

令和 6 年 9 月 6 日現在

機関番号：14301

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2020～2023

課題番号：20K22328

研究課題名（和文）汎関数くりこみ群によるスピン軌道相互作用と多体効果の協奏現象の理論研究

研究課題名（英文）Many body theory with spin-orbit coupling based on fRG

研究代表者

田財 里奈（Tazai, Rina）

京都大学・基礎物理学研究所・助教

研究者番号：10880023

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,200,000円

研究成果の概要（和文）：2019年に発見されたカゴメ超伝導体AV3Sb5では、多彩な量子相転移相が実験的に発見されているが、その相図の微視的機構は未解明問題であり、その理論の構築が急務である。そこで我々は、微視的なハバード模型に基づき、電子系の多体効果を考慮して、カゴメ超伝導体の相図の解析をおこなった。ナノスケールの電荷ループ秩序の理論の研究をおこなった。その結果、高温での1方向性(1Q)電荷ループ秩序の発生と、面内磁場が誘起する一次相転移の機構を提唱することができた。更に、電荷ループ秩序がもたらす輸送現象の研究までおこない、面直磁場によって符号反転する $V(2)$ の解析的な導出をおこなった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

これまでに、電場の2次に比例した電圧 $V(2)$ が面直磁場の向きによって符号を変えるという結果が、実験によって観測されているが、その微視的導出は不十分であった。我々は、電荷ループ秩序の秩序変数を考慮した非相反電気伝導度の解析を行うことで、面直磁場によって符号反転する $V(2)$ の解析的な導出をおこなうことができた。

研究成果の概要（英文）：Various quantum phase transition were experimentally discovered in the Kagome superconductor AV3Sb5 in 2019. However, the microscopic mechanism of the phase diagram is an open problem. Here, we analyzed the phase diagram of Kagome superconductors based on the microscopic Hubbard model, taking into account the many-body effect of the electronic system. As a result, we have proposed a mechanism of unidirectional (1Q) charge loop ordering at high temperatures and a first-order phase transition induced by an in-plane magnetic field. We have also studied the transport phenomena induced by the charge-loop current.

研究分野：強相関電子系

キーワード：超伝導 電荷整列秩序 多体効果

1. 研究開始当初の背景

(1) 2019年に発見されたカゴメ超伝導体 AV_3Sb_5 では、多彩な量子相転移相が実験的に発見されている。これまでの様々な実験から、90[K]付近でダビデの星型/反ダビデの星形バンド秩序が生じ、更に低温では、超伝導相が生じることが観測された。更に40[K]付近では、大きな異常ホール伝導度などが観測され、時間反転対称性の破れが見つかったが、磁気秩序は観測されておらず、時間反転対称性の破れの起源をめぐって、さまざまな理論が提唱されている。これらの多彩な相図が生じる起源として、カゴメ格子のもつ幾何学フラストレーションとの関係が重要な鍵となると考えられるが、幾何学フラストレーション系はこれまで主に絶縁体に集中して行われており、金属などの遍歴系におけるフラストレーションの役割は、これまでわかっていなかった。カゴメ超伝導体の相転移の微視的機構を解明するためにも、その理論の構築が急務となっていた。特に2023年度行われた、京大グループの磁気トルクの実験により、130K という高温で磁気秩序を伴わない時間反転対称性の破れが観測され、この高温の時間反転対称性の破れの理論を構築することが待ち望まれた。

2. 研究の目的

(1) 本研究では、カゴメ超伝導体 AV_3Sb_5 の相図の微視的機構を解明することを目的として、理論研究をおこなった。特に、これまでの平均場近似による解析から、この系では、フラストレーションの存在によって、強磁性揺らぎが高温で発達することが分かっている。この強磁性揺らぎがどのような役割を担って、90[K]付近でダビデの星型/反ダビデの星形バンド秩序が形成されるのか。また、このバンド秩序と時間反転対称性の破れや・超伝導状態の関係性を見出すことを目的に研究を行った。

3. 研究の方法

(1) 研究手法としては、カゴメ格子ハバード模型に基づき、電子系の多体効果を考慮して、線形化ギャップ方程式の解析をおこなった。そこで、まず初めに、ダビデ星型バンド秩序の微視的起源の解明をおこなった。ここでは、強磁性揺らぎを考え、平均場を超えた多体効果補正(vertex補正と呼ぶ)を考慮した。更に、このバンド秩序の量子揺らぎを使って、ナノスケールの電荷ループ秩序の理論的研究をおこなった。多体効果を系統的に考慮するために、モデルの3つのvHSに着目し、g-oologyによる散乱チャンネルの分解を行った。加えて、電荷ループ秩序をもたらす輸送現象の研究までおこなった。

4. 研究成果

(1) 本研究の結果、高温で発達した強磁性スピン揺らぎの交換散乱が、van-Hove 特異点近傍の有効ウムクラップ散乱 g_3 と後方散乱 g_1 を顕著に増強し、反ダビデバンド秩序が安定に発現することを見出した。更に、従来の Migdal-Eliashberg 近似を超えて「超伝導ペアリングにおけるバンド揺らぎの寄与」を考慮した解析により、バンド揺らぎが dominant な領域では、異方的 s 波 singlet 超伝導相、バンドとスピン揺らぎが協力する領域では p 波 triplet 超伝導相が発現するという非自明な超伝導相図を予言し、電子照射実験の結果を説明することに成功した。更に、バンド秩序をもたらす非自明な相図を見出した。後方散乱とウムクラップ散乱の多体効果による増強が得られ、電荷秩序の発現を微視的に説明することができた。具体的には、幾何学フラストレーションによって長距離磁気秩序の発生が抑制されつつも、バンド秩序の量子揺らぎが生じたときに、電荷ループ秩序が安定化することを見出した。特に、バンド揺らぎの奇数/偶数本の散乱が電子正孔対間の斥力/引力を引き起こし(図 1a,b)、電荷ループ秩序を選択的に誘起する機構を見出した(図 1c)。

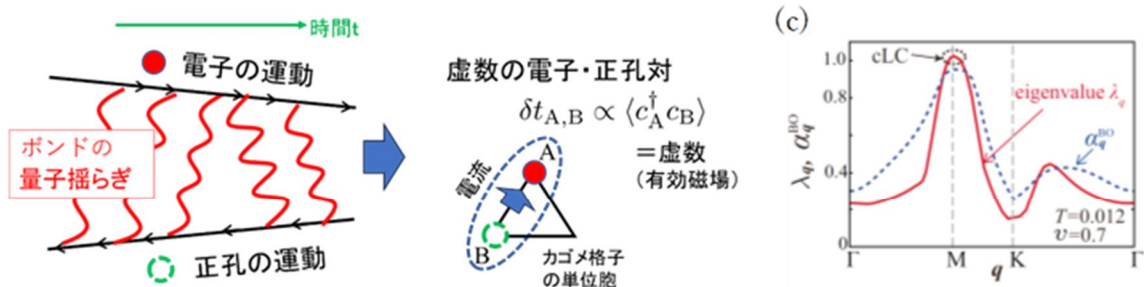


図 1(a) 電荷ループ秩序を生み出すバンド揺らぎの散乱機構。(b) 電荷ループ秩序をもたらす電子正孔対凝縮。(c) 反強的な(M点)電荷ループ秩序が出現。

更に、最近の実験により、 AV_3Sb_5 におけるバンド/電荷ループ秩序相が、磁場や圧力・一軸歪に対して非常に敏感に応答することが明らかになってきた。特に、電荷ループ秩序の転移温度が磁場や一軸歪によって顕著な増大を示すことが報告された[参考3]が、これを説明できる理論はなかった。本研究では、Ginzburg-Landau 理論(GL)に基づき、磁場/一軸歪による AV_3Sb_5 の多重量子相の制御機構を見出した。特に、GL係数をミクロに決定することで、外部磁場・バンド秩

序・電荷ループ秩序変数の結合項 $F \sim a \eta z \phi$ が vHS-filling 付近で非常に大きくなることを見出した。これにより、C2 ネマティック状態が安定化(図 2a)するとともに、電荷ループ秩序の転移温度が、外部磁場/歪によって顕著に増大することを見出した(図 2b)。本成果は、電荷ループ秩序の外場による一般的な制御機構として、今後の実験分野の発展に大きく貢献すると期待される。

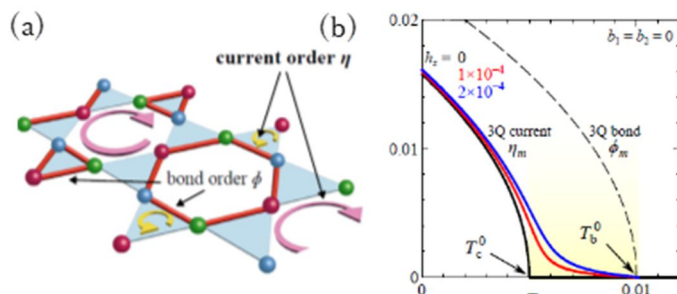


図 2(a) 電荷ループ秩序とボンド秩序の共存状態。(b) 磁場によって電荷ループ秩序の T_c が急激に誘起される(赤青線)。

更に、電荷ループ秩序やボンド秩序が発現した時に特異的にみられる非相反伝導度の解析をおこなった。電場の 2 次 に比例した電圧 $V(2)$ が面直磁場の向きによって符号を変えるという結果が、実験によって観測されているが、その微視的導出は不十分であった。我々は、電荷ループ秩序の秩序変数を考慮した非相反電気伝導度の解析を行うことで、面直磁場によって符号反転する $V(2)$ の解析的な導出をおこなった。以上の研究成果は、論文 3 編[1-3]として発表を行った。

[1] R. Tazai, Y. Yamakawa and H. Kontani, “Charge-loop current order and Z3 nematicity mediated by bond-order fluctuations in kagome metal AV3Sb(A=Cs,Rb,K)”, Nat. Commun. 14,7845 (2023).

[2] R. Tazai, Y. Yamakawa, S. Onari, and H. Kontani, “Mechanism of exotic density-wave and beyond-Migdal unconventional superconductivity in kagome metal AV3Sb5 (A=K,Rb,Cs)”, Sci. Adv, 8, eabl4108 (2022).

[3] R. Tazai, Y. Yamakawa and H. Kontani, “Drastic magnetic-field-induced chiral current order and emergent current-bond-field interplay in kagome metal AV3Sb5 (A=Cs,Rb,K)”, Proc. Natl. Acad. of Sci. (PNAS) 121, e2303476121 (2024).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Tazai Rina, Matsubara Shun, Yamakawa Youichi, Onari Seiichiro, Kontani Hiroshi	4. 巻 107
2. 論文標題 Rigorous formalism for unconventional symmetry breaking in Fermi liquid theory and its application to nematicity in FeSe	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.035137	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tazai Rina, Yamakawa Youichi, Onari Seiichiro, Kontani Hiroshi	4. 巻 8
2. 論文標題 Mechanism of exotic density-wave and beyond-Migdal unconventional superconductivity in kagome metal AV_3Sb_5 ($A = K, Rb, Cs$)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.abl4108	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tazai Rina, Yamakawa Youichi, Tsuchiizu Masahisa, Kontani Hiroshi	4. 巻 3
2. 論文標題 Prediction of pseudogap formation due to d-wave bond-order in organic superconductor $(BEDT-TTF)_2X$	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 L022014/1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.L022014	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Tazai Rina, Yamakawa Youichi, Tsuchiizu Masahisa, Kontani Hiroshi	4. 巻 90
2. 論文標題 d- and p-wave Quantum Liquid Crystal Orders in Cuprate Superconductors, $(BEDT-TTF)_2X$, and Coupled Chain Hubbard Models: Functional-renormalization-group Analysis	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 111012 ~ 111012
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.111012	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tazai Rina, Yamakawa Youichi, Kontani Hiroshi	4. 巻 103
2. 論文標題 Emergence of charge loop current in the geometrically frustrated Hubbard model: A functional renormalization group study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L161112/1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.L161112	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 田財里奈, 大成誠一郎, 紺谷浩	4. 巻 3月号
2. 論文標題 金属電子系における新規な自発的対称性の破れ	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 日本物理学会学会誌「解説」	6. 最初と最後の頁 145-154
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tazai Rina, Yamakawa Youichi, Kontani Hiroshi	4. 巻 103
2. 論文標題 Emergence of charge loop current in the geometrically frustrated Hubbard model: A functional renormalization group study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 161112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.L161112	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計13件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 田財里奈, 山川洋一, 大成誠一郎, 紺谷浩
2. 発表標題 Origin of superconductivity and CDW with/without time-reversal-symmetry breaking in kagome metals AV ₃ Sb ₅ (A=K,Rb,CS)
3. 学会等名 29th international conference on low temperature physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田財里奈, 山川洋一, 大成誠一郎, 紺谷浩
2. 発表標題 Non-Trivial Interplay between Unconventional CDW and Superconductivity in Kagome Metal AV3Sb5
3. 学会等名 the Materials and Mechanisms of Superconductivity (M2S) conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田財里奈
2. 発表標題 Permanent Loop Current in Strongly Correlated Electron Systems based on fRG
3. 学会等名 FRG workshop at RIKEN (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 田財 里奈, 小川明里, 山川洋一, 大成誠一郎, 紺谷浩
2. 発表標題 カゴメ超伝導体AV3Sb5における時間反転対称性の破れとネマティック相の起源
3. 学会等名 基研研究会「非自明な電子状態で発現する超伝導現象の新しい潮流」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田財里奈, 山川洋一, 大成誠一郎, 紺谷浩
2. 発表標題 カゴメ金属AV3Sb5における電荷秩序・超伝導・時間反転対称性の破れの起源
3. 学会等名 日本物理学会 秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田財里奈
2. 発表標題 Unified Description of Bond and Charge/Spin Loop-Current Orders
3. 学会等名 QLC international conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田財里奈
2. 発表標題 新規カゴメ金属AV3Sb5における超伝導・電荷秩序相の研究
3. 学会等名 基研研究会:非自明な電子状態が生み出す超伝導現象の最前線:新たな挑戦と展望 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田財里奈
2. 発表標題 低次元強相関電子系における超伝導・量子相転移の理論研究
3. 学会等名 ISSP woman 's week 2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田財里奈
2. 発表標題 Novel relation between superconductivity and CDW phase in kagome metal AV3Sb5
3. 学会等名 APS march meeting (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田財里奈、山川洋一、紺谷浩
2. 発表標題 heory of Charge Loop Current in q1D Systems based on Functional Renormalization Group Study
3. 学会等名 APS march meeting
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田財里奈
2. 発表標題 重い電子系CeCu ₂ Si ₂ における s 波超伝導相の理論研究
3. 学会等名 高温超伝導フォーラム,
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田財里奈、紺谷浩
2. 発表標題 磁気フラストレーション系の電荷ループ相の理論研究
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田財里奈
2. 発表標題 強相関電子系における各種カレント秩序相の微視的機構の研究
3. 学会等名 基研研究会「非従来型超伝導研究の最前線：多様性と普遍性（招待講演）」
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------