. 1 に示されるような、比較的強結合領域 (Fig. 1では、 $(V, V')=(5, 4)t_0$) を扱った。その結果、前期間までに扱った弱結合領域 (たとえば、 $(V, V')=(2, 1)t_0$) と比べて、より明瞭にドメイン励起の寄与を示すことが出来た。まず、Fig. 1(a) では ω/t_0 が9以上で N_{ex} (1光子による電子励起数)が4以上になっており、かつ、同じ領域の $\sigma(\omega)$ が十分大きくなっており(緑色のエネルギー領域)、それはつまり、

「この領域への光遷移がドメイン励起に他ならず、かつ、それが比較的弱い励起高強度で引き起こせること」

を意味している。次に、Fig. 1(b)においては、励起状態における電荷相関を赤線で基底状態における値(青水平線)とともに示した。本計算における基底状態における(長距離)電荷秩序は波数 (π, π) であり、左パネルは、上記の緑領域で元々のチェッカーボード型電荷秩序が大きく融解する事を意味し、右パネルは、元々はほとんど無かった別の秩序(波数 $= (2/3\pi, 2/3\pi)$)が同じエネルギー領域で顕著になってくることを示唆する。つまり、前述のドメイン励起された空間的領域においては、元々の秩序が壊されるだけでなく、新しい秩序が生成されたことを意味している。

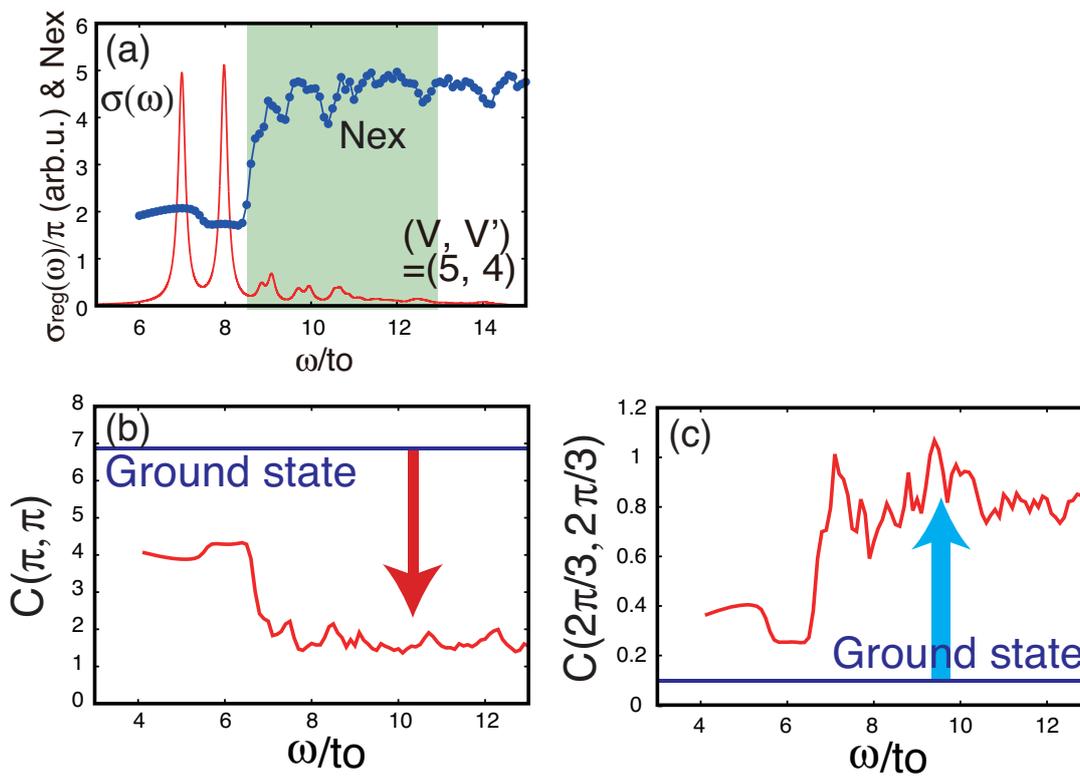


Fig. 1. $(V, V') = (5, 4)t_0$ の場合の (a) 光学伝導度スペクトル、および、(b) および (c) 電荷相関。 (a) においては、赤線が $\sigma(\omega)$ であり、青線が電子励起数 N_{ex} である。