

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 11 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2023

課題番号：17K05543

研究課題名(和文)多軌道高次多体効果による新規複合揺らぎ理論

研究課題名(英文) Novel multi-fluctuation theory by a multi-orbital higher-order many-body effect

研究代表者

大成 誠一郎 (Seiichiro, Onari)

名古屋大学・理学研究科・准教授

研究者番号：80402535

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：1. 鉄系超伝導体の多彩なネマティック秩序の解明：高ホールドーブ系では $45^\circ$ 回転したネマティック秩序、BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>やNaFeAsにおいては構造等転移温度以上から隠れたネマティック秩序が出現することが高次多体効果を取り入れたDW方程式を解くことで統一的に理解できた。  
2. 魔法角ツイスト2層グラフェン(MATBG)のネマティック秩序：MATBGにおいてはスピン・バレーの混成自由度によるSU(4)対称性が局所クーロン相互作用に存在する。そのSU(4)揺らぎ間の干渉効果により、ネマティックボンダ秩序が出現することを示した。  
以上のように多軌道高次多体効果により、新規秩序が説明されることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

鉄系超伝導体や魔法角ツイスト2層グラフェンに代表される多軌道強相関電子系においては、超伝導相、ネマティック秩序等多彩な相図が出現する。本研究結果により、多軌道系の高次多体効果をミクロから取り扱うことで、物質依存性まで含めて統一的に相図を理解することが出来ることが示された。つまり、本研究で取り扱った高次多体効果は、強相関電子系全体の理解に繋がることを示唆される。強相関電子系は新規機能物質の宝庫であるため、強相関電子系の理解は社会の発展に寄与すると期待している。

研究成果の概要(英文)：1. Clarification of the diverse nematic order in iron-based superconductors: the  $45^\circ$  rotated nematic order in highly hole-doped systems and the hidden nematic order in BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> and NaFeAs above the structural transition temperature were understood in a unified manner by solving the DW equation, which incorporates higher-order many-body effects.  
2. Nematic order in magic-angle twisted bilayer graphene (MATBG): In MATBG, SU(4) symmetry exists in the local Coulomb interaction due to the composite spin and valley degrees of freedom. It is shown that the SU(4)-fluctuation interference causes the nematic bond order.  
In summary, it is shown that the novel order is explained by the multi-orbital higher-order many-body effect.

研究分野：強相関電子系の超伝導・輸送現象

キーワード：強相関電子系 鉄系超伝導体 ツイスト2層グラフェン Ni酸化物 ネマティック秩序 軌道秩序

### 1. 研究開始当初の背景

鉄系超伝導体は 2008 年に東京工業大学の細野研で発見され、超伝導転移温度( $T_c$ )が最大 55K にも到達するということから、国内外で非常に精力的に研究されてきた。図 1 に典型的な鉄系超伝導体の相図を示す。温度  $T = T_S$  において電子系が非磁性のまま回転対称性を破る相転移(斜方晶構造相転移)が実現し、液晶の言葉を借りて「電子ネマティック状態」と呼ばれている。図 1 の相図より電子ネマティック状態は「高温超伝導の母状態」であり、その正体解明が、鉄系超伝導体における最重要課題の一つとなった。典型的な鉄系超伝導体では  $T_S$  より数 K ~ 数 10K 低温の  $T = T_N$  で反強磁性秩序が生じるが、FeSe においては磁性秩序が生じず ( $T_N < 0$ )、これらの物質依存性を统一的に理解可能な理論が求められてきた。

電子ネマティック状態は従来の平均場近似レベルの理論では、全く説明出来ないという重大な困難があった。そこで我々は、平均場近似を超える非従来型の高次多体効果を考慮した自己無撞着バーテックス補正(SC-VC)理論を新規に開発し、解析を行った。その結果、軌道・スピン間のモード結合が生じ、図 2 に示されるような伝導を担う鉄の  $dxz$  軌道と  $dyz$  軌道が非等価となる軌道秩序が現れることが明らかになった。この「軌道秩序」に起因する回転対称性の自発的破れにより、電子ネマティック状態が自然に説明される。

実際に典型的な鉄系超伝導体において SC-VC 理論を用いると、軌道・スピン間のモード結合により、軌道秩序に対応する  $dxz$  軌道と  $dyz$  軌道の電子数の差の感受率(軌道揺らぎ)がスピン感受率(スピン揺らぎ)と協奏して発達し、図 1 と整合する  $T_S \geq T_N$  を再現することが分かった。一方、FeSe において SC-VC 理論を用いると、スピン揺らぎが小さいにもかかわらず軌道揺らぎが増大し、軌道秩序のみが出現することを再現した。

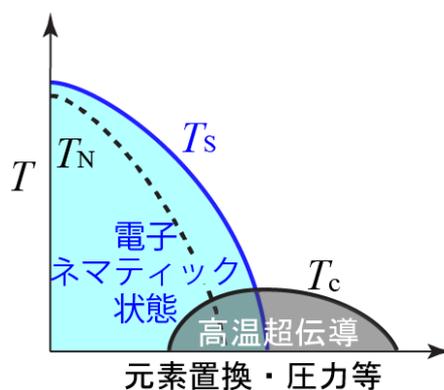


図 1 典型的な鉄系超伝導体の相図

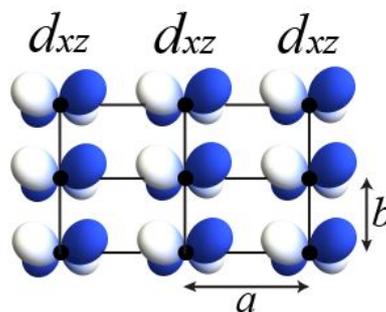


図 2 軌道秩序の実空間表示

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、非従来型の高次多体効果であるバーテックス補正を考慮することで多軌道強相関電子系の新規物理現象および新規高温超伝導発現機構を解明することである。近年、我々は典型的な多軌道系である鉄系超伝導体においてバーテックス補正を考慮することにより、軌道揺らぎとスピン揺らぎの結合効果が起こることを明らかとした。これにより、長年の謎であった鉄系超伝導体の斜方晶構造相転移や高温超伝導のメカニズムの理解が進んだ。更にバーテックス補正の理論(SC-VC 理論)を拡張することにより、軌道揺らぎ・スピン揺らぎ・その他の揺らぎの干渉効果(複合揺らぎ干渉効果)の研究を行う。

### 3. 研究の方法

従来の SC-VC 理論では  $q=0$  の一様かつ局所秩序のみを取り扱うことが出来た。非一様かつ非局所な秩序を構造因子を用いて取り扱えるように、SC-VC 法を拡張し Density wave (DW) 方程式を開発した。DW 方程式の固有値は 1 になるときが秩序が発現する温度に対応し、 $\delta t_2$  が大きな秩序ほど発現しやすい秩序に対応する。また、DW 方程式の固有関数は構造因子であり、構造因子の  $q$  依存性から秩序波数が分かり、構造因子の  $k$  依存性が非局所秩序を記述する。DW 方程式により、高次多体効果に由来する揺らぎ間の干渉効果が引き起こされ、従来の平均場近似等では得られなかった非一様非局所秩序が説明される。

具体的には、高ホールドープ鉄系超伝導体の  $45^\circ$  回転したネマティック秩序、鉄系超伝導体  $BaFe_2As_2$  で観測された隠れたネマティック秩序、新規強相関電子系魔法角ツイスト 2 層グラフェンのネマティック秩序、Ni 酸化物の 3 次元 CDW 秩序等の研究を行った。

### 4. 研究成果

(1) 高ホールドープ鉄系超伝導体の  $45^\circ$  回転したネマティック秩序  
高ホールドープ鉄系超伝導体  $AFe_2As_2$  ( $A=Cs, Rb$ ) において、通常の電子ネマティック秩序とは  $45^\circ$  対称軸が回転した特異なネマティック状

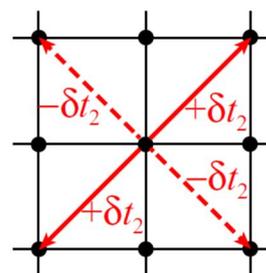


図 3 次近接サイト間ボンド秩序

態が実験により報告された。この未解明なネマティック状態を解明するために DW 方程式を用いて解析を行った。結果として、図 3 に示すような実験結果と整合する次近接サイト間ボンド秩序（飛び移り積分の変調）が起きることが分かった。高ホールドープ系においては  $d_{xy}$  軌道からなるホール面が大きいこと、このホール面が高次多体効果に重要となり、主に  $d_{xy}$  軌道のボンド秩序が現れた。

(2) 鉄系超伝導体  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  の隠れたネマティック秩序  
 $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  において、構造相転移温度  $T_s$  よりも高い温度である  $T^*$  からネマティック状態が現れていることが磁場中トルク等の実験により明らかとなっている。この  $T_s < T < T^*$  のネマティック状態の起源としては一軸ストレスによる  $T_s$  以下のネマティック状態の前駆状態や未知の相転移が示唆されているが、長年の未解決問題であった。また、 $T < T^*$  において擬ギャップやシャドウバンドが観測されており、我々は  $T_s < T < T^*$  のネマティック状態の正体は反強的ネマティック状態であると予想した。実際に、DW 方程式を用いて、ネマティック状態の計算を行ったところ、 $q=0$  の強的ネマティック秩序が現れる温度よりも高温で反強的ネマティック秩序が現れることが分かった。反強的ネマティック秩序は M 点周りの  $d_{xy}$  軌道フェルミ面が大きいことに起因している。これらの結果は磁場中トルクの実験から得られた相図を再現する。また、得られた反強的ネマティック状態により、擬ギャップやシャドウバンドが説明されることを示した。更に、反強的ネマティック秩序に誘起されるネマティック異方性の温度依存性は図 4 で示されるように線形であり、実験結果と整合する。

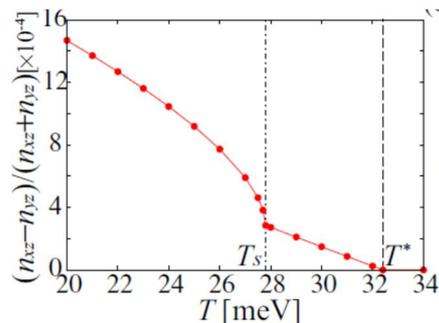


図 4  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  のネマティック異方性の温度依存性

(3) 魔法角ツイスト 2 層グラフェンのネマティック秩序  
 近年、新規強相関電子系魔法角 ( $1.1^\circ$ ) ツイスト 2 層グラフェン (MATBG) において、超伝導状態、モット絶縁体、異常量子ホール状態、ネマティック状態等が観測され、大変注目を集めている。これらの多様な相は、結晶構造に長周期のモアレ模様が現れ、非常にバンド幅の狭くフラットなバンドをもつ強相関電子系であることに起因している。このバンドには van Hove 特異点もあり、電子相関が重要となる可能性が高い。特にネマティック状態はフェルミエネルギーが van Hove 特異点近傍にある場合、顕著に表れる。この系の特徴として、グラフェン等で現れるバレー自由度  $\pm 1$  がある。バレー自由度は軌道角運動量に対応し、時間反転操作で符号変化し移り変わる。

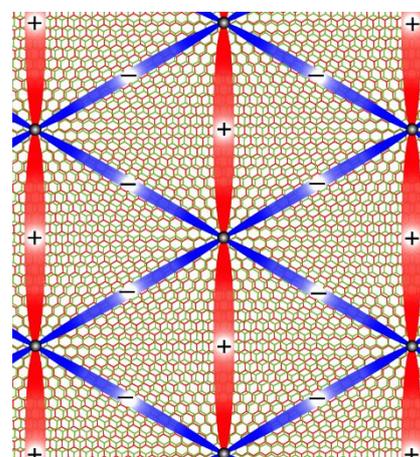


図 5 MATBG のネマティックボンド秩序

我々は MATBG のネマティック状態の起源を解明するために、鉄系超伝導体や銅酸化物の研究で発展した電子相関の高次多体効果に基づくパーテックス補正理論を用いて解析を行った。その際に、大阪大学の越野らによって得られた、第一原理計算に基づいた 4 軌道モデルを用い、DW 方程式により、ネマティック状態の解析を行った。MATBG の局所クーロン相互作用にはスピン・バレー複合自由度に対して  $\text{SU}(4)$  対称性があるため、多チャンネルの  $\text{SU}(4)$  揺らぎが発達する。結果として、 $\text{SU}(4)$  揺らぎ間の干渉効果により、フェルミエネルギーが van Hove 特異点近傍において、STM 実験を良く再現する  $q=0$  の強的ネマティック秩序が現れることがわかった。この強的ネマティック秩序はほぼ 2 回対称であり、ボンド秩序(図 5)とバレー流が混在した新規な状態であることも分かった。

#### (4) Ni 酸化物の 3 次元 CDW 秩序

近年発見された無限層ニッケル酸化物  $\text{Nd}_{1-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_2$  において超伝導 ( $x=0.2$  で超伝導転移温度 15K) が出現することが報告された。  $\text{Nd}_{1-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_2$  の電子状態としては Ni の  $d_{x^2-y^2}$  軌道がフェルミ面を構成するため、銅酸化物に似た構造を持つが、3 次元構造を持ち Nd の  $d$  軌道からなるフェルミ面も現れるため銅酸化物と異なる点も多い。また、  $\text{Nd}_{1-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_2$  ( $x < 0.1$ ) において約 3 倍周期の CDW が現れることが報告された。この CDW に隣接して超伝導相が現れ、CDW の量子臨界点近傍で超伝導の  $T_c$  が最大になることから、CDW の量子揺らぎと超伝導発現機構が密接に関係していることが予想される。さらに、CDW の量子臨界点近傍で、非フェルミ流体的輸送現象(電気抵抗が  $T$  に比例)が観測されており、銅酸化物における反強磁性量子臨界点や鉄系超伝導体におけるネマティック量子臨界点との関係も興味深い。

そこで、 $\text{NdNiO}_2$  の 3 倍周期 CDW の起源を明らかにするために、3 次元タイトバインディングモデルを作成し DW 方程式を解析した。結果として、図 6 のような 3 次元的な 3 倍周期のボンド秩序がスピン揺らぎ干渉機構により発現することが示された。この結果は実験で観測された 3 倍周期 CDW と整合する。得られた結果は銅酸化物 YBCO における結果と類似性があることが分かった。また、3 次元的な 3 倍周期のボンド秩序が発現するためには、スピン感受率のピークだけではなく、フラットなフェルミ面間の 3 次元的なネスティングベクトルが重要であることが分かった。

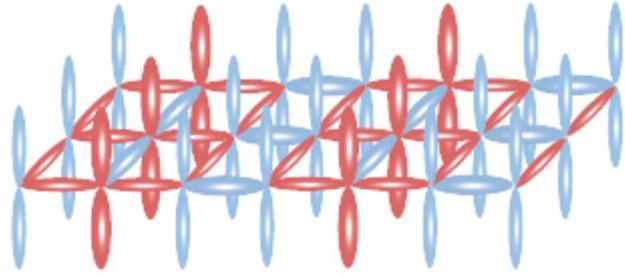


図 6 Ni 酸化物の 3 倍周期ボンド秩序

以上のように様々な強相関電子系のネマティック秩序や CDW 秩序が統一的に DW 方程式で理解できることを示した。その際に、高次多体効果に由来する揺らぎ間の干渉効果が重要であることが明らかとなった。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計22件（うち査読付論文 22件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 3件）

|   |                               |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名<br>Seiichiro Onari and Hiroshi Kontani   | 4. 巻<br>10                    |
| 2. 論文標題<br>Diverse Exotic Orders and Fermiology in Fe-Based Superconductors: A Unified Mechanism for B1g/B2g Nematicity in FeSe/(Cs,Rb)Fe2As2 and Smectic Order in BaFe2As2 | 5. 発行年<br>2022年               |
| 3. 雑誌名<br>Frontiers in Physics  | 6. 最初と最後の頁<br>915619_1-15     |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.3389/fphy.2022.915619  | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |
| 1. 著者名<br>Christopher John Butler, Yuhki Kohsaka, Youichi Yamakawa, Mohammad Saeed Bahramy, Seiichiro Onari, Hiroshi Kontani, Tetsuo Hanaguri, and Shinichi Shamoto         | 4. 巻<br>119                   |
| 2. 論文標題<br>Correlation-driven electronic nematicity in the Dirac semimetal BaNiS2   | 5. 発行年<br>2022年               |
| 3. 雑誌名<br>Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America   | 6. 最初と最後の頁<br>e2212730119_1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1073/pnas.2212730119   | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |
| 1. 著者名<br>Rina Tazai, Shun Matsubara, Youichi Yamakawa, Seiichiro Onari, and Hiroshi Kontani  | 4. 巻<br>107                   |
| 2. 論文標題<br>A Rigorous Formalism of Unconventional Symmetry Breaking in Fermi Liquid Theory and Its Application to Nematicity in FeSe  | 5. 発行年<br>2023年               |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B   | 6. 最初と最後の頁<br>035137_1-16     |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.107.035137   | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |
| 1. 著者名<br>Kontani Hiroshi, Tazai Rina, Yamakawa Youichi, Onari Seiichiro  | 4. 巻<br>70                    |
| 2. 論文標題<br>Unconventional density waves and superconductivities in Fe-based superconductors and other strongly correlated electron systems                                  | 5. 発行年<br>2021年               |
| 3. 雑誌名<br>Advances in Physics   | 6. 最初と最後の頁<br>355 ~ 443       |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1080/00018732.2022.2144590   | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Ando Satoshi, Yamakawa Youichi, Onari Seiichiro, Kontani Hiroshi                                     | 4. 巻<br>90               |
| 2. 論文標題<br>Development of Spin Fluctuations under the Presence of d-wave Bond Order in Cuprate Superconductors | 5. 発行年<br>2021年          |
| 3. 雑誌名<br>Journal of the Physical Society of Japan   | 6. 最初と最後の頁<br>063704_1~5 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.7566/JPSJ.90.063704   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                           |
|--|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Hirata Toru, Yamakawa Youichi, Onari Seiichiro, Kontani Hiroshi                                      | 4. 巻<br>3                 |
| 2. 論文標題<br>Unconventional orbital charge density wave mechanism in the transition metal dichalcogenide 1T-TaS2 | 5. 発行年<br>2021年           |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review Research   | 6. 最初と最後の頁<br>L032053_1~6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevResearch.3.L032053  | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|   |                         |
|---|-------------------------|
| 1. 著者名<br>Shimajima T., Motoyui Y., Taniuchi T., Bareille C., Onari S., Kontani H., Nakajima M., Kasahara S., Shibauchi T., Matsuda Y., Shin S. | 4. 巻<br>373             |
| 2. 論文標題<br>Discovery of mesoscopic nematicity wave in iron-based superconductors  | 5. 発行年<br>2021年         |
| 3. 雑誌名<br>Science   | 6. 最初と最後の頁<br>1122~1125 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1126/science.abd6701   | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>-               |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Onari Seiichiro, Kontani Hiroshi  | 4. 巻<br>128              |
| 2. 論文標題<br>SU(4) Valley+Spin Fluctuation Interference Mechanism for Nematic Order in Magic-Angle Twisted Bilayer Graphene: The Impact of Vertex Corrections | 5. 発行年<br>2022年          |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review Letters   | 6. 最初と最後の頁<br>066401_1~6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevLett.128.066401  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                            |
|--|----------------------------|
| 1. 著者名<br>Tazai Rina, Yamakawa Youichi, Onari Seiichiro, Kontani Hiroshi   | 4. 巻<br>8                  |
| 2. 論文標題<br>Mechanism of exotic density-wave and beyond-Migdal unconventional superconductivity in kagome metal AV <sub>3</sub> Sb <sub>5</sub> (A = K, Rb, Cs) | 5. 発行年<br>2022年            |
| 3. 雑誌名<br>Science Advances   | 6. 最初と最後の頁<br>eab14108_1~9 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1126/sciadv.abl4108   | 査読の有無<br>有                 |
| オープンアクセス<br>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<br>-                  |

|   |                           |
|---|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Kontani Hiroshi, Yamakawa Youichi, Tazai Rina, Onari Seiichiro  | 4. 巻<br>3                 |
| 2. 論文標題<br>Odd-parity spin-loop-current order mediated by transverse spin fluctuations in cuprates and related electron systems | 5. 発行年<br>2021年           |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review Research  | 6. 最初と最後の頁<br>013127_1-12 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevResearch.3.013127  | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|  |                             |
|--|-----------------------------|
| 1. 著者名<br>Kawaguchi Kouki, Onari Seiichiro, Kontani Hiroshi  | 4. 巻<br>89                  |
| 2. 論文標題<br>Spin-fluctuation-driven B <sub>1g</sub> and B <sub>2g</sub> Bond Order and Induced In-plane Anisotropy in Magnetic Susceptibility in Cuprate Superconductors: Impact of Hot-/Cold-spot Structure on Bond-order Symmetry | 5. 発行年<br>2020年             |
| 3. 雑誌名<br>Journal of the Physical Society of Japan   | 6. 最初と最後の頁<br>124704-124704 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.7566/JPSJ.89.124704   | 査読の有無<br>有                  |
| オープンアクセス<br>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<br>-                   |

|  |                             |
|--|-----------------------------|
| 1. 著者名<br>Onari Seiichiro, Kontani Hiroshi   | 4. 巻<br>2                   |
| 2. 論文標題<br>Hidden antiferromagnetic order in Fe-based superconductor BaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> and NaFeAs above T <sub>S</sub> | 5. 発行年<br>2020年             |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review Research   | 6. 最初と最後の頁<br>042005(R)_1-6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevResearch.2.042005   | 査読の有無<br>有                  |
| オープンアクセス<br>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<br>-                   |

|   |                             |
|---|-----------------------------|
| 1. 著者名<br>Yamakawa Youichi, Onari Seiichiro, Kontani Hiroshi  | 4. 巻<br>102                 |
| 2. 論文標題<br>Doping effects on electronic states in electron-doped FeSe: Impact of self-energy and vertex corrections | 5. 発行年<br>2020年             |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B   | 6. 最初と最後の頁<br>081108(R)_1-6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.102.081108   | 査読の有無<br>有                  |
| オープンアクセス<br>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<br>-                   |

|  |                               |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名<br>Oda Koushi, Tanaka Kenta K., Onari Seiichiro, Ichioka Masanori   | 4. 巻<br>88                    |
| 2. 論文標題<br>Paramagnetic Pair-Breaking in Spin-Triplet Superconductors with Spin-Orbit Coupling: Application to Sr2RuO4 | 5. 発行年<br>2019年               |
| 3. 雑誌名<br>Journal of the Physical Society of Japan   | 6. 最初と最後の頁<br>064707 ~ 064707 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.7566/JPSJ.88.064707   | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |

|  |                               |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名<br>Yamamoto Yoshiya, Yamaoka Hitoshi, Onari Seiichiro, Yoshida Masahiro, Hirao Naohisa, Kawaguchi Saori, Oishi Yasuo, Miao Xiao, Kubozono Yoshihiro, Lin Jung-Fu, Hiraoka Nozomu, Ishii Hirofumi, Liao Yen-Fa, Tsuei Ku-Ding, Mizuki Jun'ichiro | 4. 巻<br>88                    |
| 2. 論文標題<br>Study of the Pressure-Induced Second Superconducting Phase of (NH3)yCs0.4FeSe with Double-Dome Superconductivity  | 5. 発行年<br>2019年               |
| 3. 雑誌名<br>Journal of the Physical Society of Japan   | 6. 最初と最後の頁<br>074704 ~ 074704 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.7566/JPSJ.88.074704   | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |

|   |                               |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名<br>Onari Seiichiro, Kontani Hiroshi  | 4. 巻<br>100                   |
| 2. 論文標題<br>Origin of diverse nematic orders in Fe-based superconductors: 45° rotated nematicity in AFe2As2 (A=Cs, Rb) | 5. 発行年<br>2019年               |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B Rapid Communication   | 6. 最初と最後の頁<br>020507 ~ 020507 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.100.020507   | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Tanaka Kenta K., Ichioka Masanori, Onari Seiichiro  | 4. 巻<br>97               |
| 2. 論文標題<br>Local NMR relaxation rates $T_1^{-1}$ and $T_2^{-1}$ depending on the d-vector symmetry in the vortex state of chiral and helical p-wave superconductors | 5. 発行年<br>2018年          |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B   | 6. 最初と最後の頁<br>134507_1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.97.134507  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Kenta K. Tanaka, Masanori Ichioka, Seiichiro Onari  | 4. 巻<br>95               |
| 2. 論文標題<br>Spin-polarized local density of states in the vortex state of helical p-wave superconductors | 5. 発行年<br>2017年          |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B   | 6. 最初と最後の頁<br>134502_1-6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.95.134502  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                           |
|--|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Hitoshi Yamaoka, Yoshiya Yamamoto, Jung-Fu Lin, Junjie J. Wu, Xiancheng Wang, Changqing Jin, Masahiro Yoshida, Seiichiro Onari, Shigeyuki Ishida Yoshinori Tsuchiya, Nao Takeshita, Nozomu Hiraoka, Hirofumi Ishii, Ku-Ding Tsuei, Paul Chow, Yuming Xiao, Jun'ichiro Mizuki | 4. 巻<br>96                |
| 2. 論文標題<br>Electronic structures and spin states of BaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> and SrFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> probed by x-ray emission spectroscopy at Fe and As K-absorption edges  | 5. 発行年<br>2017年           |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B  | 6. 最初と最後の頁<br>085129_1-12 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.96.085129   | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>該当する              |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Masahiro Nabeta, Kenta K. Tanaka, Seiichiro Onari, Masanori Ichioka  | 4. 巻<br>96               |
| 2. 論文標題<br>Pair breaking of multigap superconductivity under parallel magnetic fields in the electric-field-induced surface metallic state | 5. 発行年<br>2017年          |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B  | 6. 最初と最後の頁<br>094522_1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.96.094522   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Seiichiro Onari and Hiroshi Kontani   | 4. 巻<br>96               |
| 2. 論文標題<br>In-plane anisotropy of transport coefficients in electronic nematic states: Universal origin of nematicity in Fe-based superconductors | 5. 発行年<br>2017年          |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B   | 6. 最初と最後の頁<br>094527_1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.96.094527  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Kojiro Honkawa, Seiichiro Onari             | 4. 巻<br>87               |
| 2. 論文標題<br>Orbital Order in Two-Orbital Hubbard Model | 5. 発行年<br>2018年          |
| 3. 雑誌名<br>Journal of the Physical Society of Japan    | 6. 最初と最後の頁<br>034703_1-5 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.7566/JPSJ.87.034703    | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

〔学会発表〕 計29件 (うち招待講演 6件 / うち国際学会 5件)

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>S. Onari and H. Kontani  |
| 2. 発表標題<br>SU(4) valley+spin fluctuation interference mechanism for nematic order in magic-angle twisted bilayer graphene |
| 3. 学会等名<br>LT29 (国際学会)  |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎、紺谷浩   |
| 2. 発表標題<br>無限層ニッケル酸化物超伝導体NdNiO <sub>2</sub> における3倍周期CDWの理論解析 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会  |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎、紺谷浩                                    |
| 2. 発表標題<br>3次元強相関電子系NdNiO <sub>2</sub> における3倍周期CDW秩序の解析 |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「量子液晶の物性科学」 令和4年度領域研究会                |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎   |
| 2. 発表標題<br>ねじれ2層グラフェンにおける多チャンネルSU(4)相互作用がもたらす新規量子相転移機構     |
| 3. 学会等名<br>京都大学基礎物理学研究所研究会「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<br>2022年  |

|                                   |
|-----------------------------------|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎, 山川洋一, 田財里奈, 紺谷浩 |
| 2. 発表標題<br>カゴメ金属における3次元CDW秩序の理論解析 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会                 |
| 4. 発表年<br>2023年                   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎, 紺谷浩                                      |
| 2. 発表標題<br>SU(4)揺らぎ干渉機構によるねじれ2層グラフェンのNematic秩序: 鉄系超伝導体との比較 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会 第77回年次大会                                 |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎, 紺谷浩                               |
| 2. 発表標題<br>魔法角ツイスト2層グラフェンにおけるネマティック秩序: SU(4)揺らぎ干渉機構 |
| 3. 学会等名<br>高温超伝導フォーラム第9回会合                          |
| 4. 発表年<br>2022年                                     |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>S. Onari, H. Kontani  |
| 2. 発表標題<br>SU(4) fluctuation interference mechanism of nematic order in magic angle twisted bilayer graphene |
| 3. 学会等名<br>令和3年度 新学術領域研究「量子液晶の物性科学」領域研究会   |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎, 紺谷浩  |
| 2. 発表標題<br>Fe(Se,Te)とツイスト2層グラフェンのネマティック状態の比較                   |
| 3. 学会等名<br>京都大学基礎物理学研究所研究会 「非自明な電子状態がみ生み出す超伝導現象の最前線: 新たな挑戦と展望」 |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎, 紺谷浩                              |
| 2. 発表標題<br>FeSe <sub>1-x</sub> Texのネマティック臨界現象の理論解析 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会                                  |
| 4. 発表年<br>2021年                                    |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Seiichiro Onari, Youichi Yamakawa, and Hiroshi Kontani                    |
| 2. 発表標題<br>Analysis of phase diagram in FeSe <sub>1-x</sub> Te <sub>x</sub>          |
| 3. 学会等名<br>International Conference on Quantum Liquid Crystals 2021 (QLC2021) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Seiichiro Onari, Hiroshi Kontani  |
| 2. 発表標題<br>Nematic order in twisted bilayer graphene by valley + spin fluctuation interference |
| 3. 学会等名<br>American Physical Society March Meeting 2021 (国際学会)                                 |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|                                      |
|--------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎、紺谷浩                 |
| 2. 発表標題<br>ツイスト2層グラフェンにおける強相関電子状態の解析 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会                    |
| 4. 発表年<br>2021年                      |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>ツイスト2層グラフェンのネマティック状態及び超伝導状態の解析 |
| 2. 発表標題<br>大成誠一郎、紺谷浩                      |
| 3. 学会等名<br>高温超伝導フォーラム                     |
| 4. 発表年<br>2021年                           |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎, 紺谷浩  |
| 2. 発表標題<br>Twisted bilayer graphene におけるネマティック秩序発現機構: ボンド秩序とバレーカロントの共存 |
| 3. 学会等名<br>基研研究会「高温超伝導・非従来型超伝導研究の最前線: 多様性と普遍性」                         |
| 4. 発表年<br>2020年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎, 紺谷浩                  |
| 2. 発表標題<br>ツイスト2層グラフェンにおけるネマティック秩序発現機構 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会                      |
| 4. 発表年<br>2020年                        |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Seiichiro Onari  |
| 2. 発表標題<br>Quest for the origin of various nematicities in Fe-based superconductors                   |
| 3. 学会等名<br>Research Frontier of Advanced Spectroscopies for Correlated Electron Systems (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2019年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Seiichiro Onari, Hiroshi Kontani  |
| 2. 発表標題<br>Theoretical prediction of antiferro nematic order above TS in BaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> |
| 3. 学会等名<br>SNS 2019 (国際学会)   |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎, 紺谷浩  |
| 2. 発表標題<br>BaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> における多段ネマティック秩序の理論：保存近似の適用 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会  |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎   |
| 2. 発表標題<br>鉄系超伝導体における多様なネマティック秩序および超伝導発現機構                   |
| 3. 学会等名<br>京都大学基礎物理学研究所研究会「電子相関が生み出す超伝導現象の未解決問題と新しい潮流」(招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎   |
| 2. 発表標題<br>CsFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> における特異なB <sub>2</sub> gネマティック揺らぎの解析 |
| 3. 学会等名<br>京都大学基礎物理学研究所研究会「電子相関が生み出す新規な秩序と超伝導現象：トポロジー、液晶状態、動的現象」(招待講演)           |
| 4. 発表年<br>2018年  |

|                                   |
|-----------------------------------|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎, 紺谷浩             |
| 2. 発表標題<br>鉄系超伝導体におけるネマティック秩序の多様性 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会                 |
| 4. 発表年<br>2018年                   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎、紺谷浩                            |
| 2. 発表標題<br>鉄系超伝導体における強的・反強的ネマティック秩序             |
| 3. 学会等名<br>東京大学物性研究所 短期研究会 「量子多体効果が生み出す液晶的電子状態」 |
| 4. 発表年<br>2018年                                 |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎                                    |
| 2. 発表標題<br>強相関電子系における多様なネマティック秩序                    |
| 3. 学会等名<br>つくば-柏-本郷 超伝導かけはしプロジェクト ワークショップ(2) (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年                                     |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎                          |
| 2. 発表標題<br>非従来型超伝導体における未解決問題：電荷・軌道揺らぎの重要性 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会 (招待講演)                  |
| 4. 発表年<br>2019年                           |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎、紺谷浩   |
| 2. 発表標題<br>BaFe <sub>2</sub> As <sub>2</sub> における強的・反強的ネマティック状態の理論 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会  |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>大成誠一郎、 紺谷浩                   |
| 2. 発表標題<br>FeSeのネマティック状態で誘起される新規な軌道秩序状態 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会                       |
| 4. 発表年<br>2017年                         |

|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>本川昂次朗、大成誠一郎                |
| 2. 発表標題<br>2軌道ハバードモデルにおける軌道秩序および超伝導状態 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会                     |
| 4. 発表年<br>2017年                       |

|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>紺谷浩、大成誠一郎、山川洋一             |
| 2. 発表標題<br>鉄系超伝導体におけるネマティック電荷ボンド秩序の理論 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会                     |
| 4. 発表年<br>2017年                       |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| 氏名<br>(ローマ字氏名)<br>(研究者番号) | 所属研究機関・部局・職<br>(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 |
|---------|---------|
|---------|---------|