

## 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、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. $Z_2$ ワイル・ディラック半金属の提案（森本、古崎）

K 理論に基づいたトポロジカル絶縁体の分類理論を応用し、 $Z_2$  トポロジカル数で特徴づけられるワイル・ディラック半金属を提案した。従来のワイル半金属は時間反転対称性か空間反転対称性のいずれかが破れているときに、ブリルアンゾーン内のギャップレス点が安定的に存在できて、チャーン数で特徴づけられる。我々はこれを拡張し、時間反転対称性および空間反転対称性に加えスピン回転対称性が存在するときに  $Z_2$  トポロジカル数で特徴づけられるディラック点が安定に存在しうることを提案した。

#### 2. $SU(3)$ スピン鎖における $Z_3$ トポロジカル相（森本、上田、桃井、古崎）

一次元量子スピン系において知られているハルデン相を拡張し、 $SU(3)$  対称性をもつ一次元系にあらわれる  $Z_3$  トポロジカル相について解析を行った。群コホモロジーによるトポロジカル相の一般論を応用し、 $Z_3$  トポロジカル相を実現する  $SU(3)$  スピンのハミルトニアンを導出した。我々はより一般の  $SU(3)$  スピンハミルトニアンを DMRG により解析し、その相図とトポロジカル相転移点への理解を得た。

#### 3. スピン 1/2 フラストレート交替鎖に現れる対称性に守られたトポロジカル相（上田、小野田）

擬1次元銅酸化物の有効模型となる、最近接交換相互作用が強磁性的でかつ次近接交換相互作用が反強磁性的であるフラストレートしたスピン  $S=1/2$   $XXZ$  ジグザグ交替鎖の基底状態相図を、対称性に守られたトポロジカル相 (SPT 相) の観点から数値的に解析した。特に、2つの実空間反転対称性を破ったダイマー相間にセントラル・チャージ  $c=1$  の共形場理論で特徴づけられる臨界性を持つ連続相転移が現れることを示し、この連続相転移が時間反転対称性によって守られた SPT 相転移であることを明らかにした。

#### 4. 一次元トポロジカル絶縁体における強相関効果 (吉田)

一次元トポロジカル絶縁体における電子相関効果を解析するため、Su-Schrieffer-Heeger モデルに局所相互作用、スピン交換相互作用を取り入れたモデルを解析した。自由電子系のトポロジカル相においては以下の性質が知られている。(i) バルクの非自明な構造に起因して、試料の端では一粒子スペクトルにゼロエネルギー状態がみられる。(ii) バルクのトポロジカルな構造が変化する際にはバルクギャップが閉じる。本研究では強相関効果に起因して上述の振舞いとは本質的に異なる挙動をする事を明らかにした: (I) 一粒子励起はギャップを持つがバルクの非自明な構造に起因して、スピン励起においてゼロエネルギーモードを示すトポロジカルモット絶縁体が一次元系で発現する事、(II) 強相関系では一般にはトポロジカル相転移の際に状態密度においてギャップが閉じる必要はなく、実際にスピン交換相互作用が誘起するトポロジカル相転移において上述の非従来型のトポロジカル相転移を見出した。

#### 5. 二次元鏡映対称性により守られたトポロジカル相の分類 (吉田、森本、古崎)

近年、空間対称性によって守られた topological crystalline insulators が SnTe において見出された。強相関系においても、対称性によって保護されたトポロジカル相 (symmetry protected topological (SPT) phase) が bose 粒子系、spin 系においても発現する。本研究では、Chern-Simons 理論に基づき、鏡映対称性によって保護されたトポロジカル相の分類を行い、鏡映対称性によって保護された相を示す spin 系のモデルを構築した。さらに、fermi 粒子系では整数値でラベルされるトポロジカル相は強相関効果により  $Z_4$  の代数をなす相に変化する事が知られているが、新たに離散的な局所対称性に起因して  $Z_N$  の代数をなす相が発現する事も指摘した。

#### 6. パイロクロア Ir,Rh 酸化物の電子状態におけるトポロジーと電子相関 (小野田)

強いスピン軌道相互作用をもったパイロクロア酸化物  $A_2M_2O_7$  ( $A=La, Y$ ;  $M=Ir, Rh$ ) に対して、OPENMX パッケージを用いて LDA、および、LDA+U 法による第一原理計算を行った。その結果、常磁性の金属、フェルミ点をもつ半金属、 $Z_2$  トポロジカル絶縁体が得られた。これらの状態はクーロン相互作用が弱い限り安定である。さらに、all-in, all-out 反強磁性構造を示すと思われる  $Y_2Ir_2O_7$  に対しては反強磁性絶縁体、 $Pr_2Ir_2O_7$  に対しては常磁性金属という実験結果を再現する、尤もらしいオンサイトクーロン斥力  $U$  の値を得ることに成功した。

#### 7. パイロクロア磁性体におけるスピン・ネマティック相 (桃井)

クロムスピネル酸化物  $ACr_2O_4$  ( $A=Zn, Cd, Hg$ ) において高磁場測定で観測されている飽和磁場近傍の新規な相の特性を明らかにするため、パイロクロア格子上的  $S=3/2$  反強磁性スピンモデルを調べた。スピンと格子の結合に由来するスピンの双2次型相互作用の効果によりマグノン対が生成することを見出し、全磁場領域における相図を完成させた。この結果は、実験と定性的により一致を示す。また、スピン・ネマティック相におけるジャロシンスキー・守谷型相互作用の効果も議論し、相の安定性を調べた。

さらに、スピンのサイズを変え、 $S=1$  の双 1 次・双 2 次型スピン模型の相図を調べ、スピンサイズが  $S=3/2$  と  $S=1$  の系における違いを明らかにした。

#### 8. スピン液体の量子モンテカルロシミュレーション (紙屋、加藤)

フラストレート磁性体において量子スピン液体の可能性に大きな関心を持たれているが、これらの系のハミルトニアンは解析が難しく決定的証拠を得ることは容易でない。一方、Kitaev 模型などの一連の理論模型は量子スピン液体が基底状態であることが厳密に示され、また摂動や有限温度の効果を数値計算により定量的に調べられるという点で非常に有用である。今回我々は 3 次元版の toric code に Ising 相互作用を加えた系を量子モンテカルロ法によって調べ、常磁性相、量子スピン液体相、および磁気秩序相を含む熱力学相図を得た。本計算では多スピン非対角項を効率よく扱える新手法を考案し適用した。

#### 9. $S=1/2$ 三角格子スピン系 $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ の磁場中秩序相の解析 (紙屋)

フラストレート量子スピン系の一つの典型例であるスピン  $1/2$  の三角格子反強磁性体の新物質  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$  の磁場中秩序相の解析を行った。空間二次元かつ異方性がない場合のスピン波解析から評価される擬古典的な相互作用として量子効果を取り入れ、これと磁気異方性およびの面間相互作用の摂動項の競合の結果として得られる基底状態相図を解析した。得られた相図は最近の Yamamoto らによるクラスター平均場近似による結果とコンシステントであり、また共同研究者の Koutroulakis らによる NMR の実験結果を一部領域 (異方性軸に平行に磁場がかけられた場合の飽和磁場近傍) を除き定性的に再現することがわかった。

#### 10. $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ の磁化過程の理論解析 (Marmorini)

三角格子上反強磁性スピン  $1/2$  XXZ 模型を徹底的に調査し、最近  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$  の実験で観測された磁化ダイナミクスに応用した。クラスター平均場+スケーリング (CMF+S) 法と希薄 Bose 気体展開法を用いた。両方法はスピン系だけでなく光格子冷却原子系に対しても応用されており、二つの研究分野が理論的には類似していることを示す一例である。主な研究成果は次の通りである。1) 量子揺らぎがフラストレートスピン系の基底状態の縮退を取り除き、古典的では存在しない新たな相を安定化させる機構が分かった。2) 模型計算は測定された磁化曲線とよく一致しており、 $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$  が幾何学的にほぼ完璧な三角格子容易面異方的磁性絶縁体であることを確認した。3)  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$  の横磁場磁化異常は、二次元模型には存在しない反強磁性層間結合による一次相転移で説明できた。さらにこの一次相転移は模型計算でどんなに小さな反強磁性層間結合でも現れる、三角格子上容易面異方的反強磁性体の一般的な特徴であることを示した。

#### 11. 一般化スピン波理論 : Bilinear-biquadratic 模型への適用 (加藤)

スピン波理論は代表的な磁性体の模型の近似手法として、広く使われている。伝統的なスピン波理論は Holstein-Primakoff 変換を用いてスピン演算子をボゾンの演算子に書き換え、一体問題の範囲内で模型を近似的に取り扱う。この方法により、基底状態の励起スペクトルなどの情報が得られ、基底状態の安定性を議論する事ができる。このスピン波理論を一般化し、 $N$ 種類ボゾンを導入したものが、複数のグループで各々の模型に対して使用されてきた。本研究ではこの一般化スピン波理論の数学的枠組みを、 $SU(N)$  Schwinger boson 表示を用いて整理した。その枠組みを用いて、伝統的なスピン波理論では取り扱えなかった四重極秩序が安定化される Bilinear-biquadratic 模型に適用した。

## 12. 光格子中 2 成分ボーズ混合気体の重いソリトンと表面臨界現象 (加藤)

1 成分の冷却ボーズ気体を光格子中に閉じ込め、格子の深さを変えると、モット絶縁体-超流動転移が起こる事が知られている。昨年度、1 成分ボーズ気体の転移は連続転移であるのに対し、2 成分の混合気体を用いると不連続転移になる場合があることを示した。本年度は、この不連続点移転近傍で、冷却原子気体の分野で広く研究されているソリトンについて調べた。その結果、不連続転移近傍でソリトンの質量およびサイズが発散的に大きくなることがわかった。不連続転移で特徴的長さが発散する事例として表面臨界性が知られており、本研究ではソリトンサイズの発散と表面臨界現象との関係を明らかにした。

## 13. 分子性導体 $X[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ のフラグメントモデルと相競合 (妹尾)

擬 2 次元分子性導体  $\beta'$ - $X[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$  は多様な物性を対し、第一原理計算を元にしたモデルに平均場近似を適用し、 $X$  の違いや相互作用の大きさによる電子状態の変化を系統的に調べた。基底関数として  $\text{Pd}(\text{dmit})_2$  分子の配位子上に局在した 2 つのフラグメント分子軌道を取り、オンサイトおよびサイト間のクーロン相互作用、ならびに格子変位と電子の結合を考慮した結果、 $X$  によって異なるスピン構造を持つ反強磁性相が安定化し、また特異な電子格子結合状態とも競合することがわかった。クーロン相互作用と電子相互作用パラメータを変化させたときの相図を導出し、実験相図との比較を行った。

## 14. 電荷フラストレーション系の光誘起ダイナミクス (妹尾)

異方的三角格子上のスピンレスフェルミオンモデルを用いて、電荷フラストレーション系の光誘起電荷ダイナミクスを調べた。パルスポンプ光を照射した後の系の実時間発展を、厳密対角化法を用いて解析した。パラメータ領域に依って安定化する異種の電荷秩序における光誘起励起状態が異なることを見出し、この原因が光誘起状態における電荷フラストレーション効果にあることが分かった。

## 15. $\text{BiNiO}_3$ における金属間電荷移動と絶縁体-金属転移 (中, 妹尾)

巨大な負熱膨張を示すことで注目を集めているペロブスカイト型酸化物  $\text{BiNiO}_3$  における、 $\text{Bi-Ni}$  間の電荷移動を伴った特異な絶縁体-金属転移の微視的な機構を調べた。電子状態を記述するミニマルなモデルとして、 $\text{Bi}$  と  $\text{Ni}$  サイト当り単一の電子軌道を考え、これらの間の電子遷移とクーロン相互作用を考慮した二次元有効モデルを導入し、平均場近似により解析した。 $\text{Bi-Ni}$  軌道間の一電子エネルギー差が小さい場合、系は  $\text{Bi}$  の電荷秩序を伴った絶縁体となり、軌道間のエネルギー差を増加させると、 $\text{Ni}$  から  $\text{Bi}$  へ電荷移動を伴って金属相へと転移することを示した。有限温度の電子状態相図は、実験で得られている圧力-温度相図を定性的に良く再現している。

## 16. 超流動ヘリウム 3-B 相の量子渦束縛状態 (堤)

トポロジカル超流動体である超流動ヘリウム 3-B 相の量子渦に束縛された準粒子励起のトポロジカルな性質についての研究を行った。B 相の量子渦は 3 種類の空間対称性の有無により分類されているが、対称性を反映して量子渦の種類によって量子渦束縛状態が異なる。特に、二重回転と時間反転の同時操作に対する対称性を持つ量子渦では、対称性に保護されたゼロエネルギーモードがマヨラナフェルミオンとして存在することを見出した。

## 17. パウリ常磁性効果の強い多バンド超伝導体 (堤)

パウリ常磁性効果の強い単バンド超伝導体では、臨界磁場での正常状態への転移が一次相転移となることがよく知られている。しかし、実際には、強いパウリ常磁性効果にも関わらず一次相転移を示さない物質が多く存在する。本研究では、多バンド超伝導体での一次相転移が消失する可能性を指摘した。一次相転移が起こらない場合にも熱力学量の異常が臨界磁場以下にあることも示したが、これは実験でも観測されている。

## 18. ボゴリューボフ理論による南部ゴールドストーンモードの分類と数え上げ理論 (高橋)

自発的対称性の破れに伴って様々な物理系で普遍的に現れるギャップレス励起である南部ゴールドストーンモードは、その分散関係が線形か二乗かによってタイプIまたはタイプIIと呼ばれる。対称性の破れた系がタイプI、タイプIIのモードを幾つ持つかという問題が近年注目を集めている。我々は、凝縮系の物性の理論解析に広く用いられるボゴリューボフ理論を用いてこの問題を解析し、既知の結果の再現だけでなく、我々の定式化でのみ可能な様々な拡張を与えた。例えば、スピン2のボーズ凝縮体や超対称理論等で存在が予言されている擬南部ゴールドストーンモードの分類と数え上げの一般論の構築、位相欠陥に付随する南部ゴールドストーンモードの分散関係の有限サイズ効果の理論的導出、などを行った。

## 19. スピノールボース・アインシュタイン凝縮体のスカラーの間に成り立つ不等式 (高橋)

冷却原子気体系ではスピンを持つボース・アインシュタイン凝縮体の実現されており、多成分凝縮系に特有の物理現象が理論・実験の両面から盛んに調べられている。我々はこの系に存在する幾何学的不変量 (スカラー) の間に成り立つ新たな不等式を発見した。これは多成分系の相図決定問題や、渦等の位相欠陥の内部構造の決定に有用であると期待される。

-----  
**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, topological insulators, 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.

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. $Z_2$ Weyl and Dirac semimetals (Morimoto, Furusaki)

We proposed novel Weyl and Dirac semimetals characterized by  $Z_2$  topological numbers, by applying the classification theory of topological insulators based on the K-theory. Conventional Weyl semimetals possess gapless points in the Brillouin zone characterized by integer Chern numbers when either time-reversal symmetry or inversion symmetry is broken. We studied novel Dirac semimetals with gapless points characterized by  $Z_2$  topological numbers which are stable when the spin  $SU(2)$  symmetry is present in addition to the time-reversal and inversion symmetries.

### 2. $Z_3$ topological phases in $SU(3)$ spin chains (Morimoto, Ueda, Momoi, Furusaki)

We studied  $Z_3$  topological phases in one-dimensional spin systems with  $SU(3)$  symmetry, which is a nontrivial extension of the well-known Haldane phase. We derived a Hamiltonian of  $SU(3)$  spins that realizes the  $Z_3$  topological phase by using the general classification theory of topological phases from the group cohomology. We performed DMRG analyses to obtain the phase diagram of general  $SU(3)$  spin Hamiltonians and understand the nature of the topological phase transition.

### 3. Symmetry-protected topological phases in a frustrated spin-1/2 XXZ chain (Ueda, Onoda)

We investigated ground-state phase diagrams of frustrated spin-1/2 XXZ zigzag alternating chains relevant to quasi-one-dimensional cuprates in the light of symmetry-protected topological (SPT) phases. In particular, we found a continuous phase transition, which can be characterized by a conformal field theory of the central charge  $c=1$ , between two parity-broken dimer phases. In addition, we showed that this continuous phase transition is an SPT phase transition protected by only the time-reversal symmetry.

### 4. Correlation effects on topological insulators in one dimension (Yoshida)

In order to clarify correlation effects on one-dimensional topological insulators, we have analyzed an extended Su-Schrieffer-Heeger model, including on-site Coulomb interaction and spin exchange interactions. For free-fermion topological insulators, the following two behaviors are generally observed; (i) zero-energy boundary modes in the single-particle spectrum are stabilized due to nontrivial topological properties in the bulk (ii) the topological properties can change only via gap-closing. Our study reveals that above mentioned behaviors are drastically changed by correlation effects; (I) Correlation effects destroy gapless modes in the single-particle spectrum and induce gapless spin excitations at edges which are protected by the nontrivial topological properties

in the bulk. (II) Electron correlation can change topological properties without gap-closing in the density of state. Such an unconventional type of topological phase transition can be observed at interaction-induced topological phase transition points.

#### **5. Classification of topological phases protected by reflection symmetry (Yoshida, Morimoto, Furusaki)**

Applying classification scheme based on the Chern-Simons theory, we have classified SPT phases protected by a reflection symmetry. We have proposed a spin model which shows a topologically nontrivial phase protected by the reflection symmetry. Furthermore, we have pointed out that correlation effects can reduce topological classification of free-fermion systems from  $\mathbb{Z}$  to those of  $\mathbb{Z}_N$  in the presence of local discrete symmetry. Here,  $N$  denotes order of the local symmetry.

#### **6. Topology and electron correlations in electronic structures of pyrochlore Ir and Rh oxides (Onoda)**

We have performed intensive and extensive first-principles LDA and LDA+U calculations on strongly spin-orbit coupled pyrochlore oxides  $A_2M_2O_7$  ( $A = \text{La, Y; } M = \text{Ir, Rh}$ ) on the basis of the OPENMX package. We obtained a paramagnetic metal, Fermi-point semimetal, and  $\mathbb{Z}_2$  topological insulator phases, which are stable against at least weak Coulomb interaction. Furthermore, we have obtained a reasonable value of the onsite Coulomb repulsion  $U$ , which reproduces an antiferromagnetic insulator for  $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ , which most likely shows the all-in, all-out magnetic structure and a paramagnetic metal for  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ .

#### **7. Spin nematic phase in pyrochlore antiferromagnets (Momoi)**

To clarify the nature of the experimentally observed unknown phase of chromium spinel oxides  $A\text{Cr}_2\text{O}_4$  ( $A = \text{Zn, Cd, Hg}$ ) in high magnetic field, we studied the  $S = 3/2$  bilinear-biquadratic spin model with a biquadratic interaction on the pyrochlore lattice. We obtained magnetic phase diagram in applied magnetic field, which contains a spin nematic phase below saturation field. We discussed the effect of both Dzyaloshinskii-Moriya interaction and spin size ( $S = 3/2$  and  $S = 1$ ), studying the stability of this spin nematic phase.

#### **8. Quantum Monte Carlo study of a spin liquid (Kamiya, Kato)**

While extremely frustrated magnets may realize quantum spin liquid (QSL) ground states, it is by no means easy to obtain conclusive evidence. On the other hand, series of models such as the Kitaev model are useful because one can rigorously show that their ground states are QSLs and moreover can investigate perturbative and/or thermal effects quantitatively by numerical methods. In the present study, we investigated a 3D version of the toric code perturbed by the Ising coupling by using world-line quantum Monte Carlo simulations. We obtained a phase diagram featuring the paramagnetic, QSL, and magnetic ordered phases. We applied our new algorithm that can deal with multi-spin off-diagonal terms very efficiently.

## 9. Magnetic phase diagram of the $S=1/2$ triangular-lattice antiferromagnet $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ (Kamiya)

To explain the recently reported magnetic phase diagram of the spin-1/2 triangular-lattice compound  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ , we proposed a semiclassical mean-field theory for the easy-plane XXZ model on the stacked triangular-lattice with a small inter-layer coupling. Quantum effects are incorporated by deriving effective interactions from the linear spin-wave analysis of the two-dimensional model. This analysis reproduced the main experimental observations, such as the 1/3-magnetization plateau ( $B \parallel a$ ), a cusp near 1/3 of the saturated moment ( $B \parallel c$ ), and a small step anomaly in the high field regime. The predicted spin configurations were compared against the NMR measurements on this compound, showing a very good agreement except for a small region near the saturation field for  $B \parallel c$ . Our results are also consistent with recent cluster mean-field calculations done by Yamamoto et al.

## 10. Theoretical analysis of the magnetization process of $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ (Marmorini)

We performed a thorough investigation of the spin 1/2 XXZ model on the triangular lattice, a prototypical model of quantum frustrated spins, and applied it to the magnetization dynamics of  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ , recently observed experimentally. We employed a combination of cluster mean field theory with a scaling scheme and dilute Bose gas expansion; both techniques have been previously used not only for spin systems but especially for cold atoms in optical lattices, which is an example of the theoretical proximity of the two fields. Main results are as follows. i) A novel mechanism is found for which quantum fluctuations remove the classical degeneracy of ground states of a frustrated spin system and stabilize a non-classical phase. ii) Agreement between the model calculation and the measured magnetization curves confirms  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$  as a geometrically almost perfect triangular-lattice magnetic insulator with small easy-plane spin anisotropy as suggested by independent measurements (e.g. ESR). iii) The anomaly in the transverse field magnetization of the same material can be explained by an additional first-order phase transition induced by the non-vanishing antiferromagnetic interlayer coupling, which is not present in the purely two-dimensional model; moreover, the model calculation identifies this as a general feature of triangular-lattice easy-plane quantum antiferromagnets because it appears however small the interlayer coupling is.

## 11. Generalized spin-wave theory: Application to the bilinear–biquadratic model (Kato)

The traditional spin-wave theory has been widely used for understanding quantum magnets. In this work, we revisited a mathematical framework for the multi-boson ( $N$ -flavored bosons) approach that has been used by several groups. We demonstrated that the multi-boson approach corresponds to a generalization of the traditional spin-wave theory from  $\text{SU}(2)$  to  $\text{SU}(N)$ . This generalization enables to treat quantum spin systems whose ground states exhibit multipolar orderings. We illustrate the advantages of the generalized spin-wave theory by applying it to a bilinear–biquadratic model of arbitrary spin  $S$  on hypercubic lattices as an example.

## 12. Heavy solitary wave and surface criticality in binary ultracold bosonic gases loaded into an



### **optical lattice (Kato)**

It is well known that ultracold bosonic gases loaded into an optical lattice exhibit the so-called superfluid-Mott insulator transition by changing the depth of the lattice potential. The transition is always continuous in the case of single-component atomic gases while it can be discontinuous in the case of multi-component gases. In this project, we investigated the solitary wave in a superfluid of binary Bose mixtures near the discontinuous superfluid-Mott insulator transition point where the filling factor is close to even number and the inter-species interaction is smaller than but close to the intra-species interaction. It turned out that the mass and size of the solitary wave diverges at the discontinuous transition point. We found that this divergence is closely related to the surface criticality appearing in matters which exhibits first-order phase transition in bulk.

### **13. Effective model study of molecular conductors $X[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ (Seo)**

Quasi-two-dimensional molecular conductors  $\beta'$ - $X[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$  show a variety of physical properties. We apply a mean-field analysis to the model based on first-principles band calculations, and investigate the variation of electronic states by the choice of X and the effect of interactions. We take the basis functions of the model as two fragment molecular orbital localized on the dmit ligands, and take into account the on-site and intersite Coulomb interaction as well as coupling between the electrons and lattice distortions. We find that, depending on X, antiferromagnetic states with different spin pattern are stabilized, which compete with a peculiar charge-lattice ordered state. Phase diagrams by varying Coulomb interactions and electron-lattice couplings are derived and compared with the experiments.

### **14. Photo-Induced Dynamics in Charge-Frustrated Systems (Seo)**

Photo-excited charge dynamics of interacting charge-frustrated systems are studied using a spinless fermion model on an anisotropic triangular lattice. Real-time evolution of the system after irradiating a pump-photon pulse is analyzed by the exact diagonalization method. We find that the photo-induced excited states from two types of COs depending on parameter are distinct, whose origin is attributable to the charge frustration effects occurring in the photo-excited states.

### **15. Insulator-metal transition and intermetallic charge transfer in $\text{BiNiO}_3$ (Naka, Seo)**

We have investigated the microscopic mechanism of a novel insulator-metal transition accompanied by the intermetallic charge transfer in  $\text{BiNiO}_3$ , which is attracting interests because of its huge negative thermal expansion. As a minimal electronic model, we consider a single electron orbital on each Bi and Ni site, and take into account electron hoppings and Coulomb interactions, which we analyze by mean-field approximation. We find that an insulator-to-metal transition occurs, by the charge transfer between Bi and Ni sites together with the charge ordering in the Bi sites, by increasing the energy difference of Bi and Ni orbitals. The finite temperature phase diagram qualitatively well reproduces the pressure-temperature phase diagram obtained in experiments.

#### **16. Vortex bound state in superfluid $^3\text{He}$ B-phase (Tsutsumi)**

We studied topological natures of the vortex bound states in the superfluid  $^3\text{He}$  B-phase. In the B-phase, different kinds of vortices classified in terms of three types of spatial symmetries have the different vortex bound states reflecting the symmetry. We found that the vortices with the combined symmetry of two-fold rotation and time-reversal operation has symmetry protected Majorana zero-energy modes.

#### **17. Pauli paramagnetic effect in multiband superconductors (Tsutsumi)**

It has been known that the phase transition at the upper critical field becomes first-order phase transition in single-band superconductors with strong Pauli paramagnetic effect. In reality, however, there are many superconductors without the first order phase transition in spite of the strong Pauli paramagnetic effect. In this study, we pointed out that the possibility of disappearance of the first order phase transition in multiband superconductors. We also showed the observed anomalies in thermodynamic quantities below the critical field.

#### **18. Bogoliubov theoretical formulation for classification and counting rule of Nambu-Goldstone modes (Takahashi)**

Nambu-Goldstone modes, which universally emerge in spontaneously symmetry broken systems, are called type-I or type-II, if they have linear or quadratic dispersion relations, respectively. How to determine the number of type-I and type-II modes in given systems is a recent hot topic in both condensed matter and high-energy physics. We have solved this problem using the standard Bogoliubov theory widely used in condensed matter systems with superfluid order parameters, and provided a variety of generalizations. For example, we have constructed the classification and counting theory of quasi-Nambu-Goldstone modes, which are predicted to appear in spin-2 Bose condensates or supersymmetric field theories. Also, we have derived finite-size corrections for dispersion relations of Nambu-Goldstone modes associated with topological defects such as domain walls or vortices.

#### **19. Inequality between scalars of spinor Bose condensates (Takahashi)**

In ultracold atomic gases, Bose-Einstein condensates with spin degree of freedom are realized. They offer opportunities to investigate rich phases and topological defects emerging due to multi-component nature of order parameters. We have found a new inequality between geometrical invariants (scalars) in these systems, which will be useful to determine phase diagram or detailed profiles of vortex cores.

### ***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

Troels Bojesen

紙屋 佳知 Yoshitomo Kamiya

加藤 康之 Yasuyuki Kato

Giacomo Marmorini

森本 高裕 Takahiro Morimoto

中 惇 Makoto Naka

高橋 大介 Daisuke Takahashi

堤 康雅 Yasumasa Tsutsumi

上田 宏 Hiroshi Ueda

吉田 恒也 Tsuneya Yoshida

### ***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

是常 隆 Takashi Koretsune

久保 健 Kenn Kubo

求 幸年 Yukitoshi Motome

二宮 正夫 Masao Ninomiya

野村 健太郎 Kentaro Nomura

笠 真生 Shinsei Ryu

坂井 徹 Toru Sakai

佐藤 正寛 Masahiro Sato

進藤 龍一 Ryuichi Shindou

Konstantin Matveev

Christopher Mudry

Nicholas Shannon

Philippe Sindzingre