

令和 3 年 6 月 17 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2020

課題番号：19K14647

研究課題名（和文）強相関トポロジカル量子物性の探索と相転移・臨界現象の解明

研究課題名（英文）Investigation on topological quantum phenomena in strongly correlated electron system

研究代表者

上田 健太郎（Ueda, Kentaro）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・助教

研究者番号：40835336

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,700,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題では、スピン軌道相互作用の大きい4d・5d電子系酸化物に着目し、強相関トポロジカル量子物性の開拓と機能制御を行った。パイロクロア型イリジウム酸化物においては、磁性ワイル半金属の実現可能性が理論的に議論されていた。近年では、磁気構造によって様々なトポロジカル電子相が現れることが知られていたが、電子相関の比較的小さい領域に限定されていた。本研究課題では、電子占有率を変化させることで、相関の強い領域でも、トポロジカルに非自明なバンド構造を持つ常磁性金属相が現れることを見出した。さらに、希土類磁気モーメントによってバンドのトポロジーを反映した特徴的な磁気輸送特性が発現することを突き止めた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題で達成したのは、新しいトポロジカル電子相の発見と磁気輸送特性の評価である。トポロジカル電子状態とその機能の開拓は、非散逸流に代表されるように、基礎科学的にも応用の観点からも喫緊の課題である。研究代表者は、電子相関が本質的な役割を果たす酸化物において、化学圧力や外部磁場によって物理パラメータを精密に制御することで、金属絶縁体転移が生じることを突き止めた。さらに、相転移近傍において、ベリー曲率に起因した巨大なホール効果が生じることを見出した。以上の結果は、電子バンドのトポロジカルな性質が、外場で制御できる可能性を示唆しており、従来のトポロジカル物性とは一線を画す結果となった。

研究成果の概要（英文）：In this project, we focused on 4d/5d transition metal oxides with large spin-orbit coupling to explore strongly correlated topological quantum properties and functions. In pyrochlore iridates, the possible emergence of magnetic Weyl semimetals has been theoretically discussed. Recently, it has been known that various topological electronic phases appear depending on the magnetic structure, but they were limited to a relatively small region of electron correlation. In this research project, we found that by changing the electron occupancy or band filling, paramagnetic metallic phases with topologically non-trivial band structures can be realized even in the strongly correlated region. Furthermore, we found out that the rare-earth magnetic moments give rise to characteristic magnetotransport properties reflecting the band topology.

研究分野：固体物理

キーワード：強相関電子系 スピン軌道相互作用 金属絶縁体転移 磁気輸送現象

## 1. 研究開始当初の背景

トポロジカル絶縁体の発見以来、電子バンドのトポロジー(位相幾何学)の重要性が見直され、新しい視点での分類学として発展してきた。特に近年では、三次元波数空間内にトポロジカルに安定なノードを持つディラック・ワイル半金属など様々な電子状態やその物性機能が明らかとなり、トポロジカル量子物性の研究は隆盛を極めている。しかし、これまでの研究では、時間反転対称性を維持しつつ電子バンドを反転させるために、スピン軌道相互作用の大きな原子を用いることがトポロジカル物性を発現させる上で必須条件となっていた。このため、候補物質が少数に限られるという難点がある。さらに、結晶の対称性や化学組成、電子数などでその物性が概ね特徴付けられるため、トポロジカル量子相の種類が少なく基礎学問として新しい物理学の概念が尽きかけているのが現状である。

次世代のトポロジカル量子物性を開拓する一指針として、電子間クーロン相互作用を考慮する方針が提案されている。例えば、強い電子相関はしばしば磁性を誘発する。磁気秩序化により時間反転対称性が破れると縮退が解かれ、線形なバンドが一点で交差するワイル半金属状態が発現しうる。この電子構造は磁気対称性を反映しているので、外部磁場等による磁気構造の変調により、トポロジカルな性質の変化を伴った新しい電子相転移が生じることが期待される。このように、強相関トポロジカル量子物性という分野は、トポロジカル相転移と臨界現象という基礎学理として重要な問題を追及するのに適した題材を提供してくれる。さらに、電荷以外の内部自由度も絡んだ複雑な相互作用が働くため、これまでのトポロジカル量子状態を超えた創発的現象や機能の実現も期待できる。しかし、多様な測定に適した高品質な試料の合成が困難であることから、実験例が少なく実験・理論研究の双方が滞っているのが現状である。

## 2. 研究の目的

電子相関とスピン軌道相互作用が競合する  $4d\cdot 5d$  電子系酸化物に着目し、トポロジカルに非自明な新奇電子相の開拓とトポロジカル量子相転移・臨界現象の解明、巨大外場応答の探索を目的とする。

## 3. 研究の方法

トポロジカル電子状態の発現可能性を理論的に指摘されているパイロクロア型イリジウム酸化物を中心に系統的な物質開拓を行い、その磁性・電子状態を電気輸送・熱電能・分光測定を用いて明らかにしていく。(1)物質合成と基礎物性測定により、バンド幅や電子占有率、磁場をパラメータとした磁気・電子相図を作成し、物質探索の指針を確立する。(2)電子のトポロジカルな性質が如実に反映される輸送特性の非対角成分の測定や理論計算により新奇トポロジカル電子相の性質やその存在によってもたらされる創発的物性機能について議論する。(3)分光測定や、圧力や磁場など外場による精密なパラメータ制御下での輸送測定を組み合わせることで、多角的な視野で、トポロジカル相転移に伴う臨界現象の究明や巨大応答の開拓を行う。

## 4. 研究成果

### (1)パイロクロア型イリジウム酸化物におけるフィリング制御と磁気輸送現象

電子相関が強い  $\text{Gd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  において、フィリング制御による金属絶縁体転移と、相転移近傍における磁気輸送現象を調べた。

母物質の  $\text{Gd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  は、全温度領域で絶縁体的挙動を示し、120 K 以下において反強磁性的秩序を示す。3 価の Gd イオンを 2 価の Ca イオンに置換し実効的にイリジウムサイトの電子占有率を 10% 変化させることで、反強磁性絶縁体から常磁性金属へ相転移し、結果として抵抗率が 9 桁変化した。さらに、金属絶縁体転移近傍において、ホール角が 1.5% を示す巨大ホール効果を見出した。これは、現存の強磁性酸化物よりも大きい値であり、ベリー曲率の湧き出しと吸い込みに寄与するワイル点の存在を示唆するものである。実際に、非磁性希土類の Eu 化合物と比較すると、ホール効果が一桁以上大きいことがわかった。これは、Gd と Ir の磁気的交換相互作用によって縮退したバンドが分裂し、ワイル点がフェルミ準位近傍に現れたと解釈できる。

### (2)パイロクロア型ルテニウム酸化物におけるフィリング制御による金属絶縁体転移

4d 電子系酸化物は、5d 電子系酸化物に比べて電子間相互作用が強い。特に、ルテニウム酸化物においては軌道自由度があるため、多自由度が複雑に絡み合った物性の発現が期待できる。スピン軌道相互作用や電子相関の競合がもたらす新奇物性を開拓するため、 $(\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x)_2\text{Ru}_2\text{O}_7$  の物性を電荷輸送測定と光学測定を用いて調べた。

ルテニウム酸化物の揮発性のために合成が難しく、報告例が少なかったが、本研究では高压合成装置を用いることで、細かい組成での試料合成に成功した。 $x$  が小さい領域では反強磁性的絶縁体だったが、 $x > 0.3$  で常磁性金属となることを見出した。さらに、 $x > 0.4$  で強磁性秩序が発現し、ホール角 2% に達する非常に大きな磁気応答を観測した。理論計算を行った結果、フント結合が強磁性秩序に重要な役割を果たしていることが明らかになった。ホール効果の増大は、強磁性秩序に加えて Pr 磁気モーメントの異方性による有限のスピンカイラリティに起因していると考えられる。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Ueda K., Fukuda H., Kaneko R., Fujioka J., Tokura Y.	4. 巻 102
2. 論文標題 Evolution of possible Weyl semimetal states across the Mott transition in pyrochlore iridates induced by hole doping	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 245131
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.102.245131	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 Kaneko R., Ueda K., Terakura C., Tokura Y.	4. 巻 102
2. 論文標題 Mott-Hubbard gaps and their doping-induced collapse in strongly correlated pyrochlore ruthenates	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 41114
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.102.041114	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 Ueda K., Kaneko R., Subedi A., Minola M., Kim B. J., Fujioka J., Tokura Y., Keimer B.	4. 巻 100
2. 論文標題 Phonon anomalies in pyrochlore iridates studied by Raman spectroscopy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115157
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.100.115157	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 Kaneko R., Ueda K., Terakura C., Tokura Y.	4. 巻 102
2. 論文標題 Mott-Hubbard gaps and their doping-induced collapse in strongly correlated pyrochlore ruthenates	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 41114
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.102.041114	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 Ueda K., Fukuda H., Kaneko R., Fujioka J., Tokura Y.	4. 巻 102
2. 論文標題 Evolution of possible Weyl semimetal states across the Mott transition in pyrochlore iridates induced by hole doping	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 245131
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.245131	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5件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 福田光, 上田健太郎, 金子竜馬, 藤岡淳, 十倉好紀
2. 発表標題 パイロクロア型(Gd <sub>1-x</sub> Cdx)2Ir2O7における モット転移近傍半金属相のトポロジカル相転移
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (2021年)
4. 発表年 2020年 ~ 2021年

1. 発表者名 Kentaro Ueda
2. 発表標題 Emergent properties of correlated Dirac and Weyl semimetals in iridates
3. 学会等名 Competing interactions and Colossal responses in Transition Metal Compounds (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 上田健太郎, 金子竜馬, Alaska Subedi, Matteo Minoda, Bumjoon Kim, 藤岡淳, 十倉好紀, Bernhard Keimer
2. 発表標題 パイロクロア型イリジウム酸化物におけるラマン分光法を用いたフォノン異常の観測
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 上田健太郎
2. 発表標題 パイロクロア型イリジウム酸化物における磁気輸送現象
3. 学会等名 物性研短期研究会 強磁場科学研究会 強磁場コラボラトリーによる強磁場科学の新展開 ~光科学との融合も視野にいれて~ (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kentaro Ueda
2. 発表標題 Emergent transport properties on the verge of metal-insulator transitions in pyrochlore 5d/4d oxides
3. 学会等名 APS March Meeting 2020 (招待講演) (国際学会)
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
---------	---------