

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、マクロな大きさをもった物質の示すいろいろな性質を、ミクロな世界を司る物理法則（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导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。

ランダムなポテンシャル中の電子波動関数が示す局在・非局在転移（アンダーソン転移）は、乱れによって生じる量子相転移現象の一種である。この量子相転移の普遍的な性質についても研究している。

1. 磁場中三角格子古典ハイゼンベルグ模型の相転移（桃井、Sindzingre、Shannon）

磁場中三角格子古典ハイゼンベルグ模型は、約 30 年前に川村・宮下らにより相図の概略が明らかにされた。この系の相転移には、空間 Z_3 対称性とスピン $0(2)$ 対称性が顔を出す。この様な対称性の破れを伴う相転移の特性はほとんど研究が行われていなかった。我々は、古典モンテカルロ法とレプリカ交換法を用いて、相図と相転移の臨界特性を詳細に調べた。その結果、低磁場での有限温度相転移は、 Z_3 対称性の破れと $0(2)$ 対称性から来るコスイタリッツ-サウレス (KT) 転移が異なる温度で起こることが判明した。転移はそれぞれ、3 状態ポッツ模型と KT 転移のユニバーサリティークラスに属する。一方、高磁場では、 Z_3 対称性の破れと KT 型転移は同じ温度で起こる。この転移は、3 状態ポッツ型でも KT 転移でもない異常な臨界特性を示す。

2. 整数スピンパイロクロア磁性体に対する有効量子擬スピン 1/2 模型のゲージ理論（小野田）

$\text{Pr}_2\text{B}_2\text{O}_7$ (B=Zr, Sn, Hf, Ir) などのパイロクロア磁性体では、整数電子スピンをもつ希土類イオンが磁

性を担う。これらの系を記述する有効量子擬スピン 1/2 模型に対し、最近接スピンスピン系の巨視的に縮退した基底状態に量子力学的相互作用を導入する形式で、双対ダイヤモンド格子上的 U(1)ゲージ理論を構築し、平均場近似による解析を行った。その結果、磁化の単極子を運ぶ、閉じ込めから解放されたスピン 1/2 の準粒子 (スピノン) 励起、および、仮想的「量子電磁気学」と「光子」をもたらす U(1)量子スピン液体が安定となる領域を見出した。特に、U(1)対称な擬スピン交換相互作用が反強磁性的な場合に相図上の広範な領域で安定となる。また、U(1)スピン液体から強的・反強的四重極秩序相への相転移が、スピノンのボーズ凝縮による Higgs 相への閉じ込めによる 1 次相転移で記述される。

3. $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ の中性子磁気散乱の理論 (小野田)

パイロクロア量子磁性体 $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ の有効量子擬スピン 1/2 模型を特徴づける結合定数を、乱雑位相近似の範囲でスピン偏極磁気中性子散乱実験を全般的に説明するように求めた。特に、この系の高温常磁性相が、降温とともに pinch-point 特異性が発達する磁気クローン液体的振る舞いを有すること、および、[100]方向の磁化をもった強磁性基底状態が出現することを示した。両者間の相転移は 1 次の Higgs 転移として記述される。また、低温秩序相におけるスピン励起スペクトルを計算した。それは、Higgs 質量に対応するエネルギーギャップをもったスピン波で記述される。

4. $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ の平均場理論と U(1)スピン液体基底状態出現の理論予測 (小野田)

$\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ に対する有効量子擬スピン 1/2 模型を微視的に導出し、平均場近似から $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ が U(1)スピン液体の基底状態を示すことを理論的に予測した。一方、 $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ と $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ は磁気モーメントが <111>方向に垂直に配列した反強磁性状態に 2 次相転移するという、実験結果と符合する理論計算結果を得た。また、この反強磁性相におけるスピン波励起スペクトルを計算し、中性子散乱による詳細な検証を可能にした。これにより、類似した有効量子擬スピン 1/2 模型で記述される希土類パイロクロア磁性体の物質群の磁性が、系統的に理解されると期待される。

5. MDT 系の非整合反強磁性状態 (妹尾、大塚)

MDT-TSF 分子および関連分子(ここでは MDT と略して総称)からなる非整合なフィリングを持つ 2 次元分子性導体系における非整合反強磁性状態についての解析を行った。これらは MDT と閉殻 1 価陰イオンが 2:1 近傍の非整合比率にて結晶を形成するため、MDT 分子の HOMO バンドは 1/4 からずれた非整合のフィリングを持つ。そのうち(MDT-TS)(AuI_2)_{0.441} が低温で絶縁体となるメカニズムとして、以前に単純化した 1 次元モデルの解析から特異な「非整合モット絶縁体」を提唱した。本研究では、陰イオンからの周期的ポテンシャル δ 下での物質に即した 2 次元ハバードモデルを構築し、MDT 分子上のオンサイトクローン相互作用 U に関しては平均場近似を適用し磁気秩序について調べた。 U および δ が大きい領域において、MDT 分子の周期ではなく陰イオンの周期と合致した反強磁性絶縁体状態が安定化することを見出し、この状態は常磁性金属状態と電荷自由度の関しては対称性の破れはないため 1 次元モデルで得られた非整合モット絶縁体状態の拡張となっている。

6. TMTTF 系の相図の理解 (妹尾)

TMTTF 系の実験相図における複雑な電荷・スピン状態の理解を与えた。以前より多くの研究がされている擬 1 次元分子性導体 TM_2X ($\text{TM}=\text{TMTTF}$ および TMTSF , $\text{X}:1$ 価陰イオン)の相図において、近年電荷秩序および低温磁気状態について TMTTF 系にあたる低圧側への拡張が提唱された。この系では印

加圧力は主に鎖間遷移積分を相対的に大きくする役割として理解されていたが、この拡張においては基底状態が反強磁性相→スピンパイエルス相→反強磁性相と非自明なリエントラント挙動が見られ、従来の解釈では相変化は説明できなかった。これに対し、この系に特有の強誘電型電荷秩序を加味した上でそのスピン状態を考慮し、また格子自由度との結合も含めた拡張ハバードモデルに厳密対角化を適用して調べた。その結果、電荷秩序の安定化により反強磁性相関が増大されることを示し、上記の鎖間遷移積分にサイト間クーロン力を加えた 2 パラメータ平面で、両者の小さい領域でのみスピンパイエルス相が安定化することがわかった。これに、第一原理計算を用い $\text{TMTTF}_2\text{SbF}_6$ および $\text{TMTTF}_2\text{PF}_6$ の遷移積分を評価し圧力印加によるパラメータ変化を推定することで、実験で得られる複雑な磁気基底状態の圧力依存性を再現できることを示した。また、ダイマー間スピンフラストレーションの効果をもたらす、斜め方向の遷移積分の効果についても調べ、 $\text{TMTTF}_2\text{SbF}_6$ の電荷秩序相ではむしろ反強磁性秩序を安定化することを見出した。

7. 擬 1 次元電子系の電気、熱電、および、熱輸送現象の理論 (Akhanjee、小野田、古崎)

Hall 輸送現象において明瞭に Wiedemann-Franz 則を破ることを示した最近の実験を説明するため、擬 1 次元電子系の輸送現象を研究している。この法則によれば、金属の熱伝導と電気伝導に対する電子の寄与の比が、低温極限において温度と普遍定数である Lorenz 数の積で与えられる。この法則の破れは系が非フェルミ液体であることを示唆する。そこで我々は、1 次元 Luttinger 液体が鎖間電子ホッピングによって結合したモデルを考え、その電流および熱流の表式を計算し、相互作用と温度に依存した、電気、熱電、熱ホール輸送係数を計算する土台を与えた。

8. 三角光格子中の極性ボース気体の量子相 (山本)

近年、双極子モーメントが非常に大きい極性ボース冷却気体に関する実験が盛んに行われるようになってきた。我々は、この極性ボース気体をごく最近作成された三角光格子に充填した場合を考えた。この系には三角格子の形状と長距離相互作用によって強いフラストレーションが引き起こされる。我々のクラスター平均場近似を用いた解析から、この系の基底状態相図には異なるフィリングを持つ様々な固体相、また、それに付随する様々な超固体相が現れることが明らかになった。さらに他の系で見ついている従来の超固体相とは異なり、超固体 - 超流動間の相転移が一次相転移になることを示した。

9. リエントラント一次相転移における異常な履歴現象 (山本)

三角光格子中極性気体やスピン 1 ボース気体などの冷却格子気体系では、リエントランスを伴う一次相転移現象が理論的に予想されている。例えば立方格子中の反強磁性スピン 1 ボソンでは、超流動相 - モット絶縁相 - 超流動相の一次相転移が存在する。我々はこれらのリエントラント一次相転移における履歴現象を詳細に調べ、ヒステリシスループを伴わない新奇な振る舞いを示すことを明らかにした。この「異常な履歴現象」では、相転移の経路が初期状態に依存するだけでなく相転移の有無自体が初期状態に依存する。

10. 時間反転対称な拡張 Kitaev 模型 (仲井、笠、古崎)

Kitaev が構成したハニカム格子上の量子スピン模型は、スピン演算子をマヨラナ・フェルミオン演算子で表現することにより、自由なマヨラナ・フェルミオン模型に帰着する。我々は時間反転対称性を保ったまま Kitaev 模型を 2 次元正方格子上の量子スピン模型に拡張した。マヨラナ・フェルミオン表現

により、このモデルは2フレーバーの自由なマヨラナ・フェルミオンモデルとなり、さらに、時間反転対称な2次元トポロジカル超伝導体とみなすことができる。すなわち、系の内部の準粒子励起には超伝導ギャップが開いているが、系の端に沿って伝搬するギャップレスのマヨラナ・フェルミオンのクラマース対状態が存在する。

11. 2次元ディラック・フェルミオンの局在 (笠、Mudry, 古崎)

2フレーバーの2次元ディラック・フェルミオンに、時間反転対称でかつカイラル対称なランダム・ポテンシャルを摂動として加えたときのアンダーソン局在問題を調べた。ランダムな質量項やベクトル・ポテンシャル項の乱れの強さをパラメータとした有効場の理論に対して繰り込み群の解析を行い、相図を求めた。

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 of macroscopic scale and understand them from the physical laws that govern microscopic world. Many-electron systems go into ordered phases with spontaneous symmetry breaking at low temperatures. Typical examples are superconductivity and magnetism found in strongly-correlated electron systems like transition-metal or rare-earth oxides and molecular conductors, which 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.

We also study universal properties at localization-delocalization transition of electrons moving in random potential, which is a disorder-induced quantum phase transition.

1. **Phase diagram of the classical Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice in applied magnetic field** (Momoi, Shindzingre, Shannon)

The Heisenberg antiferromagnet on a two-dimensional triangular lattice is a paradigmatic

problem in frustrated magnetism. It is well known that three distinct phases, including a collinear one-third magnetization plateau, are stabilized by thermal fluctuations in applied magnetic field. After more than thirty years of study, many of the details of its phase diagram remain surprisingly obscure. We used modern Monte Carlo simulation techniques to determine the finite-temperature phase diagram of the classical Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice in applied magnetic field. At low to intermediate values of magnetic field, we find evidence for a continuous phase transition from the paramagnet into the collinear one-third magnetization plateau, belonging to the three-state Potts universality class. We also find evidence for conventional Kosterlitz-Thouless transitions from the one-third magnetization plateau into the canted “Y-state”, and into the 2:1 canted phase found at high fields. However, the phase transition from the paramagnet into the 2:1 canted phase, while continuous, does not appear to fall into any conventional universality class.

2. Gauge theory of effective quantum pseudospin-1/2 model for integer-spin pyrochlore magnets (Onoda)

In pyrochlore magnets such as $\text{Pr}_2\text{B}_2\text{O}_7$ (B=Zr, Sn, Hf, Ir), rare-earth ions having integer electronic spins are responsible for the magnetism. For the effective quantum pseudospin-1/2 model describing these systems, we have formulated a U(1) gauge theory on the dual diamond lattice by introducing quantum-mechanical interactions into degenerate ground-state manifold of nearest spin ice. Then, it has been analyzed by means of a mean-field approximation. We have found a region where the ground state is given by a U(1) quantum spin liquid hosting deconfined spin-1/2 quasiparticles (spinons) carrying monopole charges of magnetic moments, and harboring a fictitious “quantum electrodynamics” with “photons”. This state is stable in a rather wide region in the phase diagram, particularly when the U(1)-symmetric exchange interaction is antiferromagnetic. Phase transitions from the U(1) spin liquid to ferroquadrupole and antiferroquadrupole ordered phases are of first order and associated with a Bose condensation of spinons and a confinement to Higgs phases.

3. Theory of magnetic neutron scattering in $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ (Onoda)

The coupling constants of the effective quantum pseudospin-1/2 model for a quantum pyrochlore magnet $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ have been determined to explain overall results of polarized magnetic neutron-scattering experiments within the random phase approximation. In particular, we have shown that it exhibits a growth of pinch-point singularity on cooling in the high-temperature paramagnetic phase as an indication of a magnetic Coulomb liquid, and a ferromagnetic ground state with the uniform magnetization along [100]. The transition between the two phases is described as a Higgs transition of the first order. Besides, the spin excitation spectra in the low-temperature ordered phase have been calculated. They are characterized by the spin waves that have an energy gap corresponding to the Higgs mass.

4. Mean-field theory for $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$: a theoretical proposal of a U(1) spin liquid

ground state (Onoda)

Effective quantum pseudospin-1/2 models for $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ have been derived on a microscopic basis. It has been predicted theoretically from a mean-field approximation that $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ shows a U(1) spin liquid ground state. On the other hand, it has been shown that $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ and $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ undergo a second-order phase transition to an antiferromagnetic state with the magnetic moments aligned perpendicular to the $\langle 111 \rangle$ direction, which accounts for the experimental observations. Spin-wave spectra in this antiferromagnetic state have also been calculated. This theory can be tested in detail by neutron-scattering experiments. It is expected that the work provides a systematic understanding of the magnetism in the series of magnetic rare-earth pyrochlore oxides, which are described with analogous effective quantum pseudospin-1/2 models.

5. Incommensurate Antiferromagnetic State in MDT System (Seo, Otsuka)

We have investigated the incommensurate (IC) antiferromagnetic state in a two-dimensional molecular conductor system composed of MDT-TSF and related molecules (called MDT here), which have IC filling factors. These materials crystallize with IC ratio near 2:1 of MDT and closed-shell monovalent anion, giving rise to a HOMO band of MDT off 1/4-filling. Among them, as the mechanism of the low-temperature insulating behavior in $(\text{MDT-TS})(\text{AuI}_2)_{0.441}$, we have proposed the existence of a peculiar “IC Mott insulator” based on an analysis of a simplified one-dimensional model. In this study, we constructed a more realistic two-dimensional Hubbard model under the periodic potential δ from the anions, and sought for magnetic ordered states applying mean-field approximation to the on-site Coulomb interaction U , on MDT molecules. We find an antiferromagnetic insulating state in the large U and δ region, which does not match the periodicity of the MDT molecules but does that of the anions. This state does not show symmetry breaking in the charge sector from the paramagnetic metallic state therefore can be understood as the IC Mott insulating state seen in the one-dimensional model.

6. Understanding of Phase Diagram of TMTTF Systems (Seo)

We provided an understanding of the complex charge/spin states in the experimental phase diagram in TMTTF systems. On the phase diagram of the well-studied quasi-one-dimensional molecular conductors TM_2X (TM=TMTTF or TMTSF, X: monovalent anion), an extension to the low-pressure side corresponding to the TMTTF systems was recently proposed. In this system the role of applied pressure has been interpreted as to relatively increase the interchain transfer integrals, whereas it is hardly applicable to this extension, since there the ground state shows a non-trivial reentrant behavior as antiferromagnetic (AF) \rightarrow spin-Peierls \rightarrow AF phases. To resolve this problem, we investigated an electron-lattice coupled extended Hubbard model and considered its spin states taking into account of the ferroelectric-type charge ordering peculiar to this system. We find that the AF correlation enhances by the charge ordering, and that within the parameter plane of the interchain transfer integral and the intersite Coulomb repulsion the spin-Peierls phase is only stabilized when both are small. By estimations of the transfer integrals for $\text{TMTTF}_2\text{SbF}_6$

and $\text{TMTTF}_2\text{PF}_6$ within first-principles band structure calculations and deducing the variations under pressure we showed that the pressure dependence of the complex magnetic ground states seen in experiments can be reproduced. Moreover, we studied the effects of a diagonal transfer integral which acts as spin frustration between dimers, and found that it rather acts as enhancing the AF ordering in $\text{TMTTF}_2\text{SbF}_6$.

7. **Theory of electric, thermoelectric, and thermal transport phenomena in quasi-1D electron systems** (Akhanjee, Onoda, Furusaki)

We have been studying the transport properties of quasi-1D electron systems, to explain recent experiments that have demonstrated a violation of the Wiedemann-Franz law in the Hall geometry unambiguously. The law states that the ratio of the electronic contribution to the thermal and electrical conductivity of a metal is given by the temperature multiplied by a universal constant, the Lorenz number, in the low-temperature limit. A violation of this law implies that the system is a non-Fermi liquid. We have calculated both the electric and the thermal current operators for a model system consisting of 1D Luttinger liquids coupled with inter-chain hopping. The interaction and temperature dependent electric, thermoelectric, and thermal Hall conductivities are to be calculated on this basis.

8. **Quantum phases of dipolar Bose gases in a triangular optical lattice** (Yamamoto)

Experimental techniques for the preparation of ultracold gases with a strong dipole moment have been rapidly advanced over the last few years. We have considered a system of dipolar Bose gases loaded into a triangular optical lattice. Our cluster mean-field calculations showed that the ground-state phase diagram contains many different solid phases with different filling factors and the corresponding various supersolid phases. Additionally, we found that the supersolid-superfluid transition is first-order unlike that previously reported in other systems.

9. **Anomalous hysteresis accompanying re-entrant first-order phase transitions** (Yamamoto)

Some ultracold-gas systems such as triangular-lattice dipolar gases and spin-1 Bose gases are theoretically expected to exhibit “re-entrant” first-order phase transitions. For example, it is known that the antiferromagnetic spin-1 Bose-Hubbard model has a superfluid-Mott insulator-superfluid first-order phase transition. We have found that the hysteresis accompanying the re-entrant first-order phase transitions can show a particular behavior; the hysteresis curve does not form a “hysteresis-loop” structure unlike the case of the conventional first-order transitions. Moreover, the phase transition can occur only unidirectionally from one phase to the other along the anomalous hysteresis curve.

10. **Time-reversal invariant extension of Kitaev model** (Nakai, Ryu, Furusaki)

The Kitaev model on the honeycomb lattice is known to be reduced to a free Majorana fermion model by representing spin operators in terms of Majorana fermions. We have constructed an extended Kitaev model on the square lattice which preserves time-reversal symmetry. Our model is

equivalent to a tight-binding model of free two-flavor Majorana fermions and can be regarded as a time-reversal invariant two-dimensional topological superconductor. The quasiparticle excitations in the bulk have a superconducting gap while there exist a Kramers' pair of gapless Majorana fermion excitations propagating along the edge.

11. **Localization of Dirac fermions in two dimensions** (Ryu, Mudry, Furusaki)

The Anderson localization problem of two-flavor Dirac fermions in two dimensions is studied in the presence of random perturbations which have time-reversal and chiral symmetries. The phase diagram is obtained from renormalization-group analysis of an effective field theory with random masses and vector potentials.

Principal Investigator

古崎 昭 Akira Furusaki

進藤 龍一

Ryuichi Shindou

佐藤 正寛

Masahiro Sato

古川 俊輔

Shunsuke Furukawa

笠 真生

Shinsei Ryu

Research Staff

桃井 勉 Tsutomu Momoi

小野田 繁樹 Shigeki Onoda

妹尾 仁嗣 Hitoshi Seo

Shimul Akhanjee

大塚 雄一 Yuichi Otsuka

山本 大輔 Daisuke Yamamoto

Students

仲井 良太 Ryota Nakai

Assistant and Part-timer

網代 雅代 Masayo Ajiro

Visiting Members

前川 禎通 Sadamichi Maekawa

求 幸年 Yukitoshi Motome

有田 亮太郎 Ryotaro Arita

引原 俊哉 Toshiya Hikihara

是常 隆 Takashi Koretsune

Konstantin Matveev

Christopher Mudry

Karlo Penc

Philippe Sindzingre

小布施 秀明 Hideaki Obuse

内海 裕洋 Yasuhiro Utsumi

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

Nicholas Shannon

Jaime Merino