

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现象

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期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。

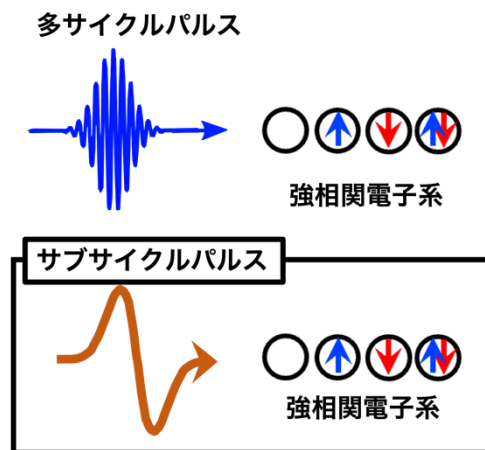


図1 強相関電子系を多サイクルパルスとサブサイクルパルスで光励起するセットアップの比較。

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、超短サブサイクルパルスおよび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。

模型としては一次元モット絶縁体物質 $\text{ET-F}_2\text{TCNQ}$ を念頭に、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的拡張ハバードハミルトニアンを採用した。一次元鎖方向にポンプ光として超短サブサイクルパルスおよび比較的幅の広いテラヘルツパルスを印加した。パルス電場は、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。

3. 結果

超短サブサイクルパルスを一次元拡張ハバード模型に印加すると、条件を整えれば電流を誘起して、時間反転対称性を破ることができることがわかった [1]. その条件とは、(1)パルスの(キャリアエンベロープ)位相をパルス照射後のベクトルポテンシャルが有限になるように調整すること. これにより、励起状態波動関数にひねりが加えられる. (2) 電子状態がドルーデ重みまたは超流動重みを持つ状態であること. 以上の(1)と(2)の条件が満たされると、線形応答の範囲内で、Kohn の定理から電流が誘起される振る舞いが理解できる.

実際に密度行列繰り込み群法で電流の時間発展を計算すると、キャリアをドーピングしたモット絶縁体および引力ハバード模型で電流を誘起し、時間反転対称性を破ることを示した. この時間反転対称性の破れは、二次高調波が発生することで検出が可能であり、実験的にも調べることができる.

幅の広いテラヘルツパルスを照射する場合は、電流ではなく、分極を誘起することができる. 実際に、二次高調波発生の有無を調べることで、分極に伴う空間反転対称性の破れが起こることを示した.

4. まとめ

2D-DMRG の時間依存モードを用いて、一次元拡張ハバード模型のサブサイクルパルス励起状態を計算した. 通常の中赤外ポンプパルスでハバード模型を励起しても、時間および空間反転対称性を破る状態は誘起しない. それに対して、サブサイクルパルスを印加すると、時間および空間反転対称性の破れた励起状態を誘起することができる. このような対称性の破れは、二次高調波発生の有無で調べることができる.

我々の研究から、サブサイクルパルスを用いれば、多サブサイクルパルスでは生み出せない特徴を持つ光励起状態が実現できることを示した.

5. 今後の計画・展望

今後は、超短サブサイクルパルスで励起した状態の過渡吸収スペクトルを計算したいと考えている. それにより、本研究で調べた電流誘起状態についての理解がさらに深まると期待している. 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, S. Yunoki, and T. Tohyama, Phys. Rev. B **107**, 195103 (2023).
- [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).

2023 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, S. Yunoki, and T. Tohyama, Controlling inversion and time-reversal symmetries by subcycle pulses in the one-dimensional extended Hubbard model, *Physical Review B* **107**, 195103(1-7) (2023)

【口頭発表】

新城一矢, 曾田繁利, 柚木清司, 遠山貴巳, 「一次元拡張ハバード模型におけるサブサイクルパルスを用いた空間反転・時間反転対称性の制御」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 東京工業大学, 2022 年 9 月.

K. Shinjo, "Subcycle pulse-induced nonequilibrium dynamics", Quantum Many-Body Systems In and Out of Equilibrium, Ljubljana, Slovenia, February 2023.

K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama, "Subcycle Pulse-Induced Nonequilibrium Dynamics in One-Dimensional Strongly Correlated Electron Systems", International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2023 (SCES 2023), Incheon, S. Korea, July 2023.