

1 物性理論

1.1 青木

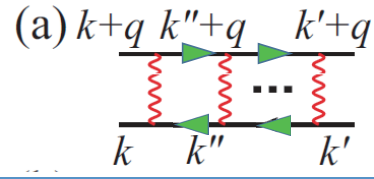
青木は一貫して、超伝導に代表される多体効果、ならびにトポロジカル系の理論を主眼に研究を行ってきた。これらの現象では、強相関電子系やトポロジカル系に特有な新奇現象が起きる。面白い物性を面白い物質構造で発現させる物質設計も目指している。さらに、強相関系やトポロジカル系において、非平衡で生じる顕著な物性を探ることを最近の大きな柱としている。東大からの定年退職後の2016年度からは東大名誉教授として、東大物理学教室ならびに産総研（筑波）において研究を続けている。

1.1.1 超伝導

ダイナミカル・バーテックス近似 (DΓA)

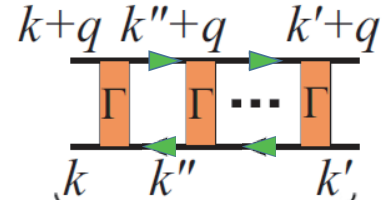
銅酸化物超伝導体に対する代表的な2次元斥力 Hubbard 模型での d 波超伝導は、これまで様々な手法で調べられてきたが、特に超伝導転移温度 (~ 100 K) が電子のエネルギー・スケール (~ 1 eV ~ 10000 K) から二桁も落ちる理由は良く理解されていない。北谷、Held (ウィーン工科大学) 等と青木は、動的平均場理論 (DMFT) のダイアグラマティックな拡張の一つである動的バーテックス近似 (DΓA) を超伝導相に拡張して、2次元斥力 Hubbard 模型の超伝導不安定性を計算し (図 1.1.1)、バーテックス補正がどのように転移温度に影響するかを調べた [1]。その結果、 T_c はドーピングに対しドーム状になり、そこで T_c を支配する主要因を追跡することにより、多体相互作用において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 (二桁落ち) をもたらすことを明らかにした。これにより T_c 増強へのヒントが得られただけでなく、概念的にも、高温超伝導の理論が従来はスピン揺らぎ媒介などボソン交換機構にほぼ限定されていたのに対し、DΓA を用いればボソン交換を超えた機構が探索できる可能性がある。バーテックス補正は、下記の平坦バンドをもつ系でも重要な可能性がある。

Weak U



Strong U (DΓA)

p-h channel



p-p channel

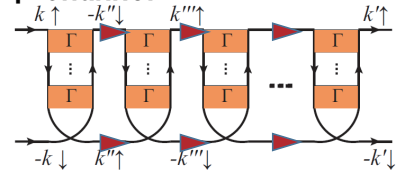


図 1.1.1: スピン揺らぎ媒介ペアリング相互作用に対して、(上段) 弱い斥力相互作用 (赤波線) に対して通常考察されるラダー・ダイアグラム。黒実線はグリーン関数。(中段) 強い斥力相互作用に対するダイナミカル・バーテックス近似 (DΓA) では、バーテックス Γ のラダー (particle-hole チャンネル; 緑矢印) が考慮されるだけでなく、(下段) DΓA では particle-particle チャンネル (赤矢印) も取り入れられる。[1]

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。一方、斥力相互作用から生じる d 波ペアリング超伝導のような異方的超伝導を扱うには、運動量依存のペアリング相互作用を扱うことが必須であり、北谷、青木等は、これら二つの方法を合体させた “FLEX+DMFT” という方法論を提案していた。しかしそこでも、超伝導と磁性が同等な枠組みで扱われていない、等の不満点があった。Sayyad (物性研、現在ネール研) 等と青木は、これに関して以下の方法論を提案した [2]。すなわち、DMFT における自己無撞着ループを数値的に解く際に、1 サイトの多体問題を解く方法 (impurity solver)

が鍵となる。そこにおいて、slave particle (補助場) を用いた impurity solver を用いることを提案した。特に、Hubbard 模型には、スピン $SU(2)_s$ 対称性だけでなく、もう一つの $SU(2)$ 対称性 (η - $SU(2)_\eta$ と呼ばれる) が内在しており、その subgroup 構造は

$$SU(4) \supset \begin{cases} SO(4) \otimes U(1) & \supset SU(2)_s \otimes U(1), \\ SO(5) & \supset SU(2)_s \otimes U(1), \\ SU(2)_s \otimes SU(2)_\eta & \supset SU(2)_s \otimes U(1) \end{cases}$$

となる。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枠組みが構築された。

新銅酸化物 $Ba_2CuO_{3+\delta}$ における高温超伝導

Li (Chinese Academy of Sciences)、内田 (東大) 等のグループが、新しい銅酸化物 $Ba_2CuO_{3+\delta}$ において $T_C = 70$ K 級の超伝導を発見し、2019 年に報告した。従来は、銅酸化物高温超伝導には CuO_2 面が必須との常識があったが、新たな化合物では面内酸素の数割が欠損しており、銅の原子価も $2+$ から大幅にずれているので、超伝導機構を初めとして新たな理論解析がチャレンジングな問題となる。山崎、黒木 (大阪大)、永崎 (産総研)、内田、青木等は、これを理論的に調べた [3, 18]。実験では結晶構造が確定していないので、理論では先ず可能な構造の探索から始めた。そこで有力な候補の一つとして、酸素によって結ばれている銅原子が、平坦バンド模型として有名な Lieb 格子をなす構造を見出した。この構造に対し、多軌道 Hubbard 模型を第一原理電子状態計算から構築し、FLEX を用いて超伝導を解析した。その結果、(i) s 波と d 波の超伝導が拮抗し、(ii) そこでは軌道内ペアリングと軌道間ペアリングが共存という奇妙な状態となっていることを見出した。これに基づき、銅 d 軌道レベルを調整することにより T_C をさらに上げ、 $s_{\pm}$ 波超伝導を実現する可能性も指摘した。より広いパースペクティブとして、Lieb 模型における超伝導と、通常の La 型銅酸化物 (K_2NiF_4 構造) 上での 2 軌道模型や、2 層系 Hubbard 模型における超伝導の間に密接な関連があることも見出した。

ニッケル化合物における超伝導

最近、ニッケル化合物 (Nd,Sr) NiO_2 において超伝導が生じることが Li (Stanford) 等により実験的に報告された。銅以外の遷移金属化合物における超伝導として注目されるが、電子構造は銅酸化物とはかなり異なっている可能性があり、超伝導機構に興味をもたれる。榊原 (鳥取大) 等と青木は、先ず、第一原理電子状態計算に基づいて有効模型 (7 バンド模型 = Ni 3d 電子および希土類元素の 5d 電子) を構築し、多体相互作用の大きさを見積り、FLEX によ

り超伝導を調べた [4]。その結果、on-site 斥力 U はニッケル酸化物では銅酸化物より大きく、超伝導の T_c を下げることを見出した。

平坦バンド系の設計と平坦バンド超伝導

強磁性の発生を厳密に示せる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、黒木等により示唆されている。さらに最近では

小林等により示されているように、平坦バンド超伝導相がトポロジカル相に隣接している平坦バンド模型があり、そこでは異常に大きな量子もつれが存在するので、それが超伝導を増強している可能性がある。これをうけて、Sayyad, Vaezi (スタンフォード大) 等と青木は、以下を明らかにした [5, 6]。通常考えられている平坦バンド模型は一般に多バンド系 (平坦バンドと分散バンドが共存) である。しかし、より単純な系である 1 バンド系において、分散が平坦な部分をもつ部分的平坦バンドの場合は何が起きるであろうか。このような模型において、斥力 Hubbard 相互作用を考え、FLEX+DMFT 法を用いて調べたところ、(i) バンド・フィリングを変化させるにつれ、強磁性のスピン揺らぎから反強磁性のスピン揺らぎへのクロスオーバーが生じ、これに伴い、スピン・トリプレット超伝導からシングレット超伝導への転移が起きる (図 1.1.2)。これが起きる臨界フィリングは、平坦部分のサイズに支配される。(ii) 平坦バンドの効果は、超伝導ギャップ関数の対称性において、多数の nodes (実空間においては、拡がったペア) に現れる。(iii) さらに、平坦バンド部分で電子相関が強調されるため、非フェルミ液体の振る舞いが運動量分布、自己エネルギーの振動数依存性、スペクトル関数において発生する。これらは、平坦バンド系では電子相関効果が特徴的に現れる兆候といえる。特に、異なるペアリング対称性の間の相転移近傍ではトポロジカル超伝導が発現し易いことが知られているので、平坦バンド系はトポロジカル系および超伝導の両者を融合したユニークな物質設計の舞台になることが期待される。

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一般化でき、これを用いてハミルトニアンを代数的連続変形を、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 d ディラック電子系から傾いたディラック電子系が

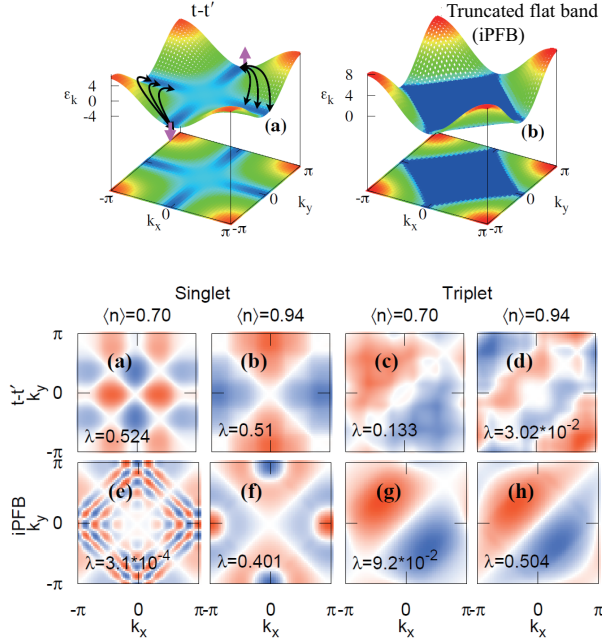


図 1.1.2: (上段) 平坦な部分をもつ 1 バンド系 (次隣接ホッピング $t' \simeq -0.5t$ をもつ t - t' 格子、および底を平坦にした iPFB 模型)。矢印はペア・ホッピングを表す。(下段) t - t' 格子と iPFB 模型に対して数値的に得られたギャップ関数 (赤: 正、青: 負) を、異なるバンド・フィリング n に対して示す [5]。左二列はシングレット・ペアリング、右二列はトリプレット・ペアリング、 λ は Eliashberg 方程式の固有値 (超伝導の指標)。

生成できることを具体的に示してきた (図 1.1.3)。また、Lieb 格子やカゴメ格子など平坦バンドが Dirac cone と共存する模型においても、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。さらに、2次元系において、質量ゼロのディラックフェルミオン・ダブリングが、通常のカイラル対称性が破れたときもトポロジカルに保護されることが、一般に 2 バンド格子系で起き、Nielsen・二宮定理の物性版ともいえることを示した [7]。

2 層グラフェンおよび遷移金属ダイカルコゲナイドにおける谷偏極およびスピン偏極

グラフェンは、Brillouin zone の K および K' という二領域 (谷と呼ばれる) において Dirac cone をもつが、片方の谷の電子が他方の谷の電子より多いという状況 (谷偏極) を作り出せるかどうか長年の興味が払われている。Maksym と青木は、2 層グ

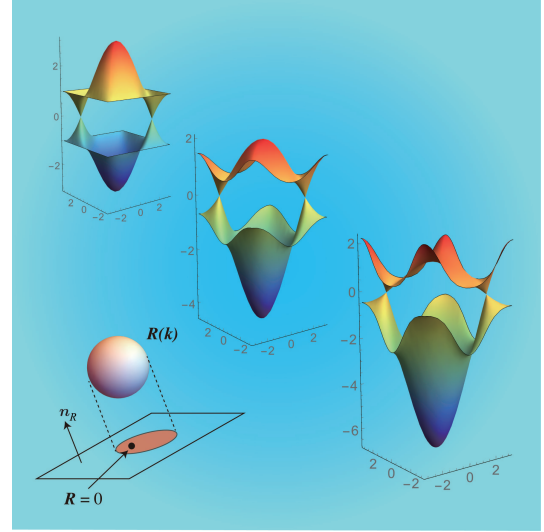


図 1.1.3: 蜂の巣格子に対するハミルトニアンに代数変形 (その程度は q) を施した場合のバンド分散 [7]。左下の挿図はディラック・ハミルトニアンを記述するパラメータ $\mathbf{R}$ の空間において、波数 $\mathbf{k}$ が Brillouin zone を走査したときに得られる面が、Dirac cone が現れる場合にはつぶれ、Dirac cone は必ずペアで発生することを模式的に示す。

ラフェンは様々な特異な性質をもつが、これを用いて谷偏極を生み出すことが可能なことを理論的に提案した [8, 19, 21]。鍵となるのは、グラフェンでは Dirac cone が三回対称性に歪んでおり、そのために波数 ($\mathbf{k}$) と電流 ($\mathbf{j}$) の方向は一致しない。このずれ方が谷によって異なるので、2 層グラフェンにポテンシャル障壁を加えると、片方の谷が完全反射され、谷偏極が生じる。同様なことは遷移金属ダイカルコゲナイドでも期待され、この物質群の場合はスピン・軌道相互作用が大きいために、谷偏極にスピン偏極が伴うことも予想される。

また Maksym と青木は、グラフェン (単層および二層) の磁場中での電子のダイナミックスの時間発展を数値計算するために、従来の split operator 法を改良して、計算速度が桁違いに早くなることを示した [9]。

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。

異方的バンドにおける運動量依存の非平衡ダイナミクス

強相関系を、系を支配するパラメータ（例えば斥力相互作用の大きさ）を急に変化させること (ramp) により非平衡にした場合、その後の時間発展がどうなるかに興味をもたれる。特に、高温超伝導銅酸化物のように、バンドが異方的な場合に、平衡への緩和が運動量空間でどのように起きるだろうか。Sayyad 等と青木は、これを FLEX を時間発展が扱えるように整備した上で数値的に調べ、緩和は (i) 確かに運動量に強く依存して起き、(ii) hole doping と electron doping の場合でも異なり、(iii) ramp をどの程度急に行うかにも依る。これらが、Keldysh グリーン関数の枠組みから求めた自己エネルギーが運動量に強く依存することから来ることを明らかにした (図 1.1.4) [10]。

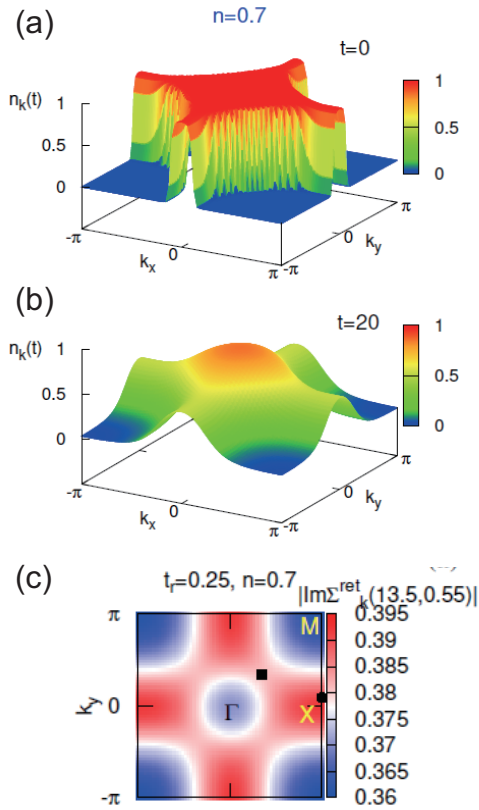


図 1.1.4: 斥力相互作用 U を、ゼロから $U = 3$ に変化 (ramp) させたときの、電子の運動量依存分布関数 $n_k(t)$ を、時間 $t = 0$ (a) と $t = 20$ (b) に対してプロット。(c) 運動量依存の自己エネルギーを ramp 後に対してプロット。[9]

空間周期的な円偏光によるトポロジカル状態の “imprinting”

岡・青木 [Takashi Oka and Hideo Aoki, Phys. Rev. B **79**, 081406(R) (2009)] が理論的に予言した、グラフェンに円偏光を照射するとトポロジカル絶縁体 (Floquet topological insulator; FTI) になる、という現象が、ハンブルクのマックス・プランク研究所の James McIver 等により実証され、Nature Physics に 2020 に出版され、表紙も飾った。このようなトポロジカル状態をさらに engineer する試みとして、Hafezi (Maryland 大) 等は、振幅が空間的に周期変調する円偏光を 2 次元系に照射すると、FTI への相転移が制御されることを理論的に提案した [11, 15]。空間変調の格子パターンも制御できるので、例えば正方格子から三角格子に変形すると、FTI 相の領域が鋭く増大する、また三角格子から籠目格子にも変形するとトポロジカル・チャーン数も制御される等が示された。

1.1.4 その他

青木は、国際会議等の招待講演において、平坦バンド超伝導 [12]、超伝導とトポロジカル状態のデザインについては **Gordon Research Conf.** [16] を初めとして [13, 14] において、またフロック・エンジニアリングおよび超伝導ヒッグスモード [17] について報告した。

<報文>

(原著論文)

- [1] 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, Phys. Rev. B **99**, 041115(R) (2019).
- [2] Sharareh Sayyad, Naoto Tsuji, Massimo Capone and Hideo Aoki: SO(4) FLEX+DMFT formalism with SU(2)⊗SU(2)-symmetric impurity solver for superconductivity in the repulsive Hubbard model, arXiv:1903.05800.
- [3] K. Yamazaki, M. Ochi, D. Ogura, K. Kuroki, H. Eisaki, S. Uchida and H. Aoki: Superconducting mechanism for a new-type cuprate $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ based on a multiorbital Lieb lattice model, arXiv:2003.04015.
- [4] Hirofumi Sakakibara, Hidetomo Usui, Katsuhiko Suzuki, Takao Kotani, Hideo Aoki, and Kazuhiko Kuroki: Model construction and a possibility of cuprate-like pairing in a new d^9 nickelate superconductor (Nd,Sr)NiO₂, arXiv:1909.00060.
- [5] Sharareh Sayyad, Edwin W. Huang, Motoharu Kitatani, Mohammad-Sadegh Vaezi, Zohar Nussinov, Abolhassan Vaezi and Hideo Aoki: Pairing and non-Fermi liquid behavior in partially flat-band systems, Phys. Rev. B **101**, 014501 (2020).

- [6] Hideo Aoki: Theoretical possibilities for flat-band superconductivity, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, DOI: 10.1007/s10948-020-05474-6 (arXiv:1912.04469).
- [7] Tohru Kawarabayashi, Hideo Aoki and Yasuhiro Hatsugai: Topologically protected doubling of tilted Dirac fermions in two dimensions, *Proc. 34th Int. Conf. on Physics of Semiconductors*, Montpellier, France, July 2018 [Phys. Status Solidi B, 2019, 1800524].
- [8] P. A. Maksym and H. Aoki: Complete spin and valley polarization by total external reflection from potential barriers in bilayer graphene and monolayer transition metal dichalcogenide, arXiv:1911.03077.
- [9] P.A. Maksym and H. Aoki: Fast split operator method for computation of time-dependent quantum states of bilayer graphene in a magnetic field, *Physica E* **112**, 66 (2019).
- [10] Sharareh Sayyad, Naoto Tsuji, Abolhassan Vaezi, Massimo Capone, Martin Eckstein and Hideo Aoki: Momentum-dependent relaxation dynamics of the doped repulsive Hubbard model, *Phys. Rev. B* **99**, 165132 (2019).
- [11] Hwanmun Kim, Hossein Dehghani, Hideo Aoki, Ivar Martin, and Mohammad Hafezi: Optical imprinting of superlattices in 2D materials, arXiv:1912.13059.
- <学術発表>
- (国際会議)
- 招待講演
- [12] Hideo Aoki: Theoretical possibilities for flat-band superconductivity, Int. Conf. “Superstripes2019”, Ischia, Italy, June 2019.
- [13] Hideo Aoki: Theoretical possibilities for superconducting and topological properties in flat-band systems, Int. Workshop “Topology”, NIMS, Tsukuba, June 2019.
- [14] Hideo Aoki: Design of superconducting and topological properties in flat-band systems, Int. Workshop “BEC2019”, Hiroshima, July 2019.
- [15] Hideo Aoki: Imprinting topological states with superlattice-patterned laser fields in 2D materials, Int. Workshop “Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts” [BE/BC2020F], Tokyo, Feb 2020.
- [16] Hideo Aoki: Floquet engineering of topological and superconducting properties in one-body and many-body systems, Gordon Research Conf. “Ultrafast Phenomena in Cooperative Systems”, Lucca, Italy, Feb 2020.
- [17] Hideo Aoki: Floquet engineering and Higgs dynamics in superconductors, Flatiron Int. Conf. “Nonequilibrium superconductivity”, New York, Jan 2020.
- 一般発表
- [18] K. Yamazaki, M. Ochi, K. Kuroki, H. Eisaki, S. Uchida and H. Aoki: Model construction and fluctuation exchange study of a new cuprate superconductor $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$, 32nd Int. Symposium on Superconductivity (“ISS2019”), Kyoto, Dec 2019.
- (国内会議)
- 一般発表
- [19] P. Maksym and H. Aoki: Spin polarised transmission of holes through a potential barrier in transition metal dichalcogenides (日本物理学会、岐阜、2019年9月)。
- [20] 山崎公裕, 越智正之, 小倉大典, 黒木和彦, 永崎洋, 内田慎一, 青木秀夫: 新型銅酸化物 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ の多軌道 Lieb 格子模型に基づく超伝導機構の解析 (日本物理学会、名古屋、2020年3月)。
- [21] P. Maksym, H. Aoki: Self-consistent potential in electrostatic pn junctions formed from bilayer graphene (日本物理学会、名古屋、2020年3月)。