

令和 元年 6 月 13 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2015～2017

課題番号：15H03687

研究課題名（和文）強相関超伝導体における電荷・軌道・スピン複合自由度の協奏現象の理論解明

研究課題名（英文）Novel cooperative phenomena among charge, spin, and orbital degrees of freedoms in strongly correlated electron systems

研究代表者

紺谷 浩 (Hiroshi, Kontani)

名古屋大学・理学研究科・教授

研究者番号：90272533

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,000,000円

研究成果の概要（和文）：強相関電子系では、高次の多体効果である「バーテックス補正」の重要性に近年注目が集まっている。我々は、ダイアグラムの理論と汎関数線り込み群の理論を両輪に、鉄系超伝導体や銅酸化物超伝導体におけるバーテックス補正の包括的研究を遂行し、未解明問題の解決に取り組んだ。その結果、これらの系で広く観測される電子状態が自発的に回転対称性を破る「電子ネマティック秩序」の発現機構が、Aslamazov-Larkin型バーテックス補正であることを見出した。その物理的意味は「電荷・スピン・軌道の量子的縫れ合い」であり、強相関電子系において大変重要な役割を果たす。

研究成果の学術的意義や社会的意義

鉄系超伝導体や銅酸化物超伝導体における「電子ネマティック秩序」は、従来の標準的理論（平均場近似など）では理解不可能であり、その理論的解明が急務であった。本研究で我々は、高次の多体効果である「バーテックス補正」の重要性にいち早く注目して理論を発展させ、電子ネマティック秩序の理論的再現に成功した。開発された理論手法は、重い電子系など他の強相関電子系にも適用可能であると期待される。また、電子ネマティック秩序の揺らぎは超伝導ペアリング機構を与えるため、鉄系超伝導体や銅酸化物超伝導体における高温超伝導発現機構の解明に向けての、重要な足掛かりを与える。

研究成果の概要（英文）：In strongly correlated electron systems, impact of vertex corrections (VCs), which describes the higher-order many-body effects, attract increasing attention. Here, we perform the theoretical study of VCs in Fe-based and cuprate superconductors, based on both the diagrammatic method and functional RG method. We revealed that the “electronic nematic states” observed in these strongly correlated systems, originate from the Aslamazov-Larkin VCs. The physical meaning of the Aslamazov-Larkin VCs is the “quantum interference between charge, spin, and orbital fluctuations”, which is found to be very important in various strongly correlated electron systems.

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 銅酸化物超伝導体 重い電子系 超伝導機構 電子ネマティック秩序 多極子秩序

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 本研究の開始当初、鉄系超伝導体や銅酸化物高温超伝導体などの強相関超伝導体の超伝導発現機構が盛んに研究されていた。しかしながら、超伝導状態の母胎である「正常状態」の相図の理解は遅れていた。鉄系超伝導体の母物質では、磁気秩序相 ($T=T_N$) より高温から軌道秩序相 ($T=T_S$) が生じ、FeSe に至っては、常圧下において $T_S=90\text{K}$ にも関わらず磁気秩序相は存在しない ($T_N<0$)。また Yb 系、La 系、Bi 系、Hg 系など殆どの銅酸化物超伝導体において、低ドーピング試料の擬ギャップ相で波数 $Q_c \sim (\pi/2, 0)$, $(0, \pi/2)$ の電荷秩序が生じる。つまり、これら 2 種類の高温超伝導体では「電荷・軌道の秩序」が広いドーピング領域で生じ、電荷や軌道の自由度が活性である。これらの事実は、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。

(2) これらの電荷・軌道秩序の再現において、今まで無視されてきた高次の多体効果である「パーテックス補正」の重要性が、次第に明らかになりつつあった。パーテックス補正は電荷・軌道・スピンの 3 自由度の結合項を与え、これら複合自由度の多彩な協奏効果の源泉となる。その頃我々は「自己無撞着パーテックス補正 (SC-VC) 法」を開発し、鉄系超伝導体の 5 軌道八バード模型に適用することで、軌道秩序の再現に成功していた。しかし FeSe の多彩な相図 (常圧下への磁性を伴わない軌道秩序相、圧力誘起磁気秩序相など) など、未解明の問題が山積していた。軌道・磁性秩序相に隣接した最適ドーピング領域では、軌道揺らぎとスピン揺らぎが協調して発達する。軌道揺らぎが優勢であれば「符号反転の無い s_{++} 波状態」が実現し、LiFeAs や $\text{BaFe}_2(\text{As}, \text{P})_2$ におけるギャップ構造が再現できることを見出したが、まだ現象論にとどまっていた。

2. 研究の目的

(1) 鉄系および銅系高温超伝導体において軌道秩序や電荷秩序が最近相次いで発見され、電荷・軌道自由度の本質的役割に大変注目が集まっている。これらの電荷・軌道秩序は、今まで無視されてきた高次の多体効果である「パーテックス補正」を考慮すれば、再現できることがわかってきた。パーテックス補正は電荷・軌道・スピンの 3 自由度の結合項を与え、これら複合自由度の多彩な協奏効果の源泉となる、大変重要な研究対象である。本研究では、新規理論である「自己無撞着パーテックス補正 (SC-VC) 理論」と「汎関数繰り込み群 (functional RG) 理論」を両輪として、各種強相関超伝導体におけるパーテックス補正の役割を研究する。本研究により電荷・軌道秩序の起源を明らかにし、超伝導発現機構や擬ギャップ現象をはじめとする重要未解明問題の解決を目指す。

3. 研究の方法

(1) 我々が最近開発した SC-VC 理論では、揺らぎの 2 次の汎関数である Asamozov-Larkin (AL) 型パーテックス補正 (= 揺らぎ間の干渉効果) を自己無撞着に計算する。AL 型パーテックス補正の効果により、RPA では再現できない軌道・スピン複合揺らぎを説明できが、その数値計算は大変困難であった。そこで本研究では、SC-VC 理論の計算速度および計算精度を大幅に向上することで、FeSe をはじめとする手鉄系超伝導体相図の解明に取り組む。更に、高次の AL 型パーテックス補正を計算する新手法 (非従来型秩序方程式の方法) を開発し、FeSe や銅酸化物高温超伝導体に適用する計画を立てた。

(2) SC-VC 法と並行して、パーテックス補正の系統的な計算が可能な「functional RG 法」の研究計画を立案した。我々は過去の研究で、functional RG 法と摂動理論と効率よく組み合わせた $\text{RG}+\text{cRPA}$ 法を開発した。この手法を多軌道八バード模型に適用し、SC-VC 法と同様な軌道揺らぎの導出に成功した。本研究で我々は、 $\text{RG}+\text{cRPA}$ 法をさらに改善・発展させる。我々は、SC-VC 法と $\text{RG}+\text{cRPA}$ 法という新規計算手法を両輪として、鉄系・銅系・ルテニウム系超伝導体における重要未解明問題の解決を目指した。

4. 研究成果

(1) 鉄系超伝導体における電子ネマティック秩序:

電子系が自発的に回転対称性を破る電子ネマティック秩序は、鉄系超伝導体の多体電子状態の本質として注目を集めてきた。特に FeSe における磁性秩序を伴わない軌道秩序を理論的に説明することが、理論家の急務であった。我々は、SC-VC 理論を拡張して FeSe の有効模型に適用し、その説明に成功した [論文、]。特に図 1 に示すような、FeSe において角度分解高電子分光 (APES) で観測された「運動量空間で符号反転を伴う軌道秩序」の再現に成功した。これらの研究成果により、鉄系超伝導体の電子ネマティック秩序の正体が「非同所的な軌道秩序」であり、その起源が図 2 の高次パーテックス補正が記述する「スピン・軌道間の量子的もつれ」であることが明らかになった。我々の理論は、鉄系超伝導体にとどまらず、各種強相関電子系 (遷移金属化合物や重い電子系化合物) の様々な電子ネマティック秩序に適用可能であることが、明らかになりつつある。

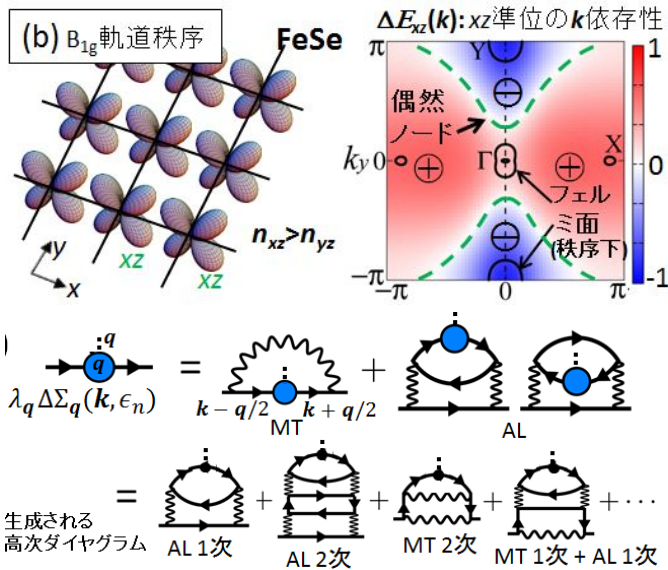


図1：(左) 鉄系超伝導体における軌道秩序の模式図。(右) FeSe 模型を解析して得られた「運動量空間で符号反転を伴う軌道秩序」。電子ネマティック秩序相におけるフェルミ面の变形は、ARPES の実験結果を良く再現する。

図2：我々が開発した線形 CDW 方程式と、自動生成される高次バーテックスの例。 $q(k)$ は自己エネルギーの対称性の破れであり、波数依存性を持つ。

(2) 鉄系超伝導体の超伝導発現機構：

鉄系超伝導体では、軌道秩序相に隣接した正方晶相において、発達した軌道の揺らぎ（電子ネマティック揺らぎ）が観測される。発達した軌道の揺らぎは、符号反転の無い S++波超伝導に対する引力機構を与えるが、その微視的理論は未発達であった。我々は、従来の標準理論である Migdal-Eliashberg 理論にバーテックス補正を導入した「Migdal 近似を超えたギャップ方程式」を構築し、鉄系超伝導体における軌道揺らぎが媒介する超伝導機構を研究した[論文]。その結果、Ba122 系の s 波超伝導ギャップ構造の特徴（ホール面上のフルギャップおよび電子面上のループ状ノード）や、ホール面を持たない過剰電子ドーピング FeSe における異方的 s 波超伝導ギャップの構造を、軌道揺らぎ機構に基づき再現することに成功した。更に、本理論を多軌道系 Sr2RuO4 に適用し、スピントリプレット機構を議論した[論文]。

(3) 鉄系超伝導体のスピンレゾナンス機構：

鉄系超伝導体の超伝導状態として、符号反転を持つ S± 波状態と、符号反転を伴わない S++ 波状態の両方の可能性がある。その区別を行うために様々な位相敏感実験が提案され、実行されてきた。鉄系超伝導体では、非弾性中性子散乱により観測される動的スピン感受率が、有限のエネルギーで共鳴的なピークを示す「スピンレゾナンス」を示し、S± 波状態の符号反転をとらえた実験として注目を集めてきた。しかし我々は、論文 で詳細な理論計算を実施し、非弾性散乱による自己エネルギーの s 顕著なエネルギー依存性を考慮することで、むしろ S++ 波状態として自然に再現できること理論的に明らかになった。

(4) 銅酸化物超伝導体の電子ネマティック秩序：

銅酸化物超伝導体において、2012 年頃から共鳴 X 線散乱実験により擬ギャップ領域内で周期 4 の電荷密度波が温度 T_{CDW} で出現することが明らかになり（図 3(a)(b)）、さらに最近では擬ギャップ温度 T ($> T_{CDW}$) で電子状態の回転対称性が破れるネマティック秩序が発見され、現在研究が活況を帯びている。我々は、その解明のために、図 2 の CDW 方程式や RG+cRPA 理論に基づく包括的な理論解析を遂行した[論文]。その結果、温度 T で強制的ボンド秩序、温度 T_{CDW} でストライプボンド秩序が起きる、多段ボンド秩序の修験を理論的に予言し、銅酸化物超伝導体の新しい相図の説明を行った。ボンド秩序とは、電子相関の有効 hopping の対称性が破れ(秩序変数 $\pm t$)である。本研究により、銅酸化物超伝導体における高次多体効果 (AL 型バーテックス補正) の重要性が明らかになった。

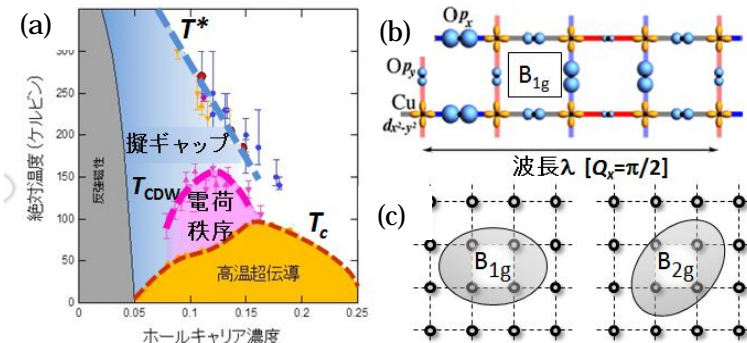


図3：(a) 銅酸化物超伝導体の模式的な相図。(b) 理論的に予言される、周期 4 のボンド秩序(論文)、(c) Y 系(Hg 系)化合物では、B1g 対称性 (B2g 対称性) ボンド秩序が観測される。

5 . 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 9 件)

Lisa Takeuchi, Youichi Yamakawa, and Hiroshi Kontani, “Self-energy driven resonancelike inelastic neutron spectrum in the s(++)-wave state in Fe-based superconductors”, PHYSICAL REVIEW B 98, 165143 (2018)、査読有

Hironori Nakaoka, Youichi Yamakawa, and Hiroshi Kontani, “Pairing mechanism for nodal s-wave superconductivity in BaFe₂(As, P)₂: Analysis beyond Migdal-Eliashberg formalism”, Phys. Rev. B 98, 125107 (2018)、査読有

Kouki Kawaguchi, Youichi Yamakawa, Masahisa Tsuchiizu, and Hiroshi Kontani, “Competing Unconventional Charge-Density-Wave States in Cuprate Superconductors: Spin-Fluctuation-Driven Mechanism”, JOURNAL OF THE PHYSICAL SOCIETY OF JAPAN 86, 063707 (2017)、査読有

Youichi Yamakawa, Seiichiro Onari, and Hiroshi Kontani, “Nematicity and magnetism in FeSe and other families of Fe-based superconductors”, Physical Review X 6, 021032 (2016)、査読有

Seiichiro Onari, Youichi Yamakawa, and Hiroshi Kontani, “Sign-reversing orbital polarization in the nematic phase of FeSe due to the symmetry-breaking in the self-energy”, Physical Review Letters 116, 227001 (2016)、査読有

Masahisa Tsuchiizu, Youichi Yamakawa, and Hiroshi Kontani, “p-orbital density wave with d symmetry in high-T_c cuprate superconductors predicted by renormalization-group plus constrained RPA theory”, PHYSICAL REVIEW B 93, 155148 (2016)、査読有

Masahisa Tsuchiizu, Youichi Yamakawa, and Hiroshi Kontani, “Orbital density wave with symmetry in high-_c cuprate superconductors predicted by the renormalization-group + constrained RPA theory”, Physical Review B 93, 155148 (2015)、査読有

Youichi Yamakawa and Hiroshi Kontani, “Spin-Fluctuation-Driven Nematic Charge-Density Wave in Cuprate Superconductors: Impact of Aslamazov-Larkin Vertex Corrections”, Physical Review Letters 114, 257001 (2015)、査読有

Masahisa Tsuchiizu, Youichi Yamakawa, Seiichiro Onari, Yusuke Ohno, and Hiroshi Kontani, “Spin-triplet superconductivity in Sr₂RuO₄ due to orbital and spin fluctuations: Analyses by two-dimensional renormalization group theory and self-consistent vertex-correction method”, Physical Review B, 91, 1551032 (2015)、査読有

[学会発表] (計 9 件)

H. Kontani and S. Onari, “Diverse nematicity and superconductivity in high-T_c superconductors (invited talk)”, the 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M2S 2018), Beijing, China, August 2018

H. Kontani, “Spin fluctuation driven nematicity in Fe-based and high-T_c superconductors (invited talk)”, 6th International Conference On Superconductivity & Magnetism, Turkey, April 2018

H. Kontani, “Nematicity and superconductivity in Fe-based and cuprate superconductors: Impact of Aslamazov-Larkin vertex corrections (invited talk)”, APCTP Workshop on Pairing Interaction of High Temperature Superconductors (WPIHTSC), Seoul, Korea, November 2016

H. Kontani, “Orbital Order and Superconductivity in FeSe and Other Fe-based Superconductors (invited talk)”, The 17th International Conference on High Pressure in Semiconductor Physics (HPSP-17) & Workshop on High Pressure Study on Superconducting (WHS), Tokyo, Japan, August 2016

H. Kontani, “Theory of S₊₊ Wave Superconductivity in FeSe: Beyond the Migdal-Eliashberg Approximation (invited talk)”, EMN 2016 Prague Meeting, Prague, Czech, June 2016

H. Kontani, “Origins of the nematicity and superconductivity in FeSe and other Fe-based superconductors (invited talk)”, Superstripes 2016, Ischia, Italy, June 2016

H. Kontani, “p-orbital density wave with d-symmetry in high-T_c superconductors predicted by the renormalization-group + constrained-RPA study (invited talk)”, International Workshop & Seminar on Strong Correlations and the Normal State of the High Temperature Superconductors, Dresden, Germany, May 2016

H. Kontani, “Orbital order driven by vertex corrections (invited talk)”, Workshop on the two-dimensional chalcogenides: exotic electronic orders, superconductivity and magnetism 2015, IFW Dresden, Germany, September 2015

H. Kontani, “Orbital order driven by vertex corrections (invited talk)” SUPERSTRIPES 2015, Ischia, Italy, June 2015

〔図書〕(計1件)

S. Onari and H. Kontani, “Orbital plus Spin Multimode Fluctuation Theory in Iron-based Superconductors”, IRON-BASED SUPERCONDUCTIVITY (Springer Series in Materials Science book series) 211, pp.331-376, 2015年

〔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

研究室のホームページ：<http://www.s.phys.nagoya-u.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：下志万 貴博

ローマ字氏名：SHIMOJIMA, Takahiro

所属研究機関名：国立研究開発法人理化学研究所

部局名：創発物性科学研究センター

職名：研究員

研究者番号(8桁)：70581578

研究分担者氏名：大成 誠一郎

ローマ字氏名：OONARI, Seiichiro

所属研究機関名：名古屋大学

部局名：理学研究科

職名：准教授

研究者番号(8桁)：80402535

(2) 研究協力者

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。