

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 29 日現在

機関番号：15301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26800185

研究課題名(和文)多軌道強相関電子系の相図及び超伝導発現機構の解明

研究課題名(英文)Elucidation of phase diagram and mechanism of superconductivity in strongly correlated multi-orbital electron systems

研究代表者

大成 誠一郎(Onari, Seiichiro)

岡山大学・異分野基礎科学研究所・准教授

研究者番号：80402535

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)：研究成果として、近年日本で発見され、高い超伝導転移温度を持つ、鉄系超伝導体の相図全体の統一的理解が著しく進んだことが挙げられる。具体的には、我々が開発した新しい計算手法である自己無撞着バーテックス補正(SC-VC)法を用いることで、スピンと軌道間の新しい相互作用が現れ、軌道揺らぎがスピン揺らぎと協奏的に増大することが明らかとなり、鉄系超伝導体の相図に現れるスピン秩序相、軌道秩序相、超伝導相等を物質によらず、統一的に説明することが可能となった。また、軌道秩序相における特異な軌道偏極エネルギーの波数依存性もこのSC-VC法に基づいて物質によらず、統一的に説明することに成功した。

研究成果の概要(英文)：In this study, the universal understanding of whole phase diagram in iron-based superconductors particularly progresses. Iron-based superconductors with high superconducting transition temperature were first discovered in Japan. By using the self-consistent vertex correction (SC-VC) method, which we had newly developed, it has been cleared that the new interaction between spin and orbital is induced by the vertex correction, and the orbital fluctuations increase mutually with the spin fluctuations. From this result, spin order, orbital order, and superconductivity in phase diagram of iron-based superconductors are understood independently of materials by the vertex correction. In addition, the peculiar wavenumber dependence of orbital polarization energy in the orbital-ordered phase of iron-based superconductors observed in experiments is reproduced independently of materials by the theory based on the SC-VC method.

研究分野：物性理論

キーワード：超伝導 強相関電子系 軌道秩序

1. 研究開始当初の背景

2008年に東京工業大学の細野研で発見された鉄系超伝導体は超伝導転移温度(T_c)が最大55Kにも到達し、銅酸化物高温超伝導体以来約20年ぶりの大発見であった。55Kもの高い T_c を説明することはBCS理論では困難であり、超伝導発現機構に興味が集まっていた。

(a) スピン揺らぎ理論

鉄系超伝導体において低ドープ領域に反強磁性相が存在することから、まずスピン揺らぎに着目し理論研究を行った。我々は共同研究者らと第一原理計算によって求めた5軌道モデルを導出し、乱雑位相近似(RPA)を用い、線形化された多軌道エリアシュベルグ方程式を自己無撞着に解くことで、スピン揺らぎを媒介とした S_{+-} 波が発現することを明らかにした。得られた S_{+-} 波は符号反転を伴うフルギャップ S 波であった。

(b) S_{+-} 波の理論検証

鉄系超伝導体は非磁性不純物による対破壊効果が d 波超伝導体である銅酸化物高温超伝導体と比べて、大変小さいことが知られていた。我々が鉄系超伝導体における不純物効果を調べた結果、 S_{+-} 波は d 波超伝導体同様、非常に非磁性不純物に弱く、実験結果を説明できないことを明らかにした。また、実験結果との対比からフェルミ面間で符号を変えず、不純物散乱の影響を受けにくい S_{++} 波の発現を強く示唆する事となった。

(c) パーテックス補正による軌道揺らぎ理論
多軌道系の軌道揺らぎについて理解を深めるため、多軌道ハバードモデルにおける解析を行った結果、クーロン相互作用の高次多体効果であるパーテックス補正により、軌道揺らぎが増大することを明らかにした。この軌道揺らぎにより、鉄系超伝導体で普遍的に現れる回対称性が4回対称性から2回対称性に落ちたネマティック相を説明できる可能性が出てきた。

2. 研究の目的

本研究の目的は現実に即したモデルに基づき、多軌道強相関電子系の物理を解明することである。特に、鉄系超伝導体の超伝導発現機構及びネマティック相、反強磁性相等の相図を解明することを目指す。鉄系超伝導体の超伝導ギャップ関数として、符号反転のある S 波(S_{+-} 波)や符号反転のない S 波(S_{++} 波)等のフルギャップが提案されているが、ノードのあるギャップ関数も実験で観測されており、超伝導ギャップ関数の対称性は未だ解明されていない。本研究の目的は、超伝導状態における多様なギャップ関数を物質群によらず普遍的に説明可能な超伝導発現機構を解明することである。更に、軌道秩序の波数依存性等の常伝導状態の詳細を同時に解明する理論体系を構築することを目指す。

3. 研究の方法

第一原理計算に基づく、鉄系超伝導体のタイ

トバインディングモデルを作成し、多軌道ハバードモデルを用いて解析を行った。

具体的にはRPAやFLEX近似では無視されている高次の多体効果であるパーテックス補正をスピン感受率、軌道感受率と自己無撞着に計算することにより、発現する軌道秩序やスピン秩序を解析した。また、超伝導状態については、得られたスピン感受率、軌道感受率を用いて線形化されたエルアシュベルグ方程式を解くことにより、超伝導ギャップ関数や超伝導転移温度を求めた。

4. 研究成果

(1) 鉄系超伝導体 $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{H}_x$ の相図

鉄系超伝導体 $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{H}_x$ では、低ドープ領域における系の4回対称性が2回対称性に落ちる斜方晶構造相転移と高ドープ領域における4回対称性を保つ構造相転移がそんざいする。このことをパーテックス補正により、統一的に説明することに成功した。特に、パーテックス補正の中でも、揺らぎの2次で記述されるAslamazov-Larkin(AL)項によりスピン揺らぎと軌道揺らぎのモード間結合が生じ、軌道揺らぎとスピン揺らぎが協奏的に増大することを明らかにした。その際、低ドープ領域においては鉄の dxz, dyz 軌道によるネスティングが支配的なのに対して、高ドープ領域においては鉄の dxy 軌道によるネスティングが支配的であることが、2種類の構造相転移を引き起こす要因であることが分かった。また、図1に示すように構造相転移近傍で出現する超伝導は符号反転のない S 波(S_{++} 波)であることが明らかになった。また、他の鉄系超伝導体におけるノードのあるギャップ関数は軌道揺らぎとスピン揺らぎの競合により発現しうることが分かった。

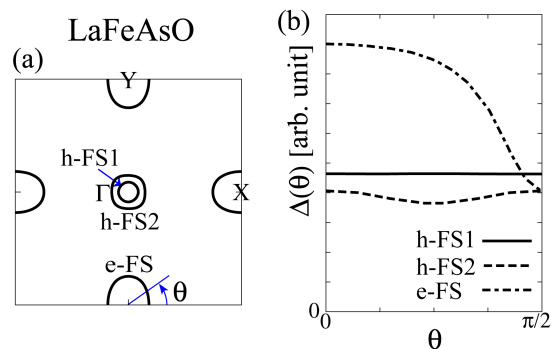


図1 (a) LaFeAsO のフェルミ面 (b) フェルミ面上のギャップ関数の角度 θ 依存性

(2) Sr_2RuO_4 のトリプレット超伝導

鉄系超伝導体以外の多軌道系においてもパーテックス補正が重要である可能性が高いため、実験により特異な多軌道トリプレット超伝導体であると報告されている Sr_2RuO_4 について、多軌道ハバードモデルによるパーテックス補正の解析を行った。結果としてスピン軌道相互作用の有無にかかわらず、パーテックス補正により軌道揺らぎが増大し、軌道揺らぎが媒介するスピントリプレット超伝

導（カイラル p 波超伝導）が発現することが分かった。また、ヘリカル p 波超伝導も次点ではあるが、発現しやすいことが分かった。

(3) FeSe の軌道秩序

鉄系超伝導体の物質群で最も単純な構造を持つ FeSe においては反強磁性相が存在しないという特徴が有る。鉄系超伝導体を解明するにあたり、物質群に依らず軌道秩序や超伝導発現のメカニズムを明かにすることが重要である。実際に、FeSe において第一原理計算に基づく多軌道タイトバインディングモデルを作成し、パーテックス補正を自己無撞着に計算した結果、スピン揺らぎが小さいまま軌道揺らぎが発達するという実験事実を再現することに成功した。その際にフント結合 J がクーロン斥力 U に比べて小さいことや、フェルミ面が小さく、 d_{xy} 軌道のホール面が消失する FeSe に特徴的なバンド構造が軌道揺らぎの発達に重要であることが分かった。以上のように物質群によらず、パーテックス補正による軌道秩序が斜方晶構造相転移の起源であることが明らかとなった。

(4) 軌道偏極の波数依存性

鉄系超伝導体の構造相転移における軌道秩序により d_{xz} 軌道のエネルギー E_{xz} と d_{yz} 軌道のエネルギー E_{yz} が分裂する。この軌道秩序の詳細が最近 ARPES により明らかになってきた。特に反強磁性相転移が存在しない FeSe においては X(Y) 点近傍と Γ 点近傍で軌道偏極エネルギー $\Delta E_{xz} - \Delta E_{yz}$ の符号が逆転し、 Γ 点近傍に縦長のフェルミ面が現れることが報告されている。これは、通常の波数依存性を考慮しない軌道秩序では理解できない。しかし、第一原理計算に基づく多軌道ハバードモデルを用いて、2 回対称自己エネルギーを自己無撞着に求めることで、その波数依存性が実験と整合する符号反転軌道偏極を与えることを明らかにした。(図 2) この軌道偏極エネルギーにより現れるフェルミ面は Γ 点近傍で縦長である実験で報告されたフェルミ面を再現する。得られた結果を解析することで、高次多体効果であるパーテックス補正が重要であることが明らかになった。具体的にはパーテックス補正の中でも揺らぎの 2 次で記述される Aslamazov-Larkin 項により軌道偏極が主に引き起こされるが、FeSe における符号反転軌道偏極は揺らぎの 1 次で記述される Maki-Thompson 項に起因することが分かった。一方、LaFeAsO の第一原理計算モデルを用いた場合は符号反転軌道偏極は現れなかった。

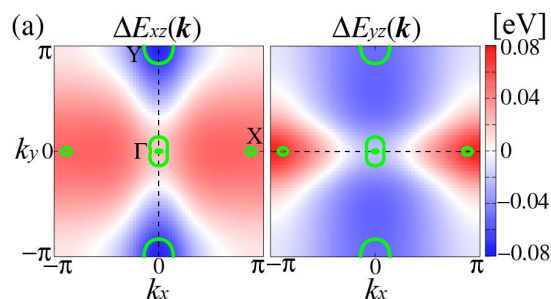


図 2 FeSe の軌道偏極エネルギー ΔE_{xz} , ΔE_{yz} の波数依存性および軌道偏極後のフェルミ面（緑線）

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 6 件)

Sign-Reversing Orbital Polarization in the Nematic Phase of FeSe due to the C2 Symmetry Breaking in the Self-Energy
Seiichiro Onari, Youichi Yamakawa, and Hiroshi Kontani,
 Physical Review Letters 116, 227001_1-6 (2016) 査読有り
 DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.227001

Nematicity and Magnetism in FeSe and Other Families of Fe-Based Superconductors
 Youichi Yamakawa, Seiichiro Onari, and Hiroshi Kontani,
 Physical Review X 6, 021032_1-15 (2016) 査読有り
 DOI:10.1103/PhysRevX.6.021032

Revisiting orbital-fluctuation-mediated superconductivity in LiFeAs: Nontrivial spin-orbit interaction effects on the band structure and superconducting gap function,
 Tetsuro Saito, Youichi Yamakawa, Seiichiro Onari, and Hiroshi Kontani
 Physical Review B 92, 134522_1-11 (2015) 査読有り
 DOI:10.1103/PhysRevB.92.134522

Spin-triplet superconductivity in Sr2RuO4 due to orbital and spin fluctuations: Analyses by two-dimensional renormalization group theory and self-consistent vertex-correction method
 Masahisa Tsuchiizu, Youichi Yamakawa, Seiichiro Onari, Yusuke Ohno, and Hiroshi Kontani,
 Physical Review B 91, 155103_1-155103_8 (2015) 査読有り
 DOI: 10.1103/PhysRevB.91.155103

High-Tc Superconductivity near the Anion Height Instability in Fe-Based Superconductors: Analysis of LaFeAsO_{1-x}H_x
Seiichiro Onari, Youichi Yamakawa, and Hiroshi Kontani,
 Physical Review Letters 112, 187001_1-5 (2014)

査読有り

DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.187001

Reproduction of experimental gap structure in LiFeAs based on orbital-spin fluctuation theory: s_{++} -wave, s_{\pm} -wave, and hole- s_{\pm} -wave states
Tetsuro Saito, Seiichiro Onari, Youichi Yamakawa, Hiroshi Kontani, Sergey V. Borisenko, and Volodymyr B. Zabolotnyy
Physical Review B 90, 035104_1-10 (2014)
査読有り

DOI: 10.1103/PhysRevB.90.035104

〔学会発表〕(計15件)

大成誠一郎, 紺谷浩

鉄系超伝導体における抵抗率と熱起電力の面内異方性
日本物理学会 2017 年秋季大会
大阪大学豊中キャンパス(大阪)2017 年 3 月 17-20 日

大成誠一郎, 紺谷浩

鉄系超伝導体における抵抗率の物質依存面内異方性
基研研究会「超伝導研究の最先端:多自由度、非平衡、電子相関、トポロジ」
基礎物理学研究所(京都)2016 年 10 月 10-12 日

大成誠一郎, 山川洋一, 紺谷浩

鉄系超伝導体における軌道秩序状態の理論解析
日本物理学会 2016 年秋季大会
金沢大学(金沢)2016 年 9 月 13-16 日

大成誠一郎, 紺谷浩

鉄系超伝導体における抵抗率と熱起電力の面内異方性
日本物理学会 2016 年秋季大会
金沢大学(金沢)2016 年 9 月 13-16 日

大成誠一郎

多軌道系における軌道秩序及び超伝導発現機構(招待講演)
日本物理学会中国四国支部大会
岡山大学(岡山)2016 年 7 月 31 日

大成誠一郎, 山川洋一, 紺谷浩

各種鉄系超伝導体の斜方晶相における電子状態理論解析
日本物理学会第 71 回年次大会
東北学院大学(仙台)2016 年 3 月 19-22 日

大成誠一郎

鉄系超伝導体における軌道秩序:高次電子相間効果(招待講演)
日本化学会中国四国支部大会

岡山大学(岡山)2015 年 11 月 14-15 日

大成誠一郎, 山川洋一, 紺谷浩

軌道秩序による FeSe のフェルミ面の变形
日本物理学会 2015 年秋季大会
関西大学(吹田)2015 年 9 月 16 日~19 日

大成誠一郎, 山川洋一, 紺谷浩

鉄系超伝導体における熱起電力の面内異方性の反転
日本物理学会 2015 年秋季大会
関西大学(吹田)2015 年 9 月 16 日~19 日

S. Onari

Orbital fluctuations and orders in iron-based superconductors(招待講演)
Energy Materials and Nanotechnology (EMN2015)
青島(中国)2015 年 06 月 14-17 日

大成誠一郎

鉄系超伝導体における軌道偏極及び輸送現象の面内異方性(招待講演)
基研研究会:多自由度と相関効果が生み出す超伝導の新潮流~BCS から BEC まで~
基礎物理学研究所(京都)2015 年 6 月 9-10 日

大成誠一郎

軌道揺らぎによる鉄系超伝導発現機構の研究(若手奨励賞講演)
日本物理学会第 70 回年次大会
早稲田大学(東京)2015 年 3 月 21-24 日

大成誠一郎, 紺谷浩

鉄系超伝導体における輸送係数の面内異方性
日本物理学会第 70 回年次大会
早稲田大学(東京)2015 年 3 月 21-24 日

大成誠一郎, 紺谷浩

鉄系超伝導体における軌道ネマティック秩序の検証:熱起電力の面内異方性の研究
日本物理学会 2014 年秋季大会
中部大学(春日井)2014 年 9 月 7-10 日

大成誠一郎

鉄系超伝導体における軌道揺らぎ及び特異な輸送現象 [招待講演]
京都大学基礎物理学研究所研究会「多自由度電子状態と電子相関が生み出す新奇超伝導の物理」
京都大学(京都)2014 年 10 月 21-22 日

〔図書〕(計1件)

Iron-Based Superconductivity:
Orbital+Spin Multimode Fluctuation Theory in

Iron-based Superconductors
Seiichiro Onari and Hiroshi Kontani
331-376 total 447 pages.
(ed. P.D. Johnson, G. Xu, and W.-G. Yin, Springer
Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K
(2015))

6 . 研究組織

(1)研究代表者

大成 誠一郎 (ONARI Seiichiro)
岡山大学・異分野基礎科学研究所・准教授
研究者番号：80402535