

論文内容の要旨

論文題目 Theoretical Study of Electron-Phonon Coupled Systems in and out of Equilibrium

(平衡および非平衡における電子・フォノン系の理論的研究)

氏名 村上 雄太

序論

電子・フォノン相互作用は超伝導や電荷秩序相と言った様々な興味深い物理現象の原因となる。電子・フォノン系の研究は古くからなされてきたが、実験技術の発展により様々な新しい現象の報告と問題提起がなされ、今なお興味を持たれ盛んに研究されている。この背景の元で、本著者が興味を持った事は、(1) 従来の理論では扱えないパラメータ領域における秩序相の性質と(2) 電子・フォノン相互作用が重要な系における非平衡現象である。

(1)に関しては、例えばアルカリ金属ドープ C₆₀ フラーレン超伝導体やアルカリ金属ドープ芳香物超伝導体では、電子間クーロン相互作用と電子・フォノン相互作用がともに強く、後者に寄与する分子内振動のエネルギーは電子のバンド幅と同程度であると考えられている。また、強相関電子系においても顕著な電子・フォノン結合の存在が実験的に報告され、複数の秩序の競合への深い関連が示唆されている場合もあり興味深い。(2)に関しては、近年の THz 帯のレーザー技術の発展により、超伝導体における集団励起モードであるヒッグスモードの観測や光による超伝導の様な振る舞いの誘起などが報告され注目を集めている。

以上のように、実験的には様々な報告がなされているが、理論的には、摂動論で扱いにくいパラメータ領域や電子と格子が絡み合ったダイナミックスを取り扱う事は一般的に難しく、十分な理解がなされているとは言えない。特に、(1)のような非従来のパラメータ領域での電子・フォノン系における異なった秩序相の競合や共存の様子を明らかにする事は、秩序相形成への電子・フォノン相互作用の影響を系統的に理解する上で重要であるだけでなく、将来的に光誘起相転移などの顕著な非平衡現象の探索にも有用な布石と考えられる。非平衡問題に関しては、まず取り組まなければならない事は方法論の開発であり、それを用いた非平衡状態の緩和や秩序相におけるコヒーレントなダイナミックスの理解が必要である。

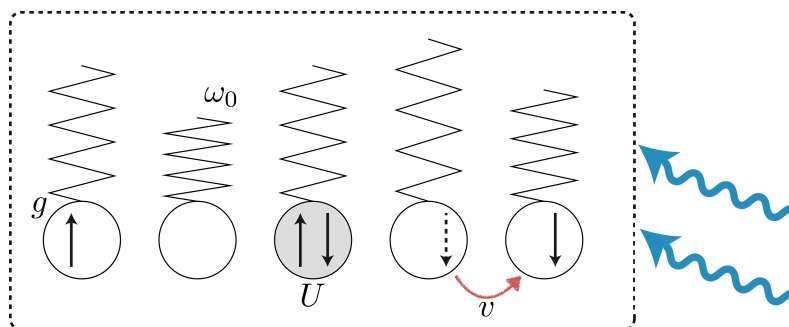


図 1、ホルスタイン-ハバード模型の模式図。円で表されたサイト間を電子(上下向き矢印)がホッピングパラメータ v をもって動き回る。逆スピンの電子があるサイトに来るとクーロン力 U を感じる。各サイトには ω_0 の周波数を持つアインシュタイン・フォノンが付いており、そのサイトに来た電子と電子・フォノン結合 g で結びついている。波線の矢印は外場を表している。 $U=0$ の場合をホルスタイン模型と言う。

本論文では、以上の問題提起を踏まえて、電子・フォノン系を記述する最も単純な模型であるホルスタイン模型およびホルスタイン-ハバード模型に焦点を当てた(図 1)。動的平均場理論の枠組みを用いることにより、これらの模型において発現する平衡状態および非平衡状態における様々な物理現象を明らかにした。動的平均場理論においては格子上の問題が有効不純物問題に写影されるためその解法が重要であるが、本論文では議論する各種問題に応じて新たに拡張・開発を行った。

ホルスタイン-ハバード模型とホルスタイン模型における秩序の競合

平衡において、ホルスタイン模型とホルスタイン-ハバード模型の相図はこれまで様々な空間次元で興味を持たれ調べられてきたが、異なる秩序の競合という観点からの系統的な研究は十分になされてはいなかった。本論文では、これらの模型の電荷秩序、超伝導と反強磁性を動的平均場の枠組みで同時にかつ数値的に厳密に扱うために従来の不純物問題のための連続時間モンテカルロ法の拡張を行い、これにより異なる秩序の競合の様子を明らかにした。ハーフフィルドのホルスタイン-ハバード模型においては電荷秩序と反強磁性の相境界での振る舞いを詳細に調べるとともに、いくつかの簡略化された記述の正当性も議論した。また、ハーフフィルドからずれたホルスタイン模型においては、中間結合領域で電荷秩序と超伝導が微視的に共存するいわゆる「超固体相」とそれに付随する量子臨界点が発現する事を見だし、これらの特徴的な性質を明らかにするとともに出現のメカニズムを議論した(図 2)。

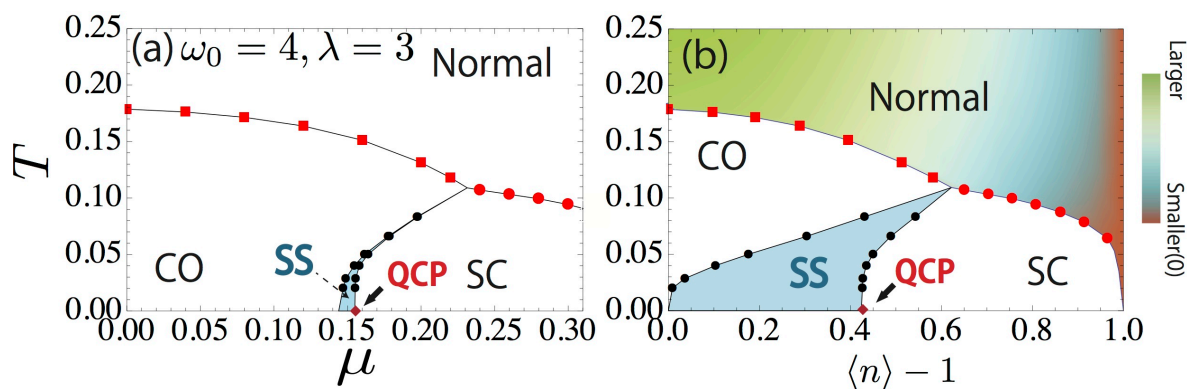


図 2, 中間結合領域におけるホルスタイン模型の相図を、化学ポテンシャルに対して(a)、また電子数に関して(b)プロット。略記は各々SS:超固体相、SC:超伝導相、CO:電荷秩序相、QCP:量子臨界点。

非平衡動的平均場理論に付随する非平衡不純物問題のためのミグダル近似の拡張

次に、非平衡を扱うために方法論を開発した。ミグダル近似は強結合領域における従来型超伝導体の性質を説明する上で成功を収めてきたが、本著者はこの近似を動的平均場に付随する非平衡不純物問題に対して新たに拡張を行った(非平衡自己無撞着ミグダル近似)。これにより、従来の方法では取り入れられていなかったフォノンの非平衡ダイナミクスおよび電子系へのフィードバックを取り込む事が可能となり、非平衡電子・フォノン系の全体像が議論できるようになった。

非平衡緩和ダイナミクスのクロスオーバー

本著者は非平衡動的平均場+自己無撞着ミグダル近似の第一の応用として、ホルスタイン模型の緩和ダイナミクスに焦点を当てた。具体的には、電子・フォノン結合の瞬間的な変化後の熱化のプロセスを調べた(クエンチ問題)。本著者は緩和の性質がクエンチ後の電子・フォノン結合の大きさによって質的に変化する事を見いだした。すなわち、弱結合側ではフォノン由来の振動が緩和した後も電子の運動量分布が熱化せず遅い緩和を示すのに対し、強結合側ではまず電子の運動量分布が熱化後の分布に近づき、その後熱化後の値の周りを他の物理量とともに振動するという、異なる振る舞いへのクロスオーバーが存在することを明らかにした。これらの現象は電子とフォノンの自己エネルギーが、電子・フォノン結合への異なった依存性をもつことに起因する事を見いだした。

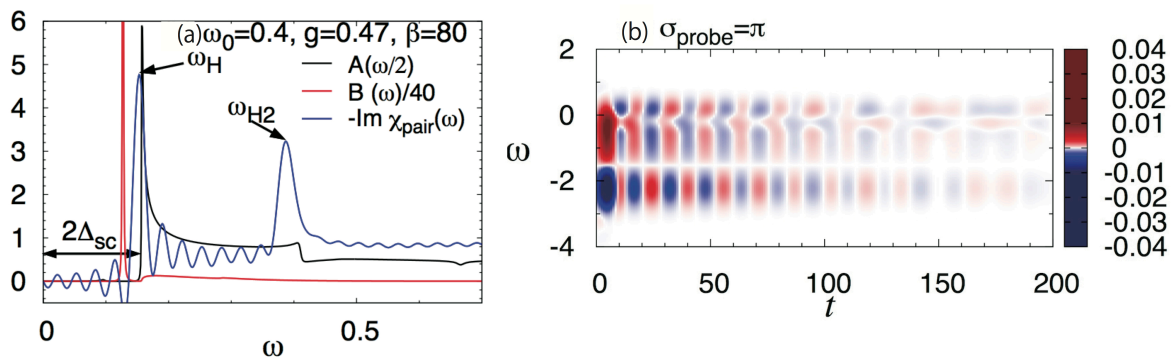


図 3, (a)従来型強結合超伝導体における動的ペア相関関数。A、B は各々電子とフォノンのスペクトル関数。(b) レーザーによる強励起後の時間分解光電子スペクトル。

強結合フォノン媒介超伝導体における集団振幅モード

本著者は非平衡動的平均場+自己無撞着ミグダル近似を用いて、これまで解析が難しかった強結合超伝導における振幅モード（超伝導秩序パラメータの振幅の変化を伴う集団励起）の性質を調べた。まず、強結合領域においては、ヒッグスモード以外にフォノンダイナミクスに由来する第二の集団振幅モードが存在する事を新たに明らかにし(図 3 (a))、そのエネルギースケールには超伝導内で顕著になる「電子に媒介されるフォノン間の相互作用」が重要である事を明らかにした。さらに、ヒッグスモードに関しては、そのエネルギー(ω_H)が超伝導ギャップ($2\Delta_{sc}$)良く一致する事を見だし、弱結合領域で予言された関係($\omega_H=2\Delta_{sc}$)が強結合領域まで幅広く適応可能である事を明らかにした (図 3 (a))。また、フォノンのダイナミクスのヒッグスモードへの影響を詳しくするとともに、電子・フォノン結合から生じる電子の準粒子の寿命がヒッグスモード由来のコヒーレントな振動を温度に依存して冪減衰から指数減衰に変化させる事を明らかにし、そのメカニズムを議論した。そして、これらのモードの時間分解光電子分光での観測可能性についても議論した(図 3 (b))。

今後の展望

以上のように、電子・フォノン系の基礎的なモデルであるホルスタイン(ハバード)モデルに含まれる豊富な現象を明らかにした。特に、非平衡自己無撞着ミグダル近似はフォノンのダイナミクスを考慮出来る利点があり、今後様々な設定への応用が期待される。さらなる課題としては、非平衡不純物問題の解法により広範な改良、本研究で得られた競合する秩序に関する知見を生かした非平衡状態における秩序の競合の理解と光による秩序相操作の可能性の探索、また第一原理計算と組み合わせた非平衡動的平均場の現実的な系への応用などが挙げられる。