

令和 3 年 5 月 27 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K05528

研究課題名(和文) ワニ工局在軌道を用いたVMCの開発と乱れを伴う強相関超伝導への応用

研究課題名(英文) Development of VMC with the Wannier localized orbitals and its application to strongly correlated superconductivity in disordered systems

研究代表者

土浦 宏紀 (TSUCHIURA, Hiroki)

東北大学・工学研究科・准教授

研究者番号：30374961

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：銅酸化物超伝導に残された課題として、(i) T'型構造を持つ超伝導体におけるノンドープ超伝導転移の可能性と、(ii) T型構造を持つ系の低キャリア密度領域で見られる擬ギャップ状態の起源解明の二つが挙げられる。(i)については、CuO₂面における酸素の自由度を取り入れた2バンド有効模型を用いて、揺らぎ交換近似の範囲で超伝導転移の可能性を調べたところ、実験で報告されているような超伝導転移が可能であることを見出した。(ii)については、現実的なバンド構造において交替フラックス状態と呼ばれる状態を考慮すると、実験で見られるフェルミアークや電荷密度波状態が満足すべき水準で記述できることが明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

銅酸化物超伝導体は、通常の金属超伝導体と比較して高い転移温度を持つため、幅広い分野における実用化が強く期待される材料である。しかし、銅酸化物超伝導体のうち試料の制御が比較的容易な物質群は転移温度が約100K以下と比較的低く、実用化のためには、あと5-10K程度の転移温度向上が必要とされている。本研究において擬ギャップ状態の起源を理論的に解析したところ、擬ギャップ状態は超伝導を抑制する働きを持ちうるということが判明した。これにより、擬ギャップ状態を選択的に抑制する手段を探索することで転移温度向上を目指すという、性能向上指針を提出することができた。

研究成果の概要(英文)： There are two remaining issues in cuprate superconductivity: (i) the possibility of non-doped superconducting transition in T'-type cuprates, and (ii) the origin of the pseudogap state observed in the low carrier density region of T-type ones. For (i), we have investigated the possibility of a superconducting transition within the fluctuation exchange approximation using a two-band effective model that explicitly incorporates the oxygen 2p orbital degrees of freedom in the CuO₂ plane, and found that the superconducting transition is possible as reported in experiments. As for (ii), it was found that the experimental findings such as the Fermi arc and charge density wave states can be described satisfactorily by considering the staggered flux state in the realistic band structure.

研究分野：物性理論

キーワード：銅酸化物超伝導 T'型構造 擬ギャップ状態 電荷密度波

1. 研究開始当初の背景

銅酸化物超伝導体の発見以来 30 年以上が経過し、様々な知見が蓄積されてきた。しかしながら、T 型構造を持つ物質群の低キャリア密度領域において見られる、擬ギャップ状態と呼ばれる特異な状態に関しては、フェルミアークや電荷密度波といった新たな観測結果の発見が相次ぐ一方で、その物理的起源に関する理論的な理解は不十分なままであった。

また、T 型とは少し異なる T'型構造を持つ物質群に関しては、擬ギャップ状態がほぼ観測されないこともあり、その物性に関する十分な理解が得られたと考えられてきた。しかしながら、これらの物質群において、試料作成時に過剰に混入した酸素を十分な還元処理により除去することで、従来は反強磁性相と考えられていた低電子キャリア密度領域においても超伝導転移が見られるという実験結果が相次いで報告された。これは、少なくとも一部の T'型銅酸化物超伝導体においては、電荷移動ギャップがほぼ消失していることを示唆しており、銅酸化物超伝導体の電子状態に対する統一的描像に矛盾する結果であった。

2. 研究の目的

上記の背景のもと、本研究においては、(1) T 型構造を持つ物質群における擬ギャップ状態で見られる実験事実を統一的に説明できる理論の確立と、(2) T'型構造を持つ物質群の低キャリア密度領域および非キャリアドープ状態における超伝導転移の可能性に関する理論的解析を行い、銅酸化物超伝導体という物質群に関する包括的な理解を確立することを目的とした。

3. 研究の方法

(1) T 型構造の物質群における擬ギャップ状態：

擬ギャップ状態の起源に関しては、これまでに様々な理論的解釈が提案されてきたが、それらは擬ギャップ状態で見られる実験事実を断片的に記述するにとどまっている。最近では、擬ギャップ状態における電荷密度波の発見により、ペア密度波状態と呼ばれる状態が一定の注目を集めている。この状態はフェルミアークや電荷密度波を定性的に記述することは可能であるが、熱力学的に安定な状態ではないという問題を内包している。そこで本研究課題においては、交替フラックス状態と呼ばれる状態に注目した。これは銅酸化物超伝導の発見後すぐに理論的に提案された状態であり、当時精力的に研究されたものの、準粒子スペクトルが非現実的な形状を示す等の問題点が明らかになったため、最近では省みられることは少なくなっていた。しかし、銅酸化物超伝導体における現実的なバンド構造を記述するために長距離のキャリア遷移を理論モデルに導入し、かつ最隣接サイト間におけるクーロン斥力相互作用を取り入れると、準粒子スペクトルに関する問題は解消されることが判明したため、この拡張した理論モデルを Gutzwiller 近似や変分モンテカルロ法を用いて解析した。

(2) T'型構造の低キャリア密度領域における超伝導転移の可能性：

T'構造の物質群を理論的に解析する上で、電荷移動ギャップの大きさが決定的な要因となることが予想される。そのため、CuO₂ 面における酸素の 2p 軌道の自由度を明示的に取り入れた理論モデルを新たに提案し、電荷移動ギャップをモデルパラメータの一つとした。その上で、揺らぎ交換近似を用いて超伝導転移の解析を行った。

4. 研究成果

(1) T 型構造の物質群における擬ギャップ状態：

本研究で用いた理論モデルは、CuO₂ 面の標準的な理論モデルである t-J 模型に長距離のキャリア遷移と最隣接サイト間クーロン斥力相互作用を加えたものである。このモデルを renormalized mean-field theory を用いて解析して得られた相図を図 1 に示す。キャリア密度 (hole-doping rate) δ が 0.2 以下の領域では、幅広い温度範囲にわたって交替フラックス状態 (SF) が現れることが見て取れる。また、より低温の領域では、交替フラックス相と d 波超伝導相 (dSC) の共存相 (SF+dSC) が実現する。この共存状態は $\delta = 0.2$ 付近まで存在し、それ以上のキャリア密度においては純粋な d 波超伝導状態となる。図 1 の相図は、交替フラックス状態を擬ギャップ状態と同定するならば、実験的に確立された銅酸化物超伝導体の相図の特徴を非常によく捉えていることが分かる。

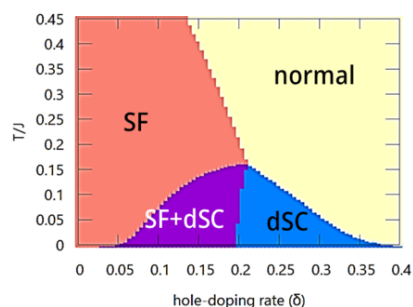


図 1 拡張された t-J 模型を用いて得られた相図. SF は交替フラックス状態, dSC は d 波超伝導, SF+dSC はこれらの共存状態, そして normal は通常の金属状態であることを示す。

次に、交替フラックス状態および超伝導との共存状態における準粒子スペクトルを図2に示す。本研究で用いた理論モデルにおいては、長距離のキャリア遷移を導入したことにより電子正孔対称性が破れている。さらに、最隣接サイト間クーロン斥力により、電子-正孔間引力と電子間引力の対称性も破れている。前者は交替フラックス状態の、そして後者はd波超伝導の起源となる相互作用である。したがって、低キャリア密度領域においては交替フラックス状態を実現することによるエネルギー利得が大きくなり、図3に示すようなフェルミアークが形成される。このフェルミアーク、すなわち残留フェルミ面を用いて、d波超伝導状態が生じたのが図1でSF+dSCと記された共存状態であり、その準粒子スペクトルは図2の赤線のようになる。

このように、拡張されたt-J模型を用いて交替フラックス状態を考察すると、STM/Sで測定される準粒子スペクトル、角度分解光電子分光で観測されるフェルミアークをはじめ、2ギャップ構造や電荷密度波などが極めて満足すべき水準で記述できることが本研究により明らかになった。また、交替フラックス状態はd波超伝導と共存可能ではあるものの、d波超伝導を抑制する働きを持つことも明らかになった。(2) T型構造の低キャリア密度領域における超伝導転移の可能性：

CuO₂面に存在する酸素の2p軌道の自由度を明示的に取り入れた2バンド模型を構築し、電子間相互作用については揺らぎ交換近似を用いて、超伝導転移温度の解析を行った。その結果を図4に示す。ここで、赤線 ($\Delta = 1.30\text{eV}$) はT型構造を持つ銅酸化物超伝導体を想定した計算結果、青線 ($\Delta = 2.60\text{eV}$) はT型構造を想定した際の結果である。T型構造に対する結果は、従来よく知られた、低キャリア密度領域で反強磁性状態が安定化し超伝導転移が消失する様子を示している。それに対して、ここで新たに計算されたT型構造に対する結果は、 $\delta < 0.1$ の低電子キャリア密度領域のみならず、T型構造が保たれていることを仮定してホールキャリアを導入した $\delta < 0$ の領域においても、超伝導転移が見られることを示している。また、この結果と同様の実験結果が後に報告されている [1]。

図4と同様の解析をさらに広い Δ の範囲について行い、超伝導転移及び反強磁性転移の有無を調べた結果を図5に示す。これによると、電荷移動ギャップ Δ が $0.9 < \Delta < 1.3$ の範囲では、キャリアドープなしでも超伝導転移が生じることが見て取れる。

(3) まとめ：

本研究で得られた成果により、(1)で調べたT型物質群における擬ギャップ状態は、交替フラックス状態である可能性が極めて高いことが判明した。この理論的結果を確認するための実験的研究の提案が次の課題となる。また、交替フラックス状態を選択的に抑制するような摂動を探索することにより、超伝導転移温度を向上させることも可能になると期待される。一方、(2)のT型物質群の低キャリア密度領域における超伝導転移に関しては、我々の結果とよく一致する実験結果[1]が報告されたこともあり、少なくとも一部の物質においては実現しているものと考えられる。したがって、銅酸化物超伝導体の電子状態に関して従来信じられてきた「ドープされたモット絶縁体」という描像は、T型構造を持つ物質群には必ずしも当てはまらなないと結論できる。これにより、銅酸化物超伝導体に関する包括的な理解を再確立する必要性が認識され、新たな研究の潮流が創出されるものと期待される。

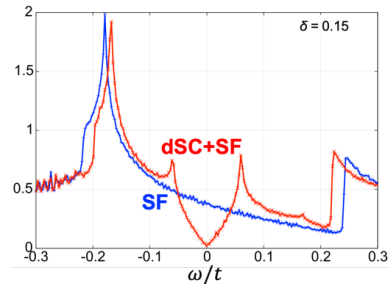


図2 交替フラックス状態 (SF) および d 波超伝導との共存状態 (dSC+SF) における準粒子スペクトル。

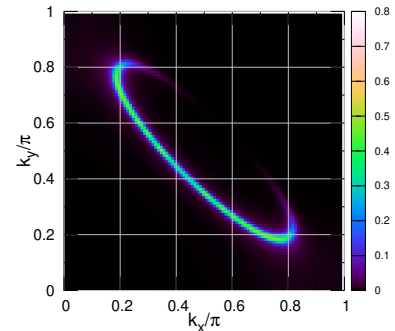


図3 交替フラックス状態において得られたフェルミアーク。

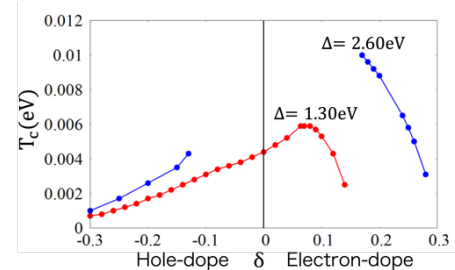


図4 T型構造を持つ銅酸化物超伝導体の理論模型に対して、揺らぎ交換近似を用いて得られた超伝導転移温度のキャリア密度依存性 (赤線)。青線は、T型構造を想定した計算結果を示す。

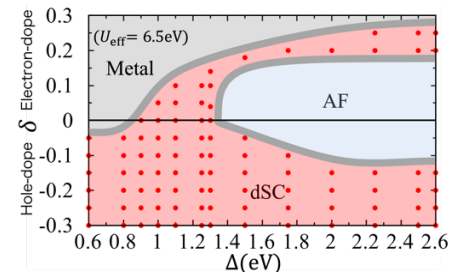


図5 キャリア密度 δ と電荷移動ギャップ Δ に対してプロットした相図。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Fukuda S, Yamazaki K, Tsuchiura H, Ogata M	4. 巻 1293
2. 論文標題 The coexisting state of the staggered flux and d-wave superconducting order in a t-J type model	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012026 ~ 012026
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/1293/1/012026	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Tsuchiura Hiroki, Ogata Masao, Yamazaki Kunito, Asaoka Rui	4. 巻 969
2. 論文標題 Anomalous dispersion relations in the staggered flux state	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012066 ~ 012066
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/969/1/012066	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Yamazaki Kunito, Tsuchiura Hiroki, Yoshioka Takuya, Ogata Masao	4. 巻 969
2. 論文標題 Superconductivity in the underdoped region of the T'-structure cuprates based on an effective two-band model	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012044 ~ 012044
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/969/1/012044	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Yamazaki Kunito, Yoshioka Takuya, Tsuchiura Hiroki, Ogata Masao	4. 巻 871
2. 論文標題 An effective Hamiltonian and its phase diagram for T'-structure cuprates	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012009 ~ 012009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/871/1/012009	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Asaoka R, Tsuchiura H, Sigrist M	4. 巻 871
2. 論文標題 Spin-current induced around half-quantum vortices in chiral p-wave superconducting states	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012025 ~ 012025
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/871/1/012025	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

[学会発表] 計10件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 S. Fukuda, K. Yamazaki, H. Tsuchiura, and M. Ogata
2. 発表標題 The staggered flux state with nematic charge-density order for the pseudo gap phenomena
3. 学会等名 Spectroscopies in Novel Superconductors (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 土浦宏紀, 小形正男, 山崎国人, 福田周平
2. 発表標題 4回対称性が破れた系における交替フラックス状態
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 福田周平, 山崎国人, 土浦宏紀, 小形正男
2. 発表標題 擬ギャップ状態における異常な分散関係に関する理論的研究
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Fukuda, K. Yamazaki, H. Tsuchiura, and M. Ogata
2. 発表標題 The coexisting state of the staggered flux and d-wave superconducting order in a t-J type model
3. 学会等名 The 31st International Symposium on Superconductivity (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 福田周平, 山崎国人, 土浦宏紀, 小形正男
2. 発表標題 d波超伝導及び交替フラックス状態の共存状態における4回対称性の破れ
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山崎国人, 土浦宏紀, 吉岡匠哉, 小形正男
2. 発表標題 T'型銅酸化物超伝導体における超伝導転移と過剰酸素の相関
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 浅岡類, 土浦宏紀, Manfred Sigrist
2. 発表標題 p波超伝導体の超伝導ドメインと磁場応答
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 K. Yamazaki, H. Tsuchiura, T. Yoshioka, and M. Ogata
2. 発表標題 Superconductivity in the underdoped region of the T'-structure cuprates based on an effective two-band model
3. 学会等名 28th International Conference on Low Temperature Physics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 H Tsuchiura, M Ogata, K Yamazaki, and R Asaoka
2. 発表標題 Anomalous dispersion relations in the staggered flux state
3. 学会等名 28th International Conference on Low Temperature Physics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 R. Asaoka, H. Tsuchiura, and M. Sigrist
2. 発表標題 Electronic states around a vortex core in chiral and helical p-wave superconducting states
3. 学会等名 28th International Conference on Low Temperature Physics (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	浅岡 類 (ASAOKA Rui) (60780947)	東北大学・工学研究科・助教 (11301)	削除：2018年3月22日

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
スイス	ETH-Zurich			