

課題名(タイトル):

サブサイクルパルスで励起した強相関電子系

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. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係

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。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、これまで研究してきた [1-4]。

本年度は特に、昨年度の報告書の課題としても挙げていた、過渡吸収スペクトルの計算に焦点を当てて研究を行った。その結果、サブサイクルポンプパルスに起因した興味深い構造がスペクトル中に現れることがわかった。

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 [5]。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 [6]。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および二次元の強相関電子系を記述する典型的なハバード模型を用いた。この模型は、最近接ホッピング t およびオンサイトクーロン相互作用 U をパラメータに持つが、 $t = 1$ としてエネルギーの単位を設定する。ある一方向にポンプ光として超短サブサイクルパルスを印加した。パルス電場は、ホッピング項にいわゆるパイエルス

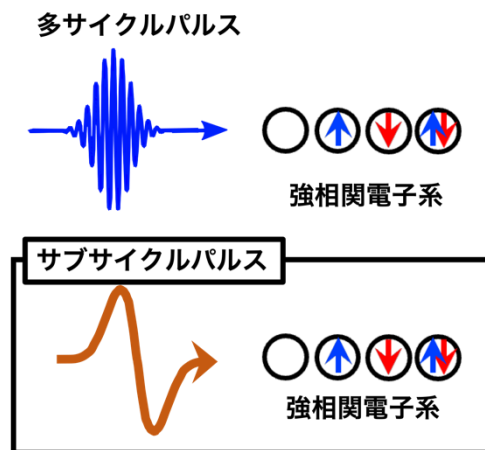


図 1 強相関電子系を多サイクルパルスとサブサイクルパルスで光励起するセットアップの比較。

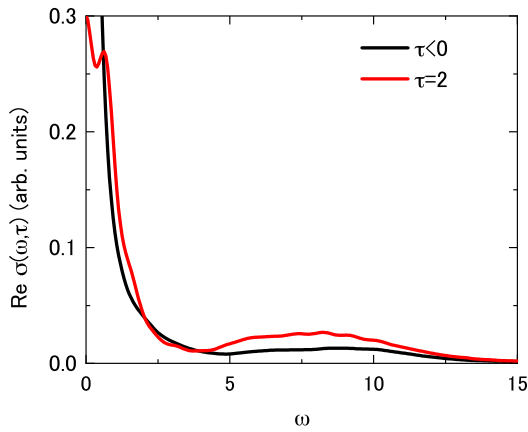


図 2 6×6 格子点の正方格子ハバード模型の線形吸収スペクトル（黒色線）およびサブサイクルパルスで励起した直後での過渡吸収スペクトル（赤色線）。ホールキャリア密度 $x = 1/9$ ，オンサイトクーロン相互作用 $U = -8$ の場合の結果を示す。

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

以下では，サブサイクルパルスで励起したハバード模型の過渡吸収スペクトルを調べた結果をまとめる．金属状態および超伝導状態に位相を適切に制御したサブサイクルパルスを照射すると，空間反転対称性が破れた状態が実現可能である [2,4]．密度行列繰り込み群法で電流の時間発展を計算すると，キャリアをドーブ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，空間反転対称性を破ることを示した．実際に，二次高調波が発生することで，空間反転対称性の破れを確認したが，同様の方法で実験的にも検証することができる．

このような状況下での過渡吸収スペクトルを計算した結果を図 2 に示す．これは， 6×6 正方格子上の引力ハバード模型についての結果であり，黒色線は，平衡状態での $U = -8$ における線形吸収スペクトルを示し，赤色線は，ポンプサブサイクルパルス照射直後の過渡吸収スペクトルを示す．ポンプする前の吸収は， $\omega = 0$ の超流動重みに由来する吸収が集中している．ポンプ直後は，この超流動重みが減少するが，それだけでなく，吸収の増大がダブロンを消滅させるエネルギーに対応する $\omega = |U|$ で起こる．このような吸収の増加は通常の高サイクルパルスで励起する場合には起こらない．また，この構造は相互作用が引力の場合

にのみ現れるため，超伝導状態に特徴的な構造であると思われる．また，斥力相互作用が働く場合は，スピン交換相互作用に対応する幅広い領域のエネルギーでスペクトルが増大することがわかった．我々の計算した過渡吸収スペクトルの特徴は，キャリアドーブ下の銅酸化物におけるポンプ・プローブ分光[7]においても観測されており，それに対応した構造が見えている可能性がある．

二次元ハバード模型の過渡吸収スペクトルを得るには，励起状態の電流の長時間発展の精密な計算が必要とされるため，スーパーコンピュータを活用しないと得られない結果である．また，密度行列繰り込み群法でキャリアドーブした二次元系ハバード模型の過渡吸収スペクトルが得られたのは初めての成果である．

4. まとめ

我々は，密度行列繰り込み群法を用いて，サブサイクルパルスで励起した二次元ハバード模型の過渡吸収スペクトルを計算した．その結果，引力相互作用と関係したエネルギーで吸収の増大が起こることを明らかにした．二次元ハバード模型のポンプ・プローブスペクトルの計算は，計算コストの観点から大変困難である．今回それが可能になったのは，スーパーコンピュータを活用しただけでなく，超短ポンプパルスによる励起に焦点を当てたためでもある．

5. 今後の計画・展望

今後は，幅の広いポンプパルスで励起したときの過渡吸収スペクトルを計算したいと考えている．そして，一次元モット絶縁体における Keldysh クロスオーバー[1,3,4]と二次元モット絶縁体でおこる Keldysh クロスオーバーの違いを明らかにしたい．

参考文献

- [1] K Shinjo, S Sota, T Tohyama Phys. Rev. Res. **4**, L032019 (2022).
- [2] K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama, Phys. Rev. B **107**, 195103 (2023).
- [3] 新城一矢, 曾田繁利, 柚木清司, 筒井健二, 遠山貴巳, 固体物理 **58**, 761 (2023).
- [4] K. Shinjo and T. Tohyama, APL Mater. **12**, 041109 (2024).
- [5] https://www.rccs.riken.jp/labs/cms/DMRG/2D_DMRG.html.

[6] S. Sota and T. Tohyama, Phys. Rev. B **82**, 195130 (2010).

[7] S. Peli, S. Dal Conte, R. Comin, N. Nembrini, A. Ronchi, P. Abrami, F. Banfi, G. Ferrini, D. Brida, S. Lupi, M. Fabrizio, A. Damascelli, M. Capone, G. Cerullo, and C. Giannetti, Nat. Phys. **13**, 806 (2017).

2024 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

K. Shinjo and T. Tohyama, APL Mater. **12**, 041109 (2024).

【口頭発表】

K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama, "Subcycle pulse-induced nonequilibrium dynamics in one-dimensional Mott insulators", APS March Meeting 2024, Minneapolis, MN, USA.

新城一矢, 遠山貴巳, 柚木清司, 「サブサイクルパルスで励起したハバード模型の過渡吸収スペクトル」, 日本物理学会第 78 回年次大会, 東北大学.

新城一矢, 「テラヘルツパルスで励起したモット絶縁体の非平衡ダイナミクス」, TN スキームに基づく異分野融合型計算科学研究ワークショップ, 大阪大学中之島センター.