

令和 2 年 7 月 10 日現在

機関番号：13101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05540

研究課題名(和文) 高い自由度を持つ強相関電子系におけるトポロジカルな現象の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical Research of Topological Phenomena in Strongly Correlated Electronic Systems with High Degrees of Freedom

研究代表者

瀧本 哲也 (Takimoto, Tetsuya)

新潟大学・自然科学系・教授

研究者番号：80397794

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：多自由度の系の構築のために、正四面体の角にs電子軌道を置いた際に現れる全ての粒子-正孔対を構成し、それらを正四面体の点群Td(結晶軸に対応した点群)の既約表現に分類した。この場合、64種類の粒子-正孔対演算子が現れるが、その内の12種類はスピン配列演算子であり、A2表現に属するAll-In-All-Outスピン配列の演算子や、E表現に属するスピン配列演算子などが含まれる。これらの粒子-正孔対を単位胞について和を取れば対応する秩序パラメーター演算子が得られる。これらからある秩序状態を分子場近似で記述し、そのトポロジカルな性質を調べることを目的とした。また、軌道自由度を持つ系へ理論を拡張した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

All-In-All-Outスピン秩序相における集団励起についての研究はクラスター多極子からの新たな解釈を与えることができたと考えている。2つ目のテーマについては、パイロクロア化合物という実際の物質と比較する際には結晶軸と局所的座標軸の関係を明らかにしたことにより、対象とする現象によらずこの系のミニマムモデルを構築できたことは学術的に意義があったと考えている。

研究成果の概要(英文)：In order to construct a theoretical model with large degrees of freedom, we consider first all electron-hole pairs in a regular tetrahedron, where an s-orbital is considered at each corner-site of the regular tetrahedron. Then, these electron-hole pair operators are classified into irreducible representations of the tetrahedral group Td, which corresponds to the crystal coordinate system. Among 64 types of electron-hole operators totally, there are 12 types of spin configuration operators, including the All-In-All-Out spin configuration operator (SPO) belonging to A2 representation and SPO belonging to E representation. Summing up electron-hole operators with respect to the unit cell, the order parameter belonging to the representation is obtained to describe the corresponding phase transition. The purpose of the study is to search the topological transition in the ordered state with the order parameter. We also generalize our theory to the system with orbital degree of freedom.

研究分野：数物科学系

キーワード：物性理論 強相関電子系 トポロジー 群論

1. 研究開始当初の背景

高い自由度を持つ電子系は軌道縮重度が大きい場合か単位胞内に多くの原子サイトを有するような系であると考えられるが、そのような系でどのような秩序状態が安定化されるかはしっかりとした理論が構築されていなかった。さらに、スピン軌道相互作用の強い系ではトポロジカル絶縁体やワイル半金属などのトポロジカルな状態が実現することが新たに明らかとなったが、これらのトポロジカルな状態への電子相関の影響に対しては明確な理論が構築されていなかった。一方で、高い自由度を持つ電子系と考えられる実際の化合物では、新奇な或いは未解決な秩序状態の実験結果が報告されており、それらを解明する理論の構築が望まれている。

2. 研究の目的

多自由度を持つ系に特徴的な秩序状態におけるトポロジカルな状態の研究をすることが目的である。トポロジカル絶縁体やワイル半金属の表面ではフェルミレベルと交差するエネルギー分散の存在が知られているが、秩序状態ではある条件下で集団励起が生ずるから、秩序状態における集団励起が表面状態に影響を及ぼしうる。これを明らかにすることが本研究の目的の一つであった。

また、実際の化合物をより精密に記述するために軌道自由度を考慮した系に対して秩序状態を分類し、スピン軌道相互作用の増大に伴ってどのような秩序状態が安定化されその中からトポロジカルな状態が現れるかをしらべることが本研究のもう一つの目的であった。

3. 研究の方法

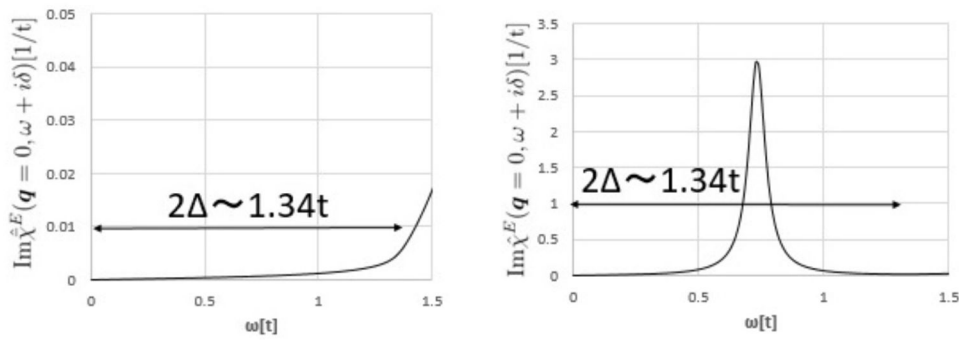
研究を具体的に行うために、対象物質をパイロクロア化合物とした。パイロクロア化合物は単位胞に4つの遷移金属原子を含みそれらが正四面体を成しており、それぞれの遷移金属原子は6つの酸素イオンによって形成される八面体により囲まれている。

1つ目の研究目的のために軌道縮退を持たないパイロクロア格子ハバード模型を構築し、各単位胞で生じうる秩序パラメータを明らかにするために単位胞内の全6種類電子-正孔対を導入しこれらを点群 T_d の既約表現に分類した。これらの中にはスピンのAll-In-All-Out秩序の秩序パラメータであるスピン配列演算子(A_2 表現)やこれとは少し異なるスピン配列演算子(E表現)が含まれた。ハバード相互作用項を A_2 スピン配列秩序について平均場近似を行い、 A_2 スピン秩序状態への転移温度を求めた。同時に A_2 とEスピン配列演算子を久保公式に用いて、この秩序に対する感受率を乱雑位相近似(RPA)の範囲内で計算した。このRPA内での感受率の計算は無秩序状態のみならず A_2 スピン配列秩序状態に対しても行われた。この数値計算はこの科研費で購入したワークステーションを用いて行われた。Weyl半金属の状態はAll-In-All-Out秩序相において実現することが知られており、この表面状態への集団励起の影響を見るには1電子グリーン関数とスピン配列感受率の両方を、例えば、結晶のz軸方向に開放端を持たせた系(x, y-方向は周期的境界条件でz-方向は開放境界条件)を用いれば原理的に計算可能である。

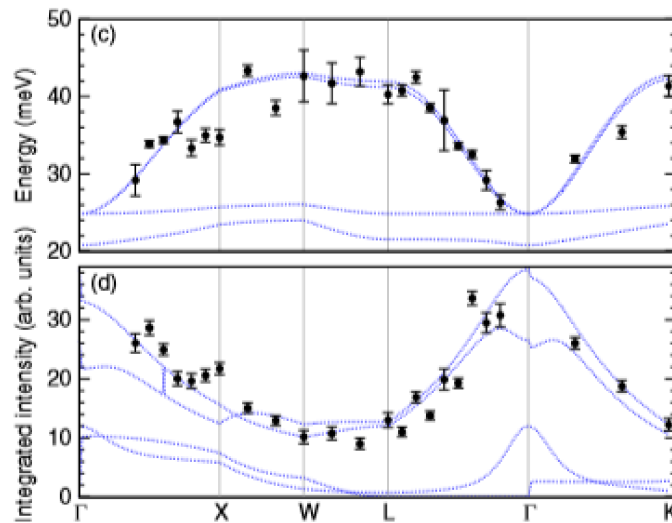
2つ目の研究目的のためにパイロクロア化合物の結晶構造をソフトウェア vesta を用いて詳細に調べたところ、遷移金属原子を取り囲む八面体には僅かではあるが trigonal な歪みが生じていたためこれを無くして理想的な正八面体で囲まれている結晶構造をベースとしてミニマル模型の構築を始めた。遷移金属原子を取り囲む構造を正八面体にできたことで、この原子に含まれる5d電子状態は立方対称な結晶場の影響で t_{2g} 軌道と e_g 軌道に分裂する。これらの電子状態の中で t_{2g} 軌道のみを用いてミニマル模型の構築を目指した。しかし、遷移金属原子から正八面体の角への方向は立方対称な結晶軸とは全く異なり、さらに単位胞内の4つの遷移金属原子それぞれが正八面体の存在により異なった局所的座標軸を持っていることが判った。それぞれの局所的座標軸は適切な回転により結晶軸に一致させることができるため、幾何学的考察からこれらの回転軸の方向と回転の大きさを同定した。

4. 研究成果

1つ目のテーマについては、パイロクロア格子ハバード模型に反対称スピン軌道結合項(この項も T_d 点群の恒等表現に属する電子-正孔対演算子の1つ)を加えた模型に対してAll-In-All-Outスピン配列秩序相における集団励起をRPAの範囲内で計算し、そのエネルギー分散を中性子非弾性散乱実験による観測データと比較し良い一致が得られた。この結果に到るために、まず、ハバード相互作用項の効果により波数ベクトル $q=0$ の A_2 スピン配列秩序(All-In-All-Outスピン配列秩序)が安定化されるスピン軌道結合定数の領域を同定した。次に、このパラメータ領域で温度を減少することにより、平均場近似の範囲内でAll-In-All-Outスピン配列秩序を記述し、この秩序相に見られる集団励起を探索した。この秩序相での集団励起はEスピン配列演算子の感受率に現れた(下図)。この理由を明らかにするために A_2 スピン配列演算子とEスピン配列演算子(2成分)の間で交換関係を計算すると、スピン演算子(3成分)に対して得られる交換関係と同様の結果が得られた。すなわち、z-方向に強磁性磁化が生じているような系での集団励起(スピン波)はx, y-成分に現れるのと同様であることが分かった。また、反対称スピン軌道

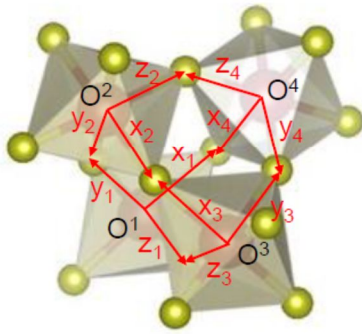


結合定数の大きさの増大に伴って集団励起に要するエネルギーは増大することが示されたが、これは反対称スピン軌道結合定数の符号を反転することによって A_2 スピン配列秩序は E スピン配列秩序に置き換えられることや反対称スピン軌道結合項がスピン空間に異方性を導入していることによるものと考えられる。(これらスピン配列秩序の転移は、ジャロシンスキー-守谷相互作用を伴うハイゼンベルグ模型においても調べられており、ジャロシンスキー-守谷相互作用の符号の変化により A_2 表現から E 表現のスピン配列秩序に転移することと対応している。)最後に、実際に $\text{Sm}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ において観測された All-In-All-Out スピン配列秩序状態における集団励起の中性子非弾性散乱実験の結果と比較した結果が下図である。トポロジカルな状態についてはまだ実行できていない。

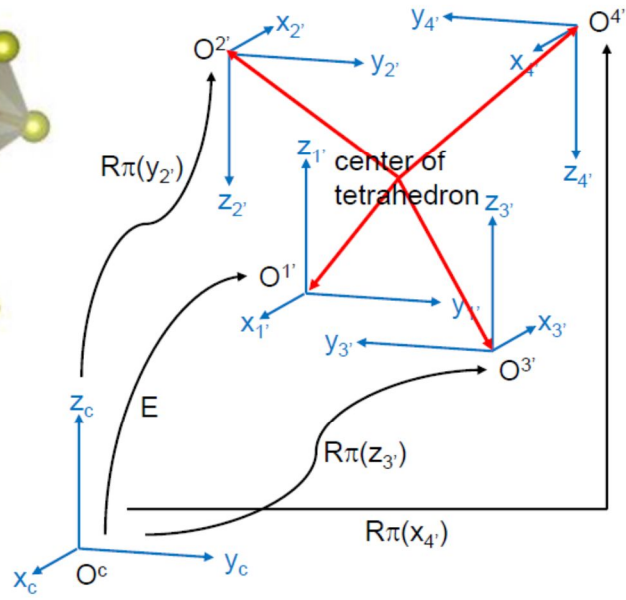


2つ目のテーマについては、まず、実際のパイロクロア化合物の遷移金属原子を取り囲む八面体を僅かな構造パラメーターを変化させることで正八面体にして t_{2g} 軌道パイロクロア格子ハバード模型にスピン軌道結合項を加えた模型に対して可能な多極子配列演算子を T_d 点群の既約表現に分類しその中から低温で安定化される多極子配列秩序を同定する理論を構築した。幾何学的考察により、結晶軸から局所的座標軸を得るための回転軸の方向と回転の大きさを同定した。次ページの図に示されている 0_i が局所的座標軸 $x_i y_i z_i$ であり、 0_c が結晶軸 $x_c y_c z_c$ である。これらの回転をそれぞれの局所的座標軸の下に定義されている t_{2g} 電子状態に作用させ、結晶軸の下での電子状態に変換した。この時、対応する回転行列は回転群を駆使することにより求めることができ、電子状態の空間部分のみならずスピン部分にも作用させた。1つ目の研究と同様に、単位胞に許される可能な電子-正孔対を形成しそれらを T_d 点群の既約表現に分類した。これらの電子-正孔対には、軌道自由度を考慮していることから、多極子配列演算子(いわゆるクラスター多極子演算子)が含まれる。久保公式を用いて、多極子配列秩序に対する感受率をRPAの範囲内で解析計算を行なった。今後、数値計算によりどのような秩序状態が安定化するかを明らかにする。

Transformations of Coordinate System by Rotations



$O^1 = R\pi(-1, -1, -1) O^c$
 $O^2 = R\pi(1, -1, 1) R\pi(y_2') O^c$
 $O^3 = R\pi(1, 1, -1) R\pi(z_3') O^c$
 $O^4 = R\pi(-1, 1, 1) R\pi(x_4') O^c$



from the crystal coordinate to each octahedral coordinate

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 金井眞一郎 瀧本哲也
2. 発表標題 パイロクロア・ハバード模型のAll-In-All-Outスピン秩序と対応する励起
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 金井眞一郎 瀧本哲也
2. 発表標題 パイロクロア・ハバード模型のAll-In-All-Outスピン秩序に由来する集団励起
3. 学会等名 日本物理学会2019年新潟支部会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 瀧本哲也
2. 発表標題 Cd ₂ Re ₂ O ₇ の傾いた座標系でのスピン軌道結合によって生じる局所的有効多極子の役割
3. 学会等名 日本物理学会2020年会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

数本の論文を投稿予定

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----