

# 物性理論研究部門

## Division of Condensed Matter Theory

当部門では、現代の凝縮系物理学、統計物理学、物質科学の最先端の問題を微視的な見地から活発に理論研究しているが、その目指すところは、実験を参照しつつ、相互作用する多体系の運動を捉える新概念の開拓、興味ある新現象の予言、そして、物質の本質を捉えた有用なモデルの提案である。

最近の研究対象は、遷移金属酸化物や有機伝導体におけるスピン電荷フォノン(軌道)複合物性、低次元量子スピン系や近藤格子等の電子系(いわゆる強相関系)における量子相転移や量子臨界現象、金属絶縁体転移、重い電子系、現象論や微視的な立場から見た様々な物質中での超伝導、金属や半導体での動的物性への交換相関効果、表面での動的過程や触媒作用、そして、メソスコピック系における量子輸送や相互作用の問題など、多様である。

これらの理論研究は各人得意の方法を用いて遂行されているが、部門全体として見ると、高等物理数学の解析手法、場の量子論的多体摂動理論、そして、量子モンテカルロ法や密度汎関数理論に基礎を置く最先端の第一原理計算などの大規模数値計算手法等、殆ど全ての現代的理論手法がカバーされている。

In this division, we are conducting vigorous theoretical research from a microscopic point of view on topics at the forefront of contemporary condensed matter physics, statistical physics, and materials science, in pursuit of the development of new concepts to describe collective behavior of interacting systems, prediction of novel interesting phenomena, and useful theoretical modeling of materials, in close contact with experimental groups.

The topics in recent research span such diverse areas as spin-charge-phonon(-orbital) complex properties in transition-metal oxides and organic conductors, quantum phase transitions and critical phenomena in the strongly-correlated systems such as low-dimensional quantum magnets and electron systems including the Kondo lattice, metal-insulator transitions, heavy-fermion physics, both phenomenological and microscopic theories of superconductivity in various materials, exchange and correlation effects on dynamic properties in metals and semiconductors, dynamic processes and catalytic properties at surfaces, and quantum transport and interactions in mesoscopic conductors.

In performing those pieces of research, individual members employ calculation techniques in accordance with their expertise and taste, but as a whole, the theory group covers virtually all modern theoretical methods, ranging from sophisticated analytical techniques in mathematical physics and formal many-body theory to large computational approaches, such as quantum Monte Carlo simulations and state-of-the-art ab-initio calculation of electronic structures based on the density functional theory.

教授 Professor	上田 和夫 Kazuo UEDA	助教 Research Associate	藤井 達也 Tatsuya FUJII	特任研究員 Project Researcher	前橋 英明 Hideaki MAEBASHI
教授 Professor	高田 康民 Yasutami TAKADA	助教 Research Associate	服部 一匡 Kazumasa HATTORI	特任研究員 Project Researcher	櫻井 誠大 Masahiro SAKURAI
教授 Professor	押川 正毅 Masaki OSHIKAWA	助教 Research Associate	野口 良史 Yoshifumi NOGUCHI	特任研究員 Project Researcher	滝本 佳成 Yoshinari TAKIMOTO
教授 Professor	常次 宏一 Hirokazu TSUNETSUGU	助教 Research Associate	多田 靖啓 Yasuhiro TADA		
准教授 Associate Professor	甲元 真人 Mahito KOHMOTO	助教 Research Associate	阪野 壘 Rui SAKANO		
准教授 Associate Professor	杉野 修 Osamu SUGINO				
准教授 Associate Professor	加藤 岳生 Takeo KATO				
准教授(客員) Visiting Associate Professor	三宅 隆 Takashi MIYAKE				
准教授(客員) Visiting Associate Professor	楠瀬 博明 Hiroaki KUSUNOSE				
教授(外国人客員) Visiting Professor	ペンツ カルロ Karlo PENC				

# 上田研究室

Ueda Group



上田 和夫  
Kazuo UEDA  
教授  
Professor



藤井 達也  
Tatsuya FUJII  
助教  
Research Associate

強相関電子系の低温では磁気秩序や超伝導など各種の秩序状態が実現する。基底状態における相境界は量子相転移に他ならない。最も簡単な量子相転移の例は、スピン系の秩序無秩序転移であり、われわれは二次元直交ダイマー格子やパイロクロア格子上的のハイゼンベルグ模型の研究を推進してきた。最近では遍歴電子系の量子相転移の研究へと歩を進めている。

近年籠状構造を持つ物質群が注目されているが、こうした物質では籠中にあるイオンの非線形格子振動が重要な役割をしていると考えられる。この物質系における電気抵抗、核磁気緩和率の特異な温度依存性が非線形格子振動によるものとして理解できることを明らかにした。さらに、振動するイオンが磁性イオンである場合には、格子振動と近藤効果の絡み合いという新たな問題が生じる。局在軌道と伝導電子の混成に加え、フォノンを介して新たに生じるチャンネルによる2チャンネル近藤効果が普遍的に見られることが明らかになった。

有限バイアス下における量子ドットの近藤輸送現象について、久保公式を非平衡定常状態に一般化し、ショットノイズが電荷 - 電流の相関関数で与えられることを明らかにした。また、非平衡定常状態の電流を時間依存の密度行列繰り込み群を用いて直接計算し、近藤輸送現象の数値的研究を行った。

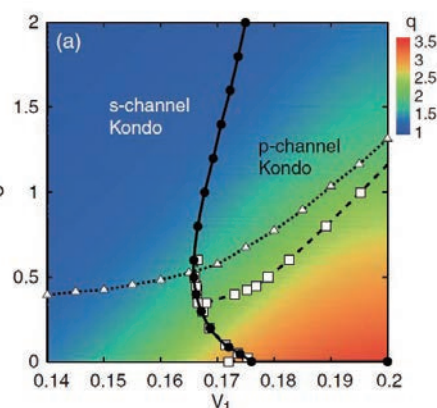
In strongly correlated electron systems, a rich variety of the ground states are realized, including magnetic and superconducting states. Boundaries between different phases define quantum phase transitions. One of the simplest examples of the quantum phase transitions is the order-disorder transition in localized spin systems. Typical examples we have studied include the spin systems in the two-dimensional orthogonal dimer lattice and the three-dimensional pyrochlore lattice. We are now interested in quantum phase transitions in itinerant electron systems.

Materials which have a network of cages are under intensive studies in these days. A unique feature of such systems is the strongly anharmonic vibration of ions contained in the cages. We have shown that it is the origin of unusual temperature dependences of resistivity and NMR relaxation rates in this class of materials. Recently effect of vibrations of a magnetic ion coupled with conduction electrons is studied. It is shown that opening of a new hybridization channel accompanied with phonons leads to a line of critical points of the two channel Kondo effects.

Concerning the transport phenomena through quantum dots, it is shown that generalization of the Kubo formula into non-equilibrium situations is possible, which leads to a new theoretical definition of the shot-noise. Concerning numerical study of Kondo transport, a direct method to calculate current with the time-dependant DMRG has been developed.

振動する磁性イオンのクーロン相互作用 ( $U$ ) とフォノンを伴った混成強度 ( $V_1$ ) 空間での低温極限での振る舞い。基底状態はパリティによって特徴づけられ、s波近藤効果とp波近藤効果の二つの領域が現れる。境界線上では2チャンネル近藤効果が見られる。

Two regimes in the low temperature behaviors of Kondo effect of a vibrating magnetic ion. On the boundary the two-channel Kondo behavior is identified.



## 研究テーマ Research Subjects

1. 局在スピン系および遍歴電子系における量子相転移  
Quantum phase transitions in localized spin systems and itinerant electron systems
2. 振動する磁性イオンにおける近藤効果  
Kondo effects of a vibrating magnetic ion
3. 量子ドットにおける近藤輸送現象  
Kondo transport phenomena through quantum dots

# 高田研究室

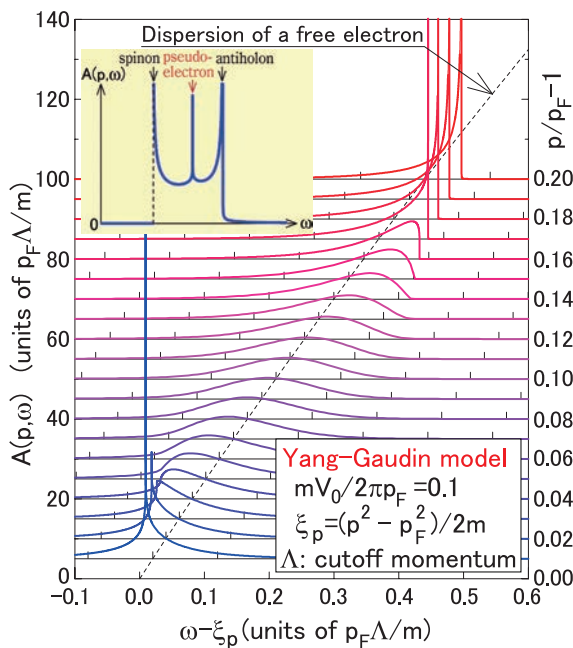
Takada Group



高田 康民  
Yasutami TAKADA  
教授  
Professor

自然の階層構造の中で物性理論の主たる対象は電磁相互作用をする多数の原子核電子複合系である。この系は容易に厳密解を許さないという意味で複雑ともいえる。しかし、この系の上部階層（生物学の範疇）では当然のことながら、予想外にもこの系を生み出している下部階層（素粒子物理の範疇）でもずっと複雑な系を対象にしていることに比べれば際立って簡単な系である。それゆえ、この系を究めることは全ての物性理論にとって基本的課題である。この認識の下に、密度汎関数理論やグリーン関数法を主たる手段として、この原子核電子複合系の量子物性を第一原理から忠実に解明する研究を行っている。特に、超伝導転移温度の第一原理計算手法の確立とそれを駆使しての高温超伝導機構の提唱を目標としている。

In the hierarchic structure of nature, condensed matter theory is mainly concerned with the complex system of many nuclei and electrons, interacting to each other through electromagnetic fields. This system is so complex that no rigorous solution is allowed. It is, however, regarded as an astonishingly simple one if we compare it with the systems in the upper hierarchy (the domain of biology) as well as those in the lower one (the domain of high-energy physics). Thus we consider it as one of the most fundamental problems in the whole theory of physics to make its thorough investigation. With this recognition, we study this system faithfully from first principles with mainly using the density functional theory and the Green's-function method. More specifically, we are constructing a framework for calculating the superconducting transition temperature from first principles with the aim of proposing a high- $T_c$  mechanism.



ラッティンジャー流体（ヤン・ゴードン模型）における1電子スペクトル関数に現れる擬電子ピークの変遷の全容。挿図はフェルミ点近傍のスペクトル関数の全体像。

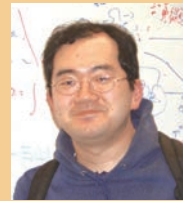
Structural change of the pseudoelectron peak in the one-electron spectral function for the Luttinger liquid (Yang-Gaudin model). Inset: The entire structure of the spectral function near the Fermi point.

## 研究テーマ Research Subjects

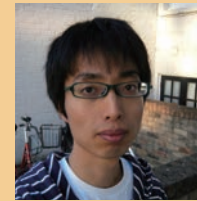
1. GWΓ法：ワード恒等式を常に満たす電子自己エネルギーの計算手法の開発と低密度電子ガスの物性解明  
GWΓ method: Development of the calculation method for the electron self-energy always satisfying the Ward identity and investigation of the properties in the low-density electron gas
2. 超伝導転移温度の第一原理計算：密度汎関数超伝導理論での対相互作用汎関数の開発と引力斥力拮抗系での高温超伝導機構探求  
First-principles calculation of the superconducting transition temperature: Proposal of a good functional form for the pairing interaction in the density functional theory for superconductors and investigation of high-temperature superconductivity in an attraction-repulsion competitive system
3. 原子・分子挿入電子ガス系：第一原理からの近藤問題と交換相関エネルギー汎関数形の開発  
Atom/molecule embedded electron gas: Kondo problem from first principles and developments of the exchange and correlation energy functional

# 押川研究室

Oshikawa Group



押川 正毅  
Masaki OSHIKAWA  
教授  
Professor



多田 靖啓  
Yasuhiro TADA  
助教  
Research Associate

量子多体系の理論を中心として研究を行っている。量子多体系と古典統計力学系および場の理論の密接な関係を踏まえ、広範な系について成立する普遍的な概念を探求するとともに、実験結果の統一的な理解や新たな実験に対する予言も目標とする。たとえば、1次元系に閉じ込められた液体ヘリウム4の系で最近実験的に見出された超流動的なふるまいを、1次元系に特徴的な異常に遅い緩和を反映した動的な現象として記述する理論を提案し、「超流動転移温度」の周波数依存性を予言した。

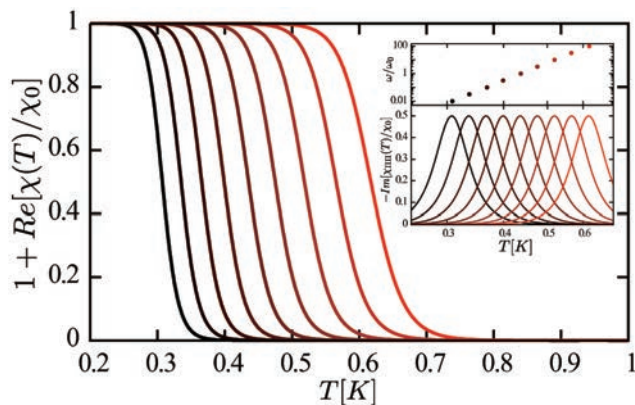
一方、量子多体系に関する近年の研究の進展は、量子相の分類という基本的な問題についての概念的な再検討を促している。たとえば、局所的な秩序パラメータが存在しないトポロジカル秩序相を量子エンタングルメントによって同定する研究を行っている。このような研究により、量子情報理論や量子計算との境界領域の開拓も企図している。

これらの研究の多くは、国際共同研究として推進している。

Our main focus is quantum many-body theory. Based on the close correspondence among quantum many-body systems, classical statistical systems and field theory, we pursue universal concepts in physics. At the same time, we aim to give a unified picture on experimental data and to make testable predictions. For example, recent experimental observation of superfluid-like behavior in liquid Helium 4 confined in one dimension is described as a dynamical phenomenon related to anomalously slow relaxation characteristic in one dimension. Moreover, frequency dependence of the “superfluid transition” temperature is predicted.

On the other hand, recent developments in quantum many-body problems motivate us to reexamine the fundamental issue of classification of quantum phases, at conceptual level. For example, we study characterization of topological phases, which has no local order parameters, in terms of quantum entanglement. With these studies, we also aim to develop an interdisciplinary field with quantum information theory and quantum computation.

Much of our research is carried out in international collaborations.



1次元に閉じ込めた液体ヘリウム4の、さまざまな周波数における超流動応答。周波数が200kHz(右)から20Hz(左)に下がると、超流動応答の立ち上がり温度が低下している。挿入図は、各周波数で超流動応答の立ち上がりとほぼ一致する温度における散逸のピークと、その温度が周波数とともにべき的に変化することを示している。

Superfluid response of liquid Helium 4 confined in one dimension. As the frequency is lowered from 200kHz(right) to 20Hz(left), the onset temperature of superfluid response approaches to zero. The inset shows a dissipation peak at about the same temperature as the onset of the superfluid response at each frequency, and a power-law dependence of this temperature on the frequency.

## 研究テーマ Research Subjects

- 低次元スピン系における電子スピン共鳴の場の理論による定式化  
Field-theory formulation of Electron Spin Resonance in low-dimensional quantum spin systems
- 共形場理論とその物性物理への応用  
Conformal Field Theory and its applications to condensed matter physics
- トポロジカル相と量子エンタングルメント  
Topological phases and quantum entanglement
- ナノ多孔体中の液体ヘリウム4の量子臨界現象  
Liquid Helium 4 in nanoporous media and quantum critical phenomena
- 重い電子系における相転移と超伝導  
Phase transitions and superconductivity in heavy fermion systems

# 常次研究室

Tsunetsugu Group



常次 宏一  
Hirokazu TSUNETSUGU  
教授  
Professor



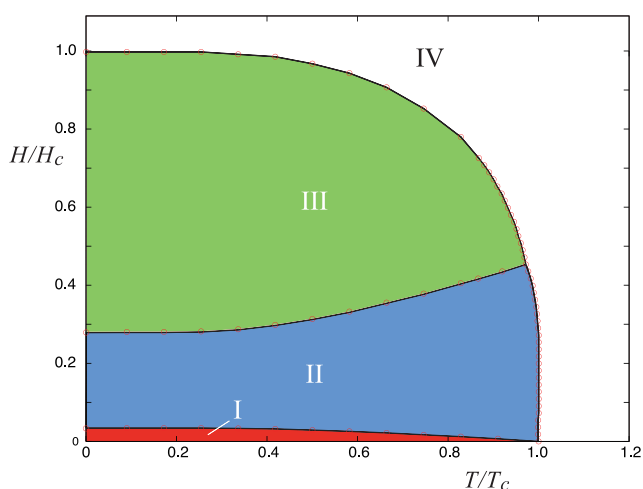
服部 一匡  
Kazumasa HATTORI  
助教  
Research Associate

遷移金属化合物、希土類・アクチノイド化合物などの電子間クーロン相互作用が強い強相関電子系の物性の理論を研究している。クーロン相互作用が強い系においては、低温において興味深い磁性状態や異方的超伝導、密度波などの多種多様な物性が発見される。これらの複雑な物性の統一的理解を目標とするとともに新しい現象の発見を目指している。

主に研究しているテーマは、フラストレーション系やスピン・電荷・軌道の複合自由度を持つ系における新しいタイプの量子秩序や量子ゆらぎである。これらの系に特有の、多くのモードのソフトな揺らぎが結合している場合における秩序と臨界現象の特徴、電子状態や輸送現象がどのような影響を受けるのかを調べている。最近の成果として、三角格子上的モット転移における電気伝導の特異性を明らかにし、また、Pr化合物の軌道秩序に伴う臨界性の新しい特徴を発見した。

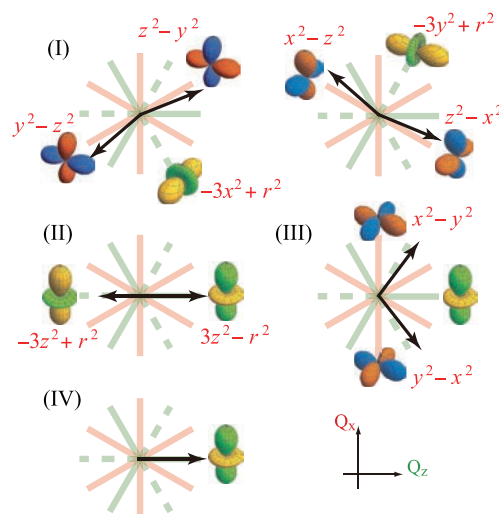
Strongly correlated electron systems, particularly compounds including d- or f-orbital electrons, are the main subjects of our research. In these systems where electron-electron interactions are very strong, a variety of interesting phenomena emerge at low temperatures, and various magnetic orders, unconventional superconductivity and density waves are typical cases.

Targets of our recent study include novel types of quantum order and quantum fluctuations in frustrated spin and strongly correlated electronic systems with multiple degrees of freedom. In these systems, many soft modes of fluctuations are coupled, and this affects the nature of quantum phase transitions, as well as electronic states and transport properties. We have recently studied electric transport singularity at Mott transition on a triangular lattice. We have also discovered a new type of divergence in quadrupole response associated with an orbital order in Pr-based compounds.



平均場近似によるPrIr<sub>2</sub>Al<sub>20</sub>の温度磁場相図。磁場印可とともに3つの反強軌道秩序相 (I-III) が出現。

Temperature-magnetic field phase diagram of PrIr<sub>2</sub>Al<sub>20</sub> determined by mean field theory. Three antiferro orbital ordered phases (I-III) appear with magnetic field sweep.



左図の各相における2副格子の軌道状態。四重極空間におけるベクトル表示。I相では2種類の軌道状態が縮退。

Orbital states on two sublattices in each phase in the left figure. Represented by vectors in quadrupole space and related states are shown. Two types of orbital orders are degenerate in phase I.

## 研究テーマ Research Subjects

1. d 電子、f 電子化合物など強相関電子系の電子状態  
Electronic states of strongly correlated systems with d- or f-electrons
2. フラストレーション系の統計力学  
Statistical physics of frustrated systems
3. 量子磁性体の新奇量子相の理論  
Theory of novel phases in quantum magnets
4. 強相関電子系における異方的超伝導  
Unconventional superconductivity in strongly correlated electron systems

# 甲元研究室

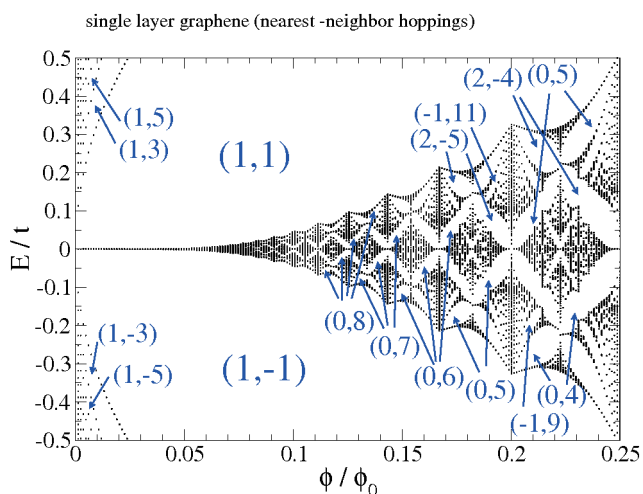
Kohmoto Group



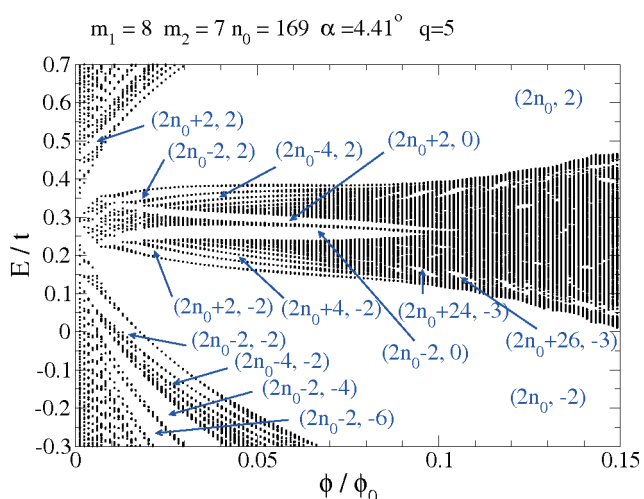
甲元 真人  
Mahito KOHMOTO  
准教授  
Associate Professor

多体系では相互作用により多くの興味深い現象が起こる。最近の例ではグラフィンの量子ホール効果である。またトポロジカルな強い長距離相互作用によりトポロジカル絶縁体ではギャップの無い表面状態が現れ、これを始めに数々の新規な現象を示す。このような現象は摂動法を主とする従来の物性理論では理解することがむずかしい。例えば量子ホール効果で成功したトポロジイ理論のような非摂動的な場の理論がある。このような新奇な現象を非摂動的なトポロジイ理論などの方法を開発して研究することが目的である。

In many body systems, there appear many interesting properties due to interaction. A recent example is the quantum Hall effects on graphene. Also topological long-range correlations give rise to novel properties like gapless surface states in topological insulators. Traditional theoretical approaches based on the perturbation theory often fail to analyze these recently found phenomena. For example, the non-perturbative field theoretical approach succeeded in the study of the quantum Hall effects. Our purpose is to develop the non-perturbative method including field theories and the solution of the basic problems in physics mentioned above.



磁場中のグラフエンのエネルギースペクトラムと量子ホール効果  
Energy spectrum and quantum Hall effect of graphene in a magnetic field



磁場中の2重層グラフエンのエネルギースペクトラムと量子ホール効果  
Energy spectrum and quantum Hall effect of double layer graphene in a magnetic field

## 研究テーマ Research Subjects

1. グラフィンの量子ホール効果  
Quantum Hall effect of graphene
2. 冷却原始の光学格子上の準結晶  
Quasicrystal of cold atom optical lattice
3. フリーデル総和則のスペクトル変位  
Spectrum shift of the Friedel sum rule

物性理論研究部門

Division of Condensed Matter Theory

[http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/sugino\\_group.html](http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/sugino_group.html)

# 杉野研究室

Sugino Group



杉野 修  
Osamu SUGINO  
准教授  
Associate Professor



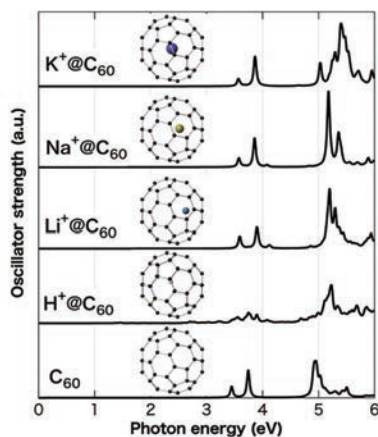
野口 良史  
Yoshifumi NOGUCHI  
助教  
Research Associate

計算機の中で物質を仮想的に再現し、その構造安定性や電子物性を明らかにすることにより、未知なる物質の新たな可能性を追求する研究を推進している。ここに、抽象化した模型を用いることなく量子力学の基本方程式を一から解く、いわゆる第一原理計算とよばれる手法を用いる。基礎電子論と応用物性論をつなぐユニークな研究を目指している。

当研究室では、電子的に励起した状態と励起後の動力学、(電子的)基底状態にある系の有限温度における動力学、原子核が静止している系の電子相関の表現論などを研究し、第一原理計算をより広範な物質系に適用するための手法開発に力を入れている。その重要な応用として、表面・界面過程における化学反応系に注目している。これは、燃料電池やその他のエネルギー変換の中心課題でありながら、微視的理論が未構築の領域であり、京コンピュータを用いた研究による発展が期待されている。

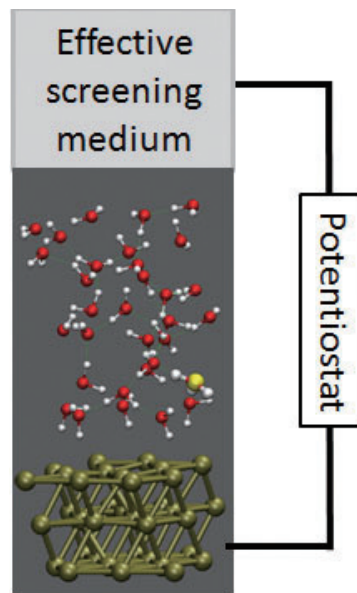
The purpose of our study is to explore novel property of matters through a first-principles computer simulation, which allows us to realistically investigate structural stabilities and the electronic properties without any input from experiments. This is a particularly powerful method based on the basic electronic structure theory and the applied materials science.

The present targets of our study include (1) electronically excited state and its dynamics, (2) dynamics of the ground state at finite temperatures, and (3) representation of electron correlation of a given nuclear configuration. These works are done to extend possibility of the first-principles calculation. The extension is particularly important in the surface/interface phenomena associated with chemical reactions, e.g., microscopic processes of fuel cells. Such study is a central topic of the energy conversion but has been hampered by the need for large computer resources. The development of K-computer has opened possibility to advance microscopic theory and effective predictions.



C<sub>60</sub> 及びアルカリイオン内包 C<sub>60</sub> の吸収スペクトルの第一原理計算。100 原子規模の第一原理励起状態計算が初めて可能になった。

Absorption spectra of C<sub>60</sub> and alkali-ion encapsulated C<sub>60</sub>. This demonstrates that the first-principles excited-state calculation is facilitated.



電極界面の動力学計算。拡張ラグランジ法を用いた手法 (potentiostat MD) を開発することにより電位一定の下での第一原理計算が可能になった。

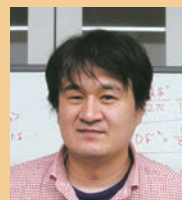
Electrode dynamics at constant potential. With the extended Lagrange method, called potentiostat MD, the electrode potential can be kept constant throughout.

## 研究テーマ Research Subjects

1. グリーン関数法を用いた励起状態の第一原理計算  
First-principles Green's function calculation of excited-state of a matter
2. テンソル解析法を用いた基底状態の高精度計算  
First-principles tensor decomposition approach to accurate electronic structures
3. 燃料電池電極触媒の大規模シミュレーション  
Large-scale simulation of the fuel-cell electrocatalysis
4. 非断熱カップリングの第一原理計算  
First-principles calculation of the nonadiabatic couplings

# 加藤研究室

Kato Group



加藤 岳生  
Takeo KATO  
准教授  
Associate Professor



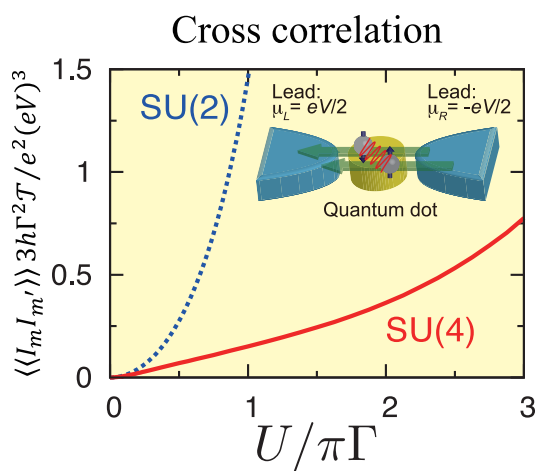
阪野 塁  
Rui SAKANO  
助教  
Research Associate

本研究室では、電子間相互作用の影響が顕著となるメゾスコピック系を対象として、輸送特性の理論研究を行っている。メゾスコピック系とは、ナノスケールで微細加工された電子系を主な対象とし、電子の量子力学的な効果が顕著となる系のことである。この分野では微細加工された半導体や超伝導体を舞台にして、量子情報制御・スピントロニクス・量子光学など、次世代への応用が期待されるさまざまな研究が進展しつつある。本研究室ではこれらの系の基礎理論の構築や計算手法の開発を行い、この分野における諸現象の理論的な理解を目指している。

本研究室ではメゾスコピック分野以外にも、電子間相互作用が物質の伝導特性や誘電応答に及ぼす影響を幅広い手法で取り扱っている。最近では、分子性導体における電荷秩序や強誘電性、遷移金属酸化物の巨大誘電リラクサー応答の研究を行っている。

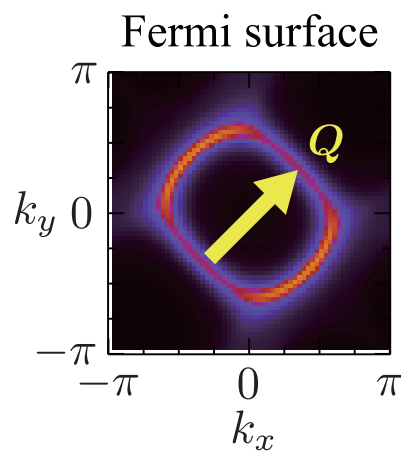
The main research subject is theoretical study on transport properties in mesoscopic systems, in which quantum interference of electrons emerges through transport properties. One of our purposes is to understand novel features emerging in interacting electrons in solid-state mesoscopic devices by utilizing various theoretical methods. Recently, novel technology on quantum information, spintronics, and quantum optics has been intensively studied in small semiconductors/superconductors. We are engaging in construction of fundamental theory and development of new numerical method for understanding of various phenomena in this research field. We are especially focusing on strong electron correlation in mesoscopic objects.

We are also trying to understand transport and dielectric properties in the presence of strong electron-electron interaction in bulk materials by utilizing various theoretical methods. Recent activities in this direction are charge-ordering phenomena and dielectric responses in organic conductors and giant relaxor-type dielectric response in transition oxides.



量子ドットのクーロン斥力  $U$  は、通常の量子ドット (SU(2)) と二重縮退軌道をもつ量子ドット (SU(4)) の交差相関を増幅する。縮退が増えると電流相関は抑えられる。

The dot-site Coulomb repulsion  $U$  enhances a cross correlation of currents through a normal dot (SU(2)) and an orbital-degenerate dot (SU(4)), while the orbital degeneracy suppresses the cross correlation.



電荷秩序転移近傍にある有機導体のフェルミ面。電荷秩序パターンの波数  $Q$  によってフェルミ面がうまくさしわたされるように、フェルミ面が変形する。

A Fermi surface of organic conductors near charge-ordering transition. The Fermi surface is modified so that the wavenumber of charge-ordering pattern  $Q$  spans it well.

## 研究テーマ Research Subjects

1. メゾスコピック系における輸送特性  
Transport properties in mesoscopic systems
2. 電子間相互作用の強い低次元導体の理論  
Theory of electron correlation in low-dimensional conductors
3. 非平衡統計力学・量子観測理論の基礎理論  
Fundamental theory of non-equilibrium statistical mechanics and quantum measurement
4. 多体電子系の数値計算手法開発  
Development of numerical algorithms for interacting electron systems



## 三宅研究室

Miyake Group



三宅 隆  
Takashi MIYAKE  
客員准教授  
Visiting Professor

第一原理計算に基づいて物質の電氣的、磁氣的、光学的性質や構造特性の解明を行っている。特に電子相関とスピン軌道相互作用に起因した物理現象を主な対象とし、鉄系超伝導体の電子励起スペクトル、パイロクロア酸化物のノンコリニア磁性、表面ラッシュバ効果などの研究を行ってきた。これらの現象を記述するには標準的な計算手法では不十分である。現在、第一原理計算に基づいた低エネルギー有効モデルの導出(ダウンフォールディング)、多体論的手法との融合、ベリー位相理論の第一原理計算への応用などの手法開発と汎用プログラムの開発・整備を継続的に行っている。また元素戦略上の観点からも近年注目されている磁石材料の特性の改良と新材料探索を目的に、希土類磁石の磁化と磁気異方性を、その温度特性、元素置換効果、表面・界面効果に着目し理論的に研究している。

My research subject is first-principles calculation of electrical, magnetic, optical and structural properties of condensed matter. Our main target is physical phenomena induced by electron correlation and/or spin-orbit interaction such as electron-excitation spectra of iron-based superconductors, noncollinear magnetism of pyrochlore oxides and surface Rashba effect. Since standard first-principles approaches are insufficient to treat these phenomena, development of computational methods is also an important subject. This activity includes development of an ab-initio scheme to derive a low-energy effective model (downfolding), combining first-principles approach with many-body techniques and application of Berry-phase theory to electronic structure calculations. Permanent magnet is another target. In order to improve magnetic properties and search for new magnetic materials, we are studying temperature dependence, effects of substitution and surface/interface on magnetization and magnetic anisotropy of rare-earth magnets.

## 楠瀬研究室

Kusunose Group



楠瀬 博明  
Hiroyuki KUSUNOSE  
客員准教授  
Visiting Professor

希土類・アクチノイド化合物、遷移金属化合物を主な対象に、軌道とスピンの結合がもたらす新しい物性現象の創造を目指して、理論的な研究を行っている。同時に、電子相関効果を効率よく扱うための実用的な数値計算手法の開発にも取り組んでいる。固体中電子が持つ複合自由度をキーワードに、広範な対象に横たわる普遍的な物理的概念の抽出と、新現象の予言を目標とする。

Our main focus is theoretical development on entangled orbital and spin degrees of freedom in rare-earth, actinide, and transition-metal compounds, based on which we aim to create novel material sciences. At the same time, we develop a practical numerical algorithm applicable to degenerate electron systems with emphasis on efficient inclusion of strong correlations among electrons. Our goals are to find universal concept and predictions of new phenomena for a wide range of materials, focusing on complex degrees of electrons in solids.

最近の主な研究テーマは、(1) 強磁性と共存する超伝導体における磁束を介した連携ダイナミクス、(2) クーパーペアや各種密度が時間方向にノードを持つ奇周波数超伝導・密度波の基礎理論、(3) 空間反転対称性の(自発的)破れとスピン軌道相互作用の協働によるバンドのスピン分裂や変形、それら歪んだ電子状態にともなう輸送・光学現象の解明などである。このほか、(4) 強相関電子系の相反する固定点において有効な計算手法の相互補完による計算手法の構築。例えば、動的平均場理論に代表される非摂動的計算手法とファインマンダイアグラムを用いた摂動的計算手法との融合など。

The recent main topics of study are (1) cooperative dynamics through vortices in superconductors coexisting with ferromagnetism, (2) fundamental theory on odd-frequency superconductivity or density wave, which is characterized by a node of an order parameter in time domain, (3) theoretical investigation on (spontaneous) symmetry breaking of spatial inversion, spin-splitting or distortion of electronic bands owing to parity mixing and spin-orbit coupling, and related novel phenomena in transport and optics. We are also developing (4) an efficient numerical algorithm based on integration of two complementary methods valid at opposite fixed points of strongly correlated electron systems, such as a hybrid scheme of the representative non-perturbative method, e.g., the dynamical mean field theory, with a diagrammatic perturbation theory.

# ペンツ研究室

Penc Group



ペンツ カルロ  
Karlo PENC  
外国人客員教授  
Visiting Professor

当研究室では、遷移金属や希土類の化合物、および光学格子中のアルカリ土類原子などのモット絶縁体の低温における性質に興味を持っている。幾何学的構造の多様性、および軌道とスピンなど複数の自由度の存在、そして多種の相互作用により、これらの磁性体の物理は非常に豊富である。我々は、フラストレーションがスピン液体相（ギャップを持つものとギャップレスのものを含む）や四重極秩序に導くような系に特に注目している。微視的なモデルから出発して、基底状態や励起の性質を解析的および数値的方法の併用により解明することを試みている。さまざまな磁性体に関する磁化測定やESR、遠赤外および中性子スペクトルなどの実験結果を定性的および定量的に理解することが目標である。

物性研の嶽山研究室とは、フラストレーションの強いCrスピネル系の強磁場下の性質における磁気格子相互作用の役割について共同研究を行っている。最近急速に発展しているトポジカル絶縁体に関連して、押川研究室とは梯子系におけるトポジカルな性質の研究を行っている。また、新たに中辻研究室と希土類スピネル化合物について、徳永研究室とマルチフェロイック物質について共同研究を開始している。

We are interested in the low temperature properties of Mott insulating systems, like transition metal and rare earth magnetic compounds and alkaline earth atoms in optical lattices. The large variety of the geometrical structures, degrees of freedom (like orbitals next to spins), and various exchange interactions make the physics of magnetic compounds very rich. We study systems where the frustration can lead to formation of gapped or gapless spin liquids, and ordering of quadrupolar moments. We attempt to characterize the nature of the ground state and excitations starting from a microscopic model, using analytical and numerical methods. Our aim is to provide qualitative and quantitative explanation of experimental results - like magnetization measurements and ESR, far-infrared and neutron spectroscopy - on various magnetic compounds.

In collaboration with the group of Prof. Shojiro Takeyama in ISSP, we study the relevance of the magnetoelastic coupling on the properties of the highly frustrated Cr spinels in large magnetic fields. Recently, we also become interested in the rapidly evolving field of topological insulators: collaborating with the group of Prof. Masaki Oshikawa, we have studied topological properties of ladder systems. New areas include collaborations with the groups of Prof. Satoru Nakatsuji on rare earth spinel, and the group of Prof. Masashi Tokunaga on multi-ferroic materials.