

平成30年6月4日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K05189

研究課題名(和文) 軌道ネマチック揺らぎによる高温超伝導機構の追求

研究課題名(英文) Possible high-temperature superconductivity from orbital nematic fluctuations

研究代表者

山瀬 博之 (Yamase, Hiroyuki)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・主幹研究員

研究者番号：10342867

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：軌道ネマチックとは、軌道の自由度を用いて電子系のxy対称性のみを破った新規な量子状態であり、鉄系超伝導体で実現している可能性が大きく注目されている。本研究では、軌道ネマチックとスピン揺らぎが共存しているという、より現実的な観点から鉄系超伝導体の高温超伝導機構を追求した。その結果、両者は互いに競合関係にあることが分かった。スピン揺らぎは超伝導不安定性に対する自己抑制効果を持ち、高い超伝導転移温度は軌道ネマチック揺らぎによって実現され得る、という知見が得られた。超伝導ギャップは、ほぼ等方的であり、ネマチック相で超伝導転移した際には電子面に顕著な波数依存性が生じることが分かった。

研究成果の概要(英文)：Orbital nematicity is a hot topic in iron-based superconductors and leads to the so-called nematic state in terms of orbital degrees of freedom. In this state, the system breaks only xy symmetry, keeping the other symmetries unbroken. In the present work, considering the realistic situation in iron-based superconductors, we study the pairing mechanism in the presence of both orbital nematic fluctuations and spin fluctuations. It turns out that both are competitive and high-Tc can be reached by orbital nematic fluctuations, because spin fluctuations are found to have the self-restraint effect of the superconducting instability. The pairing gap is almost isotropic on each Fermi surface and it becomes highly anisotropic on the hole Fermi surfaces when the superconducting instability occurs in the nematic phase.

研究分野：物性理論

キーワード：物性理論 高温超伝導 電子ネマチック 軌道揺らぎ スピン揺らぎ

1. 研究開始当初の背景

高温超伝導機構として、スピン相互作用(瞬間相互作用)やスピン揺らぎ(遅延相互作用)が候補になりえることが銅酸化物高温超伝導体の研究から分かってきた。一方、2008年に発見された鉄系高温超伝導体の超伝導機構に関しては、スピン揺らぎまたは軌道揺らぎによる機構(共に遅延相互作用)が提唱されている。スピン揺らぎの機構は銅酸化物研究から得た知見と合致する。一方、軌道揺らぎの機構は新たな高温超伝導機構の可能性を示している点で大変に興味深い。軌道揺らぎには、大きな運動量移行を伴うものとゼロ近傍の運動量移行を伴うものがあるが、申請者は以下の3つの理由から、軌道ネマチック揺らぎと呼ばれる波数ゼロ近傍の揺らぎが大切であると考えている。

(1) 鉄系超伝導体の典型的な相図からの示唆。鉄系超伝導体では、スピン密度波(SDW)相近傍で超伝導が実現するが、SDW転移の前に電子ネマチック相転移が生じる。したがって、超伝導相はSDW相よりもむしろ電子ネマチック相により隣接して実現している(図1)。

(2) 電子ラマン散乱実験からの示唆(図2)。降温と共に電子ネマチック相に近づくにつれ、ゼロエネルギー近傍でラマン散乱強度が増大(セントラルピーク)することが2013年末に報告された[1]。これは、申請者らが理論的に予言した、軌道ネマチック揺らぎによる電子ラマン散乱と一致した[2]。

(3) 高い超伝導転移温度からの示唆。2013年、申請者らは、軌道ネマチック揺らぎによる超伝導機構で高い転移温度が得られ、実験的に報告されている50K程度の転移温度を実現出来ることを示した[3]。

軌道ネマチックとは、軌道の自由度に起因する電子ネマチック相であり、系の xy 対称性のみが破れた新規な量子状態である。電子ネマチック相は、現在ホットな研究テーマであり、特に電子ネマチックと超伝導機構の関係は多くの研究者の関心を引いている。しかし、この問題への理論的答えはなかなか得られない。鉄系超伝導体では5バンドのハバード模型に代表される微視的な理論研究が主に行われてきた。そのような微視的模型を用いて超伝導転移温度を信頼出来るレベルで計算(線形化したEliashberg方程式を電子の自己エネルギーを含めて解析)しようとすると、解析の複雑さに加えて、計算機のメモリ容量の制限から、期待される超伝導転移温度まで温度を下げて計算することが出来ず、転移温度そのものを議論することが難しくなる。鉄系超伝導体の高温超伝導機構の研究を大きく進展させるには、この困難を打破することが急務である。

一方、鉄系超伝導体では、中性子散乱実験

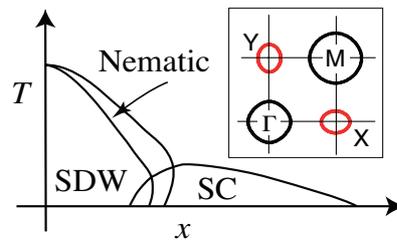


図1 鉄系超伝導体の典型的な $x-T$ 相図: 元素置換量 x 、温度 T 、スピン密度波相SDW、超伝導相SC。各相の共存の詳細は不明。電子ネマチック相がSDW相より先に生じる。挿入図は典型的なフェルミ面で Γ ,M点周りにホール面、X,Y点周りに電子面がある。

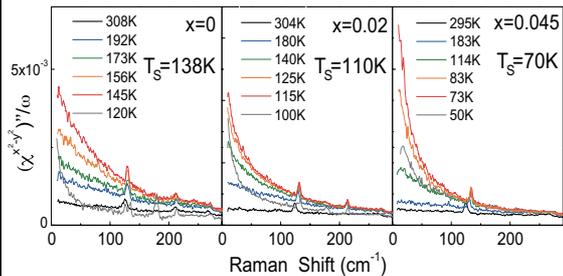


図2 鉄系超伝導体での電子ラマン散乱スペクトラム。 T_S がネマチック転移温度に対応し、その温度に向かって低エネルギーのスペクトラルウェイトが増強する[1]。

やNMR実験が示すように低エネルギーのスピン揺らぎも観測されている。したがって、鉄系超伝導体では、軌道ネマチック揺らぎによる超伝導機構の可能性が浮上しているものの、スピン揺らぎと共存した中で超伝導が実現している、という描像が妥当と考えられる。

2. 研究の目的

本研究は、5バンドハバード模型に代表される微視的な解析とは相補的な関係にあり、微視的解析が直面する計算上の諸問題を、低エネルギー有効模型を駆使することで克服する研究と位置付けられる。遅延効果を伴う軌道やスピンの揺らぎによる超伝導転移温度は、線形化したEliashberg方程式を解くことで議論出来るので、電子の自己エネルギーを含めて出来る限り正確にそれを解き、鉄系超伝導体の超伝導機構を理論的に議論することを目的とする。特に、軌道ネマチックとスピン揺らぎが共存する中で、高い超伝導転移温度を導けるか否か、更にどのような超伝導ギャップ構造が実現するかに着目する。

軌道ネマチックは鉄の d_{yz} と d_{xz} 軌道の占有率の自発的偏り、つまり xy 対称性の自発的破れとして記述出来る。さらに運動エネルギー項を適切に選べば、この2軌道を用いて鉄系超伝導体で観測されているフェルミ面の形状も再現出来る(図1の挿入図)。結果として、それらのフェルミ面のネスティングによってスピン揺らぎも発達する。したがって、この2軌道模型に、軌道ネマチック相互作用とスピ

ン相互作用を取り入れたものを、低エネルギーのミニマル有効模型とする。

この有効模型を用いて、電子の自己エネルギー効果を取り込んでEliashberg方程式の解をゼロ温度近傍まで解析する。軌道ネマチックの揺らぎのみを扱った場合[3]だと、強結合超伝導になることが分かっているので、自己エネルギー効果を取り入れてEliashberg方程式を解くことは極めて重要である。さらに、軌道ネマチックとスピンの各々の揺らぎの強さを互いに独立なパラメータで調整出来る利点を生かして、超伝導に対する軌道ネマチックとスピン揺らぎの効果をより一般的な観点から俯瞰することを行う。

微視的な模型では、電子の自己エネルギー効果を含めて低温までEliashberg方程式を解析したり、軌道ネマチックとスピンの揺らぎを自由に制御したりする研究は容易ではない。したがって、本研究によって鉄系超伝導体の超伝導機構に新たな知見を与えることが出来る。特に軌道ネマチック揺らぎの機構では、スピン揺らぎが存在した場合、ホール面と電子面のフェルミ面間(図1の挿入図)で超伝導ギャップの符号が反転する s^+ 状態と符号反転のない s^{++} 状態が拮抗することが予想され、超伝導に劇的な効果を与えることが期待される。

参考文献：[1] Gallais *et al.*, Phys. Rev. Lett. **111**, 267001 (2013). [2]HY & Zeyher, Phys. Rev. B **88**, 125120 (2013). [3] HY & Zether, Phys. Rev. B **88**, 180502(R) (2013).

3. 研究の方法

軌道ネマチック揺らぎによる超伝導は、HY & Zeyher, Phys. Rev. **88**, 180502 (R) (2013)で解析されているが、等方的な超伝導ギャップが仮定されていた。しかし、鉄系超伝導体ではギャップにノードが存在する場合も観測され、ギャップ対称性がユニバーサルでない可能性が浮上している。そこで本研究では、この先行研究を鉄系超伝導体の現実的な側面を反映するよう、スピン揺らぎの効果および超伝導ギャップの波数依存性を取り入れるように拡張する。

(1)超伝導ギャップの波数依存性の導入

波数依存性を取り入れることによって、計算機のメモリ容量の制約によって、Eliashberg方程式を低温で解けない、従って超伝導転移温度を評価出来ない、という技術的問題がある。この困難を克服するのが最初の課題である。そこで、以下のような手段を用いる。

ブリルアンゾーンを幾つのパッチに分け、

パッチ内の波数依存性をフェルミ波数に置き換える。この近似は汎関数繰り込み群でしばしば用いられている。パッチの数を N とすると、 $2\pi/N$ の精度でフェルミ波数の角度依存性を取り込むことが出来る。しかし、最大利用可能なメモリ制限と計算時間の問題から、 N を十分に大きくすることは出来ないことが予想されるので、パッチの幾何学的配置を工夫して対処する。特に、パッチの配置を変化させても物理的結果は普遍であるはずで、実際にそのような傾向があるかを調べることで信頼性の高い理論結果を導く。

(2)スピン揺らぎのみによる超伝導

(1)では軌道ネマチック揺らぎのみが存在する場合を調べるが、その逆極限に当たる、スピン揺らぎのみが存在する場合の超伝導を調べる。スピン揺らぎによる超伝導は既に多くの理論研究で調べられているが、自己エネルギー効果を取り入れ、かつ超伝導転移温度を評価した研究はあまりない。スピン相互作用が大きくなると、実験で観測されているストライプ型のSDW秩序が安定化するが、そのパラメータ領域を、スピン相互作用の大きさと温度の平面で決定する。次に、Eliashberg方程式を解いて、SDW相の近傍における超伝導転移温度や超伝導ギャップの波数依存性を明らかにする。

(3)軌道ネマチック揺らぎとスピン揺らぎの共存による超伝導

軌道ネマチック揺らぎが支配的な状況を考え、そこにスピン相互作用をゼロから徐々に増やしていった時に、超伝導のギャップ構造や超伝導転移温度がどのように変化するかを明らかにする。特に軌道ネマチック揺らぎとスピン揺らぎによる超伝導は互いに協調するのか競合するのか、つまり超伝導転移温度が上昇するのか下降するのか大変に興味深い。

鉄系超伝導体では、物質によって超伝導転移温度は大きく異なる。この物質依存性は、電子のバンド構造の違いという高エネルギー物理(eVオーダー)で議論されることが多い。本研究の視点は、そのような高エネルギー物理を低エネルギー物理に焼き直し、軌道ネマチック揺らぎとスピン揺らぎの相対強度の違いという言葉で翻訳する点にある。鉄系超伝導体の超伝導転移温度の物質依存性を概観するような理論的知見を与え、同時にその背後にある電子の集団励起に関する理論的洞察を与える。

4. 研究成果

(1)超伝導ギャップの波数依存性の導入

パッチスキームを用いてEliashberg方程式を導出し、その数値的解析を行った。パッチの数が多ほど正確に波数依存性を取り込むことができるが、計算時間と計算機メモリの制約から、一つのフェルミ面あたり20程度のパッチ数が限界であった。しかし、パッチの幾何学的配置を工夫することで非常に高い精度で波数依存性を取り込むことに成功した。

系のxy対称性がある正常相から超伝導転移する場合、ホール面と電子面で超伝導ギャップの位相が同じである、いわゆるs++状態が最も安定で、それにほぼ縮退するd波状態が存在することが分かった。d波は、 $k_y=k_x$ と $k_y=-k_x$ の軸にノードを持つ。超伝導ギャップの波数依存性は高々5%未満であり、ほぼ等方的なギャップとして近似できることが分かった。

一方、系のxy対称性が破れた軌道ネマチック秩序相においても、軌道ネマチック揺らぎによって超伝導転移が可能である。この場合、ホール面上で超伝導ギャップが顕著な波数依存性を示すことが分かった。興味深いことに、電子面上ではギャップはほぼ等方的であり、超伝導転移温度も、等方的なギャップを仮定した場合とほぼ同じであった。ギャップの対称性は、正常相の時と同様にs++波で特徴づけられた。

これらの成果は、Phys. Rev. B **94** (2016) 214505に“Structure of the pairing gap from orbital nematic fluctuations”として発表した。

(2) スピン揺らぎのみによる超伝導

軌道ネマチック揺らぎのみが存在する場合は(1)で解析済みである。その逆極限にあたるスピン揺らぎのみが存在する場合の超伝導不安定性を解析した。似たような理論研究は数多く行われているが、本研究は、ミニマルな有効模型を用いている点、電子の自己エネルギー効果を含めている点、低温までEliashberg方程式を解いている点でユニークである。

解析の結果、たとえSDW相のごく近傍でスピン揺らぎが強くなっても、超伝導不安定性が生じないことが分かった。その原因として、電子の自己エネルギー効果が挙げられるが、それ以外に超伝導不安定性に対する自己抑制効果という驚くような効果があることを見出した。つまり、鉄系超伝導体で期待されるフェルミ面に対しては、スピン揺らぎはネステイングベクトルに対応する波数 $(\pi, 0)$ 近傍で大きくなるが、その波数から大きく離れた揺らぎの「裾野」にあたるような弱い揺らぎの効果によって、超伝導不安定性が著しく抑制される効果があることが分かった。

この成果は、指導する博士課程学生の我妻友明氏の学位論文(2018年3月)に示した。

(3) 軌道ネマチック揺らぎとスピン揺らぎの共存による超伝導

(1)と(2)の成果を踏まえ、軌道ネマチック揺らぎとスピン揺らぎの両方が存在した場合の超伝導不安定性を調べた。その結果、両者は超伝導不安定性に対しては協調関係ではなく、互いに競合することが分かった。つまり、高い超伝導転移温度は、軌道ネマチック揺らぎによって引き起こされ、スピン揺らぎによってその転移温度が抑制される傾向があることが判明した。SDW相の量子臨界点の近傍であっても、超伝導転移温度は極めて強く抑制された。

このような理論結果から、鉄系超伝導体で実現している比較的高い超伝導温度は、軌道ネマチック揺らぎが支配的である状況で期待され、逆に低い転移温度は軌道ネマチックとスピン揺らぎの競合の結果、またはスピン揺らぎが支配的である場合に実現している可能性がある、という予想すらしなかった知見が導かれた。

この成果は、指導する博士課程学生の我妻友明氏の学位論文(2018年3月)に示した。

(4) その他の関連する成果

鉄系超伝導体と同じ高温超伝導物質である銅酸化物に対して以下の6つの成果、およびスピン磁化率に対する統計力学的な基礎的研究成果1つを得た。1) 電子ドーピング系銅酸化物高温超伝導体の電荷励起スペクトラルの解明、2) 電子ドーピング系銅酸化物高温超伝導体におけるd波ボンド電荷励起の可能性、3) 波数 $(0, 0)$ 近傍での電荷励起スペクトラルに現れる低エネルギーピークの起源、4) 層状構造物質におけるプラズモン励起スペクトラム、5) 非整合磁気秩序と電荷励起によるフェルミ面の再構成とホールナンバーの異常、6) ハバード模型における非整合磁性と超伝導の共存；さらに、7) 磁気秩序相におけるスピン磁化率に非自明な性質があることの理論的発見、その熱力学的方程式の導出。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計8件) すべて査読あり
① M. Bejas, H. Yamase, and A. Greco, Dual structure in the charge excitation spectrum of electron-doped cuprates, Phys. Rev. B **96** (2017) 214513-1-214513-12.
10.1103/PhysRevB.96.214513

② K. Kuboki and H. Yamase, Static spin susceptibility in magnetically ordered states, Phys. Rev. B **96** (2017) 064411-1 - 064411-8.
10.1103/PhysRevB.96.064411

③ A. Greco, H. Yamase, and M. Bejas, Charge-Density-Excitation Spectrum in the $t-t'J-V$ Model, J. Phys. Soc. Jpn. **86** (2017) 034706-1 - 034706-5.
10.7566/JPSJ.86.034706

④ T. Agatsuma and H. Yamase, Structure of the pairing gap from orbital nematic fluctuations, Phys. Rev. B **94** (2016) 214505-1 - 214505-9.
10.1103/PhysRevB.94.214505

⑤ A. Eberlein, W. Metzner, S. Sachdev, and H. Yamase, Fermi surface reconstruction and drop in the Hall number due to spiral antiferromagnetism in high- T_c cuprates, Phys. Rev. Lett. **117** (2016) 187001-1 - 187001-6.
10.1103/PhysRevLett.117.187001

⑥ A. Greco, H. Yamase, and M. Bejas, Plasmon excitations in layered high- T_c cuprates, Phys. Rev. B **94** (2016) 075139-1 - 075139-8.
10.1103/PhysRevB.94.075139

⑦ H. Yamase, A. Eberlein, and W. Metzner, Coexistence of incommensurate magnetism and superconductivity in the two-dimensional Hubbard model, Phys. Rev. Lett. **116** (2016) 096402-1 - 096402-6.
10.1103/PhysRevLett.116.096402

⑧ H. Yamase, M. Bejas, and A. Greco, d -wave bond-order charge excitations in electron-doped cuprates, Europhys. Lett. **111** (2015) 57005-p1 - 57005-p6.
10.1209/0295-5075/111/57005

[学会発表] (計 25 件)

① 山瀬博之、鉄ニクタイト・カルコゲナイドの高温超伝導機構、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、2018/3/26-27、物質・材料研究機構 (茨城県・つくば市)

② 山瀬博之、我妻友明、超伝導不安定性に対する軌道ネマチック揺らぎとスピン揺らぎの効果、日本物理学会第 73 回年次大会、2018/3/22-25、東京理科大学野田キャンパス (千葉県・野田市)

③ H. Yamase, Incommensurate magnetic

order in the Hubbard model and its possible connection to high- T_c cuprate superconductors, Condensed Matter Physics Seminar, 2018/03/9, Faculty of Physics, University of Warsaw, Warsaw (Poland)

④ 山瀬博之、銅酸化物高温超伝導体における電荷励起スペクトラムの二面性、高温超伝導体とその関連物質における新奇な物理、2018/1/31-2/1、東北大学金属材料研究所 (宮城県・仙台市)

⑤ H. Yamase, Spin susceptibility in magnetically ordered phases, Quantum Many-Body Theory Seminar, 2017/12/12, Max-Planck-Institute for Solid State Research, Stuttgart (Germany)

⑥ 山瀬博之、久保木一浩、磁気秩序相での磁化率、高温超伝導フォーラム第 5 回会合、2017/9/25、岩手大学理工学部テクノホール (岩手県・盛岡市)

⑦ 山瀬博之、A. Greco, M. Bejas、 t - J 模型における局所電荷による励起スペクトラム、日本物理学会 2017 年秋季大会、2017/9/21-24、岩手大学上田キャンパス (岩手県・盛岡市)

⑧ H. Yamase, K. Kuboki, Longitudinal magnetic susceptibility in magnetically ordered phase, RIKEN Symposium International Workshop on Organic Molecular Systems, 2017/8/1-3, ParkRoyal Hotel, Pulau Pinang (Malaysia)

⑨ 山瀬博之、銅酸化物高温超伝導体における電荷とスピンの不安定性、超伝導研究の最先端：多自由度、非平衡、電子相関、トポロジ、人工制御、2017/6/19-21、京都大学基礎物理学研究所 (京都府・京都市)

⑩ H. Yamase, Hint from the interplay of superconductivity and antiferromagnetism in the two-dimensional Hubbard model, CMRC Workshop, 2017/3/24, KEK (茨城県那珂郡)

⑪ 山瀬博之、A. Eberlein, W. Metzner, S. Sachdev、スパイラル磁性によるフェルミ面の再構成とホールキャリア濃度の変化、日本物理学会第 72 回年次大会、2017/3/17-20、大阪大学 (大阪府・豊中市)

⑫ 山瀬博之、電荷秩序とフェルミ面再構成、日本物理学会第 72 回年次大会シンポジウム、2017/3/17-20、大阪大学 (大阪府・豊中市)

⑬ H. Yamase, Griffiths wings associated with electronic nematic phase transition, Harvard Condensed Matter Physics Seminar, 2017/2/9, Harvard University, Boston

(USA)

⑭ H. Yamase, Fermi surface reconstruction and spin/charge instability in high- T_c cuprates, Workshop Series of Condensed Matter by Neutron Scattering Group in Tohoku University, 2017/1/12-13, 東北大学金属材料研究所 (宮城県・仙台市)

⑮ H. Yamase, A. Eberlein, W. Metzner, S. Sachdev, Coexistence of incommensurate magnetism and superconductivity in the Hubbard model and Fermi surface reconstruction due to incommensurate orders, IWSRFM2016, 2016/12/20-22, 物質・材料研究機構 (茨城県・つくば市)

⑯ H. Yamase, A. Greco, M. Bejas, Charge excitations in high-temperature cuprate superconductors: charge orders with internal structure and plasmons, IWSRFM2016, 2016/12/20-22, 物質・材料研究機構 (茨城県・つくば市)

⑰ H. Yamase, Charge-order correlations with internal structure and plasmon excitations in high- T_c cuprate superconductors, Joint workshop of CMRS and PF Research Groups, 2016/9/20, KEK (茨城県・つくば市)

⑱ 山瀬博之, A. Greco, M. Bejas, 共鳴非弾性 X 線散乱で観る銅酸化物高温超伝導体のプラズモン励起, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016/9/13-16, 金沢大学 (石川県・金沢市)

⑲ 山瀬博之, M. Bejas, A. Greco, 電子ドープ系銅酸化物高温超伝導体の電荷秩序の理論研究, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016/3/19-22, 東北学院大学 (宮城県・仙台市)

⑳ 我妻友明, 山瀬博之, 軌道ネマチック揺らぎによる超伝導ギャップ, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016/3/19-22, 東北学院大学 (宮城県・仙台市)

㉑ 山瀬博之, ネマチック相転移のグリフィス翼, 理研シンポジウム: ミュオン科学応用の最先端, 2016/2/16-17, 理化学研究所 (埼玉県・和光市)

㉒ 山瀬博之, R. Zeyher, 鉄系超伝導体における軌道ネマチック揺らぎによる高温超伝導, 理研シンポジウム: ミュオン科学応用の最先端, 2016/2/16-17, 理化学研究所 (埼玉県・和光市)

㉓ 我妻友明, 山瀬博之, 軌道ネマチック揺

らぎによる超伝導のペアリングギャップ, 理研シンポジウム: ミュオン科学応用の最先端, 2016/2/16-17, 理化学研究所 (埼玉県・和光市)

㉔ 山瀬博之, 層状銅酸化物高温超伝導体におけるプラズモン励起, 量子ビーム利用技術の発展と物性研究, 2016/2/19-20, 東北大学金属材料研究所 (宮城県・仙台市)

㉕ 山瀬博之, 電子ドープ系銅酸化物高温超伝導体における電荷密度波の理論研究, 量子ビームによる銅酸化物超伝導体研究の最前線, 2015/11/18, KEK (茨城県・つくば市)

[図書] (計 1 件)

① 山瀬博之, 「鉄系超伝導, その風変わりな謎を追って」, パリティ Vol.31 No.06 (2016) 4-13.

[その他]

国際研究集会の主催

The research forefront of high- T_c cuprates, 2017 年 5 月 23-24 日, 作並温泉 (宮城県・仙台市)

ホームページ等

<http://www.nims.go.jp/nqt/yamase/jp>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山瀬 博之 (Hiroyuki Yamase)

国立研究開発法人物質・材料研究機構

機能性材料研究拠点

主幹研究員

研究者番号: 10342867