

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 6 月 11 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(A)

研究期間：2009～2011

課題番号：21244053

研究課題名（和文） 相関電子系におけるトポロジーと量子ダイナミクスの理論的研究

研究課題名（英文） Theoretical study on topology and quantum dynamics of correlated electronic systems

研究代表者 永長直人 (NAGAOSA NAOTO)

東京大学・大学院工学系研究科・教授

研究者番号：60164406

研究成果の概要（和文）：

固体電子の相対論的効果と電子間相互作用の相乗効果を、トポロジカル絶縁体、半導体、超伝導体など広い範囲の系に対して理論的に研究し、伝導現象、光学現象、磁性、などの物性にどのような形で現れるかを明らかにした。また、強く相互作用する多数の電子に光を当てたときに生じる動的現象を量子力学的シミュレーションで調べて、強相関太陽電池の動作基本原理を明らかにした。

研究成果の概要（英文）：

The interplay between the relativistic effects and the electron-electron interaction has been studied theoretically for the wide range of systems including topological insulators, semiconductors, and superconductors. Various physical properties such as transport, optical and magnetic properties in these systems were clarified. In addition, the dynamical processes of strongly interacting electrons when irradiated by light have been studied by quantum simulation revealing the fundamental mechanism of solar cell action in correlated electronic systems.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	9,800,000	2,940,000	12,740,000
2010年度	9,800,000	2,940,000	12,740,000
2011年度	9,800,000	2,940,000	12,740,000
年度			
年度			
総計	29,400,000	8,820,000	38,220,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性Ⅱ

キーワード：強相関電子系、量子スピンホール系、量子ダイナミクス

## 1. 研究開始当初の背景

スピンと電子輸送現象の相関は、2007年度ノーベル物理学賞の対象であるGMR、TMRなどに代表されるように、現代物性物理学の中心的なテーマであるが、電子の波動関数に生じる非自明な量子力学的な位相因子がゲージ場として表現されることがわかり

つつあった。物理現象としては、高温超伝導体で議論されてきた非フェルミ流体、異常ホール効果、スピンホール効果、電流誘起磁気構造運動、磁性強誘電（マルチフェロイック）、などの多くの顕著な現象がこの量子位相の観点から理解できること、また量子スピンホール系に代表されるトポロジー的に新しい

電子状態をもたらすこと、が分かってきていた。この状況下で、次の大きな潮流は(1)トポロジと電子相関効果の協奏現象、(2)電子・スピン結合系の実時間量子ダイナミクス、の2つに絞られつつあった。それぞれに関連した当時の背景を以下に記す。

(1) 磁性秩序が存在する系でも、電子の感じるゲージ場が結晶内で静的分布することで、運動量空間でブロッホ波動関数に付随するベリー位相が発生し、ホール効果を生じることが明らかとなっていた。これは長年外因性機構が主と考えられてきた異常ホール効果の内因性機構を与えるもので、実験で実証されるに至った。このアイデアは磁性のない半導体におけるスピントルクに拡張されて、スピンホール効果の理論的提唱へとつながった。さらにスピンホール効果は、絶縁体へと拡張され、量子ホール系にも匹敵する量子スピンホール系の理論へと発展し、ついにHgTe系の量子井戸で実験的に検証されるに至った。一方、モット絶縁体におけるスピントルクの研究は、スパイラル磁性体における電気分極発生(強誘電性)を予言し、それが多くの物質でのマルチフェロイクス現象を記述していることが中性子散乱実験などで明らかとなってきた。

(2) 遷移金属酸化物や有機導体などの強相関電子系における時間依存ダイナミクスは、実験的研究が先行し、超短光パルスによる励起後の緩和が時間分解で調べられつつあった。理論的にはその取扱いの困難さゆえに、非常に小さな系の厳密対角化を用いた研究や動的平均場近似を用いた研究が主で、空間的構造を調べるまでには至っていなかった。

## 2. 研究の目的

上記のような背景下で、(1)トポロジと電子相関効果の協奏現象、(2)電子・スピン結合系の実時間量子ダイナミクス、を研究の目的とし、それぞれ具体的に以下のようにテーマを設定した。

(1) 強相関電子系遷移金属酸化物、およびその超格子・界面などを対象としてトポロジと電子相関の協奏を調べる。磁性や超伝導といった秩序状態が実現することで、量子トポロジが巨視的なレベルで発現する可能性を探究する。また、トポロジカル絶縁体表面に現れる特異な金属の多体効果(たとえば磁性不純物による近藤効果、フェルミ流体効果、各種の電子秩序状態など)を調べる。

(2) 電子の多体波動関数の実時間発展をスピンの古典的運動とともに追跡する。磁性体を考えると磁化は古典的に振る舞うためにこれを古典的に時間発展させ、電子波動関数の方はハミルトニアンによる量子力学的時間発展をさせる。具体的には、2重交換模型に

ついて、光励起とその後のスピン・電子緩和過程。バンド間のゼナートンネルによる電子・正孔対消滅過程、界面ポテンシャルによる電子・正孔分裂と光電子カレント生成、光励起による金属・絶縁体転移、などの量子シミュレーションを実行し、可変なパラメータ(バンド幅、ポテンシャル構造など)がどのように量子過程を支配しているかを系統的に明らかにする。

## 3. 研究の方法

(1) この研究には、ゲージ場理論を中心とした解析的な場の量子論の諸方法論、第一原理電子状態計算、数値的繰り込み群、ダイアグラムモンテカルロ法を中心とした量子シミュレーションの3者を組み合わせて取り組む。

(2) 電子系の時間発展はハミルトニアンによる完全な量子ダイナミクスで記述し、それからスピンに働くトルクを計算し、スピンの古典的運動方程式(LLG方程式)を連立して数値的に解く。Langevinランダムスピントルクを揺動散逸定理を満たすように方程式に取り入れ、有限温度効果をも扱う。

## 4. 研究成果

以下、研究テーマ(1)トポロジと電子相関効果の協奏現象、(2)電子・スピン結合系の実時間量子ダイナミクス、それぞれにつき研究成果をまとめる。

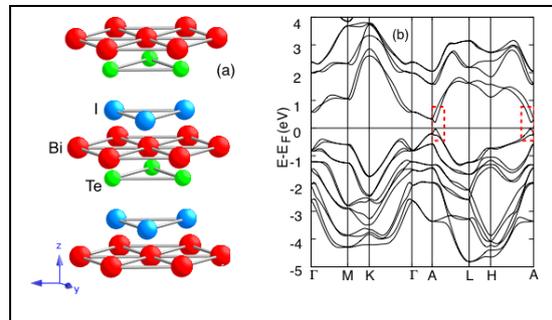


図1 半導体 BiTeI の結晶構造とバンドエネルギー分散

(1) ①半導体 BiTeI を取り上げ、巨大な相対論的 Rashba 効果を示す系であることを見出した。角度分解光電子分光、光学スペクトル、軌道反磁性、などの物理量を計算し実験との良い一致を得た。また、k.p 摂動法を用いて電子状態を解析し、巨大 Rashba 分裂が起きるための条件を明らかにした。

②トポロジカル絶縁体表面の金属における電子多体問題の研究として、(i)磁性体を接合したときの磁気抵抗効果(GMR)と磁化のダイナミクスの研究を行い、スピン軌道相互作用がともに本質的に効いて、通常の GMR や磁化ダイナミクスにはない数々の特徴

(たとえば反平行磁化配置でコンダクタンスが極大になるなど)を見出した。(ii)また、トポロジカル絶縁体上の2次元電子系における磁性不純物効果を、スケーリング理論を用いて数値的に調べた。磁性不純物は局在効果を引き起こし、その結果トポロジカル電気磁気結合効果を広いパラメーター空間で実現できることを示した。

③ 超伝導との接合を作ったときに現れるマヨラナフェルミオンの物性について、アンドレーフ反射、ジョセフソン効果、近藤効果、などの現象に則して調べた。その結果、“実”フェルミオンとしてのマヨラナフェルミオンに特有な干渉効果が現れることを突き止めた。また、フェルミオン間の相互作用の効果をボゾン化法で取り扱い、繰りこみ群を使ってトンネル現象が特異な温度依存性を持つことを見出した。また、トポロジカル超伝導体のカイラルエッジ状態、ヘリカルエッジ状態で実現されるマヨラナフェルミオンに伴うトンネル現象を相互作用効果まで含めて解析し、ジョセフソン電流が温度のべきに依存すること、準粒子電流がジョセフソン位相に依存するなどの特異な振る舞いを見出した。さらに、ヘリカルエッジ状態のマヨラナフェルミオンと磁性不純物の相互作用を考察し、異方的近藤効果が表れることを示した。

(2)①光励起による電子・スピン結合系—2重交換模型—のシミュレーションを行い、光励起後の緩和のダイナミクスを調べた。その結果、ナノスケールの自己組織化現象が量子力学的遷移に伴って生じることを見出した。②さらに進んで、光励起による絶縁体・金属転移の実時間発展を捉えることに成功した。光励起強度に関する閾値的振る舞い、励起エネルギー依存性を見出すとともに、時間・空間の非均一構造が転移の中間過程で自発的に現れることを見出した。例えば、励起光の偏光方向の記憶を電子系が保持し、少し時間が経った後でその方向にストライプ秩序が発生する現象を見出した。これらの結果は、マンガン酸化物系における光誘起絶縁体・金属転移の実験結果と良い符合を示している。また、電場を印加することによって光励起電子・正孔対が自由キャリアーになる過程も捉えることに成功し、強相関太陽電池の基礎過程の解明に寄与した。

##### 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 52 件)

1. W. Koshibae, N. Furukawa and N.

Nagaosa, "Real-Time Quantum Dynamics of Interacting Electrons: Self-Organized Nanoscale Structure in a Spin-Electron Coupled System", *Phys. Rev. Lett.*, 査読有, 103, 2009, 266402-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevLett.103.266402

2. Y. Tanaka and N. Nagaosa, "Two Interacting Helical Edge Modes in Quantum Spin Hall Systems", *Phys. Rev. Lett.*, 査読有, 103, 2009, 166403-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevLett.103.166403

3. H. Katsura, M. Sato, T. Furuta and N. Nagaosa, "Theory of the Optical Conductivity of Spin Liquid States in One-Dimensional Mott Insulators", *Phys. Rev. Lett.*, 査読有, 103, 2009, 177402-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevLett.103.177402

4. H. Katsura, N. Nagaosa and P. A. Lee, "Theory of the Thermal Hall Effect in Quantum Magnets", *Phys. Rev. Lett.*, 査読有, 104, 2010, 066403-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevLett.104.177206

5. T. Yokoyama, Y. Tanaka and N. Nagaosa, "Anomalous magnetoresistance of a two-dimensional ferromagnet / ferromagnet junction on the surface of a topological insulator", *Phys. Rev. B*, 査読有, 81, 2010, 121401-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevB.81.121401

6. D. J. J. Marchand, G. De Filippis, V. Cataudella, M. Berciu, N. Nagaosa, N. V. Prokofev, A. S. Mishchenko and P. C. E. Stamp, "Sharp Transition for Single Polarons in the One-Dimensional Su-Schrieffer-Heeger Model", *Phys. Rev. Lett.*, 査読有, 105, 2010, 266605-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevLett.105.266605

7. M. Mochizuki, N. Furukawa and N. Nagaosa, "Theory of Electromagnons in the Multiferroic Mn Perovskites: The Vital Role of Higher Harmonic Components of the Spiral Spin Order", *Phys. Rev. Lett.*, 査読有, 104, 2010, 177206-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevLett.104.177206

8. Y. Avishai, D. Cohen and N. Nagaosa, "Purely Electric Spin Pumping in One Dimension", Phys. Rev. Lett., 査読有, 104, 2010, 196601-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevLett.104.196601
  9. X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa and Y. Tokura, "Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal", Nature, 査読有, 465, 2010, 901-904  
DOI:10.1038/nature09124
  10. Y. Onose, T. Ideue, H. Katsura, Y. Shiomi, N. Nagaosa, and Y. Tokura, "Observation of the Magnon Hall Effect ", Science, 査読有, 329, 2010, 297-299  
DOI:10.1126/science.1188260
  11. K. Nomura and N. Nagaosa, "Electric charging of magnetic textures on the surface of a topological insulator", Phys. Rev. B, 査読有, 82, 2010, 161401-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevB.82.161401
  12. R. Shindou, A. Furusaki and N. Nagaosa, "Quantum impurity spin in Majorana edge fermions", Phys. Rev. B, 査読有, 82, 2010, 180505-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevB.82.180505
  13. T. Yokoyama, A. V. Balatsky and N. Nagaosa, "Gate-Controlled One-Dimensional Channel on the Surface of a 3D Topological Insulator", Phys. Rev. Lett., 査読有, 104, 246806-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevLett.104.246806
  14. W. Koshibae, N. Furukawa and N. Nagaosa, "Photo-induced insulator-metal transition of a spin-electron coupled system ", EPL, 査読有, 94, 2011, 27003P1-5  
DOI:10.1209/0295-5075/94/27003
  15. K. Nomura and N. Nagaosa, "Surface-Quantized Anomalous Hall Current and the Magnetoelectric Effect in Magnetically Disordered Topological Insulators", Phys. Rev. Lett., 査読有, 106, 2011, 166802-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevLett.106.166802
  16. T. Yokoyama, Y. Tanaka and N. Nagaosa, "Anomalous Meissner Effect in a Normal-Metal-Superconductor Junction with a Spin-Active Interface", Phys. Rev. Lett., 査読有, 106, 2011, 246601-1-4  
DOI:10.1103/PhysRevLett.106.246601
  17. K. Nomura, S. Ryu, A. Furusaki and N. Nagaosa, "Cross-Correlated Responses of Topological Superconductors and Superfluids", Phys. Rev. Lett., 査読有, 108, 2012, 026802-1-5  
DOI:10.1103/PhysRevLett.108.026802
  18. H. Y. Hwang, Y. Iwasa, M. Kawasaki, B. Keimer, N. Nagaosa and Y. Tokura, "Emergent phenomena at oxide interfaces", Nature Materials, 査読有, 11, 2012, 103-113  
DOI:10.1038/nmat3223
- [学会発表] (計 45 件)
1. N. Nagaosa, "Interaction effects on the edge channels of quantum spin Hall system", Spin Current 2009, Apr.16-20, 2009, Stanford Sierre Conference Center, USA
  2. N. Nagaosa, "Topological superconductors- edge channels and spin transport", Gordon Conference Superconductivity, Jun. 7-12, 2009, Hong Kong, China
  3. N. Nagaosa, "Correlated System including Topological Insulators: Materials, Measurements, and Majorana Modes", APS March Meeting 2010, Mar.13-17, 2010, Portland, Oregon
  4. A.S. Mishchenko, "Diagrammatic Monte Carlo and analytic continuation", Invited lecture of University of Catalonia, Jun. 8-10, 2010, University of Catalonia, Barcelona, Spain
  5. N. Nagaosa, "Proximity effect of Superconductor and Topological Insulator", SNS2010, May 23, 2010, Shanghai, China
  6. N. Nagaosa, "Berry phase and Dirac fermions in condensed matter physics",

Novel Symposium on Graphene,  
May.27 - Jun.1, 2010, Stockholm,  
Sweden

7. N.Nagaosa, "Unconventional Superconductivity on a Topological Insulator", 55thMMM Conference, Nov.17, 2010, Atlanta, USA
8. N.Nagaosa, "Photo-induced dynamics of spin textures", PIPT4, Jun.27-Jul.3.2011, ヴロツワフ/ポーランド ヴロツワフ大学
9. N.Nagaosa, "Emergent Electromagnetism in Solids - Spin-Orbit Interaction as a Gauge Field", LT26 - Beijing 2011, Aug.12.2011, 北京/中国 北京国際会議センター (BICC)
10. N.Nagaosa, "Gauge fields in real and momentum spaces", Emergent magnetic monopoles in frustrated magnetic systems, Oct.18.2011, Buckinghamshire/ イギリス The Kavli Royal Society International Centre, Newport Pagnell
11. N.Nagaosa, "Theoretical Design of Topological Insulators", 2011MRS Fall Meeting, Nov.28.2011, マサチューセッツ州ボストン/アメリカ Hynes Convention Center, Boston

〔図書〕(計1件)

Veljko Zlatić 他, Springer-Verlag, Properties and Applications of Thermoelectric Materials, 2009, 69-79

〔産業財産権〕

○出願状況(計 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◇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

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

永長 直人 (NAGAOSA NAOTO)  
東京大学・大学院工学系研究科・教授  
研究者番号: 60164406

### (2)研究分担者

ミシエンコ アンドレイ  
(MISHCHENKO ANDREY)  
理化学研究所・交差相関理論研究チーム・  
基幹研究所研究員  
研究者番号: 50525889  
※平成 21 年度・22 年度  
小椎八重 航  
(KOSHIBAE WATARU)  
理化学研究所・交差相関理論研究チーム・  
基幹研究所研究員  
研究者番号: 20273253  
※平成 21 年度・22 年度  
江澤 雅彦  
(EZAWA MOTOHIKO)  
東京大学・大学院工学系研究科・助教  
研究者番号: 10504805  
※平成 21 年度

### (3)連携研究者

( )

研究者番号:

