1 物性理論

1.1 青木

青木は一貫して、超伝導に代表される多体効果や、 トポロジカル系の理論を主眼に研究を行ってきた。こ れらの現象では、強相関電子系やトポロジカル系に 特有な新奇現象が起きる。面白い物性を面白い物質 構造で発現させる物質設計も目指している。さらに、 強相関系やトポロジカル系において、非平衡で生じ る顕著な物性を探ることを最近の大きな柱としてい る。東大からの定年退職後の 2016 年度からは東大名 誉教授として、ImPACT に関しては東大物理学教室 において、科研費に関しては産総研(筑波)におい て研究を続けている。

1.1.1 超伝導

ダイナミカル・バーテックス近似 (DΓA)

銅酸化物超伝導体に対する代表的な2次元斥力 Hubbard 模型での d 波超伝導は、これまで様々な 手法で調べられてきたが、特に超伝導転移温度が電 子のエネルギー・スケールから二桁も落ちる理由は 良く理解されていない。北谷、Held(ウィーン工科 大学)、青木等は、動的平均場理論 (DMFT) のダイ アグラマティックな拡張の一つである動的バーテッ クス近似 (D Γ A) を超伝導相に拡張して、2 次元 斥力 Hubbard 模型の超伝導不安定性を計算し(図 1.1.8)、バーテックス補正がどのように転移温度に 影響するかを調べた [1, 23]。その結果、Tc はドーピ ングに対しドーム状になり、そこで Tc を支配する主 な要因を追跡することにより、従来専ら扱われてき た particle-hole チャンネルに加え、particle-particle チャンネルのバーテックス関数の動的な構造(振動 数依存性)が、ペアリング相互作用を通して超伝導 に重要な影響を与えることを明らかにした。

動的平均場理論 (DMFT) における slave-particle impurity solver

強相関電子系に対して、Mott 転移を記述できる数 少ない方法として、動的平均場理論 (DMFT) がある。 これは空間的には平均場近似をとるが、時間軸上で の量子揺らぎを取り込む方法である。これを自己無撞 着ループで数値的に解く際に、1 サイトの多体問題を 解く方法 (impurity solver) が鍵となる。Sayyad(物



図 1.1.1: (a) ダイナミカル・バーテックス近似 (DГА) を用いて、超伝導に対する Eliashberg 方程式の固有 値 λ をバンド・フィリング n に対してプロット。温度 は T/t = 0.010t, 0.013t。(b) 局所的バーテックス補 正 $\delta\Gamma_{\rm m}(\nu_n, \nu_{n'}, \omega = 0) \equiv \Gamma_{\rm m}(\nu_n, \nu_{n'}, \omega = 0) - (-U)$ を振動数 $\nu_n, \nu_{n'}$ に対してプロット(青:正、赤: 負)。(c) Bethe-Salpeter 方程式に現れる磁気バー テックス。左は RPA での典型的なダイアグラム(矢 のついた線はグリーン関数、赤い波線は斥力相互作 用 U、右は particle-particle チャンネルを含む局所 的バーテックス補正の例。[1]

性研) と青木は、これに関して、slave particle(補助 場)を用いた impurity solver を提案した。Hubbard 模型には、スピン SU(2) 対称性だけでなく、もう一 つの SU(2) 対称性 (η -SU(2) とも呼ばれる)が内在 しているが、この SU(2) \otimes SU(2) 対称性を尊重しな がら slave particle 法を構成し、その上で DMFT と FLEX (揺らぎ交換近似)を組み合わせることで、超 伝導と磁性などの対角秩序を同等に扱えることを提 案した [18]。

Pomeranchuk 不安定性と超伝導への影響

高温超伝導体の基本模型である、正方格子上のHubbard 模型では、本来4回対称であるフェルミ面が、 多体効果のために自発的に低対称化する Pomeranchuk 不安定性の可能性が議論されてきたが、平 均場解析等にとどまっていた。特に、Pomeranchuk 不安定下での超伝導についてはよく分かっていなかっ た。北谷、辻(理研)、青木は、DMFT+FLEX 法を 用いてこれを調べ、フェルミ面の形状を系統的に変 化させたときに、(i) Pomeranchuk 不安定性はこの 影響を超伝導 Tcより強く受ける、(ii) Pomeranchuk 不安定性のために歪んだフェルミ面においては、超 伝導のペアリングが d 波から d+(extended) s 波に なる、(iii) 歪みが Tc を上昇させる場合がある、こ とを見いだし、直感像を与えた [4]。

梯子系の物質設計

高温超伝導のT_Cを増強するのが難しい根本的な 理由として、ペアリング相互作用を強くすることと 準粒子繰り込みを弱くすることが両立し難いという ジレンマが挙げられる. これを克服する方策として 黒木等により提案された、対角ホッピングを含む梯 子格子がある。この系では幅の狭いバンドと広いバ ンドが共存しており、特に Fermi 準位が幅の狭いバ ンドの端付近に位置し,幅の広いバンドのみが Fermi 面を形成する状況を考えると,非常に多くのバンド 間ペア散乱チャンネルが生じ,強いペアリング相互 作用を生み出すことができ,同時に準粒子繰り込み を小さく保つことが可能となるので、高い転移温度 が期待される.但し、梯子型銅酸化物に多量の電子 ドープができればこの状況が実現されるが、このよ うなドーピングは実際上困難である.そこで、小倉、 黒木(阪大)、青木は,Ruddlesden-Popper 型化合物 Sr₃Mo₂O₇, Sr₃Cr₂O₇ において, 遷移金属の d 軌道 の異方性に起因した梯子的な電子状態が隠れており (図 1.1.9), Fermi 準位が好都合にも狭いバンドの端 の直下に位置することを見出した [5, 16, 24].



図 1.1.2: 一見2層系(黒の格子)に見える Ruddlesden-Popper 化合物 $Sr_3TM_2O_7$ (TM は遷 移金属)は、遷移金属中のd 電子軌道(ここでは d_{xz}, d_{yz})を考慮すると、二本梯子の並びとみなせ る。[5]

平坦バンド系の設計と平坦バンド超伝導

厳密な強磁性を示すことで知られる平坦バンド系 は、最近では超伝導やトポロジカル系の観点からも 重要性が認識されつつある.特に電子間斥力を導入 した場合,バンド間ペア散乱が、スピン揺らぎに媒 介された高温超伝導を誘発する可能性が、上記の黒 木等や小林等により指摘されている.このときに、2 次元系において通常の平坦バンド模型では、平坦バ ンドは分散バンドの端に接触するか、あるいはディ ラック点に一致するが、スピン揺らぎ媒介超伝導に

おいては、平坦バンドが分散バンドを貫通して交叉 する状況の方がこのメカニズムを増強することが期 待される。このような背景下で「エネルギーを制御 出来る平坦バンド模型の構成」が重要と考えられる. 三角(秋田大)と青木は、ユニットセルに2つの格 子点を含む2次元格子において第3隣接ホッピング まで考慮したタイトバインディング模型のハミルト ニアンの構造を調べることで、平坦バンドが生じ得 る補助条件を見出した.これにより, 平坦バンド模 型において分散バンドとの間にギャップを持ち、かつ 平坦バンドのエネルギーがチューンできる模型が構 成された [図 1.1.10 上][3, 25]. この模型は正方型格 子と六方格子において構成でき、既知の模型を含み, 高次元への拡張も可能である。既知の平坦バンド模 型と同様にワニエ軌道が直交化できないという特殊 な条件を満たしているために、強磁性の発現が期待 される.次に、この平坦バンド模型に変形を導入す ることで、平坦バンドと分散バンドが交差する模型 を構成することができた [図下]。平坦バンドは僅か に歪むが、上記のバンド間ペア散乱の増強により超 伝導に資することが期待される. この論文は Phys. Rev. B において Editor's suggestion に選ばれた。



図 1.1.3: (a) エネルギー準位を制御できる平坦バン ド模型の例。ゼロエネルギー(矢印)とは一般に異 なるエネルギーを持たせられる。(b) 平坦バンドが 分散バンドを貫通する模型の例。[3]。

1.1.2 グラフェン関連物質

グラフェンとカイラル対称性

炭素が蜂の巣格子をなすグラフェンは massless Dirac 粒子のバンド分散 (Dirac cone)をもち、カイラル対 称性のために電子状態は特徴的になる。河原林(東 邦大)、初貝(筑波大)、青木は、有機導体に現れるよ うな傾いた Dirac cone に対してもカイラル対称性が 格子模型においても一般化でき、これを用いてハミ ルトニアンの代数的連続変形を一般化されたカイラ ル対称性を保持しながら行うことにより、垂直なディ ラック電子系から傾いたディラック電子系が生成で きることを具体的に示してきた。その際、ゼロモー ド(ゼロエネルギー固有状態)も保存される。ただし 従前の解析では、蜂の巣格子(グラフェン)のように 単位胞に2つの格子点を含む格子模型に限られてい た。Lieb 格子やカゴメ格子など平坦バンドが Dirac cone と共存する模型ではこれがどうなるかに興味が もたれ、これを、単位胞に3格子点を含む格子模型 に代数的変形を拡張することにより調べた[21]。そ の結果、これらの模型において、平坦バンドを保持 したまま、代数的変形によって、ディラック・コーン を傾けられることがわかった(図1.1.11)。また、そ の際、平坦バンド系において議論されていた SU(2) のスピン1表現が有用であることもわかった。



図 1.1.4: (a) 平坦バンド模型の例(ここでは Lieb 格 子)。(b) 模型を変形した場合のバンド構造。傾いた Dirac cone の Dirac 点を平坦バンドが貫通。[21]

2層グラフェンにおける電子複屈折および谷偏極

グラフェン中の電子の伝播は、光学における負の 屈折にアナロガスな現象を示すことが示唆されてい る。Maksym、青木は、2層グラフェンにおける電子 伝播においては、正の屈折と負の屈折を併せもつ複 屈折が起き得ることを4成分 Dirac 方程式から指摘 し、現実的なパラメータ領域で興味深い現象がおき ることをシミュレーションで示した [22]。

また、このように複屈折を示す2層グラフェンを 用いて pn 接合をつくると、グラフェンの K 谷と K' 谷から成る電子状態について、片方の谷成分に偏っ た(谷偏極, valley polarisation)電流を発生させら れることも理論的に提案した [26]。

3次元 Dirac 電子

グラフェンを3次元周期的曲面("graphitic zeolites ")としたときに電子構造はどうなるかというのは興 味深い問題である。実験的に、東北大の田邊等は超臨 界乾燥法を用いてナノ多孔質グラフェン(図1.1.12) を合成した。この結果、従来より高い電気伝導度を もちながら、ambipolar 制御(電子注入および正孔 注入)が容易であること、この3次元構造において もグラフェンのディラック電子的な性質が保持され ていることが実証された。この実験との共同研究と して、越野と青木はこの系のホール抵抗の振舞いな どの理論解析をおこなったが、本年度は伊藤(筑波 大)等と総説を執筆した [10]。



図 1.1.5: 様々な炭素構造のファミリー。[10]

1.1.3 非平衡および非線形現象

非平衡や非線形現象は、強相関電子系やトポロジカ ル系において特に興味深い。本年度は以下を行った。

超伝導体における Higgs モード共鳴

一 従来型超伝導体

超伝導体は、秩序パラメーターの振幅 (超流動密 度)の集団励起振動モード(Higgs モード)をもつ。 Higgs モードは電荷、分極などをもたず、線形応答 の範囲では電磁場と結合しないため実験観測が困難 であったが、2013年には島野グループにより高強 度 THz レーザーを用いて実験観測され、2014 年に は Higgs モードとの共鳴により3次の非線形高調波 (THG)が発生することが観測され、青木グループに より理論解析された。その後、応答には準粒子励起 (電荷密度揺らぎ)も寄与し、BCS 近似の範囲内では これが大きいことが指摘された。しかし、平均場的な BCS 理論を超えた DMFT 等で調べると、フォノン 媒介相互作用の遅延の効果等のために、Higgs モード の寄与は準粒子励起の寄与と同程度になり得ること が示され、BCS では無視されていた光と Higgs モー ドの間の非線形共鳴的結合に起因することも分かる。

より直接的に Higgs モードの寄与と準粒子励起(密 度揺らぎ)の寄与を分離するために、松永等の島野 の実験グループと、辻等の青木の理論グループは共 同で、THG 共鳴への Higgs モードの寄与と密度揺 らぎの寄与の各々が、レーザーの偏光方向と結晶軸 のなす角度にどのように依存するかを明らかにした [13, 20]。島野グループの実験で使われた(従来型) 超伝導体 NbN に対する具体的なバンド構造を用い て、角度依存性を DMFT 等で理論的に求めたとこ ろ、Higgs の寄与は角度に依存しないのに対し、密 度揺らぎの寄与は大きな依存性を示す。実験で偏光 方向を回転させたところ、THG の大きさは殆ど角度 依存性をもたず、Higgs の寄与が支配的であること が結論される。

高温超伝導体における Higgs モード共鳴

一方、Higgs モードが、d 波ペアリングをもつ高 温超伝導体においてどうなるかに興味がもたれる。 島野の実験グループは青木の理論グループと協力し て、銅酸化物高温超伝導体 Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+x} に対 して THz ポンプ・近赤外プローブ法を用いて調べた [14]。異方的 (d 波) 超伝導体に対しては、結晶の正 方対称性の既約表現に分解して解析する必要がある が、単結晶試料に対してポンプ光、プローブ光の偏 光を回転させて調べることにより、この分解を実行 し、その結果、 A_{1g} 既約表現成分が大きく、これは理 論的に Higgs モードの寄与が支配的であることを示 す(図 1.1.13)。この研究は Gallais 教授 (パリ・ディ ドロ大学) との共同研究であり、Phys. Rev. Lett. の Editor's suggestion に選ばれた。

2 バンド超伝導体における集団励起

室谷、辻、青木は、2バンド超伝導体における Higgs モードおよび Leggett モード(2個の超流動秩序が 逆位相で振動する位相モード)、ならびにそれらと 光との共鳴を理論的に調べ、(i) 2個存在する Higgs モードは異なる共鳴幅をもつ、(ii) Leggett モードは 非線形効果により電場により励起され得て、特徴的 な温度依存をもつ、などを示し、MgB₂ での観測可 能性について議論した [15]。

フロッケ・トポロジカル相転移

系を AC 外場で駆動すると生じるフロッケ (Floquet) トポロジカル絶縁体は最近ではトポロジカル 絶縁体表面をはじめとしてフォトニック結晶や蜂の 巣光学格子上の冷却原子系において観測されている [?]。多体相互作用があると、モット絶縁体とトポロ ジカル状態間の転移も起きる。

北村、岡 (MPI Dresden)、青木は、強相関の Hubbard 模型(モット絶縁体)に円偏光を照射すると、 そのスピン状態がスカラー・カイラリティを獲得する という新たな現象を見いだした [18]。これには Floquet 理論を用いるが、相互作用 U とレーザーの振動 数ωが同程度の場合に興味があるので、強相関 1/U



図 1.1.6: (a) 銅酸化物高温超伝導体にテラヘルツ・ レーザー・パルスを照射したときに、d 波超伝導秩 序変数が振動する模式図。(b) レーザー・パルスに よって誘起された、反射率変化(3次の非線形光学 応答 $\chi^{(3)}$ に対応)の時間変化に対する実験結果を、 様々な温度に対してプロット(ここでは既約表現の 中で A_{1g} 成分を示す)。水平の破線は超伝導の Tc。 (c) 3次の非線形光学応答 $\chi^{(3)}$ の温度変化に対する 理論結果を、電荷揺らぎからの寄与(CDF)と Higgs モードからの寄与(Higgs)に対して、既約表現に分 解して示す。[14]

展開した後に高振動数 (1/ω) 展開するという方法を 用いて、有効ハミルトニアンにスカラー・スピン・カ イラリティ項が発生することを示した(図 1.1.14)。 これにより、カイラル・スピン液体相の実現可能性に つながるかもしれない。また、発生するカイラル結 合が光強度の 2 次なので、逆にモット絶縁体におけ る circular dichroism として、カイラリティのプロー ブに使えることも示される。

1.1.4 その他

青木は、2017 年 9 月から 12 月まで、ETH Zürich (スイス連邦工科大学)に客員教授として赴任し、大 学院講義 "Quantum Phases of Matter"を行うとと もに、冷却原子系の Esslinger 教授のグループと共同 研究を行った。

青木は国際会議等の招待講演で、超伝導やトポロジ カル系の性質と設計および非平衡 [13, 27] について、 また、フロッケ・トポロジカル状態 [14, 15, 17, 28, 29] について解説した。特に、[28] は伝統あるチューリッ ヒ物理コロキウムにおける招待講演である。国内で も強相関系に対するアルゴリズム [18]、物性物理学 と場の理論 [19] についての招待講演をおこなった。 青木は、グラフェンの物性理論を量子化学的観点 [10] やトポロジカルな観点 [11] から解説した。また、村 上(Fribourg 大)、辻、青木は、非平衡動的平均場



図 1.1.7: 電子間のクーロン反発が強い相関電子系に 円偏光レーザーを当てると、スピンにカイラルな構 造が誘起される概念図。[18]

の最近の進展と光誘起ダイナミクスについての解説 を出版した [12]。

<報文>

(原著論文)

- Motoharu Kitatani, Naoto Tsuji and Hideo Aoki: Interplay of Pomeranchuk instability and superconductivity in the two-dimensional repulsive Hubbard model, *Phys. Rev. B* 95, 075109 (2017).
- [2] Motoharu Kitatani, Thomas Schäfer, Hideo Aoki and Karsten Held: Why T_c is so low in high- T_c cuprates: importance of the dynamical vertex structure, submitted (arXiv:1801.05991).
- [3] Tatsuhiro Misumi and Hideo Aoki; A new class of flat-band models on tetragonal and hexagonal lattices: gapped vs crossing flat bands, *Phys. Rev.* B 96, 155137 (2017) (Editor's suggestion).
- [4] Daisuke Ogura, Hideo Aoki and Kazuhiko Kuroki: Possible high-T_c superconductivity due to incipient narrow bands originating from hidden ladders in Ruddlesden-Popper compounds, *Phys. Rev. B* 96, 184513 (2017).
- [5] Yoshikazu Ito, Yoichi Tanabe, Katsuaki Sugawara, Mikito Koshino, Takashi Takahashi, Katsumi Tanigaki, Hideo Aoki, and Mingwei Chen: Three-dimensional porous graphene networks expand graphene-based electronic device applications, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, DOI: 10.1039/c7cp07667c.
- [6] Ryusuke Matsunaga, Naoto Tsuji, Kazumasa Makise, Hirotaka Terai, Hideo Aoki, and Ryo Shimano: Polarization-resolved terahertz thirdharmonic generation in a superconductor NbN:

dominance of Higgs mode beyond the BCS approximation, *Phys. Rev. B* **96**, 020505(R) (2017).

- [7] Kota Katsumi, Naoto Tsuji, Yuki I. Hamada, Ryusuke Matsunaga, John Schneeloch, Ruidan D. Zhong, Genda D. Gu, Hideo Aoki, Yann Gallais, Ryo Shimano: Higgs mode in the d-wave superconductor Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+x} driven by an intense terahertz pulse, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 117001 (2018) (Editor's suggestion).
- [8] Yuta Murotani, Naoto Tsuji and Hideo Aoki: Theory of light-induced resonances with collective Higgs and Leggett modes in multiband superconductors, *Phys. Rev. B* 95, 104503 (2017).
- [9] Sota Kitamura, Takashi Oka and Hideo Aoki: Probing and controlling spin chirality in Mott insulators by circularly polarized laser, *Phys. Rev. B* 96, 014406 (2017).

(編著書)

[10] 青木秀夫:グラフェンの物性理論ー量子化学的観点から(戸部義人,斉木幸一朗,川俣純,西原寛(編): CSJカレントレビュー「二次元物質の科学ーグラフェンなどの分子シートが生み出す新世界」)、Part II 第 1章(化学同人、2017)。

(国内雑誌)

- [11] 青木秀夫:グラフェンにおけるトポロジカルな性質、 パリティ「特集:トポロジーによる新しい物性物理」 2017 年 7 月号、p.19。
- [12] 村上雄太、辻 直人、青木秀夫:非平衡動的平均場の最近の進展と光誘起ダイナミクス、 固体物理 53, 209 (2018)。
- <学術発表>

(国際会議)

招待講演

- [13] Hideo Aoki: Designing topological and superconducting properties for graphene-related materials, EU Flagship-Japan Workshop, Barcelona, May 2017.
- [14] Hideo Aoki: Quantum phases induced by circularly-polarised light — Floquet-topological states, Int. Workshop "New trends in theory for experiments at advanced light sources", Hamburg CFEL, Nov 2017.
- [15] Hideo Aoki: Quantum phases induced by circularly-polarised light — Floquet-topological states, Int. workshop "Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts" (BEC2018), Tsukuba, Jan 2018.

一般発表

[16] Daisuke Ogura, Hideo Aoki, and Kazuhiko Kuroki: Possible high-Tc superconductivity in Ruddlesden-Popper compounds — Incipient narrow bands originating from "hidden ladders" (APS March meeting 2018, Los Angeles).

(国内会議)

招待講演

- [17] Hideo Aoki: Design of topological and superconducting properties in and out of equilibrium, MANA special seminar, NIMS, Tsukuba, Apr 2017.
- [18] 青木秀夫:高温超伝導のための新たなアルゴリズム-SU(2) スレーブボゾン法およびダイナミカル・バー テックス近似、ImPACT 全体会議、東京、2018 年 3 月。
- [19] 青木秀夫:物性物理学と場の理論- 南部理論を中心 に、慶應大学特別講義、2017年6月。

一般発表

- [20] 松永隆佑, 辻 直人, 牧瀬圭正, 寺井弘高, 青木秀夫, 島野 亮: 超伝導体 NbN の偏光分解テラヘルツ第三高調波発生: ヒッグスモードの支配的寄与と BCS 近似の破綻(日本物理学会、岩手、2017年9月)。
- [21] 河原林透,青木秀夫,初貝安弘:フラットバンド格子 模型におけるディラック電子系の代数的変形(日本物 理学会、岩手、2017年9月)。
- [22] P. A. Maksym and H. Aoki: Applications of negative refraction in bilayer graphene (日本物理学会、 岩手、2017年9月)。
- [23] 北谷基治, Thomas Schäfer, 青木秀夫, Karsten Held: 動的バーテックス近似 (D Γ A) による d 波超伝導 Tc ドーム (日本物理学会、野田、2018 年 3 月)。
- [24] 小倉大典, 青木秀夫, 黒木和彦: Ruddlesden-Popper 型化合物における隠れた梯子状電子状態による高温超 伝導の可能性 (日本物理学会、野田、2018 年 3 月)。
- [25] 三角樹弘, 青木秀夫:分散バンドを貫通する平坦バン ド模型(日本物理学会、野田、2018年3月)。
- [26] P. Maksym, H. Aoki: Valley asymmetric transmission through a bilayer graphene pn junction (日本 物理学会、野田、2018 年 3 月)。
- (セミナー(国外))
- [27] Hideo Aoki: Design of topological and superconducting properties in and out of equilibrium, Technical University Vienna, May 2017.
- [28] Hideo Aoki: Condensed-matter systems shaken, not stirred — non-equilibrium avenue to novel quantum phases, Zurich Physics Colloquium, Sept 2017.
- [29] Hideo Aoki: Quantum phases induced by polarised light — Floquet-topological states and Higgs modes, Hamburg CFEL seminar, Oct 2017.