

計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の
開発と応用

2016 年度採択研究代表者

2019 年度 実績報告書

岡本 博

東京大学大学院新領域創成科学研究科

教授

強相関係における光・電場応答の時分割計測と非摂動型解析

§ 1. 研究成果の概要

○ 位相制御パルス・極短パルス光の発生とポンプ-プローブ分光測定系の高度化

中赤外パルスの電場波形にそった物質の応答を検出するサブサイクル分光を行うには、次々に出射される中赤外パルスの位相の長時間安定化、及び、10 フェムト秒以下の極短パルスの発生が必要である。本測定系では、二段階の光路長フィードバック機構を導入するとともに、最適なフィードバックアルゴリズムを開発し、中赤外パルスの電場波形を 10 時間以上に渡り 1 フェムト秒以下に安定化することに成功した。本成果は、AIP Advances 誌に発表した。

○ 光/電場パルスで励起した強相関係の過渡光学スペクトル計測

本プロジェクトの計測研究では、1次元及び2次元モット絶縁体において光・電場応答データの蓄積を進めることに重点を置いて測定を進めてきた。具体的には、1次元モット絶縁体である有機分子性物質 ET-F₂TCNQ において、テラヘルツパルスによる電場変調反射スペクトルの測定を行い、励起子準位構造の解明に成功した。この成果は、Communications Physics 誌に公表した(代表的な原著論文②)。また、2次元モット絶縁体である銅酸化物に同じ手法を適用し、2次元系に特有の電荷-スピン結合に起因するスピン由来の励起子効果の存在を明らかにした。この成果は、Science Advances 誌に公表した(代表的な原著論文①)。さらに、新たに開発したテラヘルツパルスポンプ-中赤外プローブ分光測定系を用いて、1次元モット絶縁体 ET-F₂TCNQ のテラヘルツ電場効果を詳細に調べ、中赤外領域におけるドルーデ応答の検出により電場誘起絶縁体-金属転移を実証した。

○ 非平衡光学スペクトルの新しい理論解析手法の構築

本研究で開発する理論解析手法は、以下のように要約される。まず、小さいサイズの系において光励起後の多体電子波動関数の時間発展を厳密に計算する。その時間依存波動関数を、情報科学的あるいは統計数理的手法を用いて解析することにより、重要基底を抽出するとともに、現象の物理的描像を理解する。その情報をもとに、より大きなサイズの系の光学伝導度スペクトルの変化を導出し、実験結果の解釈に結びつける。2018 年度に引き続き、この方針に基づいて、1次元モット絶縁体における弱励起光学伝導度スペクトルについて、多体ワニア関数を用いた解析を進めた。まず、電荷モデルにおいて、オンサイト斥力(U)と最近接トランスファーエネルギー(T)の比(U/T)を変化させて光学伝導度を計算したところ、そのスペクトルは、U/T=5-10 の範囲でハバードモデルに密度行列繰り込み群(t-DMRG)法を適用して計算したスペクトルと一致した。これは、U/T=5 の中間領域までスピン電荷分離が成立しており、電荷モデルが有効であることを示している。この成果は、Phys. Rev. B 誌に公表した(代表的な原著論文③)。強励起光学伝導度スペクトルの解析については、同じ1次元モット絶縁体において、t-DMRG 法を用いたポンプ-プローブ分光実験で得られる過渡光学伝導度の計算を行い、32 サイトでのスペクトルの計算に成功した。また、ポンプ光により時間変化する波動関数の特徴を抽出するための新しい手法として、光励起後の波動関数の数理統計的解析手法の開発を行い、スピン電荷分離の破れが生じる過程に関して詳細な情報を得ることに成功した。これと並行して、機械学習を援用した解析手法の開発も進めた。具体

的には、波動関数の情報を「画像」とみなして波動関数の量子状態を判別するニューラルネットワークを構築し、それをポンプ光で励起された状態に適用する枠組みを構築した。

【代表的な原著論文】

1. T. Terashige, T. Ono, T. Miyamoto, T. Morimoto, H. Yamakawa, N. Kida, T. Ito, T. Sasagawa, T. Tohyama, H. Okamoto,
“Doublon-holon pairing mechanism via exchange interaction in two-dimensional cuprate Mott insulators”,
Science Advances **5**, eaav2187:1-8 (2019).
2. T. Miyamoto, T. Kakizaki, T. Terashige, D. Hata, H. Yamakawa, T. Morimoto, N. Takamura, H. Yada, Y. Takahashi, T. Hasegawa, H. Matsuzaki, T. Tohyama, and H. Okamoto,
“Biexciton in one-dimensional Mott insulators”,
Communications Physics **2**, 131:1-9 (2019).
3. S. Ohmura, A. Takahashi, K. Iwano, T. Yamaguchi, K. Shinjo, T. Tohyama, S. Sota, and H. Okamoto,
“Effective model of one-dimensional extended Hubbard systems: Application to linear optical spectrum calculations in large systems based on many-body Wannier functions”,
Phys. Rev. B **100**, 235134:1-15 (2019)

§ 2. 研究実施体制

(1) 岡本グループ

① 研究代表者: 岡本 博 (東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授)

② 研究項目

- ・位相制御パルス・極短パルス光の発生とポンプ-プローブ分光測定系の高度化
- ・光/電場パルスで励起した強相関係の過渡光学スペクトル計測

(2) 岩野グループ

① 主たる共同研究者: 岩野 薫 (高エネルギー加速器研究機構 研究機関講師)

② 研究項目

- ・非平衡光学スペクトルの理論解析手法の構築

(3) 高橋グループ

① 主たる共同研究者: 高橋 聡 (名古屋工業大学物理工学科 教授)

② 研究項目

- ・非平衡光学スペクトルの理論解析手法の構築

(4) 遠山グループ

① 主たる共同研究者: 遠山 貴巳 (東京理科大学理学部第一部 教授)

② 研究項目

- ・非平衡光学スペクトルの理論解析手法の構築