

プロジェクト名(タイトル):

サブサイクルパルスで励起した強相関電子系の新奇量子多体現象

利用者氏名:

○新城一矢(1)

理研における所属研究室名:

(1)創発物性科学研究センター 計算量子物性研究チーム

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

電子の光との相互作用を調べる研究は、量子力学の発展と共に興味を集め続けてきた非常に基礎的なものである。特に、強相関電子系は量子多体効果による非自明な性質を持つため、レーザーパルス光の照射による電子状態の光学的性質を理解する試みが続けられてきた。さらに最近は、レーザー光によって熱的にはたどり着けない励起状態を作り出す研究も行われており、光誘起の超伝導状態やトポロジカル状態が提案されている。

このような光誘起状態の研究で使われてきたパルス光は主に、パルス包絡線内に多くの周期で振動する多サイクルパルス光であるが、最近のレーザーの発達により、図1に示すようなパルス包絡線内で一周以下しか振動しない「サブサイクルパルス」が作られるようになってきた。最先端の技術を用いれば、雷に匹敵する強度を持つ位相が制御された電場を生み出すことが可能である。このようなパルスの代表はテラヘルツパルスであり、その生成技術は 6G 以降の超高速無線通信の中核でもある。さらに、フェムト秒程度の非常に狭い幅のパルスを用いた実験も行われている。

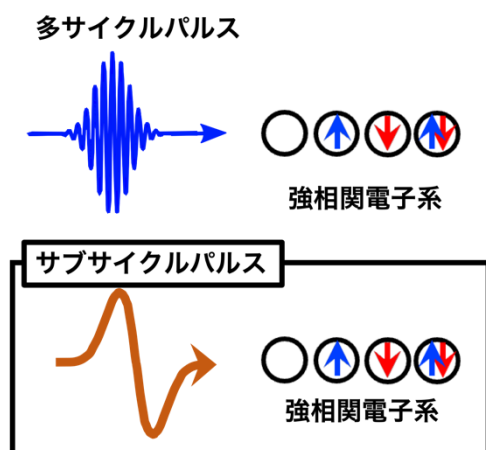


図 1 強相関電子系を多サイクルパルスとサブサイクルパルスで光励起するセットアップの比較。

電子の運動の特徴的な時間がフェムト秒程度であるため、フェムト秒パルス光を使うと電子状態の新たな制御・理解が可能になる。

このような背景のもとで、強相関電子系では強い量子多体効果によって、多様な新奇量子相が発見されてきたことを考えると、サブサイクルパルス光のような新しい光源で励起した非平衡状態で新たな量子多体ダイナミクスを生み出すことができるのではないかと、という疑問が生まれた。この疑問に答えるために我々は、高強度テラヘルツ電場パルスで励起された一次元強相関電子系の性質を明らかにすることを具体的な目的として設定して研究した [1]。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本課題では、理研 R-CCS 量子系物質科学研究チームにより作成・公開されている 2D-DMRG を用いた [2]。2D-DMRG では、量子格子模型に対するスピンや電荷の励起スペクトル(動的構造因子)を計算することができるほか、外場を加えたときの時間発展を計算できる機能が含まれている。それらの計算のコア部分である補正ベクトルの計算には、独自開発したルジャンドル関数による多項式展開が用いられている [3]。本計算では動的物理量であるポンプ・プローブスペクトルを計算するため、2D-DMRG の時間発展計算モードを用いた。

模型としては最近接ホッピング t 、オンサイトクーロン相互作用 U 、次近接クーロン相互作用 V を持つ一次元格子上の拡張ハバードハミルトニアンを採用した。一次元モット絶縁体物質 ET-F₂TCNQ を念頭に、 t をエネルギー単位として、 $U=10$ 、 $V=3$ に固定した。ハーフフィリングのもとで自由境界条件を持つ 32 格子点鎖を準備し、鎖方向にポンプ光としてテラヘルツ電場パルスを印加した。パルス光終了後に微小プローブ電場パルスを加えた後、そのプローブ光によって誘起された電流の時間変化を計算した。ポンプ光、プローブ光ともに、ホッピング項にいわゆるパイエルズ位相を付加することでハミルトニアンの中に導入した。誘起

電流のフーリエ成分とベクトルポテンシャルのフーリエ成分を用いて、ポンプ光照射後の光学伝導度スペクトルを得た。

3. 結果

テラヘルツパルス光を照射したとき、光励起されたホロン・ダブロン(電子の非占サイト・二重占有サイト)のダイナミクスが、光子エネルギーを中赤外に持つ多サイクルパルスによるダイナミクスとは異なることを見出した。中赤外パルス光の場合、ポンプ光の強度を増加させると、金属的な応答を特徴付けるドルーデ重みが増加する(図2左パネル)。一方、テラヘルツパルスの場合、電場強度の増大とともにドルーデ重みが減少し、さらにモット・ギャップ内の吸収強度が増加するのである(図2右パネル)。この現象は、キャリアの生成が量子トンネル機構によって生じる一次元モット絶縁体の特徴と考えられる。物理的には、インコヒーレントな運動が光励起キャリアのダイナミクスを支配していることを意味しており、多体局在効果で議論されているヒルベルト空間のフラグメンテーションと関係している。その結果として、ポンプ光照射によるガラス的な状態の出現を示唆している。

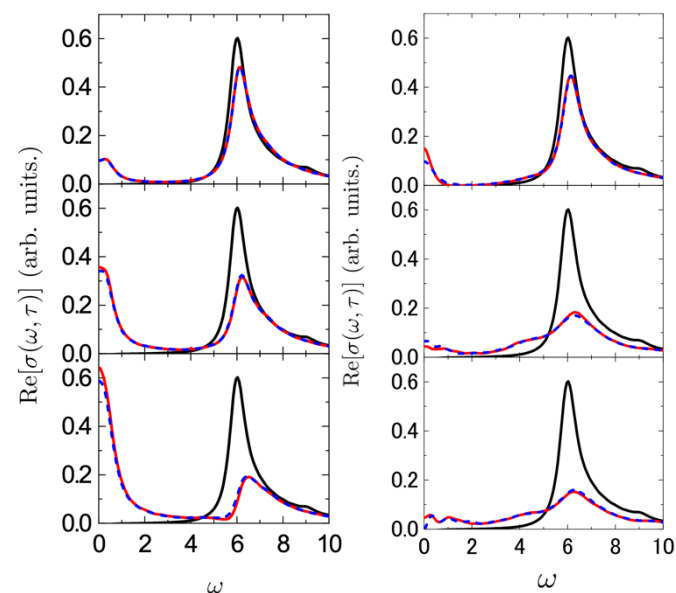


図 2 左パネルは中赤外パルスで励起したモット絶縁体の光学伝導度、右パネルはテラヘルツパルスで励起したモット絶縁体の光学伝導度を示す。赤線と青点線はそれぞれ、異なるプローブ時間でのスペクトルである。黒線は平衡状態での光学伝導度を示す。パルスの電場強度は下側のものほど大きい。

4. まとめ

2D-DMRG の時間依存モードを用いて、ハーフフィールドの一次元拡張ハバード模型のポンプ・プローブスペクトルを計算した。通常の中赤外ポンプパルスによる光学伝導度スペクトルでは、ポンプ光の強度の増大とともに金属状態を特徴づけるドルーデ重みが増大する。一方、量子トンネル効果を生み出すサブサイクル・テラヘルツパルス光の場合は、パルス光強度の増大とともにドルーデ重みが減少し、モット・ギャップ内の吸収強度が増大する。これは光誘起されたキャリアがガラス的な振る舞いを示すという新しい物理現象を示している。

5. 今後の計画・展望

今後は、キャリアドーピング系や二次元系の場合に物理がどのように変化するか明らかにする。それにより、サブサイクルパルスで生み出される量子多体ダイナミクスの深い理解に貢献したい。このような一連の研究は、低次元強相関電子系の基底状態および励起状態の解明という重大なゴールにつながる。

参考文献

- [1] K. Shinjo, S. Sota, and T. Tohyama, Phys. Rev. Res. **4**, L032019 (2022).
- [2] https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cms/DMRG/2D_DMRG.html
- [3] S. Sota and T. Tohyama, Phys. Rev. B **82**, 195130 (2010).

2022 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

K. Shinjo, S. Sota, and T. Tohyama, Glassy dynamics of the one-dimensional Mott insulator excited by a strong terahertz pulse, *Physical Review Research* **4**, L032019(1-8) (2022).

【口頭発表】

新城一矢, サブサイクルパルスで励起された一次元モット絶縁体の時間依存密度行列繰り込み群法による研究, 日本物理学会第 77 回年次大会, 2022 年 3 月, オンライン開催.