

光が引き起こす遷移金属中の超高速な電子の局在化現象の観測に成功

研究成果のポイント

1. 光パルスが引き起こす遷移金属の光吸収特性の変化を、アト秒(10の18乗分の1秒)の時間精度で測定することに成功しました。
2. 第一原理シミュレーションにより、この光吸収変化が遷移金属内部で電子が超高速に局在化していることに起因していることを明らかにしました。
3. この知見は、将来期待される、光によって物質の性質を超高速制御するための基盤となるものです。

国立大学法人筑波大学計算科学研究センター 佐藤駿丞助教は、マックスプランク物質構造ダイナミクス研究所理論グループ、及びチューリッヒ工科大学の超高速レーザー物理グループとの共同研究により、パルス光が遷移金属薄膜に引き起こすアト秒(10の18乗分の1秒)時間スケールの超高速な光吸収特性の変化を測定することに成功しました。

本研究では、スーパーコンピュータを用いた第一原理計算により、測定された超高速な光吸収特性変化が、電子が物質内で空間的に局在することに起因していることを明らかにしました。この成果は、光と物質の相互作用に関する基礎的知見を与えるもので、光により物質の性質の超高速制御を実現するための基盤となるものです。

本研究の成果は、2019年8月5日付「Nature Physics」誌で公開されました。

研究の背景

私たちの身の回りの物質は、正の電荷を持った原子核と負の電荷を持った電子から成っており、アルミニウムなどの金属中では、電子が原子核の束縛を逃れて自由に移動することができます。このような電子は「自由電子」と呼ばれ、金属の伝導性の起源となっています。一方で、チタン(Ti)やジルコニウム(Zr)などの遷移金属中では、一部の電子は原子核の束縛から完全には逃れられず、原子核の周りの空間的に狭い領域に局在しています。この電子の空間的な局在性が電子同士の相互作用を強めることに起因して、高温超電導や金属-絶縁体転移などの様々な興味深い物質の性質が発現することが知られています。

本研究では、このような電子の空間的な局在性を持った遷移金属に光パルスを照射することによって、物質中の電子がどのように応答するのか、また物質の性質がどのように変化するのかを、理論グループと実験グループの密接な協力により探求しました。

研究内容と成果

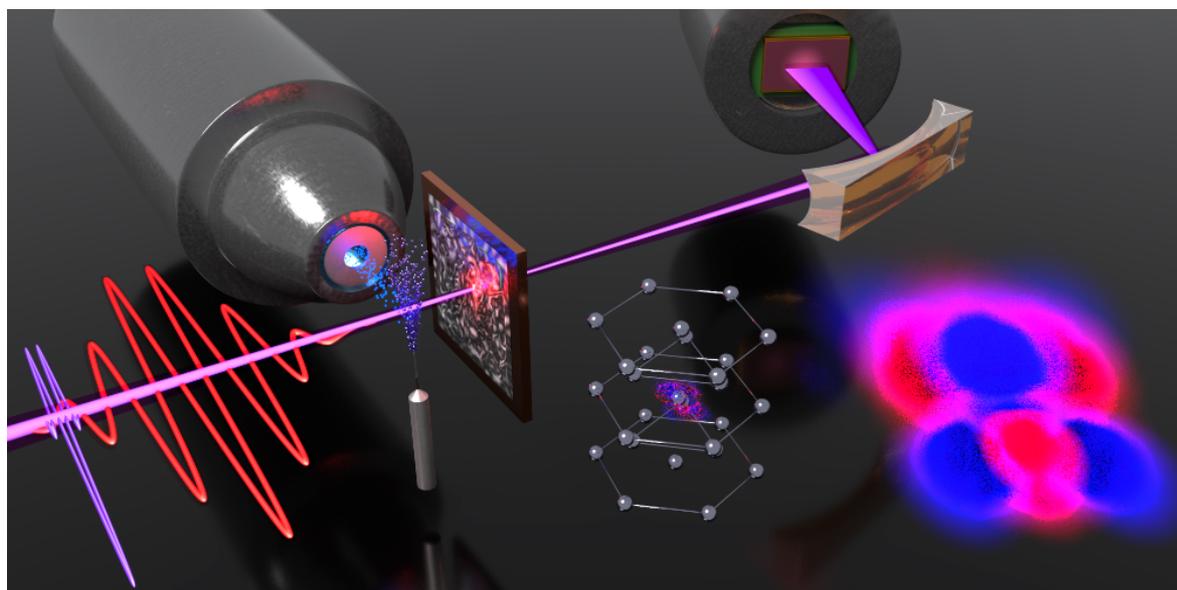
本研究では、二つの光パルスを、厚み50から100ナノメートルのチタン(Ti)薄膜、及びジルコニウム(Zr)薄膜に照射する実験を行いました(参考図)。一つ目の光パルスは赤外光から成る数フェムト秒(10の15乗分の1秒)の時間幅を持ち、遷移金属試料を励起する役割を持っています。また、二つ目の光パルスは極端紫外光から成る数百アト秒の時間幅を持ち、一つ目の光パルスで励起された試料の光吸収特性を、アト秒の時間分解能で測定するために用いられます。この実験の結果、赤外光パルスを照射された遷移金属試料の光吸収特性がアト秒の時間スケールで変化していることを見出しました。

さらに、遷移金属の超高速な光吸収特性変化の起源を明らかにするために、スーパーコンピュータを用いた第一原理シミュレーションにより、赤外光がチタン試料内部に引き起こす電子の運動を詳細に調べました。その結果、実験で観測された超高速な光吸収特性変化は、光によって電子が遷移金属原子の周りに局在化していること、および物質内部での微視的な遮蔽効果が増加することによって起こっていることが明らかになりました。

今後の展開

本研究は、光パルスによって遷移金属内部での電子の局在性を増強することで、物質の光学的な性質を超高速に変化させることが可能であることを明らかにしました。ここで得られた知見は、光によって物質中の電子の運動を超高速制御するための基盤となるものであり、様々な物質の性質を超高速に光制御するための重要な一歩となる成果です。

参考図



二つの光パルス(赤と青の波形)がチタン薄膜へ照射される様子の模式図。図中央にはチタンの結晶構造が示されており、図右には光パルスが誘起する結晶内での電子密度の変化の様子が示されている。© Mikhail Volkov

掲載論文

【題名】 Attosecond screening dynamics mediated by electron localization in transition metals

(遷移金属中の電子局在が誘起するアト秒遮蔽ダイナミクス)

【著者名】 M. Volkov, S. A. Sato, F. Schlaepfer, L. Kasmi, N. Hartmann, M. Lucchini, L. Gallmann, A. Rubio, U. Keller

【掲載誌】 Nature Physics (DOI: 10.1038/s41567-019-0602-9)

問合わせ先

佐藤 駿丞（さとう しゅんすけ）
筑波大学 計算科学研究センター 助教

筑波大学計算科学研究センター広報・戦略室

TEL:029-853-6260

E-mail:pr@ccs.tsukuba.ac.jp