

## 研究 成 果 報 告 書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		有機強相関電子系における光誘起テラヘルツ電荷・格子ダイナミクスの生成と制御			
研究テーマ (欧文) AZ		Generation and control of photoinduced THz charge/lattice dynamics in organic strongly correlated electron systems			
研究氏 代 表 名 者	カタカナ CC	姓) マエシマ	名) ノブヤ	研究期間 B	2011 ~ 2013 年
	漢字 CB	前島	展也	報告年度 YR	2013 年
	ローマ字 CZ	Maeshima	Nobuya	研究機関名	筑波大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		筑波大学 数理物質系 物質工学域 ・ 講師			
<p>概要 EA (600 字～800 字程度にまとめてください。)</p> <p>近年、光誘起相転移(光照射によって誘起されるマクロな状態変化)が注目を集めている。特に最近では強相関電子系に対する光照射実験が活発に行われている。そのような系の一つに R-TCNQ (R=K, Rb など) がある。R-TCNQ は TCNQ 分子が積層した一次元構造を持つ有機電荷移動錯体であり、また、強い電子相関のためにモット絶縁体となっている。そして、低温においては、電子格子相互作用に由来するスピンパイルス不安定性のため、二量化相が実現している。この二量化相に光を照射して二量化を壊す実験的試みがこれまでに行われてきた。特に最近の実験において、光照射直後に電荷移動ギャップよりも低エネルギーにギャップ内吸収ピークが出現することが見出されたが、その起源については未だ解明されていない。そこで我々は、ギャップ内吸収ピークの起源に対する理論的解析を行った。</p> <p>模型として1次元拡張パイエルス-ハバード模型を採用し、格子自由度は断熱的に取り扱った。光励起直後に生成される正負自由キャリアはすぐに解離すると仮定して、その後生成されると考えられるポーラロン状態およびソリトン状態における光吸収スペクトルを求めた。また、数値計算には(動的)密度行列繰り込み群を用いた。その結果、ポーラロン状態およびソリトン状態において、ギャップ内吸収ピークを見出した。さらにそれらのピークに対応する状態に対する解析から、ポーラロン状態、ソリトン状態における格子歪みの中心近傍での電荷励起が原因となっていることが分かった。実験との詳細な比較から、R-TCNQ においてはポーラロン状態が光励起直後に形成されていることを示した。</p> <p>上記の結果は、光励起直後において既に電子と格子自由度が結合した状態が形成されていることを示している。よってこの状態を更に外場などで制御するなどの更なる発展が期待される。</p>					
キーワード FA		強相関電子系	光誘起相転移		

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA									
研究機関番号 AC					シート番号									

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）										
雑誌	論文標題 <sub>GB</sub>	Optical Response of Polarons and Solitons in One-Dimensional Peierls- Hubbard Model								
	著者名 <sub>GA</sub>	N. Maeshima, K. Moriya, and K. Hino		雑誌名 <sub>GC</sub>	Journal of the Physical Society of Japan					
	ページ <sub>GF</sub>	104708_1~104708_7		発行年 <sub>GE</sub>	2	0	1	2	巻号 <sub>GD</sub>	81
雑誌	論文標題 <sub>GB</sub>	Dynamical properties of photogenerated polarons in one-dimensional dimerized Mott Insulators								
	著者名 <sub>GA</sub>	K. Moriya, N. Maeshima and K. Hino		雑誌名 <sub>GC</sub>	The European Physical Journal B					
	ページ <sub>GF</sub>	85_1~85_4		発行年 <sub>GE</sub>	2	0	1	2	巻号 <sub>GD</sub>	85
雑誌	論文標題 <sub>GB</sub>									
	著者名 <sub>GA</sub>			雑誌名 <sub>GC</sub>						
	ページ <sub>GF</sub>	~		発行年 <sub>GE</sub>					巻号 <sub>GD</sub>	
図書	著者名 <sub>HA</sub>									
	書名 <sub>HC</sub>									
	出版者 <sub>HB</sub>			発行年 <sub>HD</sub>					総ページ <sub>HE</sub>	
図書	著者名 <sub>HA</sub>									
	書名 <sub>HC</sub>									
	出版者 <sub>HB</sub>			発行年 <sub>HD</sub>					総ページ <sub>HE</sub>	

#### 欧文概要<sub>EZ</sub>

Photoinduced phase transitions (PIPTs), macroscopic changes of electronic states induced by the photo-excitation, have been attracted much attention, and recent experimental effort has been particularly devoted to investigate PIPTs of strongly correlated electron systems. An organic material R-TCNQ (R=Rb or K) is a typical example of strongly correlated electron systems which show PIPTs and related phenomena. R-TCNQ is a kind of organic charge-transfer complexes with the one-dimensional (1D) structure constructed by stacked TCNQ molecules. The material is a Mott insulator because of strong on-site Coulomb interaction within a TCNQ molecule. In addition, R-TCNQ displays a spin-Peierls transition because of finite electron-lattice interactions. Experimental studies have focused on the dimerized phase in low temperature. A recent experiment has shown that, in the photo-absorption spectrum, a novel midgap peak appears immediately after the photoexcitation, and its origin has not been clarified.

We investigate the origin of the midgap peak by a theoretical analysis of 1D Peierls- Hubbard model. We use the (dynamical) density matrix renormalization group method combined with the adiabatic approximation for lattice distortion. Based on an assumption that photogenerated carriers dissociate immediately, we calculate optical response spectra of polarons and solitons. Obtained numerical results demonstrate that there appear novel midgap peaks in optical response spectra of polarons and charged-solitons for large on-site Coulomb interaction  $U$ . The origins of these novel peaks are understood in terms of charge-transfer excitations within clusters for each states: a dimer in polarons and a pentamer in charged-solitons, both of which are located around the center of the relaxed lattice distortion. Our results show that photo-excitation immediately create an electron-lattice coupled state, which can be controlled by additional external fields.