

電子が描くナノスケールの“右巻き・左巻きの波紋” カゴメ金属で見えた“カイラリティ”的起源

【本研究のポイント】

- ・カゴメ金属では鏡映対称性^{注1)}を破った電子の波紋「カイラル電子干渉^{注2)}」が観測される。
- ・カイラル電子干渉の起源は、ナノスケールのループ電流相^{注3)}であることを理論的に検証。
- ・カゴメ金属のループ電流を含む多重量子相^{注4)}や非従来型超伝導^{注5)}の正体が明らかに。

【研究概要】

名古屋大学大学院理学研究科の中沢 正剛 博士後期課程学生、山川 洋一 講師、大成 誠一郎 准教授、紺谷 浩 教授は、京都大学基礎物理学研究所の田財 里奈 助教と共に、カゴメ(籠目)格子構造^{注6)}の金属化合物で広く観測された、鏡映対称性を破った電子のナノスケールの定在波「カイラル電子干渉」を解き明かす新原理を発見しました。カイラル電子干渉の起源が、ミクロな回転電流を伴うループ電流相という新規量子相であることを理論的に解明し、カゴメ格子金属の電子状態の本質を明らかにしました。

カゴメ格子金属 AV_3Sb_5 (A=Cs,Rb,K)では、幾何学的フラストレーション^{注7)}に由来する多彩な新奇量子相や非従来型超伝導が発見されたことから、現在世界中で注目を集めています。有名な実験事実として、走査型トンネル顕微鏡により相次いで観測された、カイラリティ(右巻き・左巻き)を有するナノスケールの電子の波紋「カイラル電子干渉」があります。興味深いことに、そのカイラリティは微小な磁場により反転します。これは時間反転対称性^{注8)}が破れたループ電流相を強く示唆する実験事実であるため、大いに注目を集めましたが、その理論的根拠は未解明でした。

本研究では、カゴメ金属にわずかに含まれる不純物の存在に着目しました。数千個のV原子から成るカゴメ格子の巨大クラスター模型を導入して、不純物が電子状態にもたらす非自明な影響を理論解析しました。その結果、ループ電流相に実在する 0.1%未満の希薄不純物を考慮することで、実験で観測された「カイラル電子干渉」の機構解明に成功しました。本研究は、カゴメ金属の中心的問題であるループ電流相の存在を決定づけると同時に、ループ電流相で実現する非従来型超伝導の謎を解明する鍵としても注目を集めています。

本成果は 2025 年 10 月 29 日付の英国科学誌「Nature Communications」オンラインで公開されました。

【研究背景と内容】

金属中の無数の電子は量子力学^{注9)}に従って運動し、さらに互いに強く相互作用することで、超伝導や強磁性など多彩な量子相を生み出します。こうした新しい量子相の発見と実現は、物性物理学における最重要課題のひとつです。最近注目されているのが、独特のカゴメ格子構造を持つ「カゴメ金属」です。三角形の単位格子からなるカゴメ格子は、電子の局在を妨げる幾何学的フラストレーションという特徴を持ちます。この幾何学的フラストレーションと電子間相互作用が有機的に協奏することで、従来観測されたことのないユニークな量子相が発現することが明らかになり、世界的に注目を集めています。

カゴメ金属の中でも、2019年に発見された新規超伝導体 CsV_3Sb_5 は、隣り合う V 原子間に電子がたまる「ダビデ星型秩序」(図 1)や、電子が自発的に回転運動する「ループ電流相」(図 1)、電子相関によりクーパー対が生じる非従来型超伝導など、これまでにならない新奇な量子相が実現します。中でもループ電流相は、1990 年頃に銅酸化物高温超伝導体の擬ギャップの理論として C.M. Varma により提唱され、これまで多くの研究者が探求してきましたが、カゴメ金属において複数の決定的な証拠が観測されました。本研究グループは量子力学に基づき、電子間斥力がループ電流を安定化する理由を見出し、ループ電流・電荷秩序・超伝導の共存がもたらす「多重量子相」の理論を構築しました。カゴメ金属では、ループ電流相に由来する新奇な物理現象が興味を集め、世界中で研究されています。例えば電流が一方向のみ流れやすい「整流効果」が観測され、注目を集めましたが、本研究グループはループ電流を起源とする新しい整流効果の理論を確立し、実験の説明に成功しました。

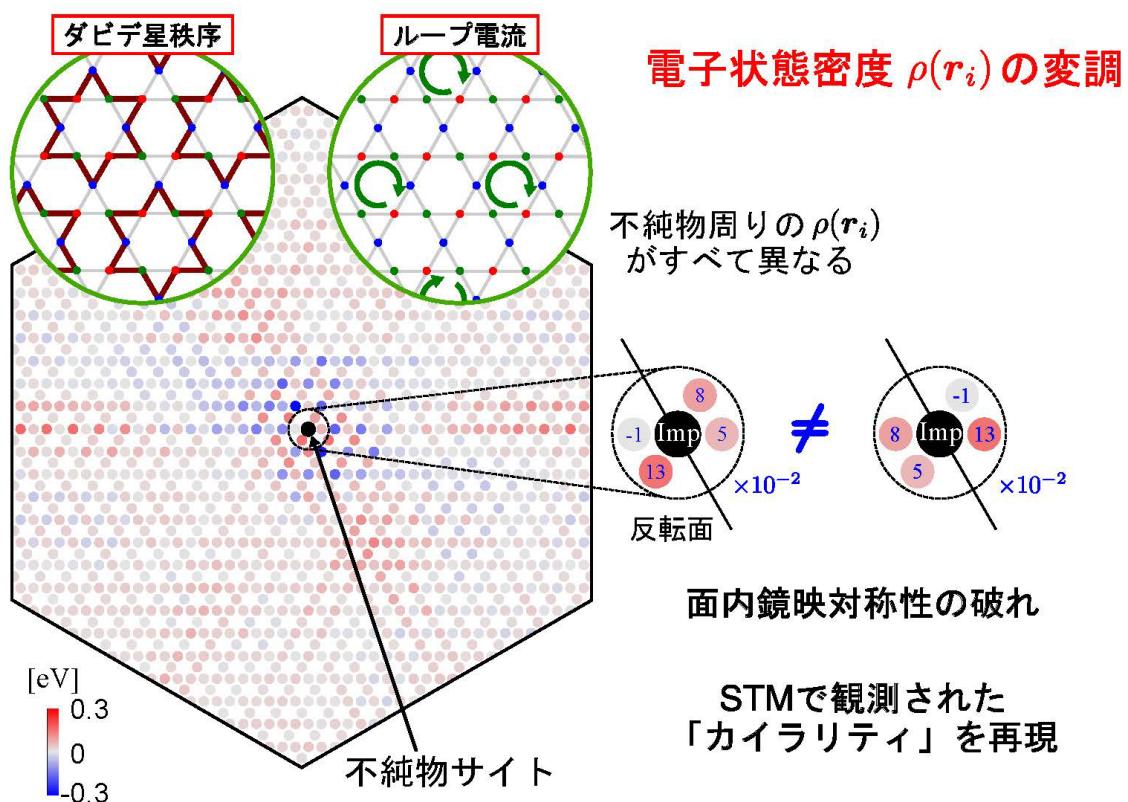


図 1 カゴメ格子金属における「ダビデ星秩序」と「ループ電流相」の共存状態における、電子状態密度の振動成分(実空間分布)。そこに1つの不純物(黒丸)を導入すると、その周囲の局所状態密度がすべて異なる「カイラル電子状態」が出現する。本理論により、STM 実験で観測されたナノスケールの「カイラル電子干渉」の起源が、ループ電流であることが明らかになった。

図 1 に本研究で計算された「ダビデ星秩序」と「ループ電流相」の共存状態における、V 原子上のエネルギー E の電子状態密度 $\rho(r_i)$ の振動成分を示します。($\rho(r_i)$ は走査型トンネル顕微鏡(STM)で精度よく観測されます。) 中央に存在する不純物サイト(黒丸)の周りに 4 つの V 原子が存在し、これらの電子状態密度はすべて異なります。このとき、すべての面内鏡映対称性が失われるため、電子状態に「右巻き」、「左巻き」の区別、すなわちカイラリティが生じることが分かりました。これより、STM 実験で観測されたカイラリティは、ループ電流が存在する強い証拠であると分かりました。

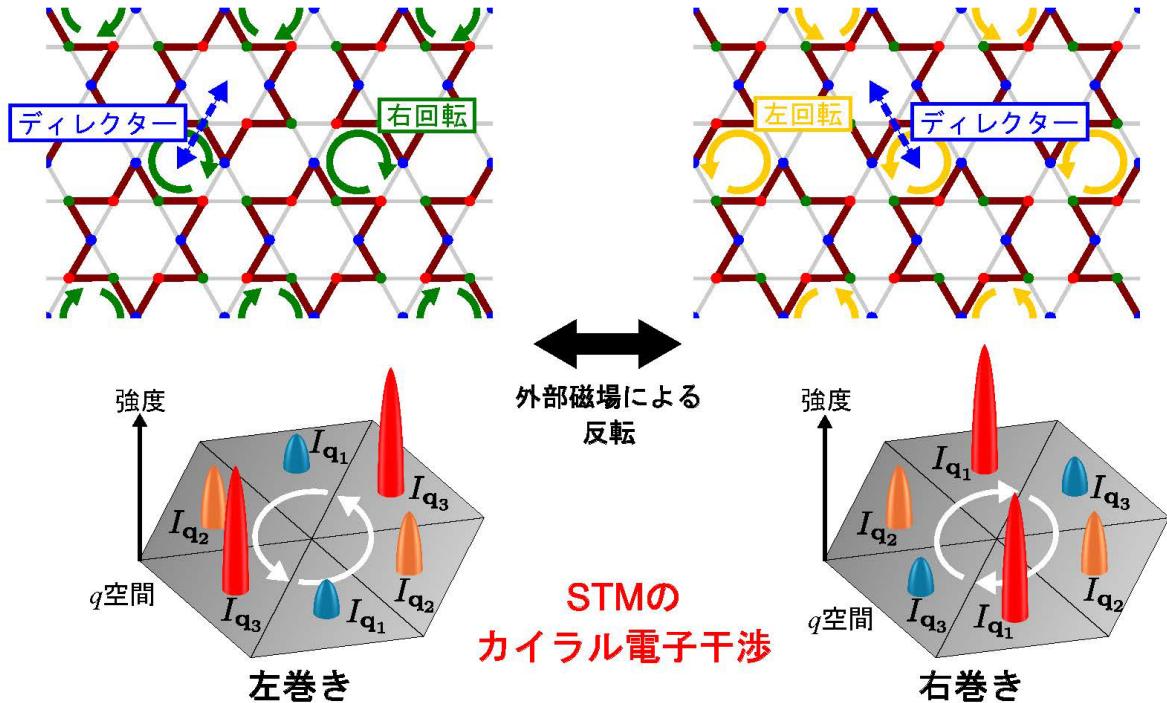


図 2 (上) 本理論で得られた、ループ電流とダビデ星秩序の共存状態。外部磁場により、ループ電流は回転の向きを反転すると同時に、水平方向に並進移動し、回転対称性の破れの方向であるディレクターが 60 度回転する。(下) 電子状態密度(図 1)をフーリエ変換すると、「電子干渉の強度 I_q 」が得られる。図 1 の鏡映対称性の破れを反映して、3 つのブラングピークの強度が異なる「カイラル電子干渉」が実現し、そのカイラリティ(右巻き・左巻き)は磁場により反転する。

次に、外部磁場の影響を考えます。図 2(上)に、ループ電流とダビデ星秩序が共存する実空間図を示します。ループ電流の中心とダビデ星の中心が一致しないため、ディレクターの方向に回転対称性が破れます。外部磁場により、ループ電流は右巻き(左図)から左巻き(右図)に反転すると同時に水平方向に移動するため、ディレクターが 60 度回転します。同時に、図 1 の $\rho(r_i)$ のカイラリティの右巻き・左巻きが反転します。外部磁場によるディレクターの 60 度回転およびカイラリティの反転は、最近の精密化された STM 実験によって観測されています。

電子状態のカイラリティを明瞭に解析するため、図 1 の $\rho(r_i)$ をフーリエ変換した「波数空間の関数 $\rho(\mathbf{q})$ 」を求め、さらに「電子干渉の強度 $I(\mathbf{q}) = |\rho(\mathbf{q})|$ 」を考察します。ここで \mathbf{q} は波数ベクトルです。ダビデ星秩序は、カゴメ格子の 3 軸方向の電荷秩序の重ね合わせであり、 $I(\mathbf{q})$ の 3 つのブラングピークを持ちます。加えてループ電流が存在するとき、鏡映対称性の破れを反映して図 2(下)に示す $I(\mathbf{q})$ の 3 つのピークはすべて異なる値を

持ち、そのカイラリティは $I(\mathbf{q})$ の強度の回転方向で定義されます。ゆえに、カゴメ金属の STM 実験で報告された「カイラル電子干渉」は、ループ電流の存在を実証するものだと言えます。本研究は、カゴメ金属のループ電流相の存在を決定づけると同時に、カゴメ金属の多重量子相(ループ電流・電荷秩序・超伝導)の全容を解明する鍵として注目を集めています。

【成果の意義】

カゴメ超伝導体 AV_3Sb_5 (A=Cs,Rb,K)では、幾何学フラストレーションと電子相関に由来して、自発的な回転電流が流れるループ電流相など、他にないユニークな量子相が実現します。ループ電流相を示唆する有名な実験事実として、走査型トンネル顕微鏡観測で報告されたナノスケールの「カイラル電子干渉」がありますが、その理論的根拠は未解明でした。本研究では、カゴメ金属にわずかに含まれる不純物の存在に着目し、ループ電流相に実在する 0.1%未満の希薄不純物を考慮することで、実験で観測された「カイラル電子干渉」の理論的再現に成功しました。本研究は、カゴメ金属の中心的問題であるループ電流相の存在を決定づけると同時に、ループ電流相で実現する非従来型超伝導の謎を解明する鍵としても注目を集めています。

本研究は、2025年度から始まった文部科学省 学術変革領域研究(A)「相関設計で挑む量子創発」の支援のもとで行われたものです。

【用語説明】

注 1) 鏡映対称性:

ある鏡映面を境に空間を反転させる操作のことを鏡映操作と呼ぶ。適当な鏡映操作により元に戻る状態のことを、鏡映対称性を持つという。すべての鏡映対称性が破れた状態は、カイラリティを持つと表現される。

注 2) カイラル電子干渉:

STM 等で観測される電子状態密度の実空間分布 $\rho(r)$ の変調成分のフーリエ変換から、電子干渉の強度 $I(\mathbf{q})$ が求まる。 $\rho(r)$ がカイラリティを持つ時、 $I(\mathbf{q})$ も運動量空間でカイラリティを持ち、カイラル電子干渉と呼ばれる。

注 3) ループ電流相:

電子相関によって電子の飛び移り積分が位相を持つとき、時間反転対称性が破れて、ナノスケールのループ電流が流れる。F.D.M. Haldane によりハニカム格子に対して導入され、その後銅酸化物超伝導体において長年精力的に研究されてきたが、最近カゴメ金属において有力な実験的観測が報告されている。

注 4) 量子相:

電子相関の強い金属電子系では、磁気秩序や電荷秩序、超伝導などの豊かな相転移(自発的対称性の破れ)が発現する。電子の量子性が重要な役割を果たすことから量子相と呼ばれる。

注 5) 非従来型超伝導:

電子・格子相互作用を電子対起源とする Bardeen-Cooper-Schrieffer(BCS) 型超伝導は、従来型超伝導と呼ばれる。一方で、電子間相互作用を電子対起源とする非従来型超伝導では、非 s 波超伝導や高温超伝導など、バラエティーに富む超伝導現象が発現し、物性物理における中心的課題である。

注 6)カゴメ(籠目)格子構造:

竹籠の網目模様に類似した 2 次元格子構造(図 1)。カゴメ格子金属の強い幾何学フラストレーションにより、単純なスピン秩序や電荷秩序が抑制される。このためカゴメ格子金属では電子相関が強い金属領域が安定化し、新奇な金属量子相の舞台となる。

注 7)幾何学フラストレーション:

カゴメ格子が有する三角形構造は、電子の磁気秩序や電荷秩序を著しく抑制する効果があり、幾何学フラストレーションと呼ばれる。

注 8)時間反転対称性:

時刻の向きを逆転($t \rightarrow -t$)させる操作のことを時間反転と呼ぶ。時間反転により元に戻る状態のことを、時間反転対称性を持つという。ループ電流秩序は時間反転により回転方向が変わるため、時間反転対称性を破っている。

注 9)量子力学:

電子などのミクロな粒子の運動を司る物理法則。電子は粒子としての性質(粒子性)と波としての性質(波動性)という 2 重性を併せ持ち、不確定性原理と呼ばれる。

【論文情報】

雑誌名:Nature Communications 誌

論文タイトル: Origin of switchable quasiparticle-interference chirality in loop-current phase of kagome metals measured by scanning-tunneling-microscopy

著者: 中沢正剛(名古屋大学)、田財里奈(京都大学)、山川洋一(名古屋大学)、大成誠一郎(名古屋大学)、紺谷浩(名古屋大学)

DOI: 10.1038/s41467-025-64588-4