

論文内容要旨 (和文)

平成 23 年度入学 大学院博士後期課程

地球共生圏科学 専攻 物理学 分野

氏 名 志田 佳祐



論文題目 CDW状態における格子の断熱近似を超えた大きな量子ゆらぎ

白川秀樹らが導電性高分子の発見と発展に関して、2000年にノーベル賞を受賞してから十数年が経った。彼らの研究対象であるポリアセチレンはそのままでは絶縁体であるが、不純物(ドナーもしくはアクセプター)を加えることで、電気伝導度が急激な上昇をすることがわかった。この研究を機に、1次元電子系の研究が盛んになった。1次元系は、電子-格子相互作用が強く、パイエルス転移やスピンプエルス転移により格子が結合交替することがよく知られている。結合交替が起こることで、異なる2つの位相を結ぶ欠陥、ソリトンが物性の表舞台に現れるようになる。一方、1次元電子系は量子揺らぎが大きく、長距離秩序が存在しないことでも有名である。このように1次元電子系の記述は複雑なため、未だに明らかになっていない問題が多く存在している。

量子モンテカルロ法や密度行列くり込み群は、強い電子間相互作用を持つ1次元系の研究に対して有効な方法である。しかし、それらの方法から得た結果に、どのような物理があるかを直観的に理解することは困難である。くわえて、それらの方法は格子を古典的、かつ、断熱的に扱っている。

本研究では、格子を量子力学的に扱い、かつ断熱近似を超えた新しい理論的な枠組みを開発した。格子を量子力学的に扱う計算を行うために、格子の状態としてコヒーレント状態

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \exp(\mathbf{z} \cdot \mathbf{b}^\dagger) |0\rangle, \quad \mathbf{z} = (z_1, z_2, \dots), \quad \mathbf{b}^\dagger = (b_1^\dagger, b_2^\dagger, \dots).$$

を用いる。ここで b_i^\dagger はモード*i*のフォノンに関する生成演算子である。各モードの振幅 z_i に関して最適化し、

$$\langle z | q_n | z \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{mN}} \sum_{k=0}^{N-1} \sqrt{\frac{1}{\omega_k}} z_k \exp \frac{2\pi i n k}{N}.$$

の関係から格子構造を決定する。一方、電子状態はSlater行列式によって表わす。断熱近似を超えた電子と格子の量子ゆらぎの効果を記述するために、以下のようにSlater行列式とコヒーレント状態の直積を重ね合わせる。

$$|\Psi\rangle = \sum_{f=1}^{N_S} C_f |u_f\rangle |z_f\rangle.$$

ここで N_S は重ね合わせる直積の数である。このような方法を共鳴Hartree-Fock法という。この方法は、重ね合わせの係数 C_f だけでなくSlater行列式 $|u_f\rangle$ の軌道とコヒーレント状態 $|z_f\rangle$ の振幅も最適化を行う。共鳴HF法の最大の特長は、最適化された波動関数を構成するSlater行列式とコヒーレント状態を解析することによって、直観的な理解を得ることが可能な点である。

本研究では、共鳴HF法を用いて、以下に示す、Su-Schrieffer-Heeger型の電子-格子間相互作用を加えた拡張Hubbardモデルの計算を行う。

$$H = -t \sum_{i\sigma} \{1 + \alpha(q_{i+1} - q_i)\} (a_{i\sigma}^\dagger a_{i+1\sigma} + a_{i+1\sigma}^\dagger a_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_i n_i n_{i+1} + \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{k(q_{i+1} - q_i)^2}{2} \right].$$

ここで U と V はon-site、最隣接クーロン相互作用であり、最後の項は格子のハミルトニアンである。この格子のハミルトニアンと第1項目にある電子格子相互作用も含め、全てを量子力学的に扱っていく。このモデルは $U \approx 2V$ のところではスピン密度波(SDW)の状態と電荷密度波(CDW)の状態の間で相転移をすることがわかっている。これまで、SDW相における電子相関の影響に関する研究は幅広く行われている。しかし、CDW相における電子や格子の構造に関する研究はあまり行われていない。そのため、本研究ではCDW相における電子と格子の量子ゆらぎを明らかにし、電子と格子の構造に与える影響を共鳴HF法を用いて調べた。以下の結論を得た。

電子数が格子点の数に等しいhalf-fillingの場合では、格子は非常に小さいゆらぎを含んでいるものの、ほぼ等間隔の格子構造を持つCDW状態であった。一方、正孔をドーブした場合(電子-正孔対称性があるので電子をドーブしても同じ結果になる)、CDWソリトンが形成されることがわかった。ここでCDWソリトンは、一次元鎖上のCDW波のパターンを途中で $++ \Rightarrow ++$ に転換するとともに、格子の2量体化を誘起する位相欠陥である。本研究により、電子と格子の量子ゆらぎはCDWソリトンの並進と振動によって表わされることが明らかになった。CDWソリトンが生成された結果、格子ひずみの平均値はドーブされたCDW領域では有限な値を持つことを示した。また、その格子ひずみの大きさは、6%のホールドーブ量で最大値を取り、それ以上のドーブ量では減少する。しかし、10%のドーブ量でも格子ひずみは有限の値を持つことがわかった。この結果は高いドーブ量でもソリトンが残ることを示唆している。ポリアセチレンの光学実験結果では、赤外活性モードが高いドーブ量でも存在していることがわかっており、ソリトン格子が残っている可能性が考えられる。今回の結果は、ポリアセチレンで観測された光学実験の結果と矛盾していないと考えている。ポリアセチレンの電子的な構造に関して詳細な研究は今後の課題である。

学位論文の審査及び最終試験の結果の要旨

28年 2月 8日

理工学研究科長 殿

課程博士論文審査委員会

主査 富田憲一
 副査 大西彰正
 副査 栗原正人
 副査 遠藤龍介
 副査



学位論文の審査及び最終試験の結果を下記のとおり報告します。

記

| | | | | |
|----------|-------------------------------|-----------------|-------------------------|------|
| 論文申請者 | 専攻・分野名 | 地球共生圏科学専攻・物理学分野 | 氏名 | 志田佳祐 |
| 論文題目 | CDW 状態における格子の断熱近似を超えた大きな量子ゆらぎ | | | |
| 学位論文審査結果 | 合格・不合格 | 論文審査年月日 | 28年 1月27日～ 28年 2月 8日 | |
| 論文公聴会 | 28年 2月 8日 | 場 所 | 理学部1号館13番教室 | |
| 最終試験結果 | 合格・不合格 | 最終試験年月日 | 28年 2月 8日 | |

学位論文の審査結果の要旨 (1,000字程度)

志田佳祐君は、フォノンのコヒーレント状態表示を用いて格子構造を量子化するとともに、格子の揺らぎを複数のコヒーレント状態間の量子力学的干渉として記述する計算手法を開発した。本手法を1次元 Su-Schrieffer-Heeger モデルに適用し、電荷密度波 (CDW) 状態にキャリアドーピングした時の格子と電子相関の関係について解明した。

(第1章) 導電性ポリマーの中には一次元性が強く、電子間相互作用のみならず、電子格子相互作用を無視できないものが多くある。ポリアセチレンはその代表であるが、高ドーピングした時の格子構造は、密度行列繰り込み群による理論計算では等間隔格子になることが予想されているが、赤外吸収の実験からは格子が歪んでいることが示唆されており、いまだ明らかになっていない。本章では、一次元電子格子系の未解決な問題をまとめている。

(第2章) 物質設計を行う上で高精度状態計算は不可欠であるが、従来の理論計算では原子や分子の配置は古典的かつ断熱的に扱うことが多く、量子力学的揺らぎが考慮されることは多くなかった。機能性物質設計において、今後より詳細な状態計算が必要となる可能性は高く、分子配置や格子構造を量子力学的に取り扱うことは、基礎科学的な関心にとどまらず、工学的応用においても重要である。本章前半では、Su-Schrieffer-Heeger 型の電子格子相互作用を伴った拡張ハバードモデルの説明をした。後半では、コヒーレント状態表示を用いて格子の量子揺らぎを記述する手法と多電子系の量子揺らぎを取り込む共鳴 Hartree-Fock 法を組み合わせることで電子、格子両者の大振幅揺らぎを取り込む新しい計算手法について解説している。本研究最大のオリジナリティは、この新しい計算手法の開発にある。

(第3章) CDW状態にキャリアをドーピングすることで格子が歪むことを明らかにした。従来の計算結果とは異なり、このひずみとソリトンの欠陥は10パーセント以上の高ドーピング領域まで残ることが分かり、導電性ポリマーの実験結果を説明する新しい電子格子構造を示唆することが出来た。

(第4章) 全体のまとめと考察が記述されている。

本論文は、申請者を第1著者とする英文論文として、Journal of the Physical Society of Japan (84巻124803, 2015年) に掲載されている。また、本論文は審査委員全員が閲読し、審査員全員一致で、審査基準も十分に満たし博士学位論文に値すると判断したため、合格と判定する。

最終試験の結果の要旨

学位論文を中心とし、一次元電子格子系の量子多体論についても口頭発表を行い、研究の質とプレゼンテーション能力を審査した。また、審査員を中心とした公聴会出席者からの質問、意見に対して適切な返答ができるか、研究に対して深いレベルで理解できているかどうかを審査した。

これらの結果、審査委員全員一致で合格と判断した。