

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 22 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2010～2013

課題番号：22340090

研究課題名(和文) 量子相転移の物理の革新 トポロジカル量子臨界、多重量子臨界と新量子相

研究課題名(英文) Physics of Quantum Phase Transitions - Topological Quantum Criticality, Quantum Multi-Criticality and Novel Quantum Phases

研究代表者

今田 正俊 (IMADA, Masatoshi)

東京大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：70143542

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 11,200,000円、(間接経費) 3,360,000円

研究成果の概要(和文)：系のトポロジー変化によって特徴づけられる量子相転移や、1次相転移の浸み出し効果のあるような、特異な量子臨界点とその周りに引き起こす新奇な量子臨界性(マージナル量子臨界性や多重量子臨界性)の特質を解明した。三重量子臨界点近傍に生み出される波数ゼロのゆらぎの発散が今まで知られていなかった、非フェルミ液体のふるまいを生み出すことを明らかにした。トポロジカル絶縁体とゼロギャップ半導体の間の相転移が対称性の破れと、トポロジーの変化による相転移の両方の性格を持ち、特異な臨界性を示すことを明らかにした。マージナル量子臨界点近傍に生み出される高温超伝導の機構を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：Nature of novel quantum criticality including marginal quantum criticality and quantum multi-criticality characterized by topology changes as well as proximity effects of first-order transitions were clarified. It was revealed that the divergence of the fluctuations at zero wave number generated around the multi-critical points is the origin of several unprecedented non-Fermi liquid properties. Quantum phase transitions between zero-gap semiconductors and topological insulators are shown to have dual characters of spontaneous symmetry breaking and topology change and thus show novel criticality. We have elucidated the mechanism of high-temperature superconductivity generated by the marginal quantum criticality.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性I

キーワード：量子臨界現象 非フェルミ液体 トポロジカル相転移 モット転移 マージナル量子臨界

1. 研究開始当初の背景

顕著な量子効果のもとで多粒子系の示す現象は多彩だが、とりわけ量子相転移は多くの関心を集め、磁気転移、金属絶縁体転移、誘電転移、超伝導転移、超流動転移などの量子臨界現象が広範な物性分野で研究されてきた。通常の相転移は熱ゆらぎによって生じるが、相転移はこれに限らない。絶対零度に近い低温でも、粒子濃度や相互作用等のパラメータを通じて量子的なゆらぎが変化すると、量子相転移が生じる。この研究対象は、対称性の破れを伴う熱的な相転移の臨界温度 T_c が量子ゆらぎによって低下し、絶対零度になる時に量子臨界点 $T_c = 0$ が生じ、近傍の円錐領域内の量子臨界現象として捉えられる。しかし、強相関フェルミ粒子系の中には、熱相転移の単純な延長線上では理解できない未知の現象が多く発見され、新概念を必要としていた。古典臨界点近傍では密度ゆらぎのような古典ゆらぎが発散する。一方多体フェルミ粒子系の低温ではフェルミ縮退のために、フェルミ面効果と呼ばれる量子ゆらぎと不安定性が生じ、密度波相、超伝導相や磁気秩序相などへの相転移の引き金にもなる。フェルミ粒子系の量子臨界点では、この古典・量子の両者のゆらぎが相乗効果を生じると考えられ、一部の重い電子系などを対象にこの量子臨界現象の研究が進んだ。例えば磁気転移に伴う量子臨界については、対称性の破れに伴う Ginzburg-Landau-Wilson (GLW) の枠組みに基づくスピンゆらぎ理論を守谷・Hertz・Millis らが発展させた。しかしこの予測に従わず、また臨界領域が臨界点近傍を超えて広がる系が多数発見され、その機構は多く未知のままである。一方量子臨界点近傍に限らずに、あるパラメータ領域に広がって未知の新量子相が発現する可能性についても活発な研究が行われてきた。量子スピン液体相、モット転移近傍での新奇な量子流体相、非フェルミ液体金属相研究はその典型的な例である。

2. 研究の目的

系のトポロジー変化によって特徴づけられる量子相転移や、1次相転移の浸み出し効果のあるような、特異な量子臨界点とその周りに引き起こす新奇な量子臨界性(マージナル量子臨界性や多重量子臨界性)の特質を明らかにする。特に電子系の新奇量子臨界性におよぼす強い電子相関の効果を解明する。また、特異な量子臨界性のゆらぎが新量子相を生む機構を解明する。一方、量子スピン液体、非フェルミ液体金属、トポロジー絶縁体や非従来型超伝導のような新量子相の低エネルギー励起を解明し、新量子相からの量子相転移(例えば非フェルミ液体やトポロジー絶縁体からの金属絶縁体転移)が特異な量子臨界を引き起こす可能性を理論的に解明する。以上の特異量子

臨界と新量子相の双方向の波及効果から両者を包括する統一的描像を得る。

3. 研究の方法

申請者らが開発・改良した高精度の数値計算手法(多変数変分モンテカルロ法、経路積分繰り込み群法、ガウス基底モンテカルロ法、クラスター型改良動的平均場近似)を用いて、本研究費で新たに導入するワークステーションクラスターを駆使し、新しい量子臨界と新量子相の物性を解明する。高精度数値計算に加えて、量子三重臨界理論や、現在発展させている場の理論による非フェルミ液体相理論も考察の核にし、数値計算、解析計算のそれぞれの利点を生かしながら、比較検証を進めることによって、明確な物理的描像を追求する。またトポロジカル絶縁体の物性解明においては、スピン軌道相互作用を含む第一原理計算に立脚して、有効模型を導出した上で有効模型を高精度ソルバーで数値的に解く。

4. 研究成果

系のトポロジー変化によって特徴づけられる量子相転移や、1次相転移の浸み出し効果のあるような、特異な量子臨界点とその周りに引き起こす新奇な量子臨界性(マージナル量子臨界性や多重量子臨界性)の特質の解明を行なった。

三重量子臨界点近傍に生み出される波数ゼロのゆらぎの発散が今まで知られていなかった、非フェルミ液体のふるまいを生み出すことを明らかにし、重い電子系で見られる非フェルミ液体的な物性を説明できることを明らかにした。

ドーパされたモット絶縁体における一体グリーン関数の極とゼロ点の解析から、低ドーパ域に通常のフェルミ液体といくつかのトポロジカルな相転移で隔てられて、非フェルミ液体的なふるまいを持つ相が形成されること、この相がフェルミアークと呼ばれる銅酸化物の光電子分光に見られる特徴を良く再現し、擬ギャップ的なふるまいも再現することをクラスター拡張した動的平均場理論により、数値的に明らかにした。また銅酸化物の光電子分光の特徴である、water fallと呼ばれる急峻な分散やキック構造やフェルミレベルに関して非対称な状態密度も良く再現した。さらに擬ギャップが従来主張されていたようなd波的なギャップではなく、ブリルアンゾーン全面にギャップの空いているs波的な構造を持つことを明らかにし、銅酸化物の超伝導機構に対する重要な問題提起を行い、s波的なギャップの実験的な検証を提案した。スレーブボソン法により、半導体における励起子概念を拡張して得られる複合フェルミオ

ン描像が擬ギャップを含む銅酸化物の特異性を説明する鍵であることを示したうえで、銅酸化物の超伝導機構に対して再考し、d 波的なギャップ構造と擬ギャップ構造の間にあった矛盾 (dichotomy) を解決した。

トポロジカル絶縁体とゼロギャップ半導体の間の相転移が対称性の破れと、トポロジの変化による相転移の両方の性格を持ち、特異な臨界性を示すことを明らかにした。チャーン絶縁体とトポロジカル絶縁体の二通りの場合について、電子相関によって、自発的にスピン軌道相互作用と等価な項が生成される可能性を吟味し、この場合の相転移は、マージナルな量子臨界を含むトポロジカルな相転移に特有な性格を示し、従来のランダウギンツブルクウィルソン型の対称性の破れによる理論に従わないことを明らかにした。特にグラフェン型の蜂の巣格子、カゴメ格子、ダイヤモンド格子、パイロクロア格子について、その臨界性を平均場近似の範囲で求め、従来型の相転移でないことを示した。

ハバード模型の超伝導を吟味し、相分離と関連するマージナル量子臨界点の近傍で、超伝導相が顕著に安定化することを示した。この超伝導はスピン相関とそのゆらぎが超伝導機構に顕著な寄与をすると考えられているが、むしろ相分離に伴うマージナルな量子臨界性が生み出す超伝導への寄与が大きいことがわかってきたという点で、長年の懸案である銅酸化物超伝導の機構解明に大きく貢献する。

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 11 件)

M. Imada, S. Sakai, Y. Yamaji and Y. Motome, "Theory of Pseudogap in Underdoped Cuprates", J. Phys.: Conf. Ser., 449, 2013, 012005 (1-10). DOI: 10.1088/1742-6596/449/1/012005

Shiro Sakai, Sebastien Blanc, Marcello Civelli, Yann Gallais, Maximilien Cazayous, Marie-Aude Méasson, Jinsheng Wen, Zhijun Xu, Genda Gu, Giorgio Sangiovanni, Yukitoshi Motome, Karsten Held, Alain Sacuto, Antoine Georges, and Masatoshi Imada, "Raman-Scattering Measurements and Theory of the Energy-Momentum Spectrum for Underdoped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{8+x}$ Superconductors: Evidence of an s-Wave Structure for the Pseudogap", Phys. Rev. Lett., 111, 2013, 107001

(1-5).

DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.107001

Moyuru Kurita, Youhei Yamaji, and Masatoshi Imada, "Phase Diagram Structure of Topological Mott Transition for Zero-Gap Semiconductors beyond Conventional Landau-Ginzburg-Wilson Scenario", Phys. Rev. B, 88, 2013, 115143(1-21). DOI: 10.1103/PhysRevB.88.115143

Shiro Sakai, Giorgio Sangiovanni, Marcello Civelli, Yukitoshi Motome, Karsten Held, Masatoshi Imada, "Cluster-size dependence in cellular dynamical mean-field theory", Phys. Rev. B, 85, 2012, 035102(1-10). DOI:10.1103/PhysRevB.85.035102

Masatoshi Imada, Youhei Yamaji, Youhei Sakai and Yukitoshi Motome, "Theory of pseudogap and superconductivity in doped Mott insulators", ANNALEN DER PHYSIK, 523, 2011, 629-637. DOI: 10.1002/andp.201100028

Youhei Yamaji and Masatoshi Imada, "Composite fermion theory for pseudogap phenomena and superconductivity in underdoped cuprate superconductors", Phys. Rev. B, 83, 2011, 214522(1-25). DOI: 10.1103/PhysRevB.83.214522

Youhei Yamaji and Masatoshi Imada, "Mott physics on helical edges of two-dimensional topological insulators", Phys. Rev. B, 83, 2011, 205122(1-5). DOI:10.1103/PhysRevB.83.205122

Moyuru Kurita, Youhei Yamaji, and Masatoshi Imada, "Topological Insulators from Spontaneous Symmetry Breaking Induced by Electron Correlation on Pyrochlore Lattices", J. Phys. Soc. Jpn., 80, 2011, 044708(1-7). DOI: 10.1143/JPSJ.80.044708

Y. Yamaji and M. Imada, "Composite-Fermion Theory for Pseudogap, Fermi Arc, Hole Pocket, and Non-Fermi Liquid of Underdoped Cuprate Superconductors", Phys. Rev. Lett., 106, 2011, 016404(1-4). DOI:10.1103/PhysRevLett.106.016404

S. Sakai, Y. Motome, M. Imada, "Doped high-Tc cuprate superconductors elucidated in the light of zeros and poles of electronic Green's function", Phys. Rev. B, 82, 2010, 134505(1-16). DOI:10.1103/PhysRevB.82.134505

M. Imada, T. Misawa and Y. Yamaji, "Unconventional Quantum Criticality Emerging as a New Common Language of Transition-Metal Compounds, Heavy-Fermion Systems, and Organic Conductors", J. Phys.: Condens. Matter, 22, 2010, 164206(1-9). DOI: 10.1088/0953-8984/22/16/164206

[学会発表](計 20 件)

M. Imada, "Novel Quantum Phases and Nonequilibrium Dynamics in Strongly Correlated Quantum Systems", CMSI International Symposium 2013 - Extending the power of computational materials sciences with K-computer -, October 21-22, 2013, University of Tokyo, Tokyo. (招待講演)

M. Imada, "Electron Correlation Effects on Topological Phases", The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013), August 5-9, 2013, University of Tokyo, Tokyo. (招待講演)

Takahiro Misawa and Masatoshi Imada, "Superconductivity in *Ab initio* Low-Energy Model for Iron-Based Superconductors", APS March Meeting 2014, March 3-7, 2014, Denver, U.S.A.

三澤 貴宏, 「近藤格子系における電荷秩序とその周辺」, 第3回 強相関電子系理論の最前線 -若手によるオープン・イノベーション-, 2013年12月16 - 18日、勝浦観光ホテル、和歌山。(招待講演)

三澤 貴宏, 今田 正俊, 「多変数変分モンテカルロ法を用いたハバード模型における高温超伝導機構の解析」, 物性研スパコン共同利用・CMSI 合同研究会 (第4回 CMSI 研究会) -計算物質科学の課題と展望-, 2013年12月10 - 13日、東京大学物性研究所、千葉。

三澤 貴宏, 今田 正俊, 「ハバード模型における高温超伝導再考」, 日本物理学会 2013年秋季大会, 2013年9月25 - 28日、徳島大学、徳島。

M. Imada, "Iron-based

Superconductors", Workshop on Novel Materials: Adding material-specific reality in physicists' models, December 11, 2012, Natal, Brazil. (招待講演)

M. Imada, "Quantum Monte Carlo for strongly correlated systems", Conference on Computational Physics (CCP2012), October 15, 2012, Nichii Gakkan, Hyogo. (基調講演)

M. Imada, "Dynamical mean-field approach on doped Mott insulators and cuprate superconductors", Dynamical Mean-Field Approach for Strongly Correlated Materials, September 27, 2012, Dresden, Germany. (招待講演)

M. Imada, "Theory of Pseudogap in Underdoped Cuprates", International Conference on Materials & Mechanisms of Superconductivity (M2S 2012), August 2, 2012, Washington D.C., U.S.A. (招待講演)

M. Imada, "Interplay of electron correlation and spin-orbit interaction", International Workshop on Spin-Orbit Physics in Correlated Electron Systems, July 20, 2012, Aspen, U.S.A. (招待講演)

M. Imada, "Spin-Orbit Interactions, Topological Insulators and Topological Transitions", 12th Japanese-German Symposium Emergent Phenomena in Novel Quantum Phases of Condensed Matter, July 14-17, 2012, Laforet Shuzenji, Shizuoka. (招待講演)

M. Imada, "Topological Insulators and Topological Transitions", The FIRST-QS2C Workshop on "Emergent Phenomena of Correlated Materials", December 12-15, 2011, ANA InterContinental Manza Beach Hotel & Resort, Okinawa. (招待講演)

M. Imada, "Topological Transitions and Topological Insulators", The International Conference on Recent Progress in Many Body Theories (RPMBT16), November 28-December 2, 2011, Bariloche, Argentina. (招待講演)

M. Imada, "Topological transitions and topological insulators", The 26th

Nishinomiya-Yukawa Memorial International Workshop "Novel Quantum States in Condensed Matter 2011 (NQS2011)", November 22, 2011, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto. (招待講演)

M. Imada, "Topological transitions and topological insulators", Tokyo-Cologne Workshop on Strongly Correlated Transition-Metal Compounds, September 7-10, 2011, The University of Cologne, Germany. (招待講演)

M. Imada, "Renewed Understanding on Mott Transitions", APS March Meeting 2011, March 21-25, 2011, Dallas, U.S.A. (招待講演)

M. Imada, "Emergent Mott Physics", Opening Symposium of QS2C Theory Forum, September 27-30, 2010, RIKEN, Saitama. (招待講演)

M. Imada, "Low-energy excitations around novel quantum phase transitions and novel quantum phases", International Workshop on Statistical Physics of Quantum Systems, August 2-4, 2010, Institute of Industrial Science, University of Tokyo, Tokyo. (招待講演)

M. Imada, "Two Families of Superconductors, Cuprates and Iron-Based Superconductors", International Workshop on "Properties of high temperature superconductors", April 13-15, 2010, Munich, Germany. (招待講演)

〔図書〕(計 1 件)

押山 淳、天能 精一郎、杉野 修、大野 かおる、今田 正俊、高田 康民、岩波書店、『岩波講座 計算科学 3 計算と物質』、2012 年、296 ページ。

6. 研究組織

(1) 研究代表者

今田 正俊 (IMADA, Masatoshi)
東京大学・大学院工学系研究科・教授
研究者番号：7 0 1 4 3 5 4 2

(2) 研究分担者

三澤 貴宏 (MISAWA, Takahiro)
東京大学・大学院工学系研究科・助教
研究者番号：1 0 5 8 2 6 8 7