

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 20 日現在

機関番号：33924

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400411

研究課題名(和文)モット絶縁体に導入したホールによる磁性と超伝導

研究課題名(英文) Magnetism and superconductivity induced by holes introduced to Mott insulator

研究代表者

高野 健一 (Takano, Ken'ichi)

豊田工業大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：00197112

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：モット絶縁体に電子受容体をドーピングして、電子を取り除くと、電子バンドの占有率  $1/2$  からずれた分がホールとして運動する。このホールは、周囲の電子スピンと強い磁気的な相関を持ちながら運動する。数値的な解析によって、1つのホールは周囲のスピンと束縛して  $S=1, 2, 3, \dots$  の複合粒子を形成することを明確にした。どの複合粒子ができるかは、ハミルトニアンに含まれるパラメータによる。 $S=1$  の複合粒子は、2つあってもそれぞれほぼ独立に運動するが、 $S$  が2以上の複合粒子は融合して強磁性領域になってしまうことがわかった。また、有限密度のホールがある場合の相図を数値的に求めた。

研究成果の概要(英文)：We investigated the motion of holes which are introduced in Mott insulator by doping. Such a hole moves in the surrounding electrons, strongly interacting with the electronic spins. By numerical analysis, we confirmed that one hole and spins form a bound state which behaves as a composite particle with spin  $S=1, 2, 3, \dots$ . The spin magnitude of a composite particle depends on the values of parameters in the Hamiltonian. Two  $S=1$  composite particles exist almost independently. Two composite particles with  $S$  more than 1 aggregate to a single ferromagnetic area. We further constructed the phase diagram for finite hole density by numerical calculation.

研究分野：物性基礎論

キーワード：モット絶縁体 ホールとスピンの束縛状態  $t$ - $J$ モデル

1. 研究開始当初の背景

モット絶縁体は、電子バンドが占有率 1/2 で、電子間に強い斥力が働くとき実現する。これは、斥力によって電子の 2 重占有ができず、各格子点あたり 1 個存在する電子が移動できないためである。このようなモット絶縁体に電子受容体をドーピングして、電子を取り除くと、電子バンドの占有率 1/2 からずれた分がホールとして運動する。このホールは、半導体における一問題的なホールとは異なり、周囲の電子と強い磁気的な相関を持つ。ホールの磁性や電気伝導への影響は、興味深い基本的な問題である。

モット絶縁体にホールを導入した物質の性質は、銅酸化物超伝導体が発見されてから、活発に研究された。この超伝導は、当初、1/2 占有の電子バンドを持つ銅の格子点に生じたホールによると考えられたためである。しかし、ホールは酸素のサイトに生じることが明らかになり、単純なモット絶縁体に導入されたホールの運動に帰着させる立場の研究は下火となっていた。しかし、近年になり、電子を原子に置き換えた光格子中の冷却原子系が現実になり、このような理想的な状況での実験も可能性が高くなった。また、このような状況は、有機電荷移動錯体などで実現できる可能性もある。

2. 研究の目的

モット絶縁体から電子を取り除いてできるホールの運動を研究する。ホール 1 個の運動は、周囲の電子との磁気的な相関を伴い、それ自体多体問題となるが、ホール個々の性質および多数のホールの集団運動による物性を解明する。特に、ある条件下では、このホールと周囲のスピン自由度が束縛して電荷 +e、スピン 1 の複合粒子を形成すること、この複合粒子が多数集まったときに新奇な超伝導を起こすことを理論的および数値的に検証する。

3. 研究の方法

(1) ホールが複合粒子を形成するための背景となるモット絶縁体の磁性を調べる。これは、各格子点に 1 個ずつの電子スピンの局在する量子スピン系である。この中にホールを導入したときに複合粒子ができるための前提条件は、この量子スピン系がスピン・ギャップのあるスピン液体状態となっていることである。このため、1 および 2 次元系でフラストレーションのある量子スピン系を候補として、基底状態でスピン液体状態が実現する条件やその性質を数値的、解析的に明らかにする。

(2) スピン・ギャップのある量子スピン系を  $t_1-t_2-J_1-J_2$  模型などの電子系に拡張して、ホールを導入する。1 次元と 2 次元でホールが 1 個の場合および少数個の場合を数値的手法で調べ、ホールとスピンによる複合粒子の存

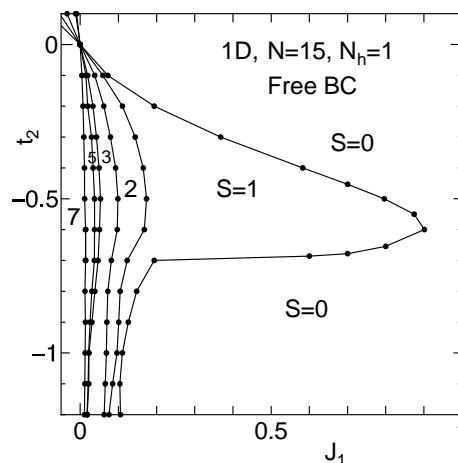
在するパラメータ領域を確定する。複合粒子が形成される場合には、その有効質量、束縛エネルギー、相互作用の強さを定量的に評価する。可能ならば、1 次元と 2 次元での数値的手法で得た結果を再現するように、複合粒子が満たす簡潔な有効ハミルトニアンを構築する。これを検討して、3 次元に対しても、有効ハミルトニアンを推定する。

(3) 複合粒子が有限密度である場合の基底状態と有限温度の性質を調べる。数値対角化の手法では大きな系を扱うことはできないが、小さい系であっても密度が同じになるような格子点数と電子数の組を複数用意して、外挿を行う。有効ハミルトニアンが見いだされた場合にはこれを利用して、解析的にも調べる。

4. 研究成果

(1) ホールをドーピングする前のモット絶縁体自体の磁性を調べた。このような磁性体は、量子スピン系として理論的に解析される。1 次元  $t_1-t_2-J_1-J_2$  模型の元となる量子スピン系は、1 次元ハイゼンベルグ模型 ( $J_1-J_2$  模型) である。これについては、ホールを導入したときのバックグラウンドのスピン液体として、ホールの問題とともに調べている。その他に、ダイヤモンド鎖と呼ばれるトランプカードのダイヤを連ねた形の量子スピン系の性質を  $S=1$  の場合に調べた。この系は、含まれるパラメータを変化させることに伴い、何種類かのスピン液体状態を実現する。厳密解を求めることと数値解析により、スピン液体の性質を明らかにした。この結果は、〔雑誌論文〕で発表している。〔学会発表〕では、とがこの内容である。ダイヤモンド鎖にホールを導入することは、研究期間内には行っていない。

(2) モット絶縁体にホールをドーピングしたモデルとして、1 次元  $t_1-t_2-J_1-J_2$  模型の 1/2 占有の電子バンドから 1 個の電子を取り除いた場合を詳しく調べた。以前の研究で、数値対角化法により基底状態の相図 (下図) は求めてあり、その中で  $S=1$  相では、電子スピン



2つがトリプレットとなり、ホールと共に束縛状態(複合粒子)を形成することがわかっている。

この相図中の  $S = 2, 3, 4, \dots$  の一連の狭い相を調べたところ、システムサイズ無限大への外挿で有限に残ることが判明した。相関関数により状態を調べた結果、 $S = 2$  の相には、ホールと4個の電子スピンの強磁性的な複合粒子が形成されていることがわかった。同様に、 $S = 3, 4, \dots$  の相では、ホールとそれぞれ 6, 7, ... の強磁性的な複合粒子が形成されていることがわかった。これらすべての束縛状態の原因は、長岡強磁性の効果、ホールの近くで局所的に起こっているとして説明できる。この結果は、[雑誌論文] の中に述べられている。[学会発表] では、がこの内容である。

(3) モット絶縁体から電子を2個取り除いた場合(2ホール系)を数値対角化法によって詳細に調べた。(i) パラメータ値によっては、1ホールにの spin 1 が束縛した複合粒子が2個生成し、それらが近づくと斥力が働き、それ以外はほぼ独立に運動する。そのような相ははっきりと存在する。これらは、1ホール系で形成される準粒子が、ホール2つの場合でもそのまま形成されることを意味している。このことから、ホール3個以上の場合でも、数値計算の限界で直接は確認できないが、準粒子の生成が同様に可能であることを示唆している。別のパラメータ領域では、2つのホールが周囲の spin と一体となって生存し、それ以外の spin がない場所と空間的に相分離する状況も起こることがわかった。(ii) 2ホールの場合、1ホールと spin 2 が束縛した複合粒子が2つできる相は存在しないことがわかった。そのような複合粒子は、分離して独立に運動するのではなく、くっついて spin 4 の空間的な強磁性領域が形成される。すなわち、相分離が起こる。2つのホールはその強磁性領域内を運動する。同様に、ホールと spin 3 以上の複合粒子も複数個は共存しないことがわかった。これらのことは、[雑誌論文] の中に述べられている。[学会発表] は、 の中で発表している。

(4) 複合粒子が有限密度の場合の基底状態を調べた。数値対角化の手法では大きな系を扱うことはできないが、小さい系で密度が同じになるような格子点数と電子数の組を複数用意できれば外挿を行うことができる。実際に数値的対角化を行ったのは、11サイトに1ホールの場合と22サイトに2ホールの場合である。これより、ホールが有限密度  $n$  のときの相図を推定した(下図)。見いだされた相は、強磁性相(FM)、相分離領域(PS)、Ferromagnetic Cloud Liquid 相(FCL)(ホールと spin 1 の複合粒子が有限密度で形成される相)、Tomonaga-Luttinger Liquid 相(TLL)

である。図中で UI とあるのは、数値的に確定できなかった領域で、サイズ効果の可能性はある。この結果を再現する、有効ハミルトニアンであるが、Prelovsek 等による、1次元  $t_1-t_2-J_1$  モデル( $J_2=0$  の場合)の有効モデルがあり、結果が比較された。これらのことは、[雑誌論文] の中に述べられている。[学会発表] は、 の中で発表している。



(5) spin がそろった複数の電子とホールの複合粒子の形成は、ホールのまわりで電子の spin がそろってエネルギーが低下することによって起こる。このような現象は、より単純化された状況として、量子リング中で2電子の spin がそろって現象としても現れることに気が付いた。量子リングの中央の穴が、ホールの役割をする。半導体中にナノスケールの量子リングを作成し、その中に2電子を閉じ込めた状況を理論的に解析した。この系はある程度電子間の相互作用が強いとトリプレットになる。この系の特徴として、リング全体に磁場をかけ、磁場の強さを増加させていくとシングレットとトリプレットが交互に現れ振動することもわかった。これについては、[学会発表] の で発表している。

#### 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2件)

Kazuhiro Sano, Ken'ichi Takano,  
“Ferromagnetic Clouds Caused by Hole Motion in a One-Dimensional  $t$ - $J$  Model”, Journal of the Physical Society of Japan, 査読有, Vol. 85, 2016, 094714-1-8  
<http://doi.org/10.7566/JPSJ.85.094714>

Kazuo Hida, Ken'ichi Takano,  
“Ground-State Phase Diagram of  $S = 1$  Diamond Chains”, Journal of the Physical Society of Japan, 査読有, Vol. 86, 2016, 033707-1-4  
<https://doi.org/10.7566/JPSJ.86.033707>

[学会発表](計5件)

佐野和博, 高野健一,  $t_1-t_2-J_1-J_2$  モデルにおけるホールの運動と電子状態, 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月 9 日, 中部大学春日井キャンパス(春日井市

松本町)

法月直人, 高野健一, 量子リング中の 2 電子スピン状態の磁場増加に伴うシングレット-トリプレット振動, 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015 年 3 月 22 日, 早稲田大学早稲田キャンパス(東京都新宿区)

飛田和男, 高野健一, スピン 1 ダイヤモンド鎖の基底状態相図, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 13 日, 金沢大学角間キャンパス(金沢市角間町)

高野健一, 佐野和博, 1 次元 t-J モデルにおけるホールの運動と電子状態 III, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 17 日, 大阪大学豊中キャンパス(大阪府豊中市)

飛田和男, 高野健一, 鈴木秀則, 混合スピンダイヤモンド鎖の理論, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 18 日, 大阪大学豊中キャンパス(大阪府豊中市)

〔図書〕(計 件)

〔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

高野健一 (TAKANO, Ken'ichi)  
豊田工業大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号: 00197112

### (2) 研究分担者

佐野和博 (SANO, Kazuhiro)

三重大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号: 40201537

### (3) 連携研究者

( )

研究者番号:

### (4) 研究協力者

( )