

令和 6 年 4 月 24 日現在

機関番号：82108

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2018～2019

課題番号：18K18744

研究課題名（和文）量子化条件で規定される新規な絶縁体状態の理論的研究

研究課題名（英文）Theoretical study of a novel insulating state controlled by a quantization condition

研究代表者

山瀬 博之（YAMASE, Hiroyuki）

国立研究開発法人物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・主幹研究員

研究者番号：10342867

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：本理論研究では、 N_x 本の鎖から成る擬一次元物質を対象とし、そこに歪みを加えても電子系の異方性が変化しない「電子異方性プラトー」という全く新しい現象の物理的理解を目指した。その結果、プラトー状態は、擬一次元物質を構成する鎖の数とサイトあたりの電子数のみで決まる量子化条件で規定された新規な絶縁体であると位置づけられることが分かった。量子化条件は、Lieb-Schultz-Mattisの定理からも導くことが出来ることを突き止め、電子異方性プラトーは、類似現象である量子スピン系の磁化プラトーや整数量子ホール系のホール伝導度プラトーと並んで、物性論における第3のプラトーと位置づけられる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

N_x 本の鎖から成る擬一次元物質の歪みを制御することで、鎖を構成する物質によらずに金属・絶縁体状態を一般的に実現できる、という新しい物質観を与える点で学術的および社会的意義がある。この結果は、系の詳細には依存せず擬一次元物質の一般的性質である。現在、電子異方性プラトーに対応する物質やシステムは知られていないが、本理論的知見がナノまたはアトムテクノロジーを駆使することで将来的に確認される日は遠くないと期待している。

研究成果の概要（英文）：We study theoretically a quasi-one-dimensional electronic system consisting of a few chains and explore the underlying physics of a newly found quantum state dubbed as “electronic anisotropy plateau”, where electronic anisotropy does not change even if anisotropy is applied externally. We found that the plateau is a novel insulating state characterized by a quantization condition controlled by the number of chains and the electron density per site. The quantization condition is also understood in terms of Lieb-Schultz-Mattis theorem. This implies that the electronic anisotropy plateau is a phenomenon similar to the magnetization plateau in quantum spin systems and Hall conductivity plateau in integer quantum Hall systems and can be regarded as the third plateau in condensed matter systems.

研究分野：物性理論

キーワード：物性理論 金属絶縁体転移 量子化条件 擬一次元物質 プラトー

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

申請者は平成 22 年度から継続的に科研費の助成を受けて「電子ネマチック液晶」の理論的研究を行ってきた。「電子ネマチック」の概念は理論先行の概念であったが、近年、銅酸化物超伝導体、鉄系超伝導体、ルテニウム酸化物、ウラン系化合物、銅をドーブしたトポロジカル絶縁体で電子ネマチックが観測され、大きな注目を集めている。電子ネマチックは、電子系が自発的に異方性を生む新しい機構であり、4 回対称性の自発的破れである。そのため、4 回対称性が既に破れた系では、電子ネマチックの概念は、そもそも適応出来ないと考えられていた。実際、今までの電子ネマチックの観測例や研究例は、電子系が 4 回対称性を持つものに限られていた。

ところが、最近、申請者によって擬一次元物質のような明らかに大きな異方性がある物質でも、異方性が不連続的に大きく変化する（電子ネマチック転移と言う）、という予想外な結果が得られた：H. Yamase, Phys. Rev. B **91**, 195121 (2015)。この予想外の結果に刺激を受け、図 1 に示したように擬一次元物質をモデル化して電子ネマチック転移を調べ始めると、セレンディピティがあった。例えば y 方向に引っ張ったり、または一軸圧やピエゾ素子で系に歪みを与えると、電子系の異方性も変化することが期待されるが、図 2(a) に示したように電子系の異方性

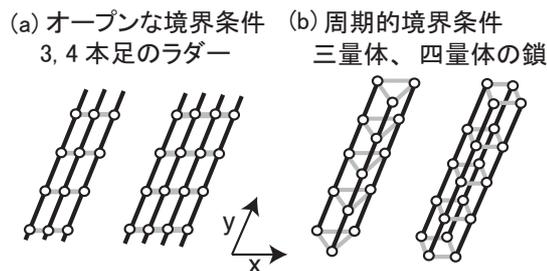


図 1：対象とする擬一元電子系の例。白丸が格子点に対応する。黒線は一次元ワイヤであり灰色はワイヤ間の量子力学的な結合を表している。(a)と(b)の違いは境界条件であり、定性的な結果は境界条件には依存しない。

の新しい量子現象を「電子異方性プラトー」と命名した。類似現象として、磁場の関数として、量子スピン系で現れる磁化プラトー（図 2(b)）や整数量子ホール系でのホール伝導度プラトー（図 2(c)）がある。

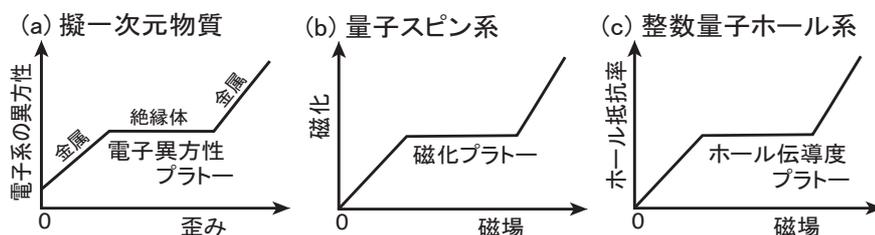


図 2：(a) 擬一次元物質で歪みの関数として生じる電子異方性プラトーの概念図。電子ネマチック転移によって不連続的に電子異方性プラトー状態に入り込む可能性がある。電子異方性プラトーは磁化プラトー (b) やホール伝導度プラトー (c) と似た現象であるが、縦軸と横軸が異なる。

2. 研究の目的

本研究は、擬一次元物質を対象とし、歪みを加えても電子系の異方性が変化しない「電子異方性プラトー」という全く新しい概念を確立し、磁化プラトーやホール伝導度プラトーに次ぐ第三のプラトーを提唱することを目的とする。電子異方性プラトーの実現そのものは相互作用の強さに依存しないため、電子間相互作用が弱い時はバンド絶縁体が、それが強い時はモット絶縁体を実現し得る、という従来の概念では電子異方性プラトーの絶縁体状態を理解出来ない。したがって、電子異方性プラトーは新しいタイプの絶縁体である可能性があり、本研究を通じて絶縁体に対する概念を更に発展させることも目指す。

注目する電子異方性プラトーは理論先行の概念であり、現状では対応する物質は知られていない。しかし、思わぬ物質に潜んでいる可能性が高い。例えば、スピントラップである四量体鎖の $\text{Cu}_2\text{Cl}_4 \cdot \text{D}_8\text{C}_4\text{SO}_2$ は量子化条件を満たしている。したがって、その絶縁体状態が実は「電子異方

性プラトー」に対応しているのではないか。研究期間中に多くの実験研究者と議論を行い、物質合成・検証実験の方向性を見出し、さらなる研究の発展に努める。

3. 研究の方法

図1に示す N_x 本の鎖から成る擬一次元模型を扱う。 y 方向は無限個の格子点から成っている。 x 方向の境界条件として、オープンなものをとれば N_x 本から成る擬一次元鎖(図1(a))になり、周期的な境界条件をとれば図1(b)に示す多量体の一次元鎖になる。境界条件の違いによって定量的には大きな差が生じるが、歪みを加えても電子系の異方性が変化しない「電子異方性プラトー」という背後にある物理現象は普遍である。

予備的な計算結果から分かっていることは、以下の3つである。i) プラトーは量子化条件 $N_x \cdot n / 2 = \text{integer}$ または $N_x \cdot (2-n) / 2 = \text{integer}$ で規定される; n はサイト数あたりの電子数、ii) 電子間の相互作用がない極限でもプラトーは存在する、iii) N_x は2以上で、3本足ラダーや三量体なら $N_x = 3$ 。 N_x が小さいほどプラトーは明瞭に現れ、 $N_x=3$ で図1(a)の時は $n=2/3, 4/3$ に、図1(b)の時は $n=2/3$ にプラトーが生じる。一方、 N_x が無限大の時、量子化条件は $n=0, 2$ となり自明な絶縁体に帰着する。これらの予備結果を学術研究として発展させるべく、以下の3つに取り組む。

(1) 電子異方性プラトーの相図。量子化条件は必要条件であり、条件を満たしても必ずしも電子異方性プラトーが生じる訳ではない。そこで、擬一次元模型(図1)に対して、電子異方性プラトーが生じるパラメタ領域を明らかにする。電子ネマチック転移によって、電子異方性プラトー状態に不連続的に入り込むことが期待される。プラトー状態へ不連続的に入り込む例は、磁化プラトーやホール伝導度プラトーでは知られておらず、電子異方性プラトーの特異な性質である可能性がある。

(2) 量子化の背後にある物理的概念。量子スピン系のプラトーは電子相関が強い極限で、整数量子ホール系のプラトーは電子相関が弱い極限で生じる現象である。一方、電子異方性プラトーの量子化条件は、 N_x と n で与えられ、電子相関の強さに依存しない。よって、磁化プラトー、ホール伝導度プラトー、電子異方性プラトーは無関係に見えるが、量子化条件の方程式は互いに酷似している。この背後にある物理的概念を明らかにし、電子異方性プラトーという第三のプラトーの学術的位置付けを明確にする。

(3) 電子異方性プラトーの絶縁体状態の位置付け。既知の絶縁体として、バンド絶縁体(電子相関小)とモット絶縁体(電子相関大)があり、電子相関の強さが概念上、重要である。ところが、電子異方性プラトーは電子相関の強さに依存しない新しい絶縁体状態であるので、従来の絶縁体に対する概念を変える可能性がある。そこで、擬一次元模型(図1)に電子間のクーロン相互作用を加えた模型を用いて、電子異方性プラトーの電子相関依存性を解析する。分数量子ホール効果の例から期待されるように、電子相関によってプラトー状態の「分数化」、つまり、量子化条件の右辺の「integer」が「fraction」になる可能性を追求する。

4. 研究成果

擬一次元物質を特徴付ける鎖の数を N_x とした時、 $N_x=2, 3, 4$ の場合に対して、電子異方性プラトーが生じるパラメタ領域を、化学ポテンシャル(またはサイトあたりの電子数)と外的な異方性の大きさの平面で明らかにした。温度は絶対零度である。電子間相互作用がない極限でもプラトーが生じることを相図上で確かめた。また、相互作用が存在すると電子異方性プラトー状態には不連続的に入り込むことも分かった。この不連続性は、プラトー状態に入る相境界で電子ネマチック転移が生じることによる。プラトー状態へ不連続的に入り込む例は、類似現象である磁

化プラトーやホール伝導度プラトーでは知られていないことから、電子異方性プラトーの特異な性質であることが分かった。ただし、常に不連続的になる訳ではなく、連続的にプラトー状態に入るパラメタ領域も存在することを明らかにした。プラトー状態は、サイトあたりの電子数 n と鎖の数 N_x のみで決まる量子化条件で規定される絶縁体状態であるが、それ以外にも、ある「マジック」化学ポテンシャルに対して、量子化条件で規定されないプラトー状態も現れることが分かった。このプラトー状態は金属状態である。

次に、得られた相図の安定性に関して考察を行なった。まず、電子異方性プラトー領域は、擬一次元電子系特有の強い揺らぎに影響を受け消失してしまう可能性もあるが、過去にくりこみ群で得られた結果 (H.-H. Lin *et al.*, Phys. Rev. B **56**, 6569 (1997)) と比較すると、その可能性はないことが分かった。そもそも電子異方性プラトーは絶縁体状態であるので、擬一次元電子系特有の強い揺らぎによって影響を受けることはないであろう、という直感的理解とも一致した。したがって、電子異方性プラトーは、擬一次元鎖の数とサイトあたりの電子数のみで記述される量子化条件で規定された新規な絶縁体であると言える。つまり、電子相関の強さには依存せず、電子相関がない極限においても同様な絶縁化が得られる。さらに、量子化条件は、Lieb-Schultz-Mattis の定理からも導くことが出来ることも突き止めた。類似現象である量子スピンの磁化プラトーや整数量子ホール系のホール伝導度プラトーの存在も、Lieb-Schultz-Mattis の定理で理解できることから、電子異方性プラトーは物性論における新しい第 3 のプラトーであると位置づけられる。量子ホール系では、電子相関効果によって分数量子ホール効果が現れることが知られているが、量子化条件の分数化の傾向は電子異方性プラトーでは見つからなかった。ただし、分数化の可能性を否定するには早計であり、分数化の可能性のさらなる追求は将来の課題としたい。

本研究では、電荷の自由度の性質に焦点を当てるので、電荷に起因する物理現象に関する以下の理論研究も行い、より広い視点から研究を実施した。(1) 反強磁性と超伝導が共存した状態での超流動密度の電子数密度依存性を調べ、ハーフフィリングを境にして顕著な電子・ホール非対称性が現れることを見出した。(2) 電子ドーピング系銅酸化物高温超伝導体において、波数 $(0.5\pi, 0)$ 近傍での低エネルギー電荷励起のドーピング依存性が実験的に報告されたが、それがボンド電荷の励起としてよく理解できることを示した。(3) 銅酸化物高温超伝導体では、電子ドーピングおよびホールドーピング系のいずれにおいても、波数 $(0, 0)$ 近傍に電荷励起スペクトラムが観測されている。この励起がプラズモン励起としてほぼ定量的に理解出来ることを示した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Metzner Walter、Yamase Hiroyuki	4. 巻 100
2. 論文標題 Phase stiffness in an antiferromagnetic superconductor	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 1-12
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.100.014504	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Greco Andres、Yamase Hiroyuki、Bejas Matias	4. 巻 2
2. 論文標題 Origin of high-energy charge excitations observed by resonant inelastic X-ray scattering in cuprate superconductors	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Communications Physics	6. 最初と最後の頁 1 - 6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s42005-018-0099-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Yamase Hiroyuki、Bejas Matias、Greco Andres	4. 巻 99
2. 論文標題 Doping dependence of d-wave bond-charge excitations in electron-doped cuprates	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 1 - 7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.99.014513	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 3件/うち国際学会 2件）

1. 発表者名 山瀬博之
2. 発表標題 銅酸化物高温超伝導体における電子ネマティック物性
3. 学会等名 電子相関が生み出す超伝導現象の未解決問題と新しい潮流
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroyuki Yamase, Walter Metzner
2. 発表標題 超伝導と反強磁性との共存状態における超流動密度
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 山瀬博之
2. 発表標題 電子ネマティック液晶の物理
3. 学会等名 日本物理学会北海道支部講演会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山瀬 博之
2. 発表標題 2次元ハバード模型における超伝導と磁性
3. 学会等名 高温超伝導フォーラム第6回会合
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山瀬 博之
2. 発表標題 Interplay of superconductivity and magnetism in the 2D Hubbard model
3. 学会等名 Workshop Strongly Correlated Electron Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山瀬 博之
2. 発表標題 電子相関係における電子ネマチック不安定性
3. 学会等名 量子多体効果が生み出す液晶的電子状態
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山瀬 博之
2. 発表標題 Spiral magnetism and superconductivity in the two-dimensional Hubbard model
3. 学会等名 International Workshop on Topological Quantum Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

NIMS Condensed Matter Theory (Hiroyuki Yamase) https://www.nims.go.jp/nqt/yamase/

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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
アルゼンチン	UNR-CONICET			
ドイツ	Max-Planck-Institute			