

平成 21 年 5 月 27 日現在

研究種目：若手研究 (B)
 研究期間：2006～2008
 課題番号：18740197
 研究課題名 (和文) 非一様な強相関電子系における電子状態、特に輸送現象の理論的研究

研究課題名 (英文) Theoretical study of electronic states and transport phenomena in inhomogeneous strongly correlated electron systems

研究代表者

紺谷 浩 (KONTANI HIROSHI)

名古屋大学・理学研究科・准教授

研究者番号：90272533

研究成果の概要：

反強磁性量子臨界点 (AF-QCP) 近傍の強相関電子系では、わずか 1 % の非磁性不純物が系全体の電子状態を劇的に変化させることが知られている。たとえば銅酸化物高温超伝導体では、1 % の Zn 不純物により巨大な残留抵抗が生じたり、1 μ B に達する大きな局在モーメントが発生する。今回我々は、FLEX 近似を拡張して空間的に非一様な状態に適用できる近似理論 (GVI 理論) を開発して、高温超伝導体における非磁性不純物問題を解析した。その結果、上記の実験事実を第一原理的に再現することに始めて成功した。その後、我々は鉄砒素系高温超伝導体における不純物効果を研究し、超伝導対称性に関する重要な知見を得た。さらに我々は Ag 金属中における Yb 不純物が、Yb の電子相関によって劇的に大きなスピホール効果をもたらすことを理論的に予言した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	1,300,000	0	1,300,000
2007 年度	1,200,000	0	1,200,000
2008 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	300,000	3,800,000

研究分野：物性物理

科研費の分科・細目：物理学・物性 II

キーワード：強相関電子系、輸送現象、超伝導現象

1. 研究開始当初の背景

高温超伝導体や重い電子系などの強相関電子系では、少数の不純物により系全体の電子状態が劇的に変化するなどの大変興味深い現象がしばしば観測される。強相関電子系における不純物効果は、系の多体電子状態の本質を研究する上で非常に重要なプローブであり、盛んに研究されてきた。例えば低ド

ブ領域の高温超伝導体では、CuO₂ 面の Cu サイトを非磁性不純物である Zn で置換すると、
 (1) Zn 周辺の局所帯磁率および反強磁性相関が増大する。
 (2) 一不純物あたりの「残留抵抗値」が、電子密度に対応する「大きなフェルミ面」を持つフェルミ液体状態を仮定した際の s 波散乱体の最大抵抗値 (ユニタリー極限值) を大幅

に超えて増大する。

(3)フェルミ面上の準粒子の緩和時間 τ_k の異方性 (hot-spot/cold-spot の構造) が、不純物ドーピングをしても均される事無く保たれることが、ARPES やホール係数の実験から導かれる。

などの現象が広く知られている。このうち(1)は t-J 模型に基づく厳密対角化の数値計算で再現されるが、その物理的理解は不十分である。また(2),(3)は 10 年来の未解明の難問であった。

これらの不純物効果はフェルミ液体状態における常識と一見矛盾するため、高温超伝導体の異常な基底状態の本質を反映した現象として、長年著名な研究者たちが理論研究を積み重ねたが、未解決であった。

2. 研究の目的

高温超伝導体では、これまで反強磁性揺らぎに着目したフェルミ液体理論に基づく解析が精力的に行われて、slightly under-doped ($\delta \sim 10\%$) より高ドーピング領域では一定の成功を収めてきた。特に申請者はカレントバーテックス補正の重要性に着目して、ホール係数など各種輸送現象における異常な振舞い (非フェルミ液体的挙動) が、フェルミ液体理論に基づき理解できることを示してきた。

そこで本研究では、不純物問題における各種多体効果を「従来の標準理論を越えてより正確に」解析して、上述の実験事実(1)-(3)がフェルミ液体理論の範疇で理解可能であるか否か、詳細に研究する計画をたてた。

また異常な不純物効果は銅酸化物超伝導体のみで発現するわけではなく、重い電子系や有機物超伝導体、さらに 2008 年に東工大の細野たちによって発見された鉄砒素系高温超伝導体など、多くの強相関電子系で共通に発現する。本研究ではこれらの強相関電子系における不純物効果を幅広く研究し、多体電子状態や超伝導発現機構に関する重要な知見を得ることを目的とした。

3. 研究の方法

申請者は FLEX 理論に基づき不純物周辺の自己エネルギーの空間依存性 (以下で非局所効果と呼ぶ) を自己無撞着に求める手法を開発した。動的帯磁率に対する「バーテックス補正」の非局所効果を適切に考慮することで、不純物近傍における (i)局所帯磁率の増強や、(ii)準粒子寿命の低下が期待通り再現された。

まず申請者は、各種輸送現象における「ユニ

タリー極限の一不純物の及ぼす効果」を網羅的に研究する手法を開発した。自己エネルギーの空間依存性より直ちに、多体電子系における不純物による T-matrix が計算できる。不純物の位置平均をとることで、不純物のもたらす準粒子緩和率 γ_{imp} が求まる。不純物が存在しない場合の電子相関による緩和率を $\gamma_{host} [=Im \Sigma]$ と記すと、準粒子の全減衰率は n_{imp} を不純物濃度として $\gamma_{tot} = \gamma_{imp} \cdot n_{imp} + \gamma_{host}$ で与えられる。ホールドーピング系高温超伝導体に対する γ_{imp} および電気抵抗の計算結果を下図に示す。反強磁性量子臨界点 (AF-QCP) 近傍の系では、従来の素朴な常識に反して次のような非自明な不純物効果が発現することがわかった：

(A) γ_{imp} は反強磁性揺らぎの増大に従い、s 波散乱のユニタリー極限值 $\gamma_{imp}^0 [=1/ImG]$ を大幅に超えて増加する。故に一不純物あたりの残留抵抗値もユニタリー極限值を超えて増大する。

(B) γ_{imp} が顕著な k 依存性を示すため、全緩和率 γ_{tot} は $(\pi, 0) = \text{hot-spot}$ 、 $(\pi/2, \pi/2) = \text{cold-spot}$ でそれぞれ極大、極小値をとり、不純物ドーピングをしても γ_{host} の k 依存性が保たれる。

(A),(B)はそれぞれ研究目的で挙げた実験事実(2),(3)を良く説明する。(B)の事実は輸送現象一般を理解する上で大変重要である。加えてホール係数などの磁場中輸送現象では、カレントバーテックス補正が重要であることは研究目的で述べた。そこで本研究では、上記で求めた T-matrix を求める手法を発展させ、カレントバーテックス補正に対する不純物効果を Ward 恒等式を満たす枠組みで正しく計算して、「不純物が存在する AF-QCP 近傍の電子系」におけるホール係数や磁気抵抗、ネルンスト係数などの理論解析を実行する計画である。研究目的で述べたが、高温超伝導体のホール角における不純物効果—10 年以上前に Anderson や Ong により指摘されて以来、重要な未解明の問題と考えられている—をフェルミ液体の立場から解決できると期待している。更に、YBCO では Zn などの非磁性不純物のドーピングにより RH は上昇するが、緩和時間近似によると不純物により γ の異方性が小さくなると RH は減少すべきなので、フェルミ液体の立場からは長年の問題であった。バーテックス補正における非局所効果まで正しく考慮することで、この実験結果も再現できると考えている。さらに磁気抵抗や熱起電力、ネルンスト係数などを網羅的に解析して、各種輸送係数における不純物効果の包括的理解を目指した。

4. 研究成果

●強相関電子系における光学伝導度およびホール伝導度の研究：

通常金属における交流ホール係数は、 $RH(\omega)$ の虚部は殆ど 0 であり、これはボルツマン近似がよく成り立っていることを意味する。ところが高温超伝導体では $\text{Im}RH(\omega)$ は有限の ω で極めて大きな値をとり、その値は低温かつ低ドープ領域において非常に大きくなる。我々は $RH(\omega)$ を FLEX 近似に基づき、カレントに対するバーテックス補正を ω 依存性までまじめに考慮して解析し、実験で観測される交流ホール係数の異常な振舞いを良く再現することが出来た。バーテックス補正の ω 依存性をまじめに考慮して $RH(\omega)$ を数値計算する手法はこれまで開発されていなかったが、最近我々は信頼性の高い数値計算手法を開発した。その結果、反強磁性近傍の金属では、バーテックス補正により $RH(\omega)$ の異常な ω および温度依存性が良く再現されることが明らかになった。本研究により、高温超伝導体の交流及び直流輸送現象の振舞いが、フェルミ液体の立場からバーテックス補正を考慮することで「統一的に」理解できることが明らかになり、高温超伝導体の正常状態における電子状態の理解が進歩したといえる。

●三角格子 Co 酸化物超伝導体 $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ の研究：

水をインターカレートした超伝導体 $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ における電子状態および超伝導発現機構を研究した。この系のバンド計算では、 Γ 点周りに $a1g$ 軌道の大きなホールのフェルミ面に加えて、 eg' 軌道の 6 つの小さなホールポケットの

存在が予想されているが、ARPES の実験では後者はフェルミ準位の下に沈んで Valence-Band になっている。そこで我々はそれぞれのフェルミ面における Na_xCoO_2 の正常状態を、FLEX 近似を用いて解析した。その結果、実験において観測されている帯磁率や状態密度の弱い擬ギャップ的振る舞いは、ARPES のフェルミ面を仮定した場合に限って再現できることを導き、バンド計算で予言されたフェルミ面は実現していないことを明らかにした。

この物質においては ARPES 実験におけるバンド構造(キंक構造)等から強い電子-格子相互作用が示唆される。そこで我々は CoO_2 層の光学フォノン(シェアモード、ブリージングモード)による s 波超伝導の可能性を考えた。解析の結果、シェアモードフォノンによって $a1g$ 軌道と eg' 軌道の軌道間遷移が起るため、 eg' 軌道がフェルミレベルよりも下に沈んでいても、そのバンド端のエネルギーがフォノンのエネルギー(およそ 70 meV)よりもフェルミレベルに十分近ければ、

Valence-Band Suhl-Kondo (VB-SK) 機構が働くことがわかった。その結果、見積もられた電子-格子相互作用から十分に高い温度が得られた。同時に ARPES で観測されているバンド構造におけるキंक構造も再現した。

●強相関電子系における不純物効果の理論的研究：

反強磁性量子臨界点 (AF-QCP) 近傍の強相関電子系では、わずか 1% の非磁性不純物が系全体の電子状態を劇的に変化させることが知られている。たとえば高温超伝導体では、1% の Zn 不純物により巨大な残留抵抗が生じたり、Zn の周囲数サイトにわたって反強磁性相関が増大する。また非磁性不純物ひとつあたり、 $1 \mu\text{B}$ に達する大きな局在モーメントが発生し、その大きさは AF-QCP 近傍で発散的に増大する。これらの現象はいずれも通常金属におけるフェルミ液体的挙動から大きく逸脱し、長年未解明の難問であった。今回我々は、FLEX 近似を拡張して空間的に非一様な状態に適用できる近似理論 (GVI 理論) を開発して、高温超伝導体における非磁性不純物問題を解析した。その結果、上記の実験事実を第一原理的に再現することに始めて成功した。我々の研究は高温超伝導体のみならず、重い電子系や有機物超伝導体など、さまざまな QF-QCP 近傍の強相関電子系に適用できると考えられる。

●重い電子系 $\text{CeCoIn}_5, \text{CeRhIn}_5$ における輸送現象の研究：

$\text{CeCoIn}_5, \text{CeRhIn}_5$ は AF-QCP 近傍に位置する重い電子系であり、反強磁性相に隣接して d 波超伝導状態が実現するなど大変興味深い物性が出現するため、現在盛んに研究されている。これらの物質では、AF-QCP 近傍でホール係数が $1/T$ に比例して低温で著しく上昇し、また磁気抵抗が T の 4 乗に比例する「修正コーラ則」が成り立つなど、高温超伝導体と共通した現象が観測されるなど、大変興味深い実験事実が観測される。我々はこの事実を反強磁性揺らぎに由来するカレントバーテックス補正がもたらすと考えて、理論的解析を行った。 $\text{CeCoIn}_5, \text{CeRhIn}_5$ に対応する 3 次元ハバードモデルを FLEX 近似により解析し、3 次元系でもカレントバーテックス補正が (2 次元系以上に) 重要になることを見出した。我々は $\text{CeCoIn}_5, \text{CeRhIn}_5$ におけるホール係数、磁気抵抗、ネルンスト係数の三者三様の著しい非フェルミ液体的挙動を、カレントバーテックス補正を考慮することで「統一的に」理解できることを明らかにした。

●異方的超伝導体における熱伝導度の研究：
高温超伝導体の熱伝導度は、ホールドープ系では T_c 以下で急激な増大 (コヒーレンスビ

ーク)を示し、d波超伝導状態のノード構造に由来すると考えられる。一方電子ドープ系の熱伝導度はコヒーレンスピークを示さないため、d波とは異なる超伝導対称性が実現している可能性があると思われる。本研究では、スピン揺らぎの理論に基づく T_c 以下の熱伝導度の計算を世界で初めて行った。その結果、電子ドープ系でもやはりd波状態が実現しており、ホールドープ系との違いは準粒子寿命の k 依存性によって説明できることが明らかになった。準粒子寿命の k 依存性は hot spot/cold spot 構造と呼ばれ、角度光電子分光によって実験的に観測され、スピン揺らぎの理論で自然に説明できる。ゆえに本研究により、電子ドープ系でもホールドープ系同様に、スピン揺らぎによるd波超伝導状態が実現することが明らかになった。

●高温超伝導体や重い電子系、有機物超伝導体など量子臨界点近傍の金属では、ホール係数が低温で発散的に増大するが、この現象はパーテックス補正(カレントに対する多体効果)であることが知られている。本年度の研究で、弱い不純物によってパーテックス補正が小さくなる結果、ホール係数の発散的増大が不純物によって抑制されることを明らかにした。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計9件)

- ① Y. Senga and H. Kontani, Impurity-induced in-gap state and T_c in sign-reversing s-wave superconductors: analysis of iron oxypnictide superconductors, *New J. Phys.* **11** 035005 (12 pages), (2009)、査読あり
- ② H. Kontani, J. Goryo, and D. S. Hirashima, Intrinsic spin Hall effect in the s-wave superconducting state: Analysis of the Rashba model, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 086602 (4 pages), (2009)、査読あり
- ③ T. Tanaka and H. Kontani, Giant extrinsic spin Hall effect due to rare-earth impurities, *New J. Phys.* **11**, 013023(10 pages), (2009)、査読あり
- ④ H. Kontani, T. Tanaka, D. S. Hirashima, K. Yamada, and J. Inoue, Giant orbital Hall effect

in transition metals: Origin of large spin and anomalous Hall effect, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 016601 (4 pages), (2009)、査読あり

⑤ Y. Senga and H. Kontani, Impurity effects in sign-reversing fully gapped superconductors: Analysis of FeAs superconductors, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 113710 (4 pages) (2009)、査読あり

⑥ K. Yada and H. Kontani, s-wave superconductivity due to Shul-Kondo mechanism in $NaxCoO_2 \cdot yH_2O$: Effect of Coulomb interaction and trigonal distortion, *Phys. Rev. B* **77**, 184521 (15 pages), (2008)、査読あり

⑦ T. Tanaka, H. Kontani, M. Naito, T. Naito, D. S. Hirashima, K. Yamada, and J. Inoue, Intrinsic spin Hall effect and orbital Hall effect in 4d and 5d transition metals. *Phys. Rev. B* **77**, 165117 (16 pages) (2008)、査読あり

⑧ Y. Nakajima, Y. Shishido, H. Nakai, T. Shibauchi, M. Hedo, Y. Uwatoko, T. Matsumoto, R. Settai, Y. Ohnuki, H. Kontani, and Y. Matsuda, Magnetotransport properties governed by antiferromagnetic fluctuations in the heavy fermion superconductor $CeIrIn_5$, *Phys. Rev. B* **77**, 214504 (7 pages), (2008)、査読あり

⑨ K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka, H. Kontani, and H. Aoki, Unconventional pairing originating from the disconnected Fermi surfaces of superconducting $LaFeAsO_{1-x}Fx$. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 087004 (4 pages) (2008).、査読あり

[学会発表] (計11件)

- ① H. Kontani, Theory of anomalous transport phenomena in high- T_c superconductors, 21st International Conference on Superconductivity, Tsukuba, Japan, Oct. 27-29, 2008
- ② H. Kontani, Novel Intrinsic Hall Effect in d, f-Electron Systems, The 23rd Nishinomita-Yukawa Memorial International Workshop, Spin Transport in Condensed Matter, Kyoto, Japan, Oct. 27-

Nov. 28, 2008,

- ③ 紺谷浩、d 軌道強束縛模型に基づく外因性スピンホール効果の理論、日本物理学会 2008 年秋季大会、岩手大学、2008 年 9 月 21 日.
- ④ 千賀裕子、紺谷浩、 $\text{Na}_x\text{CoO}_2\text{yH}_2\text{O}$ における不純物効果の理論的解析、日物理学会 2008 年秋季大会、岩手大学、2008 年 9 月 22 日.
- ⑤ 紺谷浩、御領潤、平島大、超伝導状態における内因性スピンホール効果の理論、日本物理学会 2008 年秋季大会、岩手大学、2008 年 9 月 22 日.
- ⑥ 内藤隆、平島大、紺谷浩、田中拓郎、3d 強磁性金属における異常ホール効果、日本物理学会 2008 年秋季大会、岩手大学、2008 年 9 月 23 日.
- ⑦ 紺谷浩、田中拓郎、平島大、山田耕作、井上順一郎、d 電子系における内因性ホール効果の起源：軌道流の効果、日本物理学会 2008 年秋季大会、岩手大学、2008 年 9 月 23 日.
- ⑧ 田中拓郎、紺谷浩、磁性不純物に起因する外因性スピンホール効果の理論 II、日本物理学会 2008 年春季大会、立教大学、2009 年 3 月 27 日.
- ⑨ 千賀裕子、紺谷浩、鉄砒素系超伝導体の超伝導状態における不純物効果、日本物理学会 2008 年春季大会、立教大学、2009 年 3 月 28 日.
- ⑩ 富澤剛、紺谷浩、非自明な磁気構造に由来する異常ホール効果の理論、日本物理学会 2008 年春季大会、立教大学、2009 年 3 月 29 日.
- ⑪ 紺谷浩、D.H. Drew、電子ドーピング系高温超伝導体における直流／交流ホール効果の理論解析、日本物理学会 2008 年春季大会、立教大学、2009 年 3 月 30 日.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

紺谷 浩 (KONTANI HIROSHI)
名古屋大学理学研究科 S 研究室 准教授
研究者番号：90272533