

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 15 日現在

機関番号：82108

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2014

課題番号：25800206

研究課題名(和文) 光でみる電荷・軌道ネマチック揺らぎの理論

研究課題名(英文) Theory of light scattering by charge and orbital nematic fluctuations

研究代表者

山瀬 博之 (Yamase, Hiroyuki)

独立行政法人物質・材料研究機構・超伝導物性ユニット・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) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：電子ネマチックとは、電子系において方向対称性のみが低下した状態であり、超伝導や磁性と同様な自発的対称性の破れに伴うものである。それ故に、その存在を確定することは物質科学研究の中で極めて重要な位置付けとなる。本研究では、電子ネマチックを記述する相関関数がラマン散乱で直接観測出来ることに着目し、鉄系高温超伝導体で議論されている軌道およびスピンに関する電子ネマチック揺らぎを解析した。各々の揺らぎによるラマン散乱理論を構築するとともに、軌道ネマチック揺らぎによる新規高温超伝導機構も提案した。

研究成果の概要(英文)：An electronic nematic state breaks orientational symmetry of the system but retains the other symmetries. This instability is driven by spontaneous symmetry breaking, as in the case of superconductivity and magnetism. Hence it is fundamentally important in materials science to establish the existence of the electronic nematic state. Here, motivated by an insight that electronic nematic correlation functions can be measured directly by Raman scattering, we study nematic fluctuations associated with orbital and spin, which are vigorously discussed in iron-based superconductors. We establish a theory of Raman scattering by both fluctuations and also propose a new mechanism of high-temperature superconductivity due to orbital fluctuations.

研究分野：物性理論

キーワード：物性理論 強相関電子系 光物性 ラマン散乱 ネマチック 自発的対称性の破れ 銅酸化物超伝導 鉄系超伝導

1. 研究開始当初の背景

(1) 電子ネマチックという新しい量子状態

液晶分野において、分子がある方向を向きながら動き回る状態はネマチック相と呼ばれ、光透過特性の変化を伴うその相制御は液晶ディスプレイ等に利用されている。もし、大きさを持たない電子（点電荷）が方向対称性を破る状態を作るのであれば、ネマチック状態の本質的に新しい概念となり得て未知の機能発現が期待される。1999年、驚くべきことに、フェルミ面の方向対称性が電子相関効果によって自発的に破れることが申請者らによって理論的に発見された(JPSJ (2000))。これは電子間の前方散乱効果によるもので、特に電荷ネマチックと呼ぶことが出来る(図1上)。また、電子は電荷以外にも軌道やスピンの自由度を持つので、それらの自由度を反映した新規量子ネマチック状態が実現する可能性も、この発見は示している。図1下は軌道ネマチックの例である。

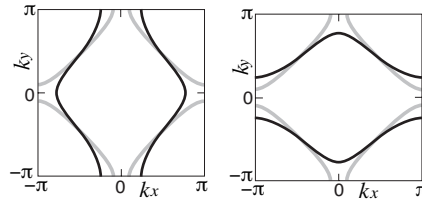
電子ネマチックは自発的対称性の破れに伴う量子状態である。超伝導や磁性に代表される電子系の自発的対称性の破れが物質科学にとって極めて重要な概念であることは周知の通りである。それ故に、電子ネマチックの学理形成もまた物性論の中で重要な位置を占め、新しいパラダイムを切開くことが期待される。しかし、現実の物質中では方向が互いに異なる電子ネマチックドメインの形成が予想され、一般的にはバルクに方向対称性の破れが観測出来ない。このことが実験的観測を困難にしている主な要因であり今までの研究発展には限界があった。

(2) 電荷及び軌道ネマチックの実験的示唆

ところが、2層系ルテニウム酸化物 $Sr_3Ru_2O_7$ 及び銅酸化物高温超伝導体である $YBa_2Cu_3O_y$ の純良単結晶で、電荷ネマチックの存在を強く示唆する、物理量の異方性がいくつか報告された。ルテニウム酸化物に対しては、図2左上に示す新たな相が低温中間磁場領域で発見され、特にこの相内でのみ残留電気抵抗に顕著なx, y異方性が観測された[1]。銅酸化物に対しては磁気励起に異方性があり(図2右上)、それがキャリア濃度が小さくなる程大きくなることが観測された[2]。また、ネルンスト係数にも巨大なx, y異方性が発見された[3]。

一方、ごく最近、鉄系高温超伝導体である $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ で磁気トルクに2回対称性成分がある温度以下で生じることが示された(図2下)[4]。この2回対称性成分は磁性相からかなり離れても存在すること、またフェル

電荷ネマチック



軌道ネマチック

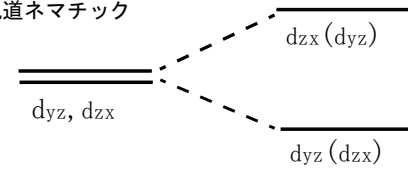


図1：(上) 電荷ネマチック。準粒子の前方散乱によって、フェルミ面の対称性が自発的に4回対称(灰色)から2回対称(実線)に低下する。(下) 軌道ネマチック。エネルギー的に縮退した d_{yz} と d_{zx} 軌道が電子相関効果によって(結晶場ではない)自発的に縮退が解け非等価になる。

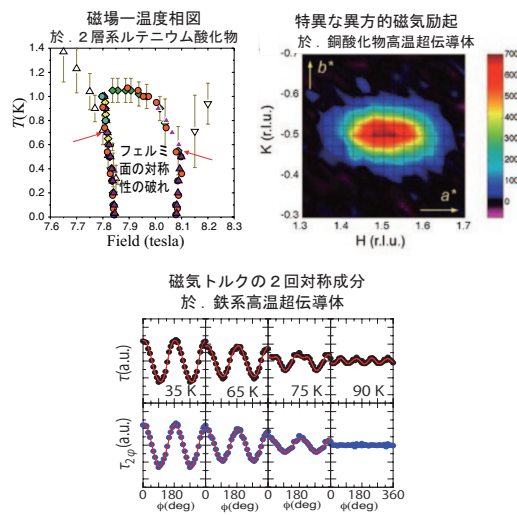


図2：電子ネマチックの実験的証拠。(左上) ルテニウム酸化物での磁場-温度相図。7.95テスラ近傍でフェルミ面の対称性が自発的に破れた相が実現する(Grigera et al, (2004))。(右上) 銅酸化物高温超伝導体における、低エネルギー磁気励起スペクトラムのマップ。スペクトラム強度が横方向に著しく異方的である(Hinkov et al, (2008))。(下) 鉄系高温超伝導体において、磁気トルク(上図)に75K以下で2回対称性成分(下図)が出現する(Kasahara et al, (2012))。

ミ面の形状がルテニウム酸化物や銅酸化物のそれとは著しく異なることから、電荷ではなく軌道またはスピンネマチックの可能性が注目されている。

このように電子ネマチックが特異な物性発現に深く関わっていることが実験的に示されつつある今、その研究は極めてホットである。しかし、これまでの報告は間接的な観測例であるため、幅広い物質に普遍的に適応出来、かつ電子ネマチックを直接的に観測する手段を確立することが急務である。

参考文献：[1] Grigera et al, Science 306, 1154 (2004); Borzi et al, Science 315, 214 (2007); Rost et al, Science 325, 1360 (2009), [2] Hinkov et al, Nature 430, 650 (2004); Nature Physics 3, 780 (2007); Science 319, 597 (2008), [3] Daou et al, Nature 463, 519 (2010), [4] Kasahara et al, Nature 486, 382 (2012).

2. 研究の目的

スピン相関関数を測定する中性子散乱が、物質の磁気的性質を最も直接的に明らかに出来るように、電子ネマチックの相関関数を直接測定する手段を確立することで新しい量子状態の研究を大きく進展させることが出来る。これが本研究を貫くアイデアである。

申請者は最近、結晶格子の持つ対称性を選択出来るラマン散乱で、電荷ネマチックの相関関数が測定出来ることを示すと共に、その理論を構築することに成功した (PRB 83, 115116 (2011))。本研究の期間内に、この理論を拡張し軌道ネマチックに対するラマン散乱理論を確立する。これによって軌道ネマチックの直接的検証を鉄系超伝導体に対して可能にする。

鉄系超伝導相は磁気相よりもむしろ電子ネマチック相に近接して実現している。したがって、仮に軌道ネマチック揺らぎが存在すれば、その揺らぎの効果によって高温超伝導性を導くことが出来るのか否か大変に興味深い。そこで、Eliashberg 理論の枠組みで軌道ネマチック揺らぎによる超伝導性を理論的に明らかにする。

ラマン散乱は電荷や軌道の揺らぎによっても生じるが、スピンの揺らぎもラマン散乱強度に寄与する。そこで、スピンネマチック揺らぎによるラマン散乱も考察する。特に、軌道ネマチックと顕著な違いがあるか否かにも着目し、鉄系超伝導体で見つかっている電子ネマチック相の起源の解明に向けて理論的示唆を与える。

ところで、ラマン散乱そのものは鉄系超伝導体に対して多くの実験が既になされている。しかし、電子ネマチックの効果は低エネルギー（例えば 100cm^{-1} 以下）に現れることが期待される。このエネルギー領域の実験は非常に少なく、かつ一般には難しい実験である。それ故に明確な理論的提案が必要になる。本研究はラマン散乱実験研究者に明確な指針を与えると共に、電子ネマチック相関関数の直接

観測を通じて、研究分野全体の大きな発展に理論の側から貢献することを目指す。

3. 研究の方法

(1) 軌道ネマチック揺らぎによるラマン散乱理論

電子ネマチックの特徴の一つはフェルミ面上にギャップが開かないことである。その状態でのラマン散乱理論は、電子の自己エネルギー効果を陽に取り込んで構築する必要があるため、一般には難しい理論テーマとして知られている。しかし、申請者は既に単バンド模型での電荷ネマチック揺らぎに対するラマン散乱理論の構築に成功している (PRB 83, 115116 (2011))。この理論を足がかりにして、鉄系高温超伝導体で示唆されている軌道ネマチックを記述するミニマル模型、つまり、鉄の d_{yz} と d_{zx} 軌道を含んだ 2 バンド模型への拡張を行い、ラマン散乱理論を構築する。このことにより、より直接かつ微視的な観点から軌道ネマチックを実験的に検証することを可能にする。特に散乱強度を B_{1g} 、 A_{1g} 、 B_{2g} という対称性によって分類出来るため、どの対称性に軌道ネマチック揺らぎによるシグナルが生じるかを論じることが出来る。軌道ネマチックの研究がまだ初期段階である現状を踏まえれば、このようなシステムの詳細には依存しない、より定性的な観点から決定的な議論が早期に出来る意義は大きい。

(2) 軌道ネマチック揺らぎによる高温超伝導機構

軌道ネマチック揺らぎによる超伝導機構を Eliashberg 理論の枠組みで調べる。特に軌道ネマチック揺らぎによって高い臨界温度を導けるか否かに注目する。そのために、電子の自己エネルギーの効果を含めた計算を低温領域まで行う必要がある。このような計算は、計算機のメモリー容量の制限の都合上ほとんど行われていない。計算を可能にするために、(1) で用いた軌道ネマチック揺らぎを記述する 2 バンドミニマル模型を用いる。また、他の実験・理論研究よりフェルミ面上での超伝導ギャップの波数依存性は弱いことが期待される。そこで、超伝導ギャップのフェルミ波数依存性を無視する近似を行う。さらに、異なるバンド間でのペアリングも無視する。

(3) スピンネマチック揺らぎ

スピンネマチック揺らぎによるラマン散

乱は、Aslamazov-Larkin ダイアグラムという高次の過程を通じて生じ、波数が Q と $-Q$ のスピン揺らぎを介する。このダイアグラムに含まれるバーテックス関数は、一般に波数とエネルギーに依存する。しかし、スピン揺らぎが波数 Q 近傍に大きなウェイトを持つ時、バーテックス関数は近似的に波数 Q で評価できる。また、バンド幅に代表される電子系の典型的なエネルギースケールよりもずっと低いエネルギー領域のラマン散乱に興味があるため、バーテックス関数をエネルギーゼロで評価する。このような近似を行うと、ラマン散乱強度の計算はスピンネマチック揺らぎの相関関数の計算に帰着する。結果として、ラマン散乱のみならず、スピンネマチック揺らぎの特徴も同時に明らかにする。

4. 研究成果

(1) 軌道ネマチック揺らぎによるラマン散乱理論

単バンドでの電荷ネマチック揺らぎに対する申請者らのラマン散乱理論 (PRB 83, 115116 (2011)) を、鉄系高温超伝導体で示唆されている軌道ネマチックを記述するミニマル 2 バンドモデルへ拡張した。その結果、 B_{1g} 偏光配置に対してはネマチック転移温度の高温側と低温側の両方で、一方、 A_{1g} に対してはネマチック転移温度の低温側でのみ、準弾性散乱ピーク、すなわちセントラルピークが現れることが分かった。 B_{2g} の偏光配置に対しては、軌道ネマチック揺らぎによる散乱は生じないことが判明した。本研究の後にラマン散乱実験も行われ、理論的予言と整合することも確かめられた。PRB 88, 125120 (2013) に報告した。

(2) 軌道ネマチック揺らぎによる高温超伝導機構

(1) のラマン散乱理論で用いたミニマルモデルを使って、軌道ネマチック揺らぎによってどのような超伝導が導かれるかを追求した。その結果、長波長、低エネルギーの軌道ネマチック揺らぎによって、BCS 超伝導とは異なる強結合 s 波超伝導が導かれること、フェルミ面のネスティング効果は重要ではないこと、典型的には 50K 程度の転移温度が得られること、軌道ネマチック相の中でも超伝導転移が生じること、そしてクーロン斥力による超伝導性の抑制は顕著ではないことが分かった。鉄系超伝導体では、主にスピン揺らぎや有限の運動量移行を伴う軌道揺らぎ

による超伝導機構が提案されている。本研究成果によって、運動量移行がゼロ近傍である軌道ネマチック揺らぎが新しい高温超伝導機構になり得ることが示された。PRB 88, 180502 (R) (2013) に報告した。

(3) スピンネマチック揺らぎ

スピンネマチックの引力相互作用が存在した時、スピンネマチック不安定性は、磁気相関長がある臨界長を超えると現れることが分かった。つまり、スピン密度波相転移の前にネマチック相が安定化する。特に、その臨界磁気相関長はスピンネマチック臨界温度 T_s が高くなるほど短くなる。付随して、低エネルギーのスピンネマチック揺らぎは、 T_s が高くなるほどより広い温度領域まで存在する。スピンネマチック臨界点に近づくと、波数がゼロにおいてスペクトラル関数は、エネルギーの関数として有限温度ではセントラルピークを、絶対零度ではソフトモードを示す。このようなスピンネマチックの特徴は、驚くべきことにスピン密度波相近傍での一般的なものであることが判明した。更に、スピンネマチックのスペクトラル関数は、波数ゼロ、エネルギーゼロ周りの散漫ピークとして現れ、明瞭な分散関係を示さないことが分かった。以上の理論結果に基づいて、スピンネマチック不安定性とその近傍にあるスピン密度波相という観点から鉄系超伝導体の相図を考察した。また、スピンネマチックと軌道ネマチック揺らぎの相違は、ゼロ温度近傍でのみ定性的な相違が現れることも明らかにした。arXiv: 1503.07646 に報告した。

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 2 件) すべて査読有り

① H. Yamase and R. Zeyher, Superconductivity from orbital nematic fluctuations, Phys. Rev. B 88, 2013, 180502 (R)-1 - 180502 (R)-5. 10.1103/PhysRevB.88.180502

② H. Yamase and R. Zeyher, Electronic Raman scattering from orbital nematic fluctuations, Phys. Rev. B 88, 2013, 125120-1 - 125120-11. 10.1103/PhysRevB.88.125120

[学会発表] (計 11 件)

- ① H. Yamase, High-temperature superconductivity from orbital nematic fluctuations in pnictides, Workshop on Quantum Materials, 2014/10/13-17, Max-Planck-Institute for Solid State Research, Stuttgart, Germany
- ② H. Yamase, Ising spin nematic fluctuations near spin-density-wave phase, Research Frontiers of Transition-Metal Compounds Opened by Advanced Spectroscopies, 2014/9/30-10/2, 東北大学金属材料研究所、宮城県仙台市
- ③ 山瀬博之、R. Zeyher、反強磁性相転移点近傍でのスピンネマチック揺らぎ、日本物理学会 2014 年秋季大会、2014/9/7-10、中部大学春日井キャンパス、愛知県春日井市
- ④ H. Yamase, High-temperature superconductivity from orbital nematic fluctuations in pnictides, Theory Seminar, 2014/6/10, ETH Zurich, Institute for Theoretical Physics, Zurich, Switzerland
- ⑤ H. Yamase, High-temperature superconductivity from orbital nematic fluctuations in iron pnictides, ITF-Seminar, 2014/6/4, IFW Dresden, Dresden, Germany
- ⑥ 山瀬博之、ネマチック揺らぎと超伝導、高温超伝導フォーラム、2014/3/26、上智大学、東京都千代田区
- ⑦ H. Yamase, Superconductivity from orbital nematic fluctuations, Theory seminar, 2013/12/3, University of Augsburg, Augsburg, Germany
- ⑧ 山瀬博之、軌道ネマチック揺らぎによる超伝導とラマン散乱、物性セミナー、2013/10/2、神戸大学、兵庫県神戸市
- ⑨ 山瀬博之、R. Zeyher、軌道ネマチック揺らぎによる超伝導、日本物理学会 2013 年秋季大会、2013/9/25-28、徳島大学、徳島県徳島市
- ⑩ H. Yamase, Superconductivity from orbital nematic fluctuations in iron pnictides, ICC-IMR International Workshop, 2013/7/23-25, 東北大学金属材料研究所、宮城県仙台市
- ⑪ H. Yamase, Superconductivity from orbital nematic fluctuations in iron pnictides, The New Generation in Strongly Correlated Systems, 2013/7/1-5, Sestri

Levante, Italy

[その他]
ホームページ等
<http://www.nims.go.jp/nqt/yamase>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山瀬 博之 (Hiroyuki Yamase)
独立行政法人 物質・材料研究機構・超伝導物性ユニット
主幹研究員
研究者番号：10342867