

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 5日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2009 ~ 2011

課題番号：21540358

研究課題名（和文）

軌道自由度に由来する新規な輸送現象の研究

研究課題名（英文）

Novel Transport Phenomena due to Orbital Degree of Freedoms

研究代表者

紺谷 浩 (KONTANI HIROSHI)

名古屋大学・理学研究科・教授

研究者番号：90272533

研究成果の概要（和文）：軌道自由度を有する金属における多体電子状態を研究した。主に、(i) 軌道自由度とスピン軌道相互作用に由来するベリー位相（軌道ベリー位相）によるスピンホール効果や異常ホール効果の研究、また(ii)多体効果によって発現する軌道揺らぎを媒介とする超伝導発現機構や、異常輸送現象に関する研究を遂行した。

研究成果の概要（英文）：We studied the many-body electronic states in metals with orbital degree of freedoms. The main objects are (i) spin Hall effect and anomalous Hall effect driven by the Berry phase due to orbital degree of freedoms and spin-orbit coupling (orbital Berry phase), and (ii) the mechanism of superconductivity and anomalous transport phenomena due to orbital fluctuations driven by Coulomb interaction.

交付決定額

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2010年度	1,400,000	420,000	1,820,000
2011年度	900,000	270,000	1,170,000
総計	3,300,000	990,000	4,290,000

(金額単位：円)

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：強相関電子系、高温超伝導

1. 研究開始当初の背景

(1) 軌道自由度を有する遷移金属化合物では、巨大な異常ホール効果やスピンホール効果、さらに軌道揺らぎに由来する異常輸送現象が発現する。特にスピンホール効果については、スピントロニクス素子の動作原理として、つまり磁場を用いないスピncurrentの生成手法として、内外の注目を集めていた。

(2) また研究開始の直前に、東工大の細野教授が鉄系超伝導体を発見し、その超伝導発現機構に関する研究が爆発的に進展していた。

鉄系超伝導体は Fe の d 電子の軌道自由度を有することから、軌道自由度の重要性に注目が集まっていた。

2. 研究の目的

(1) 軌道自由度を有する遷移金属化合物や f 電子系化合物における異常ホール効果やスピンホール効果、また軌道揺らぎに由来する異常輸送現象など、軌道自由度を起源とする新規輸送現象の総合的研究を推進した。特に、鉄系超伝導体に関する研究を積極的に推

進し、輸送現象の研究を通じて超伝導発現機構の解明を目指した。

(2) 具体的には、単純金属中の遷移金属不純物がもたらす「外因性スピンホール効果」に関する理論研究を行うことにした。また、鉄系超伝導体における多バンド構造に由来する軌道ベリー位相に起因する、「内因性スピンホール効果」の研究を推進することにした。さらに、鉄系超伝導体の微視的モデルである、5 軌道ハバードモデルを、平均場近似（および乱雑位相近似）を超えた解析を行い、軌道揺らぎの発現機構を見出す研究を行うことにした。

3. 研究の方法

(1) 上記の外因性スピンホール効果に関しては、遷移金属不純物の微視的モデルである「拡張された多軌道アンダーソンモデル」に基づき、中野・久保公式に立脚した計算を遂行することにした。散乱 T 行列を厳密に計算して、不純物が希薄な場合のスピンホール電導度の厳密な表式の導出を行うことが可能である。

(2) また、鉄系超伝導体における内因性スピンホール効果の研究では、5 軌道強束縛モデルに立脚して、中野・久保公式に立脚した計算を遂行することにした。鉄系超伝導体のうちで、Dirac cone 的なバンド構造を有する KFe2As2 に着目して、研究を推進することにした。

(3) 鉄系超伝導体における軌道揺らぎの理論研究では、5 軌道ハバードモデルを平均場近似を超えた解析を行うための、多体電子状態の新しい計算手法の開発に着手することにした。平均場近似では考慮されない多体効果である「バーテックス補正」に着目して、バーテックス補正を自己無動着に計算する計算手法の確立に取り掛かることにした。

4. 研究成果

(1) 単純金属中の遷移金属不純物がもたらす「外因性スピンホール効果」の厳密な表式の導出に成功した。得られた表式によると、4d,5d 遷移金属を不純物として用いることで、外因性項のうち「スキュー散乱項」によって、巨大スピンホール効果を実現できる可能性を見出した。また、もう一つの外因性項である「サイドジャンプ項」と、内因性ホール効果との密接な理論的関係を見出した。

(2) 鉄系超伝導体の一種である KFe2As2 の内因性スピンホール効果が、Fermi 準位近傍の Dirac cone 的なバンド分散によって、極めて大きくなることを理論的に見出した。こ

の理論的予言を受けて、現在細野研で実験的観測に向けての努力が始まっている。

(3) 我々は最近、感受率に対するバーテックス補正 (VC) により、クーロン相互作用のみで軌道揺らぎが著しく増大する新機構を見いだした。VC は平均場近似（および乱雑位相近似）を超えた多体効果であり、ワード恒等式より保存近似を満たすために必要であるため、強相関係においてしばしば重要な役割を果たす。多軌道系の VC はこれまでほとんど研究されていなかったが、我々の研究により、軌道系に特有の重要性が明らかになった。

図 1 (a) に、我々が開発した自己無撞着 VC 理論 (SC-VC 理論) により考慮されるバーテックス補正のファイマン図を示す。また、バーテックス補正によって軌道揺らぎが増大する理由を図 2 (b) で説明する。反強スピン揺らぎ $\chi^s(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}=\mathbf{Q}$ (ネスティングベクトル) で発達するとき、バーテックス補正は強的成分 ($\mathbf{k}=0$) の増大を受けることがわかる。ゆえに、スピン揺らぎと同時にバーテックス補正が増大し、軌道揺らぎの強的成分 $\chi^c(0)$ を発達させる。つまり、この機構によりスピンと軌道の臨界揺らぎが協調して発達する。場の理論の解釈では、図 1 (a) のバーテックス補正は軌道波が 2 つのスピン波に分かれて再び軌道波に戻るといった仮想過程を表し、乱雑位相近似には含まれない軌道波とスピン波との干渉 (スピン・軌道モード間結合) を与える。さらに異なる既約表現の軌道揺らぎも誘発されて発達する。

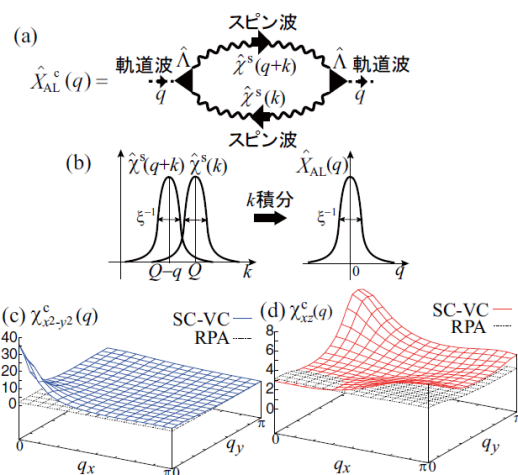


図 1: (a)バーテックス補正のファイマン図。(b)バーテックス補正により強軌道揺らぎが出現する理由の図示。(c),(d)SC-VC法によって導出された軌道感受率の3次元プロット。

図 1(c)と(d)に、SC-VC法により得られた軌道感受率の2次元プロットを示す。このよう

に、顕著な軌道揺らぎの発達が理論的に再現できることが分かった。特に(c)の強軌道揺らぎの発散的発達は、この系の構造相転移を説明する。ゆえに SC-VC 法により、鉄系超伝導体の状態相図が、(現象論ではなく) 微視的模型に基づく再現に初めて成功した。

次に、SC-VC 法に基づきギャップ方程式を解析して得られた超伝導ギャップ関数を図 2 に示す。非磁性不純物濃度がゼロの時には、ノードあり S 波状態が得られたが、微量の不純物を導入すると、ノードあり S 波は非磁性不純物により強く抑制されるため、フルギャップ S 波状態にクロスオーバーする結果を得た。この場合、クロスオーバーが起こる際の T_c の減少は緩やかである。SC-VC 法において、一般に軌道揺らぎとスピン揺らぎが拮抗して発達するため、パラメーターに応じて様々な S 波状態が実現し、これらは同じ全対称規約表現に属するためクロスオーバー可能である。このため、実験で観測される鉄系超伝導体の多様なギャップ関数を説明できると期待される。

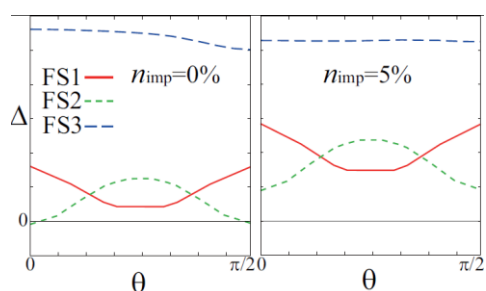


図 2 : SC-VC 法によるフェルミ面上のギャップ関数の角度依存性

本研究では鉄系超伝導体において、平均場近似を超えた多体効果であるバーテックス補正 (VC) を解析した。構造相転移や弾性定数のソフト化などの正常状態における主要な電子状態を説明する上で、乱雑位相近似では不可能であり、VC が不可欠であることを見出した。発達した軌道揺らぎを考慮してギャップ方程式を解析すると、符号反転のない S 波状態や、ノードあり S 波状態の発現が導かれた。このように VC による軌道揺らぎ機構により、各種実験結果や相図、超伝導ギャップ関数の統一的な理解が提示される。

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 3 件)

- ① Yusuke Ohno, Masahisa Tsuchiizu,

Seiichiro Onari, and Hiroshi Kontani, Spin-Fluctuation-Driven Orbital Nematic Order in Ru-Oxides, 査読有、J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 013707 (4p)

DOI: 10.7566/JPSJ.82.013707

- ② Takuro Tanaka and Hiroshi Kontani, Extrinsic Spin Hall Effect Due to Transition-Metal Impurities, 査読有、Prog. Theor. Phys. 128 (2012) 805-828.

DOI: 10.1143/PTP.128.805

- ③ Seiichiro Onari and Hiroshi Kontani Self-consistent Vertex Correction Analysis for Iron-based Superconductors, 査読有、Phys. Rev. Lett. 109 (2012) 137001 (4p) 10.1103/PhysRevLett.109.137001

[学会発表] (計 1 件)

- ① Hiroshi Kontani, Development of orbital and spin fluctuations in Fe-based Superconductors, APS March Meeting, 2013.03.19, Baltimore, MD (invited talk)

[図書] (計 1 件)

- ① Hiroshi Kontani, Transport Phenomena in Strongly Correlated Fermi Liquids (185p), Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K, (2012)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
出願年月日 :
国内外の別 :

○取得状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
取得年月日 :
国内外の別 :

[その他]

ホームページ等

<http://www.slab.phys.nagoya-u.ac.jp/kon>

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・理学研究
科・教授

研究者番号：90272533

(2) 研究分担者 なし
()

研究者番号：

(3) 連携研究者 なし
()

研究者番号：