

光に誘起された電子状態変化に対する異なる理論的アプローチ¹

分子科学研究所, 総合研究大学院大学, JST, CREST 米満 賢治²

光に誘起された電子状態の変化と付随する物性の変化を記述する理論として、これまでに様々な方法がとられてきた。光誘起相転移のダイナミクスが実験から明らかになり、特にその分解能が高まるにつれて、対応する理論も統計的なものから、相互作用する電子を直接扱うものまで発展してきた。また、実験で観測されている対象の電子的な次元性や相関、時間スケールに応じて、方法論も多様である。

研究の初期には、実験の測定の分解能がナノ秒程度だったこともあり、理論的な描像は統計力学に基づくものだった。とりうる局所的な状態をたとえば2つに限ると、基本的にイジング模型に帰着する。状態変化は遷移確率で表わされるが、最終的に熱平衡状態に落ち着くために、詳細釣り合いを満たさなければならない。そのような遷移確率をいかに選ぶか、という問題になる。

最近、実験の測定の分解能が（測定手段に大きく依存するが）10フェムト秒程度にまで向上し、理論的な描像が密度汎関数理論あるいは遍歴電子系の模型理論に基づくものが多い。最も直接的な方法は、時間依存シュレディンガー方程式を解くもので、光照射前の初期状態がひとつの波動関数（たとえば基底状態の波動関数）として表せるときに有効である。物理量や相関関数の時間変化を直接計算することができる。説明したい現象や電子相関に応じて、波動関数に近似を導入することもできる。

以上は、レビュー記事 [1] に紹介したので、今回は以下に焦点をあてる。国内外を問わず、これまで最もよく使われてきた方法は、密度の時間変化を模型ハミルトニアンで記述するものである。論文はとても多く、最近、強磁性半導体 [2] や、d波超伝導体 [3] に応用されている。初期状態がひとつの波動関数で表せないとき、たとえば有限温度で有効になる。環境との結合を考慮すると、緩和や散逸も扱える。方程式を閉じるため通常は近似を使うので、電子相関が強いときには用いないほうが安全だが、利便性ゆえに使われることもある。したがって注意が必要である。

参考文献

- [1] K. Yonemitsu and K. Nasu, Phys. Rep. **465** (2008), 1.
- [2] J. Chovan and I. E. Perakis, Phys. Rev. B **77** (2008), 085321.
- [3] J. Unterhinninghofen, D. Manske and A. Knorr, Phys. Rev. B **77** (2008), 180509(R).

¹次世代スパコンプロジェクト「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」により支援されている。

²E-mail: kxy@ims.ac.jp