

機関番号：11301

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2008 ~ 2010

課題番号：20540341

研究課題名 (和文) 強相関超伝導体のサブナノスケールからバルクに至る隠れた秩序の  
発現機構研究課題名 (英文) emergence of hidden orders in strongly correlated superconductors;  
from sub-nano scale to bulk systems

研究代表者

土浦 宏紀 (TSUCHIURA HIROKI)

東北大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：30374961

研究成果の概要 (和文)：

本研究課題の目的は、磁束芯やストライプ状態という局所的構造に現れる非自明な秩序状態の痕跡を段階的に明らかにしていくことにより、銅酸化物超伝導における最大の謎である擬ギャップ状態 (バルク) の素性に迫ることである。これに関して、反強磁性秩序を伴わないストライプ型変調 d 波 RVB 状態が、バルクでも準安定解として存在し、擬ギャップ状態の候補たりうるということが分かった。

研究成果の概要 (英文)：

The aim of this research project is to reveal the nature of the pseudo-gap (PG) state in high-Tc cuprates by studying the local structure of hidden order-parameters around vortex cores and stripe states. We find that a stripe-like modulating d-wave RVB state can be a meta-stable state in the bulk systems, and a plausible candidate of the PG state.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,600,000	480,000	2,080,000
2009年度	600,000	180,000	780,000
2010年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	2,800,000	840,000	3,640,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性 II

キーワード：ナノストライプ, 不均一超伝導, 準粒子干渉効果, 銅酸化物超伝導体

## 1. 研究開始当初の背景

銅酸化物超伝導体の示す異常物性の起源は、その発見以来 20 年を経ても明らかになつたとは言いがたい。主な未解決の問題として、擬ギャップ状態・不均一電子状態・磁束芯近傍における  $4 \times 4$  電荷秩序状態が挙げられる。当時の高精度角度分解光電子分光法 ( $k$  空間プローブ) と走査型トンネル顕微鏡分光法 (実空間プローブ) を併用した実験結果 (Valla *et al.*, Science **314** (2006) 等) などから、これらの状態の背後に共通の長周期構造を持つ非自明な秩序状態が隠れている

という仮説が有力であった。この仮説のもとで、磁束芯 (サブナノスケール) や不均一超伝導状態のワイドギャップ領域 (ナノスケール) という局所的構造に現れる非自明秩序状態の痕跡を段階的に明らかにしていくことにより、高温超伝導最大の謎である擬ギャップ状態 (バルク) の素性に迫る研究が望まれていた。

銅酸化物超伝導の発見以来 20 年間で、実験手段・理論的手法ともに飛躍的な進歩があったのは事実だが、擬ギャップ等の素性を解明する一二歩手前で停滞しているのが実状

であった。この状況を打ち破るために、本申請課題では、上述の  $k$  空間-実空間プローブを併用した観測、そして磁束芯や不均一電子状態のワイドギャップ領域といった局所的構造に現れる特異性を詳細に検討することの必要性を主張した。実験的には、このような研究はアメリカ・日本の各グループによって遂行されており、当時、そして現在でも Nature, Science, Phys. Rev. Lett. 等の誌上で定期的に成果を見ることが出来る。一方で理論的研究は、フロリダ大学やカリフォルニア大学サンタバーバラ校のグループによって急速に展開され始めたところであり、国内での早急な対応が必要であった。

## 2. 研究の目的

上記 1. で述べたように、本研究においては、磁束芯（サブナノスケール）やワイドギャップ領域（ナノスケール）という局所的構造に現れる非自明秩序状態の痕跡を段階的に明らかにしてゆくことにより、高温超伝導最大の謎である擬ギャップ状態（バルク）の素性に迫ることを目的とする。また、この目的を達成するための具体的なステップとして、次の 6 項目を設定した。

- (1) モデルパラメーターの第一原理的評価
- (2) 微視的モデルによる磁束浸潤粒子状態の研究
- (3) 微視的モデルによる不均一電子状態の研究
- (4) 非自明な秩序状態の候補を選択
- (5) ゼロ温度擬ギャップ相の同定

## 3. 研究の方法

理論分野における本研究の特色は、磁束芯から不均一電子状態を経てバルクの擬ギャップ状態に至る空間的スケールの階層性を縦断した計算・考察を行うこと、第一原理計算から実空間的モデル計算までを包括的に取り入れた計算を行うこと、そして実空間と  $k$  空間の両面からアプローチすることにある。これにより、従来行われてきた空間的に一様な微視的モデル計算に基づく解析とは相補的な情報を提供することができる。また、銅酸化物超伝導体の研究にとどまらず、空間的な不均一性を持つ違法的超伝導体全般における新しい解析手法の確率にもつながる。

ここで、本研究で用いる具体的な計算技術・手法について述べる。

まずモデルパラメーターの第一原理的評価においては、PAW 法と呼ばれる擬ポテンシャル電子状態計算法を用いて銅酸化物超伝導体における化学的乱れ、特に銅・酸素面外に存在する不純物の安定位置を明らかにすることから始める。その後、タイトバインディング模型へのマッピングを行い、微視的モ

デルを構築する。

いったん微視的モデルが得られれば、超伝導状態における準粒子状態は Bogoliubov-de Gennes (BdG) 理論に基づき解析を行う。これにより、超伝導状態、特に不均一超伝導や磁束芯近傍における準粒子状態の実空間的な情報を引き出すことができる。また、BdG 理論によって得られたスペクトルを運動量空間にマップするための計算手法を確立する。

## 4. 研究成果

(1) 第一原理計算法を用いたモデルパラメーターの評価：銅酸化物超伝導体の銅・酸素面外における化学的乱れの影響を取り入れた有効モデルの設定を行った。このモデルにおいては、乱れの効果は次隣接サイト間のキャリア遷移パラメーターに繰り込まれる。

(2) 微視的モデルによる空間変調型 d 波超伝導状態の探索：微視的モデルを用いて、反強磁性を伴わない空間変調型 d 波超伝導状態が存在することを見出した。この状態は乱れの存在しない系において準安定であり、上記 (1) で得た有効モデルにおいては、真の安定解となり得ることが分かった。

(3) 準粒子干渉効果と空間変調型 d 波超伝導状態：(2) で見出した空間変調型の状態は、電荷密度波のようなクーロン斥力由来のものではなく、d 波超伝導体における準粒子干渉効果の結果であることが分かった。

(4) 不均一超伝導状態の運動量空間における解析手法の開発：本研究課題が対象とする、実空間における構造をもつ状態、および系に内在する乱れ等の情報を、運動量空間にマップして解析するための計算手法を確立した。点状の非磁性不純物によって誘起される共鳴状態は d 波超伝導のノード付近に、CuO<sub>2</sub> 面

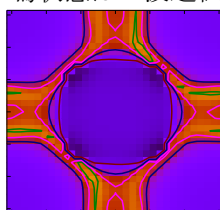


図 1: 2次元 Brillouin zone における面外乱れの影響。

外の乱れによる不均一超伝導はアンチ・ノード付近に、それぞれ Brillouin zone でのすみ分けがなされていることを見出した (図 1)。また、反強磁性状態が d 波超伝導状態と共存している場合、反強磁性エネルギーギャップはフェルミ面と反強磁性の reduced Brillouin zone が交差する点を中心に形成されることを見出した (図 2)。

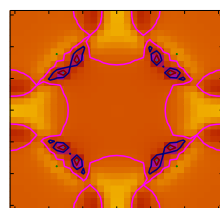


図 2: 2次元 Brillouin zone における d 波超伝導ギャップと反強磁性ギャップ (青線) の共存の様子。

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 12 件)

1. *Finite size effects on the quantum spin Hall state*, Y. Ohyama, H. Tsuchiura, A. Sakuma, *J. Phys.:Conf. Ser.* **266**, 012103(1-4) (2011). 【査読有り】
2. *First-principles study on the local magnetic anisotropy near surface of  $Dy_2Fe_{14}B$  and  $Nd_2Fe_{14}B$  magnets*, S. Tanaka, H. Moriya, H. Tsuchiura, A. Sakuma, M. Divis and P. Novak, *J. Appl. Phys.* **109**, 07A702 (1-3) (2011). 【査読有り】
3. *First-principles calculation of crystal field parameters of Dy ions substituted for Nd in Nd-Fe-B magnets*, S. Tanaka, H. Moriya, H. Tsuchiura, A. Sakuma, M. Divis and P. Novak, *J. Phys.: Conf. Ser.* **266**, 012045 (1-5) (2011). 【査読有り】
4. *First principles study on interfacial electronic structures in exchange-spring magnets*, Y. Toga, H. Moriya, H. Tsuchiura and A. Sakuma, *J. Phys.: Conf. Ser.* **266**, 012046 (1-5) (2011). 【査読有り】
5. *First principles study for the electronic structure and residual resistivity of  $Co_2MnZ$  ( $Z=Al, Si$ )*, Y. Kota, H. Tsuchiura and A. Sakuma, *J. Phys.: Conf. Ser.* **200**, 052012 (1-4) (2010). 【査読有り】
6. *Anti-phase superconducting domain structures in the  $t-t'-t''-J$  model*, H. Tsuchiura and M. Ogata, *J. Phys.:Conf. Ser.* **150**, 052272 (1-4) (2009). 【査読有り】
7. *First principles calculation of crystal field parameter near surface of  $Nd_2Fe_{14}B$* , H. Moriya, H. Tsuchiura and A. Sakuma, *J. Appl. Phys.* **105**, 07A740 (1-3) (2009). 【査読有り】
8.  $Nd_2Fe_{14}B$  永久磁石の磁気異方性, 土浦宏紀, 榎裕太, 守谷浩志, 佐久間昭正, 「固体物理」**44** (10), 39-50 (2009). 【査読有り】
9. *Spin-polarized electronic structures and transport properties of Fe-Co alloys*, Y. Kota, T. Takahashi, H. Tsuchiura and A. Sakuma, *J. Appl. Phys.* **105**, 07B716 (1-3) (2009). 【査読有り】
10. *Theoretical study on the stability of magnetic structures in the surface and interfaces of Heusler alloys,  $Co_2MnAl$  and  $Co_2MnSi$* , A. Sakuma, Y. Toga and H. Tsuchiura, *J. Appl. Phys.* **105**, 07C910 (1-3) (2009). 【査読有り】
11. 第一原理計算ソフトウェア WIEN2k による磁気特性研究の手引き, 土浦宏紀, 榎裕太, 守谷浩志, 佐久間昭正, 日本磁気学会誌「まぐね」**3** (12), 586-593 (2008).

【査読有り】

12. *Ab-initio Study on the Magnetic Structures in the Ordered  $Mn_3Pt$  Alloy*, Y. Kota, H. Tsuchiura and A. Sakuma, *IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS* **44**, 3131-3133 (2008). 【査読有り】

[学会発表] (計 16 件)

1. 「 $S=1$  ボース・ハバードモデルにおけるモット絶縁相のスピン相関」, 榎裕太, 土浦宏紀, 山下真, 横山寿敏, 稲葉謙介, 「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト, 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発, 第 5 回後悔シンポジウム, 2011 年 2 月 23 日, 神戸.
2. *Half-quantum vortices in a chiral p-wave superconducting state based on a lattice model*, 大山雄一, 土浦宏紀, 柏谷聡, 新学術領域研究「対称性の破れた凝縮系におけるトポロジカル量子現象」第 1 回領域研究会, 2010 年 12 月 19 日, 京都.
3. *Variational study on Mott transition and spin correlations in the two-dimensional  $S=1$  Bose-Hubbard model*, 榎裕太, 土浦宏紀, 山下真, 横山寿敏, 新学術領域研究「対称性の破れた凝縮系におけるトポロジカル量子現象」第 1 回領域研究会, 2010 年 12 月 18 日, 京都.
4. *First principles study on the crystal field parameters for Dy-doped Nd-Fe-B magnets*, S. Tanaka, H. Moriya, H. Tsuchiura, A. Sakuma, M. Divis and P. Novak, 55th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, 2010 年 11 月 18 日, Atlanta (USA).
5. 「スピン 1 の 2 次元ボース・ハバードモデルにおけるモット転移とスピン相関」, 榎裕太, 土浦宏紀, 山下真, 横山寿敏, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 26 日, 大阪.
6. 「p 波カイラル超伝導体における half-quantum vortex の安定性に関する微視的理論」, 大山雄一, 土浦宏紀, 柏谷聡, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 23 日, 大阪.
7. *Variational study on Mott transition in the  $S=1$  two-dimensional Bose-Hubbard model*, Y. Toga, H. Tsuchiura, M. Yamashita and H. Yokoyama, 22nd International Conference on Atomic Physics (ICAP2010), 2010 年 7 月 29 日, Cairns (Australia).
8. 「スピン 1 の 2 次元ボース・ハバードモデルにおけるモット転移の解析」, 榎裕太, 土浦宏紀, 山下真, 横山寿敏, 佐久間昭正, 日本物理学会第 65 回年次大会, 2010 年 3 月 21 日, 岡山.

9. 「乱れた  $t$ - $J$  モデルにおける電荷密度変動と準粒子干渉効果」, 土浦宏紀, 小形正男, 日本物理学会 2009 年秋季大会, 2009 年 9 月 27 日, 熊本.
10. *Charge modulations due to QPI effect in a  $t$ - $J$  type model*, H. Tsuchiura, *New directions of superconducting nanostructures 2009*, 2009 年 9 月 4 日, 名古屋 (invited).
11. *Non-dispersive charge modulations in the  $t$ - $t'$ - $t''$ - $J$  model*, H. Tsuchiura, 7th International conference on New Theories, Discoveries, and Applications of Superconductors and Related Materials, 2009 年 5 月 15 日, 北京(中国) (invited).
12. 「Nd-Fe-B 磁石の界面における結晶場の第一原理的評価」, 土浦宏紀, 榎裕太, 守谷浩志, 佐久間昭正, 日本金属学会 2009 年春期講演大会, 2009 年 3 月 29 日, 東京 (シンポジウム講演).
13. 「乱れを持つ  $t$ - $J$  モデルにおける擬ギャップ」, 小形正男, 土浦宏紀, 日本物理学会第 64 回年次大会, 2009 年 3 月 28 日, 東京.
14. 「遷移金属合金の電気伝導度とスピン分極率の第一原理計算」, 佐久間昭正, 小田洋平, 土浦宏紀, 日本物理学会第 64 回年次大会, 2009 年 3 月 28 日, 東京.
15. *First-Principles Calculation on the Crystal Field Parameter near the Surfaces and the Interfaces of  $Nd_2Fe_{14}B$* , 53rd Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, H. Moriya, H. Tsuchiura and A. Sakuma, 2008 年 11 月 13 日, Texas (USA).
16. 「 $t$ - $J$  モデルにおける位相反転型  $d$  波ドメイン構造」, 土浦宏紀, 小形正男, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 23 日, 盛岡.

[その他]

ホームページ等

<http://www.apph.tohoku.ac.jp/sakuma-lab/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

土浦 宏紀 ( TSUCHIURA HIROKI )

東北大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号 : 30374961

### (2) 研究分担者

佐久間 昭正 ( SAKUMA AKIMASA )

東北大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号 : 30361124

### (3) 連携研究者

なし