

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 5 月 11 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2017

課題番号：26800172

研究課題名(和文)磁性と超伝導を統一的に扱う強相関理論の構築

研究課題名(英文) Construction of a unified theory for magnetism and superconductivity in strongly correlated electron systems

研究代表者

大槻 純也(Otsuki, Junya)

東北大学・理学研究科・助教

研究者番号：60513877

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：それまで別々の理論を用いて議論されてきた磁性と超伝導を統一的に扱う理論を構築した。具体的には、磁性の研究に広く用いられている動的平均場法を出発点として、空間相関を考慮することで超伝導を扱った。この理論を重い電子系の基本的模型に適用し、従来の理論とは異なる超伝導状態が実現することを明らかにした。この結果はこれまで考慮されてこなかった局所相関効果に起因しており、強相関系の超伝導研究に新たな視点を与える重要な成果である。研究期間の後半には、データ科学を量子多体計算に応用する新しい試みに挑戦した。上述の「磁性と超伝導を統一的に扱う強相関理論」を現実の化合物に適用する際に有用なものとなる。

研究成果の概要(英文)：We established a theory that treats magnetism and superconductivity on equal footing. Starting from the dynamical mean-field theory, which has been widely applied to investigation of magnetism, spatial correlations are incorporated to address superconductivity. Applying the theory to the fundamental model for heavy-fermion systems, we revealed that there emerges a peculiar superconducting state that has not been expected in ordinary theories for superconductivity. This result affords a new insights into superconductivity that an exotic pairing could be induced by local-correlation effect.

In the latter of the period, we developed a new data-science approach to quantum many-body calculations. This approach is expected to play an crucial role in future applications of the "unified theory for magnetism and superconductivity" to realistic models for strongly correlated electron materials.

研究分野：強相関電子系理論

キーワード：強相関電子系 磁性 超伝導 動的平均場理論 重い電子 量子多体論 データ科学 スパースモデリング

1. 研究開始当初の背景

(1) 強相関電子系における磁性と超伝導

強相関電子系では磁性と超伝導とが絡み合い、単独では起こらない現象を示す。特に、従来は相反する現象と考えられていた磁性と超伝導が、強相関電子系では互いに助け合い、時には共存する状況は、長年研究の対象となっている。具体的な化合物として、d 電子系における銅酸化物高温超伝導体や f 電子系における重い電子超伝導体が挙げられる。このような強相関電子系における磁性と超伝導をミクロな視点から理解することは、基礎科学としてはもちろんのこと、超伝導や磁性を利用した機能物質の開発という点からも重要な課題である。

(2) 非従来型超伝導を扱う理論の現状

強相関電子系の非従来型超伝導は、これまで様々な理論手法によって研究されてきた。最も基本的なアプローチは、クーロン斥力に関する摂動論である。揺らぎ交換近似などの摂動計算によって、エネルギーバンド構造から期待される超伝導の対称性などの基本的な情報を得ることができる。しかしながら、摂動論ではモット絶縁体や重い電子状態の記述に不可欠な強相関効果が十分に取込まれていないため、非従来型超伝導とその近傍の電子状態の統一的な理解には、摂動論だけでは不十分である。一方、厳密対角化などの数値計算は、2次元系では十分大きなシステムサイズを扱うことができず、熱力学極限の結果を得ることは困難である。また、本来なら大きいシステムサイズを扱えることが利点の量子モンテカルロ法は、特殊な場合を除いて、負符号問題のために精度の良い結果が得られない。したがって、非従来型超伝導を扱うための信頼できる数値計算手法がないのが現状である。

このような状況で、モット絶縁体や重い電子状態の記述に成功している動的平均場理論を拡張し、非従来型超伝導を扱えるようにする試みが行われている。このアプローチは大きく分けて2つに分類される(下図)。ひとつは有効的な一不純物模型をクラスターで置き換える拡張(クラスター動的平均場理論)で、もう一方は動的平均場理論で使われていない二粒子グリーン関数を使って、摂動論などによって波数依存性を取り入れる拡張(波数空間のアプローチ)である。後者の

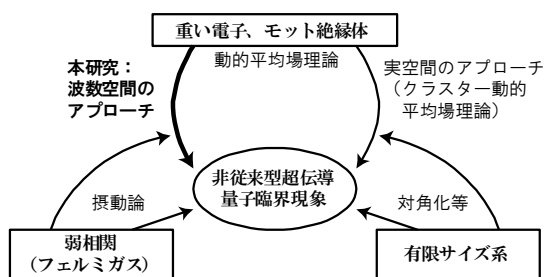


図 1: 非従来型超伝導に対するアプローチ

アプローチは、超伝導の研究で広く用いられている揺らぎ交換近似などの摂動論とつながる手法であり、磁性と超伝導の統一的な扱いが可能となることが期待される。このアプローチは発展途上であり精力的に研究が進められているが、数値計算の難しさなどのために、実用的な理論の構築までは至っていない。

2. 研究の目的

強相関電子系における磁性と超伝導に関する理論の現状を踏まえ、本研究では以下の2点を目標として研究を行った。

- (1) 動的平均場理論を出発点としてそれに摂動論の要素を取り込む「波数空間のアプローチ」により、磁性と超伝導を統一的に扱うことのできる新たな枠組みを確立する。
- (2) また、その拡張理論の自己無撞着方程式を数値的に正確に解くことで、強相関電子系における磁性と超伝導が絡み合う現象を微視的に明らかにする。

3. 研究の方法

動的平均場理論で使われていない二粒子グリーン関数を考慮に入れ、低次元系や相転移近傍で重要な長距離揺らぎを取り込む「波数空間の拡張理論」がいくつか提案されている。本研究では、近年提案されたデュアルフェルミオン法と呼ばれる補助変数を導入するアプローチに注目した。デュアルフェルミオン法では、動的平均場理論と同じ不純物模型を解いて得られる一粒子グリーン関数および二粒子グリーン関数を使って、格子系の情報を摂動展開により取り込む。この摂動展開の0次が動的平均場理論に対応しており、それに対する補正を摂動展開によって取り入れる。摂動展開では任意のダイアグラムを実行することができ、系統的な近似を構築することが可能である。この特長を利用し、d 波超伝導の研究においてしばしば用いられている乱雑位相近似や揺らぎ交換近似と同様のダイアグラムを考慮に入れる。それにより、強相関効果を取り入れた非従来型超伝導状態の記述が可能になる。

4. 研究成果

(1) 磁性と超伝導を統一的に扱う強相関理論の構築

デュアルフェルミオン法で実際に解を得るためには、一粒子グリーン関数だけでなく二粒子グリーン関数も計算する必要がある。その数値計算の難しさと空間相関を記述する方程式が本質的に持つ不安定性のために、超伝導状態を含む解は系統的に調べられていなかった。本研究では、安定して収束解を得る数値計算法を考案した。この方法と連続時間量子モンテカルロ法と呼ばれる数値計算を用いることで、任意のパラメーターに対する解が得られるようになった。

最初の応用として、銅酸化物高温超伝導体の有効模型として最も詳細に研究がなされている2次元ハバード模型に適用し、超伝導およびその他の量子状態の出現可能性について調べた。その結果、反強磁性、d波超伝導、および相分離状態が得られた。特に、低ドーピング領域では相分離が広く起こるため、純粋なd波超伝導状態は狭いドーピング領域でしか実現しない。これらの結果は、同模型に対するこれまでの数多くの研究と基本的に矛盾のないものである。このことから、本研究で構築した理論は信頼できる手法であることが示された。この枠組みを強相関電子系の種々の模型へ適用していく際の基礎となる結果である [雑誌論文リスト⑩]。

(2) 重い電子超伝導

上述の「磁性と超伝導を統一的に扱う強相関理論」は、重い電子系の超伝導の議論において、有用性が最も顕著に表れる。その記述には、スピンの時間的揺らぎによる重い準粒子の形成と長距離の異方的な揺らぎを介した超伝導相関の発達という時間的・空間的揺らぎを同時に考慮する必要があるからである。これまでの理論はそのどちらか一方を重点的に扱うものであった。デュアルフェルミオン法ではそれらを統一的に取り扱うことができ、「本当の意味」での重い電子超伝導の微視的な理論計算が可能となった。

デュアルフェルミオン法を重い電子系の基本的模型に適用することで、反強磁性量子臨界点近傍において従来とは異なる非自明なペア対称性を持つ超伝導が実現することを明らかにした (下図)。この結果は、f電子の局所相関効果によるものであり、それまでの超伝導の理論研究では考慮されていない要素を含んでいる。そのため、強相関電子系の超伝導研究に新たな視点を与えるもの

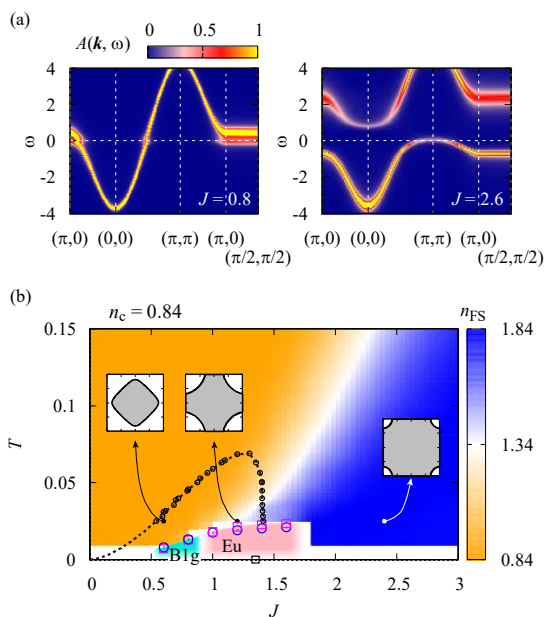


図 2: 近藤格子模型における電子状態と超伝導・反強磁性相図 [雑誌論文リスト⑦より]

として重要な成果である。この成果は Physical Review Letters 誌に単著論文として掲載された [雑誌論文リスト⑨]。

(3) 磁性元素を含む準結晶化合物における量子臨界的振る舞いの理論

希土類元素を含む準結晶化合物において、量子臨界的な振る舞いが観測されている。強相関電子系における量子臨界現象は、通常は磁気秩序の消失と関連して観測されるが、準結晶化合物では磁気秩序が存在しないため、その起源が謎であった。本研究では、準結晶の磁気的な性質を記述する新たな模型を提案し、それを動的平均場法によって解析することで、実験で観測されている量子臨界的な振る舞いを説明した。これは従来の反強磁性揺らぎによるものとは異った準結晶構造特有の機構であり、準結晶と電子相関の組み合わせによる新しい物理現象の可能性を示唆するものである。この成果は Journal of the Physical Society of Japan 誌に速報論文として掲載された [雑誌論文リスト⑥]。

(4) データ科学の方法を活用した新しい解析接続法の提案

強相関電子系化合物の数値計算における諸問題に対し、全く新しい観点からのアプローチを提案した。データ科学の分野で発展しているスパースモデリングと呼ばれる方法論は、大規模データの特徴を少ないデータで効率よく表現することを可能にする。この方法論を量子多体論に応用し、以下の成果を得た。

- 量子モンテカルロ法を用いて強相関系のスペクトルを計算する際に問題となる解析接続に対して、スパースモデリングの方法を応用することにより、安定した計算が可能となることを示した (下図) [雑誌論文リスト⑤]。
- さらに、その解析で得られた、スペクトルの高効率な表現を量子多体計算全般に応用することにより、d電子やf電子の軌道自由度を考慮に入れた場合に問題となるデータ量と計算量の問題を大幅に軽減できることを明らかにした [雑誌論文リスト④]。

以上の成果は、動的平均場法とその拡張理論を実際の化合物に応用した場合に直面する数値計算上の困難を解決または大幅に軽減

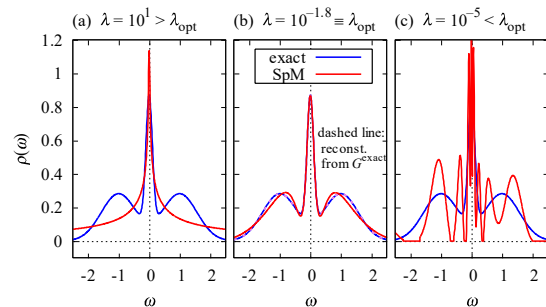


図 3: スパースモデリングの方法により計算されたスペクトル [雑誌論文リスト⑤より]

するものであり、今後のさらなる発展が期待できる重要な成果である。

(5) 動的平均場法に非局所相互作用を取り入れる拡張理論

動的平均場法は原子的な局所相関を正確に取り込む近似であるが、その一方で複数の原子にまたがった非局所相互作用は平均場近似のレベルでしか考慮されない。この点を改良するものとして、デュアルボゾン法と呼ばれる理論がある。この理論はモット絶縁体や重い電子状態を生み出す局所的な相互作用と磁性などの起源となる非局所相互作用を等しく扱うものであり、磁性と超伝導の共存相などにおいて有益な理論となると期待される。このような利点がある一方で、数値計算により解を得ることが難しいという問題がある。

本研究では、デュアルボゾン法の方程式の構造と数値計算により得られた解を詳細に調べ、この理論の特徴を明らかにした。特に、保存則が満たされた解が正しく得られる場合とそうでない場合があることが分かり、理論の適用範囲が明確となった点は今後の研究につながる有益な情報である [雑誌論文リスト③]。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 11 件)

- ① 大槻純也, 大関真之, 品岡寛, 吉見一慶, 「最大エントロピー法でいいの? — スパースモデリングの量子多体論への応用 —」, 固体物理 Vol.53 No.4 p.173-188 (2018), 査読あり
- ② H. Shinaoka, J. Otsuki, K. Haule, M. Wallerberger, E. Gull, K. Yoshimi, M. Ohzeki, "Overcomplete compact representation of two-particle Green's functions", Phys. Rev. B 97, 205111-1~14, (2018), 査読あり DOI: 10.1103/PhysRevB.97.205111
- ③ F. Krien, E. G. C. P. van Loon, H. Hafermann, J. Otsuki, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, "Conservation in two-particle self-consistent extensions of dynamical mean-field theory", Phys. Rev. B 96, 075155 (2017), 査読あり DOI: 10.1103/PhysRevB.96.075155
- ④ H. Shinaoka, J. Otsuki, M. Ohzeki, K. Yoshimi, "Compressing Green's function using intermediate representation between imaginary-time and real-frequency domains", Phys. Rev. B 96, 035147-1~8, (2017), 査読あり DOI: 10.1103/PhysRevB.96.035147
- ⑤ J. Otsuki, M. Ohzeki, H. Shinaoka, K. Yoshimi, "Sparse modeling approach

to analytical continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data", Phys. Rev. E 95, 061302(R)-1~6 (2017), 査読あり

DOI: 10.1103/PhysRevE.95.061302

- ⑥ J. Otsuki, H. Kusunose, "Distributed Hybridization Model for Quantum Critical Behavior in Magnetic Quasicrystals", J. Phys. Soc. Jpn. 85, 073712-1~4 (2016), 査読あり DOI: 10.7566/JPSJ.85.073712
 - ⑦ 大槻純也, 楠瀬博明, 「長距離相関効果を考慮した動的平均場法の拡張理論—強相関電子系の遍歴・局在双対性と超伝導—」, 固体物理 Vol.51 No.4 p.223-236 (2016), 査読あり
 - ⑧ A. Kiss, Y. Kuramoto, J. Otsuki, "Exact Dynamics of Charge Fluctuations in the Multichannel Interacting Resonant Level Model", J. Phys. Soc. Jpn. 84, 104602-1~9 (2015), 査読あり DOI: 10.7566/JPSJ.84.104602
 - ⑨ J. Otsuki, "Competing d-Wave and p-Wave Spin-Singlet Superconductivities in the Two-Dimensional Kondo Lattice", Phys. Rev. Lett. 115, 036404-1~5 (2015), 査読あり DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.036404
 - ⑩ J. Otsuki, H. Hafermann, A. I. Lichtenstein, "Superconductivity, antiferromagnetism, and phase separation in the two-dimensional Hubbard model: A dual-fermion approach", Phys. Rev. B 90, 235132-1~12 (2014), 査読あり DOI: 10.1103/PhysRevB.90.235132
- [学会発表] (計 51 件)
- ① J. Otsuki, "Superconductivity and magnetic ordering emerging when itinerant and localized natures of electrons cooperate", Emergent Condensed-Matter Physics 2018 (ECMP2018)
 - ② J. Otsuki, "Superconductivity and multipole ordering in f-electron compounds studied by dual-fermion approach and LDA+DMFT", 3rd International Workshop on Dynamical Mean-Field Approach for Strongly Correlated Materials, 2017
 - ③ J. Otsuki, "Sparse modeling approach to analytical continuation and dimensionality reduction of imaginary-time Green function", Trends in Theory of Correlated Materials 2017
 - ④ J. Otsuki, M. Ohzeki, H. Shinaoka, K.

- Yoshimi, "Intermediate representation between Matsubara and retarded Green functions: Analytical continuation and compression", The 28th International Conference on Low Temperature Physics, 2017
- ⑤ J. Otsuki, "Sparse modeling approach to analytical continuation and compression of imaginary-time quantum Monte Carlo data", Machine Learning and Many-Body Physics, 2017
- ⑥ 大槻純也, 「スパースモデリングを応用した量子モンテカルロ虚時間データの実振動数への解析接続」, 情報・データ科学との連携・融合による物性物理・量子化学の新展開, 2017
- ⑦ 大槻純也, 大関真之, 品岡寛, 吉見一慶, 「スパースモデリングを利用した量子モンテカルロデータの解析接続」, 日本物理学会, 2017
- ⑧ J. Otsuki, "Superconductivity emerging when itinerant and localized natures of electrons cooperate", 14th Bilateral Japanese-German Symposium, 2016
- ⑨ 大槻純也, 品岡寛, 播磨尚朝, 酒井治, 「LDA+DMFT 法による Ce1-2-2 系化合物の電子構造計算」, 日本物理学会, 2016
- ⑩ 大槻純也, 楠瀬博明, 「Yb 系準結晶化合物の磁気揺らぎと混合価数状態の理論」, 日本物理学会, 2016
- ⑪ J. Otsuki, "Perturbation Theory around the Dynamical Mean-Field Approximation and its Application to Heavy-Fermion Superconductivity", The 2nd Conference on Condensed Matter Physics (Nanjing), 2016
- ⑫ J. Otsuki, "Perturbation Theory around the Dynamical Mean-Field Approximation: New Insight into Heavy-Fermion Superconductivities", Trends in Theory of Correlated Materials, 2016
- ⑬ J. Otsuki, "Dual-fermion approach to heavy-fermion superconductivity in two-dimensional Kondo lattice", 2nd International Workshop on Dynamical Mean-Field Approach for Strongly Correlated Materials, 2015
- ⑭ 大槻純也, 楠瀬博明, 「Yb 系準結晶化合物の非フェルミ液体的振る舞いに関する考察: 乱れの効果」, 日本物理学会, 2015
- ⑮ 大槻純也, 「2 次元近藤格子における d 波および p 波スピナー重項超伝導」, 日本物理学会, 2015
- ⑯ J. Otsuki, "Dual-fermion approach to superconductivity in strongly correlated systems: Application to Hubbard and Kondo lattice models", The

1st Conference on Condensed Matter Physics (Beijing), 2015

- ⑰ J. Otsuki, "Dual-fermion approach to superconductivities in the two-dimensional Kondo lattice", International Conference on Magnetism 2015
- ⑱ J. Otsuki, "Dual fermion approach to strongly correlated electron systems", International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations, 2015
- ⑲ J. Otsuki, "Dual fermion approach to unconventional superconductivity and spin/charge density wave", 13th Bilateral German-Japanese Symposium, 2014
- ⑳ J. Otsuki, "Dual fermion approach to unconventional superconductivity and spin/charge density wave", New Horizon of Strongly Correlated Physics (NHSCP2014), 2014

[その他]

- ① アウトリーチ活動
<http://www.sci.tohoku.ac.jp/news/20150804-3632.html>
- ② オープンソースソフトウェア
"SpM"
スパースモデリングによる解析接続
<https://github.com/SpM-lab/SpM>
- ③ オープンソースソフトウェア
"DCore" ver. 1.0.0
動的平均場法による量子多体計算
<https://github.com/issp-center-dev/DCore>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大槻 純也 (OTSUKI, Junya)
東北大学・大学院理学研究科・助教
研究者番号: 60513877