

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年6月3日現在

機関番号：82108

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2010～2012

課題番号：22740238

研究課題名（和文）フェルミ面の自発的対称性の破れの理論的研究

研究課題名（英文）Theoretical study of spontaneous symmetry breaking of Fermi surface

## 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・主任研究員

研究者番号：10342867

## 研究成果の概要（和文）：

フェルミ面の自発的対称性の破れは理論先行の新しい概念であるが、最近、二層系ルテニウム酸化物、銅酸化物及び鉄系高温超伝導体でその可能性が実験的に示唆された。実験的に浮上した問題点を足がかりにして、強磁性や他の電荷不安定との競合関係の包括的解析、方向対称性の破れの揺らぎによる超伝導機構の提案、ラマン散乱による直接検証に向けた理論的予言、汎関数繰り込み群によるフェルミ面の揺らぎや強磁性揺らぎの解析、スケーリング理論による相転移点近傍での一般的性質の解明とその実験的検証、フェルミ面の揺らぎによる一電子スペクトラムの非摂動論的解析を行った。

## 研究成果の概要（英文）：

The spontaneous symmetry breaking of the Fermi surface is a new concept found in theory. This symmetry breaking is inferred from recent experiments for bi-layered ruthenates and iron-based and cuprate high-temperature superconductors. Motivated by these experiments we studied the competition with ferromagnetism and other charge orders, a superconducting mechanism due to fluctuations of the orientational symmetry breaking, and Raman scattering which can detect such fluctuations directly. Effects of the fluctuations were explored further by employing a functional renormalization group scheme and scaling theory and we proposed an experimental test for a general property near the phase transition. Ferromagnetic fluctuations were also studied in terms of a functional renormalization group. Finally we achieved a non-perturbative analysis of the one-particle excitation spectrum near the Fermi surface symmetry breaking.

## 交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2011年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2012年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	3,100,000	930,000	4,030,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性II

キーワード：物性理論、金属物性、強相関電子系、光物性、フェルミ面、ネマチック、強磁性、繰り込み群

## 1. 研究開始当初の背景

### (1) フェルミ面の自発的対称性の破れという新規現象

電子系はある結晶格子の上に定義され、その結晶は点群の対称性によって分類される。そのため、電子系も点群の対称性を満たすのが普通である(図1)。ところが驚くべき事に、電子相関効果によって、フェルミ面の持つ対称性が自発的に破れることが1999年に研究代表者らによって世界で初めて理論的に示された[1]。例えば、右図に示すように正方格子上での4回対称なフェルミ面(図1)が、自発的に2回対称(図2)に低下する。この不安定性は金属物性の一般的な性質であり、様々な系でその影響が見られる可能性がある。しかし、対応する観測可能な物理量が非自明であったこと、更に試料の超高純良化が必要であったことから、これまでの研究発展には限界があった。

[1] HY, H. Kohno, JPSJ 69, 332 (2000); 2151 (2000).

### (2) フェルミ面の対称性の破れの実験的支持

ところが、最近、銅酸化物高温超伝導体  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$  及び二層系ルテニウム酸化物  $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$  において、フェルミ面の対称性の破れの観点から良く説明できる実験結果が得られた。銅酸化物に対しては(図3左)、中性子非弾性散乱実験[2]によって、磁気励起の異方性が観測され、それが超伝導転移温度近傍で最も顕著になること、更にキャリア濃度が小さくなる程大きくなることが発見された。これらの振る舞いは、フェルミ面の対称性の破れの揺らぎと超伝導との競合、及びモット転移に近づくことに伴うフェルミ面の揺らぎの増強効果として理解出来ることが理論的に示された。ルテニウム酸化物に対しては、図3右に示す新たな相が低温中間磁場領域で発見された。特にその領域で電気抵抗に顕著な  $x, y$  異方性が観測されたことは、対称性低下を直接的に示しており[3]、実際、フェルミ面の自発的対称性の破れを考えることで相図を始め多くの実験データが理解出来ることが様々な理論研究で示された。

[2] Hinkov et al, Nature 430, 650 (2004); Nat. Phys. 3, 780 (2007); Science 319, 597 (2008). [3] Grigera et al, Science 306, 1154 (2004); Borzi et al, Science 315, 214 (2007); Rost et al, Science 325, 1360 (2009).

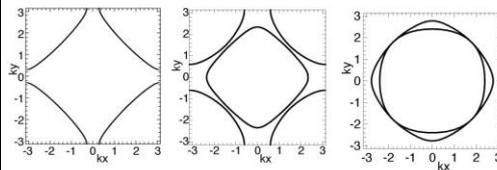


図1：正方格子上でのフェルミ面の例。形状は異なるが、すべて同じ4回対称性を持つ。

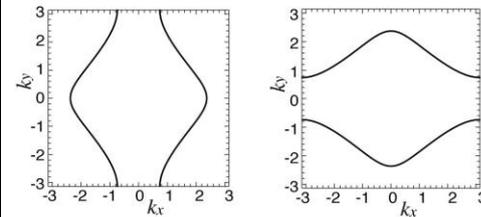


図2：図1左端のフェルミ面が自発的に2回対称に低下する例。

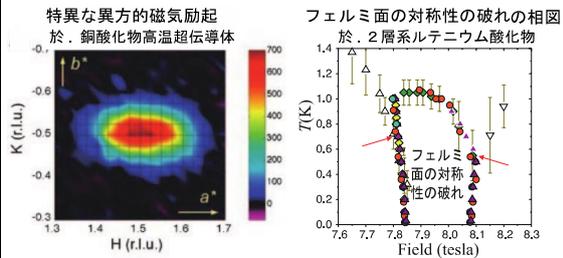


図3：フェルミ面の自発的対称性の破れを示唆する実験結果。(左)銅酸化物高温超伝導体における、低エネルギー磁気励起スペクトラムのマップ。スペクトラム強度が横方向に著しく異方的である[2]。(右)ルテニウム酸化物での磁場-温度相図。7.95テスラ近傍でフェルミ面の対称性が自発的に破れた相が実現する。白抜きの三角印はクロスオーバー現象が観測された位置を示す[3]。

## 2. 研究の目的

フェルミ面の自発的対称性の破れは理論先行の概念ではあったが、前節のような実験的支持が得られるにつれ、多くの研究者の興味を惹くようになった。フェルミ面の自発的対称性の破れは、金属物性の一般的性質である。更に、超伝導や磁性と並ぶ電子系の新たな自発的対称性の破れの一つでもある。超伝導や磁性が物性論を貫く基礎概念として欠くべからず重要であることは周知の通りである。それ故、フェルミ面の自発的対称性の破れも物性論に新しいパラダイムを与える可能性があり、その学理形成は極めて重要な位置を占めることが期待される。この対称性の破れが原因であることを示唆する様々な実験結果が得られ始めている、この好機を逸することなく、本研究は、「フェルミ面の自発的対称性の破れ」という新しい研究分野の発展に大きく貢献するために、理論と実験を

結びつける基盤を構築することを目指す。

### 3. 研究の方法

フェルミ面の自発的対称性の破れの可能性が示唆されている、二層系ルテニウム酸化物及び銅酸化物高温超伝導体の実験結果から浮上した問題点を取り上げる。また、光散乱を利用したフェルミ面の対称性の破れの直接観測へ向けた理論的予言を行う。更に、軌道の自由度に起因した方向対称性の破れが鉄系高温超伝導体で示唆された研究の発展状況を踏まえ、フェルミ面の対称性の破れの概念を軌道の自由度を含めた場合へと拡張する。これらの研究を一層高い競争力で推進するために、各々の理論分野のエキスパートと適宜議論を行う。

#### (1) ルテニウム酸化物

超伝導のBCS理論ではユニバーサルな量があり、それが実験結果と定量的に一致することが理論の正しさを決定付けた。同様に、フェルミ面の自発的対称性の破れも種々のユニバーサルな量で特徴付けられ、直接実験と定量的比較が可能であることが最近明らかになった。その結果、多くのユニバーサルな量はルテニウム酸化物の実験データと良く一致したが、いくつかの量は一致しないことが判明した。その理由の一つとして、フェルミ面の対称性の破れと競合する強磁性揺らぎが背後にある可能性が浮上した。そこで、フェルミ面の対称性の破れと強磁性揺らぎの関係を理論的に明らかにすることで先鞭をつける。平均場理論の解析は、研究代表者が以前に行ったモデル解析 (PRB 76, 115117 (2007)) に強磁性の効果を取り込むように拡張することで行う。フェルミ面の対称性の破れに伴う揺らぎは van Hove 特異点近傍で生じるために、摂動論的取り扱いが破綻する。この理論的困難を克服するため、電子相関理論の最先端技術である汎関数くり込み群を用いる。研究代表者らがその応用に成功した、PRL 103, 220602 (2009)の研究を足がかりにする。一方、強磁性揺らぎの解析に関しては、既に多くの研究者によって利用されている、温度をカットオフパラメータにとる汎関数繰り込み群の形式を用いて行う。強磁性とフェルミ面の対称性の破れの揺らぎを同時に扱うことは将来の課題とする。より一般的な観点から洞察を得るために、フェルミ面の対称性の破れの臨界点近傍に着目してスケールリング理論を用いた一般的な解析も行う。

#### (2) 銅酸化物高温超伝導体

イットリウム系銅酸化物高温超伝導体において、磁気励起スペクトラムや輸送係数に顕著な  $x$ ,  $y$  異方性が観測されている。観測される異方性は低ドーブ側でより大きくなる。この背後にフェルミ面の対称性の破れの集団励起モードが存在する可能性が理論的に示されている。一方、低ドーブ側では超伝導転移温度よりも遥か高温から大きなギャップが電子の一粒スペクトラムに現れること、つまり擬ギャップが存在することが広く知られておりその起源の解明が大きな研究テーマになっている。この問題へ一石を投じることを目指して、フェルミ面の対称性の破れの揺らぎによる、電子の自己エネルギーを明らかにする。計算は、量子臨界点近傍で電子の自己エネルギーを計算した論文、PRB 73, 045127 (2006)を足がかりにする。

フェルミ面の対称性の破れは電荷の不安定性の一つである。通常の電荷密度波や電荷ストライプ等、他の電荷不安定も銅酸化物では盛んに議論されている。そこで、すべての可能な電荷不安定性を同時にかつ同等に取り扱い、どの不安定性が理論的に確からしいかを明らかにする。このような系統的な研究は過去にはなかった。銅酸化物高温超伝導体の有効模型である二次元  $t$ - $J$  模型を用いて、それを経路積分で定式化し、相互作用項を  $1/N$  展開する理論を用いることで解析を行うことが出来る。

#### (3) ラマン散乱理論

フェルミ面の対称性の破れの相関関数を直接実験的に測定出来れば、研究分野の大きな発展につながることを期待される。対称性の破れは波数ゼロで生じることから光散乱実験が適切で、かつ特徴的な運動量依存性を介して電子系と結合するラマン散乱が有力候補である。そこで、ファインマンダイアグラムを駆使した理論的枠組みを用いて、フェルミ面の対称性の破れによるラマン散乱理論を定式化する。更に、ラマン散乱スペクトラムをフェルミ面の対称性の破れの臨界点近傍で数値的に計算する。

#### (4) 鉄系高温超伝導体への拡張

鉄系高温超伝導体において、電気抵抗の顕著な  $x$ ,  $y$  異方性が観測され、方向対称性の自発的破れの可能性が盛んに議論され始めた。2012年には磁気トルク実験においても方向対称性の破れが広い組成領域で報告された。方向対称性の破れは、フェルミ面の自発的対称性の破れを同時に引き起こすが、その

起源として軌道自由度に関連したもの、つまり波数ゼロの軌道秩序として理解出来る可能性が現在盛んに議論されている。波数がゼロであるために同様にラマン散乱実験が直接的な観測手段を与えることが期待される。そこで、上記(3)の研究を軌道の自由度を取り込んだ場合に拡張する。

また、鉄系高温超伝導体の超伝導機構として、方向対称性の破れを導く軌道揺らぎが関連している可能性も浮上した。その揺らぎによる超伝導の特徴を、Eliashberg 理論を用いて明らかにする。

#### 4. 研究成果

##### (1) ルテニウム酸化物

① **フェルミ面の対称性の破れと強磁性の競合物性。** どちらの秩序変数も波数ゼロで特徴づけられることに着目して、両者の競合物性の特徴を捉える前方散乱モデルを提案し、その包括的解析を行った。両者は一般に競合関係にあるが、共存相も存在することが分かった。一方、磁場中では、フェルミ面の対称性の破れとメタ磁性転移の競合が生じる。強磁性相互作用を強くすると、ある値を境にして前者から後者への転移に移り変わり、常に両者は背反的であることが分かった。特に、強磁性相互作用によって、フェルミ面の対称性の破れが生じる磁場領域とその磁場スケールが著しく減少する、しかし、相転移温度は普遍であり、かつフェルミ面の対称性の破れに伴う一次相転移の温度領域が増大することを見いだした。これらの結果は、二層系ルテニウム酸化物において磁場中で観測されている相図(図3参考)を特徴づける諸々のエネルギー量をほぼ定量的に再現出来る。PRB (2013)に報告した。

② **汎関数くりこみ群を用いた、フェルミ面の対称性の破れに伴う揺らぎの解析。** フェルミ面の対称性の破れは離散対称性の破れのため、二次元系においても有限温度で相転移が可能である。しかし、揺らぎによって相転移そのものが絶対零度でも消失する可能性があること、更にこのことが電子の状態密度が高い van Hove 特異点の近傍で生じる、という驚くべき結果を得た。秩序状態が消失した時の基底状態は非フェルミ液体になっている可能性を論じた。PRB (2011)に報告した。

③ **汎関数くりこみ群を用いた、二次元強磁性揺らぎの解析。** 二次元ハバードモデルを用いた結果、van Hove フィリング近傍で強磁性揺らぎが強く発達すること、van Hove フィリ

ングより高濃度電子密度だと非整合強磁性の臨界揺らぎが発達し、一方より低濃度電子密度だと、常伝導相から(整合)強磁性への一次相転移が絶対零度で期待されることが分かった。驚くべきことに、このような結果は、より小さいクーロン力を仮定したストナー理論という極めて簡単な計算を用いても近似的によく再現出来ることが分かった。JPSJ (2011)に報告した。

④ **スケーリング理論を用いた、フェルミ面の対称性の破れに伴う揺らぎの解析。** 臨界点近傍では秩序変数の臨界揺らぎ以外に、非秩序感受率が定義出来て、それも臨界点で発散することが分かった。つまり、臨界点近傍では一般に少なくとも二種類の異なる臨界揺らぎが存在することを示した。更に、それらの臨界指数を整理した。ルテニウム酸化物では、磁場下でフェルミ面の対称性の破れが期待されるため(図3参考)、非秩序感受率は一様磁化率になる。対称性の破れが生じると共に、一様磁化率が比熱と同じ異常を示し、特にジャンプが期待されることを予言した。PRB (2010)と JPSJ (2011)に報告した。

##### (2) 銅酸化物高温超伝導体

① **フェルミ面の対称性の破れに伴う電子の自己エネルギーの非摂動計算。** フェルミ面の対称性の破れの揺らぎによる電子の自己エネルギーを調べた。予想に反して摂動論的取り扱いでは不十分であることが判明したために、この困難を如何に乗り越えるかが大きな理論的挑戦であった。この難題を、ワード恒等式に基づいた非摂動論的解析を実行することで解決した。特にガウシアン揺らぎの領域では厳密解析である。二次元電子系での揺らぎの解析において、このような非摂動計算が実行できたこと、それ自体で既に理論的価値が大きいと思われる。フェルミ面の対称性の破れの揺らぎは、角度分解光電子分光で観測されている、いわゆるフェルミアークを再現出来るが、残念ながら一粒子スペクトラムの擬ギャップを再現出来ないことが分かった。PRL (2012)に報告した。

② **銅酸化物超伝導体での電荷不安定性の系統的研究。** 上記①の研究結果を受け、角度分解光電子分光の実験結果をフェルミ面の対称性の破れという観点からなぜ統一的に理解出来なかったのか、その理由を探った。その結果、フェルミ面の対称性の破れの不安定性が有限の波数を持ち得ることが判明した。上記①の研究では波数ゼロ周りの揺らぎだけを考察したので、有限の波数周りの揺らぎを考慮した上で実験データを論じる必

要性があるかも知れない。更に、フェルミ面の対称性の破れ以外に、電荷フラックスオーダーもほぼ同時に発達することも判明し、この効果も考えた上で実験データを論じていく必要性も示唆された。PRB(2012)に報告した。

### (3) ラマン散乱理論

フェルミ面の対称性の破れを記述する応答関数は  $B_{1g}$  対称の電子及び格子ラマン散乱で直接観測出来ることを理論的に示した。フェルミ面の揺らぎの集団励起モードの効果は、常伝導状態ではセントラルピークとして、超伝導状態ではソフトモードとして現れることが分かった。実験的検証が待ち望まれる。PRB (2011)に報告した。

### (4) 鉄系高温超伝導体への拡張

鉄系超伝導体のミニマルな2バンド模型を用いて以下の理論を構築した。

① **方向対称性の破れを導く軌道揺らぎによるラマン散乱理論。** ラマン散乱強度にセントラルモードが、 $B_{1g}$  対称の偏光配置では軌道秩序への相転移温度の前後、 $A_{1g}$  対称では、相転移温度以下でのみ生じることが分かった。 $B_{2g}$  対称ではセントラルモードは生じないが、軌道秩序変数の増大に伴うリフシツ相転移の効果が高エネルギー領域で現れることが分かった。論文は査読中。

② **方向対称性の破れを導く軌道揺らぎによる超伝導。** 低エネルギー、長波長の揺らぎによって、臨界温度50K程度の強結合超伝導が生じること、クーロン斥力効果による臨界温度の抑制が弱いこと、軌道秩序と超伝導との共存が可能であることを示した。論文は査読中。

## 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)

① H. Yamase, Mean-field theory on a coupled system of ferromagnetism and electronic nematic order, Phys. Rev. B 87, 2013, 195117-1 - 195117-9.

10.1103/PhysRevB.87.195117 査読有

② M. Bejas, A. Greco, H. Yamase, Possible charge instabilities in two-dimensional doped Mott insulators, Phys. Rev. B 86, 2012, 224509-1 - 224509-12.

10.1103/PhysRevB.86.224509 査読有

③ H. Yamase, W. Metzner, Fermi-surface truncation from thermal nematic fluctuations, Phys. Rev. Lett. 108, 2012, 186405-1 - 186405-5.

10.1103/PhysRevLett.108.186405 査読有

④ A. Katanin, H. Yamase, V. Yu. Irkhin, Ferromagnetic instability and finite-temperature properties of two-dimensional electron systems with van Hove singularities, J. Phys. Soc. Jpn. 80, 2011, 063702-1 - 063702-4. 査読有

10.1143/JPSJ.80.063702

⑤ Yamase, P. Jakubczyk, W. Metzner, Nematic quantum criticality without order, Phys. Rev. B 83, 2011, 125121-1 - 125121-4.

10.1103/PhysRevB.83.125121 査読有

⑥ H. Yamase, R. Zeyher, Raman scattering near a d-wave Pomeranchuk instability, Phys. Rev. B 83, 2011, 115116-1 - 115116-11.

10.1103/PhysRevB.83.115116 査読有

⑦ H. Yamase, A. A. Katanin, Addenda: van Hove singularity and spontaneous Fermi surface symmetry breaking in  $Sr_3Ru_2O_7$ , J. Phys. Soc. Jpn. 79, 2010, 127001.

10.1143/JPSJ.79.127001 査読有

⑧ H. Yamase, P. Jakubczyk, Singular nonordering susceptibility at a Pomeranchuk instability, Phys. Rev. B 82, 2010, 155119-1 - 155119-5.

10.1103/PhysRevB.82.155119 査読有

[学会発表] (計15件)

① H. Yamase, Fermi surface truncation from thermal nematic fluctuations, Workshop Strongly Correlated Electron Systems, 2012/11/26-30, Schloss Ringberg, Germany

② 山瀬博之、銅酸化物高温超伝導体での電子ネマチック物性、スピン・電子運動量密度研究会、2012/9/19、横浜国立大学

③ 山瀬博之、Matias Bejas、Andres Greco、2次元モット絶縁体に電荷ドーブした時に期待される電荷秩序相関は何か、日本物理学会2012年秋季大会、2012/9/18-21、横浜国立大学

④ 山瀬博之、Andrey Katanin、Valentin

Irkhin, Van Hove 特異点近傍での強磁性転移と超伝導、日本物理学会 2012 年秋季大会、2012/9/18-21、横浜国立大学

⑤ H. Yamase、Renormalization due to entanglement of different low-energy fluctuations in Metals、Network meeting of the Alexander von Humboldt Foundation、2012/4/25-27、RWTH Aachen、Germany

⑥ 山瀬博之、Roland Zeyher、軌道ネマチック揺らぎによるラマン散乱、日本物理学会第 68 回年次大会、2012/03/26-29、広島大学

⑦ 山瀬博之、W. Metzner、ポメラランチュク不安定性近傍での電子の自己エネルギーの漸近的厳密解析、日本物理学会第 67 回年次大会、2012/03/24-27、関西学院大学

⑧ 山瀬博之、W. Metzner、電子ネマチック揺らぎによるフェルミ面の二分、日本物理学会 2011 年秋季大会、2011/9/21-24、富山大学

⑨ H. Yamase、P. Jakubczyk、W. Metzner、Quantum criticality in two-dimensional electronic nematic system、International Conference on Strongly Correlated Electron Systems、2011/8/29-9/3、University of Cambridge、UK

⑩ H. Yamase、R. Zeyher、Raman scattering near an electronic nematic instability、ICC-IMR 国際ワークショップ 2011、2011/7/28-30、東北大学金属材料研究所

⑪ H. Yamase、Fermi arcs from electronic nematic fluctuations、Ringberg Symposium on High Temperature Superconductivity、2011/5/16-19、Schloss Ringberg、Germany

⑫ 山瀬博之、Pawel Jakubczyk、連続相転移点での非秩序感受率の異常、日本物理学会 2010 年秋季大会、2010/9/23-26、大阪府立大学

⑬ 山瀬博之、Roland Zeyher、ラマン散乱で観るポメラランチュク不安定性の揺らぎ、日本物理学会 2010 年秋季大会、2010/9/23-26、大阪府立大学

⑭ H. Yamase、What is a Pomeranchuk instability?, The New Generation in Strongly Correlated Electron Systems、2010/6/20-26、Lanzarote、Spain

⑮ H. Yamase、Pomeranchuk instability in cuprate superconductors、The New Generation in Strongly Correlated Electron Systems、2010/6/20-26、Lanzarote、Spain

[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・主任研究員

研究者番号：10342867

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者 なし