

古崎物性理論研究室

Condensed Matter Theory Laboratory

主任研究員 古崎 昭
Furusaki, Akira

電子間斥力のため互いに避けあいながら固体中を運動している電子の集団（強相関電子系）が示す、多様な量子的秩序の理解が主要な研究課題である。その具体例として、遷移金属酸化物や有機導体を舞台とする強相関電子系における磁性、超伝導、新奇秩序状態、量子相転移などについて研究を行っている。さらに、メゾスコピック系において電子の粒子・波動二重性によって生じる新しい量子効果の探求や、固体中の不純物や欠陥などによるランダムなポテンシャルによって散乱された電子の局在・非局在転移についても研究をすすめている。

1. 強相関電子系の理論的研究

(1) 強相関極限の一次元電子系（古崎, Matveev*1）

半導体量子細線やカーボンナノチューブで実現される一次元電子系において電子密度が極めて低いために電子間相互作用が実効的にとても強くなっている極限に対する低エネルギー状態の理論を昨年に引き続き、発展させた。この極限では電子は近似的にウィグナー結晶状態にあり、局在した電子のスピンの反強磁性交換相互作用はエネルギー・バンド幅よりもずっと小さくなるため、交換相互作用と同程度かそれより大きなエネルギー・スケールの物理に対しては、通常の朝永・ラッティンジャー流体論が適用できない。このような条件の下での低エネルギー有効理論として、電荷自由度のみをボゾン化し、スピン自由度についてはハイゼンベルグ模型のままで取り扱う理論形式を構築した。これを応用して、スピン・電荷分離した電子スペクトル関数を計算した。

(2) LiV_2O_4 の電子状態計算（有田）

重い電子系的な振る舞いが様々な実験で観測されている LiV_2O_4 の電子状態を、局所密度近似と動的平均場近似を組み合わせる手法(LDA+DMFT)によって調べた。絶対零度を調べるために、projective quantum Monte Carlo法を開発し、それを動的平均場理論における有効不純物問題を解く際に用いた。その結果、この系の a_{1g} バンドにわずかにホールがドーピングされた状況になっており、そのために低温でフェルミレベルよりわずかに高いエネルギーのところで鋭いピークを持つことがわかった。この振る舞いは最近の光電子分光の実験の振る舞いを再現するものである。

(3) Sr_2VO_4 と Ba_2VO_4 の電子状態計算（有田）

LDA+DMFT法を用いて、圧力下の Sr_2VO_4 と Ba_2VO_4 の電子状態を調べた。常圧下においては、 Sr_2VO_4 は d_{xy} バンドと $d_{yz/zx}$ バンドのレベル差が小さいために1/6フィリングの3バンド系であるが、一軸性圧力をかけると軌道偏極がおこり、物性に大きな変化が期待できる。特にc軸方向に圧力をかけたときは d^9 系である銅酸化物の d^1 analogが実現し、 d^1 超伝導体の有力な候補となる。また、 Sr_2VO_4 についてSrをBaに置換することによるchemical pressureの効果も考察し、 Ba_2VO_4 を格子定数4.1~4.2Åの基盤上で薄膜成長させると銅酸化物の d^1 analogが実現する可能性を見出した。

(4) フラストレート磁性体における“量子スピン液体”（桃井, Sindzingre*1）

固体 ^3He 薄膜において発見された量子スピン液体的振る舞いを理論的に解明するために、三角格子上の多体スピン交換模型における量子スピン液体相の出現可能性を理論的に研究した。その結果、スピン秩序のない量子スピン液体相が強磁性相に隣接して現れることを見出した。このスピン液体には、磁場下において隠れた8重極秩序が存在することを明らかにし、一方、無磁場においてはネマティック（4重極）秩序が伴われることを示した。

(5) フラストレーションのある量子一次元スピン模型における多マグノン束縛状態（Kecke*3, 桃井, 古崎）

幾何学的フラストレーションが重要となる新しいタイプの量子スピン模型として、強磁性的な最近接交換相互作用 J_1 と反強磁性的な次近接交換相互作用 J_2 をもった一次元の $S=1/2$ ハイゼンベルグ模型をとりあげた。この模型はジグザグ格子模型とも見なすことができる。 J_1/J_2 がおよそ-2.7から0の間のパラメータ領域では二つのマグノンの束縛状態が最低励起状態であり、この2マグノン束縛状態の励起エネルギーが0になる点で2マグノン束縛状態がボーズ凝縮することにより、強磁性状態からネマティック状態への相転移が起こるものと予想される。さらに、 $J_1/J_2=-3$ の付近では三つのマグノンの束縛状態が最低励起状態になることを見出した。

(6) Co酸化物超伝導体の軌道物理（望月*2）

近年発見されたCo酸化物超伝導体 $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ におけるCoの3d軌道自由度の重要性を指摘し、多軌道性に由来する物性現象や性質を研究した。特に、この超伝導体に関する多くの矛盾する実験結果や相図は、従来の軌道自由度を無視した単純な理論では説明ができず大きな謎となっていたが、軌道自由度を考慮することでこれらが統一的理解できることを示した。具体的には、(a)c軸方向の格子歪みに伴う電子構造や磁性・超伝導性の変化を調べ、実験的に指摘されている磁気揺らぎや超伝導転移温度の格子歪みに対する敏感性と豊かな相図を「軌道-格子結合」を考へることにより統一的理解できることを示した。(b)この系の超伝導はスピン揺らぎが媒介していることが期待されるため、その磁気的性質がNMRやNQR、 μSR 、中性子散乱等の実験により精力的に調べられてきた。これらの実験結果が、フェルミ面や状態密度の違いに由来する、磁気揺らぎの格子歪みに対する依存性を考えると自然に理解できることを示した。(c)今までに超伝導状態や超伝導機構を決定するために多くの熱力学量測定が行われているが、その実験結果も混沌としていた。本研究では、格子歪みの程度に依存して2種類の超伝導相が実現している可能性を指摘し、一見ばらばらだった上部臨界磁場や比熱、超流動密度の実験データがこの2種類の超伝導相を考えると再現できることを示した。

(7) 異方的三角格子上的ハバード模型におけるモット転移（是常*2, 求*1, 古崎）

昨年度に引き続き、異方的三角格子上的ハバード模型のハーフ・フィリングにおける基底状態を数値的厳密対角化法によって計算

し、斥力相互作用がバンド幅と同程度の強さで起こるモット転移について研究した。18サイトまでの有限系について、ドローデ重み、二重占有数、電荷ギャップ、スピン構造因子を計算し、境界条件をひねって計算した結果を平均することによって有限サイズ効果の影響を軽減した。これらの物理量のサイズ依存性を検討することにより、金属相・反強磁性絶縁体相・非磁性絶縁体相からなる基底状態の相図を提案した。

(8) 異方的三角格子ハバードモデルにおける有限温度モット転移 (大橋^{*4})

有機導体 κ -(ET)₂Cu[N(CN)₂]Cl において観測されているモット転移を理解するため、異方的三角格子上的ハバードモデルにおける有限温度モット転移について cellular dynamical mean field theory を用いて調べた。 κ -(ET)₂Cu[N(CN)₂]Cl におけるモット転移は、よく知られた V₂O₃ などの三次元系物質におけるモット転移とは全く異なったリエントラント的振る舞いを示している。計算の結果得られた相図は実験結果と定性的に一致し、リエントラント・モット転移がエントロピー解放メカニズムの温度低下に伴う変化により引き起こされることを明らかにした。

2. メゾスコピック系における量子効果およびランダム系の統計物理学

(1) 単電子トランジスタの完全計数統計 (内海^{*2})

半導体量子ドット、金属単電子トランジスタ、カーボン・ナノチューブ、単一原子・分子トランジスタ等のナノ構造では、相互作用の大きさや非平衡状態の制御が可能であり、近藤効果のような多体効果の特性が明確に現れる。また、測定技術の進歩にともなって電流の確率分布関数そのものを調べることが可能になり、完全計数統計とよばれる研究分野が急速に発展している。本研究では単電子トランジスタを例に取り、計数統計理論を研究した。単電子トランジスタは数学的には異方的多チャンネル近藤ハミルトニアンで記述され、非平衡近藤問題の典型とされる。昨年度は経路積分形式の非平衡場の理論 (Schwinger-Keldysh法) を用いて計数統計理論を構築した。本年度はこれをさらに進め、電子数と電流の同時確率分布による完全計数統計理論を提案した。この理論は昨年日本とスイスのグループで行われた量子ポイントコンタクト電位差計を用いた計数統計の実験を踏まえている。これにより、量子ドットに滞在する電子数と電流の同時確率分布の測定からクーロン相関に関する新たな情報が得られることが明らかとなった。

(2) 単一分子伝導スピントロニクスにおける完全計数統計 (井村^{*2}, 内海^{*2}, Martin^{*1})

分子を介した電子の伝導現象 (単一分子伝導) について研究した。本研究では、分子の持つ固有のスピン自由度に着目し、これが伝導電子のスピンと交換相互作用を通して相互作用しているモデルを考察した。分子を介した電子のトンネルがインコヒーレントに起こる領域では、マスター方程式を用いて完全計数統計を定式化できるが、今回はこれを電流と電荷の同時確率分布に一般化し、角運動量の合成則を採用することにより解析的な結果を得た。

(3) スピン - 軌道相互作用を有する 2 次元不規則電子系の金属 - 絶縁体転移における共形不変性の実証 (小布施^{*2}, 古崎)

一般に、2 次元以下の空間を運動する自由電子は、ランダムなポテンシャルによって一般にアンダーソン局在するが、スピン - 軌道相互作用が強い場合には 2 次元系でも金属 - 絶縁体転移が起こることが知られている。この 2 次元での相転移点直上における波動関数は臨界的であり、そのモーメントはマルチフラクタル性を示す。本研究では、スピン - 軌道相互作用と不純物によるランダムなスピン散乱を含んだ 2 次元タイト・バインディングモデルを用い、臨界的波動関数を菱形の系について開境界条件の下で数値的に求めた。系の境界付近の波動関数のマルチフラクタル特性を調べ、菱形の角における臨界波動関数のマルチフラクタル性が、共形不変性から要請される角度依存性を満たしていることを数値的に実証した。この結果は、スピン - 軌道相互作用の強い 2 次元シンプレクティック・クラスの臨界点が共形不変性を持つことを意味しており、この臨界点に対する共形場理論の存在を示唆するものである。

(4) 量子スピン・ホール効果を示す 2 次元不規則電子系におけるアンダーソン転移 (小布施^{*2}, 古崎, Mudry^{*1})

系の内部はエネルギー・バンドにギャップが開いた絶縁体であるが、系の端にスピン・カレントを運ぶギャップレスのクラマース縮退したエッジ状態が存在する、量子スピン・ホール相が最近注目されている。整数のトポロジカル数で特徴づけられる強磁場中の量子ホール液体とは異なり、量子スピン・ホール絶縁体は、時間反転に関して対称だがスピン - 軌道相互作用のためにスピン空間の回転で不変でない、Z₂トポロジカル数が 1 (奇) の状態である。一方、通常バンド絶縁体は Z₂トポロジカル数が 0 (偶) の状態である。Z₂トポロジカル数はクラマース縮退したエッジ状態数の偶奇を表している。量子スピン・ホール効果の研究はスピントロニクスへの応用のみならず、トポロジカル絶縁体という新しい物質相に関する基礎的な問題として重要である。本研究では、この量子スピン・ホール絶縁体に空間変動がゆるやかなランダム・ポテンシャルを導入したときに起こるアンダーソン局在 (金属 - 絶縁体転移) の問題に対して、ネットワーク・モデルと呼ばれる有効モデルを構築した。アンダーソン転移点における局在長の発散に対する臨界指数を数値的に計算した結果、この転移のユニバーサリティ・クラスは通常のスピン - 軌道相互作用を有する 2 次元不規則電子系のアンダーソン転移と同じユニバーサリティ・クラス、すなわちシンプレクティック・クラスに属することが明らかとなった。

3. 表面ナノ構造電子物性の表面非線形光学による研究 (鈴木^{*1}, Deng^{*4}, 井上^{*5}, 村上^{*5}, 塚越^{*1}, 田中^{*1}, 首藤^{*1}, 築山^{*1})

表面非線形光学効果が表面電子準位と対称性に極めて敏感である特徴を活かして、ナノ構造が規則的に配列する表面再構成構造に特有な電子物性の解明を目指している。K の吸着した Si(111) 7×7 表面再構成構造について非線形光学応答の実験的研究を行った。

^{*1} 客員研究員, ^{*2} 基礎科学特別研究員, ^{*3} 訪問研究員, ^{*4} 協力研究員, ^{*5} 研修生

1. Strongly-correlated electron systems

(1) Strongly-interacting electrons in one dimension

We have studied a system of one-dimensional electrons in the regime of strong repulsive interactions, where the spin exchange coupling J is much smaller than the Fermi energy, and the conventional Tomonaga-Luttinger theory does not apply. In the energy scale above J , we bosonize charge density excitations only. Only at much lower energy scale, spin density excitations can be bosonized as well. We have calculated electron's spectral function using this formalism.

(2) Electronic structure of LiV_2O_4

We investigated the electronic structure of LiV_2O_4 , for which heavy fermion behavior has been observed in various experiments, using the combination of the local density approximation (LDA) and dynamical mean field theory (DMFT). To obtain results at zero temperature, we developed a projective quantum Monte Carlo method and employed it to solve the effective DMFT impurity problem. We found that the strongly correlated a_{1g} band is a slightly doped Mott insulator which at low temperatures shows a sharp heavy-quasiparticle peak just above the Fermi level, which is consistent with recent photoemission experiments.

(3) Electronic structure of Sr_2VO_4 and Ba_2VO_4

We studied Sr_2VO_4 and Ba_2VO_4 under high pressure by means of the LDA+DMFT method. While Sr_2VO_4 is a 1/6-filling three-band system at ambient pressure with a small level splitting between the d_{xy} - and $d_{yz/zx}$ -bands, we found that an orbital polarization occurs under uniaxial pressure, which will lead to dramatic changes of the magnetic and transport properties. When pressure is applied in the c -direction, a d^1 analog of d^9 cuprates is realized, making Sr_2VO_4 a possible candidate for a d^1 superconductor. We also studied the effect of chemical pressure by substituting Sr by Ba, and found that a d^1 analog of cuprates can be realized by growing Ba_2VO_4 on a substrate with lattice constant $4.1\sim 4.2\text{\AA}$.

(4) Octupolar order in a spin liquid

We have shown how a gapless spin liquid with hidden octupolar order arises in applied magnetic field, in a model applicable to thin films of ^3He with competing ferromagnetic and antiferromagnetic (cyclic) exchange interactions. Evidence is also presented for nematic—i.e., quadrupolar—correlations bordering on ferromagnetism in the absence of magnetic field.

(5) Multi-magnon bound states in a frustrated spin chain

We have studied the spin-1/2 Heisenberg model with ferromagnetic nearest-neighbor coupling J_1 and antiferromagnetic next-nearest-neighbor interaction J_2 . We have found that the lowest excitations are two-magnon bound states when $-2.7 < J_1/J_2 < 0$ while they are three-magnon bound states when J_1/J_2 is around 3.

(6) Orbital physics in the Co oxide superconductor

We have pointed out the important role of degeneracy of Co 3d orbitals in understanding the physical properties of the cobalt oxide superconductor $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$. We have shown that its phase diagram and various experimental results, which might seem conflicting to each other, can be understood coherently by taking into account the orbital degrees of freedom.

(7) Mott transition in the half-filled Hubbard model on an anisotropic triangular lattice: zero temperature

We have numerically studied the ground-state phase diagram of the half-filled Hubbard model on an anisotropic triangular lattice. We have used the Lanczos exact diagonalization method to calculate the Drude weight, double occupancy, charge gap, and spin structure factor. From the numerical results obtained for finite-size clusters of up to 18 sites, we have proposed a phase diagram which has a metallic phase, an antiferromagnetic insulating phase(s), and a non-magnetic insulating phase.

(8) Mott transition in the half-filled Hubbard model on an anisotropic triangular lattice: finite temperatures

Inspired by the unusual reentrant Mott transition observed in the organic material $\kappa\text{-(ET)}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$, which is not seen in traditional three-dimensional systems such as V_2O_3 , we have studied the finite-temperature Mott transition in the Hubbard model on the anisotropic triangular lattice by means of the cellular dynamical mean-field theory. We have obtained the phase diagram which is qualitatively consistent with the experiments, and showed that the reentrant Mott transition is induced by change in mechanism of entropy release with lowering temperature.

2. Mesoscopic systems and disordered systems

(1) Full counting statistics of single-electron transistors

We have developed a theory of full counting statistics of single-electron transistors, which can be mapped to the anisotropic multi-channel Kondo model. Motivated by recent experiments, we have formulated and calculated the joint probability distribution for electric charge and current by using the Schwinger-Keldysh formalism. The joint distribution can provide novel information on the Coulomb correlations in single-electron transistors.

(2) Full counting statistics of a molecular quantum dot magnet

We considered transport through a molecular quantum dot magnet in the incoherent tunneling regime. We have proposed a model in which the conduction electron spin on the dot is coupled to the molecular magnet s by an exchange interaction, and formulated full counting statistics (FCS) of charge and current in the framework of master equation. Using some unconventional relations among Clebsch-Gordan coefficients, we solved analytically the modified master equation with counting fields to derive some exact expressions for the FCS generating function.

(3) Conformal invariance at a critical point of Anderson metal-insulator transition

The Anderson metal-insulator transition is a quantum phase transition driven by disorder. We have examined the existence of conformal invariance at an Anderson transition point for a two-dimensional tight-binding model with on-site disorder and the spin-orbit interaction. We have numerically calculated multifractal exponents of critical wave function moments at surfaces and corners of finite-size samples with open boundaries. We have shown numerically that the corner multifractal exponents are related to surface multifractal exponents through a relation arising from conformal invariance. We have thus numerically proved

the existence of conformal invariance in the critical two-dimensional disordered system with the spin-orbit interaction.

(4) Network model for the quantum spin-Hall effect

The quantum spin Hall phase is an insulator having a bulk band gap and a Kramers pair of gapless edge states carrying finite spin currents. This state is characterized by the Z_2 topological number representing the number of Kramers-degenerate edge states. This should be contrasted from quantum Hall insulators in strong magnetic fields which are characterized by an integer topological number. A quantum spin Hall insulator can be realized in a system with time-reversal symmetry but without spin-rotation symmetry due to strong spin-orbit coupling. We have constructed a network model describing motion of a quasiparticle in a two-dimensional quantum spin Hall insulator with spatially smooth disorder potential. Using this model, we have numerically obtained the critical exponent for the diverging localization length at a Anderson transition point, which was found to be the same as that obtained for the conventional symplectic class for the two-dimensional disordered system with the spin-orbit interaction.

3. Experimental study of surface nanostructures

Nonlinear optical studies have been performed to understand adsorbate-induced structural transformation in the Si(111) surfaces.

Staff

Head

Dr. Akira FURUSAKI

Members

Dr. Ryotaro ARITA
Dr. Tsutomu MOMOI
Dr. Ken-ichiro IMURA *1
Dr. Takashi KORETSUNE *1
Dr. Masahito MOCHIZUKI *1
Dr. Hideaki OBUSE *1
Dr. Yasuhiro UTSUMI *1
Dr. Dongmei DENG *2
Dr. Takuma OHASHI *2

*1 Special Postdoctoral Researcher

*2 Contract Researcher

Visiting Members

Prof. Toshiya HIKIHARA (Fac. Sci., Hokkaido Univ.)
Dr. Takeo IZUYAMA (Kaiyo Gakuen)
Prof. Ken KUBO (Sch. Sci. & Eng., Aoyama Gakuin Univ.)
Dr. Lars KECKE (JSPS postdoctoral fellow)
Prof. Thierry MARTIN (Centre de Physique Theorique et Universite de la Mediterranee, France)
Dr. Konstantin MATVEEV (Argonne National Lab., USA)
Prof. Seiji MIYASHITA (Fac. Sci., Univ. Tokyo)
Prof. Yukitoshi MOTOME (Fac. Eng., Univ. Tokyo)
Dr. Christopher MUDRY (Paul Scherrer Inst., Switzerland)
Dr. Karlo PENC (Research Inst. Theor. Solid State Phys. and Optics, Hungary)
Dr. Ryuichi SHINDOU (JSPS postdoctoral fellow; Univ. California, Santa Barbara, USA)
Prof. Kennichi SHUDO (Fac. Eng., Yokohama Natl. Univ.)
Prof. Philippe SINDZINGRE (Univ. Pierre & Marie Curie, France)
Prof. Takanori SUZUKI (National Defense Academy of Japan)
Dr. Kazutaka TAKAHASHI (Fac. Sci., Tokyo Inst. Technology)
Prof. Masatoshi TANAKA (Fac. Eng., Yokohama Natl. Univ.)
Prof. Motowo TSUKAKOSHI (Fac. Sci., Tokyo Univ. Sci.)
Prof. Koichi TSUKIYAMA (Fac. Sci., Tokyo Univ. Sci.)
Prof. Hirokazu TSUNETSUGU (Inst. for Solid State Physics, Univ. Tokyo)
Prof. Yao Zhong ZHANG (Univ. Queensland, Australia)

Trainees

Mr. Daisuke INOUE (Grad. Sch. Eng., Yokohama Natl. Univ.)
Mr. Tatsurou MURAKAMI (Grad. Scho. Eng., Yokohama Natl. Univ.)