

鉄系超伝導体における「軌道の物理」の新展開

大成 誠一郎
紺谷 浩

〈名古屋大学工学研究科 464-8603 愛知県名古屋市中千種区不老町 e-mail: onari@nuap.nagoya-u.ac.jp〉

〈名古屋大学理学研究科 464-8602 愛知県名古屋市中千種区不老町 e-mail: kon@slab.phys.nagoya-u.ac.jp〉

鉄系超伝導体の正常状態において、構造相転移や弾性率のソフト化、ネマティック秩序など軌道揺らぎの重要性を示唆する実験が相次いで報告された。これら正常状態の特徴は、超伝導発現機構の解明においても重要であるため注目を集めてきたが、平均場近似の枠内では理解できなかった。最近、平均場近似を超えた多体効果であるバーテックス補正によって軌道揺らぎが出現する機構が発見され、正常状態の電子状態や相図の理解が進んだ。軌道揺らぎにより誘起される超伝導は S_{++} 波であり、スピン揺らぎとの競合により多様なギャップ関数が発現する。本理論と各種実験結果との対応を調べ、超伝導発現機構を議論する。

1. はじめに：鉄系超伝導体の状態相図

2008 年に発見された鉄系超伝導体¹⁾ は超伝導転移温度 (T_c) が最大 56K であり、超伝導とは無縁と考えられてきた鉄の化合物で銅酸化物高温超伝導体に次ぐ高温超伝導体が発見されたことは、物性物理における大事件であった。鉄系超伝導体の典型的な相図とフェルミ面を図 1(a) と (b) に示す。低ドーピング領域で反強スピン秩序が温度 T_N で起こるが、それよりも高い温度 T_S で図 1(c) で示すような正方晶相から斜方晶相への構造相転移 (多くは 2 次転移) が起き、構造相転移に隣接して超伝導状態が発現するという著しい特徴がある。斜方晶相において、図 1(c) に示すような鉄の 3d 電子の軌道占有数の偏極 $n_{xz} \neq n_{yz}$ が角度分解光電子分光 (ARPES) により観測され^{2, 3)}、多体電子状態における軌道自由度の重要性が示唆される。

鉄系超伝導体の発見以降、超伝導状態に関する様々な実験が世界中で進展し、大多数の物質群、特に最適ドーピング近傍において、超伝導ギャップ関数は「フルギャップ S 波」であることが明らかになった。但し $\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$, $\text{SrFe}_2(\text{As,P})_2$ 等の一部の物質において、銅酸化物のような d 波ではないが「偶然ノードの有る S 波」ギャップ関数が実現する。黒木らは鉄系超伝導体の発見から 2ヶ月足らずで第一原理計算から求めた 5 軌道モデルに乱雑位相近似 (RPA) を用いることにより、反強スピン揺らぎに由来する、ホール面 (FS1,2) と電子面 (FS3,4) のギャップ関数が符号反転する S 波 ($S_{\pm}$ 波) 状態を提案した。^{4, 5, 6, 7, 8)} 反強スピン揺らぎによる超伝導発現機構は、銅酸化物高温超伝導体、重い電子系、有機超伝導体等で提案されている機構である。しかしながら鉄系超伝導体では、スピン揺らぎが小さくても T_c が高い物質があるなど、スピン揺らぎと超伝導発現機構との相関は単調ではない。

そもそも RPA では、非磁性構造相転移など図 1(a) の相図が理解できないという深刻な問題がある。銅酸化物などの強相関電子系においては、超伝導発現機構の解明に先立ち、超伝導状態の母体である「正常状態」の相図が理解されるべきである。構造相転移の起源としては、斜方晶相の格子歪みが $\frac{|a-b|}{a+b} \sim 0.3\%$ と非常に小さいため、音響フォノンのヤーン・テラー効果は排除される。さらに最近、 $T^*(> T_S)$ 以下の温度で、斜方晶相の歪みに対応する弾性率 C_{66} のソ

フト化や^{9, 10)}、面内抵抗の異方性や磁気トルクの実験から対称性が C_4 から C_2 に低下した電子ネマティック相^{11, 12, 13)} の発現が見いだされた。これらの事実は、「電子相関による軌道揺らぎや秩序」の発現を強く示唆する。(軌道揺らぎとは、軌道偏極の 2 乗平均が発達した状態である。) しかしながら、構造相転移や C_{66} のソフト化は RPA や局所密度近似に基づく第一原理計算等では説明することができず、未解決な問題であった。

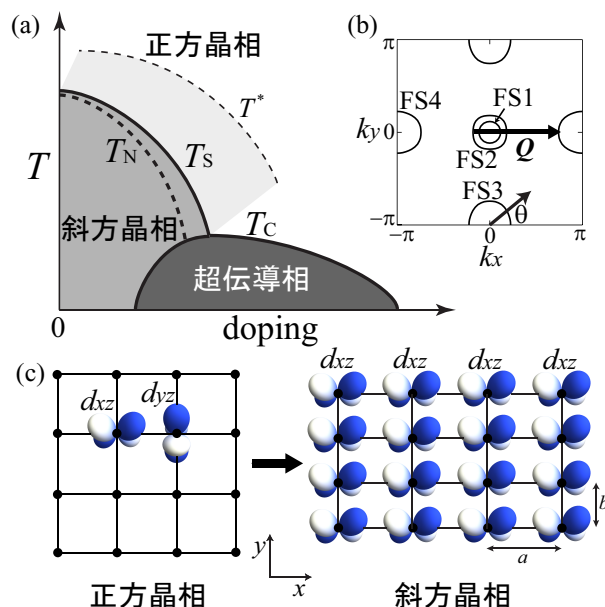


図 1 (a) 鉄系超伝導体における典型的な相図 (縦軸：温度 T 、横軸：ドーピング濃度)。 T_N 、 T_S 、 T^* はそれぞれ反強スピン転移温度、構造相転移温度、電子ネマティック相が現れる温度を表す。(b) LaFeAsO のフェルミ面。 $\mathbf{Q}$ はネスティングベクトル、 θ はフェルミ面上の回転角を表す。(c) 斜方晶相における軌道秩序。但し、 dxz と dyz のエネルギー差は 600K 程度であり^{2, 3)}、 $|n_{xz} - n_{yz}|$ は数%である。

我々は最近、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) により、構造相転移や C_{66} のソフト化に対応する軌道揺らぎが増大することを明らかにし、正常状態の相図を再現する微視的理論を構築した。¹⁴⁾ 構造相転移臨界点近傍では、発達した軌道揺らぎを起源とする超伝導の発現が自然に期待される。軌道揺らぎにより誘起される超伝導ギャップ関数は符号反転のない S 波 (S_{++} 波)^{15, 16)} であり、非磁性不純物効果^{17, 18, 19)} 等の実験結果と整合する。

20)

2. RPA による軌道揺らぎの理論

軌道揺らぎの発現機構について、まず平均場近似と同等である RPA に基づき考察する。多軌道ハバードモデルは軌道内斥力 (U)、軌道間斥力 (U')、交換相互作用 (J)、 $U = U' + 2J$ から成り、遷移金属では $J > 0$ 、 $U > U'$ が成り立つ。 U 、 U' の項は図 2(a) のように、それぞれ $Un_{\alpha\uparrow}n_{\alpha\downarrow}$ 、 $U'n_{\alpha\uparrow}n_{\beta\uparrow}$ と表せる ($\alpha \neq \beta$ は軌道、 $n_{\alpha} = n_{\alpha\uparrow} + n_{\alpha\downarrow}$)、平均場近似によると $U > U'$ ではスピン秩序が現れるが、 $U' > U$ とすると軌道秩序が現れる。瀧本らは多軌道系における RPA を遂行し、 $U' > U$ において軌道秩序が現れ、その近傍で軌道揺らぎを起源とする S 波超伝導が現れることを示した。²¹⁾ この機構を柳らが鉄系超伝導に適用したが、 $U' > U$ という条件は鉄系超伝導体において非現実的であり、導かれる軌道秩序は斜方晶相への構造相転移と相容れない。現実の $U > U'$ においては常にスピン揺らぎが軌道揺らぎよりも支配的になるため、新しい軌道揺らぎの理論が必要となった。

我々は独立に、電子格子相互作用や高次の多体効果に由来する軌道間相互作用を導入し、 $U > U'$ においても軌道揺らぎが発現する機構を見出した。¹⁵⁾ 軌道間相互作用は

$$H' = - \sum_i \sum_{\Gamma} g_{\Gamma} \hat{O}_{\Gamma}^i \cdot \hat{O}_{\Gamma}^i \quad (1)$$

と書ける。ここで $\hat{O}_{\Gamma}^i$ はサイト i における既約表現 $\Gamma (= xz, yz, xy, \dots)$ の電気四重極を表す。 $\hat{O}_{\Gamma}^i$ は位置演算子を用いて $O_{xz} \propto xz$ のように表される 2 階の既約テンソル演算子であり、図 2(b) に示されるような軌道間遷移を引き起こす。結合定数 g_{Γ} の起源として、論文¹⁵⁾ では Fe の振動による電子格子相互作用を考えた。RPA で得られた相図²²⁾ が図 2(c) であり、縦軸が $g = g_{\Gamma}$ ($\Gamma = xz, yz, xy$)、横軸が U を表す。 $U = U_c$ でスピン秩序が起き、 $g = g_c$ で軌道秩序が起きる。 $g_c \lesssim U_c/6$ であり、十分小さな g により軌道秩序が発現する現実的な機構である。また、軌道秩序近傍で S_{++} 波が現れ、反強スピン秩序近傍で $S_{\pm}$ 波が現れることが分かった。

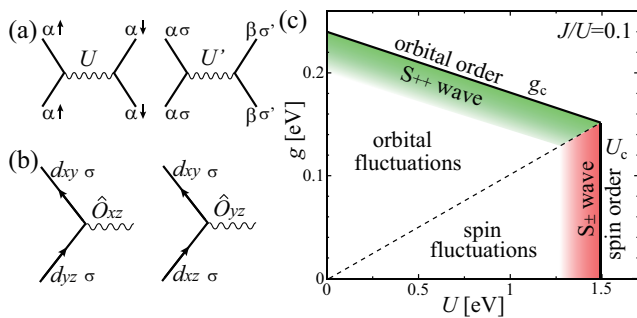


図 2 (a) U 、 U' 項のファインマン図。 $\alpha \neq \beta$ は軌道、 σ 、 σ' はスピンを表す。(b) 四重極演算子による軌道間遷移を表すファインマン図。(c) RPA における g - U 相図 ($J/U = 0.1$)²²⁾。

3. RPA を超えた多体効果の研究

軌道間相互作用の起源として、電子格子相互作用以外の可能性はないだろうか？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。¹⁴⁾ VC は平均場近似 (RPA) 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、強相関系においてしばしば重要な役割を果たす。実際、単一軌道系において VC 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納め²³⁾、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の異常な輸送現象が、カレントに対する VC により統一的に説明される²⁴⁾。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、多軌道系に特有の重要性が明らかになった。

論文¹⁴⁾ で開発した自己無撞着 VC 理論 (SC-VC 理論) では、1 ループの自己エネルギーに対応するワード恒等式を与える 4 点バーテックス $\hat{\Gamma}_{\sigma\sigma'}^I = \delta \hat{\Sigma}_{\sigma} / \delta \hat{G}_{\sigma'}$ を用い、既約感受率の VC

$$\hat{X}^{\sigma, \sigma'}(q) = \sum_{k, k'} \hat{G}(k+q) \hat{G}(k) \hat{\Gamma}_{\sigma\sigma'}^I(k, k', q) \hat{G}(k'+q) \hat{G}(k') \quad (2)$$

を計算する。但し相互作用の一次の項は RPA と重複するため省く。 $\hat{G}(k)$ は電子のグリーン関数である。行列表示のスピン (軌道) 感受率は $\hat{X}^{s(c)} = \hat{X}^{\uparrow, \uparrow} - (+) \hat{X}^{\uparrow, \downarrow}$ を用いて

$$\hat{\chi}^{s(c)}(q) = \frac{\hat{\chi}^0(q) + \hat{X}^{s(c)}(q)}{1 - \hat{I}^{s(c)}(\hat{\chi}^0(q) + \hat{X}^{s(c)}(q))} \quad (3)$$

と与えられる。ここで、 $\hat{I}^{s(c)}$ はスピン (軌道) に対する裸のクーロン相互作用の行列表示であり¹⁵⁾、RPA は $\hat{X}^{s(c)} = 0$ に対応する。 $\hat{X}^{s(c)}$ が波数 q で発達するとき、 $\hat{\chi}^{s(c)}(q)$ が RPA を超えて増大することがわかる。SC-VC 法では、式 (2) と式 (3) を自己無撞着に解くことにより $\hat{\chi}^{c, s}$ と $\hat{X}^{c, s}$ を得る。ただし今の系では $\hat{X}^s \ll \hat{X}^c$ であるため、以下では $\hat{X}^c$ のみ考える。

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 Aslamazov-Larkin (AL) 項と呼ばれる揺らぎの 2 次の VC が、軌道揺らぎを著しく増大することが見出された¹⁴⁾。(但し電荷揺らぎ $\sum_{\alpha, \beta} \chi_{\alpha\alpha, \beta\beta}^c(q)$ は抑制される。) 軌道感受率の AL 項は

$$\hat{X}_{AL}^c(q) \approx U^4 \sum_k \hat{\Lambda}^2 [3\hat{\chi}^s(q+k)\hat{\chi}^s(k) + \hat{\chi}^c(q+k)\hat{\chi}^c(k)] \quad (4)$$

で与えられる。第一項のダイアグラムを図 3(a) に示す。ここで $\hat{\Lambda}$ は 3 点バーテックスである。

AL 項により軌道揺らぎが増大する理由を図 3(b) で説明する。反強スピン揺らぎ $\hat{\chi}^s(k)$ は $k = Q$ (ネスティングベクトル

ル)で発達するため、式(4)の第一項から $\sum_k \hat{\chi}^s(q+k)\hat{\chi}^s(k)$ は $\hat{X}_{\text{AL}}^c(\mathbf{q})$ の強的成分 ($\mathbf{q} = \mathbf{0}$) の増大をもたらす。 d 次元系では $\hat{X}_{\text{AL}}^c(\mathbf{q} = \mathbf{0}) \propto \{\hat{\chi}^s(\mathbf{Q})\}^{2-d/2}$ のようにスピン揺らぎと同時に AL 項が増大し、 $\hat{\chi}^c(\mathbf{0})$ 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 3(a) 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との干渉 (スピン・軌道結合) を与える。さらに式 (4) の第二項により、異なる既約表現の軌道揺らぎも誘発されて発達する¹⁴⁾。このように AL 項による平均場近似を超えた効果が複数の軌道揺らぎをもたらす、式 (1) の軌道間相互作用の微視的裏付けを与える。

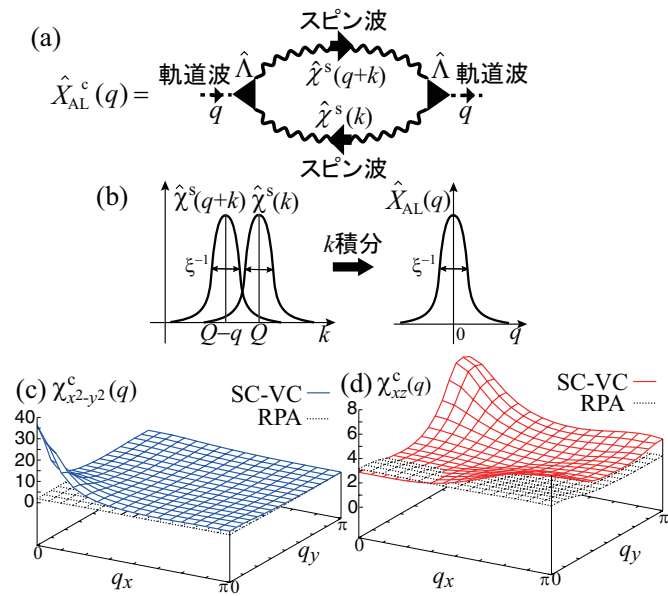


図 3 (a) $\hat{X}_{\text{AL}}^c(\mathbf{q})$ のダイアグラム。軌道波が 2 つのスピン波に分かれ軌道波に戻る仮想過程。(b) $\hat{X}^c(\mathbf{q})$ が $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ で増大する理由の図解。 ξ はスピン相関長。(c) 軌道感受率 $\chi_{x^2-y^2}^c(\mathbf{q})$ の計算結果。実線が SC-VC 法、点線が RPA の結果。(d) 軌道感受率 $\chi_{xz}^c(\mathbf{q})$ の計算結果。実線が SC-VC 法、点線が RPA の結果。($J/U = 0.09$, $T = 0.05\text{eV}$)¹⁴⁾

SC-VC 理論により鉄系超伝導体の 5 軌道模型を解析した結果を紹介する。感受率と VC を自己無撞着に計算した結果、RPA とは異なり、 $J/U \sim 0.1$ の場合でも既約表現 $\Gamma = x^2 - y^2$ と $\Gamma = xz, yz$ の軌道感受率 $\chi_{\Gamma}^c(\mathbf{q})$ が AL 項によって発達することがわかった。図 3(c) に $\chi_{x^2-y^2}^c(\mathbf{q}) \sim \int dt \langle \tau(\mathbf{q}, t) \tau(-\mathbf{q}, 0) \rangle$ の計算結果を示す。ただし $\tau = n_{xz} - n_{yz}$ であり、 $\Gamma = x^2 - y^2$ の対称性をもつ電荷四重極の演算子を与える。この感受率の $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ の発散は一様な軌道偏極 $n_{xz} \neq n_{yz}$ を導くので斜方晶相への構造相転移を与え、その近傍の揺らぎは C_{66} のソフト化を与える。AL 項による強制的軌道揺らぎはスピン揺らぎと同時に発達するため $T_N \lesssim T_S$ が得られ、正常状態の相図が SC-VC 理論によって理解される。さらに、図 3(d) に示されるように反強的な $\chi_{xz}^c(\mathbf{q})$

が、 $\Gamma = x^2 - y^2$ の軌道揺らぎとの干渉効果で増大し、 T^* における異常な電子状態と関係する可能性がある。これらの軌道揺らぎが協力して S_{++} 波状態をもたらすことが予想される。

本理論で $T_N \lesssim T_S$ が得られる理由は、熱および量子揺らぎに対して強いスカラ型秩序変数 $O_{x^2-y^2}$ が、ベクトル型秩序変数 $\mathbf{s}$ より先に長距離秩序を示すと解釈できる。なお、AL 項による軌道揺らぎとスピン揺らぎの結合機構は、局在スピン・軌道モデルである Kugel-Khomskii(KK) モデル²⁵⁾ に含まれるスピン・軌道結合項 $H_{\text{KK}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \tau_i \cdot \tau_j$ 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 では再現できず、VC が必要であった。しかしながら、KK モデルでは²⁶⁾ 図 1(a) の実験相図を再現できないため、局在モデルによる説明は不適當である。

4. 超伝導状態

超伝導ギャップ関数は、バンド対角表示における線形ギャップ方程式

$$\lambda_E \Delta_{\alpha}(k) = -T \sum_{p, \beta} V_{\alpha, \beta}(k-p) |G_{\beta}(p)|^2 \Delta_{\beta}(p) \quad (5)$$

を解くことで求められる。 $\Delta_{\alpha}(k)$ は α バンドのギャップ関数、また λ_E はギャップ方程式の固有値であり、最大固有値のギャップ関数が実現する。スピン揺らぎが優勢の場合、ペアリング相互作用は斥力 ($V(k) \sim U^2 \chi^s(k)$) であり、式 (5) の解はギャップ関数の符号反転を伴う $S_{\pm}$ 波である。一方軌道揺らぎが優勢の場合は引力 ($V(k) \sim -U^2 \chi^c(k)$) であり、符号反転の無い S_{++} 波が得られる。鉄系超伝導体において $S_{\pm}$ 波か S_{++} 波のどちらが実現するかは現在未解決の問題であり、超伝導ギャップの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。

その中で、 T_c に対する非磁性不純物効果は大変重要である。鉄系超伝導体では、単純 S 波超伝導体同様、非磁性不純物による T_c の減少が大変小さいことが、日本の実験グループによっていち早く示された。^{17, 18, 19)} ところが、不純物散乱によりホール面上のクーパー対 ($\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$) から電子面上のクーパー対 ($\mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow$) へと散乱されると、 $\Delta_{\mathbf{k}}$ と $\Delta_{\mathbf{p}}$ の符号が異なる $S_{\pm}$ 波状態の場合は超伝導状態が破壊されて T_c が著しく低下する。²⁰⁾ ゆえに、残留抵抗が大きい「乱れた」鉄系超伝導体では、 S_{++} 波が実現している可能性が高い。

以下で VC を考慮した最近の理論研究について紹介する。最近我々は、SC-VC 法に自己エネルギー補正 $\hat{\Sigma}$ を加えて自己無撞着に計算する SC-VC Σ 法を開発した。この理論では、SC-VC 法より軌道揺らぎが優勢となり、第一原理計算²⁷⁾ により見積もられた値 $J/U = 0.12 - 0.15$ においても軌道揺らぎが支配的になる。²⁸⁾ SC-VC Σ 法では自己エネル

ギー補正により、平均場近似の U_c を大きく超えた現実的な U の値 $\sim 2\text{eV}$ を用いても秩序化しない。この効果により、 U^4 に比例する AL 項が一層重要になったと考えられる。

図 4 に、SC-VC Σ 法に基づきギャップ方程式 (5) を解析して得られたギャップ関数を示す。ただし $J/U = 0.1$ である。非磁性不純物濃度 $n_{\text{imp}} = 0$ の時にノードあり S 波が得られたが、 n_{imp} を導入すると、ノードあり S 波は $S_{\pm}$ 波同様、非磁性不純物により強く抑制されるため、フルギャップの S_{++} 波にクロスオーバーする結果を得た。この場合、 χ^s と χ^c の大きさが拮抗しているため、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(Σ) 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、パラメータに応じて S_{++} 波や $S_{\pm}$ 波、ノードあり S 波が実現し、これらは同じ A_{1g} 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。

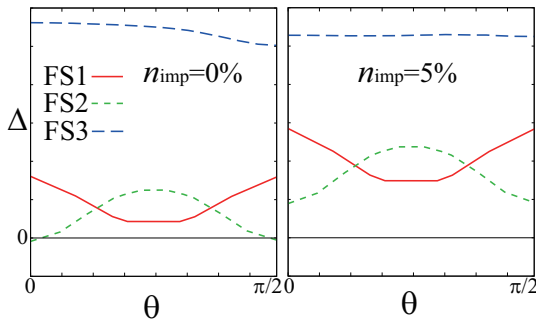


図 4 SC-VC Σ 法によるフェルミ面上 (図 1(b) 参照) のギャップ関数の角度 θ 依存性 $n_{\text{imp}} = 0\%$ (左図)、 $n_{\text{imp}} = 5\%$ (右図) ($J/U = 0.1$, $T = 0.05\text{eV}$, 不純物ポテンシャル $I = 1\text{eV}$)。

5. 実験事実との整合性

SC-VC Σ 理論において、現実的なパラメータで軌道揺らぎから S_{++} 波を得た。しかし、パラメータに応じて軌道揺らぎとスピン揺らぎの大小関係は入れ替わるので、各物質ごとに S_{++} 波か $S_{\pm}$ 波かを実験で判断する必要がある。例えば、乱れが少ない系である LiFeAs において STM/STS で観測されたギャップ内不純物準位は不純物が非磁性であれば $S_{\pm}$ 波を示唆する²⁹⁾。一方 Co ドープされた BaFe_2As_2 では、Co 不純物上でギャップ内不純物準位は観測されず S_{++} 波を示唆する³⁰⁾。また、 S_{++} 波によって、多くの鉄系超伝導体で観測される、超伝導状態の中性子非弾性散乱スペクトルに幅の広いピーク (hump) 構造³¹⁾ を再現できることを明らかにした。³²⁾ 以下で上記以外の重要と考えられる実験について紹介する。

5.1. C_{66} のソフト化

RPA では、 $J/U > 0$ のときスピン揺らぎが軌道揺らぎより圧倒的に大きいため、 C_{66} のソフト化を説明出来ない。我々は、AL 項の理論式に基づき C_{66} を計算し、数少ないフィッティングパラメータで実験結果の温度依存性とドーパ量依存性を統一的にほぼ完全に再現することを明らかにした。(図 5)³³⁾ この結果は、鉄系超伝導体において VC を起源とする軌道揺らぎが実現することの実験的証明と言える。一方で、 C_{66} のソフト化をハイゼンベルグ模型におけるスピンネマティック機構³⁴⁾ で説明しようという試みがあるが、この機構はスピン系の強いフラストレーション ($J_2 \approx J_1/2$) や強い 2 次元性を必要とするなど、実現条件が非常に厳しい。更にスピン・格子結合定数が小さいため広い温度領域に渡る C_{66} のソフト化が再現できない。

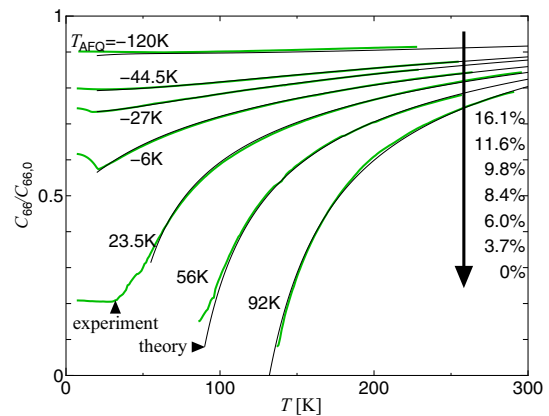


図 5 吉澤らによる C_{66} の実験結果 (太線) および計算結果 (細線)³³⁾。 T_{AFQ} は反強揺らぎのワイス温度を表すフィッティングパラメータ。

5.2. $\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$ におけるギャップ構造

$\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$ などの 122 系では 3 次元性の強い 3 枚のホール面が存在し、 $k_z = \pi$ 平面上の 3 枚のホール面はそれぞれ d_{xy} , $d_{xz} + d_{yz}$, $d_{3z^2-r^2}$ 軌道から構成される。これら 3 枚のホール面のギャップ関数はフルギャップで大きさもほぼ等しい、つまり軌道依存性が小さいことが、レーザー光源を用いた高精度の ARPES により示された。³⁵⁾ 同様の結果は他グループによっても得られている。³⁶⁾

スピン揺らぎは同一軌道内斥力 U とネスティングにより生じるが、電子面上には $d_{3z^2-r^2}$ 軌道が存在しないために $d_{3z^2-r^2}$ 軌道ではスピン揺らぎは発達しない。そのためスピン揺らぎ機構ではホール面の $d_{3z^2-r^2}$ 軌道部分のギャップがほぼ消滅する「水平ラインノード」が予言されるが³⁷⁾、上記の実験結果と整合しない。一方、軌道揺らぎ機構では軌道間散乱によって $d_{3z^2-r^2}$ 軌道部分のギャップ関数もフル

ギャップとなり、実験結果と整合する。つまり ARPES の結果は軌道揺らぎの重要性を強く示唆する。

また、 $\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$ における角度分解熱伝導率の実験により、電子面の側面に 3 次元的なループ状のラインノードが観測された。³⁸⁾ そこで我々は、第一原理計算から得られた $\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$ に対応する 3 次元 10 軌道モデルを構築し、超伝導ギャップ方程式を解析した。その結果、軌道揺らぎとスピン揺らぎが競合する場合に、実験と整合する電子面側面のループ状のラインノードを再現した。³⁹⁾ (なお LaFeAsO に対応する 2 次元 5 軌道モデルでは、図 4 の様にホール面にノードのある S 波が得られる。)

6. 他の多軌道系への応用

本稿で解説した VC による軌道揺らぎ機構は、多軌道系一般で重要となり得る。実際、 Ru 酸化物の単純化された模型である d_{xz} , d_{yz} の 2 軌道モデルを SC-VC 法で解析したところ、図 3 (c) と類似した強軌道感受率の増大を得た⁴⁰⁾。この結果は、 $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$ において磁場誘起磁性臨界点近傍で発現する「非磁性ネマティック相」が、VC による軌道秩序である可能性を示唆する。更に、バイアスのかからない計算手法である繰り込み群の計算を行い、SC-VC 理論と同様の結果が得られた⁴¹⁾。繰り込み群の結果は、近似理論である SC-VC 法の妥当性を保証するものであり、VC による軌道揺らぎの物理が、様々な多軌道系で普遍的に発現することが期待される。

7. おわりに

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) を研究した。構造相転移や弾性率 C_{66} 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、RPA では不可能であり、VC が不可欠であることを説明した。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、 S_{++} 波状態や、ノードあり S 波状態の発現が導かれる。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理解が提示される。本研究が、多軌道強相関電子系における軌道の物理の新展開の契機となることを期待したい。

参考文献

- 1) Y. Kamihara *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **130** (2008) 3296.
- 2) T. Shimojima *et al.*, Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 057002.
- 3) M. Yi *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. **108** (2011) 6878.
- 4) K. Kuroki *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 087004.
- 5) 黒木和彦、有田亮太郎、青木秀夫, 日本物理学会誌 **64** (2009) 826.
- 6) T. Nomura, J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 034716.
- 7) H. Ikeda *et al.*, Phys. Rev. B **82** (2010) 024508.

- 8) I. I. Mazin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 057003.
- 9) T. Goto *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 073702.
- 10) M. Yoshizawa *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 024604.
- 11) J. -H. Chu *et al.*, Science **329** (2010) 824.
- 12) S. Ishida *et al.*, Phys. Rev. B **84** (2011) 184514.
- 13) S. Kasahara *et al.*, Nature **486** (2012) 382.
- 14) S. Onari and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 137001.
- 15) H. Kontani and S. Onari, Phys. Rev. Lett. **104** (2010) 157001.
- 16) Y. Yanagi *et al.*, Phys. Rev. B **81** (2010) 054518.
- 17) M. Sato *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 014710.
- 18) J. Li *et al.*, Phys. Rev. B **85** (2012) 214509.
- 19) Y. Nakajima *et al.*, Phys. Rev. B **82** (2010) 220504.
- 20) S. Onari and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. **103** (2009) 177001.
- 21) T. Takimoto *et al.*, J. Phys. Condens. Matter **14** (2002) L369.
- 22) T. Saito, S. Onari and H. Kontani, Phys. Rev. B **82** (2010) 144510.
- 23) T. Moriya, *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism* Springer-Verlag (1985).
- 24) 紺谷 浩, 日本物理学会誌 **58** (2003) 524.
- 25) K. I. Kugel and D. I. Khomskii, Sov. Phys. Usp. **25** (1982) 231.
- 26) F. Kruger *et al.*, Phys. Rev. B **79** (2009) 054504.
- 27) T. Miyake *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 044705.
- 28) S. Onari and H. Kontani, unpublished.
- 29) T. Hanaguri *et al.*, Phys. Rev. B **85** (2012) 214505.
- 30) M. L. Teague *et al.*, Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 087004.
- 31) D. S. Inosov *et al.*, Nature Physics **6** (2010) 178.
- 32) S. Onari, H. Kontani and M. Sato, Phys. Rev. B **81** (2010) 060504; S. Onari and H. Kontani, Phys. Rev. B **84** (2011) 144518.
- 33) H. Kontani *et al.*, Solid State Commun. **152** (2012) 718.
- 34) R. M. Fernandes *et al.*, Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 157003.
- 35) T. Shimojima *et al.*, Science **332** (2011) 564.
- 36) T. Yoshida *et al.*, unpublished
- 37) K. Suzuki *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 013710.
- 38) M. Yamashita *et al.*, Phys. Rev. B **84** (2011) 060507.
- 39) T. Saito *et al.*, unpublished.
- 40) Y. Ohno *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 013707.
- 41) M. Tsuchiizu *et al.*, arXiv:1209.3664.

(2013 年 1 月 20 日原稿受付)

Recent development of novel orbital physics in iron-based superconductors

Seiichiro Onari and Hiroshi Kontani

abstract: In the iron-based superconductors, strong orbital fluctuations are expected to be realized by experimental results such as structure transition, softening of elastic modulus and nematic order. These phenomena in the normal state, which cannot be described in the framework of the mean-field approximation, are important in understanding the mechanism of superconductivity. Recently, we have found that strong orbital fluctuations are caused by vertex corrections, which are many-body effects beyond the mean-field approximation. By the present theory, a comprehensive understanding of the electron state and the phase diagram has been achieved. The orbital fluctuations favor the S_{++} -wave superconducting state, and a variety of gap function can be reproduced by the competition between orbital and spin fluctuations.