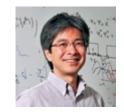
## 古崎物性理論研究室

#### 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、トポロジカル絶縁体

#### 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、トポロジカル絶縁体やトポロジカル超伝導体を含む、対称性によって守られたトポロジカル相に関する研究も行っている。

# 1. 多体系の Chern 数,回転対称性,粒子数の間に成立する普遍的な関係式(塩崎)

量子化された Hall 伝導度に対して、任意の相互作用系において成立する関係式を導いた。多体の Chern 数をある整数で割った余りの値が、基底状態における回転演算子の期待値及び単位格子当たりの 粒子数によって決まることを示した。また、磁気フラックスの存在下においても同様の関係式を導いた。

## 2. トポロジカル絶縁体表面上のマヨラナ・ストライプ秩序(紙屋、古崎)

超伝導体の近接効果の下にあるトポロジカル絶縁体表面上では、磁場によって誘起されたアブリコソフ渦中にマヨラナ粒子が現れる。我々はこのような系におけるマヨラナ粒子間の相互作用効果を調べた。我々のモデルは強結合極限において局所的な相互作用のみからなる量子スピン系にマップできる。この量子スピン系に対しては、負符号問題を引き起こすことなく量子モンテカルロ法を適用することができる。我々は正方格子上の相互作用マヨラナ粒子系が自発的に並進・回転対称性を破り、マヨラナ・ストライプ秩序という新規な状態を実現することを示した。

## 3. 量子スピンアイス接合を介した磁気モノポール超流動流(中河西、小野田)

量子スピンアイスと呼ばれている物質では、U(1)格子ゲージ理論で記述される仮想的な量子電磁気学

が顕在化するとともに、量子化された磁気モノポールが出現する。この理論のクーロン相に対応する U(1)量子スピン液体( $\Pr_2 Z_{r_2} O_7$ など)においては、磁気モノポールは閉じ込めから解放され、U(1)ゲージ場と結合した、ボーズ粒子スピノンとして振る舞う。また、 $\operatorname{charge-1}$  Higgs 相( $\operatorname{Yb_2Ti_2O_7}$ など)においては、磁気モノポールはボーズ凝縮して長距離磁気秩序を形成する。この場合、磁気モノポール およびゲージ場は遮蔽される。そこで我々は量子スピンアイス系の接合を理論的に考察した。特に、2 つの Higgs 強磁性相が U(1)量子スピン液体相との界面を介して弱く結合している接合系において、接合面に平行に電圧を印加することで、接合の両側のモノポールに位相差が発生し、接合を介して磁気モノポール超流動流が流れることを明らかにした。これは散逸を伴わない磁性制御のためのスピノニクス という新しいパラダイムへ道を拓く新しい現象である。

# 4. Rb<sub>2</sub>Cu<sub>2</sub>Mo<sub>3</sub>O<sub>12</sub>における Haldane スピンギャップと強誘電性(小野田)

擬一次元スピン 1/2 磁性体  $Rb_2Cu_2Mo_3O_{12}$ が、非磁性四量体基底状態、および、スピン一重項短距離 RVB で結合したスピン 1 対が形成する Haldane スピンギャップをもつという証拠を、理論・実験の両方から得た。非弾性中性子散乱と電子スピン共鳴実験で 3 つの低エネルギー励起が観測された。これらの 3 つの励起は、スピン 1 三重項が Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用によって分裂したモードであると理論的に同定された。さらに、スピンギャップを閉じるための磁場よりも 2 桁小さな磁場を印加するだけで、強誘電性が出現することが分かった。実験的に観測された磁気的性質のすべてが、フラストレートしたスピン 1/2 鎖が反強磁性的に結合した 2 本ラダー模型から数値的に説明された。スピンギャップをもった状態での磁気強誘電性の発見は、ベクトルスピンカイラリティーが秩序を示すが、スピンは秩序を示さないという長年探索されてきたシナリオを浮き彫りにしている。

# 5. 三脚カゴメ磁性体の理論 (Benton)

最近、カゴメ格子を有する新しいクラスの希土類磁性材料が発見された。これらの「三脚カゴメ」材料は、強力なスピン軌道結合とフラストレーションを含む幾何学的な格子形状の効果により、新奇な興味深い磁気基底状態を作り出す。我々は対称性の議論からこれらの物質を記述する一般的なハミルトニアンを導き出し、その相図を決定した。この相図は、いくつかの異なる三脚カゴメ材料の低温特性を説明する。 例えば、 $Mg_2Yb_3Sb_3O_{14}$ の場合、トポロジカルに非自明なバンド構造および関連するカイラル端モードを有する励起の存在を予言した。

# 6. Prベースのパイロクロア磁性体 Disorder in Pr-based quantum spin ice systems (Benton)

 $Pr_2Zr_2O_7$ や  $Pr_2Hf_2O_7$ のような Pr ベースのパイロクロア磁性体は、U(1)量子スピン液体の候補物質として盛んに研究されてきた。最近の研究は、これらの系が結晶場の低エネルギー状態でランダムな分裂を引き起こす構造的乱れによって強く影響されることを明らかにした。この種の乱れに対する U(1)量子スピン液体状態の安定性を決定することは重要な問題である。摂動理論から安定性の限界を導出すると、 $Pr_2Zr_2O_7$ および  $Pr_2Hf_2O_7$ の現在の試料は、スピン液体領域の外にあるようであるという結論に至った。

## 7. パイロクロア格子におけるネマティック量子スピン液体 (Benton)

パイロクロア格子上のS = 1/2XXZモデルは、スピンアイス系における量子効果を調べるための最小モデルである。横方向のXY交換相互作用がフラストレートしたイジング相互作用に比べて弱い場合、

このモデルはギャップのない光子励起を伴う U(1)スピン液体相を有することが知られている。しかしながら、XY 相互作用が強い場合はあまりよく解っていない。我々は、この問題を解明するために数値計算法と解析計算法を組み合わせ、フラストレートした横方向の交換相互作用の強い極限において、隠れたネマティック秩序を有する新しい種類の量子スピン液体を発見した。

# 8. カゴメスピン液体に対する Dirac composite fermion 理論 (藤)

カゴメ反強磁性体は量子スピン液体であると信じられているが、対応する理論の微視的な導出は困難な問題である。我々は、スカラーカイラル相互作用のあるカゴメ格子上のスピン模型を考え、Ising 極限において問題をボゾンの格子ゲージ理論に帰着させた。このボゾン模型はゲージ平均場近似の範囲内で、弱く結合したボゾン鎖の極限ではボゾン化の方法により解くことができる。さらにボゾン・フェルミオン双対性を使うことで、ボゾン模型はゲージ場と結合した2成分Diracフェルミオンの2個のコピーで記述されることがわかる。この結果から、元のスピン模型の低エネルギー有効理論がゲージ場と結合した4成分Diracフェルミオンで記述されるギャップレススピン液体であることを得た。

# 9. カゴメ反強磁性体の磁化プラトーと超固体相 (Plat, 桃井)

磁場中のカゴメ格子 Heisenberg モデルは、磁化 m=1/3, 5/9 および 7/9 で磁化プラトーを有する。プラトー相のスピン状態はこれまでの研究から、全てで結晶構造を有することが知られている。しかし、それらの相の間の領域についてはあまり知られていない。最近の数値的研究は、超固体相がプラトーの下の磁化領域に存在する可能性があることを示唆する。我々は、この領域に超固体相が出現するシナリオを提案した。まず、プラトー相の不安定化を引き起こすマグノン励起を摂動的に調べた。不安定性は固体の秩序は保存しつつ、同時に超流動成分を誘起し、その結果、超固体相がプラトー相に隣接して現れる。マグノン相互作用を含む有効なモデルを摂動計算により導出し、平均場解析を適用することにより、超固体相において出現するスピン構造を明らかにした。

#### 10. 2 次元スピンレスフェルミオン系の Density matrix embedding theory による解析 (Plat)

密度行列埋め込み理論(DMET)は、最近、電子システムをシミュレートするために提案された数値計算法である。この方法は元のハミルトニアンを不純物モデルに射影することに基づいている。 DMET の効率は、これまでにいくつかのハバードモデルにおけるエネルギーおよび局所相関の計算によってのみ調べられた。この研究では、異方性三角格子上のスピンレス・フェルミオンモデルを用い、小さな系のサイズでも相転移の検出に優れていることを示した。また、通常はフェルミオン系では、計算が困難なエンタングルメント特性を計算することを可能であることが分かった。

#### 11. スピン・ネマティック秩序の検出のための電子スピン共鳴(古谷、桃井)

スピン・ネマティック相はスピンの四極子的な秩序変数によって特徴づけられる隠れた磁性秩序相である。長距離に渡って発達したスピン・ネマティック秩序を検出するための方法論を議論した。通常の実験手法で用いられるプローブは磁気双極子の自由度にのみ結合するが、電子スピン共鳴は異方的磁気相互作用と組み合わさることで磁気四極子の自由度を直接検出することができることを示した。

## 12. イジング量子磁性体 $BaCo_2V_2O_8$ の磁場誘起量子相転移(古谷)

 $BaCo_2V_2O_8$ はイジング的異方性を持つ S=1/2 反強磁性スピン鎖物質である。この物質ではゼロ磁場

下で鎖間相互作用によってスピノンの閉じ込めが引き起こされていることが知られていた。本研究では磁場によって量子相転移が誘起され、低磁場のスピノン閉じ込め相から高磁場の別種のスピノン閉じ込め相へ遷移することが実験的および理論的に確かめられた。

#### 13. 光照射による電荷秩序融解 (妹尾)

秩序状態に対する短パルスレーザー照射は、しばしばその秩序の融解や、他の秩序状態への変換を引き起こす。実験でしばしばみられる不均一性と、これまでの理論研究で主として調べられてきた均一なコヒーレントダイナミクスという二つの描像のギャップを埋めることを目的とし、1次元電荷秩序系の光照射効果について調べた。相互作用するスピンレスフェルミオン模型に対して時間依存平均場法を用いて調べた結果、初期状態が均一な電荷秩序状態の場合はコヒーレントなダイナミクスを見せるのに対し、キンク構造をもつ電荷秩序状態の場合パルス光の照射に対して不均一構造が実空間内で広がっていくパラメータ領域があることがわかった。

## 14. 少数粒子系における普遍的束縛状態の研究(堀之内)

強相関の少数粒子系においては、しばしば系の詳細に依らず、普遍的な束縛状態構造が現れる。特に Efimov 状態と呼ばれる自己相似な 3 体束縛状態が、冷却原子系において実験的に観測され、注目されている。ごく最近、2 次元の 3 体相互作用を持つ同種ボソン系で、semisuper-Efimov 状態と呼ばれる 4 体束縛状態が出現するという提案があったが、Efimov 状態に比して、その普遍性はあまり調べられていなかった。そこで本研究では、semisuper-Efimov 状態の普遍性を種々の系で調べ、質量インバランスのある 4 粒子系、1 次元の線形分散をもつ粒子系における semisuper-Efimov 状態の普遍的を示した。特に、Efimov 状態と異なり、不純物極限においても束縛状態が安定に存在することを示した。

## **15. XXZ** スピン鎖のダイマー相関振幅 (古崎)

一次元 S=1/2 XXZ 模型のギャップレス相は朝永ラッティンジャー流体である。この相における基底 状態のダイマー相関関数を密度行列繰り込み群法によって数値的に高精度で計算し、それを低エネルギ 一有効理論(自由ボゾン模型)の与える相関関数でフィットすることにより、ダイマー相関振幅を数値 的に決定した。さらに、反強磁性ハイゼンベルグ模型に対して、対数補正を含めたダイマー相関振幅を 決定した。

# 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, topological insulators

#### 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.

However, in strongly-frustrated quantum spin systems such as triangular, kagome, and pyrochlore antiferromagnets, exotic quantum states without conventional magnetic order are expected to emerge. For example, we have recently studied spin liquids, spin nematic states, and chiral ordered states. In addition, we study novel topological states of matter: topological insulators and superconductors, and other symmetry protected topological states.

# 1. Relation among the many-body Chern number, rotation symmetry, and filling (Shiozaki)

We established nonperturbative constraints on the quantized Hall conductance of many-body systems with arbitrary interactions. We showed that the many-body Chern number modulo a certain integer is determined solely by the rotation eigenvalues and the average particle density of the many-body ground state with or without magnetic flux per unit cell.

# 2. Majorana stripe order on the surface of a topological insulator (Kamiya, Furusaki)

We studied a system of interacting Majorana fermions that may be realized on the surface of a topological insulator subject to a superconducting proximity effect. Specifically, we looked into the strong coupling limit of this problem, which we showed can be faithfully mapped to a quantum spin model with only local interactions. This spin model can be studied with a quantum Monte Carlo simulation free from a negative sign problem. We found that the interacting system of Majorana fermions on a square lattice spontaneously breaks translational and rotational symmetries of the lattice, forming a novel state that we call a Majorana stripe state.

# 3. Magnetic monopole supercurrent through a quantum spin ice junction (Nakosai, Onoda)

Materials called quantum spin ice host quantized magnetic monopoles in an emergent fictitious quantum electrodynamics described by a U(1) lattice gauge theory. These monopoles act as deconfined bosonic spinons coupled to emergent gauge fields in a U(1) quantum spin liquid (e.g.,  $Pr_2Zr_2O_7$ ), namely, a Coulomb phase, or they are Bose condensed to form long-range magnetic orders in charge-1 Higgs confined phases (e.g.,  $Yb_2Ti_2O_7$ ) where monopoles and gauge fields are screened. We have theoretically studied junctions of quantum spin ices systems. In particular, we have revealed that monopole supercurrent flows across the junction of two Higgs ferromagnets that are weakly linked through and placed on top of the U(1) QSL, when a gauge-invariant phase difference of monopoles across the junction is generated by an applied electric voltage parallel to the junction. This novel phenomenon paves the way to a new paradigm of spinonics for a dissipationless control of magnetism.

# 4. Haldane spin gap and ferroelectricity in Rb<sub>2</sub>Cu<sub>2</sub>Mo<sub>3</sub>O<sub>12</sub> (Onoda)

We have found combined experimental and theoretical evidence that the quasi-one-dimensional spin-1/2 magnet Rb<sub>2</sub>Cu<sub>2</sub>Mo<sub>3</sub>O<sub>12</sub> has a nonmagnetic tetramer ground state and a Haldane spin gap of emergent spin-1 pairs connected by spin-singlet short-range resonating valence bonds. Three lowest-energy spin excitations split from the spin-1 triplet by a Dzyaloshinskii-Moriya interaction are identified in inelastic neutron-scattering and electron spin resonance spectra. Remarkably, two orders of magnitude smaller magnetic field than this spin gap stabilizes a ferroelectricity without closing the spin gap. Overall experimental results on the magnetic properties have been quantitatively explained from numerical simulations on a two-leg ladder model of antiferromagnetically coupled frustrated spin-1/2 chains. The current discovery of a ferroelectricity in the spin-gapped state highlights a long-sought scenario that the vector spin chirality is ordered but spins are not.

# 5. Theory of tripod kagome magnets (Benton)

Recently a new class of magnetic rare-earth materials with a kagome lattice has been discovered. These "tripod kagome" materials combine strong spin-orbit coupling with a frustrated lattice geometry, opening up a route to new and interesting magnetic ground states. We have derived a general Hamiltonian describing these materials from symmetry arguments and determined its phase diagram. This phase diagram enables us to explain the low temperature properties of several different tripod kagome materials. In the case of one material, Mg<sub>2</sub>Yb<sub>3</sub>Sb<sub>3</sub>O<sub>14</sub>, we predict the existence of excitations with a topologically nontrivial band structure and associated chiral edge modes.

# 6. Disorder in Pr-based quantum spin ice systems (Benton)

Pr-based pyrochlore magnets such as Pr<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub> and Pr<sub>2</sub>Hf<sub>2</sub>O<sub>7</sub> have been intensively studied as potential realizations of a U(1) quantum spin liquid. Recent work has revealed that these systems can be strongly influenced by structural disorder, which introduces random splittings in the low energy states of the crystal field. An important issue is to determine the stability of the proposed U(1) quantum spin liquid state against this kind of disorder. Deriving stability bounds from perturbation theory leads us to the conclusion that current samples of Pr<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub> and Pr<sub>2</sub>Hf<sub>2</sub>O<sub>7</sub> likely fall outside the spin liquid regime.

# 7. Nematic quantum spin liquid phase on the pyrochlore lattice (Benton)

The S=1/2 XXZ model on the pyrochlore lattice is the minimal model for quantum effects in spin-ice like systems. It is known that, when the transverse exchange is weak compared to the frustrated Ising interaction, this model supports a U(1) spin liquid phase with gapless emergent photons. However, little is known about the case of strong transverse exchange, particularly when the transverse interaction has a frustrated sign. We have combined several numerical and analytic techniques to address this problem and have discovered a new kind of quantum spin liquid, with hidden nematic order, in the limit of strong, frustrated, transverse exchange.

# 8. Dirac composite fermion theory for a kagome spin liquid (Fuji)

The kagome antiferromagnet is believed to be in a quantum spin liquid phase, while the microscopic derivation of the corresponding theory remains a challenging task. We consider a kagome spin model with scalar-chiral interactions, which can be mapped onto a bosonic lattice gauge theory in the Ising limit. The bosonic model can be solved within a gauge mean-field treatment by using the bosonization technique in the limit of weakly coupled bosonic chains. By applying a fermion-boson duality, the bosonic model turns out to be described by two copies of a two-flavor Dirac fermion coupled to a fluctuating gauge field. Having this result, we obtain the low-energy effective theory for the original spin model, which is a gapless spin liquid with a four-flavor Dirac fermion coupled to a fluctuating gauge field.

# 9. Magnetization plateaux and supersolidity in the Heisenberg Kagome model (Plat, Momoi)

The Heisenberg model in a magnetic field on the Kagome lattice possesses several plateaux at magnetizations m=1/3, 5/9 and 7/9. While the plateaux are now well-understood and known to all host crystals, less is known about the regions in between them. A recent numerical study hinted that a supersolid phase could be present below the plateau m=5/9. In our work, we propose a scenario advocating for its presence. We perturbatively study magnon excitations to find the leading instability. In our approach, it corresponds to the onset of superfluidity, while the solid order is preserved, thus producing a supersolid. By deriving an effective model including magnon interactions and applying a mean field analysis, we discuss the possible spin structures expected in the supersolid phase.

# 10. Density matrix embedding theory for 2D spinless fermions (Plat)

Density matrix embedding theory (DMET) is a numerical scheme recently proposed to simulate electronic system. It is based on a mapping of the original Hamiltonian to an impurity model, smaller to solve. The efficiency of DMET was so far only investigated through calculations of energy and local correlations in a few Hubbard models. In this work, we have considered a spinless fermions model on the anisotropic triangular lattice and shown that the method performs well in detecting phase transitions, even when using small system sizes. It also allows computing the entanglement properties, which are usually difficult to obtain for fermions.

# 11. Electron spin resonance for the detection of spin nematic order (Furuya, Momoi)

Spin nematic phase is an interesting magnetic phase characterized by a quadrupole order parameter. We discussed a methodology for the detection of the long-range spin nematic order. We pointed out that the electron spin resonance with the aid of anisotropic magnetic interactions allows us to probe the quadrupole degree of freedom rather directly in contrast to other experimental probes which are coupled to dipole degrees of freedom only.

# 12. Field-induced quantum phase transition in an Ising-like quantum magnets BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub> (Furuya)

BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub> is an S=1/2 Ising-like antiferromagnetic spin chain compound. It has been known that a spinon confinement occurs in this compound in the absence of the magnetic field. In this study, we showed from the experimental and the theoretical viewpoint that the magnetic field induces a quantum phase transition from the low-field confined spinon phase to another kind of confined spinon phase at high fields.

# 13. Melting of charge order by light irradiation (Seo)

Light irradiation of short pulsed laser onto ordered states can produce their melting and transformation into different states. Here we try to reconcile two different pictures: inhomogeneity often discussed in experiments and homogeneous coherent dynamics mainly studied in theories. We use the one-dimensional spinless fermion model as a model for charge order and use time-dependent mean-field method introducing laser light-fermion interaction. We find coherent dynamics when the initial state is the homogeneous charge order, whereas when it is the charge ordered state with a kink structure, there is a parameter region where inhomogeneous region expands in space.

# 14. Study of universal few-body clusters in ultracold atoms (Horinouchi)

Strongly correlated few-body systems often support universal bound-state structure that does not depend on the short-range details of a given Hamiltonian. In particular, experimental observation of Efimov states in ultracold atoms provided an enormous impetus to this subject. Recently, a new family of few-body clusters, called semisuper-Efimov states, was proposed for the 2-dimentional system of identical bosons with a three-body interaction. Despite its qualitatively distinct feature from the Efimov states, the semisuper-Efimov effect in other systems is yet to be explored. Therefore, we extend the universality to mass-imbalanced systems. To further demonstrate the universality, we also liberate the semisuper-Efimov effect to a 1D system.

# 15. Dimer correlation amplitudes of XXZ spin chain (Furusaki)

The gapless phase of one-dimensional spin-1/2 XXZ model is a Tomonaga-Luttinger liquid. We have numerically obtained the dimer correlation amplitudes in the ground state in this phase by computing the dimer correlation functions using the density matrix renormalization group method and then fitting the data to the corresponding correlation functions in the effective low-energy theory (free boson model). Furthermore, we have determined the dimer correlation amplitude with a multiplicative logarithmic correction in the antiferromagnetic Heisenberg model.

# 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

Owen Benton Troels Bojesen

藤 陽平 Yohei Fuji

古谷 峻介 Shunsuke Furuya 堀之内 裕理 Yusuke Horinouchi 紙屋 佳知 Yoshitomo Kamiya

中河西 翔 Sho Nakosai

**Xavier Plat** 

塩崎 謙 Ken Shiozaki 高橋 隆志 Ryuji Takahashi

# Assistant and Part-timer

網代 雅代 Masayo Ajiro

# Visiting Members

古川 俊輔 Shunsuke Furukawa 引原 俊哉 Toshiya Hikihara 伊豆山 健夫 Takeo Izuyama 加藤 康之 Yasuyuki Kato 久保 健 Kenn Kubo

森本 高裕Takahiro Morimoto求 幸年Yukitoshi Motome二宮 正夫Masao Ninomiya

笠 真生 Shinsei Ryu

進藤 龍一 Ryuichi Shindou

堤 康雅 Yasumasa Tsutsumi

Konstantin Matveev Christopher Mudry Nicholas Shannon