

物質工学理論グループ

1. メンバ

教授 日野 健一

准教授 小泉 裕康

准教授 全 暁民

助教 前島 展也 (2008年4月着任)

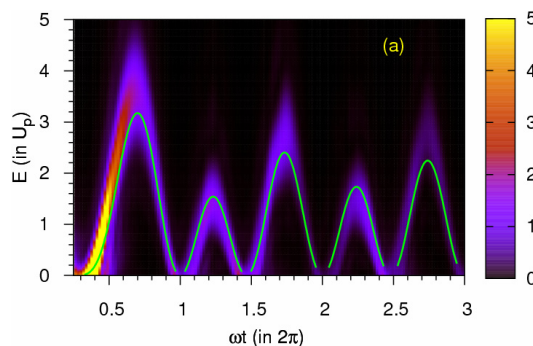
2. 概要

当グループは、光と物質の相互作用に起因する量子ダイナミクス・量子制御ならびに有機分子性結晶の光誘起相転移、銅酸化物の高温超伝導における強相関(電子相関、電子格子相互作用)を中心に理論研究を行っている。

3. 研究成果

【1】 強レーザー場と原子・分子の相互作用 (全、日野)

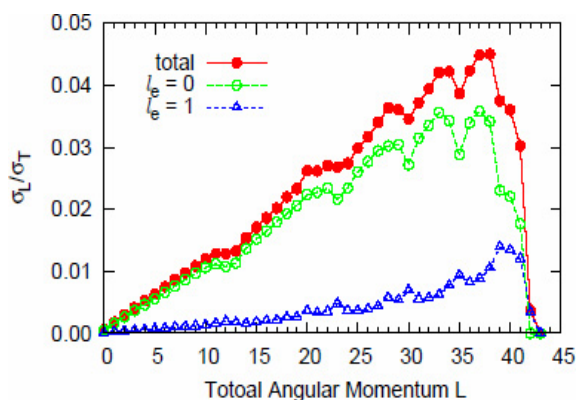
再散乱過程は強レーザー場と原子・分子相互作用の中で最も重要な過程である。電子が残留殻と再散乱する際のエネルギー分布は、既存の実験データの理解と将来な新たな実験の設定に対して、極めて重要な役割を担う。残念ながら、従来の理論計算の方法では、それらの物理量を精度よく評価することは不可



能だった。我々は新しい計算方法を開発し、初めて再散乱電子のエネルギー分布(図1)を得ることに成功した。その研究結果は Phys. Rev. Lett. 誌上に発表され、ドイツで開かれた原子分子光子衝突国際会議の招待講演にて報告された。

【2】 低速反陽子とヘリウム原子の衝突 (全、日野)

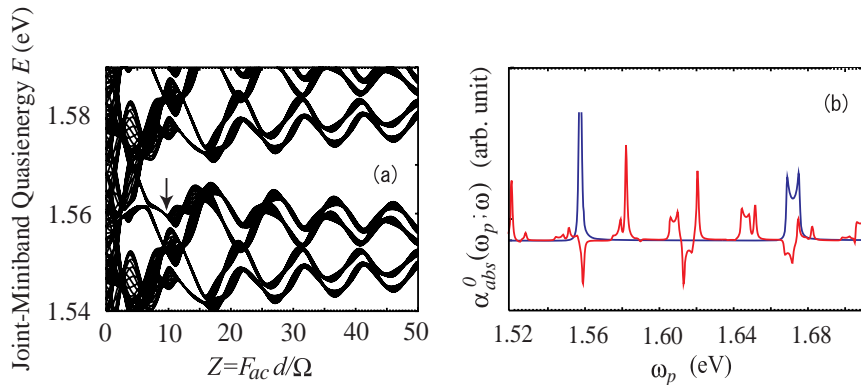
反陽子がヘリウム原子に捕獲される過程は反物質研究の重要な手段の一つである。反陽子は地球に自然な状態では存在しないので、実験は困難である。反陽子は高い励起状態に捕獲されるために、膨大な基底系を用意する必要があるので、精緻な理論計算も不可能だった。我々は反陽子と水素原子3体系の衝突計算方法を改良して、この系での詳細な捕獲情報を全部得る



ことに成功した。図に示したように、捕獲断面積が全角運動量に対して不規則に変動する新奇な現象を見出し、その起因も解明した。この結果は2008年10月の Phys. Rev. Lett. に発表予定である。また、同年11月にオーストラリアに開催されるアジア原子・分子国際会議の招待講演で発表予定である。

【3】 レーザー場下の半導体超格子の Floquet 状態 (日野、前島、全)

半導体超格子(GaAs/AlAs 系)に単色レーザーを照射すると、外場の時間周期性を反映して電子・正孔対と光が結合した Floquet 状態が形成される。超格子のミニバンド間の ac-Zener 効果が支配的な強レーザー領域では、(a)図のようにサイドバンド間の強い反交差によって複雑な擬エネルギー構造が発現することが分かった。そのような Floquet 状態のバンド間光吸収スペクトルを調べると、(b) 図のように、 $\omega_p=1.56, 1.61\text{eV}$ 近傍に強い負の吸収帯(optical gain)が現れることを見出した。

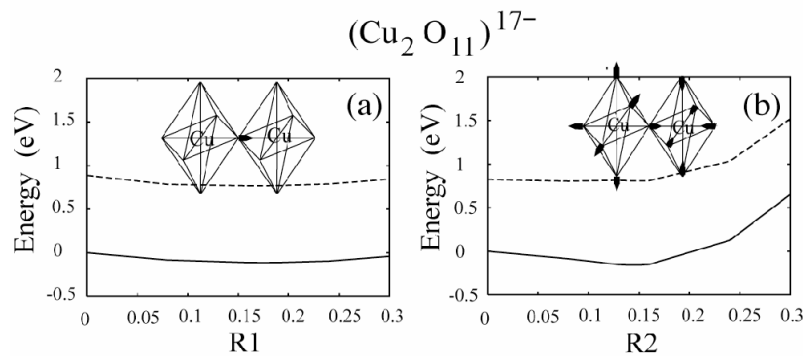


(a)電子・正孔対の擬エネルギーと(b) $Z=10$ (左図中の矢印)における Floquet 状態の光吸収スペクトル[赤線:ac-Zener 効果含む、青線:ac-Zener 効果含まず]

【4】 銅酸化物高温超伝導体 (小泉)

(1) 銅酸化物の分子軌道クラスター計算

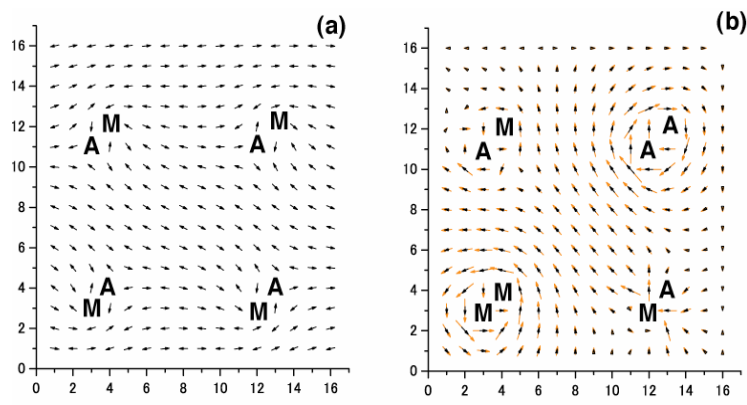
銅原子を2つ含むクラスターを結晶を模した環境に埋め込み、分子軌道計算を行った。それにより、EXAFSで測定された、Cu-O結合を再現できた。また、この系の電子-格子相互作用の強さが明らかになり、ドーパされたホールはスモールポーラロンを形成することが分かった。また、エネルギー損失関数の 0.9eV のピークがホールをドーパしたクラスターの基底状態から第一励起状態への励起エネルギーに対応することを見いだした。



ホールをドーパした銅クラスターの基底状態と第一励起状態に対するポテンシャル曲面

(2) スピン渦形成による、ループ電流の生成

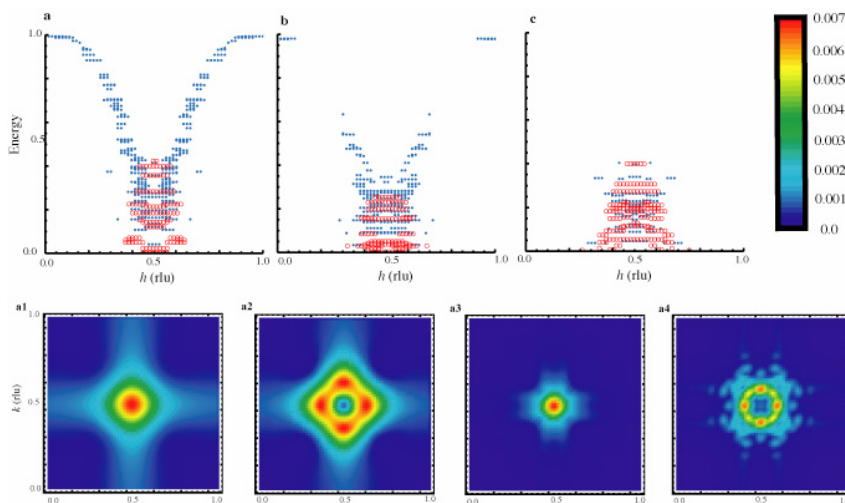
銅酸化物ではドーパされたホールがスモールポーラロンを形成することが上記の研究でかなり確実に became したが、このホールを核としてスピンの渦が形成される場合を考察した。この場合スピン渦から生じるベリ一位相が仮想磁場をもたらし、この仮想磁場によりループ電流が生じることを明らかにした。この電流生成機構は従来知られていない全く新しいもので、今後の発展が予想される。銅酸化物の異常な電気伝導現象はこのループ電流を基に解明される可能性が高いと考えられる。



(a)反強磁性スピン配列の中に出てきたスピン渦と(b)それによって生じたループ電流

(3) スピン渦形成によるあたらしいスピン波状態生成、砂時計型スピン波スペクトルの起原の解明

中性子散乱で観測された砂時計型スピン波スペクトルがスピン渦存在下でのスピン波から生じることを解明した。このスペクトルは、従来ストライプモデルで説明されて来たが、今回新たに発見した新しいスピン波状態による方が実験との一致が良いことを示した。このことにより、銅酸化物にスピン渦ができていたことが、かなり確実にとなった。



砂時計型スピン波スペクトルとエネルギー一定面でのスペクトルの断面

3. 研究業績

(1) 研究論文

1. Interacting dynamic Wannier-Stark ladder driven by a periodic pulse train, K. Hino, X. M. Tong and N. Toshima, Phys. Rev. B **77** (2008) 045322.
2. Direct time resolved observation of molecular dynamics induced by soft-x-ray photoionization, A. S. Sandhu, E. Gagnon, P. Ranitovic, X. M. Tong, C. L. Cocke, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, Journal of Physics: Conference Series, **88** (2007) 012037.
3. Computational methods in the laser-atom interactions, X. M. Tong, K. Hino, N. Toshima and J. Burgdorfer, Journal of Physics: Conference Series, **88** (2007) 012047.
4. Application of linear density response theory to electron-impact autoionizing resonances, X. M. Tong and T. Watanabe, Phys. Rev. A **76** (2007) 042715.
5. Soft X-ray driven femtosecond molecular dynamics, E. Gagnon, P. Ranitovic, X. M. Tong, C. L. Cocke, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn, and A. S. Sandhu, Science **317** (2007) 1374-1378.
6. Numerical Observation of the Rescattering Wavepacket in Laser-Atom Interactions, X. M. Tong, S. Watahiki, K. Hino and N. Toshima, Phys. Rev. Lett. **99** (2007) 093001.
7. Time-dependent approach to three-body rearrangement collisions: application to the capture of heavy negatively-charged particles by hydrogen atoms, X. M. Tong, T. Shirahama, K. Hino, and N. Toshima, Phys. Rev. A **75** (2007) 052711.
8. Alignment dependence of high-order harmonic generation from CO₂, A. T. Le, X. M. Tong, and C. D. Lin, Journal of Modern Optics **54** (2007) 967-980.
9. Two-copper-atom Units Induce a Pseudo Jahn-Teller Polaron in Hole-doped Cuprate Superconductors S. Miyaki, K. Makoshi, and H. Koizumi: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 034702.
10. Loop Current Excitations in Effectively Half-Filled Mott Insulators H. Koizumi: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 034712.
11. Spin-Wave Excitations in Effectively Half-Filled Mott Insulators H. Koizumi: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 104704.

(2) 学会発表

(A) 招待講演

1. Computational methods in the laser-atom interactions, X. M. Tong, K. Hino, N. Toshima and J. Burgdorfer, The 25th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Germany, 25-31 July 2007.

2. A new time-dependent scattering theory: application to the capture of antiprotons by hydrogen atoms and helium atoms, X. M. Tong, K. Hino, N. Toshima, Cold antimatter, plasmas and application to fundamental physics, Okinawa, Japan, 20-22 Feb. 2008

(B) その他の学会発表

1. Observation of rescattering wavepacket by quantum simulation, X. M. Tong, S. Watahiki, K. Hino and N. Toshima, The 25th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Germany, 25-31 July 2007.
2. Theoretical study on capture of antiprotons by helium atoms, X. M. Tong, S. Watahiki, K. Hino and N. Toshima, The 25th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Germany, 25-31 July 2007.
3. Theoretical study on state-specified capture of massive negatively-charged particles by hydrogen atoms, X. M. Tong, S. Watahiki, K. Hino and N. Toshima, The 25th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Germany, 25-31 July 2007.
4. State specified capture cross sections of antiprotons by hydrogen atoms, X. M. Tong, K. Hino and N. Toshima, The 20th International Symposium on Ion-Atom Collisions, Crete, Greece, 1-4 Aug. 2007.
5. Strong hole-lattice interaction, spin vortex formation, and spin wave spectrum in Cuprates : Hiroyasu Koizumi, XIX International Symposium on the Jahn-Teller Effect, Heidelberg, Germany, August 2008.