科学研究費補助金研究成果報告書

平成 22 年 3 月 15 日現在

研究種目:特定領域研究 研究期間:2004~2008 課題番号:16076203

研究課題名(和文) 新しい物質設計指針に基づく高温超伝導体の合成

研究課題名(英文) Fabrication of high-Tc superconductors based on

novel materials designs

研究代表者

青木 秀夫 (AOKI HIDEO)

東京大学・大学院理学系研究科・教授

研究者番号:50114351

研究成果の概要:

新しい物質設計の理論的指針を開発し、これに基づく高温超伝導体の実験的研究を行い、主に 以下の成果を得た。先ず理論的には、強相関電子系における電子相関からの超伝導を支配する 理論的要因を、バンド構造・フェルミ面形状、相互作用距離、多バンド効果、電子・電子と電 子・フォノン相互作用の共存効果、などの点で解析し、設計指針を与えた。方法としては、DMFT、 DMRG、LDF, FLEX などを駆使した。また、ミクロな理論模型により、銅酸化物高温超伝導 体、三角格子上での Co 酸化物超伝導体を研究した。コバルト酸化物においては、諸物性が、 特異なバンド形状と電子相関の協力効果として統一的に理解できることを示した。また、鉄系 超伝導体に対する微視的 5 軌道模型を構築し、 s ±波超伝導を提唱した。また、Ni を念頭にお いた遷移金属における電子相関からの金属強磁性について、多軌道の効果と結晶構造の効果の 両者が本質的に重要であることを初めて理論的に示した。さらに、非平衡強相関系の物理を、 モット絶縁体の誘電破壊に対して理論的に解明し、多体系におけるランダウ・ゼナー非断熱遷 移という描像を与えた。実験的には、Bi 系高温超伝導体では、結晶乱れが超伝導転移温度を低 下させる要因となっていることを、乱れの制御と STM/STS を用いたミクロな電子情報とをフィ ードバックさせることにより明らかにし、これをもとに乱れを減らした Bi¸Sr¸CaCu¸Oạ。 の Tc を 98K まで上昇させることに成功した。バナジウム化合物については、実験的に圧力・温度相図 を確立し、超伝導相が電荷秩序相、磁気秩序相と競合していることを明らかにした。

交付額

(金額単位:円)

	直接経費	間接経費	合 計
2004 年度	45,400,000	0	45,400,000
2005 年度	30,700,000	0	30,700,000
2006 年度	17,000,000	0	17,000,000
2007 年度	11,200,000	0	11,200,000
2008 年度	10,400,000	0	10,400,000
総計	114,700,000	0	114,700,000

研究分野:数物系科学

科研費の分科・細目:物理学・物性

キーワード:高温超伝導、電子相関、物質設計、銅酸化物、バナジウム化合物、コバルト酸化

物、鉄系超伝導体、STS

科学研究費補助金研究成果報告書

1. 研究開始当初の背景

本理論・実験合同グループが目標としたことは、電子相関の理解を通じて、より高いTcを持つ超伝導体、あるいは、これまでにない新奇なペアリング状態を持つ超伝導体を、(A)理論的提案をもった理論家(青木、小形、黒木)の物質設計と、(B)高温超伝導体発見のfounding member である実験家(内田)やが組んで行う点である。実験側からは、原子レベルで制御定とである。実験側からは、原子レベルで制御定とである。実験側からは、原子レベルで制御定とである。主組み合わせることにより、未知の相の実空間、運動量空間での電子状態を明らかにする。上田は、固体化学に基礎を置き様々な手法による物質合成を探求する。

(1) (青木)銅酸化物では電子間斥力相互作用のために、スピンゆらぎに媒介される超伝導が起きている可能性が高い。しかし、斥力からの超伝導ではクーパー・ペアリングが異方的(ギャップ関数も運動量空間で node をもつ)となる必要があるため、これが Tcを大幅に低下させる。超伝導が、次元性、要といき面形状、多バンド効果など様々な要といるのように高い転移温度を持ち得るか、トリプレット超伝導がどのような場合に転移温度が高くなるか、に興味が集まっていた。

(2)(内田)超伝導体の臨界温度 Tc が Hg 系 銅酸化物で 135K を記録したのは 1993 年のこ とであった。その後、銅酸化物以外にも、 Tc=30K 級の高温超伝導体が多く発見された が Tc の上昇は止まったままである。Tc が液 体窒素温度、更に 100K を越えている唯一の 物質である銅酸化物は、より高い Tc を目指 す道の先頭にいる。超伝導ギャップの大きさ が大きい(40 - 60meV)こと、また Hg 系物質 の Tc が高圧下で 164K まで上昇することから、 銅酸化物の Tc に上昇の余地があることが多 くの研究者に認識されてきた。また、最近、 内田は Davis 等と STM を用いることにより、 均一な超伝導相と考えられている状態でも、 超伝導はナノメートルの不均一性をもつ場 合があることを発見した。この不均一相は特 徴あるエネルギー・スペクトルをもち、より 高いて、への重要なヒントとなり得る。このよ うに、銅酸化物の Tc を向上させることがで きるかを考えようという世界的な機運を昴 揚すべく本特定領域研究の開始が期待され ていた。

(3)(小形)高温超伝導の発見以来、従来型の BCS 超伝導体ではなく、電子相関の効果を利用した新しいタイプの超伝導が研究されるようになってきた。最終的な目的は、より高い Tc を持つ超伝導体を見出すことであるが、理論的に種々の可能性を試してみる必要

があり、また手法的にもそのようなことが可能になってきていた。また実験では超伝導と競合・共存する他の秩序(磁性、ストライプなど)がみいだされており、超伝導との関係を明らかにする必要があった。

(4)(上田)遷移金属酸化物では、電子は電荷・スピンの他に軌道自由度(元素に依存)を持っている。実際、超伝導を示す遷移金属酸化物は Ti, Cu に限られていて謎となっていたが、最近、V, Co の酸化物で相次いで超伝導が見出され、軌道自由度の役割、その舞台となる格子の形や次元性との関連が興味をひいていた。特に、伝導性酸化物が数多質は、圧力誘起超伝導を示すベータバナジウムブロンズのみであり、この解明がまたれていた。

(5)(黒木)超伝導を実現するのに有利な状況として、非連結な(ポケットから成る)フェルミ面を持つ系を考えて node をポケットの間に通してやれば、二桁落ちだった Tc を一桁落ちにとどめる可能性を提唱した。また、wide band narrow band 共存系も提唱してきており、このような状況が現実にどういう物質で実現しうるのか、関心が持たれた。

2. 研究の目的

(1)(青木)電子機構超伝導において、より高い Tc や、エキゾチックなペアリングが起きるためにはどのような物質(フェルミ面形状など)がよいか、について研究を行う。具体的な要因としては、

- 電子相関の強さ、
- 系の次元性(層状 vs 3 次元系)
- フェルミ面・バンド分散形状、
- スピン揺らぎと電荷揺らぎの大きさ (相互作用距離への依存性)
- 単一バンド系 vs 多バンド系 (軌道自由度)
- 電子間相互作用と電子フォノン相互 作用が共存した場合、

などについて、理論的に調べる。

(2)(内田)1993年以降上昇の止まっている 銅酸化物超伝導体の Tc を向上させる方策を 考え、それを現実の物質に適用することを目 的にする。方策の1つは、銅酸化物が本質的 に内包する結晶乱れに着目し、様々な格子サイトに存在する乱れの同定とその乱れが Tc に及ぼす影響を明らかにすることから始ま る。Tc を大きく減少させている格子乱れのサイトをみつけ、その乱れを少なくすることに より Tc 向上を目指す。2つ目は物性研究が進 んでいない、単位胞に CuO_2 面を 3 枚以上含む 多層系銅酸化物に光をあて、3 層系で Tc が最高値を記録し、4 層以上で Tc が減少する要因・メカニズムを追求することである。これがわかれば Tc の向上、Tc=135K の世界記録の更新への道が拓ける。

(3)(小形)主に数値計算をもとに、銅酸化物高温超伝導体の超伝導発現の機構について明らかにする。またモット絶縁体と超伝導の関連性、および反強磁性と超伝導の関係などについて変分関数の観点から研究を行う。また新しく発見されたフラストレート系(三角格子、パイロクロアなど;佐藤正俊グループ、吉村一良グループにより、実験的に研究)での超伝導、とくにCo系の超伝導に関して、新しい超伝導発現のメカニズムを探求する。

(4)(上田)ベータバナジウムブロンズの圧力 温度電子相図の解明と圧力誘起超伝導の機構解明、および新奇な量子物性を示す新物質探索を目的とする。

(5)(黒木)まず、既存の非従来型ペアリングによると考えられる超伝導体に焦点をあて、そのペアリング機構の解明をめざす。そこで得た知見を基に新しい超伝導体の理論的設計を目指す。

3. 研究の方法

(1)(青木)我々のこれまで総合的に発展させてきた「電子相関におけるフェルミ面形状効果」という概念および具体的モデルにおける結果から得た指針を最大限に発展させ、特徴ある構造において、実際に実現し得る格子構造を探索する。方法としては、揺らぎ交換近似、量子モンテカルロ法、動的平均場、動的クラスター近似、密度行列繰りこみなどの様々な多体論的手法を駆使する。

(2)(内田)高温超伝導は元素置換や酵素量増減等のドーピング操作により発現するため、様々な結晶格子の乱れを内包している。数ある銅酸化物の中でもBi 系物質は、3種類のドーパントサイトをもち、また結晶構造はがフレキシブルなことから、非常に乱れだ系であることが知られている。3種類のドーパンサイトにどのような乱れが存在しよがのような乱れがでいる。面の電子状態と Tc にどの状態と Tc にどの大きを与えているかをミクロな電子状態と Tc にどの状態・これで割響を与えているかをミクロ結晶成長・この制御とをフィードバックを基により明らかにする。この知見を基に、乱側を行い、Tc の向上を試みる。

また、多層系については、Tcが3層系まで

は上昇することが知られているが、これを解明するために、 CuO_2 面の枚数を $1\sim5$ 枚まで変化させ、かつ他の系に比べ極立って高い Tcを示す Hg 系物質を合成し、面の枚数と Tc の変化に連動して変化する物性パラメータの探求を行う。また、STS や ARPES といった先進スペクトロスコピーに適した 3 層 Bi 系物質の単結晶成長を行い、3 層系が 1 層や 2 層系に比べ Tc が向上する要因を探る。

(3 X 小形)高温展開、変分モンテカルロ法、 摂動論的な手法など主に数値的な手法を用いて、いろいろな場合の超伝導転移温度の相対的な比較を行う。また、実験で新たに得られるような超伝導物質に関して、バンド構造、結晶構造などを参考に、どのようなエキゾチック超伝導が可能かについて理論的な検証を行う。

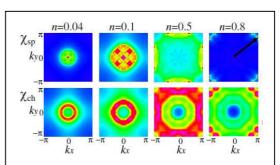
(4)(上田)ベータバナジウムブロンズには 5種類あるが、それらについて、まず、良質 の単結晶育成を行い、それを用いて、圧力下 での精密構造・物性測定を行う。また、高圧 合成や固体化学的手法を駆使して、新奇な量 子物性を示す物質の合成を行う。

(5)(黒木)第一原理バンド計算によって得られるバンド構造を正確に考慮した多体模型において、RPAやFLEX近似といった多体理論を適用して超伝導の可能性を調べる。

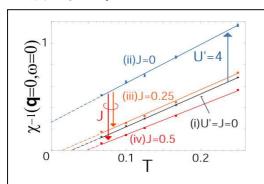
4. 研究成果

(1)(青木)

電荷揺らぎとスピン揺らぎが共存する場合のペアリング対称性相図を、電子間斥力相互作用の距離を系統的に変えることにより求め、ハバード模型的な短距離相互作用から、長距離クーロン相互作用をもつ電子ガスに至るまでの描像を与えた。

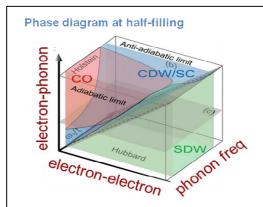


長距離相互作用系でのスピン感受率(上) と電荷感受率(下)を様々な電子密度 *n* に対してプロット。 フント結合(軌道間交換相互作用)をもつ多軌道系について、動的平均場理論を多軌道系に拡張することにより超伝導相図を求めた。これにより、ニッケルのような遷移金属単体における金属強磁性、という長い歴史をもつ基本的な問題に、フント結合と結晶構造の両者が本質的に効いていることを初めて明確に示した。



帯磁率の逆数の温度依存性が、フント結合 Jにより変わる様子。

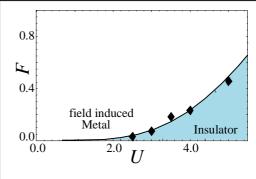
電子・フォノンと電子・電子相互作用が 共に強い系を密度行列繰り込み群により調 べ、バンド構造によっては超伝導が支配的に なり得ることを見出した。



電子・フォノン相互作用、電子・電子相 互作用、フォノン振動数に対する相図。

黒木のグループとともに、鉄系超伝導体の電子構造、ならびに超伝導メカニズムを提唱した。これは、本研究課題のうち、新しい物質における電子機構超伝導、多軌道相関電子系における超伝導、という当初の研究目的に合致する成果である。

強相関電子系における非平衡・非線形現象を、先ず強電場中の絶縁破壊について調べ、 多体量子準位間のトンネリングから解釈を 与えた。さらに、光励起されたモット絶縁体 における非平衡分布を初めて求め、ならびに

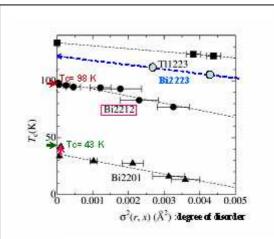


強電場中のモット絶縁体の非平衡絶縁 破壊相図。

光誘起朝永・Luttinger 的な新奇な集団励起 モードを調べ、また2次元銅酸化物超伝導体 の非平衡相転移の予言を行った。このように、 非平衡強相関電子系の解明への路を拓き、巨 大光応答班との関連も探った。このような解 析を可能にするために、非平衡動的平均場、 時間依存密度行列繰り込み群、非平衡 FLEX 近似といった理論手法を開発した。

(2)(内田)

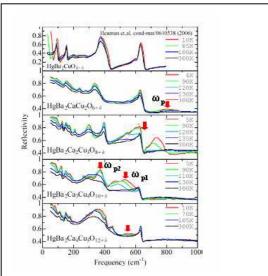
様々な結晶サイトの乱れが Tc に与える影響を Bi 系銅酸化物で探った結果、 CuO_2 面に隣接する、頂点酸素を含む原子プロック内の乱れが Tc を減少させていることをつきとめた。この乱れを最小化することにより、通常 90K の Bi2212 の Tc を 98.5K まで向上させることに成功した。



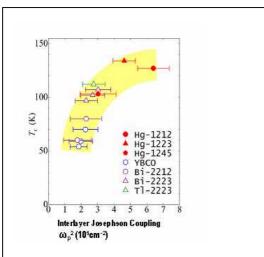
高温超伝導体の結晶乱れによる Tc の低下。

多層 Hg 系及び Bi 系の光学スペクトルと ARPES 測定から、CuO2面の枚数とそれに伴う Tc の変化と相関しているのは CuO2面間の結合の強さであることを明らかにした。面間の結合の強さを決めているのは CuO2面間の距離ではなく、各面のドーピング状況と頂点酸

素の CuO₂ 面からの距離であるということもわかってきた。この結果は、CuO₂ 面間の結合は、単なるジョセフソンや近接効果ではなく極めて特殊なものであることがわかり、高温超伝導メカニズムの解明へのヒントを与えるものである。同時に、ドーピング量や頂点酸素の距離は操作可能なパラメータであり、Tc の向上に対する将来の指針となるものである。



多層系の光学型ジョゼフソン・プラズマモ ード(矢印)。

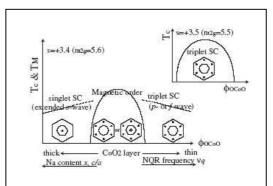


 CuO_2 面間のジョセフソン結合強度とTcとの相関。

(3)(小形) 銅酸化物高温超伝導体について超伝導発現の機構を数値的に調べた。まず2次元tJモデルにおいて、高温展開の手法によりd波超伝導相関が低温領域で発達することを示した。これはtJモデルにおいて初めて有限温度で超伝導相関が発達する様

子を数値的に見出したものである。また、強相関領域と弱相関領域の違いを明確にするために2次元ハバードモデルを変分モンテカルロ法によって調べ、ホロンとダブロンの東縛状態が重要であることを示した。この結果、高温超伝導が強相関領域で実現し、ドープされたモット絶縁体という特異な状態で理解できることを明確に示した。また、超伝導状態のエネルギー利得について調べ、強相関領域では運動エネルギーの利得による特異な超伝導状態であることを見出した。

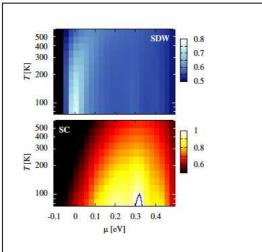
新しく発見された Co 酸化物の超伝導に関して、非常に早い段階から世界に先駆けて超伝導発現のメカニズムについて研究を行った。まず結晶構造を反映したバンド構造を tight binding model でフィットし、それを基に FLEX 近似および摂動論によってスピン三重項超伝導が実現することを見出した。さらにそのモデルを用いて、c 軸方向の圧縮による結晶場の大きさの変化が重要なパットタであることを示し、磁気的性質などが説明できることと、2種類の異なる超伝導の可能性を指摘した。



Co 酸化物超伝導体における結晶場の大きさの関数として得られた相図。

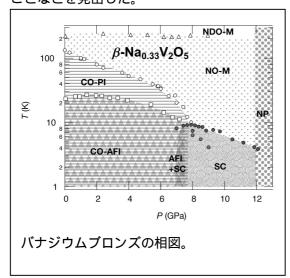
また、フェルミ面が 1 種類の場合には、 三角格子上の単バンドのモデルとなるが、こ の場合、時間反転対称性が破れた超伝導状態 が実現することを変分モンテカルロ法によって明らかにした。さらに高温展開の手法を 用いてどのような超伝導相関が低温領域で 発達するかどうかを調べ、d波以外にスピン 三重項f波超伝導の可能性を議論した。

新しく発見された Fe 系超伝導については、本研究組織の青木グループ、黒木グループからバンド構造に関する情報提供を受け、常伝導状態でのスピン相関などの研究を行った。また超伝導発現のメカニズムに関して、状態密度が小さくクーロン斥力の遮蔽が小さくなる場合に、SDW 転移は抑えられるにも関わらず超伝導が増強されるという機構があることを示した。



上: SDW 転移の強さ、下: 超伝導転移 の強さ。

(3)(上田) ベータバナジウムブロンズ β $A_{0.33}$ V_2 O_5 (A=Li, Na, Ag, Ca, Sr) について 圧力 - 温度電子相図を確立し(A=Na の場合を 図に示す), A=Li, Na, Ag では、金属(NO M) - 電荷秩序絶縁体(CO PI)転移は加圧により 抑えられ超伝導相(SC)が現れること、さらに高圧域に非超伝導相金属相(NP)が現れること、超伝導臨界圧近傍ではフェルミ液体的になること、超伝導相は反強磁性電荷秩序絶縁体相(CO AFI)に接していること、超伝導は不定比性などの乱れに非常に敏感であることなどを見出した。



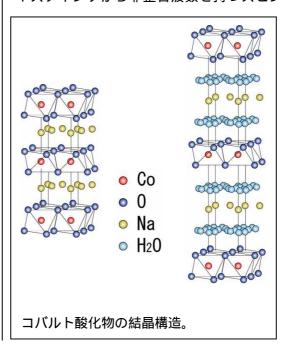
一方、A=Ca, Sr では、同様に電荷秩序金属 - 絶縁体転移は加圧により抑えられるが、さらに異なる周期を持った電荷秩序相や非超伝導金属相が現れ、超伝導相は現れないこ

と、相境界近傍ではサイト間電荷移動と構造の特異性に起因した悪魔の階段状電荷秩序相転移が観測されること、などを見出した。これらから、ベータバナジウムブロンズにおける超伝導相は色々な基底状態と競合していること、またその発現には次元クロスオーバーや電荷揺らぎとともに反強磁性揺らぎも重要な働きを持つことなどが明らかとなった。

新奇な量子物性を示す新物質開発では、ポストペロフスカイト構造を持つ新規強相関電子系物質 $CaIrO_3$ を開発し、Ca サイトをNa で置換することによりその金属化に成功した。他に新規ホランダイトバナジウム酸化物 $K_2V_8O_{16}$, $Rb_2V_8O_{16}$ を開発し、電荷秩序とスピン一重項対形成を伴った金属 - 絶縁体転移を観測した。

(5)(黒木)

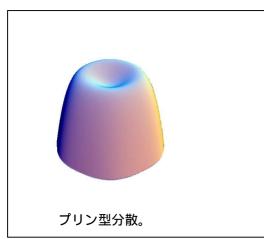
コバルト酸化物 NaxCoO2は 大きな熱起電力 にはじまり、金属磁性、そして水和物におけ る超伝導と、興味深い現象が次々と発見され、 おおいに注目をあびてきた。超伝導について はスピンの揺らぎが関与した、非従来型超伝 導の可能性が高いことが様々な実験から示 唆される。また、この物質のバンド構造をみ ると、3 重縮退した t₂₀ 軌道は a₁₀ と e₀, に分 裂するが、角度分解型光電子分光の実験によ ると、後者のバンドはフェルミ準位以下に沈 んでいることが観測されている。そのため、 a₁₀ バンドが重要な役割を演じている可能性 が高い。我々は a_{1g} バンドが - 点に極小構造 を持つ(図)ことから、内側と外側の二重フ ェルミ面が形成されている可能性があるこ とを指摘し、二つの非連結フェルミ面の間の ネスティングから非整合波数を持つスピン



揺らぎが発達すること、そしてこの揺らぎを 媒介として、二つのフェルミ面間でギャップ の符号が変わる非従来型拡張 s 波超伝導が 発現しうることを、2 次元拡張ハバード模型 に対する FLEX 近似計算を用いて示した。

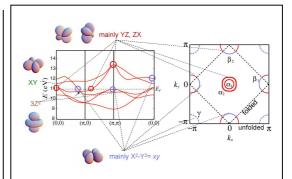
磁性についても a_{1g} バンドの・点での極小構造が重要となる。このバンド構造に起因して 3 次元的なフェルミ面に内側部分と外側部分が生じ、Na 量が多いとき、その間に波数 (0,0,π)をネスティング・ベクトルとするネスティングが生じる。これに起因して、中性子散乱の実験と整合する面内強磁性、面間反強磁性のスピン相関が発達することを FLEX 近似を用いて示した。そして、磁気転移温度、スピン波の分散等を計算し、実験と定量的に整合することを示した。

超伝導、磁性ともに a_{1g} バンドの単一バンド理論でかなりの部分が理解できることから、さらに、熱電効果についても単一バンドの見地から考えた。 a_{1g} バンドの上端部分は比較的平坦であり、中心からある程度離れたところから急激に分散をもつような形状をしている。この形状を我々はプリン型と名付け、



このようなバンド構造は大きな熱起電力と 小さな電気抵抗の両立のために有利である ことを示した。

2008 年 2 月に細野秀雄氏らのグループに より鉄系二クタイド、F-doped LaFeAs0 が 26K の超伝導になることが発見された。その後、 元素置換による同族の化合物も数多く合成 され、50K 超の Tc を持つ高温超伝導の起こる メカニズムに興味が持たれる。超伝導を担う クーパー対の形成は通常、フォノンを媒介と して電子間に生じる引力に起因して起こる が、鉄二クタイドの場合、初期の段階で理論 計算が行われ、高い Tc を説明しうるほど電 子・フォノン相互作用が大きくないことが指 摘された。そこで、黒木のグループは青木の グループと共同で、LaFeAsO に対して第一原 理バンド計算を行い、そこからワニエ軌道を 得ることで、3d バンドに対する多体模型を構 築した。



鉄系超伝導体のバンド構造(左)とフェル ミ面(右)と軌道キャラクター。

この系は波数(0,0)まわりにホール面が、波数 $(\pi,0)(0,\pi)$ まわりに電子面が存在しており、本研究課題の開始当初から我々が超伝導に有利であると予想していた非連結フェルミ面系である。実際、RPA 近似による計算を行うと、ホール面と電子面を指し渡す波数においてスピン揺らぎが発達し、その波数の前後でギャップが符号を反転するs波(s±とでギャップが符号を反転するs波(s±と明はれる)超伝導が起こることが示された。現時点で、この s±ペアリングが鉄系超伝導の最も有力なペアリング状態であると考えられている。

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 38件)

青木

Kazuhiko Kuroki, Hidetomo Usui, Seiichiro Onari, Ryotaro Arita and <u>Hideo Aoki</u>: Pnictogen height as a possible switch between high T_c nodeless and low T_c nodal pairings in the iron based superconductors, Phys. Rev. B 79, 224511/1 -16 (2009) (査読有).

Naoto Tsuji, Takashi Oka, and <u>Hideo Aoki</u>:Nonequilibrium steady state in photoexcited correlated electrons with dissipation, Phys. Rev. Lett. 103, 047403/1 4 (2009) (查読有).

<u>黒木和彦</u>、有田亮太郎、<u>青木秀夫</u>:鉄系超 伝導体における理論的研究の現状 ---有効模型とペアリング機構学、日本物理学 会誌、64,826 835 (2009) (査読無)。

<u>Kazuhiko Kuroki</u>, Seiichiro Onari, Ryotaro Arita, Hidetomo Usui, Yukio Tanaka, Hiroshi Kontani and <u>Hideo Aoki</u>: Unconventional superconductivity originating from disconnected Fermi surfaces in LaO_{1 *}F_{*}FeAs, Phys. Rev. Lett. 101, 087004/1 4 (2008). [erratum: Phys. Rev. Lett. 102, 109902(E) (2009).] (査 読有)

Walid Malaeb, Teppei Yoshida, Takashi Kataoka, Atsushi Fujimori, Masato Kubota, Kanta Ono, Hidetomo Usui, Kazuhiko Kuroki, Ryotaro Arita, Hideo Aoki, Yoichi Kamihara, Masahiro Hirano, and Hideo Hosono: Electronic structure and electron correlation in LaFeAsO_{1 x}F_x and LaFePO_{1 x}Fx, J. Phys. Soc. Japan 77, 093714/1 4 (2008) (査読有).

Takashi Oka and <u>Hideo Aoki</u>: Photo-induced Tomonaga Luttinger-like liquid in a Mott insulator, Phys. Rev. B 78, 241104(R)/1 4 (2008) (査読有). <u>青木秀夫</u>、上田正仁、福山寛:新しい物質科学の創成 - ブレイクスルーに向けて、科学 78, 220-229 (2008) (査読無)。<u>青木秀夫</u>:銅酸化物は超えられるか - 理論の立場から、パリティ、2008年5月号、p.30-37(査読無)。

Shiro Sakai, Ryotaro Arita and Hideo Aoki: Itinerant ferromagnetism in the multiorbital Hubbard model dynamical mean -field study, Phys. Rev. Lett.99, 216402/1 4 (2007) (査読有). Takashi Oka, Norio Konno, Ryotaro Arita and Hideo Aoki: Breakdown of an electric-field driven system --- a mapping to a quantum walk, Phys. Rev. Lett. 94, 100602/1-4 (2005) (査読有). Takashi Oka and Hideo Aoki: Ground state decay rate for the Zener breakdown in band and Mott insulators, Phys. Rev. Lett. 95, 137601/1 4 (2005) (査読有). Onari, Ryotaro Arita, Kazuhiko Kuroki and Hideo Aoki: The spin-triplet superconductivity induced by chargefluctuation in extended Hubbard model, J. Phys. Soc. Jpn 74, 2579 -2585 (2005) (査読有).

Masaki Tezuka, Ryotaro Arita and <u>Hideo Aoki</u>:Density matrix renormalization group study of pairing when electron electron and electron phonon interactions coexist --- an effect of the electronic band structure, Phys. Rev. Lett. 95, 226401/1 4 (2005) (査読有).

内田

Y. Kohsaka, C. Taylor, P. Wahl, A. Schmidt, J. Lee, K. Fujita, J. W. Alldredge, K. McElroy, Jinho Lee, H. Eisaki, <u>S. Uchida</u>, D. H. Lee, and J. C. Davis, "How Cooper pairs vanish

approaching the Mott insulator in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+}$ ", Nature 454, 1072 -1078 (2008) (査読有). H. Iwasawa, J. F. Douglas, K. Sato, T. Masui, Y. Yoshida, Z. Sun, H. Eisaki, H. Bando, A. Ino, M. Arita, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, S. Tajima, S. Uchida, T. Saitoh, D.S. Dessau, and Y. Aiura, "An Isotopic Fingerprint of Electron Phonon Coupling in High -Tc Cuprates", Phys. Rev. Lett. 101, 157005 (2008) (査読有). K. Fujita, I. Grigorenko, J. Lee, W. Wang, J. X. Zhu, J.C. Davis, H. Eisaki, S. Uchida, and A. V. Balatsky, "Bogoliubov angle and visualization of particle hole mixture in superconductors", Phys. Rev. B 78, 054510 (2008) (査読有). J. A. Slezak, Jinho Lee, M. Wang, K. McElroy, K. Fujita, B. M. Andersen, P. J. Hirschfeld, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, "Imaging the impact on cuprate superconductivity of varying the interatomic distances within individual crystal unit cells", Proc. Nat. Acad. Science 105, 3203-3208 (2008) (査読有). Q.Q. Liu, H. Yang, Y. Yu, L.X. Yang, R.C. Yu, F.Y. Li, C.Q. Jin, and S. Uchida, "The superconductivity up to 95 K by tuning order state in Sr2CuO3+ffi", Physica C 463 465, 100-102 (2007) (査読有). H. Kambara, Y. Niimi, M. Ishikado, S. Uchida, and H. Fukuyama, "Temperature dependence of the impurity-induced resonant state in Zn doped Bi₂Sr₂CaCu₂O₈₊ by scanning tunneling spectroscopy", Phys. Rev. B 76, 052506 (2007) (査読有). J. F. Douglas, H. Iwasawa, Z. Sun, A. V. Fedorov, M. Ishikado, T. Saitoh, H. Eisaki, H. Bando, T. Iwase, A. Ino, M. Arita, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, T. Masui, S. Tajima, K. Fujita, <u>S. Uchida</u>, Y. Aiura, and D. S. Dessau, "Unusual oxygen isotope effects in cuprates?", Nature 446, E5 (2007) (査読有). Y. Kohsaka, C. Taylor, K. Fujita, A. Schmidt, C. Lupien, T. Hanaguri, M. Azuma, M. Takano, H. Eisaki, H. Takagi, S. Uchida, and J. C. Davis, "An

Intrinsic Bond Centered Electronic

Underdoped Cuprates", Science 315,

Glass with Unidirectional Domains in

1380 -1385 (2007) (査読有). P. L. Russo, C. R. Wiebe, Y. J. Uemura, A. T. Savici, G. J. MacDougall, J. Rodriguez, G. M. Luke, N. Kaneko, H. Eisaki, M. Greven, O. P. Vajk, S. Ono, Yoichi Ando, K. Fujita, K. M. Kojima, and S. Uchida, "Muon spin relaxation study of superconducting $Bi_2Sr_{2+x}La_xCuO_{6+}$ ", Phys. Rev. B 75, 054511 (2007) (査読有). A. Sugimoto, S. Kashiwaya, H. Eisaki, H. Kashiwaya, H. Tsuchiura, Y. Tanaka, K. Fujita, and S. Uchida, "Enhancement of electronic inhomogeneities due to out of plane disorder in Bi₂Sr₂CuO₆₊ superconductors observed by scanning tunneling spectroscopy", Phys. Rev. B 74,094503 (2006) (査読有). Q. Q. Liu, H. Yang, X. M. Qin, Y. Yu, L. X. Yang, F. Y. Li, R. C. Yu, C. Q. Jin, and S. Uchida, "Enhancement of the superconducting critical temperature of Sr_2CuO_{3+} up to 95K by ordering dopant atoms", Phys. Rev. B 74, 100506(R) (2006) (査読有). Jinho Lee, K. Fujita, K. McElroy, J. A. Slezak, M. Wang, Y. Aiura, H. Bando, M. Ishikado, T. Masui, J. -X. Zhu, A. V. Balatsky, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, "Interplay of electron -lattice interactions and superconductivity in Bi₂Sr₂CaCu₂O₈₊ " Nature 442, 546 550 (2006) (査読有). Yayu Wang, Lu Li, M. J. Naughton, G. D. Gu, S. Uchida, and N. P. Ong, "Field Enhanced Diamagnetism in the Pseudogap State of the Cuprate $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+}$ Superconductor in an Intense Magnetic Field ", Phys. Rev. Lett. 95, 247002 (2005) (査読有). K. Fujita, T. Noda, K. M. Kojima, H. Eisaki, and S. Uchida, "Effect of Disorder Outside the ${\rm CuO_2}$ Plane on Tc of Copper Oxide Superconductors". Phys. Rev. Lett. 95, 097006 (2005) (查 読有). K. McElroy, Jinho Lee, J. A. Slezak. D. H. Lee, H. Eisaki, S. Uchida and J. C. Davis, "Atomic Scale Sources and Mechanism of Nanoscale Electronic Disorder in Bi₂Sr₂CaCu₂O₈₊ " Science 309, 1048-1052 (2005) (査読有). K. McElroy, D. H. Lee, J. E. Hoffman, K. M. Lang, J. Lee, E. W. Hudson, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, "Coincidence of Checkerboard Charge

Order and Antinodal State Decoherence

in Strongly Underdoped Superconducting $\mathrm{Bi}_2\mathrm{Sr}_2\mathrm{CaCu}_2\mathrm{O}_{8+}$ ", Phys. Rev. Lett. 94, 197005 (2005) (査読有). K. Tanaka, T. Yoshida, A. Fujimori, D. H. Lu, Z. X. Shen, X. J. Zhou, H. Eisaki, Z. Hussain, S. Uchida, Y. Aiura, K. Ono, T. Sugaya, T. Mizuno, and I. Terasaki, "Effect of next nearest neighbor hopping t' on the electronic structure of cuprate superconductors", Phys. Rev. B 70, 092503 (2004) (査読有).

小形

M. Mochizuki, Y. Yanase and <u>M. Ogata</u>、Ferromagnetic Fluctuation and Possible Triplet Superconductivity in Na_{0.35}CoO₂1.3H₂O: Fluctuation - Exchange Study of the Multiorbital Hubbard Model, Phys. Rev. Lett. 94, 147005/1-4 (2005) (査読有).

Y. Fuseya, T. Kariyado and $\underline{\text{M. Ogata}}$ 、"Unscreening" Effect of Coulomb Interaction on Fe Pnictide Superconductivity、 J. Phys. Soc. Japan 78,023703-1-4 (2009) (査読有).

上田

T. Suzuki, I. Yamauchi, Y. Shimizu, M. Itoh, N. Takeshita, C. Terakura, H. Takagi, Y. Tokura, T. Yamauchi, and \underline{Y} . Ueda: High pressure 51 V NMR study of the magnetic phase diagram and metal-insulator transition in quasi-one-dimensional β -Na $_{0.33}$ V $_2$ O $_5$, Phys. Rev. B, 79, 2009, 081101(R)/1 4(査読有).

Y. Ueda, M. Isobe, T. Yamauchi, and H. Ueda, Rich Behaviors of Vanadium Oxides under High Pressure, J. Phys. Soc. Jpn. 76, 2007, Suppl. A 100-103(査読有).

- K. Ohgushi, H. Gotou, T. Yagi, Y. Kiuchi, F. Sakai, and \underline{Y} . Ueda, Metal-insulator transition in $Ca_{1-x}Na_xIrO_3$ with post-perovskite structure, Phys. Rev. B 74, 2006, 241104(R)/1 4(査読有).
 - T. Yamauchi, M. Isobe and <u>Y. Ueda</u>, Charge order and superconductivity in vanadium oxides, Solid State Sciences 7, 2005, 874-881. (査読有)

黒木

K. Kuroki, S. Onari, Y. Tanaka, R. Arita, and T. Nojima, "Extended s-wave superconductivity originating from the a1g band in NaxCoO₂•yH₂O: Single band U V model with fluctuation exchange

method", Phys. Rev. B 73, 184503/1 6 (2006). (査読有)

K. Kuroki and R. Arita, "Pudding mold" band drives large thermopower in in Na_xCoO2", J. Phys. Soc. Jpn. 76, 083707/1 4 (2007).(查読有)

[学会発表](計 33件) 青木

<u>Hideo Aoki</u>: Unconventional superconductivity originating from disconnected Fermi surfaces in the iron based compound (招待講演), Int. Conf. on muSR 2008, Tsukuba, 2008

Hideo Aoki: Model construction and pairing symmetry for the iron based oxypnictides (招待講演), Int. Symposium. on Superconductivity, Tsukuba, Oct. 2008

内田

<u>内田慎一</u>: JST 新高温超伝導体国内シンポジウム(丸の内、2008年6月8日). <u>内田慎一</u>: 高温超伝導機構解明の次に見えるもの、超伝導の将来ビジョン 30 年後までを語る(東京大学、2008年6月30日).

- S. Uchida: Introduction and Road to Room Temperature Superconductivity (JST International Symposium on Fe oxipnictide superconductors, Tokyo, June 29, 2008).
- S. Uchida: Role of Apical Oxygen Atoms in High-Tc Superconductivity (The 6th International Conference, Stripe 2008, "Quantum Phenomena in Complex Matter", Erice, Italy, July 27, 2008).
- <u>S. Uchida</u>: Superconductivity (Joint Symposium by Nanyang Technological University and University of Tokyo, Singapore, February 20, 2009).

内田慎一:高温超伝導の謎に迫る、21世紀 COE 極限量子系とその対称性 シンポジウム、(東京大学、2007年11月13日) 内田慎一:より高い Tc をめざして 銅酸 化物、NEDO 新超電導物質調査委員会、成果 報告会(女性と仕事の未来館ホール、2008年2月29日).

- <u>S. Uchida</u>: How to Enhance Tc of cuprate Superconductors? (Workshop on the Road to Room Temperature Superconductivity, Loen, Norway, June 20, 2007).
- S. Uchida: Uniqueness and Mysteries of Cuprate Superconductors and Road to Higher Tc (Summer School, 50th Anniversary of BCS: From BCS to Exotic Superconductivity, Cargese, France,

July 23 and July 24, 2007).

S. Uchida: Intra Multilayer Josephson Plasma Mode in HgBa₂Ca_{n-4}Cu_nO_{2n+2+} (International Conference on Spectroscopies in Novel Superconductors, Sendai, Japan, August 23, 2007).

S. Uchida: 21 Years of HTSC Research: What is done and what is left (International Symposium on Lattice Effects in Cuprate High Temperature Superconductors, Tsukuba, Japan, October 31, 2007).

- S. Uchida: Road to Higher Tc (The 20th International Symposium on Superconductivity, Tsukuba, Japan, November 05, 2007).
- <u>S. Uchida</u>: Tc of Cuprate superconductors: How high can Tc be raised and how low can Tc be reduced? (The 2nd Topical SCENET 2 Workshop and Chem HTSC X1 Workshop, Majorca, Spain, March 16, 2006).
- S. Uchida: Probing Electronic Structure of Correlated Electron Materials at the Atomic Scale (DOE Workshop on the Basic Research Needs for Super conductivity, Arlington, USA, May 8, 2006).
- S. Uchida: Effect of disorder on Tc and electronic inhomogeneity in high Tc cuprates (Kamerling Onnes Prize Lecture, The 8th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors M2S HTSC VIII, Dresden, Germany, July 12. 2006).
- S. Uchida: Phase Competition Induced by Disorder in the Apical Oxygen Block, International Workshop on Electronic States and Disorder Effect in Cuprate Super conductors, Beijing, China, November 9, 2006).

<u>内田慎一</u>:高温超伝導の課題のまとめ、日本物理学界 2006 年秋季大会(千葉大会、2006 年 9 月).

内田慎一: 高温超伝導物語、物性若手夏の学校(妙高高原、2005年8月8-10日). 内田慎一,藤田和博、永崎洋:高温超伝導体電荷不均一性と擬ギャップ、東北大金研ワークショップ「高温超伝導体における特異な電子状態と物性」(仙台、2005年8月24日).

<u>内田慎一</u>:高温超伝導 夢のつづき、応用物理学会支部講演会(名古屋、2006年1月7日).

21 S. Uchida: Role of Disorder in High Tc Superconductivity (The 4th Asia Pacific Workshop on Strongly correlated Systems,

- Beijing, China, May 27, 2005).
- 22 S. Uchida: Inhomogeneity and t' Physics in high Tc Cuprates (Workshop on Complexity in Strongly Correlated Electron Systems, Santa Barbara, USA, July 11, 2005).
- 23 <u>S. Uchida</u>: Grand challenges in Complex Adaptive Matter Correlated Electron Materials (ICAM/I2Annual Conference, Santa Fe, USA, November 12, 2005).
- 24 <u>S. Uchida</u>: Effect of Disorder on Tc and Nanoscale Electronic Inhomogeneity of High -Tc Cuprates (The 6^h Taiwan Korea Japan Symposium on Strongly Correlated Electron Systems and the 4th Workshop on Physics of Metal Oxides, Taroko, Taiwan, December 01, 2005).
- 25 <u>S. Uchida</u>: Physics and Chemistry of Tc in Cuprates (The 10th International Workshop on Chemical Designing and Processing of High -Tc Superconductors and Related Materials, 長津田, November 21, 2004).

小形

M. Ogata and M. Mochizuki: Yamada Conference LXI and The 8th International Conference on Spectroscopies in Novel Superconductors (SNS2007) (Sendai, August 20 24, 2007) "Theoretical Study on the phase diagram of the bilayer sodium cobalt oxides"

上田

- Y. Ueda, Charge order, superconducting and magnetic transitions in low dimensional vanadium oxides, Int. Symposium on Structure Property Relationships in Solid State Materials, SP SSM 2008, 2008/07/01, Nantes (France).
- Y. Ueda, Superconductivity, charge order and magnetic transitions under high pressure in vanadium bronzes, Joint 21st AIRAPT and 45th EFPRG International Conference on High Pressure Science and Technology, 2007/09/19, Catania (Italy).
- <u>Y. Ueda</u>, Have been fascinated with vanadium oxides, Kyoto Conference on Solid State Chemistry, Transition Metal Oxides Past, Present and Future, 2006/11/15, Kyoto (Japan).
- Y. Ueda, Rich Behaviors of Vanadium Oxides under High pressure, ICM Satellite Workshop in Fukuoka, Novel

Pressure -induced Phenomena in Condensed Matter Systems, 2006/08/27, Fukuoka (Japan)

黒木

黒木和彦、鉄砒素系超伝導体の有効模型とペアリング・メカニズム 日本物理学会2008 年秋季大会 2008.9.21 岩手大学

[図書](計2件)

青木

<u>青木秀夫</u>:「超伝導入門」(裳華房、2009、 189頁)。

黒木

<u>黒木和彦</u>:「熱電変換技術ハンドブック(第2章、3-6節)」(NTS、2008、237~248頁)。

[産業財産権]

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

[その他]

ホームページ等

青木

http://www-cms.phys.s.u-tokyo.ac.jp/ 内田

http://lyra.t.u-tokyo.ac.jp/ 小形

http://hosi.phys.s.u -tokyo.ac.jp/ 上田

http:// yueda.issp.u -tokyo.ac.jp/ 里木

http://www.e-one.uec.ac.jp/~kuroki/

6.研究組織

(1)研究代表者

青木 秀夫(AOKI HIDEO) 東京大学・大学院理学系研究科・教授 研究者番号:50114351

(2)研究分担者

- ・内田 慎一(UCHIDA SHIN-ICHI) 東京大学・大学院理学系研究科・教授 研究者番号:10114399
- ・小形 正男 (OGATA MASAO) 東京大学・大学院理学系研究科・教授

研究者番号:60185501 ・上田 寛(UEDA YUTAKA) 東京大学・物性研究所・教授

研究者番号: 20127054 ・黒木 和彦(KUROKI KAZUHIKO) 電気通信大学・電気通信学部・教授

研究者番号:10242091

科学研究費補助金研究成果報告書