

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 5 月 20 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2011～2014

課題番号：23740258

研究課題名(和文)非磁性自由度から生じる量子多体状態

研究課題名(英文)Quantum many-body state due to nonmagnetic degrees of freedom

研究代表者

服部 一匡 (Hattori, Kazumasa)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号：30456199

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：今日実用化されているコンピュータや科学技術の多くは物質の磁気的性質をうまく利用したものがほとんどであるが、物質には磁気的自由度の他にも有用な自由度が数多くひそんでいる。本研究では、それら非・磁性自由度が主役を果たすような物性について研究を行った。特に複数のスピンの作る「カイラリティ」が織りなす近藤効果や、空間的に異方的な電子の電荷分布の自由度である「四極子」が関連する秩序状態とその臨界現象について精力的に調べた。また、関連した超伝導状態の新機構や低次元系で有用になる数値手法の開発にも成功した。これらの結果は、今後のさらなる発展に繋がることが期待できる。

研究成果の概要(英文)：Magnetic degrees of freedom have played a main role in our modern technology for many years. Recently, there appeared a considerable interest on non-magnetic degrees of freedom inherent in the nature of electrons. In this study, we have discussed various properties arising from such nonmagnetic degrees of freedom: "Chirality" formed by several spins turns out to be a main player in Kondo problem in tetrahedron spin configuration. "Quadrupole" moments that is anisotropic charge distributions of electrons, give a new opportunity of critical phenomena related to so called XY universality class. We have also developed a new Monte Carlo algorithm for one-dimensional systems and a theory for certain class of superconductivity. We expect that these results becomes the fundamentals for future studies in this field.

研究分野：強相関電子系

キーワード：強相関系 四極子

1. 研究開始当初の背景

今日、我々がパソコンやスマートフォンで様々なコミュニケーションをすることができたり、インターネットを閲覧できたりするためには、20世紀初頭に確立された量子力学と電子の磁気的な自由度の存在が不可欠である。それら最先端のデバイスには、電子の持つ「磁石」としての性質が多岐にわたって利用されている。これら磁石も量子力学がそのミクロな説明を与えていると言える。このような直接的な応用面を離れても、物質の磁気的（磁石のこと）性質は半世紀以上にわたって、「基礎研究」においても主役を演じてきたと言っても過言ではない。しかし、21世紀になってこのような磁気的性質を超えるような自由度による新奇物性・物質の探索がなされ始めている。例えば、未来のメモリ材料としてマルチフェロイック物質^①が注目を集めていることや、高温超伝導の微視的機構として電子の軌道自由度の揺らぎ^②が重要であるという研究成果が近年発展している。

2. 研究の目的

本研究では、そのような非磁性の自由度から生じる新しい物性について研究を行うことが目的である。また、それに付随した理論計算手法の開発も含めて研究を行う。以下に具体的な課題についての問題設定を記述する。

(1)

フラストレートしたスピン配置（スピン：電子のもつ磁石の大きさ）をした磁性不純物は低温において、そのスピンの性質を凍結し、新しい自由度が現れる。本研究ではスピンが4つの場合を考え、その4つが四面体の配置をとることとする。四面体配置の場合には、この自由度をカイラリティと呼ぶ。このような自由度に対する不純物問題についての低温での物性を明らかにする。

(2)

一次元系での非磁性不純物散乱問題は90年代に活発に研究がなされたが、近年の数値計算手法の発達により、新たな解析方法の可能性が出てきている。一次元系では電子系を朝永ラッティンジャー液体として記述できることが知られているが、この理論と21世紀になって発展した連続時間モンテカルロ法を組み合わせた汎用性のある計算手法を開発することを目的とする。

(3)

周期表の下部にあるランタノイドやアクチノイド系の物質では電子の電荷および磁気的性質が非常に異方的になることが知られている。このような系においては、低温で電子の磁気的性質がなくなって、完全に非磁性の自由度で記述されることがある。近年、Pr系の化合物においてそのような物性が報告されており、本研究ではその自由度がどのような振る舞いを見せるのかについての理論的な研究を行う。

3. 研究の方法

2の研究目的で述べた課題(1)-(3)について、それぞれの計算・解析手法を以下に簡単に説明する。

(1)

正確な議論をするために、様々な手法を適用して解析を行う。定性的な性質は2ループのくりこみ群法を用いて解析を行い、その後、パラメータの各領域において有効な手法を用いる。温度が低い領域では共形場理論や数値くりこみ群法およびボゾン化法を適用する。高温からのアプローチとして連続時間モンテカルロ法を活用する。

(2)

ボゾン化法と連続時間モンテカルロ法を組み合わせたアルゴリズムを定式化する。

(3)

Prイオンの局所的な全角運動量 $J=4$ の結晶場状態を考慮した反強四極子模型を解析する。平均場近似とそのまわりの揺らぎを取り込み温度磁場相図と励起スペクトルを計算する。微視的な計算から得られた結果を対称性の観点からランダウ理論を用いて解釈を試みる。

4. 研究成果

(1)四面体近藤模型における非遮蔽近藤効果と非フェルミ液体状態

四面体配置の磁性不純物問題の相図は図1のようになることがわかった。ここで J は局在不純物スピン間の超交換相互作用であり、 J が近藤効果のエネルギースケールである近藤温度 T_K と同程度のところで相転移が存在する。弱結合側はフェルミ液体で、四つのスピンそれぞれが伝導電子と近藤一重項を形成する。反対の強結合の領域では不純物の自由度は点群 T_d の2次元E表現（これが2つの複素一次元表現としてカイラリティになる）に制限され、その近藤効果はアンダースクリーニングといって、強磁性的な近藤効果と同様に、伝導電子と不純物の結合が低温で消失し、不純物の自由度は遮蔽されない。これら2つの相の間が非フェルミ液体的臨界点であり、そこでは後述するように電子の自己エネルギーが異常な振る舞いをする。

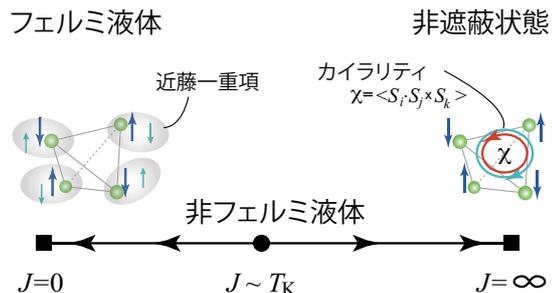


図1: 四面体不純物模型の相図

図2は非フェルミ液体臨界点近傍における自己エネルギーの松原振動数依存性である。結合定数 V は近藤効果の強さを表す変数であり、 t は不純物電子間のホッピング項である。 T と J の間には局所クーロン斥力を U として $J \sim 4t^2/U$ の関係がある。計算では温度 $T/D=0.005$ 、局在電子の準位 $\varepsilon = -U/2$ 、伝導電子のバンド幅の半分を D ととっている。注目すべきは、 $V/D \sim 0.25, 0.275$ のあたりで低振動数の振る舞いが定性的に変化するという点である。すなわち、 V が大きい領域では $\text{Im}\Sigma$ は $\omega_n \rightarrow 0$ に向かって減少($\sim \text{定数} - \omega_n$)するが、 V が小さい領域では負に発散的な振る舞いをしてい

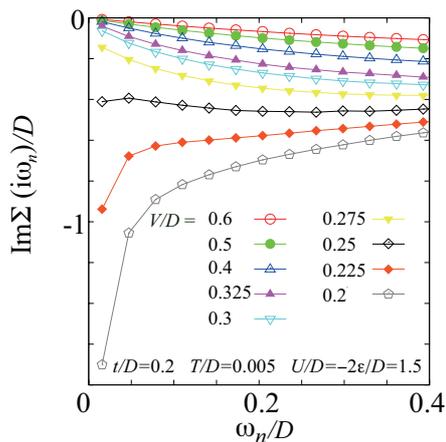


図2： 自己エネルギーの振動数依存性 (温度 $T/D=0.005$ 、混成 V を変化させている。)

この結果より、 $V/D \sim 0.25, 0.275$ に相転移があることがわかり、実際の近藤温度と超交換相互作用の見積もりから推測される点とおよそ符合する。この臨界点では、解析接続後の電子の自己エネルギーが、 V が大きいフェルミ液体状態の ω^2 ではなく ω になることがわかった。この振動数依存性は高温超伝体で提唱された、マージナルフェルミ液体^③のものとおなじものである。 V が小さい非遮蔽相では電子の自己エネルギーは低振動数で発散しており、これは電子の局在化を表している。不純物問題における局在電子の「局在化」は不純物と伝導電子の結合が消失するという事実を反映しているものである。高温超伝導体もモット絶縁体近傍にある物質であり、電子の局在化と $\text{Im}\Sigma \sim \omega$ が共通に発現する点は非常に興味深い。

(2) 一次元朝永ラッティンジャー液体中の不純物問題における連続時間モンテカルロ法の開発

一次元系ではボゾン化法を用いた解析が有用であるが、連続時間モンテカルロ法においても、ボゾン化されたモデルの解析が可能であることを示すことができる。一次元系の有効理論は朝永ラッティンジャー液体と呼ばれているが、理論内の微視的な変数として朝

永ラッティンジャー変数 g がある。この g は系の相互作用の強さに依存しており、相関関数の長距離指数を与えたり、さまざまところで重要な役割を果たしている。

連続時間モンテカルロ法では系の分配関数を摂動展開した時の1つの虚時間配置に対してその重みを計算する必要があるが、その表式が驚くべきほど単純であり、上記朝永ラッティンジャー変数 g と関連していることが明らかになった。各重みは \hat{S} を一次元電子のグリーン関数行列として $|\det \hat{S}|^{2g}$ に比例する。つまり、 g は行列式のベキに現れるだけであり、このベキの違いが全ての物理量の振る舞いを決定しているのである。

はじめに、ベンチマークとして90年代に活発に研究された量子細線における後方散乱問題^④の電子グリーン関数について解析した。電子のグリーン関数 $G(\tau)$ はユニバーサルなスケール関数 $F_g(T^* \tau, T/T^*)$ を用いて $G(\tau) = s^{-g/2}(\tau) F_g(T^* \tau, T/T^*)$ と表せる。ここで $s(\tau)$ は無摂動グリーン関数、 T は温度、 T^* は系の動的な特性温度である。この結果を図3に示す。第二変数は $T \rightarrow 0$ であるので、第一変数を x と書いて、さまざまな T^* を与える微視的パラメータに対してデータを描くと各 g について1本のユニバーサルな関数 $F_g(x, 0)$ となっていることが明確になる。 F_g に関する知見はこれまで知られていなかったが、本研究で初めて近似のない結果がモンテカルロ法で計算された。

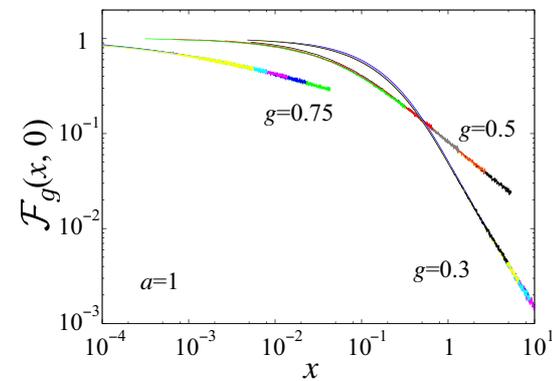


図3： $T=0$ 電子グリーン関数のユニバーサル部分 $F_g(x, 0)$

また、開発したアルゴリズムは近藤問題に対しても有用であることが示され、ヘリカル端近藤模型^⑤について適用し、種々の物理量に関して新しい知見を得た。例えば横帯磁率の低温におけるベキおよび対数発散の g 依存性を予言した(図4)。

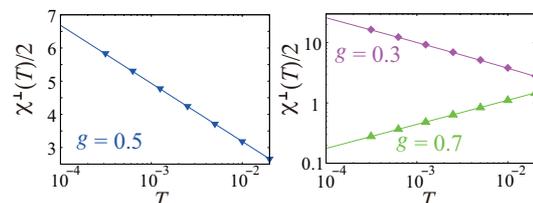


図4： 横帯磁率の温度依存性

(3) 非磁性 Γ_3 状態の四極子秩序

Pr 化合物の非磁性 Γ_3 基底状態における 2 重縮退は以下のような二つの軌道で区別される (実際の波動関数とは細部が異なるが対称性は図 5 で表される)。



図 5: 非磁性 Γ_3 基底状態の軌道

反強的な相互作用がある場合に、この軌道自由度は低温で秩序することが期待されるが、通常のスピン 1/2 の系とどのような違いがあるのかを平均場解析したところ、図 6 のような温度-磁場相図を得た。

① $H // [001]$

複数の相が現れ、それぞれ I, II, III, IV と呼ぶこととする。

I: 反強 v +誘起強 u 状態

図 7 (a), (b) の状態であり、図 5 の軌道と主軸の向きが垂直の 2 つのドメインになる。これは磁場の向きに依存している。

II: フェリ u 状態~コリニア反強 u 状態

図 7(d) の状態であり、 v 成分は一切ない。

III: キヤント状態つまり、磁場誘起 u 状態+反強 v 状態

図 7(e) の状態であり、高磁場下で現れることからわかるように、強的な u 状態が支配的である。

IV: 飽和状態

図 7(f) の状態であり、磁場下ではパラ状態と連続的につながる。

② $H // [110]$

磁場下で秩序相は 1 つのみであり、図 7(c) で表せる。 $H // [001]$ I 相と同等の状態である。飽和状態は図 7(g) であり、 $H // [001]$ と逆向きになる。

③ $H // [111]$

$H // [110]$ と同様に秩序相は 1 つであり、図 7(a-c) の状態が 3 重に縮退している。飽和状態は図 7(h) であり、 T_{xyz} 八極子が誘起される。

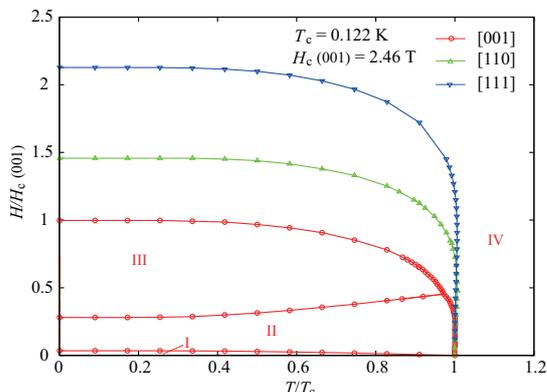


図 6: 反強四極子模型の温度-磁場相図

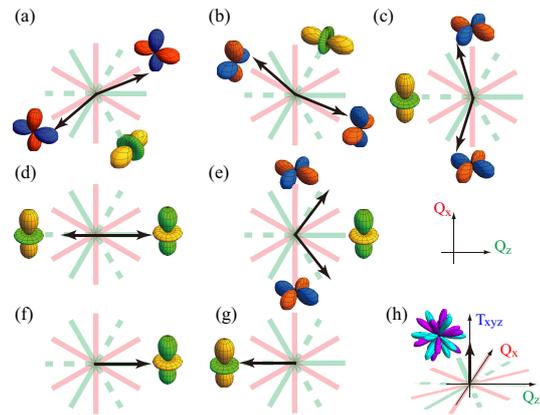


図 7: さまざまな秩序状態の概略図

これらの状態の実現において特に重要な点は自由エネルギーに現れる 3 次の項である。具体的には $u^3 - 3uv^2$ の形をしており、これは $u-v$ 平面において $\cos 3\theta$ の異方性を与える項になっている。この異方性により定性的に磁場中の秩序相が説明可能である。

平均場理論を超えたスピン波の解析により、エキシトンのスペクトルを解析することも行った。磁場中の二次転移近傍では、エキシトンのエネルギーが低下し、波数 0 で線形分散を持つことを明らかにした。このエキシトンは最近報告されているゼーベック係数の異常とも関連する可能性があり、今後の研究の発展が期待される。また、大規模古典モンテカルロ法による解析も行っており、詳細な結果は今後発表予定である。

<引用文献>

- ① 有馬孝尚、「マルチフェロイクス」(2014, 共立出版)
- ② 大成誠一郎、紺谷浩、日本物理学会誌 **68** (2013) 4月号 pp. 231-235
- ③ C. M. Varma, P. B. Littlewood, and S. Schmitt-Rink, Phys. Rev. Lett. **63**, 1996 (1989).
- ④ C. L. Kane and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. Lett. **68**, 1220 (1992).
- ⑤ C. Wu, B. A. Bernevig, and S. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **96**, 106401 (2006).

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 5 件)

- ① K. Hattori and A. Rosch,

“Quantum impurity in a Tomonaga-Luttinger liquid: Continuous-time quantum Monte Carlo approach”

Phys. Rev. B **90**, 115103 (2014) 1-14.

DOI: [10.1103/PhysRevB.90.115103](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.115103)

査読あり

② [K. Hattori](#) and H. Tsunetsugu,
“Antiferro Quadrupole Orders in Non-Kramers
Doublet Systems”

J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 034709 (2014) 1-19.

DOI: [10.7566/JPSJ.83.034709](https://doi.org/10.7566/JPSJ.83.034709)

査読あり

③ [K. Hattori](#) and H. Tsunetsugu,
“*p*-wave superconductivity near a transverse
saturation field”

Phys. Rev. B **87**, 064501 (2013) 1-5.

DOI: [10.1103/PhysRevB.87.064501](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.064501)

査読あり

④ [K. Hattori](#),
“Continuous-Time Quantum Monte Carlo
Approach for Impurity Anderson Models with
Phonon-Assisted Hybridizations”

J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 064709 (2013) 1-5.

DOI: [10.7566/JPSJ.82.064709](https://doi.org/10.7566/JPSJ.82.064709)

査読あり

⑤ [K. Hattori](#) and H. Tsunetsugu,
“Non-Fermi liquid, unscreened scalar chirality,
and parafermions in a frustrated tetrahedron
Anderson model”

Phys. Rev. B **86**, 054421 (2012) 1-6.

DOI: [10.1103/PhysRevB.86.054421](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.054421)

査読あり

[学会発表] (計 11 件)

① [K. Hattori](#),
“立方晶Gamma3四極子の秩序について”
研究環「特異な結晶構造に創出す新奇量子相
の解明」第2回研究会, 9/26, 2014

「首都大学東京(東京都八王子市)」

② [K. Hattori](#),
“Quantum impurity in a Tomonaga-Luttinger
liquid: continuous-time quantum Monte Carlo
approach” New horizon of strongly correlated
physics 2014, 6/16-7/4, 2014

「東京大学物性研究所 (千葉県柏市)」

③ [K. Hattori](#),

“URhGeにおける横飽和磁場近傍で発現するp
波超伝導の解析”

日本物理学会 第68回年次大会, 3/28, 2013

「広島大学 (広島県東広島市)」

④ [K. Hattori](#),

“Underscreening Kondo physics in a frustrated
tetrahedron impurity in a metal” Strongly
correlated electron systems 2012, 9/2, 2011

「Cambridge (UK)」

[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 :
出願年月日 :
取得年月日 :
国内外の別 :

[その他]
ホームページ等
研究成果 :

<http://tsune.issp.u-tokyo.ac.jp/researchURhGe.html>

Reserchmap HP:

<http://researchmap.jp/read0203216>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

服部 一匡 (Hattori Kazumasa)
東京大学・物性研究所・助教
研究者番号 : 3 0 4 5 6 1 9 9