

論文内容の要旨

論文題目 相関のあるヤーン・テラー結合系における超伝導

(Superconductivity in Correlated Jahn-Teller Coupled Systems)

氏名 堀 知新

新奇な超伝導体の探求とその超伝導機構の解明は、物性物理学における重要なテーマの一つである。1986年の銅酸化物高温超伝導体の発見以降、新たな高温超伝導体の探索は現在に至るまで益々活発に続けられており、2008年には鉄砒素化物において高温超伝導が観測された。この発見が引き金となって、近年は多軌道系を舞台とする超伝導が大きな注目を集めており、理論的にも実験的にも研究が爆発的に進行している。一般に、多軌道系には、それ固有の複雑さのゆえに様々な超伝導状態の発現する可能性が秘められている。そのような多様性が、鉄砒素化物のような高い転移温度 ($T_c \approx 20 \sim 50$ K) を可能にするのみならず、興味深い新現象をもたらしてくれるものと期待されている。

新規超伝導体が発見されたとき、その機構の理論的解明のためにまず問題にすべきことは、ギャップ関数がどのような対称性を有するのかということである。一般に、従来型 s 波ならば電子格子相互作用が、それ以外の対称性の非従来型ならば電子間相互作用が、それぞれ、超伝導を発現させるのに主要な役割を果たしていると考えられている。しかし、双方の働く現実の系において、それらの複合効果の結果としてどのような超伝導が発現するのかという問題は決して自明ではない。最も素朴には、二つの相互作用は打ち消し合い、その結果生き残ったより大きな相互作用に対応する超伝導が発現すると思われる。これに対し、物理的により興味深いシナリオは、両者の協力効果によって超伝導が誘起されるというものである。本論文のテーマは、このシナリオの可能性を多軌道系において理論的に吟味し、追求することである。

多軌道系では、電子間相互作用は物理的なプロセスの観点から四つに分類される。まず考えられ

るのは、同種軌道電子間の直接積分に由来する斥力 U と異種軌道電子間の直接積分に由来する斥力 U' の二つで、あとの二つは異種軌道電子間の交換積分に由来する相互作用 J と J' である。ここで、 J は電子のスピンを揃える働きがあり、フント則結合と呼ばれる。また、 J' は同種軌道にいる二つの電子を両方とも他の同種軌道に散乱する働きがあるので、ペアホッピングと呼ばれる。一方、多軌道系のフォノンには電子の電荷自由度のみならず軌道自由度にも結合するようになる。注目している電子軌道の組が縮退していれば、それらの電子の軌道間散乱は格子の変位の一次に比例して必ず生じる。この散乱項はヤーン・テラー相互作用と呼ばれる。

電子間相互作用とヤーン・テラー相互作用の複合効果が超伝導に与える影響についての理論的研究は、アルカリ金属をドーブしたフラーレンにおける超伝導の発見が端緒となって進展した。また、近年は鉄砒素化合物においてもその影響が研究されている。それらの研究では主に従来型の s 波超伝導に焦点が当てられていたため、両相互作用の複合効果は非従来型超伝導と従来型超伝導の競合という図式で捉えられる。しかし、多軌道系では電子の軌道自由度のために様々な対称性をもった超伝導状態が可能であり、それらの状態を系統的に分類し、相互作用が協力し合う可能性を探索することは非常に興味深く重要な問題である。

本論文では、電子間相互作用とヤーン・テラー相互作用の複合効果がどのような超伝導状態を誘起しうるのかについて、二次元正方格子上で定義された二軌道系に基づいて理論的に考察した。二軌道系は最も簡単な多軌道系であるが、その理解がより複雑な多軌道系の研究に対して確かな土台を与えるもので、多軌道系の本質を含んだ非常に基本的な系である。

まず、軌道対称性が高く、フェルミ面が軌道（擬スピン）に関して二重縮退している $E \otimes e$ ヤーン・テラー結合系を考察した。超伝導状態の秩序変数であるギャップ関数には、波数依存性、スピン依存性、擬スピン依存性がある。最初の波数依存性は、二次元正方格子では点群 C_{4v} の既約表現 Γ ($= A_1, A_2, B_1, B_2, E$) で指定される。また、スピン状態は合成スピン S の大きさで、擬スピン状態は合成擬スピン L とその y 成分の大きさ L_y で指定される。パウリの排他律による制約を満たす Γ, S, L, L_y の組合せを考えると、超伝導状態は 15 種類に分類される（スピン三重項の縮退等は一つとして数える）。それらすべての状態に対して、乱雑位相近似（Random Phase Approximation, RPA）を用いて線形化されたエリアシュベルグ方程式を解いた。その結果、フォノンによって軌道ゆらぎが増大されると、以下に示す多軌道系特有の超伝導状態が発現しうることを見出した。

電子間相互作用 U と電子格子相互作用 g をパラメータとして上述の結果をまとめた相図を図 1 に示す。この相図において、RPA で求まる軌道秩序相と無秩序相の境界、および磁気秩序相と無秩序相の境界が、それぞれ、 L_I と L_{II} であらわされている。従って、 L_I 近傍では主にフォノンによって軌道ゆらぎが、 L_{II} 近傍では U と J によってスピンゆらぎが増大されている。ここで注目したいのは、 L_I 近傍の $(B_1; 1, 0, 0)$ でラベルされた状態と、 $(E; 0, 0, 0)$ でラベルされた状態である。前者はスピン三重項かつ擬スピナー重項のために波数について偶パリティの状態、後者はスピナー重項かつ擬スピナー重項のために波数について奇パリティの状態で、これらが上で述べた多軌道系に特有の超伝導状態に対応している。特に $(E; 0, 0, 0)$ 相は軌道ゆらぎとスピンゆらぎの双方を斥力として利用することで発現している。

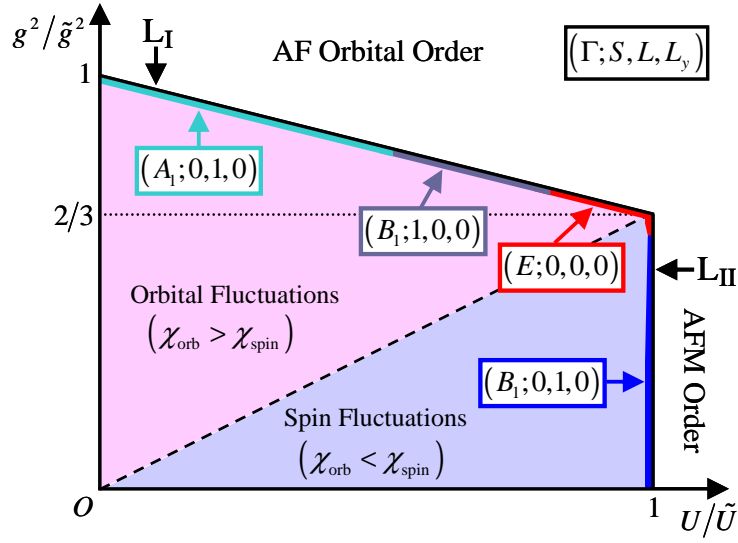


図1 擬スピン対称性のある場合の、相関のある $E \otimes e$ ヤーン・テラー結合系の相図．横軸に電子間相互作用 U を、縦軸に電子格子相互作用 g をとっている．系はハーフフィリングである．図中の AF Orbital Order は反強軌道秩序，AFM Order は反強磁性秩序をあらわす．規格化定数 \tilde{U} と \tilde{g} は、それぞれ、帯磁率が発散するときの U 、 $U = 0$ で軌道感受率が発散するときの g で定義されている．また、 $U = U' + J + J'$ 、 $J = J'$ の関係を用い、 $J/U = 1/8$ と固定されている．

この $(E; 0, 0, 0)$ 相は、ギャップ関数の波数依存性からみれば p 波超伝導の一種であり、一般には、 p_x (p_y)、 $p_x \pm p_y$ 、 $p_x \pm ip_y$ の三種類が可能である．線形化したエリアシュベルグ方程式を解くだけでは、これらのどれが発現するか判別出来ない．それらの候補を絞り込むために、相転移のランダウ理論を $(E; 0, 0, 0)$ 相に適用した．その結果、スピナー重項かつ擬スピナー重項の超伝導は、弱結合極限では $p_x \pm ip_y$ 、すなわちカイラル p 波超伝導として発現することを見出した．

次に、擬スピン対称性のない、より一般的な二軌道系を考察した．ヤーン・テラー結合は $E \otimes (b_1 + b_2)$ 型とした．擬スピン対称性は、同種軌道間ホッピングの異方性や異種軌道間ホッピングによって破られる．これらのホッピング項によって、フェルミ面の軌道縮退が解けると同時に、異なる擬スピンの分類されていた超伝導状態が混ざり合う．さらに、軌道ゆらぎが異方的になり、軌道秩序近傍ではイジング的になる．まず、ゴルフ方程式を解析することで、最初の二つの効果によって擬スピナー重項成分が抑制されることを示した．さらに、軌道ゆらぎがイジング的になると、利用できる有効相互作用の大きさの観点からも、他の状態に対する擬スピナー重項の優位性が失われることを指摘した．これらを総合すると、スピナー重項擬スピナー重項 p 波の発現領域は狭まることが結論される．実際に擬スピン対称性を破るホッピングの大きさが T_c のオーダーで導入されると、その発現は急激に抑制されることを数値計算によって示した．最後に、電子格子相互作用と電子間相互作用によって、それぞれ、電荷軌道チャネルのゆらぎとスピン軌道チャネルのゆらぎが同程度に増強されている領域で、 $(E; 0, 0, 0)$ 相に換わってどのような超伝導状態が発現するかを考察した．相互作用パラメータ g や U を変化させたときにどの感受率が最も発散的であ

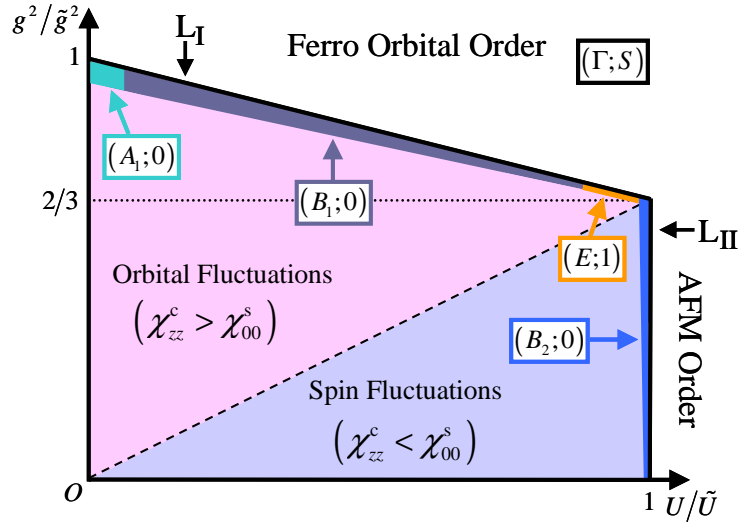


図 2 擬スピン対称性のない場合の、相関のあるヤーン・テラー結合系の相図の一例．ホッピングパラメータは鉄砒素化物の二軌道模型に合わせてある．簡単のため、ヤーン・テラー結合のパラメータは $g_1 = g$, $g_2 = 0$ としてあるが、 $g_1 > g_2$ である限り、相図は定性的に変化しない．フィリングは $n = 2.02$ で、若干ドーピングされている ($n = 2$ がハーフフィリングである)．図中の Ferro Orbital Order は強軌道秩序、AFM Order は反強磁性秩序をあらわす． $\chi_{zz}^c(q, 0)$ $\chi_{00}^s(q, 0)$ のピークは、それぞれ、 $q = (0, 0)$ および $q = (\pi, 0)$ $[(0, \pi)]$ にある．規格化定数 \tilde{U} および \tilde{g} の定義と J/U の値は、図 1 と同様である．

るかは、一般にはフェルミ面の形状に大きく依存している．特に電荷軌道感受率の中で一方向の軌道ゆらぎが発散的になる場合には、それがスピンゆらぎと協力的に働いてスピンー重項超伝導状態を安定化しうることを指摘した．

擬スピン対称性のない系の相図の一例を図 2 に示す．電荷軌道感受率とスピン軌道感受率はそれぞれ 10 種類あるが、この系では、 g の増加に対しては軌道空間の z 方向のゆらぎが最も発散的になり、 U の増加に対しては軌道と交差しない通常のスピンゆらぎが最も発散的になっている．軌道秩序相と無秩序相の境界 L_I に沿って存在する $(A_1; 0)$ 相と $(B_1; 0)$ 相は、軌道ゆらぎを引力として利用して発現するスピンー重項超伝導状態で、 U の増加によって抑制される． $(E; 1)$ 相はスピン三重項 p 波で、軌道ゆらぎとスピンゆらぎをともに引力として利用している．磁気秩序相と無秩序相との境界 L_{II} に沿って存在している $(B_2; 0)$ 相は、軌道ゆらぎとスピンゆらぎをともに斥力として利用したスピンー重項超伝導状態で、 L_{II} に沿って L_I に接するまで続いている．この相が、擬スピン対称性のないより現実的な多軌道系において、スピンー重項超伝導状態に対して電子格子相互作用と電子間相互作用が協力的に作用しうる例となっている．

本論文では、現実に確認されているバルクの超伝導状態がそうであることを鑑みて、振動数について偶の超伝導状態が研究対象となっている．しかしながら、予備的計算において軌道秩序境界近傍で奇振動数超伝導相の存在を示唆する結果を得たので、その結果を簡潔に付録にまとめた．この奇振動数超伝導相が自己エネルギー補正等の RPA を超えた効果を考慮した際にも安定に存在しうるかどうかは、残された課題である．