

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 21 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2016

課題番号：15K17702

研究課題名(和文) 遷移金属酸化物における強相関トポロジカル電子状態の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical studies on strongly correlated topological phases in transition metal oxides

研究代表者

山地 洋平 (YAMAJI, Youhei)

東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・准教授

研究者番号：00649428

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：パイロクロア構造イリジウム酸化物の対称性に基づく有効ハミルトニアンを用いて、可動性の金属磁壁の機能性および制御性を解明した。金属磁壁のフェルミ面が、ラッシュバ金属とよく似たヘリカルなスピン構造を有することを発見し、金属磁壁で起こる金属-絶縁体相転移や、金属磁壁が示す光学異常ホール効果、円二色性およびハーフ・メタルとしての性質を明らかにした。また、磁壁を磁場と薄膜化によって制御する手法を理論的に提案した。さらに、イリジウム酸化物以外のパイロクロア構造遷移金属酸化物について、金属磁壁の出現と密接な関係を持つワイル電子の対消滅の様式を分類し、金属磁壁の有無についても成果を得た。

研究成果の概要(英文)：Spontaneous symmetry breakings, metal-insulator transitions, and transport properties of magnetic-domain wall states in pyrochlore iridium oxides are studied by employing a symmetry-adapted effective Hamiltonian with a slab of the pyrochlore structure. Emergent metallic domain wall, which has an unconventional topological nature with a controllable and mobile metallic layer, is shown to host Fermi surfaces with modulated helical spin textures resembling Rashba metals. The helical nature of the domain-wall Fermi surfaces is experimentally detectable by anomalous Hall conductivity, circular dichroism, and optical Hall conductivity under external magnetic fields. Possible applications of the domain-wall metals to spin-current generation and “half-metallic” conduction are also discussed. The controllability of the domain walls is also clarified.

In addition to the iridium oxides, pair-annihilation of Weyl electrons and the emergence are studied in other pyrochlore transition metal oxides.

研究分野：強相関電子系

キーワード：遷移金属酸化物 スピン軌道相互作用 磁壁 トポロジカル絶縁体 機能性界面

1. 研究開始当初の背景

量子力学に従う多粒子系の典型例である液体ヘリウムや低温金属の研究は、多体系の量子力学の礎である。これら量子多体系の研究は、雛形としての量子相の理論的研究とともに進んできた。雛形の顕著な例である、液体ヘリウムや低温金属を普遍的に記述するフェルミ液体は、超伝導に対するバーディーン-クーパー-シュリーファー理論の基礎となり、物理学の基礎概念の一つである自発的対称性の破れへと繋がる出発点となった。また、現在電気抵抗の標準を与えている量子ホール効果の理解が進む過程で、自発的対称性の破れでは記述できないトポロジカルな相転移の存在が認識されるようになった。さらに、分数量子ホール効果の理論として導入されたラフリンの波動関数は、準粒子励起が自由電子と断熱的につながることを示したフェルミ液体論とは対照的に、多体系を構成する粒子の分数化と統計性の変更が起きうることを明らかにした。

2000年代前半のトポロジカル絶縁体の発見と対称性に基づくバンド絶縁体及び超伝導体のトポロジカル相の分類は、量子ホール状態やポリアセチレンのソリトン状態などすでに発見されていたトポロジカルな量子相の統一的な理解をもたらし、現在では対称性で守られたトポロジカル状態と呼ばれることとなったハルデー相をはじめとする強相関トポロジカル量子相の研究を加速した。

何故トポロジカル相が注目を集めるのか。対称性の破れでは特徴付けられない相転移の存在、そして新たな粒子の発見の舞台としての基礎科学的重要性のみならず、新たな機能の源泉としての期待がその背景にある。例の一つが、強相関トポロジカル絶縁体である。

しかしながら、トポロジカル量子相が現実の強相関電子系において実現した例は、極低温かつ高磁場での分数量子ホール系以外に存在しない。理論によって強相関トポロジカル相の安定性を定量的に予測することも困難な課題である。

弱相関トポロジカル絶縁体の研究が進展した過程で、電子間クーロン相互作用を積極的に活用してトポロジカルな電子状態を創り出そうとする理論が提案された。一つは、電子間クーロン相互作用による自発的対称性の破れによって有効スピン軌道相互作用を生成し、ギャップの大きなトポロジカル絶縁相を生み出そうとする試みである。一方、電子間クーロン相互作用によるバルク結晶の絶縁化とトポロジカルに保護された高移動度表面・界面キャリア伝導のコントラストを利用することも考えられる。強相関トポロジカル物質における電子自由度の凍結と純粋スピンキャリア創出の理論的研究を始めとして、このような方向へ向か

う流れもまた存在する。しかし、強相関電子系におけるトポロジカル相は未だ理論的提案に留まっており、実験の実現は道半ばである。

2. 研究の目的

本研究では、従来強相関系のエレクトロニクス応用を阻んできたキャリアの局在傾向を逆手に取った、絶縁性の高い強相関電子系の典型例である遷移金属酸化物におけるトポロジカル相の実現を長期的な目標として、研究代表者が発見したパイロクロア構造イリジウム酸化物の磁壁金属状態の制御と機能の解明、および新たな磁壁金属状態を示す物質系の開拓を目指した。

3. 研究の方法

パイロクロア構造イリジウム酸化物 $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ (R : 希土類) の有効八ミルトニアンを用い、磁性相内での磁壁の線形応答および磁場に対する安定性を理論的に研究した。

結晶の対称性に基づいて八ミルトニアンを構成し、平均場理論と久保公式の適用によって、磁壁金属状態の光学・輸送特性と磁場下における磁壁状態の安定性の解析を行った。

また、イリジウム酸化物以外のパイロクロア構造遷移金属酸化物の有効八ミルトニアンを構成し、金属磁壁の出現と密接に関連するワイル電子の対消滅の対称性による分類、およびそれによる金属磁壁の出現の有無を明らかにした。

4. 研究成果

決勝の対称性に基づくパイロクロア構造イリジウム酸化物の有効八ミルトニアンを用いて、可動性の金属磁壁の機能性および制御性を解明し、5. 主な発表論文等〔雑誌論文〕として発表した。

金属磁壁のフェルミ面が、ラッシュバ金属とよく似たヘリカルなスピン構造を有することを発見し、金属磁壁が示す光学異常ホール効果、円二色性およびハーフ・メタルとしての性質を明らかにした。これらの性質は、電子間クーロン相互作用と電子の運動エネルギーの比を制御することで起こる金属磁壁の金属-絶縁体相転移に関連して発現する性質であり、実験においては希土類の化学組成や圧力によって制御することが出来ると期待される。

金属磁壁が多彩な光学・輸送特性をデバイス機能として応用するには、金属磁壁の配置を制御することが不可欠である。また、2次元的な磁壁からの応答は、3次元のバルク結晶からの応答に比べ必然的にシグナルが小さくなってしまう。そこで、磁壁を磁場と薄膜化によって制御し、磁壁1枚の応答を観測するための手法を理論的に提案した。金属磁壁には、磁場と線形に結合する磁壁のゼーマン項と、パイロクロア構造イリジウム酸化物が示す非共面磁気秩序に特有の磁場の3次に比例するバルク結晶の八重極子項の競合を利用して、薄膜試料内

で磁壁の配置を制御できることを示した。

さらに、イリジウム酸化物以外のパイロクロア構造遷移金属酸化物について、金属磁壁の出現と密接な関係を持つワイル電子の対消滅の様式を分類し、金属磁壁の有無についても成果を得た。オスミウムなどの重い元素を含む酸化物についての原著論文を準備中である。

また、強相関トポロジカル相の典型例となっているキタエフのスピ液体を実現するため、候補物質である蜂の巣格子イリジウム酸化物 Na_2IrO_3 についても研究を行った。現在では磁性を示すことがわかっている Na_2IrO_3 から出発して、スピ液体相の特徴であるマヨラナ粒子励起を実現するために、比熱の温度依存性を用いてマヨラナ粒子相と現実物質の『距離』を測る方法を考案し、マヨラナ粒子実現のための定量的な物質設計指針を与えた。この成果は、 Na_2IrO_3 の第一原理有効ハミルトニアンを検証した成果(5.主な発表論文等〔雑誌論文〕)とともに、5.主な発表論文等〔雑誌論文〕として発表されている。

これらの研究に基づき、国内外の研究同行も含むイリジウム酸化物のトポロジカルな量子相の現状について、物性物理学コミュニティや大学院生へ伝えるため、解説記事を執筆し、日本物理学会誌に掲載された(5.主な発表論文等〔雑誌論文〕)。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 3 件)

(査読有) M. Kawamura, K. Yoshimi, T. Misawa, Y. Yamaji, S. Todo, and N. Kawashima, Quantum lattice model solver H Compt. Phys. Commun. 217, 180 (2017).

(査読有) Y. Yamaji, T. Suzuki, T. Yamada, S. Suga, N. Kawashima, and M. Imada, Clues and criteria for designing a Kitaev spin liquid revealed by thermal and spin excitations of the honeycomb iridate Na_2IrO_3 Phys. Rev. B 93, 174425 (1-14) (2016).

(査読有) Y. Yamaji and M. Imada, Modulated helical metals at magnetic domain walls of pyrochlore iridium oxides Phys. Rev. B 93, 195146(1-15) (2016).

(解説記事) 山地洋平, 今田正俊, 『トポロジカル相と電子相関-イリジウム酸化物を中心に』日本物理学会誌 Vol. 71, No.3, 146 (2016).

(査読有) T. Suzuki, T. Yamada, Y. Yamaji, and S. Suga, Dynamical properties of the honeycomb-lattice iridates Na_2IrO_3 Phys. Rev. B 92, 184411(1-6) (2015).

〔学会発表〕(計 8 件)

『トポロジカル相と電子相関の協奏が生み出す新量子相に関する理論研究』

山地洋平, 日本物理学会 第 72 回年次大会, 大阪大学, 大阪, 2017 年 3 月 18 日.

『パイロクロア構造イリジウム酸化物の励起スペクトル』

山地洋平, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 金沢大学, 金沢, 2016 年 9 月 14 日.

“Topological Domain-Wall Metals in Pyrochlore Iridates”

Y. Yamaji, APS March Meeting 2016, Baltimore Convention Center, Baltimore, Maryland, USA, March 15, 2016.

“Topological and helical domain-wall metals in pyrochlore iridium oxides”

Y. Yamaji and M. Imada, International USMM & CMSI Workshop: Frontiers of Materials and Correlated Electron Science - from Bulk to Thin Films and Interfaces, Koshiba Hall, The University of Tokyo, January 8, 2016.

『強相関電子系のトポロジカル量子相と非平衡緩和現象』

山地洋平, 東京大学物性研究所短期研究会「量子物質研究の最前線」, 東京大学物性研究所, 千葉, 2015 年 12 月 8 日.

“Towards realization of correlated topological phases in iridium oxides”

Y. Yamaji, The 18th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo, Kashiwa, Japan, Nov. 11, 2015.

『パイロクロア格子遷移金属酸化物におけるワイル電子』

山地洋平, 日本物理学会 2015 年秋季大会 シンポジウム『新奇トポロジカル物質・トポロジカル現象の探索, 新展開』, 関西大学, 大阪, 2015 年 9 月 17 日.

“Topological Magnetic Domain-Wall Metals of Pyrochlore Iridium Oxides”

Y. Yamaji, Workshop on “Topological Magnets,” RIKEN, Wako, Japan, May 27, 2015.

『ハニカム格子イリジウム酸化物の第一原理的研究』

山地洋平, 日本物理学会 70 回年次大会 シンポジウム『スピ軌道物理の新展開 - Kitaev 型異方的相互作用が創出する新奇な物性』, 早稲田大学, 東京, 2015 年 3 月 21 日.

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

名称:

発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

取得状況（計 0 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等
オープンソースソフトウェア H ver.0.1,
ver. 0.2, ver.0.2.1, ver.0.3, ver.1.0,
ver.1.1, ver.1.1.1, ver.1.2.0, ver.2.0.0,
ver.2.0.1,
<http://ma.cms-initiative.jp/ja/index/ja/listapps/hphi>
<https://github.com/QLMS/Hphi>

6 . 研究組織

(1)研究代表者

山地 洋平 (YAMAJI, Youhei)
東京大学・大学院工学系研究科・特任准教授
研究者番号：00649428

(2)研究分担者

()

研究者番号：

(3)連携研究者

()

研究者番号：

(4)研究協力者

()