

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。無限大の自由度を持った多電子系では、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はその典型例であり、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。

三角格子や籠目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・ネマティック相やベクトル・カイラル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. フラストレーションのある量子一次元スピン模型の磁場中での相図（引原、桃井、古崎）

反強磁性的な最近接相互作用と次近接相互作用を持つ、 $S=1/2$ の 1 次元ジグザグスピン鎖の磁場中の基底状態を研究した。スピン密度波が支配的な相、ベクトル・カイラリティが長距離の秩序を持つ相、波数が不整合でありながらカイラル秩序がない相が出現することを、密度行列繰り込み群法による数値計算によって確認し、相図を求めた。各相の相関関数を密度行列繰り込み群法によって数値計算し、その結果が有効理論（ボゾン化法）の解析と一致することを確認した。特に、波数が不整合でカイラル秩序が無い相は、2 成分の朝永・Luttinger 液体と記述できることを確認した。

2. 容易面異方性をもつスピン 1/2 フラストレート強磁性鎖の相図（古川、佐藤、小野田、古崎）

強磁性最近接、反強磁性次近接相互作用 J_1 、 J_2 の競合する、フラストレート・スピン 1/2 鎖の相図を、容易面異方性がある場合に対して、数値計算と有効理論により決定した。この模型は、 LiCuVO_4 、 LiCu_2O_2 などの擬一次元銅酸化物系の磁性を記述するミニマルな模型と考えられる。古典的スパイラル領域 $J_2/|J_1| > 1/4$ においては、ベクトル・カイラル秩序相が、等方的な場合を含んだ広いパラメータ領

域に現れることを見出した。このような、純一次元系におけるカイラル秩序の強い安定性が、上記銅酸化物における螺旋磁性および、それに伴う強誘電性を誘起していると考えられる。また、 $J_2/|J_1|=1/4$ 付近において、ネール秩序相、ダイマー秩序相が、異方性の大きさに応じて交互に現れるという特異な現象を見出し、その解釈を与えた。

3. 擬1次元マルチフェロイクス LiCu_2O_2 におけるカイラル秩序と電磁気応答 (佐藤、古川、小野田)

近年、磁性と誘電性が強く結合し、スパイラル磁気秩序の発生と同時に自発電気分極が生じるマルチフェロイクス物質が次々に発見され、精力的に研究されている。これまでの研究により、自発分極とスピカイラリティーの間の静的関係の理解は進んでいるが、光学応答で観測される磁氣的励起に対する理論は整備されていない。マンガン酸化物の光学応答の理論が幾つか提案されているが、実験を十分に説明する状況には至っていない。Mn イオンはスピン 2 をもつが、このような大きなスピンをもつ磁性体には一般に多種多様な磁気異方性が存在する。これら磁気異方性が系のダイナミクスを複雑化させ、理論構築を困難にさせていると考えられる。そこで我々は最近実験研究が進展しているスピン 1/2 の擬1次元マルチフェロイクス LiCu_2O_2 に注目し、その磁気秩序状態及び光学応答についての理論を構築した。スピン 1/2 の系では、現実的な磁気異方性はほぼジャロシンスキー守谷相互作用に限られる為、大きなスピンをもつ系に比べて理論解析が容易になる。すなわち、 LiCu_2O_2 は光学応答の基礎理論を構築する上で理想的舞台といえる。まず、これまでに確立している実験データから現実的な磁性体模型及び古典スパイラル秩序状態を提案し、その秩序状態の下で計算された NMR スペクトルが実験とよく一致することを示した。この古典秩序状態の周りの量子揺らぎの効果をスピン波理論で取り込み、光学実験で観測されている多数のピークが電磁波で励起されたマグノンによるものであることを明らかにした。

4. 混合価電子共鳴状態のフラストレート磁性体での探索 (進藤、桃井)

近年、反強磁性的な交換相互作用によって構成された量子フラストレート模型で、量子スピン液体状態の探索が、実験理論両面から精力的に行われている。本研究では特に、強磁性的な交換相互作用や(スピン空間で)異方的な交換相互作用を含むフラストレートした量子ハイゼンベルグ模型で、どのような新奇な量子磁性状態が実現するかを $\text{SU}(2)$ スレーブボゾン平均場描像の立場から調べた。反強磁性的なボンドの場合とは異なり、これらのボンド上ではスピノンの三重項ペアリングが導入される。その結果、三重項の価電子ボンドと一重項の価電子ボンドが混合して共鳴したスピン「液体」状態(混合価電子共鳴状態)が実現すると予想される。具体的に、以下の二つの格子模型で平均場計算を行った。(i) 正方格子上の J_1 - J_2 模型(最近接 J_1 は強磁性的、次近接 J_2 は反強磁性的)では、中間結合領域($J_1:J_2=1:0.4$)に、局所的ゲージ揺らぎに対し安定な平均場解として、スピノンの混合ペアリング状態が二種類見出された。ひとつは Higgs 機構によって安定化された Balian-Werthamer (BW) 状態、もう一つは Chern-Simons 機構によってゲージ揺らぎが制御されたカイラル p 波 (ABM) 状態である。特に前者の状態は、厳密対角化法で見出されたボンド型スピンネマチック状態と同じ磁気空間群に属している。(ii) 蜂の巣格子上の J_1 - J_2 模型(最近接 J_1 は反強磁性的、次近接 J_2 は異方的な交換相互作用、 NaIrO_3 の有効磁気模型と考えられている)では、中間結合領域で、ゲージ揺らぎに対して安定な混合ペアリング状態は見いだされなかった。ただし、 J_2 大の極限では、模型が二つの分離した 2 次元三角格子上の反強磁性量子ハイゼンベルグ模型と等価であることが分かり、この極限では 12 磁気副格子を持つ coplanar 状態(磁気異方性が XY 的であるとは限らない)が実現することを明らかにした。

5. スピンアイスの量子融解（小野田、田中）

パイロクロア格子磁性体 $\text{Pr}_2\text{TM}_2\text{O}_7$ ($\text{TM} = \text{Zr}, \text{Sn}, \text{Ir}$)では、古典的スピンアイス $R_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ($R = \text{Dy}, \text{Ho}$)と同様に、磁気モーメントがスピンアイスの相関を示し、磁気双極子長距離秩序が生じない。その一方で、反強磁性的なキュリーワイス温度をもち、スピン凍結現象が抑制され、スピンの量子揺らぎが強いなど、古典スピンアイスとは異なる性質も観測されている。これらの非自明な現象を理論的に理解するため、 $\text{Pr}_2\text{TM}_2\text{O}_7$ に対する擬スピン $1/2$ の量子有効モデルを導出した。この系では、古典スピンアイスと異なり、磁気双極子相互作用ではなく超交換相互作用が主要な相互作用となっている。理論的に得られたスピンアイスが量子融解した基底状態は、2イン2アウトのスピンアイスの短距離磁気相関を示し、古典スピンアイス系と磁気散乱構造因子のピーク位置が共通している。しかし、強い交換磁気異方性のために、3イン1アウト/1イン3アウト配置が基底状態に混合する。このため、2イン2アウトの巨視的縮退が解け、磁気相関プロファイルにおけるピンチポイント特異点が消滅する。磁化曲線の計算結果は、実験結果と定量的に良く一致する。また、この基底状態は、正四面体ごとの磁気四重極モーメントおよびカイラリティーによって特徴づけられる。特に、熱力学極限では、16個のPrイオンを含む立方格子を単位格子とし、強制的四重極秩序を示すであろうことが分かった。一方、カイラリティーは、幾何学的フラストレーションのために、長距離秩序を示すことが妨げられる。以上の研究成果は、古典的議論に限られていたスピンアイス系に対して、非自明な量子効果という新しい切り口を与える。

6. パイエルス不安定性をもつ1次元モット絶縁体の光学応答におけるスピノン励起（佐藤）

近年マルチフェロイクスの研究をきっかけとしてモット絶縁体における光学応答が大きな注目を集めている。その中で我々はTTF-CAやTTF-BAなどのスピンパイエルス転移を示す擬1次元有機系モット絶縁体の光学応答に焦点を当てた。まず、この系をhalf-filledイオニックハバードモデルでモデル化し、標準的な強結合理論を使うことで電気分極演算子がスピンドイマー演算子に比例することを示した。パイエルス転移温度以上、以下でそれぞれ有効モデルは一樣反強磁性鎖、ボンド交替鎖になる。この2つのモデルの低エネルギー物理とダイマー演算子が、場の理論と厳密解を用いて高精度に記述できることを利用して、光学伝導度を精密に計算した。その結果、高温相では、光学伝導度スペクトルにスピノン対によるギャップレスの寄与が現れ、低温パイエルス相ではギャップを持つシングレット励起が鋭いピークを与えることを明らかにした。ギャップの大きさやスペクトル振幅は解析的表式で与えられ実験結果との精密な比較検討が可能である。

7. 分子性導体における電荷フラストレーションと特異な電荷格子秩序（妹尾、求）

擬1次元的な結晶構造を持つ分子性導体DI-DCNQI₂Agは、単純なウィグナー結晶型の電荷秩序相転移を示す典型的な物質と従来は考えられてきたが、光学的性質など相いれない実験結果もあり未解決であった。最近、その秩序相において放射光によるX線構造解析によって複雑な電荷および格子変位のパターンが見いだされ、その背後に電荷秩序に対する幾何学的フラストレーションの効果「電荷フラストレーション」の存在が指摘された。この電荷格子秩序の起源を理論的に明らかにするため、格子変位との結合を考慮した拡張ハバードモデルに対する平均場計算を行い、この秩序が1次元鎖内の競合を利用し鎖間の電荷フラストレーションを解消した状態であり、実際の系に対応するパラメータ領域で安定化することを見出した。また、電荷と格子に対する秩序変数が発達する温度が著しく異なる現象を見出し、原因が不明であった輸送現象やNMR実験における温度依存性に解決の糸口を与えた。

8. p-d 結合した分子性導体系におけるフェリ磁性電荷秩序と磁場効果の数値的研究 (大塚、妹尾、求)

フタロシアニン骨格の中心に鉄イオンが配位した $\text{FePc}(\text{CN})_2$ 分子が構成要素となつたいくつかの分子性導体において、巨大な磁気抵抗 (MR) 効果が観測され近年注目されている。その中で 1 次元性が強く MR 効果が最も大きい TTP $[\text{FePc}(\text{CN})_2]_2$ に対する有効モデルとしてイジングスピン鎖 (d 電子) と結合した拡張ハバードモデル (p 電子) を構築し、モンテカルロ法による数値計算を行った。その結果、局在スピンの存在によって p 電子の電荷秩序化は著しく増大し、また p-d 結合により特異なフェリ磁性を伴うことを示し、実験結果を説明した。また、磁場に対しても大きな応答が見られ、実験で観測されている負の MR 効果のみならずパラメータによって複雑な挙動を示す結果を得、これは今後の実験において興味深い磁気伝導現象の観測の可能性を示唆する。

9. 直列ダブル量子ドット系におけるアンドレーエフ反射 (田中)

二つの量子ドットを超伝導体と常伝導体に直列に繋いだ系を考え、アンドレーエフ反射による輸送特性について数値繰り込み群を用いて解析を行った。ドット間トンネリングが小さい領域では、局所的な超伝導一重項状態と近藤効果による一重項状態のクロスオーバーが生じる。これら基底状態の違いは輸送特性に顕著に反映される。ドット内のクーロン相互作用が小さい領域では、局所的な超伝導一重項状態が基底状態となり、コンダクタンスのピークはユニタリ極限の値に達する。一方、クーロン相互作用が大きくなると、近藤効果による一重項状態が支配的となり、コンダクタンスは抑制される。また、ドット間トンネリングが大きくなると、ドット間に生じる一重項状態が支配的となり、コンダクタンスは抑制されることが分かった。

10. 量子ドット・超伝導接合系におけるアンドレーエフ束縛状態の観測 (田中)

量子ドットに超伝導体を接合した系では、超伝導近接効果によって、量子ドット内にアンドレーエフ束縛状態が形成される。我々は、東大・樽茶研の実験グループとの共同研究により、量子ドットに超伝導体を強く結合し、常伝導体を弱く接合することで、輸送特性からアンドレーエフ束縛状態を検出できること示した。また、ドットに取り付けたゲート電極を変化させることで、スピン一重項状態と磁気的なスピン二重項状態の間で転移が生じ、数値繰り込み群による解析結果と定性的に良い一致を示すことを明らかにした。

11. スカームイオン格子の形成と異常ホール効果 (小野田)

空間反転対称性を破った磁性体 MnSi など、磁場を印加することで Mn スピンが六方対称のスカームイオン格子を形成することを示唆する実験事実が蓄積されつつある。ここでスカームイオン格子とは、ある領域に存在するスピンの向きがある点を中心として渦を巻く立体配置をとった内部構造が、超格子を形成したものである。この非自明な現象を理解するため、ジャロシンスキー-守谷相互作用を含む最も簡単な有効スピンモデルを数値シミュレーションによって解析した。磁気異方性や磁場の変数空間のある領域で、長波長の螺旋磁気秩序から、スピンのスカームイオン格子を形成する磁気構造に相転移することが分かった。スカームイオン格子の対称性は、磁気異方性と磁場の強さによって 6 回対称、4 回対称、2 回対称と変化する。また、この場合に生じる異常ホール伝導度を計算し、スカームイオン格子の形成に伴ってスピнкаイラリティーによる異常ホール効果が顕著に増大することを示した。これらの理論的研究成果は、現実の物質でスカームイオン格子の形成を検証・理解する際の重要な指針を与えると考えられる。

12. 情報エントロピーによる量子臨界系波動関数の解析 (古川)

情報理論の概念を応用し、量子多体系の基底状態を特徴づけるための新しい方法論の開発に取り組んだ。まず、一次元量子系に対して、スピン配置エントロピーという、量子揺らぎを定量化する、新しい量を導入し、それが二次元古典系から作られる Rokhsar-Kivelson 状態のエンタングルメント指標と等価であることを示した。我々は、この量の、系のサイズに対するスケーリングを調べ、系の基本的性質だけで決まる、普遍的定数項の存在を見出した。一次元臨界系に広く現れる、朝永・Luttinger 流体においては、この定数項は、ボゾン半径(もしくは Luttinger パラメーター)によって決められる。また、自発的に対称性の破れる系においては、定数項は、基底状態の縮退度と関係している。この量は、量子臨界現象を解析する上での、新しい道具となると考えられる

13. 3次元トポロジカル量子臨界点での一般の非磁性不純物による乱れの効果 (進藤、仲井)

3次元量子スピンホール絶縁体は、その表面に、非磁性不純物に対して極めて安定な伝導チャンネル(2次元 massless Dirac 電子)を持った新しいクラスのバンド絶縁体である。このようなバンド絶縁体と通常型の(表面伝導チャンネルを持たない)時間反転対称なバンド絶縁体の間に介在する量子臨界点も又、任意の非磁性不純物に対して極めて安定な非局在状態であることが分かる(「バルクエッジ対応」)。実際、この3次元トポロジカル量子臨界点では、『化学ポテンシャル型の不純物(もっとも「標準」的な非磁性不純物)散乱によって引き起こされる任意の後方散乱が、その時間反転対称な「対」過程によって完全に相殺される』ことが分かる(「ベリー位相による後方散乱の消失」の3次元系への一般化)。ところが同時に、この消滅則は、任意の非磁性不純物に対しては必ずしも成立しないことも分かる。そこで、この「ベリー位相による後方散乱の消滅則」の傾向と、バルクエッジ対応に基づく議論からの「予想」の間の mismatches を補完すべく、3次元トポロジカル量子臨界点における一般の非磁性不純物による乱れの効果を系統的に調べた。具体的には、一般の非磁性不純物がある場合での、セルフコンシステントボルン近似によって得られる(臨界点周りの)相図と弱局在伝導度補正の振る舞いを論じ、化学ポテンシャル型の不純物散乱のみの場合と、どのような差異及び類似点が観察されるかを纏めた。

14. 2成分ボーズ及びフェルミガス系における強磁性相転移と強磁性相の性質 (佐藤、古川)

内部自由度が一般に系に多様な物性をもたらすことは、固体中の電子スピンの引き起こす様々な現象から容易に想像できる。近年精力的に研究されている冷却原子系では内部自由度を制御することが可能になりつつある。そこで我々は、最も単純な内部自由度をもつ多体系として、1次元2成分ボーズまたはフェルミガスに焦点を当てた。異成分粒子の入れ替わりが許される状況下で異成分間斥力相互作用が十分大きくなると、2成分粒子密度のバランスが崩れ、自発的に一方の成分密度が他方より大きくなることが予想される。2成分をスピン 1/2 とみなすと、これは強磁性相への相転移と言うこともできる。この転移は2成分系の基本的現象の1つと言えるが、既存の平均場描像や弱結合理論では十分に記述できないことが知られている。そこで我々は、既存のボゾン化法に加えて強力な数値計算法(iTEBD と数値対角化)を利用することで、強磁性相転移及び強磁性相の基本的性質を解析した。その結果、相転移は異成分間ホッピングがない(ある)場合、一次(Ising)転移となること、強磁性相は一成分朝永 Luttinger 液体で記述されることなどを明らかにした。また、広範なパラメータ空間における高精度の相図を完成させた。これらの結果は、冷却原子系やフラストレート磁性体の有効理論としてしばしば現れる2成分ガス系を考える際、参照点になると考えられる。

15. 冷却原子系におけるボーズ・フェルミ混合系と相関効果 (Akhanjee、古崎)

相互作用が制御可能な3次元ボーズ・フェルミ混合系の励起スペクトルを解析した。フェルミ原子とボーズ原子が結合してフェルミ分子を作る散乱過程が引力的な場合を考え、低エネルギー励起状態の準位幅を議論した。また、1次元ボーズ・フェルミ混合系に対して、原子間の相互作用をボゾン化法と摂動的繰り込み群で扱い、相図を解析している。

16. スピングラス (Akhanjee)

無限レンジ相互作用するスピングラス球形模型に対する新しい解を構成した。レプリカ法を用い、ハミルトニアンをある種のポテンシャルに閉じ込められた対数的相互作用するクーロン気体の問題にマップした。自由エネルギーは、パウルベ・タウ関数のレプリカ極限から得られることを示した。

17. ラシュバ相互作用が強いときの超伝導 (Neupert、小野田、古崎)

最近、酸化物絶縁体 LaAlO_3 と SrTiO_3 の2次元界面で電場によって超伝導が誘起されることが実験的に示され、注目されている。我々は、フェルミ・エネルギーがスピン軌道相互作用と同程度の大きさとなるような低密度領域に対して、ラシュバ型のスピン軌道相互作用が強い2次元電子ガスのクーパ対の対称性や超伝導転移温度について研究している。

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

The ultimate goal of our research is to understand theoretically various properties of materials of macroscopic scale 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 oxides and molecular conductors, which are our major research subjects.

In strongly-frustrated quantum spin systems such as triangular or kagome antiferromagnets, an exotic quantum state, instead of a magnetic ordered state, is expected to emerge. For example, we have recently considered spin nematic and vector 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 frustrated antiferromagnetic spin chain in magnetic field (Hikihara, Momoi, Furusaki)

We studied the ground-state phase diagram of the spin-1/2 one-dimensional Heisenberg model with antiferromagnetic nearest-neighbor coupling J_1 and next-nearest-neighbor interaction J_2 in a magnetic field. We found chiral ordered phase, non-chiral phase with incommensurate pitch angle, and spin density wave phase. We calculated various correlation functions in these phases using the density matrix renormalization group method. The results agree with field-theory predictions. The incommensurate non-chiral phase can be well described with a theory for two-component Tomonaga-Luttinger liquid.

2. Phase diagram of the spin-1/2 frustrated ferromagnetic chain with easy-plane anisotropy (Furukawa, Sato, Onoda, Furusaki)

We determined the ground-state phase diagram of the frustrated spin-1/2 chain with competing ferromagnetic nearest-neighbor J_1 and antiferromagnetic next-nearest-neighbor J_2 couplings in the presence of easy-plane anisotropy. We found that in the classically spiral regime $J_2/|J_1| > 1/4$, the vector chiral ordered phase appears in a large portion of the parameter space and is robust up to the close vicinity of the SU(2)-symmetric case. This result is in accord with the observation of the helimagnetism and the associated ferroelectricity in quasi-one-dimensional cuprates such as LiCuVO₄ and LiCu₂O₂. Furthermore, around $J_2/|J_1| = 1/4$, we found unconventional types of Neel and dimer orders, which appear alternately when changing the anisotropy.

3. Chiral order and electromagnetic excitations in quasi-one-dimensional multiferroics LiCu₂O₂ (Sato, Furukawa, Onoda)

Recently, many physicists have strenuously investigated new type of multiferroics, in which spin spiral order and electric uniform polarization emerge simultaneously below a certain temperature. From these studies, the static correlation between the polarization and spin chirality has been well understood, but basic theory for low-frequency excitations observed in the optical response has not been established yet. Some theories for optical responses in multiferroic manganites are proposed, but their results are not in good agreement with experimental ones. In these manganites Mn ions have spin-2, and such high-spin magnets usually contain various types of magnetic anisotropies, which would make the spin dynamics complicated. We therefore focus on a spin-1/2 quasi-one-dimensional multiferroic compound, LiCu₂O₂. Since spin-1/2 magnets have only a few kinds of magnetic anisotropies, it is easier to develop the corresponding theory. First, we propose a realistic simple model of LiCu₂O₂ and its spiral ordered state, taking into account the established experimental results. It is also confirmed that the NMR spectrum evaluated in the spiral state is consistent with the recent experimental result. On the basis of this classical ordered state, we consider the effects of quantum fluctuation by means of the standard spin-wave theory. Under the assumption that the polarization is coupled to spin chirality and magneto-striction terms, we calculate optical response spectrum. The resulting peak structure explains well observed optical

spectrum.

4. Possible “mixed” RVB states in frustrated magnets (Shindou, Momoi)

We investigate possible quantum spin ground states in those quantum frustrated spin systems having either ferromagnetic or anisotropic exchange interactions. Namely, unlike an anti-ferromagnetic (AF) exchange interaction, these interactions support the spin-triplet pairing of spinons. As a result, such mixed Heisenberg models would realize, as its ground state, those exotic quantum spin liquid (actually “nematic”) states, which go beyond the X.G. Wen’s “zoology” of the symmetric spin liquid. To be specific, we study the following two lattice models. (i) In the J_1 - J_2 square lattice model (nearest neighbor ferromagnetic J_1 , next nearest neighbor AF J_2), we found two mixed RVB states which are (at least locally) stable against the gauge fluctuations (i.e., emergent ones) in the intermediate coupling regime ($J_1:J_2=1:0.4$). One is the spinon-version of the so-called Balian-Werthamer (BW) state, stabilized by the Higgs mechanism. The other is the spinon-version of the chiral p -wave state, where three “apparently massless” gauge fluctuations are controlled by the Chern-Simons mass term. In particular, we found that the former BW state is consistent with the results obtained by the recent exact diagonalization studies. (ii) In the J_1 - J_2 honeycomb lattice model (nearest neighbor J_1 AF, next nearest neighbor J_2 anisotropic), we found that no meaningful mixed RVB ansatz is realized in the entire parameter regime. Instead, we found that, in the strong J_2 limit, the model can be decomposed into two copies of the Heisenberg AF triangle lattices. From this, we found that a certain coplanar (i.e. classical) spin structure having 12 sub-lattice structures is realized in the strong J_2 limit.

5. Quantum melting of spin ice (Onoda, Tanaka)

In pyrochlore-lattice magnets $\text{Pr}_2\text{TM}_2\text{O}_7$ ($\text{TM} = \text{Zr}, \text{Sn}, \text{Ir}$), the basic magnetic properties are characterized by spin-ice-like correlations and the absence of dipole long-range order, as in the classical dipolar spin ice $\text{R}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ($\text{R} = \text{Dy}, \text{Ho}$). On the other hand, it also shows the antiferromagnetic Curie-Weiss temperature, the reduction in the spin-freezing behavior, and appreciable quantum magnetic fluctuations, which sharply contrast to the classical spin ice. To understand these nontrivial phenomena, we derived the effective quantum pseudospin-1/2 model for $\text{Pr}_2\text{TM}_2\text{O}_7$ where the superexchange interaction is dominant over the magnetic dipole interaction, unlike the case of the classical spin ice. The theoretically obtained ground state as a quantum-mechanically melt spin ice has short-range “2-in, 2-out” spin-ice correlations. This produces the same peak positions of the magnetic scattering structure factor as in the classical spin ice. However, the large exchange magnetic anisotropy incorporates “3-in, 1-out” and “1-in, 3-out” configurations to the ground state. This lifts the macroscopic degeneracy and removes the pinch-point singularity. The calculated magnetization curve agrees quantitatively with the experimental result. In fact, this ground is characterized by the magnetic quadrupole moment and the chirality on each tetrahedron. In particular, it is most likely that in the thermodynamic limit, it shows the ferroquadrupole order with the cubic unit cell having 16 Pr moments. On the other hand, the geometrical frustration prevents a long-range order of the chirality. These research results will

shed a new light of nontrivial quantum effects on otherwise classical spin-ice systems.

6. Spinon excitations in optical conductivity of one-dimensional Mott insulators with Peierls instability (Sato)

Optical response in Mott insulators has attracted much attention since the discovery of new multiferroic compounds with a strong coupling between polarization and spin degrees of freedom. We have considered the optical response of organic quasi-one-dimensional Mott insulators with spin-Peierls instability, such as TTF-CA and TTF-BA. These materials can be described by using an ionic Hubbard chain coupled to the lattice modulation. For half-filled Mott phase with a strong Coulomb interaction, we showed that the electric polarization operator is equivalent to a dimerization operator. Above (Below) the spin-Peierls transition temperature, the low-energy effective model is given by a spin-1/2 Heisenberg chain (bond-alternating spin-1/2 chain). Low-energy properties of these models and the dimerization operator can be understood accurately through conformal field theory and integrability techniques. Using these methods, we calculated the optical conductivity in the Mott phase of the half-filled ionic Hubbard chain. It is shown that (1) in the high-temperature phase, the optical conductivity contains a gapless continuum spectrum due to spinon excitations, (2) in the low-temperature Peierls phase, a gapped singlet excitation gives a sharp peak in the conductivity. The amplitudes of the spectra, the singlet-excitation gap, etc., are exactly evaluated.

7. Charge frustration and charge-lattice ordering in a molecular conductor (Seo, Motome)

Molecular conductor DI-DCNQI₂Ag with a quasi-one-dimensional crystal structure has been considered as a typical charge-ordering compound, while there remained some controversies on the nature of the low-temperature ordered phase. Recently, a synchrotron x-ray crystal analysis revealed that the ordering has a complicated pattern of charge density modulation and lattice distortions, and the importance of “charge frustration” has been pointed out. To elucidate the origin of such charge-lattice ordering we have carried out mean-field calculations on an extended Hubbard model coupled to the lattice degree of freedom, and found that this pattern can be stabilized in a realistic parameter region, by taking advantage of the phase competition in the one-dimensional chain to relax the frustration effect. In addition, we found two distinct characteristic temperatures for the development of the two order parameters, i.e., charge and lattice, which provide a clue on the mysterious experimental results such as in transport properties and in NMR.

8. Numerical study of ferrimagnetic charge order and magnetic field effect in p-d coupled molecular conductor (Otsuka, Seo, Motome)

Recently, large magneto-resistance (MR) effect observed in several Fe-Phthalocyanine compounds has been attracting interest. As a theoretical model for the one-dimensional material TTP[FePc(CN)₂]₂ which shows the largest MR, we have numerically studied an extended Hubbard model (p electrons) coupled to an Ising spin chain (d spins) by means of Monte-Carlo simulations. The results show that p-electron charge ordering is drastically enhanced by the presence of d-spins,

accompanied by a peculiar p-d coupled ferri-magnetism, which are consistent with experiments. We have also found large response to the magnetic field, not only the negative MR effect as in the experiments but also more complicated behavior depending on the parameters, which suggest interesting possibilities to be explored in future experimental works.

9. Andreev transport through double quantum dots in series (Tanaka)

We studied Andreev transport through double quantum dots connected in series normal and superconducting leads, using the numerical renormalization group. We found that for small values of the inter-dot coupling, the ground state of this system shows a crossover between a local superconducting singlet state and a Kondo singlet state. The difference between these singlet states is clearly reflected in the transport properties. For the local superconducting singlet with small Coulomb interaction, the conductance has a peak with the unitary-limit value. In contrast, in the Kondo singlet region the Andreev reflection is suppressed by the Coulomb interaction. With increasing the inter-dot coupling, another singlet with an inter-dot character becomes dominant, and the conductance decreases.

10. Observation of Andreev bound states in a quantum dot coupled to a superconductor (Tanaka)

Andreev bound states are formed in a quantum dot coupled to a superconductor because of the superconducting proximity. We showed, in collaboration with Tarucha group of University of Tokyo, that the spectrum of the Andreev bound states can be detected in transport measurements with a quantum dot strongly coupled to a superconducting lead and weakly coupled to a normal metal lead. We also observed phase transitions between a spin-singlet state and a magnetic doublet state when the quantum dot chemical potential is tuned with an electrostatic gate, in good qualitative agreement with numerical renormalization group calculations.

11. Skyrmion-lattice formation and the anomalous Hall effect (Onoda)

Experimental findings have been accumulated in non-centrosymmetric magnets including MnSi, which suggest that magnetic field induces a formation of a Skyrmion lattice with the hexagonal symmetry. Here, the Skyrmion lattice is a superlattice of the substructure where the spin directions take a noncoplanar configuration having a winding number about the center. To understand this nontrivial phenomenon, we analyzed a minimal effective spin model including the Dzyaloshinskii-Moriya interaction and performed numerical simulations. It is found that with moderate magnetic anisotropy and the applied magnetic field, the system undergoes a phase transition from a long-wavelength helical magnetic order to another magnetic order in which the spins form Skyrmion lattices. The Skyrmion lattice can take the six-fold, four-fold, and two-fold rotational symmetries, depending on the magnitudes of magnetic anisotropy and the magnetic field. We also calculated the anomalous Hall conductivity associated with these states, and showed a prominent increase of the anomalous Hall effect due to the spin chirality at the onset of the Skyrmion-lattice formation. These results will provide a guiding principle for verifying and understanding the Skyrmion-lattice formation in real materials.

12. Informational entropy for analyzing quantum critical wave functions (Furukawa)

We applied the informational perspective to the characterization of quantum many-body ground states. We introduced a new quantity, configuration entropy, which measures the amount of quantum fluctuations occurring in the ground state of a one-dimensional system. We showed that this quantity is equivalent to the entanglement entropy of the Rokhsar-Kivelson wave function built from the corresponding two-dimensional classical model. We studied the scaling law of the entropy in various models and found that it contains universal constants determined by the basic properties of the system. In Tomonaga-Luttinger liquid, the universal constant is a simple function of the boson compactification radius (or Luttinger parameter). In a massive (crystal) phase, the constant is related to the ground-state degeneracy. These results indicate that the configuration entropy can be a new tool for analyzing quantum critical phenomena.

13. Disordered topological quantum critical point in a three-dimensional system (Shindou, Nakai, Murakami)

Generic non-magnetic disorder effects on those topological quantum critical points (TQCP), which intervene the 3-dimensional topological insulator and an ordinary band insulator, are investigated. We first show that, in such 3-d TQCP, any backward scattering process mediated by the chemical-potential-type impurity (the representative non-magnetic impurity potential) is always set off by its time-reversal (T -reversal) counter-process, because of the non-trivial Berry phase supported by these two processes in the momentum space. However, this cancellation does not hold true for those backward scatterings mediated by generic T -symmetric impurity potentials, while the absolute stability of the TQCP against any non-magnetic disorders is generally required by the bulk-edge correspondence. Motivated by this, we further derive the self-consistent Born phase diagram and the quantum conductivity correction in the presence of generic non-magnetic disorder potentials. The distinction and the similarity between the case with only the chemical-potential-type disorder and that with the generic non-magnetic disorders are summarized.

14. Quantum phase transition to ferromagnetic liquid in two-component Bose and Fermi gases (Sato, Furukawa)

Internal degrees of freedom in many-body systems generally enrich their physical properties. We here focus on two-component (spin-1/2) Bose/Fermi gases on one-dimensional lattice as a simple system with internal degrees of freedom. This situation could be realized in ultracold atoms. It is easily expected that a strong inter-component repulsion induces a quantum phase transition from a population balanced state to an imbalanced (ferromagnetic) state when exchange between different components is allowed, and this is one of the most fundamental phenomena in two-component gases. Nevertheless, the corresponding theory has not been developed yet: both the weak-coupling bosonization and the recent strong-coupling theory for two-component gases cannot capture the nature of the phase transition. We therefore study the features of the phase transition and the

ferromagnetic state by combining the analytical approaches with powerful numerical methods (iTEBD and numerical diagonalization). It is shown that (1) the ferromagnetic transition is of first-order type/ second-order Ising type when the inter-component hopping is absent/present, and (2) the ferromagnetic state is described by a one-component Tomonaga-Luttinger liquid. The accurate phase diagram in the wide parameter region is constructed. These results would be a reference point when we consider various types of two-component gases which appear as effective theories of cold-atom systems, frustrated magnets, etc.

15. Bose-Fermi Mixtures and Correlated Phenomena in Cold Atomic Gases (Akhanjee, Furusaki)

(a) The excitation spectrum was analyzed for a three-dimensional (3D) Bose-Fermi mixture with tunable resonant interaction parameters and high hyperfine spin multiplets, with an emphasis on effects of an attractive 3-particle vertex describing fermionic and bosonic atoms which can scatter to create fermionic molecules. It was argued that the low lying excitations (broadened energy levels) of the mean-field theory are described by a local Fermi liquid picture with a Lorentzian density of states which is justified by a $1/N$ expansion. Additionally, it was demonstrated how the bosonic chemical potential exhibits a novel crossover effect which modifies condensation and superfluid-insulator transitions.

(b) We have utilized the renormalization group method within a bosonization scheme to study one-dimensional (1D) 3-component mixtures of bosonic and fermionic atoms that can combine to form molecular fermions.

16. Spin Glasses (Akhanjee)

An exact solution has been developed of a Gaussian spin-glass model with infinite ranged interactions and a global spherical constraint at zero magnetic field. The replicated spin-glass Hamiltonian was mapped onto a Coulomb gas of logarithmically interacting particles confined by a peculiar single particle potential. The precise free energy is obtained by analyzing the Painleve tau function in the $n \rightarrow 0$, limit, accounting for neglected fluctuations beyond the semi-circle density utilized in the large N analysis of Kosterlitz, Thouless and Jones.

17. Superconductivity in the presence of strong Rashba spin-orbit interaction (Neupert, Onoda, Furusaki)

Recent experiments with gated two-dimensional interfaces demonstrated the possibility of superconductivity induced by electric field, e.g., at the interface between the insulating oxides LaAlO_3 and SrTiO_3 . Motivated by these experiments, we have been studying Cooper pairing in a two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit interaction, in the regime of low electron density where the Fermi energy is of the same order as the spin-orbit interaction.

Principal Investigator

古崎 昭 Akira Furusaki

久保 健 Kenn Kubo

宮下 精二 Seiji Miyashita

常次 宏一 Hirokazu Tsunetsugu

Research Staff

桃井 勉 Tsutomu Momoi

Nicholas Shannon

Jaime Merino

小野田 繁樹 Shigeki Onoda

古川 俊輔 Shunsuke Furukawa

妹尾 仁嗣 Hitoshi Seo

古川 俊輔 Shunsuke Furukawa

進藤 龍一 Ryuichi Shindou

田中 洋一 Yoichi Tanaka

佐藤 正寛 Masahiro Sato

Shimul Akhanjee

大塚 雄一 Yuichi Otsuka

Students

仲井 良太 Ryota Nakai

Titus Neupert

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