

令和 3 年 5 月 31 日現在

機関番号：22604

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K03522

研究課題名(和文)局所クーパー対形成による異方的超伝導機構

研究課題名(英文)Anisotropic superconductivity due to local Cooper pairs

研究代表者

服部 一匡(Hattori, Kazumasa)

東京都立大学・理学研究科・准教授

研究者番号：30456199

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,000,000円

研究成果の概要(和文)：磁場中の一次元近藤格子模型について密度行列繰り込み群を用いて基底状態の解析を行い、その超伝導相関について詳細に調べた。その結果、拡張されたクーパー対についての相関がスピンギャップ相の近傍の朝永・ラッティンジャー液体相内で顕著に増大することがわかった。また、BiS2系超伝導体の有効引力模型における局所クーパー対の役割を調べた。四極子自由度の新奇な相互作用についての研究については実験グループとの共同研究を行った。今後超伝導に対する効果についても議論する基礎が固まったと考えている。

研究成果の学術的意義や社会的意義

磁場中の近藤格子模型における超伝導発現の可能性を示した成果は、近年精力的に研究が行われてきた強磁性超伝導体の磁場中の振る舞いについて、微視的な模型とほぼ近似のない手法を用いて初めて明らかにしたものです。ここでいう「微視的な模型」というのは、科学者によって「都合の悪い寄与」などを勝手に無視したりしない、それなりに妥当と思われるモデルを指します。学術的には、微視的な模型で解析し示すことができたことは重要ですが、社会的には税金からの予算を使用して地道に基礎研究をやったということに尽きます。将来的には本研究で明らかになった超伝導機構が間接的に特定の技術等を通して社会に還元されるかもしれません。

研究成果の概要(英文)：We have analyzed one-dimensional Kondo lattice model under transverse magnetic fields by means of the density matrix renormalization group. We have clarified the ground-state phase diagram and calculated the superconducting correlations in detail. The results show that the superconducting correlations are strongly enhanced inside the Tomonaga-Luttinger liquid state near the spin-gapped phase. We also have analyzed the effective attractive-force model for the BiS2-based superconductors, focusing on the local Cooper pairs and novel interactions between quadrupole moments in cubic systems. The results of the latter become the basis for the discussions about superconductivity in cubic quadrupole systems.

研究分野：強相関電子系

キーワード：超伝導 軌道自由度

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

近年、非従来型超伝導研究に新潮流が生じている。21世紀に入り発見された銅酸化物に次ぐ高い転移温度をもつ鉄系高温超伝導体では、鉄の3d電子の軌道自由度が超伝導に重要であると指摘されている。我々はこれまでの研究で、軌道自由度を考慮した「多極子」超伝導の分類を行っており[1]、その中で本研究のキーワードでもある局所クーパー対による異方的超伝導の可能性について言及している。このような状況において、軌道自由度などの物質固有の自由度を考慮した新しい超伝導の発現機構やその性質を解明・整理することは重要な課題である。

2. 研究の目的

本研究では、局所クーパー対により発現する新奇超伝導状態を提案・探索することが目的である。局所クーパー対による異方的超伝導という観点では、我々の先行研究も含めて鉄系高温超伝導体[2]やYPtBi [3]に対して簡単な議論がなされており、その重要性が認識されつつある。しかし、これらの研究では微視的な模型による精密な解析がなされておらず、局所クーパー対による超伝導が実際に発現するかどうかを議論できていない。本研究では、微視的模型を元に局所クーパー対による異方的超伝導の実現可能性を精密数値手法と解析手法を組み合わせ解析し、発現機構とその特性を明らかにすることを目的とする。

3. 研究の方法

- (1) 一次元の異方的近藤格子模型における超伝導状態の解析のため、密度行列くりこみ群(DMRG)を用いた有限サイズの数値計算を行う。はじめにDMRGで得られた各種相関関数を詳細に解析し、基底状態相図を決定する。その後、拡張されたクーパー対の振幅に対する相関関数の計算法を定式化し、相図のどのような領域で超伝導相関が発達するかを調べる。
- (2) 軌道自由度を持つ系において、電子格子相互作用から生じる有効的な引力を考慮したBCS模型を解析する。具体例として、BiS₂超伝導体の模型をについて、軌道間相互作用と軌道内相互作用をパラメータとしてどのようなクーパー対が安定かを調べ、その超伝導ギャップ関数の波数依存性を解析し、BiS₂超伝導体で報告されている波数依存性と比較する。
- (3) 四極子自由度を持つ系において、相互作用の異方性項を整理し、どのような秩序相が安定かを調べる。それらを念頭にクーパー対の間の相互作用にどのような特徴があるかを調べる。四極子秩序が報告されているPr系化合物に対しては実験グループと共同でその性質を明らかにする。

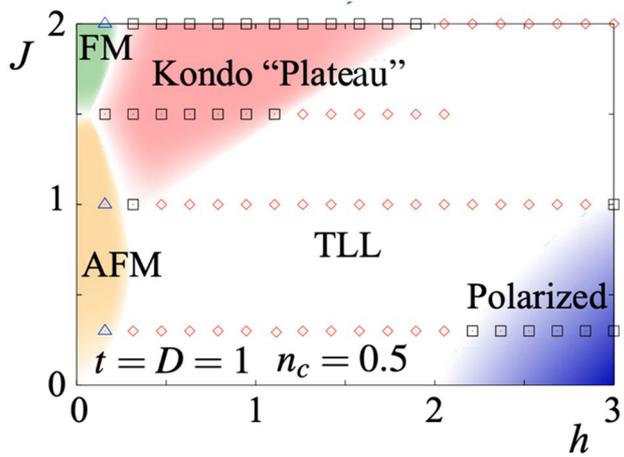
4. 研究成果

- (1) 一次元の異方的近藤格子模型における超伝導状態の解析

S=1 異方的近藤格子模型の横磁場中基底状態

近年注目を集めている強磁性と超伝導状態が共存するU系重い電子系化合物[4]であるURhGeの横磁場 h 中の振る舞いを念頭においた有効模型を調べた。有効模型として、URhGeの結晶構造の1次元鎖に着目し、その一次元近藤格子模型についてDMRGを用いて基底状態の解析を行った。その中で幾つかの興味深い相が、局在スピンと伝導電子の交換相互作用 J として、

h - J 相図内に存在することが明らかになった．低濃度強結合領域に弱磁場で現れる強磁性(FM)状態とその近傍に現れるスピンギャップ状態 (Kondo Plateau 相: KP), 朝永・ラッティンジャー液体 (TLL), および種々のパラメータ領域において, 反強磁性(AFМ)や完全分極相 (Polarized) 等に対応する相が得られた (右図参照)．これらの結果は, 一次元に単純化した有効モデルではあるが, 近藤格子系の磁場相図を構築する新奇な結果であり, かつ URhGe 等の強磁性超伝導物質の超伝導機構の基礎を与えるものになっている．



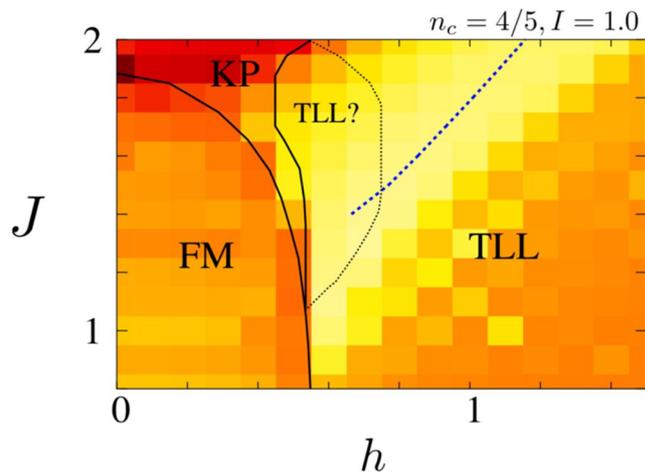
異方的近藤格子モデルの磁場中超伝導相関

で用いたモデルと同様の $S = 1/2, 1$ のモデルについて (i) 横磁場 h および局在スピンと伝導電子の交換相互作用 J の h - J 面内の相図を決定し, (ii) 超伝導相関関数の詳細な解析を行い, 相図と超伝導相関の強度の関係を明らかにした．局在スピンの自由度 $S = 1/2$ と $S = 1$ それぞれのモデルのイジング異方性の起源として, 局在スピン間の強磁性イジング相互作用と $S = 1$ のモデルに関しては局所一軸異方性を導入した．主な結果は以下である．

- $S=1/2$ のモデルにおいても得られた $S = 1$ のモデルと同様の結果を得た．低磁場領域では, 広く強磁性と反強磁性相が現れ, 中間磁場かつ J が大きい場合に磁化が磁場にほとんど依存しない近藤プラトー相, 中間磁場かつ J が小さい場合に朝永・ラッティンジャー液体相が発現し, h が大きい極限で完全分極相が実現することが明らかになった．また, 電子数密度 n_c によっては反強磁性相と電荷秩序が共存する場合があることも見出した．

- 超伝導相関が発達する領域は, h - J 相図内で 2 つの特徴的な領域に広がっていることが明らかにされた．一つ目の領域は, 超伝導相関が発達するのは近藤プラトー近傍の朝永ラッティンジャー液体相内である (右図の黄色部分)．この結果は異なる電子数密度などでも同様になっており, 詳細によらない振る舞いであることが確認された．

詳細な解析から, 超伝導相関の増大は伝導電子の磁化 m_x が消失する領域と強く関わっていることが判明した (図の破線)．第二の領域は局在スピンと伝導電子の交換相互作用 J が大きい領域であり, 横磁場 $h=0$ の強磁性相内においても超伝導相関が増大することが明らかになった．また, これらの超伝導相関の増大は, $S = 1$ の局所一軸異方性のモデルでは現れにくく, イジング異方性の種類によっても変化することがわかった．



- 拡張されたクーパ対の波動関数は, 上述の二つの領域において共にスピン三重項 (の一部) クーパ対が局在スピンと強く結合したものになっている．近藤プラトー近傍の超伝導状態のクーパ対は, 二種類のスピンの揃った対の線型結合 (+) と横磁場 h の方向に

揃った局在スピン()で記述される。他方、強磁性相内での超伝導は二つ(と)のスピン揃った対が強磁性モーメント M と結合したものが縮退していることがわかった。

以上の結果は URhGe で実現している横磁場下での非従来型超伝導を説明する初めての微視的な近似のない数値計算の結果と言え、磁場中の異方的超伝導の理解に重要な知見となる。

(2) 軌道自由度による引力が引き出すクーパー対の発現機構

BiS₂系超伝導体は、その発現機構と超伝導ギャップ構造について現在も議論が続いているが、本研究では格子振動を媒介とした引力モデルのみから、角度分解光電子分光で観測されている超伝導ギャップ構造が再現可能なことを見出した。軌道間相互作用 U' を大きい場合には局所クーパー対による d 波超伝導も予言され、今後のさらなる研究の足がかりとなる結果を得た。

(3) 四極子自由度による新しい相互作用の機構とその秩序

多軌道系では電子のスピン自由度ではなく軌道自由度が主たる役割を果たすことがある。そのような物質の典型例として Pr 系超伝導体[5]が近年研究されているが、その軌道自由度である電気四極子モーメントの相互作用や磁場との結合などについてはこれまであまり研究されてこなかった。本研究で明らかになった点を簡単にまとめると以下のようなものである：

四極子の磁場効果：

立方晶の O_h 四極子の磁場誘起相互作用が、磁場の大きさの 2 乗に比例していることを明らかにした。これは、四極子の磁場とのゼーマン相互作用と同じ次数であり、低磁場において前者が後者を凌駕することが可能であることを意味する。実際に、PrTi₂Al₂₀ ではこのようなことが実現していると考えられ、未解明の磁場相図に対して一定の解釈を与えることができた。

異方的四極子相互作用と多彩な相図：

面心立方格子上の O_h 四極子の相互作用は等方的な J と異方的な交換相互作用 K が存在する。この事実と、四極子の局所的な異方性ポテンシャルを正しく評価することで多彩な相が実現することが明らかになった。特に、高温領域で実現する部分無秩序状態は四極子特有の 3 次の異方性ポテンシャルに起因し、一般的に 3 つの波数が同時に秩序するトリプル q 秩序が実現することで起こることがわかった。

<引用文献>

- [1] T. Nomoto, K. Hattori and H. Ikeda, Phys. Rev. B **94**, 174513 (2016).
- [2] C. B. Bishop et al., Phys. Rev. B **93**, 224519 (2016).
- [3] P. M. R. Brydon et al., Phys. Rev. Lett. **116**, 177001 (2016).
- [4] D. Aoki and J. Flouquet, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 061011 (2014).
- [5] T. Onimaru and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 082002 (2016).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Tsunetsugu Hirokazu, Ishitobi Takayuki, Hattori Kazumasa	4. 巻 90
2. 論文標題 Quadrupole Orders on the fcc Lattice	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 043701 ~ 043701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.043701	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Suzuki Kohei, Hattori Kazumasa	4. 巻 89
2. 論文標題 Superconducting Correlations in the One-Dimensional Kondo Lattice Models under Magnetic Fields	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 034703 ~ 034703
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.034703	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kittaka Shunichiro, Taniguchi Takanori, Hattori Kazumasa, Nakamura Shota, Sakakibara Toshiro, Takigawa Masashi, Tsujimoto Masaki, Sakai Akito, Matsumoto Yosuke, Nakatsuji Satoru	4. 巻 89
2. 論文標題 Field-Orientation Effect on Ferro-Quadrupole Order in PrTi ₂ Al ₂₀	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 043701 ~ 043701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.043701	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Taniguchi Takanori, Hattori Kazumasa, Yoshida Makoto, Takeda Hikaru, Nakamura Shota, Sakakibara Toshiro, Tsujimoto Masaki, Sakai Akito, Matsumoto Yosuke, Nakatsuji Satoru, Takigawa Masashi	4. 巻 88
2. 論文標題 Field-Induced Switching of Ferro-Quadrupole Order Parameter in PrTi ₂ Al ₂₀	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 084707 ~ 084707
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.084707	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki Kohei, Hattori Kazumasa	4. 巻 88
2. 論文標題 Ground-State Phase Diagram of the $S = 1$ One-Dimensional Kondo Lattice Model with a Uniaxial Anisotropy under Transverse Fields	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 024707 ~ 024707
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.024707	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki Katsuhiro, Usui Hidetomo, Kuroki Kazuhiko, Nomoto Takuya, Hattori Kazumasa, Ikeda Hiroaki	4. 巻 88
2. 論文標題 Electronic Structure and Superconducting Gap Structure in BiS ₂ -based Layered Superconductors	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 041008 ~ 041008
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.041008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 石飛尊之、服部一匡
2. 発表標題 非磁性cubic項に誘起される新奇多極子秩序相
3. 学会等名 日本物理学会、第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 服部一匡
2. 発表標題 一次元異方的近藤格子模型における超伝導相関
3. 学会等名 京都大学基礎物理学研究所研究会 「高温超伝導・非従来型超伝導研究の最前線:多様性と普遍性」
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K. Suzuki and K. Hattori
2. 発表標題 Superconducting Fluctuations in S=1 One-Dimensional Kondo Lattice Model under Transverse Magnetic Fields
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木浩平、服部一匡
2. 発表標題 イジング異方性を持った横磁場中の一次元近藤格子模型における超伝導相関
3. 学会等名 日本物理学会、第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K. Suzuki and K. Hattori
2. 発表標題 Superconducting fluctuations in S=1 one- dimensional Kondo lattice model under transverse magnetic fields
3. 学会等名 FCES19 - International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石飛尊之、服部一匡
2. 発表標題 ダイヤモンド構造上の反強四極子秩序と光学ジャイロトロピー効果
3. 学会等名 新学術領域研究 J-Physics トピカルミーティング
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 鈴木浩平、服部一匡
2. 発表標題 横磁場下 $S = 1$ 近藤格子模型: 密度行列くりこみ群による解析
3. 学会等名 新学術領域研究 J-Physics トピカルミーティング
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 石飛尊之、服部一匡
2. 発表標題 ダイヤモンド構造上の反強四極子秩序と光学ジャイロトロピー効果
3. 学会等名 日本物理学会 2018 年秋季大会
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 石飛尊之、服部一匡
2. 発表標題 ダイヤモンド構造上の四極子近藤格子モデルの平均場近似による解析と交差応答
3. 学会等名 日本物理学会 2019 年第 74 回年次大会
4. 発表年 2018年～2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>研究者所属研究室HP https://scet-phys.wixsite.com/home 研究者HP https://sites.google.com/view/khhp</p>
--

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
--	---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------