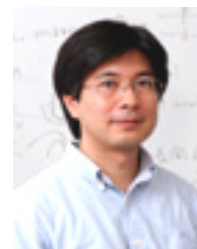


古崎物性理論研究室

Condensed Matter Theory Laboratory

主任研究員 古崎 昭 (博士 (理学))

FURUSAKI, Akira (Ph.D)



キーセンテンス：

1. 物質の普遍的な性質を理解する
2. 物質の多様性を理解する
3. 新しい物質相を見つける
4. 相転移現象を理解する

キーワード：

強相関電子系、磁性、超伝導、新奇量子秩序、量子相転移、メゾスコピック系、アンダーソン局在

研究概要

当研究室では、物質の示すいろいろな性質を、物質中の電子に対する基礎理論（量子力学や統計力学）にもとづいて理論的に解明することを目指して研究している。多数の電子が相互作用しつつ運動している多電子系では、自発的に対称性の破れた秩序相が低温で現れ、温度・磁場・圧力などの変化とともに相転移が起きる。遷移金属・希土類酸化物や分子性導体などの強相関電子系における超伝導や磁性がその典型例であり、これらの量子現象の普遍性と物質に即した多様性を研究する。

三角格子、籠目格子、パイロクロア格子上の反強磁性体などのフラストレーションの強い量子スピン系では、磁気秩序の形成が抑えられて非自明な秩序状態が生じる。その一例であるスピン液体、スピン・ネマティック相やカイラル秩序相の性質について研究している。また、局所的秩序変数をもたないトポロジカル秩序相や、量子（スピン）ホール系などのトポロジカル絶縁体やトポロジカル超伝導体に関する研究も行っている。

1. 擬1次元ジグザグ鎖における有限温度秩序 (佐藤、引原、桃井)

1次元ジグザグ鎖の絶対零度において、スピンネマティック朝永ラッティンジャー液体及びスピン密度波液体が現れることが示されている。有限温度において鎖間の相互作用により、どのようにスピンネマティック及びスピン密度波の相関が成長するかを、摂動的に有効ハミルトニアンを求めて解析した。スピン密度波は、鎖間相互作用の1次摂動で効いてくるのに対し、スピンネマティック相関は、2次摂動から作られる。その結果、多くの場合、鎖間相互作用の効果で、スピン密度波が強くなることが分かった。また、有限温度相図を、定量的に求めた。

2. スピン1/2フラストレート交替鎖のベクトルカイラル秩序 (上田、小野田)

擬一次元銅酸化物フラストレート磁性体の1つである $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ の基底状態は、スピギャップ相に属するとの予測はできるものの、その性質はよく理解されていない。そこでそのミニマルモデルとして、最近接相互作用に弱い交替をもった量子スピン1/2フラストレート交替鎖ジグザグモデルの基底状態を、密度行列繰り込み群法により解析した。その結果、非常に弱い交替を導入することで、交替の無い場合に広いパラメーター空間で存在したベクトルカイラル秩序が極めて抑制され、XXZ容易面異方性が弱

い領域でHaldane-dimer 秩序が、強い領域でeven-parity dimer 秩序がそれぞれ発現することを確認した。

3. 非整合周期をもつ行列積状態の量子スピン系への応用 (上田)

実空間で非整合周期を有するスピン回転演算子と空間的に一様な行列積状態 (MPS) を組み合わせることで、非整合周期をもつにもかかわらず熱力学的極限を直接的に取り扱える行列積状態を提案した。スピン相関に非整合周期が現れるスピン 1/2 ジグザグ鎖に対して、本研究で提案する非整合周期 MPS を適用した結果、行列積状態の自由度をわずかに増やすだけで、回転演算子の周期性がスピン相関の非整合周期性を特徴づける静的スピン構造因子のピーク位置に最適化されることが分かった。

4. 三角格子反強磁性体におけるマグノン凝縮相 (Marmorini, 桃井)

三角格子反強磁性体における飽和磁場近傍の磁性相を、希薄ボーズガスの理論を用いて解析した。フラストレーションのある系では、凝縮するマグノンの波数が複数あるため、どのような状態が実現するかは、マグノン間の相互作用に依存する。特に、三角格子上の J_1 - J_3 模型を調べ、2 つの波数の重ね合わせにより実現する非共面的なスパイラル状態の実現を見出した。また、飽和磁場直上では、状態に新たな縮退の出現に伴う連続対称性が現れることが分かった。

5. スピン二量体化合物における超固体相と異常な履歴現象 (山本)

三角格子スピン ($S=1/2$) 二量体模型における磁気相図の決定を行い、各相間の量子相転移現象について調べた。その結果、磁化 $M=1/3$ のプラトーにおいて 3 副格子固体秩序を持つシングレット-シングレットトリプレット状態が現れることが分かった。さらに、この状態から磁場を強くしていくとマグノンの Bose-Einstein 凝縮が起こり、対角 (固体) 秩序と非対角 (BEC) 秩序が共存する「超固体相」に相転移することを明らかにした。

6. パイロクロア格子上的トポロジカル磁気絶縁体 (小野田)

パイロクロア型イリジウム酸化物 $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ は、強相関電子系の新しいトポロジカル物質状態の研究に興味深い系である。我々は、 $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ に対する第一原理計算を遂行し、強束縛模型を導くとともに、対称性から許される電子間相互作用を平均場近似レベルで考慮に入れた。その結果、相互作用の結合定数の大きさによっては、基底状態がいくつかの磁気秩序、特に、一様磁化をもった、あるいは、持たない、ノンコリニア反強磁性を示す。さらに、結晶変数を変えるとバンド反転を起こし、磁気空間群で保護されたトポロジカル不変量をもつトポロジカル磁気絶縁体を実現される。

7. 単一成分分子性導体の電子状態 (妹尾)

同形構造をもつ単一成分分子性導体 $[\text{M}(\text{tmdt})_2]$ ($\text{M} = \text{Ni}, \text{Au}, \text{Cu}$) の電子状態を理論的に調べた。基底関数として分子軌道のフラグメントを考え、三つの化合物に共通の多軌道モデルを構築した。第一原理計算から強束縛パラメータを見積もり、電子構造の系統的理解を得た。二つの配位子上の $\text{p}\pi$ 型軌道と金属サイトに中心を持つ $\text{p}d\sigma$ 型の軌道との相互作用が重要な役割を果たす。磁気相転移を見せる $\text{M} = \text{Au}$ および Cu に関して多軌道ハバードモデルを平均場近似によって解析し、多軌道性を反映した多彩な磁気構造を予言した。

8. 分子性三角格子系 β' -X[Pd(dmit)₂]₂における電子状態の陽イオン依存性と有効モデル (妹尾)

同形構造を持つ分子性導体 β' -X[Pd(dmit)₂]₂の電子状態を、様々な陽イオンXについて系統的に調べた。第一原理バンド構造から三角格子上の強束縛モデルのパラメータを導出した。face-to-face配列方向の遷移積分が全ての陽イオンにおいて大きく、他の二方向の遷移積分はスピン液体挙動を見せる物質において同程度となる。また、フェルミエネルギー付近の波動関数においてdmit配位子間の電荷不均化を見せることもわかった。

9. 超流動ヘリウム 3-A 相におけるエッジマスカレントと巨視的角運動量 (堤)

超流動ヘリウム 3 のクーパー対は軌道角運動量を持つため、クーパー対の角運動量の向きが揃った A 相では巨視的角運動量が観測される可能性が指摘されている。本研究では、トポロジカル超流動体でもある超流動ヘリウム 3-A 相のエッジを流れるエッジマスカレントに注目し、巨視的角運動量とエッジマスカレントの関係を調べた。その結果、エッジ状態に束縛されたマヨラナ準粒子により運ばれるマスカレントの半分が、超流動ギャップ外の高エネルギー状態にある準粒子により打ち消されることが明らかとなった。打ち消されずに残る正味のエッジマスカレントによる角運動量を計算すると、クーパー対の巨視的角運動量として期待される値と一致しており、巨視的角運動量とエッジマスカレントに深い関係があることが予想される。

10. 重い電子系超伝導体UPt₃のギャップ関数の同定 (堤)

重い電子系化合物であるUPt₃の超伝導相の発見から 30 年近く経過するが、未だにギャップ関数が同定されておらず議論が続けられている。最近、磁場中での熱伝導率の測定によりab面内にギャップ関数の二回対称性が観測されたことを受けて、実験状況に即した理論計算を行い、スピン三重項f波のギャップ関数が実現していることを提唱した。このギャップ関数は、これまで示された数多くの実験結果のほとんどを説明することができる。このギャップ関数が実現しているとする、UPt₃はトポロジカル超伝導体としての性質を示すので、エッジ状態の研究への発展が期待できる。

11. 2層および3層グラフェン量子ホール系におけるファラデー回転 (森本)

2層および3層グラフェンについて強磁場下で光学ホール伝導度について調べた。光学ホール伝導度は実験的にはファラデー回転やカー回転により観測でき、DCで量子化するホール伝導度のAC版ともいえる物理量であり興味を持たれる。多層グラフェンにおいては、バンドの三角歪みと呼ばれる効果により低エネルギー(数 meV)にディラックコーンが現れること議論されているが、不純物の効果でマスクされるため静的なプローブで詳細に観測することには困難が伴う。我々は多層グラフェンの低エネルギーディラックコーンが光学応答に顕著な影響を与えることを示し、これにより三角歪みの効果を光学的な方法で観測する可能性について議論した。

12. 多層グラフェンにおけるゲート電場誘起ディラックコーン (森本)

グラフェンの興味深い物性は低エネルギーに実現するディラックコーンに起因する。多層グラフェンに垂直電場を印加することによって新たな低エネルギーのディラックコーンを誘起することができ、電場強度によりディラックコーンのエネルギー領域をチューンできることを示した。また3層グラフェンではバレーホール状態というKK'バレーでホール伝導度の異なる状態が実現しており、zigzagエッジに特徴的なヘリカルエッジモードがあらわれることを示した。

13. 光学カゴメ格子中 Fermi 気体における超流動流誘起の空間密度変調 (山本)

光学カゴメ格子中にトラップされた Fermi 気体の超流動性を調べた。我々は系に超流動流を課すことで、密度及び超流動秩序変数に空間変調が誘起されることを明らかにした。これはカゴメ格子の特徴的な幾何構造が超流動ペアの有効的ホッピングに異方性を与えることに由来するもので、他の格子(正方、立方、三角、蜂の巣など)では同様の現象は起こらない。さらに、カゴメ格子のフラットなバンド構造が超流動性を増進し、超流動転移温度・臨界流速ともに非常に大きい値になることも明らかにした。

14. ジョセフソン接合における擬スピン効果とソリトン (Marmorini)

擬スピン自由度の対称性が破れた 1 次元フェルミガスにおけるボゴリューボフ・ドジャン 方程式の解を実秩序パラメータおよび複素秩序パラメータについて調べた。特に、ジョセフソン接合に現れるねじれたキルク解及び、フェルミ超流動体におけるソリトンに注目した。擬スピンの任意の対称性の破れ方について秩序パラメータの厳密な形を求めた。

15. 朝永ラッティンジャー流体の低エネルギーフェルミオン励起 (古崎)

ギャップレス励起をもつ 1 次元強相関係の低エネルギー有効理論は朝永ラッティンジャー流体であることがよく知られており、その理論は自由ボゾン模型である。ギャップレス励起スペクトルの非線形性は繰り込み群で irrelevant な相互作用で表せるが、これはボズンをフェルミオンに変換することにより、弱く相互作用するフェルミオン系に写像することができる。このフェルミオン励起の寿命が励起エネルギーの 8 乗に逆比例することを示した。

Key Sentence:

1. Understand universal properties of materials
2. Understand diversities of materials
3. Find a new state of matter
4. Understand phase transitions

Key Words:

strongly-correlated electron systems, magnetism, superconductivity, novel quantum orders, quantum phase transitions, mesoscopic systems, Anderson localization

Outline

Main aims of our research are to discover theoretically novel properties of materials and understand them from microscopic theory (quantum and statistical physics). Many-electron systems go into ordered phases with spontaneous symmetry breaking at low temperatures. Typical examples are superconductivity and magnetism of strongly-correlated electron systems in transition-metal or rare-earth oxides and molecular conductors, and these are our major research subjects.

In strongly-frustrated quantum spin systems such as triangular, kagome, and pyrochlore antiferromagnets, exotic quantum states, instead of magnetic ordered states, are expected to

emerge. For example, we have recently studied spin liquids, spin nematic states, and chiral ordered states. Furthermore, we study states with some kind of topological order: topological insulators and superconductors.

1. Spin-nematic and spin-density-wave ordering in spatially anisotropic frustrated magnets (Sato, Hikihara, Momoi)

We have developed a microscopic theory of finite-temperature spin-nematic orderings in three-dimensional spatially anisotropic magnets consisting of weakly-coupled frustrated spin-1/2 chains with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor couplings in a magnetic field. Combining a field theoretical technique with density-matrix renormalization group results, we obtained finite-temperature phase diagrams in a wide magnetic-field range that possess spin-bond-nematic and incommensurate spin-density-wave ordered phases. The effects of a four-spin interaction are also studied. The relevance of our results to quasi-one-dimensional edge-sharing cuprate magnets such as LiCuVO_4 is discussed.

2. Vector chiral order in spin 1/2 frustrated chain with bond alternation (Ueda, Onoda)

We have investigated a ground-state phase diagram of a quantum spin 1/2 frustrated zigzag chain with a bond alternation numerically by using the density matrix renormalization group method. The model can be regarded as a minimal model of a quasi-one-dimensional copper oxide $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$. We have found that the weak bond alternation extends two spin gapped phases, the Haldane-dimer order phase and the even-parity dimer order phase, and suppresses the vector chiral order which robustly appears in the spatially uniform zigzag chain.

3. Incommensurate matrix product state for quantum spin systems (Ueda)

We have introduced a matrix product state with an incommensurate periodicity by applying the spin-rotation operator at each site to a uniform matrix product state in the thermodynamic limit. The relation is studied between the improvement of the variational method due to the spin-rotation transformations and the spontaneous symmetry breaking of the MPS. The optimized pitch of the rotational operator reflects the commensurate/incommensurate properties of spin-spin correlation functions in the spin-1/2 Heisenberg chain and the spin-1/2 ferromagnetic-antiferromagnetic zigzag chain.

4. Magnon condensation with degeneracy (Marmorini, Momoi)

We applied the theory of Bose-Einstein condensation of interacting bosons at low density to the analysis of the magnetic order of certain frustrated antiferromagnets near saturation field, where bosons are represented by magnons (quantized spin waves). Since frustration can yield a multiplicity of different magnon condensates (at different wave-vectors), the interaction among these can in turn determine an unconventional magnetic order. In particular our study of the J_1 - J_3 model on the triangular lattice indicates the presence of a new phase characterized by two wave-vectors but not coplanar in the case of finite interlayer coupling (J_0). On the other hand in the

purely two-dimensional case (vanishing J_0) we find that very (exponentially) close to the saturation field there emerges a symmetry enhancement (reminiscent of multi-species Bose gases with contact interaction in low dimensional continuum space) that makes a continuous family of phases degenerate.

5. Magnon supersolid and anomalous hysteresis in spin dimers on a triangular lattice (Yamamoto)

We studied the magnetic phase diagram and hysteresis behavior of weakly coupled spin dimers on a triangular lattice using the cluster mean-field method with cluster-size scaling. We found that the magnetization curve has plateaus at $1/3$ and $2/3$ of the total magnetization, in which local singlet and triplet states form a superlattice pattern. Moreover, with increasing (decreasing) the magnetic field from the $1/3$ ($2/3$) plateau, the Bose-Einstein condensation (BEC) of triplons occurs on the superlattice background, leading to the transition into “magnon supersolid” phase. We also found that the first-order transition between these solid states and the standard magnon BEC state exhibits an anomalous hysteresis upon cycling the magnetic field; the transition can occur only from solid to BEC, and the system cannot return to the initial solid state in the reverse process.

6. Topological magnetic insulators on the pyrochlore lattice (Onoda)

Pyrochlore iridium oxides $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ provide an interesting laboratory for studying new topological states of strongly correlated electrons. We have performed first-principles calculations for $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$, extracted a tight-binding model, and taken into account an electron-electron interaction that is allowed by the symmetry, in the level of a mean-field approximation. Then, depending on the coupling constants of the interaction, we have found that the ground state shows several magnetic orders, in particular, noncollinear antiferromagnetic states with and without the uniform magnetic moment. Furthermore, a change in the crystal parameters can induce a band inversion, leading to topological magnetic insulators where the topological invariants are protected by magnetic space group symmetry.

7. Electronic states of single-component molecular conductors (Seo)

Electronic states of isostructural single-component molecular conductors $[\text{M}(\text{tmdt})_2]$ ($\text{M} = \text{Ni}, \text{Au},$ and Cu) are theoretically studied. By considering fragments of the molecular orbitals as the basis functions, we construct a multi-orbital model common for the three materials. The tight-binding parameters are estimated from first-principles band calculations, leading to a systematic view of their electronic structures. We find that the interplay between a $p\pi$ -type orbital on each of the two ligands and a $pd\sigma$ -type orbital centered on the metal site plays a crucial role. For the magnetic materials ($\text{M} = \text{Au}$ and Cu), we take into account Coulomb interactions on different orbitals, i.e., consider the multi-orbital Hubbard model. Its ground state properties are calculated within mean-field approximation where various types of magnetic structures with different orbital nature are found.

8. Cation Dependence of the Electronic States in Molecular Triangular Lattice System

β' -X[Pd(dmit)₂]₂ (Seo)

Electronic structure of an isostructural series of molecular conductors, β' -X[Pd(dmit)₂]₂, is systematically studied theoretically. The first-principles band structures are fitted to the tight-binding model on the triangular lattice, where systematic variation in the anisotropy of the transfer integrals along the three directions is seen. The transfer integral along the face-to-face stacking direction is always the largest. Around the quantum spin liquid compound, the other two transfer integrals become comparable. We also see sensible differences in the distribution of wavefunctions near the Fermi level between the two dmit ligands.

9. Edge mass current and intrinsic angular momentum in superfluid helium 3 A-phase (Tsutsumi)

Since Cooper pairs in the superfluid helium 3 have orbital angular momentum, it is pointed out that intrinsic angular momentum by Cooper pairs can be observed in the A-phase in which directions of orbital angular momentum of Cooper pairs are aligned. We investigated the relation between the intrinsic angular momentum and edge mass current flowing at the edge of the topological superfluid helium 3 A-phase. Half of the edge mass current carried by Majorana bound states is canceled by that carried by quasiparticles in the continuum state outside the superfluid gap. Then, the value of orbital angular momentum by the net edge mass current corresponds to the macroscopically intrinsic angular momentum.

10. Identification of gap function of heavy-fermion superconductor UPt₃ (Tsutsumi)

Motivated by a recent angle-resolved thermal conductivity experiment that shows a twofold gap symmetry in the high-field and low-temperature C phase in the heavy-fermion superconductor UPt₃, we group-theoretically identified the pairing functions as the f-wave character for all the three phases. The pairing functions are consistent with a variety of previous observations. In the C phase, thermal conductivity data were analyzed to confirm the proposed gap structure. We also provided detailed comparisons of various proposed pair functions, by which it could be concluded that the present scenario is better than other scenarios and that UPt₃ is a candidate for a topological superconductor.

11. Faraday rotation in bilayer and trilayer graphene in the quantum Hall regime (Morimoto)

Optical Hall conductivity, as directly related to Faraday rotation, has been theoretically studied for bilayer and trilayer graphene. In bilayer graphene, the trigonal warping of the band dispersion greatly affects the resonance structures in Faraday rotation not only in the low-energy region where small Dirac cones emerge, but also in the higher-energy parabolic bands as a sequence of satellite resonances. We have found that, in ABA-stacked trilayer, the resonance spectrum is a superposition of effective monolayer and bilayer contributions with band gaps, while ABC trilayer exhibits a distinct spectrum peculiar to the cubic-dispersed bands with a strong trigonal warping, where the signals associated with low-energy Dirac cones should be directly observable owing to a large Lifshitz transition energy (~ 10 meV).

12. Gate-induced Dirac cones in multilayer graphenes (Morimoto)

We have studied the electronic structures of ABA (Bernal) stacked multilayer graphenes in uniform perpendicular electric field, and showed that the interplay of the trigonal warping and the potential asymmetry gives rise to a number of emergent Dirac cones nearly touching at zero energy. The band velocity and the energy region (typically a few tens of meV) of these gate-induced Dirac cones are tunable with the external electric field. In ABA trilayer graphene, in particular, applying an electric field induces a non-trivial valley Hall state, where the energy gap at the Dirac point is filled by chiral edge modes which propagate in opposite directions between two valleys. In four-layer graphene, in contrast, the valley Hall conductivity is zero and there are no edge modes filling in the gap. A nontrivial valley Hall state generally occurs in asymmetric odd layer graphenes and this is closely related to a hidden chiral symmetry which exists only in odd layer graphenes.

13. Flow-induced charge modulations in superfluid atomic fermions loaded into an optical Kagome lattice (Yamamoto)

We studied the superfluid state of atomic fermions in a tunable optical kagome lattice motivated by recent experiments. We found that imposed superflow induces spatial modulations in density and condensate order parameter and leads to a charge modulated superfluid state analogous to a supersolid state. The spatial modulations in the superfluid emerge due to the geometric effect of the kagome lattice that introduces anisotropy in hopping amplitudes of fermion pairs in the presence of superflow. We also studied superflow instabilities and found that the critical current limited by the dynamical instability is quite enhanced due to the large density of states associated with the flat band.

14. Spin imbalance effect on Josephson junctions and grey solitons (Marmorini)

In our study of exact solutions of the Bogoliubov-de Gennes equation of quasi-one dimensional superfluid/superconducting fermionic gas with (pseudo-)spin imbalance, after addressing the case of real order parameter (relevant to interesting states such as the Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinkov state), we turned to complex order parameters. In particular we focused on the “twisted kink” solution, relevant to Josephson junctions with arbitrary phase difference and with spin imbalanced and to grey soliton in atomic Fermi superfluids with population imbalance (whose experimental search is still ongoing). We found the exact form of the order parameter for arbitrary imbalance and determined the first corrections the quasiparticle spectrum in case of small imbalance

15. Low-energy fermionic excitations in Tomonaga-Luttinger liquids (Furusaki)

The low-energy effective theory for one-dimensional strongly-correlated systems with gapless excitations is a Tomonaga-Luttinger liquid, which is essentially a free boson theory. We make transformation of the low-energy bosons to fermions to include nonlinearity in the low-energy excitation spectrum. We have shown that the life time of the fermionic excitations is inversely proportional to the 8th power of their excitation energy.

Principal Investigator

古崎 昭 Akira Furusaki

Research Staff

桃井 勉 Tsutomu Momoi

小野田 繁樹 Shigeki Onoda

妹尾 仁嗣 Hitoshi Seo

Giacomo Marmorini

森本 高裕 Takahiro Morimoto

堤 康雅 Yasumasa Tsutsumi

上田 宏 Hiroshi Ueda

山本 大輔 Daisuke Yamamoto

Assistant and Part-timer

網代 雅代 Masayo Ajiro

Visiting Members

求 幸年 Yukitoshi Motome

有田 亮太郎 Ryotaro Arita

引原 俊哉 Toshiya Hikihara

是常 隆 Takashi Koretsune

大橋 琢磨 Takuma Ohashi

伊豆山 健夫 Takeo Izuyama

坂井 徹 Toru Sakai

久保 健 Kenn Kubo

常次 宏一 Hirokazu Tsunetsugu

二宮 正夫 Masao Ninomiya

進藤 龍一 Ryuichi Shindou

佐藤 正寛 Masahiro Sato

古川 俊輔 Shunsuke Furukawa

笠 真生 Shinsei Ryu

Konstantin Matveev

Christopher Mudry

Karlo Penc

Philippe Sindzingre

Nicholas Shannon