

二次元有機導体における電荷秩序の光誘起融解の理論

分子研、総研大、CREST・JST 田中康寛¹, 米満賢治

擬二次元有機導体 θ -(BEDT-TTF)₂RbZn(SCN)₄ (θ -RbZn) と α -(BEDT-TTF)₂I₃ (α -I₃) の電荷秩序に対する光照射の効果を、時間依存シュレディンガー方程式を数値的に解くことにより調べた。両物質は、異方的三角格子の構造を持つ 1/4 フィリングの系であり、 θ -RbZn では低温で大きな格子歪みを伴ったストライプ型の電荷秩序が観測されている。また α -I₃ も同様なストライプ型の電荷秩序が観測されているが、高温相での結晶の対称性は θ 型塩よりも低く、金属状態ですでに電荷の不均化が生じており、相転移に伴う格子歪みは小さいことが知られている。

最近、これらの物質で光照射による電荷秩序の融解が調べられ、両者が同様な空間パターンの電荷秩序を持つにも関わらず、異なるダイナミクスを示すことが明らかにされた [1]。具体的には、 θ -RbZn では光誘起された金属ドメインは小さく、超高速に電荷秩序へと移行するのに対し、 α -I₃ ではそれが巨視的なサイズとなって臨界緩和的な振る舞いを示す。このことは、電荷秩序化の際に見られる特徴の違いがダイナミクスに顕著に反映されていることを示唆している。

そこで我々は、 θ -RbZn、 α -I₃ における光誘起ダイナミクスを調べることを目的に、格子歪みを考慮した拡張ハバードモデル [2,3] に、光照射の効果をパイエルス位相として取り入れたモデル

$$H = \sum_{\langle ij \rangle \sigma} ((t_{i,j} + \alpha_{i,j} u_{i,j}) e^{i \frac{e}{\hbar c} \delta_{i,j} \cdot \mathbf{A}(t)} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{\langle ij \rangle} V_{i,j} n_i n_j + \sum_{\langle ij \rangle} \frac{K_{i,j}}{2} u_{i,j}^2 + \sum_{\langle ij \rangle} \frac{K_{i,j}}{2\omega_{ph}^2} \dot{u}_{i,j}^2$$

を考え、平均場近似のもとで時間依存シュレディンガー方程式を数値的に解くことにより時間発展を計算した [4]。その結果、結晶構造の持つ対称性の違いと、電荷秩序化に対する格子歪みの重要性の度合いを反映して、両物質での電荷ダイナミクスには特徴的な違いが生じることが分かった。すなわち、 θ -RbZn では格子による安定化エネルギーが大きく、電荷秩序の融解と歪みの解消に必要な励起強度も大きい。一方、 α -I₃ では高温相での結晶の対称性が低く格子の寄与が小さいために、 θ -RbZn に比べて金属化に要するエネルギーも小さい。また、局所的な光照射をした際の金属的なドメインの成長にも顕著な違いが現れ、 θ -RbZn では α -I₃ よりもドメインの二次元的な広がりが抑制されることが分かった。これらのことは実験結果と対応していると考えられる。

[1] S. Iwai, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97** (2007) 097402.

[2] Y. Tanaka and K. Yonemitsu, J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 034708.

[3] S. Miyashita and K. Yonemitsu, J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 094712.

[4] Y. Tanaka and K. Yonemitsu, J. Phys. Conf. Series. **148** (2009) 012063.

¹E-mail: yasuihiro@ims.ac.jp