

令和 3 年 6 月 23 日現在

機関番号：12401

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2020

課題番号：18K13490

研究課題名（和文）局所的電子相関が誘起する多軌道系の非従来型電子秩序

研究課題名（英文）Unconventional electronic ordering induced by local correlation effects in multiorbital systems

研究代表者

星野 晋太郎（Hoshino, Shintaro）

埼玉大学・理工学研究科・助教

研究者番号：90748394

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：固体中の電子はクーロン相互作用によって互いに影響を及ぼしあっており、個々の粒子の性質からは想像できない多彩な協力現象を生み出す。その一例は自発的対称性の破れをともなう電子系の秩序化である。本研究では通常電子秩序とは質的に異なる、電子相関の効果から生まれる新しい電子秩序に着目した。それを個々の現実系に即して議論するためには、物質の持つ複雑な特性を詳細に考慮する必要がある。本研究では非従来型の軌道秩序や超伝導状態について、現実物質の特徴を取り込んだ解析を行い、多軌道強相関系に特有の電子秩序に関する物性を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で対象とするのは固体中の電子が協力現象によって引き起こす秩序化（自発的対称性の破れ）である。我々の暮らす社会では、電子秩序の例である磁性体や超伝導体などの物質が様々な応用され、豊かな暮らしの基盤となっている。一方で、電子相関効果が顕著になる系では、通常概念では理解できない非従来型電子秩序が存在する。我々はこの特異な秩序現象に注目し、その物性を理論的に研究した。このような知見は、通常電子の秩序化とは異なるものであり、新しい電子物性・機能の開拓につながることを期待できる。

研究成果の概要（英文）：In the presence of the Coulomb repulsive interaction, the electrons in solids are highly entangled quantum-mechanically. As a result, the many-body electronic correlation causes a variety of collective phenomena such as electronic ordering where the symmetry of the system is spontaneously broken. Here, we have studied an unconventional electronic ordering, where the usual concept for the ordering cannot simply be applied. We have considered a material-specific conditions of the strongly correlated electron systems, and have clarified characteristic behaviors of the unconventional orbital ordering and pairing states in p-, d-, f-electron systems, including molecular-based conductors, transition-metal materials, and heavy-electrons systems.

研究分野：物性理論

キーワード：強相関電子系 多軌道系 自発的対称性の破れ 非従来型電子秩序 軌道秩序 超伝導

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

固体中の電子はクーロン相互作用によって互いに影響を及ぼしあっており(電子相関) それゆえ個々の粒子の性質からは想像できない多彩な協力現象を生み出す。特に興味深いのは、自発的対称性の破れをともなう電子系の秩序化であり、その代表例は超伝導現象である。超伝導は電子間の相互作用から生まれるため、同じく電子相関から生じる磁性や軌道の秩序化といった物理も含めて統一的な描像を構築することが、より深い超伝導の理解のために必要である。

我々は特に原子サイト内の電子が軌道自由度をもつ p,d,f 電子系において、電子相関効果から生じる質的に新しい、通常の平均場理論では理解することのできない非従来型電子秩序(composite order)を見出してきた。これまでの研究は、物質群を広くとらえたモデルに基づく研究であった。他方、実際の強相関電子系における物性解明および物質機能を開拓するためには、個々の物質に即した研究が不可欠である。また、これまで f 電子系化合物・遷移金属化合物・分子性化合物のように一見性質の異なる物理系を対象としてきた一方で、composite order のように共通の物理を含む強相関電子現象が明らかになっており、これらの電子秩序を統一的に理解できる可能性が示唆される。本研究課題の核心をなす問いは「多軌道自由度を持つハバード系(遍歴 d,p 電子相関系)と近藤系(局在 f 電子 + 遍歴電子)の非従来型電子秩序は、現実物質ではどのように発現するのか?この電子秩序は p,d,f 電子系という特定の系に依らない普遍的概念で理解できるか?」という点にある。

2. 研究の目的

個々の物質に即して議論するためには、現実系の特徴を詳細に考慮する必要がある。したがって本研究課題では、多軌道強相関電子系モデルに現実物質における複雑性を取り込み、単純化されたモデルと複雑な現実の物質とのギャップを埋めることを目的とする。

3. 研究の方法

強相関電子系を単純化したモデルを基に、第一原理計算から得たバンド構造などの情報を援用して物質の個性を反映させる。そして、上記の特異な物性がどのような状況下で実現するかを、これまでに蓄積された動的平均場理論の知見を駆使して議論する。また、異なる多軌道強相関電子系間のつながりを、両者を包含するモデルから出発して明らかにする。

4. 研究成果

(1) p 電子系の非従来型軌道秩序

フラレン超伝導体ではヤーン・テラー金属という、金属とモット絶縁体の振る舞いが共存した異常金属状態が指摘されている。この状態は、フラレンの分子振動が電子系と結びつくことにより生じる反強磁性フント結合を起源に持つ、非従来型軌道秩序として理解できる可能性が指摘された。本研究では、この秩序状態が実際のフラレン化合物(fcc構造)の物性と整合するかを検証するため、第一原理計算によって得られた電子構造と、動的平均場理論で得られた非従来型軌道秩序に特徴的な自己エネルギーを組み合わせることで、1粒子スペクトルの軌道依存性や輸送係数を詳細に調べた[1]。

1 粒子励起スペクトル構造を見ると、軌道に依存してフェルミ面を持つものと持たないものが存在し、ヤーン・テラー金属相での金属とモット絶縁体的な振る舞いが共存する性質と合致する。波数について積分した状態密度には、元来3次元系のフラレン物質であるが、軌道秩序下において2次元的正方格子に類似した性質が現れることが明らかとなった。この特徴は電気伝導度などの輸送係数にも反映されており、2次元面内で大きな異方性が現れる[1]。さらに周波数に依存した光学伝導度も計算すると、周波数が小さいところで異方性が大きく、高周波数ではその性質は顕著には見られない。以上のような振る舞いを通常の軌道秩序と比較したところ、周波数に大きく依存した異方性は見られず、本研究で対象とする非従来型軌道秩序の特徴的物性であると結論した。フラレン物質では実験的に、ヤーン・テラー金属相の低温で生じる超伝導状態についても調べられ、超伝導が消失する臨界磁場が増大することが報告された。上述の非従来型軌道秩序下における異方性は、磁場下の電子の運動を伝導面内に制限することから、臨界磁場の増大ともコンシステントである[1]。

別の観点からは、フラレン物質では近年、光照射下で超伝導の性質が誘起されることが報告され、多大な注目を集めている。我々はフラレン物性を系統的に理解したいという動機から、この振る舞いについても考察を進めた。超伝導性は転移温度よりも高温側でも誘起されることから、同じく転移温度よりも高温側の物理である超伝導揺らぎに注目し、それが光励起下でどのように変化するかを、ギンツブルク・ランダウ理論に基づいて調べた。その結果、光励起は一般に揺らぎを抑制する方向に働くことを明らかにし、かつ2段階のクロスオーバーを伴う特徴的な時間発展を見出した[2]。

さらに、別の物理系であるマルチチャンネル近藤系とのつながりに関する考察も進展した[1]。近藤系とは伝導電子と局在f電子の相互作用系である。この系に多軌道自由度を考えると、原子内自由度に由来するフラストレーションの効果により極めて多様な秩序相が実現する。そのうちのひとつとして、ここでも非従来型の軌道秩序（近藤系の文脈ではチャンネル秩序と呼ばれる）が実現する。フラレン系と近藤系の非従来型軌道秩序では、極めて似通った1粒子励起スペクトルを持つことから、一見すると全く異なる物理系の間に関係があることが示唆される。本研究では、モット絶縁体の形成と近藤効果による絶縁体の形成機構は、どちらも伝導電子と多体効果に由来する擬フェルミオンとの混成によって表せることに着目し、異なる物理系における非従来型軌道秩序を統一的に記述する枠組みを提案した[1]。これにより非従来型電子秩序を、特定の物質に依らない普遍的な形成機構から理解できる可能性が拓かれた。

(2) f 電子系の非従来型超伝導

別の強相関電子系として、重い電子系 UBe13 に注目した。この物質は非フェルミ液体的な振る舞いを示し、かつ低温で非従来型の超伝導を示す。その起源として、マルチチャンネル近藤効果が可能性の一つとして議論された。我々は化学組成比に注目し、UよりもBeの原子数が十分に多いことから、この近藤系の伝導電子はBe単体（補償金属）の性質を引き継いでいると考え、補償金属を持つマルチチャンネル近藤系を提案した[3a]。特徴を捉えたシンプルなモデルから出発し、実際に超伝導発現機構や、超伝導状態のもつ特異な性質を系統的に明らかにした。また、磁場下の超伝導状態では量子渦が形成されるが、我々はその渦構造にも特徴が現れると予想し、数値計算を駆使した空間非一様系の解析を行い、通常の超伝導体とは異なる渦芯のエネルギースペクトル構造やそれに付随する渦の空間構造を明らかにした[3b]。

前述の解析は物質の特徴を抜き出して単純化したモデルに基づくものであったが、さらに現実物質の詳細を取り込んだ解析も進展させた。特に、f 電子系では結晶場基底状態を正確に記述する必要があり、これが多電子状態であることから物質中におけるクーロン相互作用が及ぼす影響について考察した[3c]。通常、相互作用については理想化して球対称極限における表式が使われることが多いが、実際には結晶中の離散的な対称性を反映した相互作用が存在している。これは4階のテンソルとして表される複雑な量であるが、我々は多極子という、スピン・軌道を一般化した概念を用いて見通し良く整理できることを提案した。これを多 f 電子系に対して適用すると、結晶場エネルギーに大きな影響を及ぼすことを明らかにした。この研究は、低温・低エネルギー物性を第一原理計算の観点から研究するための一つのステップとなる。

(3) d 電子系の超伝導状態における特異秩序

ルテニウム系や鉄系などにおける d 電子系が舞台となる系についても研究を行った。Fe(Se, S) という物質では超伝導状態においてもフェルミ面を持つという特異な振る舞いが報告されている。近年、多軌道超伝導体に特徴的な物性として、時間反転対称性を破ると超伝導状態においてもフェルミ面が残存することが理論的に提案されている(ボゴリウボフ・フェルミ面)。我々はこのような系が示す特徴的な物性として、ボゴリウボフ・フェルミ面が不安定化するような電子秩序の可能性を理論的に検討した[4]。ここでの秩序は電子のものではなく、超伝導状態に特有のボゴリウボフ準粒子の秩序化である点に新奇性(非従来性)がある。線型応答理論に基づいて系統的に考察し、非従来型秩序状態の性質を多極子の観点から詳細に明らかにした。

(4) まとめ

以上のように、本研究では非従来型の軌道秩序や超伝導状態について、現実物質の特徴を取り込んだ解析を行い、多軌道系特有の秩序状態に関する物性を明らかにした。このような知見は、通常の電子の秩序化とは異なるものであり、新しい電子物性・機能の開拓につながることを期待できる。

<引用文献>

- [1] S. Hoshino, P. Werner, R. Arita, Phys. Rev. B **98**, 054510 (2018).
- [2] R. Iwazaki, N. Tsuji, S. Hoshino, Phys. Rev. B **100**, 104502 (2019).
- [3] S. Iimura, M. Hirayama, S. Hoshino, (a) Phys. Rev. B **100**, 094532 (2019); (b) Phys. Rev. B **102**, 064505 (2020); (c) arXiv:2103.02240 (2021).
- [4] S.-T. Tamura, S. Iimura, S. Hoshino, Phys. Rev. B **102**, 024505 (2020).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Shintaro Hoshino, Philipp Werner, and Ryotaro Arita	4. 巻 99
2. 論文標題 Unconventional orbital ordering and emergent dimensional reduction in fulleride superconductors	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235133-1, -11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.235133	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 該当する
1. 著者名 Ryuta Iwazaki, Naoto Tsuji, and Shintaro Hoshino	4. 巻 100
2. 論文標題 Nature of the superconducting fluctuations in photoexcited systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 104521-1, -15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.104521	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 Ryuta Iwazaki and Shintaro Hoshino	4. 巻 29
2. 論文標題 Multi-component time-dependent Ginzburg-Landau study of photo-excitation effects on superconducting fluctuation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JPS Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 011005-1, -6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSCP.29.011005	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 Ryuta Iwazaki, Naoto Tsuji, and Shintaro Hoshino	4. 巻 30
2. 論文標題 Effects of Periodic Drive on Superconductors above the Transition Temperature	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JPS Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 011047-1, -6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSCP.30.011047	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 Ishigaki Kosuke, Nasu Joji, Koga Akihisa, Hoshino Shintaro, Werner Philipp	4. 巻 99
2. 論文標題 Staggered ordered phases in the three-orbital Hubbard model	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 085131-1, -11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.085131	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 Iimura Shoma, Hirayama Motoaki, Hoshino Shintaro	4. 巻 102
2. 論文標題 Vortex bound state of a Kondo lattice coupled to a compensated metal	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 064505-1, -14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.064505	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 Tamura Shun-Ta, Iimura Shoma, Hoshino Shintaro	4. 巻 102
2. 論文標題 Electronic multipoles and multiplet pairs induced by Pomeranchuk and Cooper instabilities of Bogoliubov Fermi surfaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 024505-1, -12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.024505	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 Yue Changming, Hoshino Shintaro, Werner Philipp	4. 巻 102
2. 論文標題 Entropy and electronic orders of the three-orbital Hubbard model with antiferromagnetic Hund coupling	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195103-1, -11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.195103	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 星野晋太郎	4. 巻 56
2. 論文標題 ボゴリウボフ・フェルミ面の不安定性	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 201,208
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 -

〔学会発表〕 計12件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 Shintaro Hoshino
2. 発表標題 Unconventional orbital ordering in fulleride superconductors
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Iwazaki, N. Tsuji and S. Hoshino
2. 発表標題 Nature of superconducting fluctuation in photo-excited systems
3. 学会等名 International Conference on Frontiers of Correlated Electron Science 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Iwazaki, N. Tsuji and S. Hoshino
2. 発表標題 Nature of superconducting fluctuation in photo-excited systems
3. 学会等名 Spectroscopies in Novel Superconductors 2019(SNS2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Iwazaki, N. Tsuji and S. Hoshino
2. 発表標題 Nature of superconducting fluctuation in photo-excited systems
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岩崎龍太、星野晋太郎
2. 発表標題 強相関極限下でのフラレン化合物における有効モデル
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 星野晋太郎、有田亮太郎、Philipp Werner
2. 発表標題 フラレン超伝導体の非従来型軌道秩序相における秩序変数の同定と電気伝導
3. 学会等名 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、液晶状態、動的現象」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岩崎龍太、辻直人、星野晋太郎
2. 発表標題 光励起された系の超伝導ゆらぎによる伝導度
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 星野晋太郎
2. 発表標題 Bogoliubovフェルミ面の不安定性と超伝導の多極子状態
3. 学会等名 京都大学基礎物理学研究所 研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 星野晋太郎
2. 発表標題 多軌道自由度をもつ強相関電子系の電子秩序に関する理論的研究
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田村駿太、飯村翔馬、三木建矢、星野晋太郎
2. 発表標題 電子間相互作用が誘起するBogoliubov準粒子の秩序状態
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岩崎龍太、星野晋太郎
2. 発表標題 フラレン化合物のバンド構造を用いた強相関有効モデルの解析
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岩崎龍太、星野晋太郎
2. 発表標題 フラレン化合物の強相関有効モデルにおける軌道秩序状態
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

量子物性理論研究室 http://www.phy.saitama-u.ac.jp/~hoshino/publication.html
--

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
---------	---------