

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. As a whole, however, 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	高田 康民 TAKADA, Yasutami	助教 Research Associate	藤井 達也 FUJII, Tatsuya	特任研究員 Project Researcher	前橋 英明 MAEBASHI, Hideaki
教授 Professor	押川 正毅 OSHIKAWA, Masaki	助教 Research Associate	野口 良史 NOGUCHI, Yoshifumi	特任研究員 Project Researcher	滝本 佳成 TAKIMOTO, Yoshinari
教授 Professor	常次 宏一 TSUNETSUGU, Hirokazu	助教 Research Associate	多田 靖啓 TADA, Yasuhiro	特任研究員 Project Researcher	ライコ ミクロシュ LAJKO, Miklos
准教授 Associate Professor	杉野 修 SUGINO, Osamu	助教 Research Associate	阪野 壘 SAKANNO, Rui	特任研究員 Project Researcher	クワチ ジェームス QUACH, James
准教授 Associate Professor	加藤 岳生 KATO, Takeo			特任研究員 Project Researcher	杉浦 祥 SUGIURA, Sho
教授(客員) Visiting Professor	中村 真 NAKAMURA, Shin			特任研究員 Project Researcher	大谷 実 OTANI, Minoru
教授(外国人客員) Visiting Professor	シュテンゲル キリル SHTENGEL, Kirill			特任研究員 Project Researcher	胡 春平 HU, Chunping

高田研究室

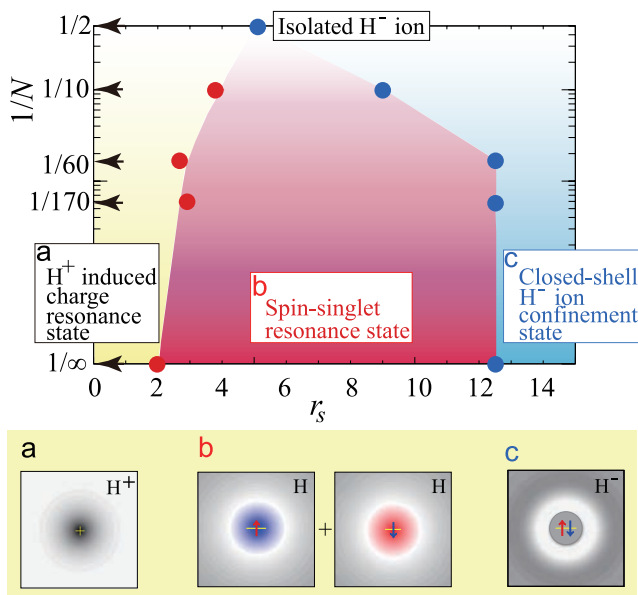
Takada Group



高田 康民
TAKADA, Yasutami
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.



陽子挿入電子ガス系における電荷共鳴、スピン一重項共鳴、閉殻水素負イオン閉じ込め状態間の鋭い連続転移。ここで、 N は全電子数、 r_s は一様密度電子ガス系を指定する密度径数である。

Sharp sequential transitions among charge resonance, singlet-spin resonance, and closed-shell H⁻ ion confinement states in the proton-embedded electron gas. Here N is the total number of electrons and r_s is the density parameter to describe the homogeneous electron gas.

研究テーマ Research Subjects

1. GW Γ 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
GW Γ 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

物性理論研究部門

Division of Condensed Matter Theory

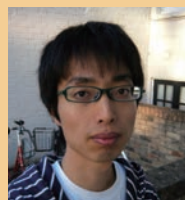
http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/oshikawa_group.html

押川研究室

Oshikawa Group



押川 正毅
OSHIKAWA, Masaki
教授
Professor



多田 靖啓
TADA, Yasuhiro
助教
Research Associate



藤井 達也
FUJII, Tatsuya
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。最近の成果の一つとして、カイラル超流動体の全軌道角運動量についての40年来のパラドックスに一定の理論的解決を与えた。

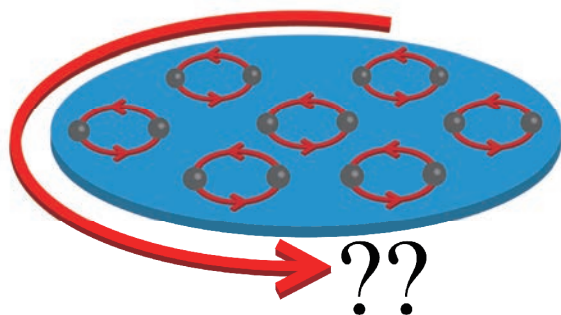
また、量子多体系に関する近年の研究の進展は量子相の分類という基本的な問題についての概念的な再検討を促している。この方向での最近の成果として、ある種の点群対称性を持つ1次元量子スピン系においては、局所スピン状態の積に断熱的につながる「自明な」相が複数あり、その間に必然的に量子相転移が存在することを明らかにした。量子相の分類は量子エンタングルメントとも密接に関連しており、これを手がかりに量子情報理論や量子計算との境界領域の開拓も企図している。

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. As an example of our recent achievements, we have given a certain theoretical result for the total orbital angular momentum of chiral superfluids, which has remained paradoxical for 40 years.

Moreover, recent developments in quantum many-body problems motivate us to reexamine the fundamental issue of classification of quantum phases, at the conceptual level. For example, recently we elucidated that there are more than one distinct “trivial” phases, each of which is adiabatically connected to a product of local spin states, in one-dimensional quantum spin systems with a certain point-group symmetry. These phases are inevitably separated by a quantum phase transition. Classification of quantum phases is also closely related to quantum entanglement. Exploiting this connection, 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.



カイラル超流動体の角運動量の問題。カイラル超流動体では、フェルミ粒子が軌道角運動量を持つクーパー対を形成している。このとき、全てのフェルミ粒子がクーパー対の形成に参加しているか、フェルミ面付近のフェルミ粒子のみが参加するかによって、超流動体の全軌道角運動量として期待される値は大きく異なる。

The angular momentum “paradox” of chiral superfluids. In chiral superfluids, each Cooper pair carries an orbital angular momentum. One may suppose all the fermions contribute to the orbital angular momentum by forming Cooper pairs, or only the low-energy fermions near the Fermi surface do. Depending on the picture, the expected value of the total orbital angular moment of the superfluid differs significantly.

研究テーマ Research Subjects

1. 低次元スピン系における電子スピン共鳴
Electron Spin Resonance in low-dimensional quantum spin systems
2. 量子細線の接合における伝導と共形場理論
Conduction at a junction of quantum wires and conformal field theory
3. トポロジカル相と量子エンタングルメント
Topological phases and quantum entanglement
4. カイラル超流体の軌道角運動量
Orbital angular momentum of chiral superfluids
5. 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



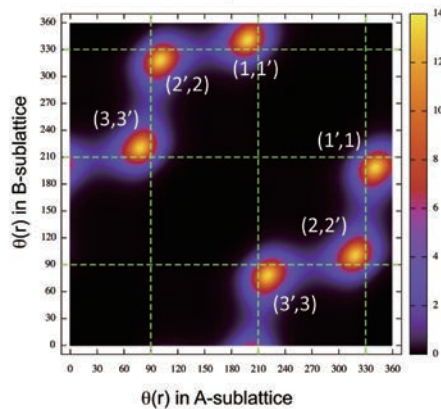
常次 宏一
TSUNETSUGU, Hirokazu
教授
Professor

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出現する。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、強磁性超伝導体やフラストレーション系などのスピン・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、f電子系化合物 $\text{PrT}_2\text{Zn}_{20}$ ($T=\text{Ir,Rh}$) の低温の新しい軌道秩序を発見し、また非磁性のモット転移および磁気秩序が出現する反強磁性転移における電気伝導度の特異性を明らかにした。

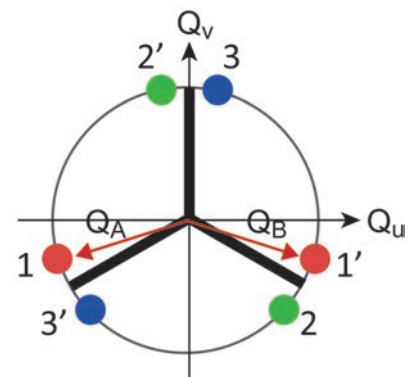
Strongly correlated electron systems, particularly compounds including d- or f-orbital electrons, are the main subjects of our research. In these systems where electron-electron interactions are very strong, a variety of interesting phenomena emerge at low temperatures, and various magnetic orders, unconventional 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. One of our recent achievements is about orbital physics in Pr-based compounds $\text{PrT}_2\text{Zn}_{20}$ ($T=\text{Ir,Rh}$), and we have discovered new types of quadrupole order in those systems. We have also studied singularity in electric conductivity near phase transitions, particularly Mott transition in a frustrated lattice and antiferromagnetic transition in a unfrustrated lattice.



ダイヤモンド格子 Pr イオンの四極子モーメント \mathbf{Q} の有効モデルのモンテカルロ計算結果。秩序相における局所秩序変数、 $\mathbf{Q}(r) = (\cos \theta(r), \sin \theta(r))$ の最近接サイト間の対分布を示す。6 個のピークは秩序相の 6 つの異なるドメインに対応。

Monte-Carlo simulation result for an effective model of quadrupole moments \mathbf{Q} of Pr ions on the diamond lattice. This figure shows the pair distribution of nearest-neighbor order parameters, $\mathbf{Q}(r) = (\cos \theta(r), \sin \theta(r))$ in the ordered phase. Index pair (1,1) etc represents the directions of the local order parameters in the two-sublattice shown in Fig. 2. Six peaks correspond to the six domains in the ordered phase.



秩序変数の模式図。各ドメインの A, B 副格子において、四極子モーメント $\mathbf{Q}_A, \mathbf{Q}_B$ は (n, n') 方向、または (n', n) 方向を向く。太黒線は四極子モーメントの容易軸。主秩序変数は反強成分 $\mathbf{Q}_A - \mathbf{Q}_B$ であり、強成分 $\mathbf{Q}_A + \mathbf{Q}_B$ が副秩序変数。

Schematic picture of order parameters. In each domain, the two sublattices have a pair of quadrupole moments $(\mathbf{Q}_A, \mathbf{Q}_B)$ that point to the directions (n, n') or (n', n) . Bold black lines show soft directions of quadrupole moments. The primary order parameter is the antiferro component $\mathbf{Q}_A - \mathbf{Q}_B$, while the ferro component $\mathbf{Q}_A + \mathbf{Q}_B$ is the secondary order parameter.

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

杉野研究室

Sugino Group



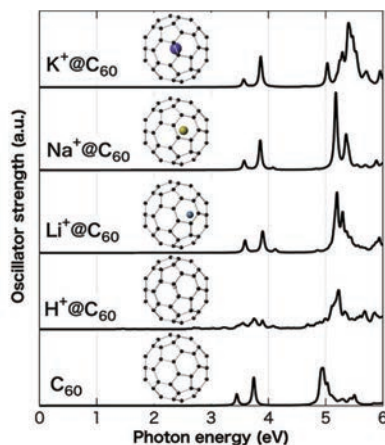
杉野 修
SUGINO, Osamu
准教授
Associate Professor



野口 良史
NOGUCHI, Yoshifumi
助教
Research Associate

スーパーコンピュータの高速化により、シュレディンガー方程式がかつてない規模で高精度に扱えるようになってきている。その結果、研究対象が均質な結晶から表面・界面を含む不均質な物質系へと広がり、物質全体の機能を視野に入れながら物性を広く理解することが現実のものとなってきた。そのような研究を支える重要な手法が第一原理計算であり、個々の電子やイオンの状態を正確に取り扱いながら、それが多数集まってできる物質の性質を演繹的に（第一原理から）求めることを可能にしている。本研究室では、そのような第一原理計算を用いた物性研究とそのための手法開発を行っている。

電極・溶液界面は機能性界面として応用さきわめて重要であるが、原子スケールで平坦な平衡界面系として基礎研究の格好の対象となっている。この系の計算を、京コンピュータなどを用いて行っている。また、第一原理計算の精度を向上させるための新しいアルゴリズムの開発や、計算対象を励起状態とそのダイナミクスに拡張させるための手法開発を並行して行っている。多彩な現象を総合的に研究できるように計算スキームの構築を狙った研究を展開している。

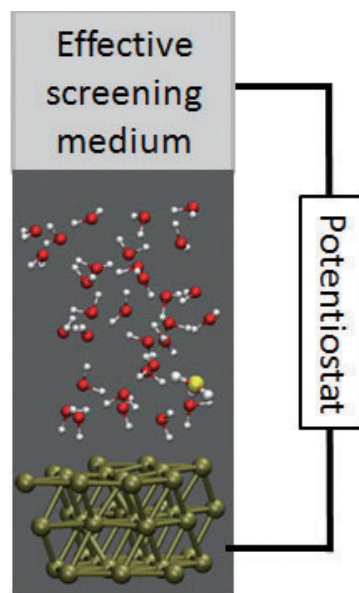


C₆₀ 及びアルカリイオン内包 C₆₀ の吸収スペクトルの第一原理計算。100 原子規模の第一原理励起状態計算が初めて可能になった。

Absorption spectra of C₆₀ and alkali-ion encapsulated C₆₀. This demonstrates that the first-principles excited-state calculation is facilitated.

Advance in the supercomputer has facilitated access to a large-scale Schrödinger equation, thereby extending the target of study from the property of the homogeneous bulk to the functionality of inhomogeneous materials having surfaces and interfaces. Such study was accelerated by the advance in the first-principles calculation that bridges states of individual electron/ion to the properties of their agglomeration. This group utilizes the first-principles calculation for the study of complex material.

The main target is the electrode/solution interface. This system is well-known as the most important functional interface, such as catalysis, but it is worth emphasizing that this interface is atomically flat and is almost in equilibrium, providing thus an ideal system for the academic interface study. This group has advanced methods for the interface study and applied them using the K-computer. This group has also been developing novel algorithms for the accurate ground-state wave function and programs for the excited-state Green's function, aiming at developing a general-purpose first-principles package for the study of materials.



電極界面の動力学計算。拡張ラグランジェ法を用いた手法 (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。

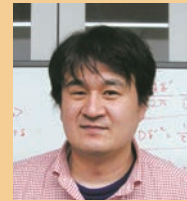
Electrode dynamics at constant potential. With the extended Lagrange method, called potentiostat MD, the electrode potential can be kept constant throughout.

研究テーマ Research Subjects

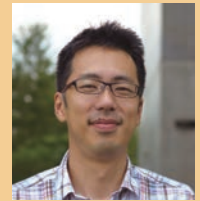
1. 電極・水溶液界面の第一原理分子動力学計算
First-principles molecular dynamic simulation of the electrode/solution interface
2. グリーン関数法を用いた励起状態の第一原理計算
First-principles Green's function calculation of excited-states
3. テンソル解析法を用いた基底状態の高精度計算
First-principles tensor-decomposition approach to accurate ground-state wavefunctions
4. 非断熱カップリングの第一原理計算と励起状態のダイナミクス
First-principles calculation of the nonadiabatic coupling and the excite-state dynamics

加藤研究室

Kato Group



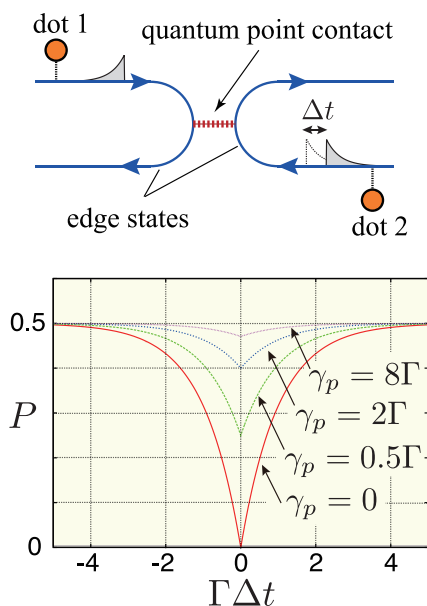
加藤 岳生
KATO, Takeo
准教授
Associate Professor



阪野 塁
SAKANO, Rui
助教
Research Associate

微細加工技術によって作成されるナノスケール素子の量子輸送特性について、理論研究を行っている。この研究分野は古くからメゾスコピック系と呼ばれ、電子の量子力学的な性質に着目した研究が活発に行われてきた。最近では、非平衡多体現象・スピントロニクス・高速駆動現象などの新しい視点で研究が進展しており、本研究室ではこれらの進展に対応して、非平衡統計力学や量子力学基礎論、多体電子論などを援用した理論研究を行っている。最近の研究例としては、量子ドット系における近藤効果の非平衡輸送特性、二電子衝突実験における位相緩和効果、フォノン系における近藤効果に類似した熱輸送現象、などがある。

本研究室では上記の理論研究のほか、多体効果や非平衡現象に関する幅広い研究テーマも取り扱っている。最近の研究例としては、巨大誘電リラクサーや進化ゲーム理論における遷移現象などがある。



The main research subject of our laboratory is theoretical study of quantum transport in nano-scale devices fabricated by fine processing technology. This research subject, which is also called ‘mesoscopic physics’, has been studied for long time by focusing on quantum mechanical nature of electrons. Recently, mesoscopic systems are studied from novel viewpoints such as nonequilibrium many-body phenomena, spintronics, high-speed drive phenomena, and so on. In order to explain these phenomena, we are constructing theories by utilizing nonequilibrium statistical mechanics, fundamental theory of quantum mechanics, and many-body physics. Examples of our recent activities are nonequilibrium transport properties of Kondo dots, dephasing effect in two-electron collider experiments, and Kondo-like effect in thermal transport of phonons.

We are also treating various research subjects related to many-body effects and nonequilibrium phenomena. Examples of our recent activities are transition phenomenon in evolutionary game theory and giant dielectric response in relaxors.

上図：Hong-Ou-Mandel型二電子衝突実験の模式図。2つの量子ドットからそれぞれ注入された電子は、量子ホール効果のエッジ状態を経由して、中央の量子ポイントコンタクトで衝突する。下図：衝突後、2つの電子が同じエッジ状態に散乱する確率 P を波束の到着時間差 Δt の関数として計算した結果。位相緩和が無視できるときは、同時に到着した2つの電子は必ず異なるエッジ状態に1個ずつ散乱される ($P=0$) が、位相緩和が存在すると P は徐々に有限の値になり古典値 ($P=1/2$) に近づく。

Upper panel: A schematic figure of the Hong-Ou-Mandel-type two-electron collision experiment. Two electrons injected from two quantum dots propagate along edge states in quantum Hall effect, and collides at a central quantum point contact. Lower panel: The probability P , that two electrons scatter into the same edge states, is plotted as a function of a wavepacket delay time Δt . Two electrons always scatter into difference edge states ($P=0$) when $\Delta t=0$ and dephasing is neglected. On the other hand, as dephasing effect increases, the probability P increases, and approaches the classical value $1/2$.

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系の量子輸送理論
Theory of quantum transport in interacting electron systems
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 many-electron systems

中村研究室

Nakamura Group



中村 真
NAKAMURA, Shin
客員教授
Visiting Professor

ゲージ・重力対応とは、強く相互作用する量子ゲージ理論を、計算が容易な一般相対性理論（重力理論）の古典力学に変換する解析手法である。この手法をゲージ粒子の多体系の解析に応用した場合、線形応答を超えた計算が可能となる場合があり、従来の手法にはない利点がある。本研究では、この手法を強相関系の非平衡物性の研究に応用し、新たな研究手法を創生することを目指している。

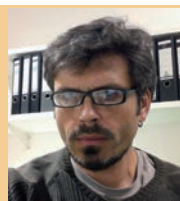
現時点では、非平衡定常系の基礎論、特に有効温度に関連する基本法則の探求に力を入れている。筆者らの研究を含む最近の研究で、強結合ゲージ理論で構成した非平衡定常状態の有効温度が重力理論側でのアナログブラックホールのホーキング温度で表されることが見出されたが、現在は、さらに有効温度の振る舞いを系統的に調べている。またゲージ・重力対応の枠組みで見出された、微分抵抗が転移する非平衡相転移についてより系統的に調べ、臨界指数などを詳細に調べていくことも予定している。

Gauge/gravity correspondence (AdS/CFT correspondence) is a map between a strongly interacting quantum gauge theory and a general relativity on a curved spacetime. The gravity picture has advantages such as we may analyze the statistical systems of gauge particles beyond the linear response regime.

Currently, I am studying on effective temperature of non-equilibrium steady states consisting of the gauge particles. In the gravity-dual picture, the effective temperature can be given as a Hawking temperature of an analog black hole that appears when the system is driven to out of equilibrium. I am surveying the dependence of the effective temperature on various parameters of the system. I am also planning to study on non-equilibrium phase transitions discovered in the framework of gauge/gravity correspondence where non-linear conductivity of the system jumps at a critical value of the parameter of the system. A detailed analysis of the critical phenomena in the phase transition will be a possible project.

シュテンゲル研究室

Shtengel Group



シュテンゲル キリル
SHTENDEL, Kirill
外国人客員教授
Visiting Professor

我々の研究の大きな目標の一つは、格子模型におけるさまざまなトポロジカル秩序や関連する現象の探求である。トポロジカル相は、古典的あるいは量子力学的なフラストレーションと深く結びついている。フラストレーションは通常の秩序を抑制し、非従来の相の発現を促す。トポロジカル秩序相は、その中でも特に興味深い例である。物性研究所では、トポロジカル相の多くの側面の専門家である押川教授、および押川研究室のメンバーと議論を重ねる予定である。また、物性研究所はフラストレーションの強い磁性体に関して世界をリードする研究所の一つである。そこで、我々は量子力学的なフラストレーションとトポロジカル相の関連に特に注力する。まずは、フラストレーションの強い格子模型を研究し、そこに現れる様々な量子相とそのトポロジカルな性質を調べる予定である。このような研究を通じて、物性研究所の研究者との交流を深め、その研究に貢献したい。

One of the specific goals of our research is studying the possibility of different kinds of topological order and related phenomena in lattice models. One theme that appears prominently in the studies of topological phases is frustration, both classical and quantum. Effects of frustration tend to inhibit conventional ordering, paving the way to more unconventional phases, of which topologically ordered phases are one particularly interesting example. ISSP presents us with a unique opportunity of interacting with Prof. Oshikawa, who is an expert on many aspects of topological states of matter, as well as the members of his group. On the other hand, ISSP is one of the leading institutions in this field of frustrated magnetism, which also interests us for the aforementioned reasons. Hence we are planning to focus on topological phases of matter and their relation to quantum frustration. One obvious route is to study lattice models with frustration and try to understand the topological features of possible phases appearing in such models. In doing so, we hope to both contribute to and benefit from the exchange of ideas with the members of ISSP.