

平成 29 年 6 月 12 日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400372

研究課題名(和文)高温超伝導体の微視的モデルによる電子状態の研究

研究課題名(英文) Research on electronic states using a microscopic model for high-temperature superconductors

研究代表者

河野 昌仙 (Kohno, Masanori)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・主幹研究員

研究者番号：40370308

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：銅酸化物高温超伝導体の性質を微視的なレベルから統一的に理解するために、銅酸化物高温超伝導体の原子軌道から導かれるモデルである2次元t-Jモデルの電子状態を調べ、銅酸化物高温超伝導体で観測されている様々な異常な特徴をモット転移近傍の性質として統一的に説明した。また、モット転移の顕著な特徴であるドーピングによってギャップ内に誘起される状態についてt-Jモデルを用いて調べ、ドーピング誘起状態の形成には二重占有は本質的ではなく、モット絶縁体のスピンと電荷の分離を反映し、モット絶縁体の低エネルギーのスピン励起状態がドーピングによってフェルミ波数だけずれて電子励起に現れたものと解釈できることを示した。

研究成果の概要(英文)：To comprehensively understand the properties of cuprate high-temperature superconductors from the microscopic level, the electronic states of the two-dimensional t-J model, which is a model derivable from atomic orbitals of high-temperature superconductors, are investigated, and various anomalous features observed in cuprate high-temperature superconductors are collectively explained as properties near the Mott transition. In addition, by using t-J models, the emergence of states in the gap by doping a Mott insulator, which is a distinctive feature of the Mott transition, is investigated, and it is shown that double occupancy is not essential to this feature and that this feature can be interpreted as the emergence of low-energy spin excited states of a Mott insulator in the electronic excitation spectrum with the dispersion relation shifted by the Fermi momentum by doping a Mott insulator, reflecting the spin-charge separation of the Mott insulator.

研究分野：物性理論物理

キーワード：高温超伝導体 モット転移 t-Jモデル クラスタ-摂動理論 擬ギャップ ドーピング誘起状態 動的密度行列繰り込み群法 スピンと電荷の分離

1. 研究開始当初の背景

(1) 銅酸化物高温超伝導体の発見から 30 年近く経つが、その高温超伝導のメカニズムは未だに解明されていない。モット転移近くの強い電子相関が高温超伝導と深く関連していると考えられており、モット転移近傍における電子状態の正確な理解が求められている。モット転移近傍の電子状態を調べるための理論研究では、ハバードモデルが用いられることが多いが、銅酸化物高温超伝導体は、原子レベルでは銅と酸素の軌道が混成した状態で構成されるため、ハバードモデルとの直接的な対応はなく、銅酸化物高温超伝導体の原子レベルから導出可能なモデルで、モット転移近傍の電子状態を明らかにすることが望まれる。

(2) モット転移の特徴として、ドーピングによって誘起される電子状態の重要性が認識されるようになった。このような状態はバンド理論等の電子を粒子として扱う描像では説明することができず、モット転移の本質的理解のために、ドーピング誘起状態の解明が重要である。ドーピング誘起状態の解釈として、一つのサイトに二つの電子が入った二重占有状態が本質的であるという考え方が現在主流になっているが、もしドーピング誘起状態の形成に二重占有が本質的であるならば、二重占有を完全に排除した t - J モデルでは、ドーピング誘起状態は現れないことになる。したがって、 t - J モデルでのモット転移近傍の電子状態を明らかにすることは、モット転移の本質的理解のためにも重要である。

2. 研究の目的

(1) 銅酸化物高温超伝導体の電子状態の正確な理解のために、銅酸化物高温超伝導体の原子軌道から導出することのできる 2 次元 t - J モデルによって、銅酸化物高温超伝導体で観測されている様々な異常な振る舞いを統一的に説明することができるかを明らかにする。

(2) モット転移の本質的理解のために、二重占有を完全に排除したモデルである t - J モデルのモット転移近傍の電子状態を調べ、ドーピング誘起状態に対して二重占有が本質的な役割を果たすのかを明らかにする。

3. 研究の方法

2 次元 t - J モデルのモット転移近傍の性質を調べるために、クラスター摂動理論を用いた。主に 4×4 サイトのクラスターで計算を行ったが、サイズ効果を調べるために、 6×6 サイトの計算も行った。その際、数値厳密対角化法では、メモリと計算時間が膨大になるため、動的密度行列繰り込み群法とクラスター摂動理論とを組み合わせた方法を用いた。また、物理的解釈を与えるために、1 次元極限からの乱雑位相近似 (RPA 近似) や、次近接ホッピングに関する RPA 的な近似法を用いた。

4. 研究成果

(1) 【2 次元 t - J モデルによる銅酸化物高温超伝導体の電子状態の説明】銅酸化物高温超伝導体で観測されている様々な異常な電子状態の特徴 (ドーピング誘起状態、スピノンの励起、ホロンの励起、分散関係のキック、ウォーターフォール、平坦バンド、擬ギャップ、フェルミアークなど) を、銅酸化物高温超伝導体の原子軌道から導出することのできる 2 次元 t - J モデルにクラスター摂動理論を適用することによって、統一的に説明することができた [図 1(a), (b)] [雑誌論文]。 4×4 サイトのクラスターの結果と 6×6 サイトのクラスターで結果を比較しても、全体的な電子状態の振る舞いはほとんど変わらないので [図 1(a), (c)]、これらの特徴に対して有限サイズ効果は小さいと考えられる。また、2 次元ハバードモデルでも同様な結果が得られているので、これらの特徴は、2 次元系のモット転移近傍の一般的な特徴であると考えられる。

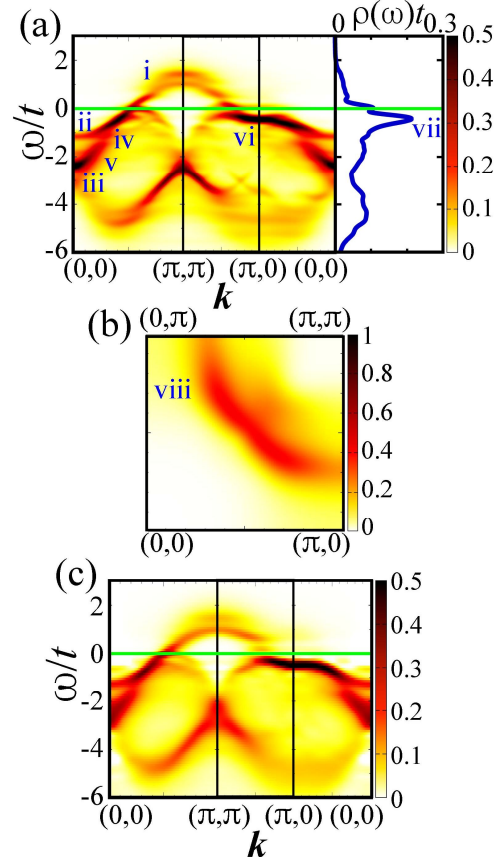


図 1 2 次元 t - J モデルの微小ドーブ領域でのスペクトル関数 $A(k, \omega)$ の t - J クラスター摂動理論の結果 [(a), (b) 4×4 サイトクラスター、(c) 6×6 サイトクラスター]。 (a) の右パネルは電子励起の状態密度 $\rho(\omega)t_0$ を示す。 (b) $A(k, \omega \approx 0)t_0$ 。 i-viii: 銅酸化物高温超伝導体で観測されている電子状態の特徴 (i: ドーピング誘起状態、ii: スピノンの励起、iii: ホロンの励起状態、iv: キック、v: ウォーターフォール、vi: 平坦バンド、vii: 擬ギャップ、viii: フェルミアーク)。 $\omega = 0$ 。 雑誌論文 より一部改変して転載。

(2) 【ドーピング誘起状態の本質の解明】モット転移の特徴であるドーピング誘起状態は、二重占有を完全に排除した t - J モデルでも現れ、その分散関係は、無限小ドーブ極限でスピン波の分散関係をフェルミ波数だけずらしたものと理解できることを明らかにした[雑誌論文,]。この結果から、これまでドーピング誘起状態に対して二重占有が本質的な役割を果たすと考えられてきたが、モット絶縁体のスピン励起状態がドーピングによって電子状態として誘起されたと考えた方が、 t - J モデルも含め、モット転移近傍の一般的特徴として理解することができる。このことを実証するために、ドーピング誘起状態の性質を無限小ドーブ極限において詳細に調べ、一般にモット絶縁体にドーピングを行うと、モット絶縁体のスピン励起状態がフェルミ波数だけずれた分散関係で電子励起状態として現れることを、量子数や波動関数の重なりなどの観点から明らかにした[雑誌論文,]。また、その特徴を最も端的に表す例として、梯子 t - J モデルの鎖間ホッピングが強い場合を考え、有効モデルの波動関数を実際に計算し、そのメカニズムを明らかにした[図 2][雑誌論文]。これらの結果から、モット転移は、電子の動きをスピン自由度に残したまま、電荷自由度が凍結する現象であるという描像が得られる。モット絶縁体からは、スピン励起状態がドーピングによって電荷自由度を付与され、電子状態として現れるということが出来る[雑誌論文,]。

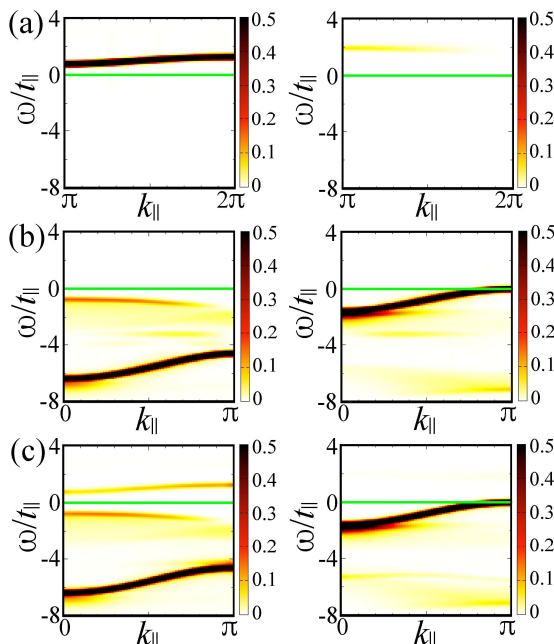


図2 梯子 t - J モデルのスペクトル関数 $A(k, t)$ とスピン動的構造因子 $S(k, t)$. t : t , k : 鎖方向のホッピングの強さと波数. 非アーベル動的密度行列くりこみ群法(120 サイト)の結果[(左) $k_{\perp} = \pi$, (右) $k_{\perp} = 0$]. (a)モット絶縁体の $S(k, t)$. (b)モット絶縁体の $A(k, t)$. (c)2 ホール系の $A(k, t)$. $\omega = 0$. 雑誌論文 より一部改変して転載.

(3) 【次近接ホッピングによる電子ドーブ系とホールドーブ系の非対称な電子状態の説明】次近接ホッピングをもつ場合についてもクラスター摂動理論を用いて調べ、銅酸化物高温超伝導体で観測されている電子ドーブ系とホールドーブ系の非対称な電子状態を説明した[図 3]。また、その特徴は、次近接ホッピングを摂動とみなしたRPA的な近似法を用いることにより、次近接ホッピングによるスペクトル強度分布の変化として、直感的に理解できることも示した[雑誌論文]。

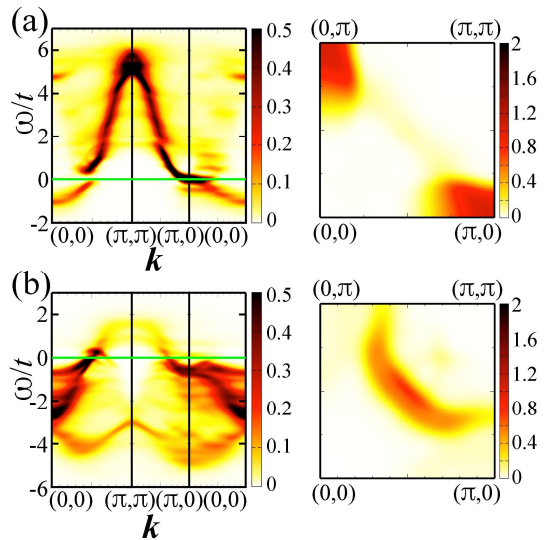


図3 次近接ホッピングをもつ2次元ハバードモデルの微小ドーブ領域でのスペクトル関数 $A(k, t)$. クラスター摂動理論(4×4 サイトクラスター)の結果[(右) $A(k, t) \approx 0$]. (a)電子ドーブ系. (b)ホールドーブ系. $\omega = 0$. 雑誌論文 より一部改変して転載.

(4) 【研究成果のまとめ】本研究により、銅酸化物高温超伝導体で観測されている様々な異常な電子状態は、原子軌道から導出することのできる t - J モデルでも、電子間相互作用を最も単純な形で取り入れたハバードモデルと同様に説明することができ、2次元系のモット転移近傍の性質として統一的に理解することができることがわかった。また、モット転移における最も顕著な特徴であるドーピング誘起状態は、モット絶縁体のスピン励起状態がドーピングによってフェルミ波数だけずれた分散関係で電子状態として現れたものとみなせることを、クラスター摂動理論や動的密度行列くりこみ群法などによる数値計算と、量子数や波動関数の重なりなどの解析に基づく一般論によって示した。二重占有を完全に排除した t - J モデルでもこの特徴が現れることから、二重占有はドーピング誘起状態に本質的ではなく、モット絶縁体のスピンと電荷の分離(低エネルギー領域にスピン励起状態が存在するが、電荷励起には大きなギャップがあり、低エネルギー領域に電子励起状態が存在しないこと)がドーピング誘起状態と本質的に関わっていることがわかった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 6 件)

河野 昌仙、モット転移と高温超伝導体の電子状態---ハバードモデルからの新展開、日本物理学会誌、**71**、No. 8、533-540、2016 年、査読有、URL:<http://www.jps.or.jp/members/books/files/gakkaishi/71-08.pdf>

Masanori Kohno、Doping-induced states in the single-particle spectrum originating from magnetic excitation of a Mott insulator、Physics Procedia、**75**、206-213、2015 年、査読有、DOI: 10.1016/j.phpro.2015.12.026

Masanori Kohno、States induced in the single-particle spectrum by doping a Mott insulator、Physical Review B **92**、085129、2015 年、査読有、DOI:10.1103/PhysRevB.92.085129

Masanori Kohno、Spectral properties near the Mott transition in the two-dimensional t - J model、Physical Review B、**92**、085128、2015 年、査読有、DOI: 10.1103/PhysRevB.92.085128

Masanori Kohno、Spectral properties near the Mott transition in the two-dimensional Hubbard model with next-nearest-neighbor hopping、Physical Review B、**90**、035111、2014 年、査読有、DOI:10.1103/PhysRevB.90.035111

Masanori Kohno、Relationship between Single-Particle Excitation and Spin Excitation at the Mott Transition、JPS Conference Proceedings、**3**、013020、2014 年、査読有、DOI:10.7566/JSPSC.3.013020

〔学会発表〕(計 13 件)

Masanori Kohno、States induced in the single-particle spectrum by infinitesimal doping of a Mott insulator、APS March meeting (No. K41.13)、2017 年 3 月 15 日、ニューオーリンズ(アメリカ)

河野昌仙、モット転移の新しい描像、鈴木増雄先生傘寿記念ワークショップ、2017 年 3 月 3 日、東京大学(東京都・文京区)

河野昌仙、モット転移における電子状態の変化、筑波大学物性セミナー、2016 年 9 月 29 日、筑波大学(茨城県・つくば市)

河野昌仙、反強磁性秩序状態からのドーピング誘起状態、日本物理学会年次大会 2016 年秋季大会(講演番号: 14pKE-12)、2016 年 9 月 14 日、金沢大学(石川県・金沢市)

河野昌仙、 t - J モデルのドーピング誘起状態、第 71 回日本物理学会年次大会(講

演番号: 19pBN-1)、2016 年 3 月 19 日、東北学院大学(宮城県・仙台市)

Masanori Kohno、Spectral properties of the two-dimensional t - J model near the Mott transition、APS March meeting(No. L25.13)、2016 年 3 月 16 日、ボルチモア(アメリカ)

河野昌仙、梯子ハバードおよび t - J モデルのドーピング誘起状態、日本物理学会 2015 年秋季大会(講演番号: 19aCR-9)、2015 年 9 月 19 日、関西大学(大阪府・吹田市)

河野昌仙、モット転移近傍の電子状態、物性研理論セミナー、2015 年 7 月 17 日、東京大学物性研究所(千葉県・柏市)

Masanori Kohno、Doping-induced single-particle states due to magnetic excitation of a Mott insulator、The 20th International Conference on Magnetism (No. FR.A-P31)、2015 年 7 月 10 日、バルセロナ(スペイン)

河野昌仙、モット転移における無限小ドーピング誘起状態、日本物理学会第 70 回年次大会(講演番号: 24aAF-5)、2015 年 3 月 24 日、早稲田大学(東京都・新宿区)

Masanori Kohno、Spectral properties of the two-dimensional Hubbard model with next-nearest-neighbor hopping near the Mott transition、APS March meeting (No. F25.2)、2015 年 3 月 3 日、サンアントニオ(アメリカ)

河野昌仙、モット転移近傍におけるドーピング誘起状態の直感的説明、日本物理学会 2014 年秋季大会(講演番号: 10aBG-3)、2014 年 9 月 10 日、中央大学(東京都・八王子市)

河野昌仙、モット転移の本質と高温超伝導体の電子状態、神楽坂・凝縮系理論勉強会、2014 年 8 月 8 日、東京理科大学(東京都・新宿区)

〔その他〕

ホームページ

http://www.nims.go.jp/mana/members/personal/m_kohno/Japanese/menu/mhome.htm

6. 研究組織

研究代表者

河野 昌仙(KOHNO, Masanori)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・

国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・

主幹研究員

研究者番号: 40370308