

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 15 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24340081

研究課題名(和文) 鉄系超伝導体の新規な多軌道物理現象と超伝導発現機構

研究課題名(英文) Novel orbital physics and mechanism of superconductivity in Fe-based superconductors

研究代表者

紺谷 浩 (Kontani, Hiroshi)

名古屋大学・理学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：90272533

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,700,000円

研究成果の概要(和文)：鉄系超伝導体における未解明問題である(i)電子ネマティック秩序の起源、および(ii)超伝導発現機構の研究を行った。電子ネマティック秩序は平均場近似では説明できない難問であった。本研究では平均場近似を超えた多体効果(バーテックス補正)を考慮することで、電子相関によって軌道秩序が発生することを見出した。本研究により、電子ネマティック秩序の起源が軌道秩序であることが明らかになった。FeSeにおける非磁性軌道秩序相は、本理論により初めて説明された。さらに、軌道秩序相近傍で発達する軌道揺らぎが媒介する引力相互作用が、高温超伝導状態の起源となることを見出した。

研究成果の概要(英文)：We studied (i) the origin of the C₂-symmetric electronic nematic order and (ii) the mechanism of high-T_c superconductivity in Fe-based superconductors. The nematic order cannot be explained within the mean-field-type approximations. However, we revealed that the orbital order originates from the vertex correction, which represents the mode-coupling between orbital and spin fluctuations. Therefore, the nematic order in Fe-based superconductors is satisfactorily explained as the C₂-symmetric electronic state due to the orbital order. By analyzing the vertex correction, the nematic order without magnetization in FeSe has been explained satisfactorily. In addition, we revealed that the orbital fluctuations give the strong pairing interaction that accounts for high-T_c superconductivity.

研究分野：物性理論

キーワード：強相関電子系 鉄系超伝導体 銅酸化物高温超伝導体 軌道秩序 電荷秩序 超伝導発現機構

1. 研究開始当初の背景

2008年に発見された鉄系超伝体の電子状態と超伝導発現機構の理解と解明は、強相関電子系の分野における最重要テーマの一つである。鉄系超伝導体で発現する非磁性電子ネマティック秩序（電子状態の回転対称性の自発的破れ）は、従来の標準的な電子相関の理論である乱雑位相近似（RPA）や揺らぎ交換（FLEX）近似では再現出来ない。正常状態が再現できない理論に基づく超伝導発現機構の研究は正当性を欠くため、相図の理論的再現は急務であった。電子ネマティック秩序の正体として、スピンネマティック秩序と軌道秩序の2つの可能性が提案され、長年の論争となっていた。電子ネマティック秩序の秩序パラメーターの同定がこの分野の急務であった。

2. 研究の目的

鉄系超伝体の電子ネマティック秩序を解明するためには、RPAやFLEX近似に含まれない多体効果を考慮した計算を遂行する必要がある。これらの近似ではネスティングにより磁気揺らぎが発達するが、非磁性状態における電子系の回転対称性の自発的破れは説明できない。我々は、RPAやFLEX近似に含まれない高次の多体効果である、バーテックス補正に着目した。バーテックス補正のうち、揺らぎの2次項であるAslamazov-Larkinバーテックス補正によって、軌道揺らぎとスピン揺らぎ間の強いモード間結合がもたらされることが見出された。我々はAslamazov-Larkinバーテックス補正を考慮することで、穏やかなスピン揺らぎが存在する状態で「強い軌道揺らぎ」が発達することを見出した。本研究の主な目的は、(i)電子ネマティック秩序・揺らぎの正体が軌道秩序・揺らぎであること、(ii)発達した軌道揺らぎが高温超伝導状態をもたらすこと、を理論的に明らかにすることである。

3. 研究の方法

本研究では、申請者とその共同研究者により開発された、自己無撞着バーテックス補正（SC-VC）法を各種鉄系超伝導体の有効多軌道ハバード模型に適用し、その電子状態や超伝導状態の説明を行った。SC-VC法では、上記のAslamazov-Larkinバーテックス補正を自己無撞着に計算することが可能である。SC-VC法に基づき、以下の重要未解明問題の理論的説明に取り組んだ：(i)弾性率測定や電子ラマン測定により測定された各種鉄系超伝導体における軌道揺らぎの発達。(ii)鉄系超伝導体FeSeにおける磁性を伴わない軌道秩序状態。(iii)FeSeの軌道秩序状態における符号反転を伴う軌道偏極。

4. 研究成果

(1)鉄系超伝導体における軌道揺らぎ・秩序の微視的導出（文献）：鉄系超伝導体の有

効模型である多軌道ハバード模型を、従来の標準的解析手法である乱雑位相近似（RPA）や揺らぎ交換近似（FLEX）を適用しても、軌道秩序相（いわゆる電子ネマティック相）の説明が出来ないため、その解明が中心的課題であった。我々は上記の理論に取り込まれない「バーテックス補正」と呼ばれる多体効果を自己無撞着に計算する「自己無撞着バーテックス補正法」を開発した。この手法を多軌道ハバード模型に適用することで、鉄系超伝導体における軌道秩序の再現に世界に先がけて成功した。Aslamazov-Larkinバーテックス補正がもたらすモード間結合により、穏やかなスピン揺らぎにより強い軌道揺らぎが誘起されることが解った。

(2)汎関数線り込み群に基づく軌道揺らぎ発現機構の研究（文献）：汎関数線り込み群法は、多数のバーテックス補正をバイアスなく生成する大変有力な計算手法である。我々は汎関数線り込み群法と摂動理論を組み合わせることで計算精度を向上させたRG+cRPA法を開発し、2軌道模型に適用した。その結果、Aslamazov-Larkinバーテックス補正を起源とする軌道揺らぎが発現することが明らかになった。Aslamazov-Larkinバーテックス補正の重要性が、自己無撞着バーテックス補正法（摂動理論）とRG+cRPA法（線り込み群理論）という異なる理論によって立証されたことは大変意義深い。

(3)鉄系超伝導体LaFeAsO+Hにおける状態相図の研究（文献）：LaFeAsO+HにおいてT_cのダブルドーム構造や斜方晶転移を伴わない新しい秩序相が観測され、理論的説明が待たれていた。我々は自己無撞着バーテックス補正法を適用し、上記の実験事実の理論的再現に成功した。

(4)鉄系超伝導体における電子ラマン感受率の理論構築（文献）：鉄系超伝導体では電子ラマン感受率が構造相転移温度T_sに向かって発散的に増大する。この実験事実は、構造相転移の起源が電荷の自由度に由来することを意味する。我々は線形応答理論を注意深くこの問題に適用し、Aslamazov-Larkinバーテックス補正を正しく考慮することで、電子ラマン感受率の実験事実の定量的再現に成功した。これにより、鉄系超伝導体における電子ネマティック相の秩序パラメーターがd軌道秩序であることが明確になった。

(5)銅酸化物高温超伝導体における電荷秩序相（CDW相）の理論的解明（文献）：2012年以降、銅酸化物高温超伝導体の擬ギャップ相において電荷秩序が発生していることが共鳴X線散乱やSTMによって明らかにされ、擬ギャップ現象の解明の鍵として注目を集めている。CDW相の特徴は、(i)波数がQ~(0.5π,0)、(0,0.5π)であり、Cu-Cu方向(axial

方向)である。また、(ii)電荷密度の変調はCu サイトではなくO サイトで起きており、最近接のO サイトの変調が逆位相になる d-wave type である。これらの実験事実を再現するため、2012 年以降、多くの著名理論家はその解明に取り組んだが、(i), (ii)を満足に説明する理論の構築は難しく、未解明問題であった。

我々は、鉄系超伝導体の軌道秩序・揺らぎを説明するために構築した「自己無撞着バーテックス補正法」を、銅酸化物高温超伝導体の有効モデルである 3 軌道 d-p 模型に適用して、この問題に取り組んだ。我々の研究により、Aslamazov-Larkin バーテックス補正により上記の実験事実 (i), (ii)が満足に説明できることが解った。反強磁性相近傍の発達したスピン揺らぎが d 波超伝導の有効引力を媒介することは良く知られている。我々の理論は、発達したスピン由来は同時に電荷秩序の有効相互作用も媒介し、その結果、磁性相と超伝導相の間に「電荷秩序相」が割って入ることが明らかになり、銅酸化物高温超伝導体の理論は新しいステージに突入したと言える。

(6)鉄系超伝導体 FeSe における「磁性揺らぎの発達を伴わない軌道揺らぎの発達」の理論的解明(文献): 鉄系超伝導体 FeSe では、構造相転移は $T_s=90\text{K}$ で起きた後に $T_c=9\text{K}$ で超伝導転移を示すが、磁性秩序は一切起きない。さらに、 T_s 以上では強い軌道揺らぎの発達が観測されるが、スピン揺らぎはほとんど発達しないという、際立った特徴を示す。それゆえ、鉄系超伝導体における電子ネマティック秩序の秩序パラメータの同定という重要課題を達成する上で格好の舞台として、近年精力的に研究されている。

我々は「自己無撞着バーテックス補正法」を、FeSe の高精度の微視的模型である 8 軌道 d-p ハバード模型に適用し、電子ネマティック秩序の正体が軌道秩序であることを見出した。本研究により、(i)FeSe のフェルミ面のサイズが非常に小さい、(ii)FeSe におけるフント結合 J とクーロン斥力 U の比が $J/U=0.0945$ (第一原理計算値)と際立って小さい、という 2 つの事実により、FeSe ではごく穏やかなスピン揺らぎが (Aslamazov-Larkin バーテックス補正のスピン・軌道モード結合を介して)強い軌道揺らぎをもたらすことが明らかになった。

(7) 鉄系超伝導体 FeSe における「符号反転軌道偏極状態」の理論(文献): FeSe に対するレーザー角度分解光電子分光 (ARPES) が実施され、軌道偏極 $\Delta E=E_{xz}-E_{yz}$ が著しい運動量依存性を有することが明らかになった。観測された ΔE は驚くことに、X 点、Y 点では他の鉄系同様に負であるが、 Γ 点では正であることが下志万達の AREPS により明らかにされた。この FeSe における「符号反転軌道偏極状態」は、軌道秩序の機構解明に直結する

極めて重要な実験事実であり、多くの理論家はその解明に取り組んだ。

我々は、「自己無撞着バーテックス補正法」を軌道秩序温度 T_s 以下へと拡張した「C2 バーテックス補正法」を開発し、その解明に取り組んだ。その結果、Aslamazov-Larkin バーテックス補正が主要項として軌道秩序をもたらすが、この項だけでは符号反転が説明できないことが解った。符号反転の説明の為に、主要項ではない Maki-Thompson バーテックス補正まで正確に取り込む必要があることが解った。数値計算により得られた軌道偏極の波数依存性は、下志万達の ARPES の結果と定量的に整合する。

我々の一連の研究により、FeSe をはじめ各種鉄系超伝導体の電子ネマティック秩序(揺らぎ)の正体は軌道秩序(揺らぎ)であり、その発現機構は Aslamazov-Larkin バーテックス補正であることが明らかになった。

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 25 件)

S. Onari and H. Kontani, Self-consistent Vertex Correction Analysis for Iron-based Superconductors: Mechanism of Coulomb Interaction-Driven Orbital Fluctuations, Phys. Rev. Lett. 109 (2012) 137001、査読有、DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.137001

M. Tsuchiizu, Y. Ohno, S. Onari, and H. Kontani, Orbital Nematic Instability in Two-Orbital Hubbard Model: Renormalization-Group + Constrained RPA Analysis, Phys. Rev. Lett. 111, 057003 (2013)、査読有、DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.057003

S. Onari, Y. Yamakawa, and H. Kontani, High-Tc Superconductivity near the Anion Height Instability in Fe-Based Superconductors: Analysis of LaFeAsO_{1-x}H_x, Phys. Rev. Lett. 112, 187001 (2014)、査読有、DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.187001

H. Kontani and Y. Yamakawa, Linear Response Theory for Shear Modulus C66 and Raman Quadrupole Susceptibility: Significant Evidence for Orbital Nematic Fluctuations in Fe-Based Superconductor, Phys. Rev. Lett. 113, 047001 (2014)、査読有、DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.047001

Y. Yamakawa and H. Kontani,

Spin-Fluctuation-Driven Nematic Charge-Density-Wave in Cuprate Superconductors: Impact of Aslamazov-Larkin-Type Vertex Correction, Phys. Rev. Lett. 114, 257001 (2015) 、 査読有 , DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.257001

Y. Yamakawa, S. Onari, and H. Kontani, Nematicity and Magnetism in FeSe and Other Families of Fe-Based Superconductors, Phys. Rev. X 6, 021032 (2016) 、 査読有 , DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevX.6.021032

S. Onari, Y. Yamakawa, and H. Kontani, Sign-Reversing Orbital Polarization in the Nematic Phase of FeSe due to the C₂ Symmetry Breaking in the Self-Energy, Phys. Rev. Lett. 116, 227001 (2016) 、 査読有 , DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.227001

[学会発表](計 30 件)

2013 APS March meeting, 3/18-3/22, Baltimore, MD, USA "Development of orbital and spin fluctuations in Fe-based Superconductors: self-consistent vertex-correction (SC-VC) method", Hiroshi Kontani (3/19 招待講演)

2013 Gordon Research Conferences, "Superconductivity", 5/12-5/17, 2013, Les Diablerets, Switzerland, "Novel orbital physics and phase diagram in iron-based superconductors", Hiroshi Kontani (5/14 招待講演)

International School , MULTI-CONDENSATES SUPERCONDUCTIVITY, July 19-25, 2014, Erice, Italy, Charge-Orbital-Spin Multimode Fluctuations due to Vertex Correction in Fe-Based Superconductors, High-Tc Cuprates, and Ruthenades", H. Kontani (7/21, 招待講演)

Gordon Research Conference "Unconventional Superconductivity: Materials and Mechanisms", May 24-29, 2015, The Chinese University of Hong Kong, Hong Kong, China "Why Orbital Order and Fluctuations Originate from the Coulomb Interaction in Multiorbital Hubbard Models?", H. Kontani (5/25, 招待講演)

[図書](計 2 件)

"Transport Phenomena in Strongly

Correlated Fermi Liquids (Springer Tracts in Modern Physics)", H. Kontani, Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K (2013), 188p, ISBN 13: 9783642353642 ISBN 10: 3642353649 "Iron-Based Superconductivity", S. Onari and H. Kontani (ed. P.D. Johnson, G. Xu, and W.-G. Yin, Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K (2015)).

[産業財産権]
出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

[その他]
ホームページ等
<http://www.s.phys.nagoya-u.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

紺谷浩 (KONTANI Hiroshi) 名古屋大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号: 18740197

(2) 研究分担者

松田祐司 (Matsuda Yuji) 京都大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号: 50199816