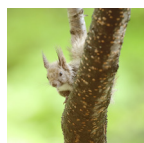


相関電子系と光によって誘起されるペア状態の理論的研究



若 者

金子竜也*

Theoretical Study of Correlated Electron Systems and Light-induced Pairing States

Key Words: Correlated electron system, Mott insulator, Light-induced phenomenon

はじめに

世の中の多くの現象は、一つの粒子の運動だけで記述されるほど単純なものではなく、多くの要素が複雑に絡み合い起こるものである。私が研究対象とする固体においては、電気・磁気的な物性の決定に固体中の電子が重要な役割を担うが、電子の振る舞いもまた固体中に存在する多くの要素の影響を受けている。周期的に原子が並んだ格子構造を舞台として電子は運動するが、格子構造が変われば電子の振る舞いも変わる。また、電子も単独で存在するわけではなく、固体中に存在する他の電子からのクーロン相互作用も受ける。物性物理学は長い歴史の中で、固体中に存在する様々な寄与をある程度正確に取り込んだ上で、多くの電子があたかも独立した電子のように記述できる方法論を確立している。電子の持つ波数に依存したエネルギー構造がつくるバンドは、第一原理的に計算できることが可能となっており、実験的に観測された多くの現象の解明に重要な役割を担ってきた。しかし、電子間の相互作用が強くなると、一体近似に基づくバンド理論では説明できない状態を形成するようになり、その記述と理解は難しいものとなってくる。本稿では、著者が研究している相関電子系のエッセンスと光照射による誘起が期待されるペア状態の理論的研究について紹介する。

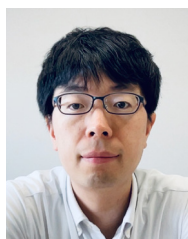
相互作用する電子

ここでは固体中の電子が周期的に並んだ原子軌道

で特徴づけられる描像で考える。ある特定の原子軌道だけが有効となる系では、その軌道を舞台とする電子を調べることで物質の性質をある程度理解できる。電子が物質内の原子軌道を自由に飛び移りながら運動ができる場合、その物質は金属的な性質を示す。しかし、1つの軌道に2つの電子が存在し、電子間に強いクーロン相互作用が働くと状態に変化が生じる。特に、各軌道に平均して1つの電子しか存在しないハーフフィリングと言われる状態においては、1つの軌道に同時に2つの電子が存在するとクーロン反発の分だけエネルギーを損するため、1つの軌道に1つの電子が局在することを好むようになる。このような状態になると電流の担い手の電子が動かなくなり絶縁体となる。つまり、強い電子間の相互作用は一体近似では金属となり得る状態を絶縁体に変えることがある。このような、電子間相互作用によって生じる絶縁体はMott絶縁体と呼ばれる。

動き回ろうとする電子の遍歴性とクーロン相互作用による電子の局在性を端的に表現した模型がHubbard模型である¹⁾。原子間の電子の飛び移りを表すパラメータ t と、電子間に働くクーロン斥力 U だけで表されるシンプルな模型である。 $U = 0$ の場合は、相互作用のない自由電子として記述できるため、バンド理論を用いて状態を記述できる。逆に、 $t = 0$ の場合は、独立した原子軌道となるので、各サイトで電子数に応じたエネルギー準位を求めることができる。しかし、両者がゼロでない場合は、 t による電子の遍歴性と U による電子の局在性の間に競合が生じ、シンプルな模型にも関わらず多体電子状態を記述することは難しくなる。

このような電子相関による効果が重要となる典型的な例が銅酸化物高温超伝導体である^{2,3)}。対象となる銅酸化物では、銅に存在する軌道の1つが電子状態の構成に有効であることが知られている。土台と



* Tatsuya KANEKO

1988年5月生まれ
千葉大学大学院 理学研究科 基盤理学専攻
(物理学) 博士後期課程(2016年)
現在、大阪大学大学院 理学研究科 物理学
専攻 助教 理学博士
TEL : 06-6850-6751
E-mail: kaneko@phys.sci.osaka-u.ac.jp

なる銅酸化物は電子間のクーロン斥力が強く絶縁体となるが、化学組成を部分的に変えて銅原子から電子の一部を抜き去ると電荷を運ぶキャリアが生じ、最終的には超伝導を示すことが1980年代に発見されている²⁾。この超伝導は従来に期待されていた温度よりも遥かに高い温度で超伝導を示し、多くの研究者を驚かせた。この超伝導の発現機構は従来の超伝導の理論では説明が難しく、電子相関効果によって生じた遍歴性と局在性の間で形成される電子どうしのペアに起因するものだと考えられている。そのため、相互作用する電子の振る舞いを正確に理解することは物性物理学の重要な課題の一つになっている。近年では、多層構造を持つニッケル酸化物においても高い温度で超伝導を示すことが発見され、その機構の解明にも注目が集まっている⁴⁻⁶⁾。

光によって誘起される風変わりなペア状態

物質中の電子が起こす現象の時間スケールは非常に短い、近年は光を用いて非平衡状態における電子のダイナミクスを捉えることが可能となってきている。光のような外場を物質に照射するとエネルギーが最も低い基底状態からの励起が生じて電子状態が変化する。外場に対する応答を調べることはその物質の性質を理解するための基礎的な課題であるが、近年では、強い外場を物質に照射することも可能となってきており、光などを用いて物質に新たな性質を創り出すような研究も進められている。光を用いて超伝導を引き起こすような光誘起超伝導の試みも実験的には進められている⁷⁾。

Mott絶縁体ではクーロン相互作用に由来するエネルギーギャップが生じるが、そのギャップを超える程度のエネルギー帯の光を照射すると基底状態からの電子の励起が活発に起こるようになる。Mott絶縁体が光励起されると、電子相関効果を反映した電子とホール(空孔)のキャリアが同時に生成される。弱い光に対する応答はこれまでも詳細に調べられてきたが、強い光が照射された場合に基底状態から非平衡過程を経て励起状態に至るダイナミクスには未解明な部分が存在する。

著者らは、Hubbard模型の光誘起ダイナミクスを少数系の電子状態を数值的に厳密に評価できる計算手法を用いて解析した^{8,9)}。クーロン相互作用 U と同程度のエネルギー帯の光をHubbard模型に導入し、

ハーフフィリングのMott絶縁体状態を初期状態として波動関数の時間発展を行なった。超伝導の源となる電子-電子ペアの間に働く相関の強さを示す相関関数を計算した結果、光照射によって相関関数が大幅に上昇することを見出した。従来の超伝導に対するペア相関関数は一定の符号となるが、我々が発見したペア状態は、原子サイトに対して交互に符号が交替するものであった。

数値計算によって発見された状態だったため当初はその原因がわからなかったが、様々な検討を経て、光で誘起された状態が30年以上も前にC. N. Yangによって理論的に提唱されていた η ペアリング状態¹⁰⁾であることを明らかにした。Yangの1989年の論文では、 η ペアリング状態がHubbard模型の厳密な固有状態であることを示しているが、我々が扱った単純なHubbard模型の基底状態としては実現しないことが述べられている¹⁰⁾。別の見方をすれば、 η ペアリング状態はHubbard模型の励起状態として存在している。我々の光照射のシミュレーションは励起状態の中に隠れた η ペアリングの断片を捉えていたのである。我々は、基底状態からの光励起に関する選択則と光照射によって生じた波動関数の構成を η ペアリング状態と関連づけて分析し、ペア相関が上昇するメカニズムを明らかにした⁸⁾。数学的な詳細などに関しては文献⁹⁾の解説記事を参照してほしい。本研究は、基底状態では存在しない風変わりな状態でも光誘起された非平衡状態では生じ得ることを示した良い例になったと考えている。

おわりに

本稿では、著者が研究を進めてきた相関電子系とその光励起状態で生じ得るペア状態に関する理論的研究について簡単に紹介した。我々が数値計算で示したペア状態の物質中での実現となると、多数のキャリアを生成するための光の強度など実験的なハードルも残されている。そういった背景もあり、近年では少ないキャリア数で生じ得るペア状態の研究も進めている¹¹⁾。銅酸化物高温超伝導体と関連して盛んに研究されたキャリアドープ系と異なり、光によってキャリアが生成された系の研究はまだ未開拓な部分もあり多くの課題が残されている。今後さらに研究が発展しその全容が明らかとなることを期待している。

参考文献

- 1) J. Hubbard, Proc. R. Soc. London A **276**, 238 (1963).
- 2) J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986).
- 3) B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, Nature **518**, 179 (2015).
- 4) H. Sun *et al.*, Nature **621**, 493 (2023).
- 5) H. Sakakibara, N. Kitamine, M. Ochi, and K. Kuroki, Phys. Rev. Lett. **132**, 106002 (2024).
- 6) T. Kaneko, H. Sakakibara, M. Ochi, K. Kuroki, Phys. Rev. B **109**, 045154 (2024).
- 7) M. Mitrano *et al.*, Nature **530**, 461 (2016).
- 8) T. Kaneko, T. Shirakawa, S. Sorella, S. Yunoki, Phys. Rev. Lett. **122**, 077002 (2019).
- 9) 金子竜也, 白川知功, 柚木清司, 固体物理 **55**, 21 (2020).
- 10) C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. **63**, 2144 (1989).
- 11) R. Ueda, M. Sarkar, Z. Lenarčič, D. Golež, K. Kuroki, T. Kaneko, arXiv:2504.03324.

