

論文内容の要旨

論文題目 : Theory of nonequilibrium steady states in multiband systems in ac-fields and its applications

(ac外場中の多バンド系における非平衡定常状態の理論とその応用)

氏名 : 見上 敬洋

近年、超高速ポンプ・プローブ測定の技術の進展に伴って、光照射された電子系のダイナミクスに強い興味もたれており、特に、様々な電子相をもつ物質に対してレーザー光を照射する事により、光で物質の相を制御する光誘起相転移の研究が盛んになされている。実際、高温超伝導体である銅酸化物系の母物質にレーザー光を照射することで光誘起の金属絶縁体転移や超伝導転移が実現されており、またトポロジカル絶縁体表面でのディラック電子系に円偏光を照射することで光誘起トポロジカル転移が観測されたという実験も報告され始めている。

このように、実験的に光誘起相転移の観測は数多くなされているが、その微視的な理解は未だに十分ではない。その主要な理由は、光誘起相転移では外場の効果を非摂動的に取り扱わなければならないためである。この困難のために、秩序相やモット絶縁相を議論する上で重要となる電子相関の効果は、非平衡下では最近まで殆ど議論されてこなかった。近年、数値計算手法の発展により、電子相関と外場を共に取り扱った研究も積極的になされるようになってきたが、それらは主に軌道自由度を無視した多体模型(1バンド・ハバード模型)に対して行われてきた。ところが、実際の物質は軌道自由度で本質的に特徴づけられる場合が多く、その自由度に起因する非平衡現象は1バンド・ハバード模型では記述出来ない。実際の銅酸化物系やディラック電子系は、軌道自由度が本質的な役割を果たし、それを無視する事が出来ない典型的な系である。

本論文の目的は、このような多バンド相関電子系の非平衡下での性質を記述する汎用的な数値手法をまず開発し、次にその手法を実際多バンド系に適用し、新規な物性を探索する事である。その為にまず第1章で多バンド相関電子系の平衡、非平衡における物理現象について概説を行う。第2章では非平衡多体系を系統的に取り扱う手法として非平衡グリーン関数法の導入を行う。相互作用を非摂動的に取り扱う強力な手法である動的平均場理論(DMFT)もここで導入する。以上の準備のもと、本論文における方法論上のオリジナルな結果である、多バンド・フロッケ動的平均場理論の開発とその適用を行う。

多バンドハバード模型に対するフロッケ動的平均場理論

我々は出発点として、既に1バンド系で提案されているフロッケ動的平均場理論(Floquet-DMFT)と呼ばれる手法を拡張し、ac電場照射下での多バンド・ハバード模型の定常状態を記述する多バンドFloquet-DMFT法を開発した。Floquet-DMFT法においては、強いac電場の効果をフロッケ法で、一方モット転移などの強相関効果をDMFTで扱い、相関電子系にac電場を照射した際に生じる非平衡定常状態を、Büttiker熱浴と

呼ばれる厳密に解けるフェルミオン熱浴を散逸として取り付けることで求める手法である。我々はその手法を多バンド系に初めて拡張した。ac 電場下の多バンド系では、光誘起ベリー曲率と呼ばれる、物質をトポロジカルに特徴づけられる重要な物理量が現れる事が知られているが、我々は Floquet-DMFT 法の多バンド拡張とともに非平衡久保公式を用いて非平衡光誘起ベリー曲率の表式を与えた。

ac 電場下での dp -模型の非平衡定常状態

ここで開発した方法論を、理論的・実験的に興味深い二つの多バンド系に対して適用し、その ac 電場下での非平衡定常状態を議論した。特に電場としては、光誘起トポロジカル転移の実験などで興味を持たれている円偏光を扱った。

まず、銅酸化物系の典型的な模型である dp -模型 (3バンド・ハバード模型) の円偏光下での定常状態を議論した。我々は、非平衡定常状態の性質が、外場の光子エネルギー Ω に大きく依存する事を見出した。すなわち、バンド幅 W に対して光子エネルギーが小さい ($\Omega < W$) と、バンド内でキャリア励起が誘起される結果、実現する定常状態は、フェルミ分布に類似の非平衡分布を持つ事を示した。対照的に、光子エネルギーがバンド幅と同程度以上 ($\Omega \gtrsim W$) の領域では、電子分布が熱分布とは異なり、バンド間の選択的なチャンネルで光励起が引き起こされた結果、電子の分布がフェルミ面よりも高エネルギー側に分布する反転分布が観測される事を示した (図 1(a,b))。それに伴い、特定の周波数 ω に対して光学伝導度 $\sigma_{xx}(\omega)$ が負になる事を示した (図 1(c))。

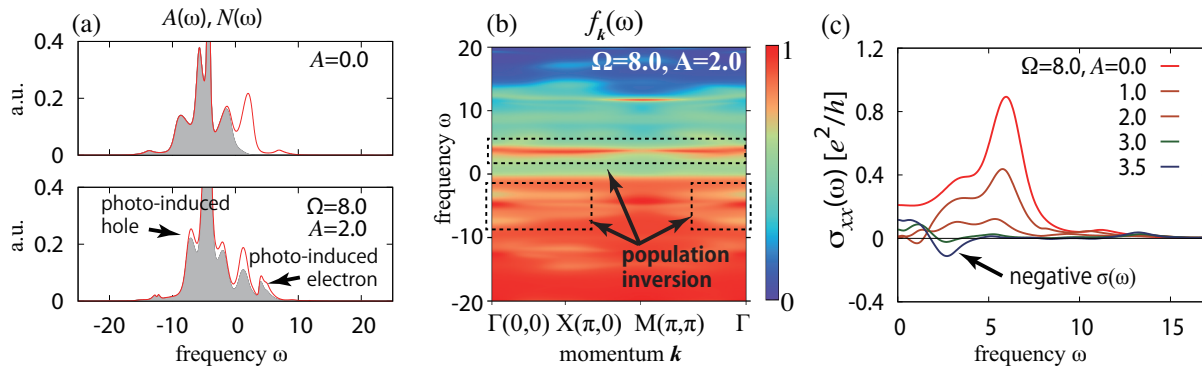


図 1 (a) 状態密度 $A(\omega)$ (赤実線)、占有状態密度 $N(\omega)$ (灰色領域)。 (b) 各 k 点に対する非平衡分布関数 $f_k(\omega)$ 。 (c) 光学伝導度 $\sigma_{xx}(\omega)$ 。エネルギー単位は eV。

円偏光下でのハニカム格子ハバード模型の光誘起相転移

次に、トポロジカル系として注目されているハニカム格子系での2バンド・ハバード模型の円偏光下での非平衡定常状態を調べた。相互作用が無く電場強度 A が弱い領域ではディラック点 (K 点、K' 点) でのトポロジカル・ギャップを伴うトポロジカル転移が起きる事は知られていたが、我々は強電場領域、強相関領域を初めて系統的に調べた。その結果、光子エネルギーが大きい ($\Omega \gg W$) とし、(1) 電場強度が大きな領域で、トポロジカル数の変化を伴う相転移が存在する事 (Fig.2(b,d)) (2) 相互作用 U の存在下では電場強度を大きくする事によりトポロジカル相からモット絶縁相への転移が引き起こされる事 (Fig.2(a,c)) を初めて示した。この現象に物理的解釈を与える為に、先行研究で行われている弱電場に対する摂動理論を強電場領域に拡張して、 $\Omega \gg W$ の条件下では、円偏光下のハニカム格子系はトポロジカル絶縁体を記述するホルデーヌ模型に有効的に一致する事を示した。さらにこの模型が上述の強電場領域でのトポロジカル相転移を定量的に説明する事を示した。

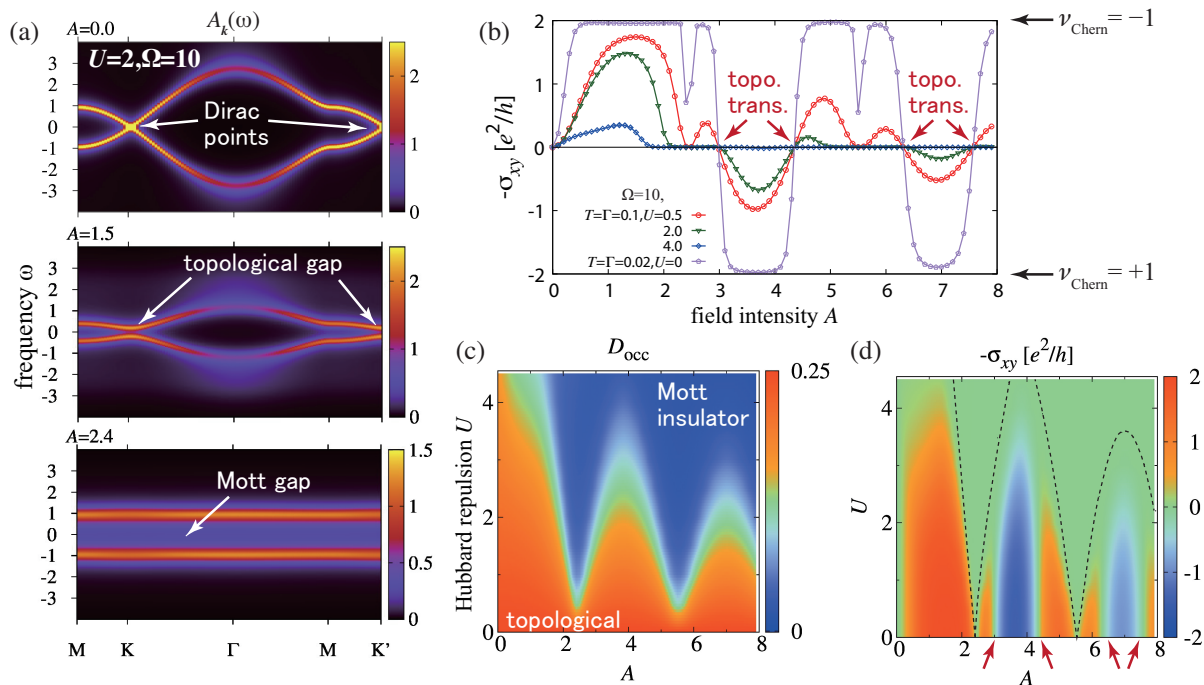


図2 $\Omega = 10$ における、(a) 波数 k 分解スペクトル関数 $A_k(\omega)$ 、(b) ホール伝導度 $\sigma_{xy}(\omega)$ 、(c,d) 二重占有率 D_{occ} とホール伝導度 $\sigma_{xy}(\omega)$ についての電場強度 A と Hubbard U に対する相図。

また、光子エネルギーが小さい ($\Omega \leq W$) 領域も解析した。この領域において我々は、 Ω の大小に伴い光誘起ホール伝導度の符号が反転する現象を見出した (図 3(a))、この現象を理解する為に、各 k 点でのベリー曲率 \mathcal{B}_{mk} と、非平衡分布関数 f_{mk} (m はバンド指標) を用いてホール伝導度を $\sigma_{xy} = \sum_{mk} \mathcal{B}_{mk} f_{mk}$ と分解した時のそれぞれの因子の効果を考察した。その結果、 $\Omega \leq W$ の条件を満たす時、K 点、K' 点におけるトポロジカルギャップ付近の光誘起 Berry 曲率の他に、Floquet バンドが交差するエネルギー $E = \pm\Omega/2$ (図 3(b)) で生じる avoided crossing ギャップ付近の光誘起ベリー曲率が寄与する事、そこで非平衡分布関数が非

自明な関数となるためにホール係数に逆符号の寄与をしている事を見出した (図 3(c))。これは実験で共鳴光 ($\Omega \lesssim W$) を与えたときに普遍的に起こる現象といえ、非平衡分布関数の重要性を示唆する結果である。

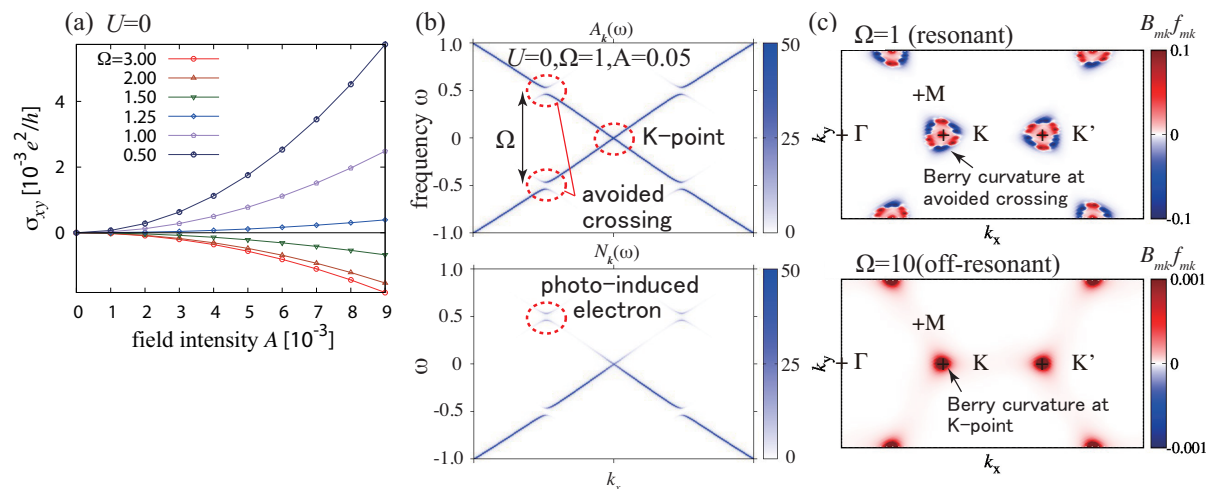


図 3 (a) 各 Ω に対するホール伝導度 σ_{xy} の電場強度 (A) 依存性。(b) $\Omega = 1$ の円偏光下での K 点近傍でのスペクトル関数 $A_k(\omega)$ と電子分布 $N_k(\omega)$ 。(c) ホール係数 σ_{xy} に寄与する各 k 点でのベリー曲率 B_k と非平衡分布関数 f_k の積 $B_k f_k$ ($U = 0, A = 0.005$)。

まとめと今後の展望

以上のように、我々は ac 電場で駆動された多バンド電子系を記述する多バンド Floquet-DMFT 法を開発し、dp 模型、ハニカム格子ハバード模型で多バンド特有の非平衡現象を見出した。将来課題としては、(1) DMFT で必要となる不純物問題の解法を、本研究では反復摂動法を用いたが、それ以外の解法と比較して結果の依存性を議論する事、(2) 熱浴をフェルミオン熱浴だけではなく、フォノン熱浴などに拡張して結果がどのように影響されるかを調べる事、(3) 本研究で考えなかった磁性相、超伝導相などの秩序相を考慮して、ac 外場下での多バンド系の非平衡秩序相を明らかにする事、が挙げられる。