

軌道ネマティック秩序の理論 —FeSe や各種鉄系超伝導体の統一的理解—

名古屋大学 大学院理学研究科 山川洋一・紺谷浩
岡山大学 異分野基礎科学研究所 大成誠一郎

概要

鉄系超伝導体において、超伝導発現の母胎である正常電子状態の理解が急務であったが、その解明が急速に進んでいる。特に 2013 年の FeSe における「非磁性電子ネマティック状態」の発見は、それまで標準理論とみなされてきたスピンネマティック理論の見直しを迫る出来事（パラダイムシフト）であり、スピン揺らぎと軌道揺らぎを対等に考慮する理論の進展のきっかけとなった。本稿では、平均場近似を超えた多体効果であるバーテックス補正を考慮した理論の進展を紹介する。非磁性電子ネマティック秩序の正体は、バーテックス補正を起源とする新規な軌道秩序であり、本理論に基づき FeSe をはじめ代表的な鉄系超伝導体を示すバラエティー豊かな相図が統一的に理解できる。さらに FeSe で実現する“符号反転軌道秩序”をはじめとする正常状態の key experiments が定量的に再現される。

1 はじめに

2008 年に発見された鉄系超伝導体は、¹⁾ 高い超伝導転移温度 (T_c) を有するのみならず、新規な量子現象の宝庫として、現在世界中で最も活発に研究されている強相関金属化合物である。鉄系超伝導体では、鉄の $3d$ 電子が有するスピンの自由度と軌道の自由度が協奏し、これらの複合自由度が豊かな物性の根源となっている。鉄系超伝導体の超伝導発現機構はまだ未解明であるが、超伝導発現の母胎となる正常電子状態の理解が、理論と実験の密接な協力によって、最近急速に進展している。

第1図に、La1111系やBa122系などの典型的な鉄系超伝導体の模式的相図と、FeSeの模式的相図を示す。²⁻⁵⁾ ともに構造相転移温度 T_{str} より低温かつ磁気転移温度 T_{mag} より高温の領域で、電子系の回転対称性が自発的に低下した「非磁性電子ネマティック状態」が実現する。第1図(a)では T_{str} と T_{mag} は数K~数10Kと接近しているが、FeSeでは絶対零度まで磁気転移を示さない。角度分解光電子分光 (ARPES) によると d_{xz} 軌道の準位と d_{yz} の準位が50~60 meVほど分裂し、数%の軌道占有数の偏り $n_{xz} > n_{yz}$ が生じる。⁶⁻¹⁵⁾ このような大きな軌道分裂は、高々0.3%に過ぎない格子定数の斜方晶変位率 $\delta = (a - b)/(a + b)$ からは説明し得ない。¹⁶⁾ ゆえに軌道分裂を伴う電子ネマティック秩序は、電子相関による電子系固有の相転移である。

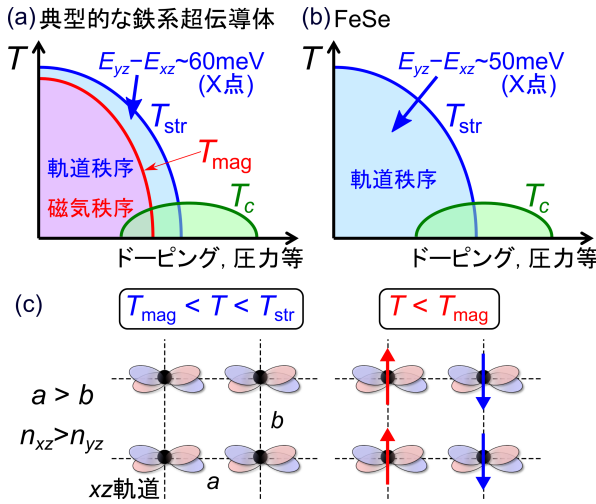


図1 (a) La1111系(母物質:LaFeAsO), Ba122系(母物質:BaFe₂As₂)等に代表される典型的鉄系超伝導体の模式的相図. (b) FeSeの模式的相図. T_{str} , T_{mag} , T_c はそれぞれ、構造相転移温度, 磁気転移温度, 超伝導転移温度である. (c) 電子状態の模式図. T_{str} で正方晶から斜方晶 (a 軸長 $>$ b 軸長) へ転移し, d_{xz} 軌道の占有数が増加する. また, T_{mag} 以下では a 軸方向に反強磁的, b 軸方向に強磁的ストライプ状の反強磁性が生じる.

その秩序パラメーターの正体として、スピンネマティック秩序¹⁷⁻²¹⁾と軌道秩序²²⁻²⁵⁾が考えられた。前者は、強くフラストレートした量子スピン系において、スピン秩序が起きる直前に最近接サイトのスピン四重極秩序が生じて4回対称状態が破れるというアイデアに立脚し、相図1(a)の $T_{\text{str}} \gtrsim T_{\text{mag}}$ の状況とは整合するが、FeSeの相図1(b)とは整合しない。一方、軌道秩序の場合はいずれの相図とも矛盾しないが、乱雑位相近似 (RPA) や動的平均場理論 (DMFT) など従来の標準的理論では再現が不可能であり、微視的理論

による裏付けがない状態が続いた。正常状態は超伝導状態の母胎であり、その最大の謎である電子ネマティック状態の解明は、超伝導発現機構の解明に直結する最重要課題と位置づけられてきた。

電子ネマティック感受率 χ_{nematic} は、ネマティック秩序の強度と歪 δ の比として定義され、弾性率 C_s の測定²⁶⁻²⁹⁾ や電子 Raman 測定³⁰⁻³²⁾、電気抵抗の面内異方性³³⁻³⁵⁾ 等により観測可能である。第 2 図に Ba(Fe,Co)₂As₂ および FeSe で観測された、NMR による $1/T_1T$ (=スピン感受率に比例) および χ_{nematic} の温度依存性を示す。^{26-29,36,37)} ここで χ_{nematic} は格子との結合を無視した純粋な電子系の感受率であり、 $T = T_{\text{str}}$ でも有限である。一方、 $C_s^{-1} \propto (1 - g\chi_{\text{nematic}})^{-1}$ は $T = T_{\text{str}}$ で発散する。 g は弱い電子・格子相互作用を介したネマティック秩序間相互作用である。Ba(Fe,Co)₂As₂ においては、室温から T_{str} に向かってスピン揺らぎと軌道揺らぎが同調して増大する。電子ネマティック秩序が生じるとスピン揺らぎが急激に増大し、 T_{str} 直下の T_{mag} でスピン秩序が生じる。³⁶⁾ 対照的に FeSe においては、室温から T_{str} に向かって軌道揺らぎだけが増大し、スピン揺らぎは小さいままである。 T_{str} 以下からスピン揺らぎは増大し始めるが、その増大は緩やかであり絶対零度まで磁気秩序に至らない。^{29,37-41)} こうした驚くべき物質依存性を統一的に説明する「鉄系超伝導体の正しい正常状態の理論」の構築が、理論家たちの喫緊の課題となった。

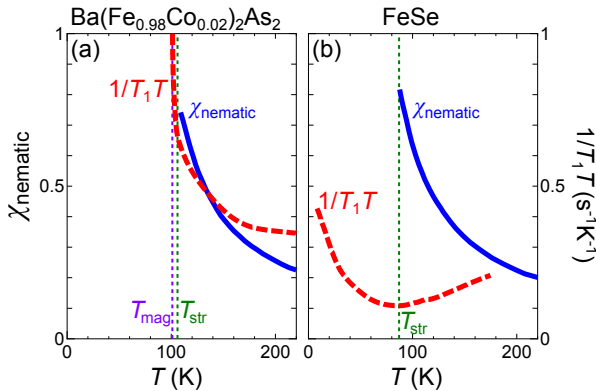


図 2 (a) Co-2% ドープ BaFe₂As₂ において、NMR により観測された核スピン緩和率 $1/T_1T$ 及び弾性率 C_s による電子ネマティック感受率 χ_{nematic} の温度依存性. (b) FeSe における $1/T_1T$ 及び χ_{nematic} の温度依存性. データは文献^{28,29,36)} より.

そこで我々は 2011 年頃から、平均場近似 (RPA 等) を超えた多体効果であるバーテックス補正 (VC) を考慮した理論の研究を開始した。²⁵⁾ ダイアグラム法や汎関数繰り込み群

法に基づく研究より、バーテックス補正を起源とする新規な軌道秩序が起きることを見出してきた。(バーテックス補正を無視した RPA では軌道揺らぎは発達しない。) この理論により、鉄系超伝導体における“軌道秩序シナリオ”の微視的裏付けが初めて与えられた。さらに、Ba122 における電子 Raman 散乱によるネマティック感受率の理論解析⁴²⁾ や、LaFeAsO の H ドープ相図の解明⁴³⁾ などが行われた。本理論の正当性を見極めるうえで、FeSe における“非磁性電子ネマティック秩序”は、その格好の試金石となるであろう。

本稿では、バーテックス補正の理論に基づき、鉄系超伝導体のバラエティー豊かな正常状態の包括的理解に取り組む。FeSe や LaFeAsO など各種鉄系超伝導体の第一原理模型を解析し、第 1 図および第 2 図に示す各化合物の状態相図やネマティック感受率の温度依存性が、自然に再現されることを紹介する。¹⁶⁾ さらに FeSe で実現する“符号反転軌道秩序”をはじめとする正常状態の key experiments が、バーテックス補正の理論が予言する軌道秩序として定量的に再現される。⁴⁴⁾ 本研究による正常電子状態の理解に基づき、現在未解明である超伝導発現機構について、本稿の最後に簡単に議論する。本理論の帰結である軌道揺らぎの発達により、符号反転の無い S_{++} 波超伝導状態の出現が期待されることを紹介する。

2 手法

2.1 第一原理模型

典型的な鉄系超伝導体と非磁性の FeSe との違いを議論する為には、第一原理計算に基づいた多軌道強束縛模型を作成し、その上で多体の電子相関を考慮した解析が必要である。十数年前までは、多軌道の強束縛模型作成は困難な作業だった。ところが近年では計算コードが整備され、各々の研究者が第一原理計算に基づいた多軌道強束縛模型を手軽に作成できる、非常に恵まれた環境になった。

最初に、鉄系超伝導体の伝導層の構造を第 3 図 (a) に示す。鉄系超伝導体では、正方形に並んだ Fe を As や Se 等の四面体を取り囲むという、共通の基本構造を持つ。第 3 図 (b) に示す Fe の 3d 軌道の内、伝導は主に xz, yz, xy の 3 軌道が担う。この伝導層内を運動する電子が互いに相互作用する事で、軌道・磁気秩序から高温超伝導まで、様々な興味深い

物理が発現する.

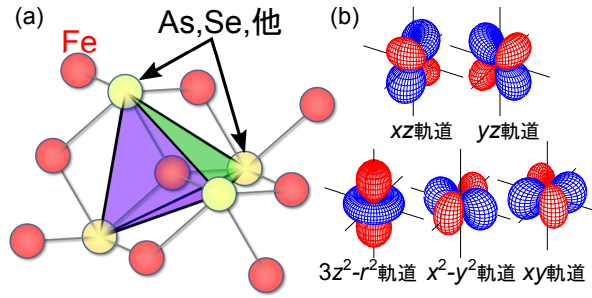


図 3 (a) 鉄系超伝導体の伝導層である FeAs 層 (As の代わりに Se, Te, P などもある) の結晶構造. 正方格子を作る Fe サイトの周りに, As サイトがほぼ正四面体状に配置している. (b) 3d 軌道の波動関数. 鉄系超伝導体の電気伝導や揺らぎは, Fe の 3d 軌道のうち xz, yz, xy の 3 軌道が主に担う.

第 4 図 (a) 及び (b) に, 実際に WIEN2k⁴⁵⁾ と wannier90⁴⁶⁾ パッケージを用いて構築した, LaFeAsO に対する 8 軌道 $d-p$ 強束縛模型のバンド構造と Fermi 面を示す. Γ 点 ($\mathbf{k} = (0, 0)$) と M 点 ($\mathbf{k} = (\pi, \pi)$) 周りの計 3 枚のホール面に加え, X, Y 点 ($\mathbf{k} = (\pi, 0), (0, \pi)$) 周りに 2 枚の電子面が存在する. Fermi 面は xz, yz, xy 軌道により構成されるが, 複雑に混成している. ホール・電子面間のネスティングに起因して, 差し渡しベクトル $\mathbf{q} = (\pi, 0), (0, \pi)$ に対応するスピン揺らぎが発達する.⁴⁷⁾

次に, FeSe に対する $d-p$ 模型を構築する. ただし FeSe には, 第一原理計算のバンド構造⁴⁸⁾ と, ARPES⁸⁻¹⁴⁾ や Shubnikov-de Haas 測定^{49, 50)} の結果とが異なるという問題がある. そこで, FeSe の強束縛模型では, バンド構造が ARPES の結果に合うようエネルギー準位を調整した (詳しくは文献¹⁶⁾ を参照してほしい). 第 4 図 (c) 及び (d) に示すとおり, 得られた模型の Fermi 面は小さく, M 点周りの xy 軌道により構成されたホール面は消失する. その結果, xz, yz 軌道が Fermi 準位で主体的となる. この変化は, xz, yz 軌道間の軌道秩序発現に好都合である.

もう一つの重要な物質依存性は, Coulomb 相互作用である. 文献⁵¹⁾ では制限 RPA 法に基づいて, 代表的な鉄系超伝導体に対する有効 Coulomb 相互作用が, 軌道依存性まで含めて系統的に導出されている. 表 1 は各鉄系超伝導体の $d-p$ 模型に対する, 軌道内 Coulomb 斥力 U の軌道平均 U_{ave} , 軌道間斥力 U' の平均 U'_{ave} , 及び Hund 結合 J の平均 J_{ave} である. J はスピン分極を増大し軌道分極を抑制する. FeSe では $J_{\text{ave}}/U_{\text{ave}}$ の値が

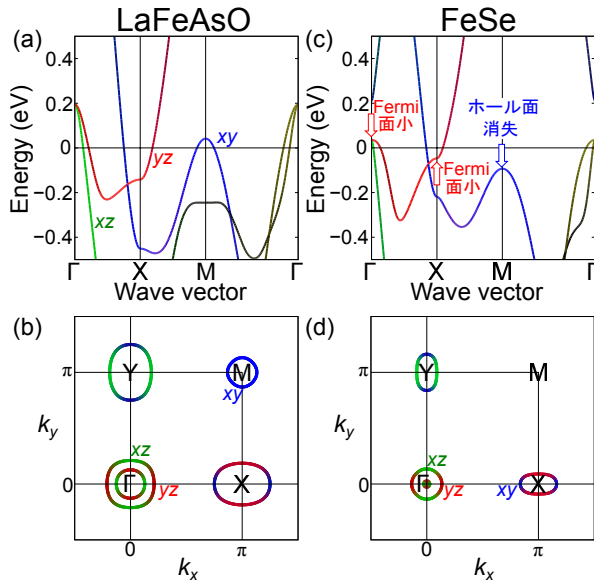


図4 (a) LaFeAsO に対し構築した 8 軌道 d - p 強束縛模型のバンド分散と (b) Fermi 面. (c) FeSe の 8 軌道 d - p 強束縛模型のバンド分散と (d) Fermi 面. FeSe の強束縛模型は, ARPES の結果に合わせて各軌道の準位を調整した. 色は軌道成分に対応し, 緑, 赤, 青はそれぞれ Fe の 3d 軌道の xz, yz, xy 軌道に対応する.

表 1 鉄系超伝導体の d - p 強束縛模型に対する有効相互作用の平均値 $U_{\text{ave}} \equiv \frac{1}{5} \sum_{l=1}^5 U_{ll}$, $U'_{\text{ave}} \equiv \frac{1}{10} \sum_{l>m} U_{lm}$, $J_{\text{ave}} \equiv \frac{1}{10} \sum_{l>m} J_{lm}$, 及び比 $J_{\text{ave}}/U_{\text{ave}}$.⁵¹⁾ ここで, $l, m = 1 \sim 5$ は Fe の d 軌道を表す.

	U_{ave} (eV)	U'_{ave} (eV)	J_{ave} (eV)	$J_{\text{ave}}/U_{\text{ave}}$
LaFeAsO	4.23	3.09	0.57	0.134
BaFe ₂ As ₂	5.24	4.00	0.62	0.119
LiFeAs	5.94	4.70	0.62	0.104
FeSe	7.21	5.85	0.68	0.095

0.1 以下と, 他の物質に比べて特に小さい. このことから, FeSe では磁気揺らぎが弱く, 軌道揺らぎが強くなるであろう事が自然に期待できる.

2.2 RPA による解析と RPA の限界

前節で得た個々の物質の特徴を反映した第一原理 Hubbard 模型に対して, 遍歴描像に基づく微視的理論を展開する. 遷移金属では一般的に $J > 0$ が成り立つ. スピン感受率

$\chi^{\text{spin}}(\mathbf{q})$ 及び軌道感受率 $\chi^{\text{orbital}}(\mathbf{q})$ は、以下で定義される。

$$\chi^{\text{spin}}(q) = \int_0^\beta d\tau \frac{1}{2} \langle \hat{m}(\mathbf{q}, \tau) \hat{m}(-\mathbf{q}, 0) \rangle e^{i\omega_m \tau}, \quad (1)$$

$$\chi^{\text{orbital}}(q) = \int_0^\beta d\tau \frac{1}{2} \langle \hat{O}_{x^2-y^2}(\mathbf{q}, \tau) \hat{O}_{x^2-y^2}(-\mathbf{q}, 0) \rangle e^{i\omega_m \tau}. \quad (2)$$

ここで、 $\hat{m} = \hat{n}_\uparrow - \hat{n}_\downarrow$ であり、 \hat{n} は粒子数の演算子である。また、 xz - yz 軌道間の軌道秩序演算子は $\hat{O}_{x^2-y^2} = \hat{n}_{xz} - \hat{n}_{yz}$ で、電気四重極に相当する。

軌道揺らぎの発現機構について、まず平均場近似と同等の RPA に基づき考察された。単純化の為に縮退 2 軌道 Hubbard 模型を考え $U = U' + 2J$ を仮定すると、RPA では以下を得る。

$$\chi_{\text{RPA}}^{\text{spin}}(q) = \chi^0(q) / [1 - (U + J)\chi^0(q)], \quad (3)$$

$$\chi_{\text{RPA}}^{\text{orbital}}(q) = \chi^0(q) / [1 - (U - 5J)\chi^0(q)]. \quad (4)$$

ただし、裸の既約感受率 $\hat{\chi}^0(q) = -T \sum_k \hat{G}(k+q) \hat{G}(k)$ は軌道対角であると単純化した。これらの式より RPA では、軌道秩序がスピン秩序より先に起きる条件は、 $J < 0$ という非現実的なものである。⁵²⁾ つまり、現実の $J > 0$ では、⁵¹⁾ 鉄系の普遍的特徴である非磁性ネマティック相 ($T_{\text{str}} > T > T_{\text{mag}}$) が説明出来ず、平均場近似 (及び RPA) の限界が明らかになった。そこで、RPA を超えた多体理論構築が、鉄系超伝導体の理論研究における主たるテーマとなった。

なお、 $\hat{G}(k)$ は電子のグリーン関数である。ここでは省略表記 $k = (\mathbf{k}, i\epsilon_n)$, $q = (\mathbf{q}, i\omega_m)$ を使い、 $\epsilon_n = (2n+1)\pi T$ と $\omega_m = 2m\pi T$ はそれぞれ Fermion と Boson の松原振動数である。

2.3 RPA を超えて: パーテックス補正

軌道間相互作用の起源として、我々は最近、感受率に対するパーテックス補正により、軌道揺らぎが著しく増大する新機構を見出した。²⁵⁾ パーテックス補正は平均場レベルの近似を超えた多体効果であり、Ward 恒等式より保存近似を満たす為に要請される。パーテックス補正は強相関係においてしばしば重要な役割を果たす。実際、1 軌道模型においてパーテックス補正を考慮した Self-Consistent Renormalization (SCR) 理論が量子臨

界現象の記述に成功を収め,⁵³⁾ また銅酸化物高温超伝導体のホール係数やネルンスト係数等における異常な輸送現象が, 伝導に対するバーテックス補正により統一的に説明される.⁵⁴⁾ 他方, 多軌道系におけるバーテックス補正はこれまでほとんど研究されていなかった. 我々の研究により, 多軌道系に特有の重要性が明らかとなった.

論文²⁵⁾ で開発された自己無撞着バーテックス補正法 (SC-VC 法) では, 1 ループの自己エネルギーに対する Ward 恒等式が与える 4 点バーテックス $\hat{\Gamma} = \partial\hat{\Sigma}/\partial\hat{G}$ を用いて, 既約感受率に対するバーテックス補正

$$\hat{X}(q) = T^2 \sum_{k,k'} \hat{G}(k+q)\hat{G}(k)\hat{\Gamma}(k,k',q)\hat{G}(k'+q)\hat{G}(k'), \quad (5)$$

を自己無撞着に計算する. 行列表示の電荷 (スピン) 感受率は,

$$\hat{\chi}^{c(s)}(q) = \hat{\Phi}^{c(s)}(q) \left[1 - \hat{I}^{c(s)}\hat{\Phi}^{c(s)}(q) \right]^{-1}, \quad (6)$$

と書ける (第 5 図 (a)). ここで, $\hat{\Phi}^c(q) = \hat{\chi}^0(q) + \hat{X}^c(q)$ 及び $\hat{\Phi}^s(q) = \hat{\chi}^0(q) + \hat{X}^s(q)$ は, 既約感受率の電荷及びスピンパートである. $\hat{I}^{c(s)}$ は電荷 (スピン) に対する裸の Coulomb 相互作用の行列表示で, U, U' 及び J により構成される. バーテックス補正のうち, 揺らぎの 1 次項は Maki-Thompson(MT) 項,^{55,56)} 揺らぎの 2 次項は Aslamazov-Larkin(AL) 項⁵⁷⁾ と呼ばれる (第 5 図 (b)). 単純化の為, 先程と同様に 2 軌道模型を考えると, 多体相関を考慮した感受率は, $U = U' + 2J$ を仮定すると

$$\chi^{\text{spin}}(q) = \Phi^s(q)/[1 - (U + J)\Phi^s(q)], \quad (7)$$

$$\chi^{\text{orbital}}(q) = \Phi^c(q)/[1 - (U - 5J)\Phi^c(q)], \quad (8)$$

を得る. $X^c(q)$ が波数 q で発達して $\Phi^c(q) \gg \Phi^s(q)$ となる時, $\chi^{\text{orbital}}(q)$ が RPA を超えて増大する事が分かる. (RPA は $X^{s,c}(q) = 0$ に対応する。) SC-VC 理論では, (5) 式と (6) 式を自己無撞着に解くことで, $\chi(q)$ と $X(q)$ を得る.

揺らぎの理論に基づくダイアグラムの考察より, SC-VC 理論に含まれる揺らぎの 2 次のバーテックス補正である AL 項が, 軌道揺らぎを著しく増大する事が見出された. 電荷パートの AL 項は,

$$X_{\text{AL}}^c(q) \sim T \sum_{\mathbf{p}} U^4 [\Lambda(\mathbf{p}, \mathbf{q})]^2 [3\chi^s(\mathbf{p} + \mathbf{q})\chi^s(\mathbf{p}) + \chi^c(\mathbf{p} + \mathbf{q})\chi^c(\mathbf{p})], \quad (9)$$

で与えられる。第一項のファインマン図を第 5 図 (c) に示す。ここで、重要な寄与を与えるゼロ松原成分のみ考慮した。また、 $\hat{\Lambda}(p, q) = -T \sum_k \hat{G}(k+q) \hat{G}(k) \hat{G}(k-p)$ は 3 点バーテックスであり、単純化の為に軌道対角成分のみ考慮した。

AL 項により軌道揺らぎが増大する理由を説明する。反強スピン揺らぎ $\chi^s(\mathbf{p})$ はある特定の波数でのみ発達する為、(9) 式の第一項から $\sum_{\mathbf{p}} \chi^s(\mathbf{p}+\mathbf{q}) \chi^s(\mathbf{p})$ は $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ の時に大きく、 $X_{\text{AL}}^c(\mathbf{0})$ の増大をもたらす。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、第 5 図 (c) の AL 項は軌道波が 2 つのスピン波に分かれて再び軌道波に戻るという仮想過程を表し、RPA には含まれない軌道波とスピン波の干渉 (軌道・スピン揺らぎ間のモード結合) を与える。このように、AL 項による平均場近似を超えた多体効果が、軌道揺らぎをもたらす。

AL 項による軌道揺らぎとスピン揺らぎの結合は、局在スピン・軌道間の Kugel-Khomskii 結合⁵⁸⁾ $H^{\text{KK}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j)(\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j)$ に対応する。局在描像におけるこの良く知られた機構は RPA では再現出来ず、バーテックス補正が必要であった。しかしながら、Kugel-Khomskii モデル (第 5 図 (e)) では第 1 図 (a) の実験相図を再現出来ない為、局在モデルによる説明は不適當である。

なお、電荷パートの AL 項に比べ、MT 項や、スピンパートのバーテックス補正 (第 5 図 (d)) は小さい事が示せる。故に、以下の計算ではこれらの項を無視した。詳しくは、文献¹⁶⁾ の Appendix B を参照して頂きたい。また、電荷パートの AL 項がいかにも大きくとも、Hubbard 模型において電荷感受率 $\chi^{\text{charge}}(q)$ は

$$\chi^{\text{charge}}(q) = \Phi^c(q) / [1 + (3U - 5J)\Phi^c(q)], \quad (10)$$

であり、常に抑制される。

3 結果

3.1 LaFeAsO の $T_{\text{str}} \gtrsim T_{\text{mag}}$ の 2 段転移

LaFeAsO を始めとした典型的な鉄系超伝導体では、 $T_{\text{str}} \gtrsim T_{\text{mag}}$ で構造と磁気の 2 段転移を示す。これを説明する為、第一原理計算に基づき作成した LaFeAsO の d - p 模型を SC-VC 理論により解析した結果を紹介する。感受率とバーテックス補正を自己無撞着に

SC-VC理論: 自己無撞着方程式

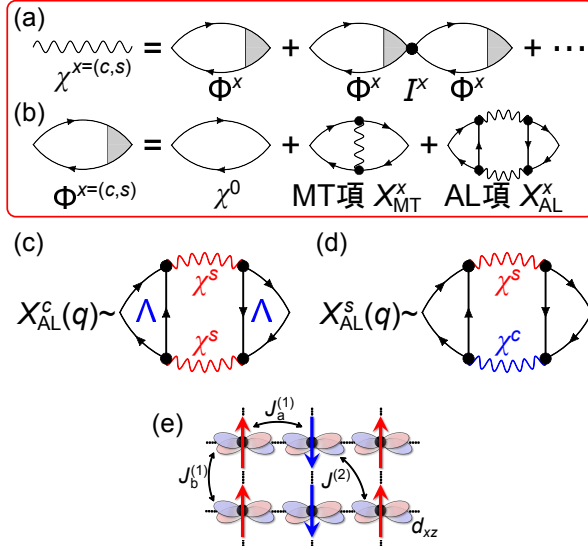


図5 (a) 感受率 $\chi^x(q)$ のファインマン図 ($x = c, s$). I^x は1次の Coulomb 相互作用による4点バーテックス. (b) バーテックス補正を含む既約感受率 $\Phi^x(q)$. $\chi^0(q)$ は裸の感受率. MT 項 X_{MT}^x は揺らぎの1次, AL 項 X_{AL}^x は揺らぎの2次の項である. (c) 電荷パートの AL 項 $X_{AL}^c(q)$ における $\chi^s(q)$ の2乗項のファインマン図. (d) スピンパートの AL 項 $X_{AL}^s(q)$. $\chi^s(q)$ と $\chi^c(q)$ の積から成る. (e) 局在 xz - yz 軌道模型における Kugel-Khomskii 型のスピン・軌道結合の模式図.¹⁶⁾ 軌道秩序 $n_{xz} - n_{yz} > 0$ により $J_a^{(1)} \gg J_b^{(1)}$ となり, ストライプ状の反強磁性が実現する.

計算した結果, RPA とは異なり, $\chi^{\text{orbital}}(\mathbf{q})$ がスピン感受率 $\chi^{\text{spin}}(\mathbf{q})$ と同調して発達し, $T_{\text{str}} \gtrsim T_{\text{mag}}$ の2段転移を与える事が分かった.^{16, 25)}

第6図 (a) はスピン感受率 $\chi^{\text{spin}}(\mathbf{q})$ の波数 \mathbf{q} 依存性である. 多くの先行研究で既に示されている通り, ホール面と電子面間のネスティングに起因し, 対応する波数 $\mathbf{q} = (\pi, 0), (0, \pi)$ で $\chi^{\text{spin}}(\mathbf{q})$ が発達する. この磁気感受率発散による磁気秩序は, 実験のストライプ状の反強磁性秩序に対応する. さらに, このスピン揺らぎは, 第5図 (c) に示した AL 項を通じて軌道揺らぎを大きく増強させる. 第6図 (b) には $\chi^{\text{orbital}}(\mathbf{q})$ を示す. $\chi^{\text{orbital}}(\mathbf{0})$ がスピン揺らぎを超えて大きく発達した. この発達は, 電子ネマティック感受率の発達を表す. また, $\chi^{\text{orbital}}(\mathbf{0})$ の発散は一様な軌道秩序 $n_{xz} \neq n_{yz}$ を導くため, 斜方晶への構造相転移を与える.

さらに, 揺らぎの温度依存性を第6図 (c) に示す. 縦軸は感受率の増強因子で, (7) 式及び (8) 式の分母による増大に相当する. 軌道とスピンの揺らぎが低温に向けて発散的に

増大する様子が見て取れる。軌道感受率の、ほぼ Curie-Weiss 則に従う発散的増大は、第 2 図 (a) の Ba122 における電子ネマティック感受率 χ_{nematic} の増大²⁶⁻²⁸⁾ と整合する。Raman 散乱³⁰⁾ や電気抵抗の面内異方性^{33,34)} からも、 $\chi_{\text{nematic}}(\mathbf{0})$ の Curie-Weiss 的増大が観測されている。同時に、スピン感受率の発達は $1/T_1T$ の増大^{36,59,60)} を導く。感受率が発散する Weiss 温度 θ を Curie-Weiss フィットから見積もると、スピン揺らぎの Weiss 温度が $\theta_S \sim 40$ meV、軌道揺らぎの Weiss 温度が $\theta_C \sim 48$ meV と、近い値が得られた。これは、 $T_{\text{str}} \gtrsim T_{\text{mag}}$ で構造と磁気の 2 段転移を示す、La1111 系や電子ドープ Ba122 系、Na111 系等の相図²⁾ と良く整合する。

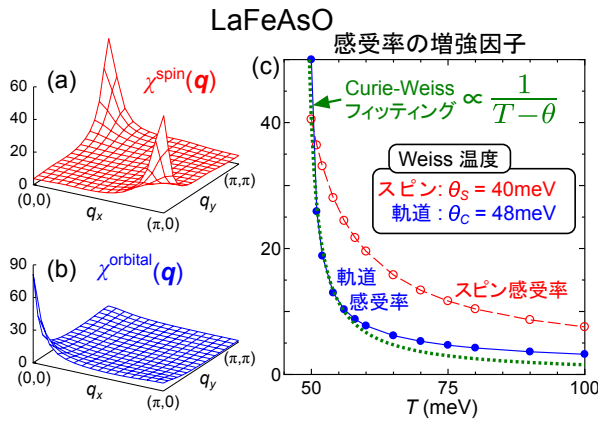


図 6 (a) SC-VC 理論により得られた、LaFeAsO 模型におけるゼロ松原振動数 ($\omega_m = 0$) のスピン感受率 $\chi^{\text{spin}}(\mathbf{q})$ 及び (b) 軌道感受率 $\chi^{\text{orbital}}(\mathbf{q})$. (c) スピン及び軌道感受率の増強因子の温度依存性。感受率が発散する Weiss 温度 θ_S 及び θ_C は、Curie-Weiss フィット $(T - \theta)^{-1}$ より見積もった。文献¹⁶⁾ より。

LaFeAsO における軌道揺らぎの起源は、第 5 図 (c) に示した電荷パートの既約感受率に対する AL バーテックス補正 $X_{\text{AL}}^c(\mathbf{q})$ である。 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ の AL 項はスピン感受率の 2 乗平均 $\sum_{\mathbf{q}} [\chi^s(\mathbf{q})]^2$ に比例する事から、反強磁性相隣傍では AL 項は反強磁性相関長の 2 乗: $\xi^2 \propto (T - \theta_S)^{-1}$ に比例して増大する。 xz 軌道及び yz 軌道に対する $X_{\text{AL}}^c(\mathbf{0})$ の増強が、(8) 式で与えられる軌道感受率の増大を与える。以上より、LaFeAsO における正常状態の相図が SC-VC 理論によって理解される。

3.2 FeSe における非磁性の軌道秩序

FeSe は $T_{\text{str}} = 90$ K で軌道分極を伴った構造相転移を示すものの、磁気転移を示さない。この FeSe の非磁性の構造相転移は 2013 年頃に確立され、⁴⁾ 鉄系超伝導体における軌道自由度の重要性を多くの研究者に知らしめ、正常状態における最重点課題に位置付けられた。本節では、FeSe の第一原理模型を SC-VC 理論により解析し、FeSe において非磁性のネマティック軌道秩序が得られる事を示す。¹⁶⁾

SC-VC 理論により得られたスピン及び軌道感受率の波数依存性を第 7 図 (a) と (b) に示す。果たして、 $\chi^{\text{spin}}(\mathbf{q})$ が小さいまま、 $\chi^{\text{orbital}}(\mathbf{0})$ のみが発達する結果が得られた。この結果は、前節の LaFeAsO の場合にスピンと軌道の感受率両方が発達した事と非常に対照的である。第 7 図 (c) は、感受率増強因子の温度依存性である。軌道感受率のみが低温で発散的に増大する。この軌道感受率の増大は、第 2 図 (b) の FeSe における電子ネマティック感受率 χ_{nematic} の増大と良く整合する。²⁹⁾ χ_{nematic} の増大は、Raman 散乱 ³²⁾ や電気抵抗の面内異方性 ³⁵⁾ からも観測されている。軌道揺らぎの Weiss 温度は $\theta_C = 12$ meV ~ 140 K と現実的な値 (T_{str} の実験値は 90 K) が得られた。他方、スピン揺らぎが弱い事も、実験の $1/T_1T$ が $T > T_{\text{str}}$ では全く発達しない事 ^{29,37)} とコンシステントである。見積もられたスピンの Weiss 温度は $\theta_S \sim -7.5$ meV で負となり、FeSe が磁気転移しない事を示している。

何故 FeSe ではスピン揺らぎが小さいまま、軌道揺らぎだけが増大したのであろうか？ FeSe における軌道揺らぎの起源もまた、第 5 図 (c) に示した、スピン揺らぎ由来の AL 項 $X_{\text{AL}}^c(\mathbf{q})$ である。軌道感受率 $\chi^c(\mathbf{q})$ の表式 (8) を見て頂きたい。 J/U が小さい FeSe では、スピン揺らぎが弱くて $X_{\text{AL}}^c(\mathbf{q})$ があまり大きくない状況でも、(8) 式の分母がゼロに近づき、軌道揺らぎが発達するのである。加えて、際立って小さい Fermi 面や xy 軌道によるホール面の不在という FeSe の特徴的なバンド構造が、軌道揺らぎの発達に重要である。これらの特徴により、スピン揺らぎが主に xz , yz 軌道で発達し波数依存性がブロードになるため、比較的弱いスピン揺らぎでも $X_{\text{AL}}^c(\mathbf{q})$ が増大するのである。詳細は論文 ¹⁶⁾ を参照して頂きたい。

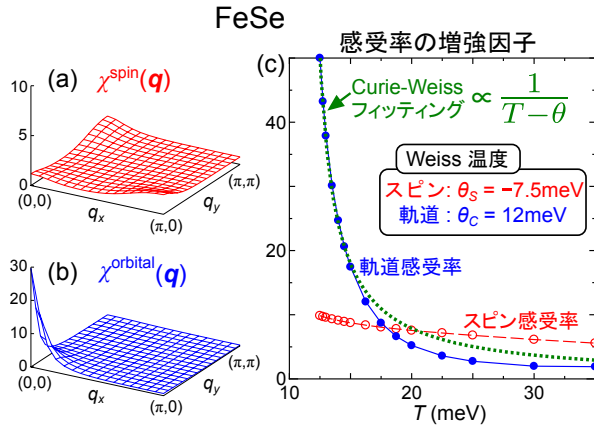


図7 (a) FeSe 模型における $\chi^{\text{spin}}(\mathbf{q})$, 及び (b) $\chi^{\text{orbital}}(\mathbf{q})$. (c) 感受率の増強因子の温度依存性. 本計算では, FeSe の ARPES 測定^{8, 11, 12)} を参考に, 有効質量 $m^*/m = 12$ (xy 軌道) ~ 4 (他の d 軌道) によるバンドの繰り込みを考慮している. 文献¹⁶⁾ より.

FeSe の軌道揺らぎの起源について, より詳細な考察を行う. AL 項のより正確な表式は, $X_{\text{AL}}^c(\mathbf{0}) \sim T \sum_{\mathbf{q}} [\Lambda(\mathbf{q})]^2 [\chi^s(\mathbf{q})]^2$ であり, 2次元系では近似的に $X_{\text{AL}}^c(\mathbf{0}) \sim [\Lambda(\mathbf{Q})]^2 \frac{T}{T - \theta_S}$ となる. ここで, 最も重要なゼロ松原振動数の寄与のみ考慮した. また, \mathbf{Q} はスピン感受率が最大となる波数である. $\Lambda(\mathbf{q}) \equiv \Lambda(\mathbf{q}, \mathbf{0})$ は前述の, 2つのスピン揺らぎと1つの軌道揺らぎ間の結合である. もし $\Lambda(\mathbf{Q})$ が定数であれば, θ_S が負の場合には $X_{\text{AL}}^c(\mathbf{0})$ は低温で減少する為, FeSe の軌道揺らぎの増大は説明し得ない. ところが, Ward 恒等式 $\Lambda_m(\mathbf{q}) \sim \partial \chi_m^0(\mathbf{q}) / \partial E_m$ ($m = xz, yz, xy$) より, $\Lambda(\mathbf{Q})$ がネスティングにより低温で増大する事が期待される.^{42, 61-63)} ここで, E_m は軌道準位である. 事実, 鉄系超伝導体の有効模型に基づく数値解析によると, $[\Lambda(\mathbf{Q})]^2 \propto T^{-1}$ が成り立ち, $X_{\text{AL}}^c(\mathbf{0})$ が低温で増大する起源を与える.¹⁶⁾ まとめて, FeSe における軌道揺らぎの増大は, $[\Lambda(\mathbf{Q})]^2$ の温度依存性を正確に考慮する事で, 初めて理解する事が出来た. 現実的 Hubbard 模型に基づくダイアグラム計算の有用性が改めて実証されたと考える.

構造相転移の起源の別の候補として, スピンネマティック機構が提案されているが,¹⁷⁻²¹⁾ FeSe の構造相転移を説明する事は出来ない. スピンネマティック感受率は $\chi_{\text{nematic}}^{\text{spin}} \propto (1 - g^s x)^{-1}$ で与えられ, g^s はスピン・格子間相互作用による結合定数である. $x \propto T \sum_{\mathbf{q}} [\chi^s(\mathbf{q})]^2 \sim T / (T - \theta_S)$ であり, $\theta_S < 0$ である FeSe において x は低温で減少する. 事実, x は解析接続により $x = \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im}[\chi^s(\mathbf{q}, E)]^2 \coth(E/2T) dE$ と与えられ,

FeSe における非弾性中性子散乱実験⁴¹⁾によると, T_{str} 以上の高温では, $\chi^s(\mathbf{q}, E)$ は全エネルギー領域で温度に依存しない. 従って, $\chi_{\text{nematic}}^{\text{spin}}$ は T_{str} 近傍でも増大し得ない. この事から, C_s 等で観測されている電子ネマティック感受率の発散的増大を説明出来ず, FeSe の構造相転移の起源はスピルネマティック機構ではないと結論できる.

3.3 軌道秩序によるスピン揺らぎの増大

鉄系超伝導体におけるスピン揺らぎは T_{str} 以下で顕著に増大し,^{36,59,60)} LaFeAsO や Ba122 系では T_{str} 直下の T_{mag} で反強磁性に転移する. FeSe も磁気転移はないが, やはり T_{str} 以下でスピン揺らぎは増大する.²⁸⁾ SC-VC 理論を $T < T_{\text{str}}$ に拡張したより厳密な計算は次章に譲るとして, 本節では軌道秩序の存在下でスピン揺らぎが急速に増大する実験事実を説明する.

第 8 図は, RPA で計算したスピン感受率の温度依存性である. ここで, T_{str} 以下では波数空間で一定の軌道分極 $E_{yz} - E_{xz} = \Delta E(T)$ が生じると仮定した. まず LaFeAsO の場合, T_{str} 以下で急速にスピン感受率が発達し, T_{mag} で磁気転移を生じる. 一方, FeSe の場合はスピン感受率は軌道分極により増大するものの, 発散には至らず磁気転移を示さない. これらの振る舞いは, 第 2 図に示した実験結果と非常に良く整合する. 従って, $T < T_{\text{str}}$ でのスピン揺らぎの顕著な増大は, 軌道秩序により理解出来る. 軌道秩序の下では, $\chi^s(\pi, 0)$ と $\chi^s(0, \pi)$ は非等価になる. 実験的には, 弱い一軸圧を用いて非双晶化 (a 軸長 $>$ b 軸長) された BaFe₂As₂ では, 軌道分極の符号は $E_{yz} - E_{xz} > 0$ となる.⁶⁾ この時, a 軸方向に反強的・ b 軸方向に強的という, $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ の磁気秩序が実現する. この結果は, 実験と理論でコンシステントである.

4 軌道秩序状態

4.1 FeSe の符号反転した軌道分極

前章では SC-VC 理論により, T_{str} 以上における軌道感受率の発達を示した. 本章では正常状態の相図の完全解明の為, T_{str} 以下の秩序状態を計算出来るよう SC-VC 理論を拡張し, 軌道秩序下の電子状態を解明する. 特に重要なのが, FeSe の軌道秩序状態である.

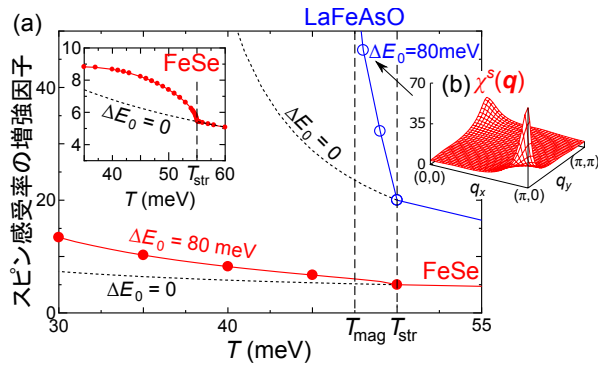


図 8 (a) LaFeAsO 模型と FeSe 模型における, RPA により計算したスピン感受率の増強因子. ここで, $T_{\text{str}} = 50 \text{ meV}$ 以下では, 波数依存の無い平均場的な軌道分極 $E_{yz} - E_{xz} = \Delta E_0 \tanh(1.74\sqrt{T_{\text{str}}/T - 1})$ を導入した. (挿入図) 次章で紹介する, T_{str} 以下へ SC-VC 理論を拡張して計算した, 波数依存した軌道分極 $\Delta E(\mathbf{k})$ によるスピン感受率の増大. 定性的には波数依存の無い軌道分極の結果と同じである. (b) LaFeAsO 模型における $\chi^s(\mathbf{q})$. 軌道秩序により, $\chi^s(\mathbf{q})$ が $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ で増大している. 文献¹⁶⁾より.

全ての鉄系超伝導体では T_{str} 以下で軌道分極が生じるが, FeSe では軌道分極の符号が波数空間内で反転するという, 非自明な現象が報告された.¹¹⁾ 符号反転する軌道分極は, 平均場近似や電子格子相互作用では決して理解出来ず, 軌道秩序の起源がバーテックス補正等の多体電子相関である強い証拠と言える.

第 9 図 (a) は ARPES 測定による, 30 K ($< T_{\text{str}}$) における FeSe の Fermi 面である.¹¹⁾ 弱い一軸圧力により非双晶化されており, $a > b$ となっている. X, Y 点周りでは, 他の鉄系超伝導体と同様, $E_{xz} < E_{yz}$ の軌道分極が生じる. ところが, Γ 点周りでは逆に $E_{xz} > E_{yz}$ となっている (第 9 図 (b)). その結果, Γ 点周りのホール面が k_y 方向の楕円形になり, X 点周りの電子面は k_x 方向に伸びた楕円になる. さらに, 数 10 原子層の薄膜 FeSe では, 軌道分極が相対的に大きく, X 点の電子面は Dirac コーンの対に変わる.^{14,15)} この軌道分極の非自明な符号反転は, 電子ネマティック相の解明のカギとして注目を集めた.

4.2 T_{str} 以下への SC-VC 理論の拡張:軌道秩序の自己無撞着理論

相転移の秩序変数は, 自己エネルギーの自発的な対称性の破れとして表される. しかしながら, 平均場近似では秩序変数が波数依存性を持たず, FeSe の符号反転する軌道分極

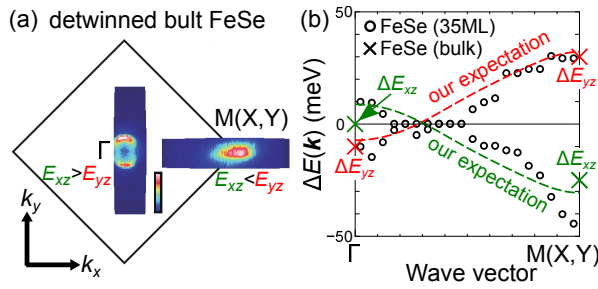


図9 (a) ARPESにより測定された, $T = 30$ K の非双晶化 FeSe 単結晶の Fermi 面. 文献¹¹⁾より. (b) FeSe 単結晶 (非双晶)⁹⁻¹¹⁾ 及び, FeSe-35 層薄膜 (双晶)¹⁴⁾ における軌道分極の実験値. T_{str} 以下で ARPES により測定された. 破線は, (a) の実験結果と本理論計算の結果⁴⁴⁾ から期待される軌道分極の波数依存性.

を説明できない. 従って, ここでも平均場を超えた電子相関効果を計算する必要がある. 我々は前章の SC-VC 理論の T_{str} 以下への自然な拡張として, 第 10 図に示す 1 ループの自己エネルギーの 4 回対称性の破れを自己無撞着に計算する手法 (C_2 自己エネルギー法) を開発した. ここで, 自己エネルギーの 2 回対称成分 $\Delta\Sigma(\mathbf{k})$ が軌道分極 $\Delta E(\mathbf{k})$ に対応し, 有限の $\Delta\Sigma(\mathbf{k})$ は感受率 $\chi(\mathbf{q})$ の対称性の破れを誘起する. 軌道分極と揺らぎを自己無撞着に解く事で, 4 回対称 (C_4) から 2 回対称 (C_2) への自発的な対称性の破れを計算できる. 第 10 図の右辺を $\Delta E(\mathbf{k})$ の 1 次で展開すると, Hartree 項, MT 項, AL 項と展開できることから, 前章の SC-VC 理論と本質的に等価である事が証明される.

$$\begin{aligned}
 \Delta\Sigma &= \text{Hartree term} + \text{MT term} - \Sigma^{\text{A1g}} \\
 &= \text{Hartree term} + \text{MT term} + \text{AL term} + \dots
 \end{aligned}$$

図 10 1 ループ近似による C_2 自己エネルギー $\Delta\Sigma$. 軌道分極 ΔE の 1 次で展開すると, 下段の式を得る. 本理論は SC-VC 理論の自然な拡張になっている. 一方, 平均場近似では Hartree 項のみ考慮し, RPA と同等である.

4.3 FeSe の軌道秩序状態の解析結果

C_2 自己エネルギー法により求めた, FeSe の軌道秩序状態の解析結果を第 11 図にまとめた. 第 11 図 (a) 及び (b) は, 軌道秩序状態における xz, yz 軌道の軌道分極 $\Delta E(\mathbf{k})$ である. 平均場を超えた非局在な電子相関効果を考慮した事で, 波数依存した $\Delta E(\mathbf{k})$ が得られた. しかも驚くべき事に, 波数空間内で軌道分極の符号が反転するという, ARPES 測定とコンシステントな結果が自然に得られた. xz 軌道の成分は Γ 点と Y 点周りに多いが, $\Delta E_{xz}(\mathbf{k})$ は Y 点で負なのに対し, Γ 点では正である. また, $\Delta E_{yz}(\mathbf{k})$ も k_x 軸上で符号が逆転する. その結果, Γ 点周りのホール面は縦長, X 点周りの電子面は 1 対の Dirac コーンに変化した. 第 11 図 (c) にはバンド分散を示す. また, 第 11 図 (d) には, k_x 及び k_y 軸上での軌道分極の波数依存性をまとめた. 軌道分極の符号反転が良く見て取れる. これらの結果は, ARPES 測定の結果 (第 9 図) と驚く程良く整合する.

次に, 軌道秩序状態下でのスピン感受率 $\chi^s(\mathbf{q})$ の計算結果を示す. 軌道秩序 $\Delta E(\mathbf{k})$ とスピン揺らぎとの間に働く正のフィードバックにより, 第 11 図 (e) に示す様に, 軌道秩序状態下では $\chi^s(\pi, 0)$ が増大する. また, 温度依存性は第 8 図の挿入図に示した通りで, T_{str} 以下で増大する.

第 11 図 (f) は強的な軌道秩序成分 $n_{xz} - n_{yz}$ の温度依存性である. 相転移温度 T_{str} 以下で 2 次転移的に増大し, およそ $\sim 1\%$ の軌道分極が生じている. この強的な軌道分極成分は電気四重極 $O_{x^2-y^2} = n_{xz} - n_{yz} > 0$ を誘起し, $a > b$ の構造相転移を導く. また, 第 11 図 (g) は軌道分極 ΔE の温度依存性である. T_{str} 以下で Γ 点と X-Y 点で逆符号の軌道分極が発達する.

この軌道秩序の主な起源は, 第 10 図の AL 項である. 第 10 図の AL 項のファインマン図が示す物理的意味は, 軌道分極 $\Delta E(\mathbf{k})$ により増大したスピン揺らぎ $\chi^s(\pi, 0)$ によって $\Delta E(\mathbf{k})$ がさらに増大されるという機構であり, $\Delta E(\mathbf{k})$ と $\chi^s(\pi, 0)$ の正のフィードバックである. つまり, AL 項による軌道・スピン揺らぎ間の強いモード結合が, 軌道秩序の起源である. 事実, MT 項を無視した解析を実行しても, ほぼ同じパラメータで軌道秩序が現れる. 一方, MT 項は $\Delta E(\mathbf{k})$ と $\Delta E(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ の符号を反転させる効果が有る. AL 項と MT

項の両方を正しく考慮する事で、弱いスピン揺らぎが存在する FeSe において、符号反転した軌道分極が実現する。なお、スピン揺らぎの強い LaFeAsO では AL 項が MT 項に対して圧倒的に大きい為、同様の解析を行っても軌道分極の符号反転は起きない。

以上、第一原理計算による Hubbard 模型に基づいて電子相関を考慮した結果、FeSe の符号反転する軌道分極という非自明な物理現象が自然に再現出来る事を示した。得られた Fermi 面は ARPES の結果を良く再現し、軌道秩序下でのスピン揺らぎ増大も実験と整合する。この実験と理論の一致は、鉄系超伝導体の構造相転移の起源が、バーテックス補正に起因した軌道秩序である事の決定的証拠である。

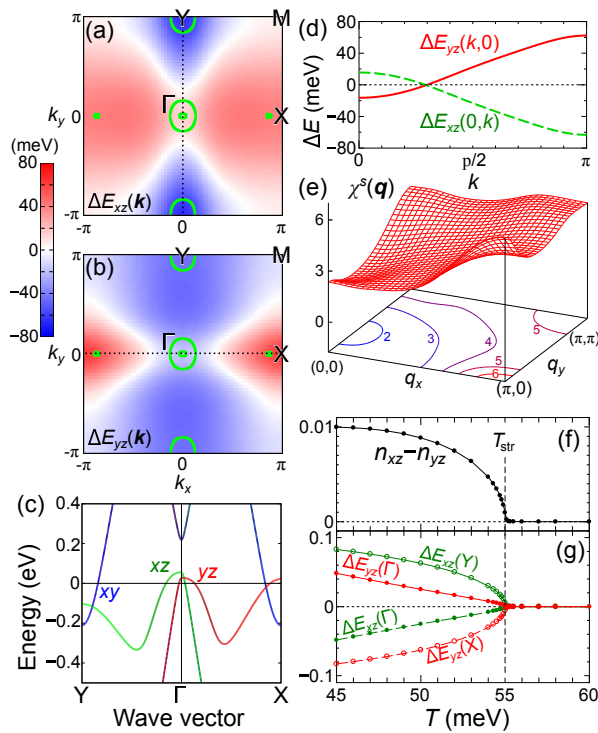


図 11 FeSe の軌道秩序状態の計算結果. (a) 軌道分極 $\Delta E_{xz}(\mathbf{k})$ 及び (b) $\Delta E_{yz}(\mathbf{k})$. 緑の実線は ΔE により変形した Fermi 面. (c) k_x 及び k_y 軸上でのバンド分散, 及び (d) 軌道分極 $\Delta E_{xz}(0, k)$, $\Delta E_{yz}(k, 0)$. (e) スピン感受率 $\chi^s(\mathbf{q})$. 軌道秩序により $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ で増強されている. (f) 軌道分極 $n_{xz} - n_{yz}$, 及び (g) Γ , X, Y 点での軌道分極の温度依存性. 文献¹⁶⁾より.

5 物質依存性の統一的説明

以上, LaFeAsO と FeSe の異なる振る舞いが, SC-VC 理論により説明出来る事を示した. 第 12 図には, SC-VC 理論により見積もった, 様々な鉄系超伝導体における Weiss 温度の比 θ_S/θ_C をまとめた. 横軸は表 1 の $J_{\text{ave}}/U_{\text{ave}}$ で並べてある. θ_S/θ_C は相対的なスピン揺らぎの強さを表す. J/U の大きい LaFeAsO や BaFe₂As₂ ではスピン揺らぎが強く $\theta_S \sim \theta_C$ となる. 一方, J/U が小さい時は $\theta_S \ll \theta_C$ となり, FeSe では磁気転移は消失する. また, $T_{\text{mag}}/T_{\text{str}}$ と $\theta_{\text{NMR}}/T_{\text{str}}$ の実験値も併せてプロットしてある. これらの比も, θ_S/θ_C と似た振る舞いを示す. より詳細には, θ_{NMR} は $1/T_1T$ から見積もられ, 理論の θ_S に相当する. 一方, 軌道秩序によりスピン揺らぎが増強されるため, $T_{\text{mag}} > \theta_{\text{NMR}} = \theta_S$ となる. 構造相転移温度は, Jahn-Teller エネルギー g による数 10K の上乘せがあり $T_{\text{str}} > \theta_C + g$ となる.⁶⁴⁾ 以上より, 理論的には $\theta_{\text{NMR}}/T_{\text{str}} < \theta_S/\theta_C < T_{\text{mag}}/T_{\text{str}}$ が期待される. 第 12 図に示す通り, 実際にこの関係が良く成り立っており, スピンと軌道揺らぎの相対的な強さは J/U でおよそスケールされる.

また, FeSe における軌道揺らぎ発達には, バンド構造も寄与している. FeSe では xy 軌道のホール面が消失している為, xz, yz 軌道の成分が主であり, 軌道秩序 $n_{xz} - n_{yz} \neq 0$ に有利である. さらに, FeSe のような小さな Fermi 面では電子・ホール非対称性が大きくなり, AL 項の式にある 3 点バーテックス $\Lambda(\mathbf{Q})$ が大きくなる.

以上より, SC-VC 理論により, 様々な鉄系超伝導体の軌道・磁気相図の統一的に説明された. 軌道・磁気相図を決定する最重要パラメータは J/U であり, 加えて FeSe の小さな Fermi 面や xy 軌道のホール面の不在が軌道秩序に有利である.

6 他の多軌道強相関係への応用

本稿で示したバーテックス補正による軌道揺らぎの発達は, 様々な多軌道強相関電子系で重要になると期待される. 近年, 銅酸化物高温超伝導体では CDW が観測され, 長年の謎である擬ギャップ現象解明のカギとして注目を集めている. SC-VC 理論により, AL 項に起因した銅の $d_{x^2-y^2}$ 軌道と酸素の p_x, p_y 軌道による CDW 生じる事が分かった⁶⁵⁾.

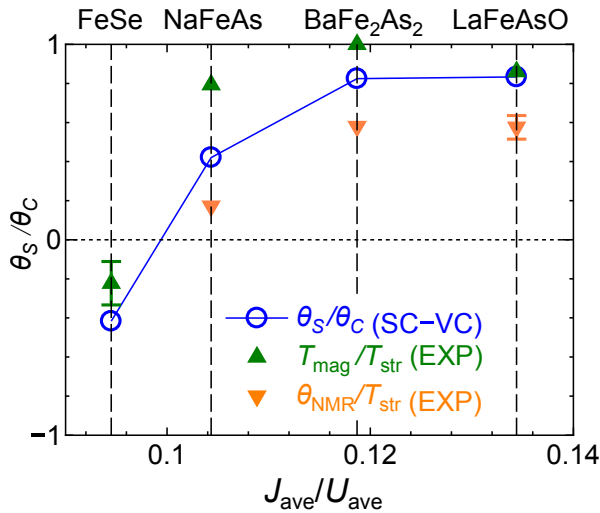


図 12 各種鉄系超伝導体の模型に対して, SC-VC 理論により見積もった Weiss 温度の比 θ_S/θ_C . また, T_{mag}/T_{str} 及び θ_{NMR}/T_{str} の実験値. Weiss 温度の実験値 θ_{NMR} は, T_{str} 以上での $1/T_1T$ の Curie-Weiss フィットによる.^{36,59,60)} また FeSe の T_{mag} は T_{str} 以下で見積もった Weiss 温度.²⁸⁾ 文献¹⁶⁾ より.

さらに, 高次のバーテックス補正を様々なバイアスなく系統的に計算できる汎関数くりこみ群を用いた解析を行い, CDW の正体が確かに AL 項に起因した酸素の p_x - p_y 軌道秩序である事を明らかにした.⁶⁶⁾ 加えて, トリプレット超伝導体として注目される Ru 酸化物に対しても, d_{xz} , d_{yz} の 2 軌道 Hubbard 模型を汎関数くりこみ群と SC-VC 理論を駆使して解析した.^{67,68)} その結果, バーテックス補正により軌道揺らぎが増大し, スピンと軌道揺らぎの協力によるトリプレット超伝導が発現する事を示した. このように多軌道系において, バーテックス補正に起因した興味深い物理現象が次々と明らかになってきている. SC-VC 理論と汎関数くりこみ群の良い一致により SC-VC の妥当性が証明され, バーテックス補正による軌道揺らぎの物理が多軌道系において広く実現している事が期待される.

7 おわりに

鉄系超伝導体の正常電子状態における最重要な未解明問題である「非磁性電子ネマティック秩序」について, 平均場近似を超えた多体効果であるバーテックス補正を考慮した最新の理論研究を紹介した. ネマティック秩序は RPA や DMFT などの従来の標準的理論手法では説明が出来なかったため, 理解が遅れていた. 本稿ではバーテックス補正を

自己無撞着に計算する SC-VC 理論を展開し、電子ネマティック秩序の正体が軌道秩序であり、その起源が Aslamazov-Larkin (AL) 型バーテックス補正が記述する軌道・スピン揺らぎ間のモード結合であることを見出した。²⁵⁾ FeSe や LaFeAsO など各種鉄系超伝導体に対する第一原理ハミルトニアンを構築し、これらの模型をバーテックス補正を自己無撞着に計算する SC-VC 理論により解析することで、第 1 図や第 2 図に示す状態相図やネマティック揺らぎのパラエティエーの再現に成功した。^{16,44)} 特に、近年話題を呼んだ“FeSe の非磁性電子ネマティック秩序”を、軌道秩序として自然に説明することができた。その理由は、Hund 結合と Coulomb 斥力の比 J/U が小さい、Fermi 面が小さい、 xy 軌道のホール面が存在しないという FeSe 固有の特徴に由来する。

本研究より、鉄系超伝導体における電子ネマティック秩序の起源は、AL バーテックス補正に由来する軌道秩序であることが結論される。多軌道 Hubbard 模型における AL バーテックス補正の重要性は、バイアスの無い大規模バーテックス補正計算を可能とする、汎関数繰り込み群法により立証されている。⁶⁶⁻⁶⁹⁾ なお AL バーテックス補正による軌道秩序機構は、鉄系超伝導体のみならず、銅酸化物高温超伝導体においてもネマティック電荷秩序の発現機構として実現するなど、^{65,66)} 多軌道金属における普遍的現象だと考えられる。今後の金属電子理論において、バーテックス補正を考慮した平均場近似を超えた多体理論の発展が、ますます重要になると考えられる。

最後に、鉄系超伝導体の超伝導発現機構について簡単に議論する。反強制的スピン揺らぎは斥力ペアリング相互作用を与えるため、符号反転のある S_{\pm} 波超伝導状態をもたらす。⁴⁷⁾ 一方、AL バーテックス補正に由来する発達した軌道揺らぎは、強い引力ペアリング相互作用を与える。⁴³⁾ 第 6 図や第 7 図に示す強制的軌道揺らぎは、符号反転の有無に関わらず T_c の増大に寄与する。加えて本稿では説明しなかったが、AL バーテックス補正によって反強制的な軌道揺らぎも発達する。その結果、発達した軌道揺らぎにより“符号反転の無い S_{++} 波状態”が実現し得る。^{25,43)} これまで La1111 系や Ba122 系を中心に、符号反転の有無を検証する様々な位相敏感測定が試みられてきた。特に、 T_c に対する不純物効果の測定や、⁷⁰⁻⁷⁴⁾ T_c 以下の中性子非弾性散乱における共鳴ピークの有無について、⁷⁵⁻⁷⁹⁾ 実験的および理論的に精力的に研究されてきたが、いまだ解決には至っていない。鉄系超伝導体の状態相図が示す豊かなパラエティエーに対応して、符号反転の有無などの超伝導状態も物

質ごとに異なるのではないかと考えるのが自然かもしれない。最近では、過剰電子ドーピングされた FeSe において、 $T_c = 60$ K を超える高温超伝導が見出されているが、そこでの超伝導ギャップは符号反転の無い S_{++} 波と報告されている。⁸⁰⁻⁸²⁾

軌道揺らぎによる超伝導発現機構を考えるうえで、大変有利な研究報告がある。最近我々は、電子・ボゾン結合定数 (U) に対するバーテックス補正 (U -VC) を考慮した超伝導ギャップ方程式の定式化を行った。文献⁶⁸⁾において、汎関数繰り込み群とダイアグラム計算を併用した理論研究を遂行したので、その結果を紹介する：軌道揺らぎが発達する AL バーテックス補正が重要な状況では、第 13 図に示す電荷チャンネルの U -VC も同様に増大する。軌道揺らぎが媒介する有効引力は U -VC の 2 乗で増大されるため、主たる超伝導発現機構を担うことが期待される。(文献⁶⁸⁾によると、その寄与は 10 倍に達する。) 逆にスピンチャンネルの U -VC は、スピン揺らぎが媒介する有効斥力を減少させる働きがある。^{68, 83-85)}

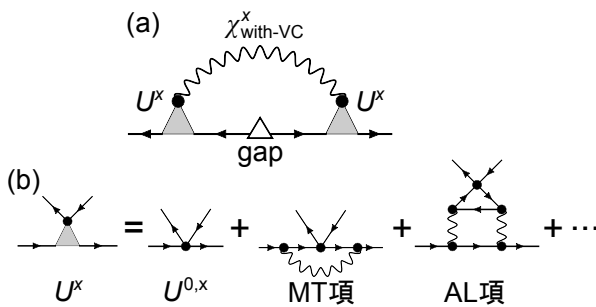


図 13 (a) U -VC を含むギャップ方程式. Migdal-Eliashberg 近似では、 U を裸のクーロン相互作用 $U^{0,x}$ で近似する ($x = s$ or c). (b) U -VC のファインマン図. AL バーテックス補正により $U^c \gg U^{c,0}$ となる。⁶⁸⁾

鉄系超伝導体の発見を契機に、多軌道 Hubbard 模型の理論解析手法が長足の進歩を遂げた。特にそれまで標準的理論手法の地位にいた多軌道 RPA や Migdal-Eliashberg 方程式が見直しを迫られ、バーテックス補正による軌道秩序の発現機構が発見され、 U -VC を考慮した Migdal 近似を超えた超伝導ギャップ方程式が確立された。これらの新しい理論手法は、これからの物性理論の主要テーマである多軌道強相関超伝導発体の研究において、ますます重要になると期待される。

謝辞

本研究の内容に関して, 佐藤正俊, 藤森敦, 松田祐司, 芝内孝禎, 下志万貴博, 土射津昌久, 斉藤哲郎, D. J. Scalapino, A. V. Chubukov, P. J. Hirschfeld, R. M. Fernandes, J. Schmalian の各氏には大変有益な議論をして頂きました. この場を借りて, 皆様に厚く御礼申し上げます.

〔参考文献〕

- 1) Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono; *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 3296.
- 2) D. C. Johnston: *Adv. Phys.* **59** (2010) 803.
- 3) Y. Mizuguchi and Y. Takano: *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** (2010) 102001.
- 4) A. E. Böhmer, F. Hardy, F. Eilers, D. Ernst, P. Adelman, P. Schweiss, T. Wolf, and C. Meingast: *Phys. Rev. B* **87** (2013) 180505.
- 5) C. H. P. Wen, H. C. Xu, C. Chen, Z. C. Huang, Y. J. Pu, Q. Song, B. P. Xie, M. Abdel-Hafiez, D. A. Chareev, A. N. Vasiliev, R. Peng, and D. L. Feng: *Nat. Commun.* **7** (2016) 10840.
- 6) M. Yi, D. Lu, J.-H. Chu, J. G. Analytis, A. P. Sorini, A. F. Kemper, B. Moritz, S.-K. Mo, R. G. Moore, M. Hashimoto, W.-S. Lee, Z. Hussain, T. P. Devereaux, I. R. Fisher, and Z.-X. Shen: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* **108** (2011) 6878.
- 7) Y. Zhang, C. He, Z. R. Ye, J. Jiang, F. Chen, M. Xu, Q. Q. Ge, B. P. Xie, J. Wei, M. Aeschlimann, X. Y. Cui, M. Shi, J. P. Hu, and D. L. Feng: *Phys. Rev. B* **85** (2012) 085121.
- 8) J. Maletz, V. B. Zabolotnyy, D. V. Evtushinsky, S. Thirupathaiah, A. U. B. Wolter, L. Harnagea, A. N. Yaresko, A. N. Vasiliev, D. A. Chareev, A. E. Böhmer, F. Hardy, T. Wolf, C. Meingast, E. D. L. Rienks, B. Büchner, and S. V. Borisenko: *Phys. Rev. B* **89** 220506(R) (2014).
- 9) K. Nakayama, Y. Miyata, G. N. Phan, T. Sato, Y. Tanabe, T. Urata, K. Tanigaki, and T. Takahashi: *Phys. Rev. Lett.* **113** (2014) 237001.
- 10) T. Shimojima, Y. Suzuki, T. Sonobe, A. Nakamura, M. Sakano, J. Omachi, K. Yoshioka, M. Kuwata-Gonokami, K. Ono, H. Kumigashira, A. E. Böhmer, F.

- Hardy, T. Wolf, C. Meingast, H. v. Löhneysen, H. Ikeda, and K. Ishizaka: Phys. Rev. B **90** (2014) 121111(R).
- 11) Y. Suzuki, T. Shimojima, T. Sonobe, A. Nakamura, M. Sakano, H. Tsuji, J. Omachi, K. Yoshioka, M. Kuwata-Gonokami, T. Watashige, R. Kobayashi, S. Kasahara, T. Shibauchi, Y. Matsuda, Y. Yamakawa, H. Kontani, and K. Ishizaka: Phys. Rev. B **92** (2015) 205117.
- 12) M. D. Watson, T. K. Kim, A. A. Haghighirad, N. R. Davies, A. McCollam, A. Narayanan, S. F. Blake, Y. L. Chen, S. Ghannadzadeh, A. J. Schofield, M. Hoesch, C. Meingast, T. Wolf, and A. I. Coldea: Phys. Rev. B **91** (2015) 155106.
- 13) P. Zhang, T. Qian, P. Richard, X. P. Wang, H. Miao, B. Q. Lv, B. B. Fu, T. Wolf, C. Meingast, X. X. Wu, Z. Q. Wang, J. P. Hu, and H. Ding: Phys. Rev. B **91** (2015) 214503.
- 14) Y. Zhang, M. Yi, Z.-K. Liu, W. Li, J. J. Lee, R. G. Moore, M. Hashimoto, N. Masamichi, H. Eisaki, S.-K. Mo, Z. Hussain, T. P. Devereaux, Z.-X. Shen, and D. H. Lu: arXiv:1503.01556.
- 15) S. Y. Tan, Y. Fang, D. H. Xie, W. Feng, C. H. P. Wen, Q. Song, Q. Y. Chen, W. Zhang, Y. Zhang, L. Z. Luo, B. P. Xie, X. C. Lai, and D. L. Feng: Phys. Rev. B **93** (2016) 104513.
- 16) Y. Yamakawa, S. Onari, and H. Kontani: Phys. Rev. X **6** (2016) 021032.
- 17) R. M. Fernandes, L. H. VanBebber, S. Bhattacharya, P. Chandra, V. Keppens, D. Mandrus, M. A. McGuire, B. C. Sales, A. S. Sefat, and J. Schmalian: Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 157003.
- 18) F. Wang, S. A. Kivelson, and D.-H. Lee: Nat. Phys. **11** (2015) 959.
- 19) A. V. Chubukov, R. M. Fernandes, and J. Schmalian: Phys. Rev. B **91** (2015) 201105(R).
- 20) J. K. Glasbrenner, I. I. Mazin, H. O. Jeschke, P. J. Hirschfeld, R. M. Fernandes, and R. Valentí: Nat. Phys. **11** (2015) 953.
- 21) R. Yu and Q. Si: Phys. Rev. Lett. **115** (2015) 116401.

- 22) F. Krüger, S. Kumar, J. Zaanen, and J. van den Brink: *Phys. Rev. B* **79** (2009) 054504.
- 23) W. Lv, J. Wu, and P. Phillips: *Phys. Rev. B* **80** (2009) 224506.
- 24) C.-C. Lee, W.-G. Yin, and W. Ku: *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 267001.
- 25) S. Onari and H. Kontani: *Phys. Rev. Lett.* **109** (2012) 137001.
- 26) M. Yoshizawa, D. Kimura, T. Chiba, S. Simayi, Y. Nakanishi, K. Kihou, C.-H. Lee, A. Iyo, H. Eisaki, M. Nakajima, and S. Uchida: *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** (2012) 024604.
- 27) T. Goto, R. Kurihara, K. Araki, K. Mitsumoto, M. Akatsu, Y. Nemoto, S. Tatematsu, and M. Sato: *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** (2011) 073702.
- 28) A. E. Böhmer, P. Burger, F. Hardy, T. Wolf, P. Schweiss, R. Fromknecht, M. Reinecker, W. Schranz, and C. Meingast: *Phys. Rev. Lett.* **112** (2014) 047001.
- 29) A. E. Böhmer, T. Arai, F. Hardy, T. Hattori, T. Iye, T. Wolf, H. v. Löhneysen, K. Ishida, and C. Meingast: *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 027001.
- 30) Y. Gallais, R. M. Fernandes, I. Paul, L. Chauviere, Y.-X. Yang, M.-A. Measson, M. Cazayous, A. Sacuto, D. Colson, and A. Forget: *Phys. Rev. Lett.* **111** (2013) 267001.
- 31) V. K. Thorsm
olle, M. Khodas, Z. P. Yin, C. Zhang, S. V. Carr, P. Dai, and G. Blumberg: *Phys. Rev. B* **93** (2016) 054515.
- 32) P. Massat, D. Farina, I. Paul, S. Karlsson, P. Strobel, P. Toulemonde, M.-A. Measson, M. Cazayous, A. Sacuto, S. Kasahara, T. Shibuachi, Y. Matsuda, and Y. Gallais: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **113** (2016) 9177.
- 33) J.-H. Chu, J. G. Analytis, K. De Greve, P. L. McMahon, Z. Islam, Y. Yamamoto, and I. R. Fisher: *Science* **329** (2010) 824.
- 34) H.-H. Kuo, J.-H. Chu, J. C. Palmstrom, S. A. Kivelson, and I. R. Fisher: *Science* **352** (2016) 958.
- 35) S. Hosoi, K. Matsuura, K. Ishida, H. Wang, Y. Mizukami, T. Watashige, S.

- Kasahara, Y. Matsuda, and T. Shibauchi: Proc. Natl. Acad. Soc. USA. **113** (2016) 8139.
- 36) F. L. Ning, K. Ahilan, T. Imai, A. S. Sefat, M. A. McGuire, B. C. Sales, D. Mandrus, P. Cheng, B. Shen, and H.-H. Wen: Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 037001; F. L. Ning, M. Fu, D. A. Torchetti, T. Imai, A. S. Sefat, P. Cheng, B. Shen, and H.-H. Wen: Phys. Rev. B **89** (2014) 214511.
- 37) S.-H. Baek, D. V. Efremov, J. M. Ok, J. S. Kim, J. van den Brink, and B. Büchner: Nat. Mater. **14** (2015) 210.
- 38) M. C. Rahn, R. A. Ewings, S. J. Sedlmaier, S. J. Clarke, and A. T. Boothroyd: Phys. Rev. B **91** (2015) 180501(R).
- 39) Q. Wang, Y. Shen, B. Pan, Y. Hao, M. Ma, F. Zhou, P. Steffens, K. Schmalzl, T. R. Forrest, M. Abdel-Hafiez, X. Chen, D. A. Chareev, A. N. Vasiliev, P. Bourges, Y. Sidis, H. Cao, and J. Zhao: Nat. Mater. **15** (2016) 159.
- 40) Q. Wang, Y. Shen, B. Pan, X. Zhang, K. Ikeuchi, K. Iida, A. D. Christianson, H. C. Walker, D. T. Adroja, M. Abdel-Hafiez, X. Chen, D. A. Chareev, A. N. Vasiliev, and J. Zhao: Nat. Commun. **7** (2016) 12182.
- 41) S. Shamoto, K. Matsuoka, R. Kajimoto, M. Ishikado, Y. Yamakawa, T. Watashige, S. Kasahara, M. Nakamura, H. Kontani, T. Shibauchi, and Y. Matsuda: arXiv:1511.04267.
- 42) H. Kontani and Y. Yamakawa: Phys. Rev. Lett. **113** (2014) 047001.
- 43) S. Onari, Y. Yamakawa, and H. Kontani: Phys. Rev. Lett. **112** (2014) 187001.
- 44) S. Onari, Y. Yamakawa, and H. Kontani: Phys. Rev. Lett. **116** (2016) 227001.
- 45) P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz: *WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Tech. Univ. Wien, Vienna, 2001).
- 46) N. Marzari and D. Vanderbilt: Phys. Rev. B **56** (1997) 12847.
- 47) K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka, H. Kontani, and H. Aoki: Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 087004.

- 48) H. Eschrig and K. Koepf: Phys. Rev. B **80** (2009) 104503.
- 49) T. Terashima, N. Kikugawa, A. Kiswandhi, E.-S. Choi, J. S. Brooks, S. Kasahara, T. Watashige, H. Ikeda, T. Shibauchi, Y. Matsuda, T. Wolf, A. E. Böhmer, F. Hardy, C. Meingast, H. v. Löhneysen, M.-T. Suzuki, R. Arita, and S. Uji: Phys. Rev. B **90** (2014) 144517.
- 50) A. Audouard, F. Duc, L. Drigo, P. Toulemonde, S. Karlsson, P. Strobel, and A. Sulpice: Europhys. Lett. **109** (2015) 27003.
- 51) T. Miyake, K. Nakamura, R. Arita, and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 044705.
- 52) T. Takimoto: Phys. Rev. B **62** (2000) R14641.
- 53) T. Moriya: *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism*, (Springer-Verlag, 1985).
- 54) H. Kontani: Rep. Prog. Phys. **71** (2008) 026501.
- 55) K. Maki: Prog. Theor. Phys. **40** 193 (1968).
- 56) R. S. Thompson: Phys. Rev. B **1** (1970) 327.
- 57) L.G. Aslamazov, A.I. Larkin: Sov. Phys. Solid State, **10** (1968) 875.
- 58) K. I. Kugel' and D. I. Khomskii: Sov. Phys. Usp. **25** (1982) 231.
- 59) L. Ma, G. F. Chen, D.-X. Yao, J. Zhang, S. Zhang, T.-L. Xia, and W. Yu: Phys. Rev. B **83** (2011) 132501.
- 60) Y. Nakai, S. Kitagawa, T. Iye, K. Ishida, Y. Kamihara, M. Hirano, and H. Hosono: Phys. Rev. B **85** (2012) 134408.
- 61) I. Paul: Phys. Rev. B **90** (2014) 115102.
- 62) M. Khodas and A. Levchenko: Phys. Rev. B **91** (2015) 235119.
- 63) A. Hinojosa, J. Cai, and A. V. Chubukov: Phys. Rev. B **93** (2016) 075106.
- 64) H. Kontani, T. Saito, and S. Onari: Phys. Rev. B **84** (2011) 024528.
- 65) Y. Yamakawa and H. Kontani: Phys. Rev. Lett. **114** (2015) 257001.
- 66) M. Tsuchiizu, Y. Yamakawa, S. Onari, Y. Ohno, and H. Kontani: Phys. Rev. B **91** (2015) 155103.

- 67) M. Tsuchiizu, Y. Yamakawa, and H. Kontani: Phys. Rev. B **93** (2016) 155148.
- 68) R. Tazai, Y. Yamakawa, M. Tsuchiizu, and H. Kontani: Phys. Rev. B **94** (2016) 115155.
- 69) M. Tsuchiizu, Y. Ohno, S. Onari, and H. Kontani: Phys. Rev. Lett. **111** (2013) 057003.
- 70) A. Kawabata, S. C. Lee, T. Moyoshi, Y. Kobayashi, and M. Sato: J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. C. **77** (2008) 103704; M. Sato, Y. Kobayashi, S. C. Lee, H. Takahashi, E. Satomi, and Y. Miura: J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 014710; S. C. Lee, E. Satomi, Y. Kobayashi, and M. Sato: J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 023702.
- 71) Y. Nakajima, T. Taen, Y. Tsuchiya, T. Tamegai, H. Kitamura, and T. Murakami: Phys. Rev. B **82** (2010) 220504.
- 72) J. Li, Y. F. Guo, S. B. Zhang, J. Yuan, Y. Tsujimoto, X. Wang, C. I. Sathish, Y. Sun, S. Yu, W. Yi, K. Yamaura, E. Takayama-Muromachiu, Y. Shirako, M. Akaogi, and H. Kontani: Phys. Rev. B **85** (2012) 214509.
- 73) S. Onari and H. Kontani: Phys. Rev. Lett. **103** (2009) 177001.
- 74) Y. Yamakawa, S. Onari, and H. Kontani: Phys. Rev. B **87** (2013) 195121.
- 75) A. D. Christianson, E. A. Goremychkin, R. Osborn, S. Rosenkranz, M. D. Lumsden, C. D. Malliakas, I. S. Todorov, H. Claus, D. Y. Chung, M. G. Kanatzidis, R. I. Bewley, and T. Guidi: Nature **456** (2008) 930.
- 76) D. S. Inosov, J. T. Park, P. Bourges, D. L. Sun, Y. Sidis, A. Schneidewind, K. Hradil, D. Haug, C. T. Lin, B. Keimer, and V. Hinkov: Nat. Phys. **6** (2010) 178.
- 77) C. H. Lee, K. Kihou, J. T. Park, K. Horigane, K. Fujita, F. Waser, N. Qureshi, Y. Sidis, J. Akimitsu, and M. Braden: Sci. Rep. **6** (2016) 23424.
- 78) T. A. Maier, S. Graser, D. J. Scalapino, and P. J. Hirschfeld: Phys. Rev. B **79** (2009) 224510.
- 79) S. Onari and H. Kontani: Phys. Rev. B **84** (2011) 144518; S. Onari, H. Kontani, and M. Sato: Phys. Rev. B **81** (2010) 060504(R).
- 80) Y. Zhang, J. J. Lee, R. G. Moore, W. Li, M. Yi, M. Hashimoto, D. H. Lu, T. P.

Devereaux, D.-H. Lee, and Z.-X. Shen: arXiv:1512.06322.

- 81) Q. Fan, W. H. Zhang, X. Liu, Y. J. Yan, M. Q. Ren, R. Peng, H. C. Xu, B. P. Xie, J. P. Hu, T. Zhang, and D. L. Feng: Nat. Phys. **11** (2015) 946.
- 82) D.-H. Lee, Chin. Phys. B **24** (2015) 117405.
- 83) M. H. Sharifzadeh Amin and P. C. E. Stamp: Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 3017.
- 84) T. Dahm and L. Tewordt: Phys. Rev. B **52** (1995) 1297.
- 85) J. R. Schrieffer: J. Low. Temp. Phys. **99** (1995) 397.

第 1 図

(a) La1111 系 (母物質:LaFeAsO), Ba122 系 (母物質:BaFe₂As₂) 等に代表される典型的鉄系超伝導体の模式的相図. (b) FeSe の模式的相図. T_{str} , T_{mag} , T_{c} はそれぞれ, 構造相転移温度, 磁気転移温度, 超伝導転移温度である. (c) 電子状態の模式図. T_{str} で正方晶から斜方晶 (a 軸長 $>$ b 軸長) へ転移し, d_{xz} 軌道の占有数が増加する. また, T_{mag} 以下では x 方向に反強磁的, y 方向に強磁的ストライプ状の反強磁性が生じる.

第 2 図

(a) Co-2% ドープ BaFe₂As₂ において, NMR により観測された核スピン緩和率 $1/T_1T$ 及び弾性率 C_s による電子ネマティック感受率 χ_{nematic} の温度依存性. (b) FeSe における $1/T_1T$ 及び χ_{nematic} の温度依存性. データは文献^{28,29,36}より.

第 3 図

(a) 鉄系超伝導体の伝導層である FeAs 層 (As の代わりに Se, Te, P などもある) の結晶構造. 正方格子を作る Fe サイトの周りに, As サイトがほぼ正四面体状に配置している. (b) 3d 軌道の波動関数. 鉄系超伝導体の電気伝導や揺らぎは, Fe の 3d 軌道のうち xz, yz, xy の 3 軌道が主に担う.

第 4 図

(a) LaFeAsO に対し構築した 8 軌道 $d-p$ 強束縛模型のバンド分散と (b) Fermi 面. (c) FeSe の 8 軌道 $d-p$ 強束縛模型のバンド分散と (d) Fermi 面. FeSe の強束縛模型は, ARPES の結果に合わせて各軌道の準位を調整した. 色は軌道成分に対応し, 緑, 赤, 青はそれぞれ Fe の 3d 軌道の xz, yz, xy 軌道に対応する.

第 5 図

(a) 感受率 $\chi^x(q)$ のファインマン図 ($x = c, s$). I^x は 1 次の Coulomb 相互作用による 4 点バーテックス. (b) バーテックス補正を含む既約感受率 $\Phi^x(q)$. $\chi^0(q)$ は裸の感受率. MT 項 X_{MT}^x は揺らぎの 1 次, AL 項 X_{AL}^x は揺らぎの 2 次の項である. (c) 電荷パートの AL 項 $X_{\text{AL}}^c(q)$ における $\chi^s(q)$ の 2 乗項のファインマン図. (d) スピンパートの AL 項 $X_{\text{AL}}^s(q)$. $\chi^s(q)$ と $\chi^c(q)$ の積から成る. (e) 局在 xz - yz 軌道模型における Kugel-Khomskii 型のスピン・軌道結合の模式図.¹⁶⁾ 軌道秩序 $n_{xz} - n_{yz} > 0$ により $J_a^{(1)} \gg J_b^{(1)}$ となり, ストライプ状の反強磁性が実現する.

第 6 図

(a) SC-VC 理論により得られた, LaFeAsO 模型におけるゼロ松原振動数 ($\omega_m = 0$) のスピン感受率 $\chi^{\text{spin}}(\mathbf{q})$ 及び (b) 軌道感受率 $\chi^{\text{orbital}}(\mathbf{q})$. (c) スピン及び軌道感受率の増強因子. 感受率が発散する Weiss 温度 θ_S 及び θ_C は, Curie-Weiss フィット $(T - \theta)^{-1}$ より見積もった. 文献¹⁶⁾ より.

第 7 図

(a) FeSe 模型における $\chi^{\text{spin}}(\mathbf{q})$, 及び (b) $\chi^{\text{orbital}}(\mathbf{q})$. (c) 感受率の増強因子. 本計算では, FeSe の ARPES 測定^{8,11,12)} を参考に, 有効質量 $m^*/m = 12$ (xy 軌道) ~ 4 (他の d 軌道) によるバンドの繰り込みを考慮している. 文献¹⁶⁾ より.

第 8 図

(a) LaFeAsO 模型と FeSe 模型における, RPA により計算したスピン感受率の増強因子. ここで, $T_{\text{str}} = 50$ meV 以下では, 波数依存の無い平均場的な軌道分極 $E_{yz} - E_{xz} = \Delta E_0 \tanh(1.74\sqrt{T_{\text{str}}/T - 1})$ を導入した. (挿入図) 次節で紹介する, T_{str} 以下へへ SC-VC 理論を拡張して計算した, 波数依存した軌道分極 $\Delta E(\mathbf{k})$ によるスピン感受率の増大. 定性的には波数依存の無い軌道分極の結果と同じである.

(b) LaFeAsO 模型における $\chi^s(\mathbf{q})$. 軌道秩序により, $\chi^s(\mathbf{q})$ が $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ で増大している. 文献¹⁶⁾より.

第 9 図

(a) ARPES により測定された, $T = 30$ K の非双晶化 FeSe 単結晶の Fermi 面. 文献¹¹⁾より. (b) FeSe 単結晶 (非双晶)⁹⁻¹¹⁾ 及び, FeSe-35 層薄膜 (双晶)¹⁴⁾ における軌道分極の実験値. T_{str} 以下で ARPES により測定された. 破線は, (a) の実験結果と本理論計算の結果⁴⁴⁾ から期待される軌道分極の波数依存性.

第 10 図

1 ループ近似による C_2 自己エネルギー $\Delta\Sigma$. 軌道分極 ΔE の 1 次で展開すると, 下段の式を得る. 本理論は SC-VC 理論の自然な拡張になっている. 一方, 平均場近似では Hartree 項のみ考慮し, RPA と同等である.

第 11 図

FeSe の軌道秩序状態の計算結果. (a) 軌道分極 $\Delta E_{xz}(\mathbf{k})$ 及び (b) $\Delta E_{yz}(\mathbf{k})$. 緑の実線は ΔE により変形した Fermi 面. (c) k_x 及び k_y 軸上でのバンド分散, 及び (d) 軌道分極 $\Delta E_{xz}(0, k)$, $\Delta E_{yz}(k, 0)$. (e) スピン感受率 $\chi^s(\mathbf{q})$. 軌道秩序により $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ で増強されている. (f) 軌道分極 $n_{xz} - n_{yz}$, 及び (g) Γ , X, Y 点での軌道分極の温度依存性. 文献¹⁶⁾より.

第 12 図

各種鉄系超伝導体の模型に対して, SC-VC 理論により見積もった Weiss 温度の比 θ_S/θ_C . また, $T_{\text{mag}}/T_{\text{str}}$ 及び $\theta_{\text{NMR}}/T_{\text{str}}$ の実験値. Weiss 温度の実験値 θ_{NMR} は, T_{str} 以上での $1/T_1T$ の Curie-Weiss フィットによる.^{36,59,60)} また FeSe の T_{mag} は T_{str} 以下で見積もった Weiss 温度.²⁸⁾ 文献¹⁶⁾より.

第 13 図

(a) U -VC を含むギャップ方程式. Migdal-Eliashberg 近似では, U を裸のクーロン相互作用 $U^{0,x}$ で近似する ($x = s$ or c). (b) U -VC のファインマン図. AL バーテックス補正により $U^c \gg U^{c,0}$ となる.⁶⁸⁾