

東京都立大学 理学研究科 物理学専攻

# 強相関電子論研究室

---

教員	教授	堀田 貴嗣
	准教授	服部 一匡
	客員教授	久保 勝規

大学院生	博士後期	0名
	博士前期	3名
卒研究生		5名

<https://scet-phys.wixsite.com/home>

# 強相関電子論研究室

**強**相関電子論研究室は8号館5階にあります。

578: 堀田 居室

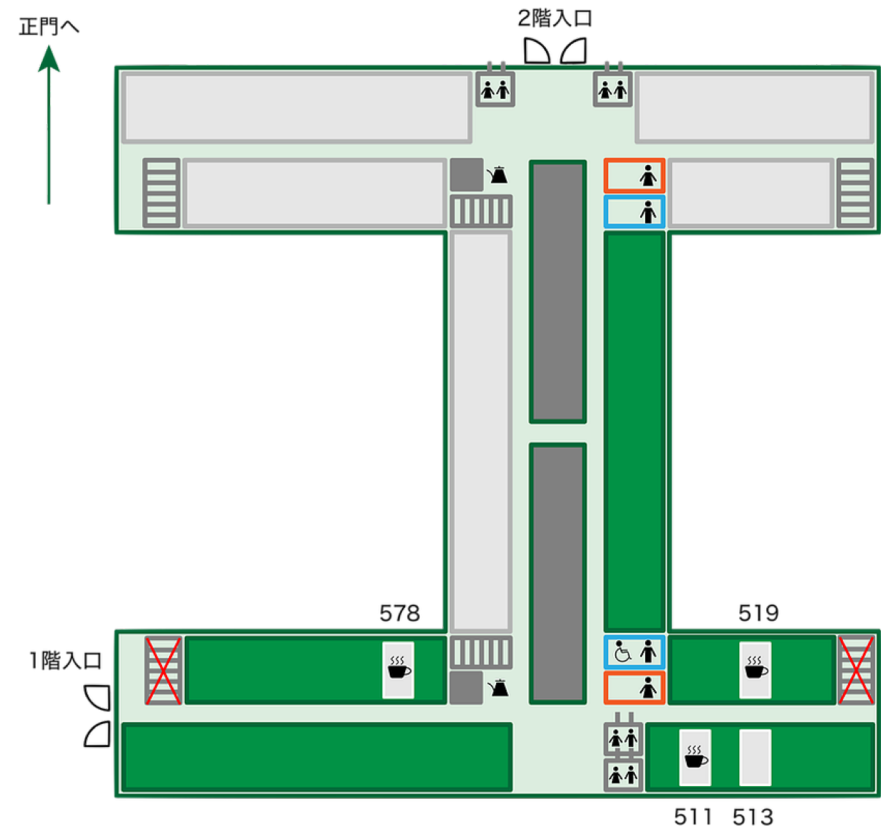
519: 服部 居室

511: 大学院生 部屋

513: 大学院生 + **卒研生** 部屋

残念ながら卒研生部屋には☕マシンはありませんが、すぐ近くに2カ所おいしいコーヒーが飲める部屋があります。

8 号館 5 階



# 強相関電子論研究室

## 輪読：

卒研究生は週一回の輪読(輪講)が研究室としての活動になります。輪読では、一つの教科書や専門書を決めて、毎週各自が(5~10ページくらいを)読んで計算を追ってきて、当番の人がレジメを配って黒板等を使いながら他の人に説明してあげる、というゼミです。他人にわかるように説明するトレーニングにもなります。

例年、選ぶ教科書や専門書を最初の回に教員からいくつかあげて選んでもらいます。自分からこれを読みたい、というのがあれば歓迎します。凝縮系の場の理論の教科書を読むことが多いですが、経路積分を勉強したい、とか、トポロジカル絶縁体を知りたい、とかでもOKです。



# 強相関電子論研究室

**卒研：** 卒業研究のテーマは後期が始まる前後にぼちぼち決めていきます。前期に終わりきらなかった輪読をつづける場合と輪読は修了して具体的なテーマに沿った卒業研究の資料集めや計算・勉強に専念する2通りの可能性があります。良い卒論ができるかは**各自の頑張りに強く依存**します。教員からはあれやれこれやれと言いません。

テーマに関しては、各個人が「超伝導がやりたい」とか「数値計算をしたい」とかの希望を尊重して、教員から「こんなのどう？」と提案することが多いです。4年生の段階で具体的に「これをやる！」という人はあまりいません。．．（これは至極当前だと思えます）。過去の卒研テーマはスライドの後半に記載されています。

卒業研究の内容は卒業論文として3月に提出して貰います。授業のレポートとは質的にも量的にも異なるので、それなりにがんばりましょう。

**卒研発表会：** 例年 2/10 頃 **発表10分+質疑応答5分**

美しいスライド～10枚程度を準備して他の研究室の卒研究生と教員（もしかすると後輩も）の前で口頭発表を行います。10分の為に最低2、3回の発表練習をします。

# 強相関電子論研究室

## 行事：

研究室の中や、他の研究室（他大学含む）と一緒にイベントなどもやっています。  
コロナ禍でなければですが．．．

花見(3月末～4月初)、新歓(4月)、BBQ(5月)、焼芋?(～10月)、打ち上げ(2月)、 etc.

## PC等：

卒研生にも自分の机とPC(Mac)が一台利用可能です。プログラミングやスライド作りに活用してください。プログラミング言語は好きに選んで貰って構いませんが、CやC++、Python、etc.を使用する人が多いです。先輩に教えて貰える言語を選ぶのが良いかと思います。

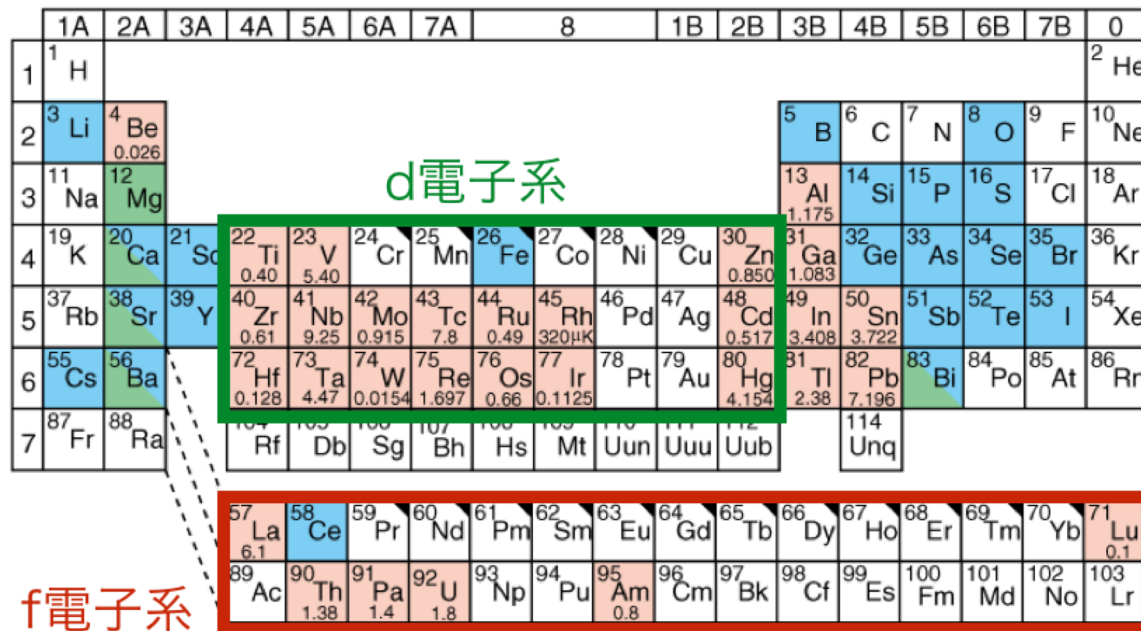
数値計算の為のワークステーションは研究室として～500Cores 程度の規模で保有しています。卒研で大規模な並列計算をした人はいませんが、並列計算とかクラスター計算機に興味がある人にも対応可能です。

## 向き不向き：

基本的に配属される人はみなさん無事に卒業できます（少なくともこれまではできています）。もちろん、計算するのが好きで、プログラム書くのが好きで、何か謎を解きたいと強く思っている人が向いていると思います。

# どんな分野を対象としているか

電子がクーロン斥力によって互いに相関しながら運動している系を多体電子系とよびます。実際の物質において、強い相関によって生じる現象、特に磁性や超伝導の性質を理論的に明らかにすることを目標としています。遷移金属化合物: 3d, 4d, 5d電子系や希土類・アクチノイド化合物: 4f, 5f電子系を研究対象とすることが多いです。



- superconducting element
- superconducting in film
- superconducting under pressure
- magnetic

# 物性理論あれこれ

**物**性理論という分野は素粒子の理論などと比較すると学部学生にとっては何をやっているかわかりにくいと思います。事実、我々研究者にとってもそうでした。例えば、相対論的電子の基礎方程式である**ディラック方程式**を習った時に神秘的な何かを感じる人もいるかと思いますが、固体中の電子は**ブロッホ関数**で、**逆格子**が、、、とか言われても若干眠いわけです（そうでない人ごめんなさい）。

**そ**れでも、物性理論は「面白い」ということを主張したいのですが、ここではディラック方程式とかに神秘性を感じる人に向けて情報発信しようと思います。まず、**ディラック電子**はいます！固体中に、さらに、**ワイル粒子**もいます！、さらにさらに、**マヨラナフェルミオン**も**スカーミオン**もいます！全部固体中に。あと、**自発的対称性の破れ**とか**ヒッグス機構**とか**非可換ゲージ理論**とか**共形場の理論**とかも全部固体中の物性を扱うことや統計力学に使われています（物性がオリジナルのものも多数あります）。**超伝導**なんかは**電荷保存則**を破った状態です。

**で**すので、逆格子に挫折したとしても、物性をかじってみるときつといい味になってるはずですよ。

注：ここで挙げた**キーワード**は全て説明しきれませんが、気になる人はWeb等で調べるか、訪問の際に質問してください。

# トピックス

**次** ページから、研究室で扱っているテーマを記載します。内容は、

- ✓ 超伝導
- ✓ くりこみ群
- ✓ 近藤効果
- ✓ 幾何学的フラストレーション
- ✓ 軌道自由度・多極子

**少** し詳細な数値計算や理論手法について、以下の3つを簡単に紹介します。

- ✓ 連続時間モンテカルロ法
- ✓ 数値くりこみ群
- ✓ ファインマンダイアグラム

注：もっと専門的なことを知りたい場合は、HPの論文リストなどを参考にしてください。



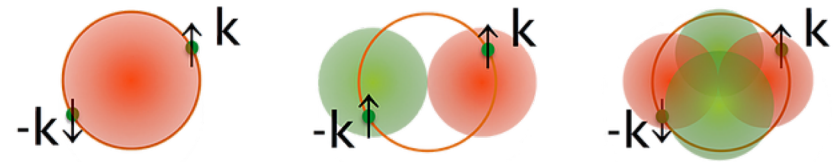
# 超伝導

**超**伝導 (superconductivity) は、20世紀初めに水銀の電気抵抗が低温で消失することが発見されて以来、長きにわたり物理学者を魅了しています。現在では工業的にも応用がなされており、医療機器のMRIやリニア中央新幹線に用いられたりしています。この現象に対する理論は1957年の**BCS理論**により完成し、今日ではBCS理論を基礎として、さらに新しいタイプの超伝導や、超伝導の持つトポロジカルな性質等が注目を集めています。

超伝導状態は、二つの逆向きの運動量 $k$ と $-k$ を持つ電子対：

**クーパー対**が緩い束縛状態を作り、**ボーズ凝縮**する

(フェルミオン2つでボゾンになる) ということによって理解されています。クーパー対の性質は、その相対角運動量 $L$ とスピン $S$ などによって様々あり、特にBCS理論発表時に想定された $L=S=0$ を従来型、その他を非従来型とよんでいます。後者が見つかり、業界の研究者は**フィーバー**するわけです。例えば、銅酸化物高温超伝導体は後者に分類されます。最近では、軌道自由度や非共型空間群などを考えると、今まで未解明だった超伝導の説明が可能であるということがわかってきました。発見から100年以上が経っていますが、新発見が続いている物性研究の巨大分野の一つです。



図：異なる種類のクーパー対の例。円は電子のフェルミ面、緑と赤の球体はクーパー対の相対角運動量を表す。左から $(L,S)=(0,0), (1,1), (2,0)$ のクーパー対。後者2つは「非従来型」に分類される

# くりこみ群

くりこみ群 (renormalization group) というと何だか難しそうですが、要約すると、観測するスケールを変えた時に系のハミルトニアンとかラグランジアン (～物理法則) がどのように変化するかを追跡する理論です (ちょっと言い過ぎかも)。この考えの根底には、自然法則はそれぞれのスケールで究極的には「**局所的**」であるべきという希望 (?) があります。例えば、水素原子内の電子の記述にクォークのラグランジアンは不要なことを思えば、この要請は受け入れられると思います。物事を「遠く = 低エネルギー」から眺めると、大域的な何かが見つかるかもしれない、ということです。

物性物理において、くりこみ群は低エネルギーでどのような相互作用が支配的になるか? とか、統計物理学における**相転移の臨界現象**の記述に力を発揮してきました。後者はぱっと見、前段落の説明と関係ないように思えますが、相転移近傍では、系の持つ特徴的長さのスケール (**相関長**) が発散するという現象があります。1970年代以降、これに関連してくりこみ群は大成功をおさめています。

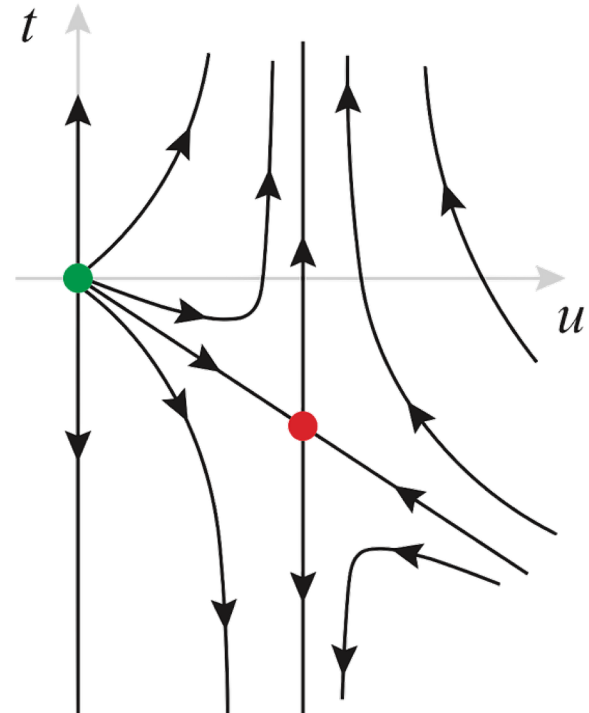
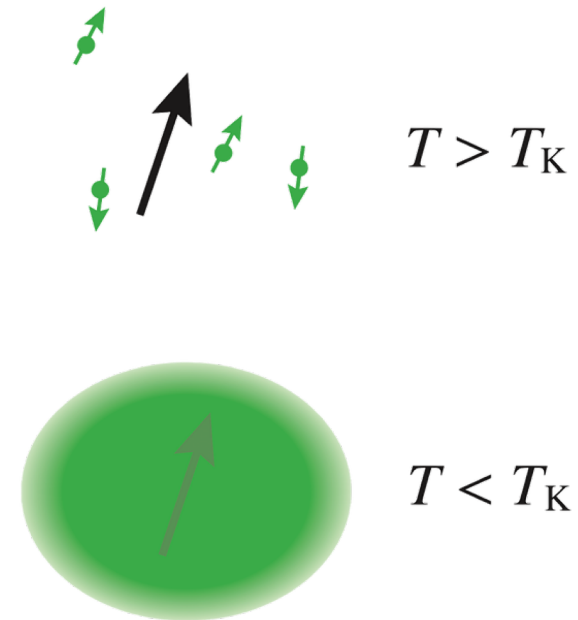


図 : ハミルトニアンの変数  $(u, t)$  の流れ。赤と緑の点はくりこみ群で変化しない点で「固定点」と呼ばれる。緑は流れが出ている固定点であり不安定固定点、赤は流れ込んでくる方向もあり、臨界現象と関係する臨界固定点という。

# 近藤効果

近藤効果 (Kondo effects) は磁性不純物を含む金属の電気抵抗が低温で増大する現象です。純良な金属の電気抵抗は温度 $T$ の降下とともに減少し、絶対零度でのある一定値に漸近していきます。磁性不純物がなぜ電気抵抗の増大に寄与するかは1960年代まで理解されていませんでしたが、Kondoによる理論でこの電気抵抗の増大の謎が解き明かされました。その後、日本の多くの研究者もこの分野で主要な貢献を果たしました。

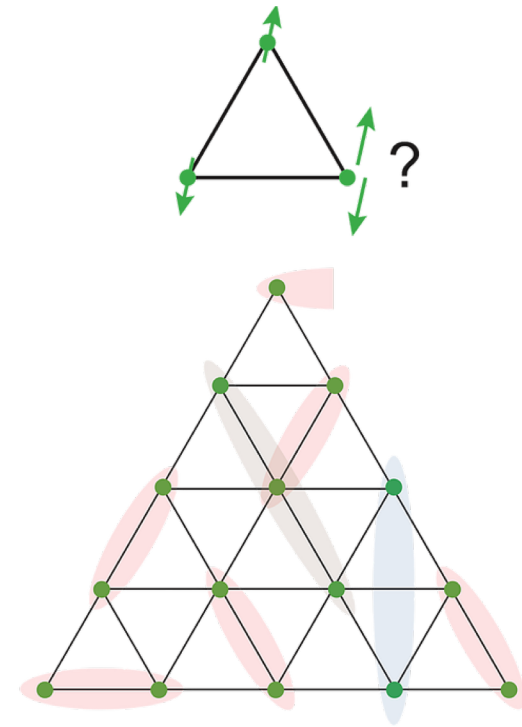
磁性不純物 (= スピン) は近藤温度とよばれる温度 $T_K$ の高温側では自由なスピンとして振る舞いますが、それ以下においては金属中の伝導電子とスピン-重項: **近藤一重項**を形成し、絶対零度では実質的に磁性不純物が消失したように振る舞います。この過程で伝導電子は不純物スピンの強く散乱され、電気抵抗が増大していたのです。実は、この近藤効果の物理が発展する過程で、現代の多体系の理論の基礎の多くが築かれたと言っても過言ではありません。1980年代から発展した**重い電子系**と呼ばれる有効質量が真空中の電子の質量の1000倍にもなっている系では、近藤効果は主要な役割を果たしており、それらの系で見られる非従来型超伝導などが現在でも盛んに研究されています。



図：近藤効果の概念図。上図は近藤温度 $T_K$ より高温の状態では伝導電子（緑矢印）と不純物スピン（黒矢印）は独立に振る舞う。下図は低温状態では、不純物スピンは伝導電子スピンにより遮蔽される。

# 幾何学的フラストレーション

フラストレーションと聞くと、あまり良い意味ではありませんが、物理学においてもこのような専門用語があります。通常、「磁性体」というのは、磁石（強磁性）になったり、隣の磁気モーメントが互いに反対向きにそろって反強磁性体になるような物質を言います。ある種の結晶構造では、高温では反強磁性体と似た振る舞いを示すにも関わらず、温度を絶対零度近傍まで下げてもうんともすんとも言わない（つまり反強磁性体にならない）ことがあります。これらの磁性体のことをフラストレート磁性体 (frustrated magnets) とよんでいます。「ある種の結晶構造」とは、たとえば三角形を要素とした構造です。大雑把に言ってしまうと、三角形の頂点に↑と↓をおいて全てのボンドを反強磁性的にすることができないこと（→フラストレーション）に関係しています。これらの系の基底状態の波動関数がどういうものかは、現在でも活発な議論が続けられていますが、有力なものとして、スピン液体という状態があり、物質の新しい状態として注目を集めています。ここでの「液体」とは実際に液体になっているわけではないですが、反強磁性体のようにスピンの「がっちり」固まっていない非磁性状態を意味しています。

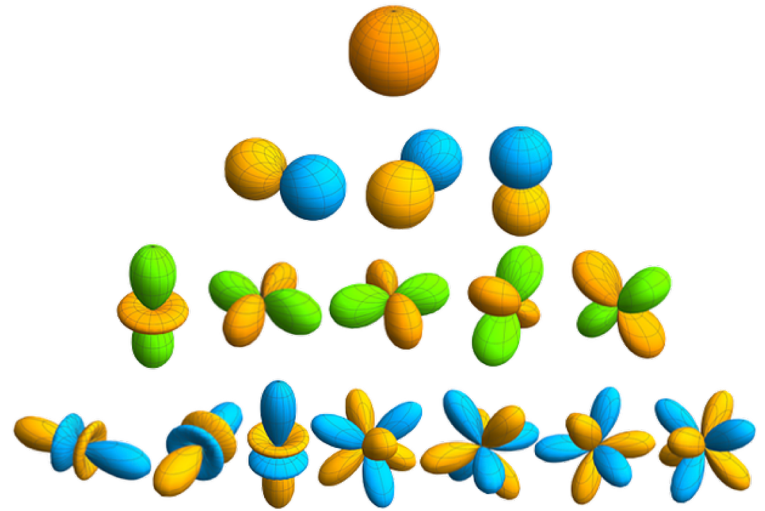


図：フラストレーションの概念図。上図は三角形上のフラストレーション。下図はスピン液体の一つであるRVB状態(Resonance Valence Bond)。楕円はスピン一重項を表し、これらの重ね合わせで波動関数が表現される。

# 軌道自由度・多極子

電子の軌道自由度 (orbital degrees of freedom) とは、量子力学でも習ったように、水素原子のような球対称ポテンシャル問題の角度部分の波動関数に対応しています。実際の物質では、この軌道自由度が物性を大きく左右することがあります。例えば、軌道がz方向に伸びているd波の波動関数（右図の上から3段目左端）の電子はz方向の隣の原子には飛び移りやすいですが、x、y方向にはあまり動けない、といった状況が生じます。このような場合には様々な量に異方性が生じ、顕著な時には有効的な次元の低下と考えた方が良くもあります。

現実には、電子は軌道自由度の他に電荷とスピンの自由度も持っています。これらが複雑に絡み合い、電荷・スピン・軌道結合系が実現している系では、多彩な相転移や興味深い応答を示します。さらに5d電子系やf電子系においてはスピン軌道結合が強いため、スピンと軌道が混ざった「多極子」として振る舞い、その新奇な物性研究も近年活発になってきており、今後も未知の性質を発見できるかもしれません。

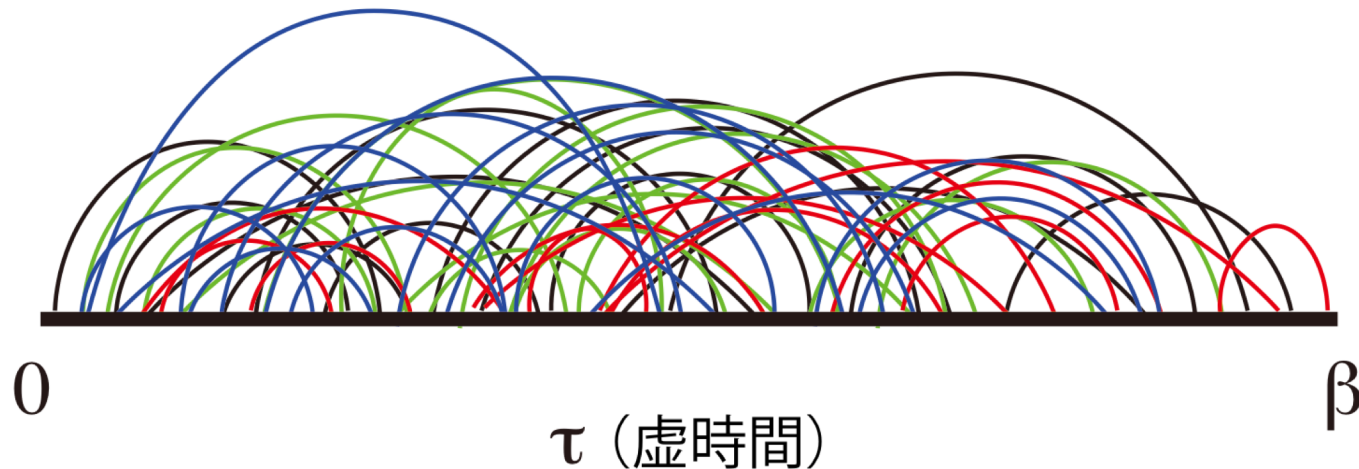


図：s, p, d, f 波の波動関数。色の違いは符号を表す。

# 連続時間モンテカルロ法

モンテカルロ法を用いると、分配関数 $Z$ を相互作用 $H'$ で摂動展開した1000次の寄与とかでも効率よく見積もることができます。

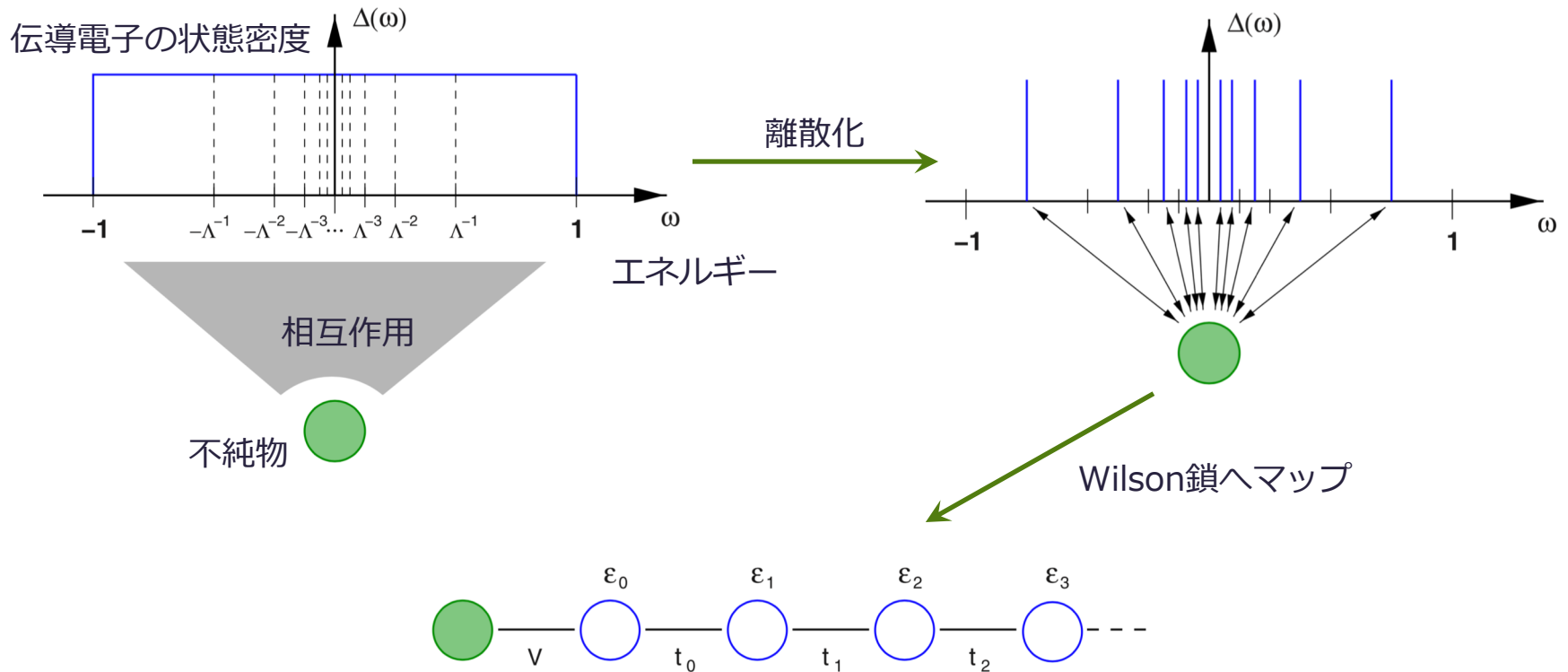
$$\frac{Z}{Z_0} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \cdots \left\langle H'(\tau_1) H'(\tau_2) H'(\tau_3) \cdots \right\rangle_0$$



摂動次数は線の数だけある。

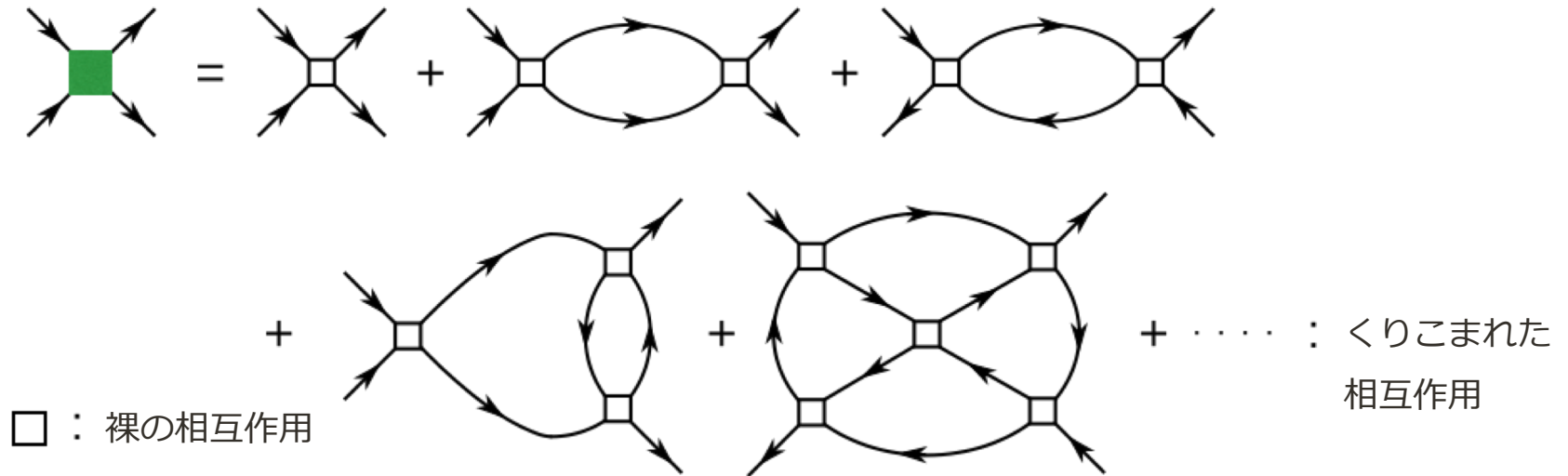
# 数値くりこみ群

**数**値くりこみ群は近藤効果などの不純物問題に対する超強力な数値計算の手法です。3次元の系を一次元のWilson鎖にマップすることで「くりこみ群」を精度良く実行します。



# ファインマンダイアグラム

ファインマンによる有名なダイアグラムの手法は素粒子から物性まで幅広い分野で用いられます。微視的な「裸」の相互作用の高次のプロセスを考慮すると、「くりこまれた相互作用」が計算できます。実際に重要なのは、裸の相互作用ではなく、くりこまれた相互作用です。



矢印は粒子（電子）を表します。



# これまでの卒研テーマ1

- H19 中三川 京弥 マンガン酸化物の新しい磁気構造 (→東大院工 求研)  
宮崎 亮一 非調和型ポテンシャル中の電子の束縛エネルギー (→首都大院理工 電子物性)
- H20 大柴 邦洋 多バンド系の超伝導 (→首都大院理工 強相関電子論)
- H21 鈴木 克佳 フント則とランダウのg因子 (→首都大院社会科学 経営学専攻)  
田島 一樹 異方的超伝導状態における核磁気緩和率の温度依存性 (→東大物性研 瀧川研究室に進学)
- H22 緒方 勝 空間反転対称性のない系の結晶場ポテンシャル (→筑波大院 システム情報工 経営・政策科学専攻)
- H23 長谷川 裕 二酸化アクチノイドの強束縛近似モデル (→首都大院理工 強相関電子論)
- H24 飯島 隆太 イジング模型の磁化 (→就職)
- H25 小久保勇気 乱雑位相近似によるハバードモデルの磁気秩序構造の解析 (→就職)  
山村諒祐 界面のあるマンガン酸化物のスピン・電荷・軌道秩序 (→首都大院理工 強相関電子論)  
松尾正裕 動的平均場の物理的な意味の考察 (→首都大院理工 強相関電子論)
- H26 石塚晃太 メトロポリス法を用いた2次元イジングモデルの解析：物理量の計算と厳密解との比較 (→就職)  
米山雄太 ランチョス法による1次元ハバードモデルの電子状態の解析 (→就職)
- H27 市川暉洋 BiS<sub>2</sub>系超伝導体のギャップ関数の解析 (→首都大院理工 強相関電子論)  
野澤卓馬 反強磁性イジング模型の数値計算による解析 (→就職)  
山村大樹 1次元ラットリング模型の熱力学 (→就職)
- H28 石飛 尊之 ダイヤモンド格子上の超伝導状態の解析 (→首都大院理工 強相関電子論)  
今泉 誠司 正二十面体スピン模型におけるスピン相関 (→就職)  
中村 憲吾 平均場近似によるアンダーソンモデルの解析 (→首都大院理工 強相関電子論)
- H29 明石 直人 ダイヤモンド構造におけるエネルギー分散と秩序変数の相関 (→東工大院)  
清田 景司 1次元ハバードモデルの電子状態の弱相関から強相関領域への移り変わり (→就職)  
古里 晃 1次元ハバードモデルの強相関領域における有効模型 (→就職)
- H30 堀川 亮 層状超伝導体のギャップ関数とフェルミ面構造の関係 (→首都大院理工 強相関電子論)  
沓澤 直輝 三角格子Potts模型の実空間くりこみ群解析 (→就職)  
青木 太一 くりこみ群を用いた $\phi^4$ 模型の解析 (→首都大院理工 強相関電子論)

# これまでの卒研テーマ2

- R1 松本 侑真 数値繰り込み群法による近藤効果の研究 (→都立大院理 強相関電子論)
- R2 軽部 哲也 カイラル結晶における格子振動の数値計算による解析 (→就職)  
篠塚 雄太 フォノン分散におけるカイラル副構造の影響 (→就職)  
高堀 峻登 室温超伝導体における異常同位体効果 (→就職)
- R3 岡谷日十子 単純立方格子における $t_{2g}$  四極子のトリプルq秩序 (→都立大院理 強相関電子論)  
藤田 剛太 歪み場下における結晶場基底状態のトポジカル転移 (→就職)  
宮平 潤 マンガン酸化物のEタイプ反強磁性相における端の影響 (→都立大院理 強相関電子論)
- R4 宿利 誠幸 二次元正方格子ラシュバ模型における磁場効果 (→就職)  
古家 源太 マンガンカゴメ格子上的軌道秩序の数値解析 (→都立大院理 強相関電子論)

# これまでの修論テーマ1

\*: 博士後期課程に進学

- H22 大柴邦洋\* 非調和格子振動による電子の有効質量の増大と超伝導の理論的研究
- H23 柴 雄二 ヤーン・テラーフォノンによって誘起される超伝導の理論的研究  
新倉文明 ハーフフィリング近傍におけるf電子系の多極子物性の微視的理論研究
- H24 田浦将久 協力的ヤーンテラー歪みとフント結合の協調による $\text{Co}^{3+}$ 中間スピン状態安定化機構  
志智 晃 動的平均場理論によるハバードモデルのモット転移の研究
- H25 長谷川裕 2軌道ハバードモデルにおけるスピン・軌道秩序相の研究  
松浦智哉 厳密対角化法による電子・ラットリング系のスペクトル関数の解析  
近藤泰弘\* 軌道縮退二重交換モデルに基づくクロム化合物の磁気構造の研究
- H26 我妻友明\*  $\text{BiS}_2$ 系層状超伝導体のギャップ対称性：有効2軌道モデルの乱雑位相近似による解析  
松井大\* 数値繰り込み群法による斥力型および引力型アンダーソンモデルにおける近藤効果の研究
- H27 松尾正裕 ボソン・フェルミオン混合系の平均場近似による基底状態相図の研究  
山村諒祐\* 層状マンガン酸化物における表面誘起の電荷不均一構造
- H28 鈴木浩平\* 横磁場下一軸異方性のある $S=1$ 一次元近藤格子モデルの基底状態
- H29 石田有伸 正方格子拡張近藤格子モデルの多重相図  
市川暉洋  $\text{BiS}_2$ 系層状超伝導体における非磁性不純物効果
- H30 中村 憲吾 2軌道アンダーソンモデルの数値くりこみ群法による近藤効果の研究  
石飛 尊之\* ダイヤモンド構造上の反強四極子秩序に誘起される電気磁気効果

# これまでの修論テーマ2

\*: 博士後期課程に進学

- R1 溝尾義輝\* プルトニウム化合物の超伝導の微視的理論研究
- R2 青木太一 交替Z3異方性のあるハニカム格子XY模型における誘起反強モーメントの研究  
堀川 亮 軌道分裂効果を利用したBiS2系層状超伝導体の超伝導発現機構の考察:  
スピン揺らぎ機構とフォノン機構の研究
- R3 松本 侑真 局所ヤーンテラーフォノンと動的に結合する2軌道アンダーソンモデルの近藤効果の研究
- R4 久保 陽大 5d- $\Gamma_8$ 基底状態の四極子秩序における励起状態の効果  
田所 有人 BiS2系層状超伝導体の超伝導ギャップ関数に対するサイト間クーロン相互作用の影響