

令和元年6月19日現在

機関番号：32702

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K17754

研究課題名（和文）キャリアドーピングされた八ニカム格子ハバード模型の磁性と新奇超伝導の理論

研究課題名（英文）Theoretical study on the magnetism and novel superconductivity in the carrier-doped Hubbard model on the honeycomb lattice

研究代表者

相澤 啓仁 (Aizawa, Hirohito)

神奈川大学・工学部・助教

研究者番号：90586231

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,500,000円

研究成果の概要（和文）：本研究計画では、特徴的なバンド構造を持つ八ニカム格子に注目し、そのハバード模型における磁性と超伝導に対するキャリア・ドーピングの影響を調べた。磁気的性質では、基底状態における磁気転移の臨界クーロン相互作用を評価し、相互作用に対する有限温度の磁気相図を明らかにした。新奇超伝導では、八ニカム格子にキャリア・ドーピングすることで、ディラック点からファン・ホーベ特異点までの間での超伝導競合が確認された。それに加え、特徴的なバンド構造を持つ現実の物質における超伝導状態を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

電子の遍歴性（電子の移動しやすさ）と局在性（電子間斥力による移動しにくさ）が拮抗した強相関電子系での現象の理解は物性物理学の重要な課題の一つであり、キャリア数と格子数の比は重要となる。本研究では、そのような系として八ニカム格子ハバード模型に注目し、キャリア・ドーピングの影響が磁性と新奇超伝導に及ぼす影響を調べた。本研究成果の意義は、通常より大きなサイズでの磁気転移臨界相互作用の評価と相互作用に対する有限温度の磁気相図を明らかにしたことが挙げられる。超伝導研究での意義は、キャリア・ドーピングで新奇超伝導が増強し得ることを示し、さらに現実の物質で新奇超伝導の可能性を検証したことが挙げられる。

研究成果の概要（英文）：In this project, we investigate an effect of carrier doping on the magnetism and novel superconductivity in the Hubbard model on the honeycomb lattice having a characteristic band structure. In magnetic properties, we evaluated a critical Coulomb interaction of the magnetic transition at the ground state and clarified a magnetic phase diagram on a temperature and interaction space. In a novel superconductivity, the pairing competition was confirmed by carrier doping to the honeycomb lattice from Dirac point to van Hove singularity. In addition to that, we clarified the superconducting state in actual materials which have a characteristic band structure.

研究分野：物性物理学理論

キーワード：電子相関 磁性 超伝導 キャリアドーピング 強相関電子系 八ニカム格子 擬一次元系 擬二次元系

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

ハニカム格子では、一電子バンド構造がディラック型分散を持ち、上下のバンド構造がブリルアン・ゾーンの K 点と呼ばれる一点でのみ接触する。この点はディラック点と呼ばれており、バンド構造はこの点に向かって線型な構造、ブリルアン・ゾーンを二次元的に見れば、円錐状の構造を持っている。一方で、ブリルアン・ゾーンの M 点と呼ばれる部分では、電子の状態密度が発散したファン・ホーベ特異点を引き起こす平坦なバンド構造が存在する。このような電子状態の特異性を背景として、活発に研究されている。物質としては、グラフェンが有名であるが、その他の物質として、層状窒化物 $MNCl$ ($M=Hf, Zr$) やイリジウム酸化物 Na_2IrO_3 等が挙げられる。また、より一般的な対象として、トポロジカル状態で線形な分散関係が実現している。

正方格子ハバード模型の $1/2$ フィリングではモット絶縁体となるが、磁気状態に注目してみると、反強磁性が実現している。その状態にキャリア・ドープすることで、 d 波対称性を持った異方的超伝導が現れる。この模型は銅酸化物高温超伝導体の最小模型として、しばしば用いられるが、現実の物質はより複雑な効果を帯びているため、電子・ドープかホール・ドープかで超伝導の挙動が異なる。一方、ハニカム格子ハバード模型の物理には明らかにすべき点がある。近年、 $1/2$ フィリングのハニカム格子ハバード模型の磁気状態において、スピン液体相の可能性が指摘された[1]。一方、大規模な量子モンテカルロ計算[2]等の理論解析の結果では、スピン液体相は確認されず、金属・反強磁性転移が示された。また、 $1/2$ フィリングにキャリア・ドープした時の影響は明らかになっていない。

超伝導状態に関する背景として、通常の超伝導は時間自由度に関する周波数の符号反転に対して、超伝導ギャップの符号は変化しない偶周波数超伝導を形成する。一方、以前から周波数の反転に対して超伝導ギャップの符号が変化する奇周波数超伝導・超流動の可能性が指摘されてきた[3]。特に、奇周波数クーパー対の存在は金属/超伝導接合系等の界面等で実現しているという報告がある[4]。また、我々は電荷ゆらぎが発達した擬一次元系では、奇周波数超伝導が安定化し得ることを明らかにした[5]。ここから、強い一次元性により電子の運動が制限され、空間自由度で異方性を持ったクーパー対の形成が困難となり、周波数空間での異方性により超伝導転移することがあると予想した。これは、空間自由度が制限された特異なフェルミ面における奇周波数超伝導の可能性を示している。ハニカム格子では、ディラック点近傍のフェルミ面は非常に小さなものになるため、特異なフェルミ面の候補の一つと言える。

2. 研究の目的

前述の背景を踏まえ、本研究の目的の一つは、先行研究と異なる計算法やアプローチでハニカム格子ハバード模型の磁性を解析し、 $1/2$ フィリングおよびキャリア・ドープした状態での磁気的挙動を明らかにすることである。この目的に加えて、 $1/2$ フィリングからのキャリアドープの過程において、超伝導状態は発達するのか、そうであればどのような超伝導状態かを明らかにすることも本研究の目的である。

また、新奇超伝導の可能性の探索・検証に関しては、ハニカム格子に限る必要はなく、特徴的なバンド構造やフェルミ面を持つ模型・物質であれば、発現しても不思議ではない。また、このような超伝導が現実の物質で実現しているかを検証することも重要である。それを踏まえ、ハニカム格子で新奇超伝導を探索・検証しつつ、様々な系にも取り組み、特異な超伝導状態が実現する可能性の検証やその安定性を明らかにすることも本研究の目的である。

3. 研究の方法

本研究では、電子の運動エネルギーと電子間クーロン斥力相互作用で構成されたハバード模型を扱う。電子の運動エネルギーは対象によって異なり、ハニカム格子のような単純なものあれば、現実の物質のように複雑なものもある。現実の物質で新奇超伝導を検証する場合は、密度汎関数理論に基づく第一原理計算から強束縛模型を導出する。電子間相互作用としては、短距離で作用するオン・サイト相互作用を考慮する。これは同一サイトに反平行のスピンを持った電子が来た場合に生じるクーロン斥力相互作用である。

これにより生じる電子相関効果を本研究では、乱雑位相近似 (Random Phase Approximation, RPA) 法および二粒子自己無撞着 (Two-Particle Self-Consistent, TPSC) 法という弱相関側からの計算法を用いて考慮する。これらの方法で磁性や超伝導の性質を一電子状態や電子間相互作用、さらに温度変数等を変化させて計算し、ハニカム格子ハバード模型の物理的理解とその系を含む新奇超伝導状態の探索を行った。

4. 研究成果

(1) ハニカム格子ハバード模型における磁性と超伝導について、RPA 法よりも定量的な評価ができる TPSC 法により解析した。この系の $1/2$ フィリングでは、以前から常磁性・反強磁性転移が起こる基底状態の臨界オン・サイト相互作用の値が様々な計算法を用いて議論されており[2][6][7]、多くの研究から $tc/t=3.8$ 程度と見積もられている。ただし、 tc は臨界オン・サイト相互作用、 t はハニカム格子の移動積分の値で単位エネルギーとして、しばしば用いられる。また、近年報告されたスピン液体状態が実現している可能性もある[1]。本研究では、TPSC 解

析により、基底状態の臨界オン・サイト相互作用の評価を行うとともに、有限温度における磁気相図を明らかにする。

磁気転移温度は、スピン感受率を構成するストーナー因子の温度依存性により評価した。磁気転移温度以上であれば、ストーナー因子は1以下であり、1に到達する温度が磁気転移温度となる。ただし、TPSC法はマーミン・ワグナーの定理を満たすため、今回扱うような純粋な二次元系のハニカム格子では磁気転移が起こらない。そのため、ストーナー因子の温度依存性を高温から外挿し、磁気転移温度を評価した。

ストーナー因子の温度依存性が図1(a)である。この図が示すように、温度依存性の外挿によって、 U/t が3.80から3.82の間で温度がゼロになっても1に到達しないことがわかる。各オン・サイト相互作用に対する磁気転移温度を表示した磁気相図が図1(b)である。この相図から、臨界オン・サイト相互作用は約3.81と見積もられ、先行研究の数値とよく一致する結果を得られた。

これを踏まえ、同模型の超伝導状態に関するTPSC解析を行った。温度変数を低温で固定して、超伝導状態の競合を解析した。その結果、ディラック点とファン・ホーベ特異点の間では、キャリア量の変化に対応して超伝導の競合があること、ファン・ホーベ特異点周辺では、超伝導の増強が見られるが、偶周波数超伝導が支配的となる傾向が見出された。ただし、この傾向が広い温度領域でも変わらないか、今後、さらなる検証が必要と考える。

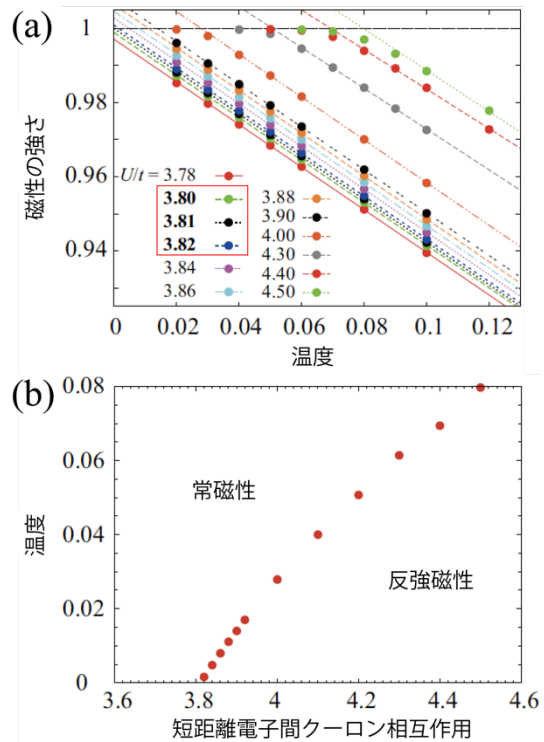


図1: (a) ストーナー因子の温度依存性、(b) 得られた相図

(2) ハニカム格子のディラック点近傍にフェルミ準位がある場合、奇周波数超伝導が比較的発達すること、および我々の以前の擬次元系の研究結果[5]を踏まえ、空間自由度が制限された系では、奇周波数超伝導が優位になり得る。これを、具体的な擬次元物質の超伝導状態について検証した。その中でも擬次元有機導体(TMTSF)₂C10₄では、奇周波数スピン三重項 p 波超伝導が発現している可能性についての報告があった[8]。これを踏まえ、新奇超伝導の可能性を検証するために、対象物質の第一原理計算を行い、強束縛模型を導出した。その後、オン・サイト相互作用を考慮したハバード模型を用いて、この物質の超伝導状態に関するTPSC解析を行った。

各種の超伝導状態と磁気秩序の強さ（線形化エリアシュベルグ方程式の固有値）の温度依存性を表したのが図2である。この図で1に到達した電子状態が、その温度で相転移することを表す。TPSC解析の結果、温度変数を下げていっても、発達し続けるのは偶周波数超伝導状態のみであることがわかった。ハニカム格子ハバード模型における磁気転移温度の評価と同様に、高温の結果から外挿することで偶周波数スピン三重項 d 波超伝導に対する超伝導転移温度が約1~2Kのエネルギーと見積もられた。実際の物質の超伝導転移温度は約1Kであり、TPSC解析の結果はこの傾向をよく記述している。ハニカム格子ハバード模型の臨界オン・サイト相互作用の評価に続き、実物質の超伝導転移温度との関係でも比較的定量的な計算手法と言える。一方、この結果は、最近報告された奇周波数超伝導を示唆する実験[8]とは矛盾するものであり、今後も継続して研究する必要があると考える。

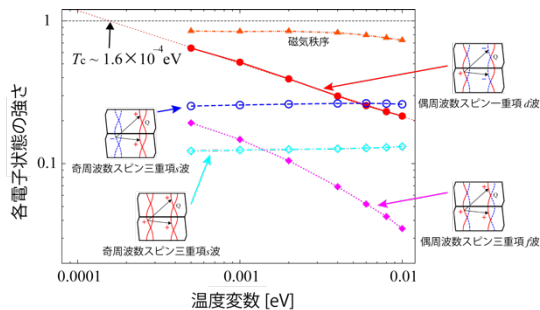


図2: 各種の超伝導状態と磁気秩序の競合に関する温度依存性

(3) ハニカム格子ハバード模型でフェルミ準位がファン・ホーベ特異点近傍にあるとき、超伝導状態や磁気転移温度に興味深い振る舞いが見られることがわかった。これを踏まえ、ファン・ホーベ特異点近傍にフェルミ準位があり、一見矛盾するような複数の実験報告がある物質

の磁性や超伝導の解析を行った。対象物質は λ 型という分子配置をした有機導体で、いくつかの実験から、複数の超伝導ギャップの可能性が報告されていた。一つはフェルミ面上にノードを持つ異方的な d 波超伝導である。他に、2 回の回転対称性を持つ超伝導ギャップという報告や、拡張 s 波超伝導の報告がある。これらが、ファン・ホーベ特異点近傍のフェルミ準位に由来する新奇超伝導の可能性を検証した。

まず対象物質の第一原理計算から強束縛模型を導出し、オン・サイト相互作用の効果を RPA 法で考慮した。RPA 法による解析では転移温度等を定量的に評価するのは難しいものの、超伝導ギャップの異方性等に関しては、定性的な結果を与えると考える。

この物質は化学組成式からバンド・フィリングが決まっており、第一原理計算から得られた強束縛模型を踏まえると、この物質のフェルミ準位がファン・ホーベ特異点近傍にあることが示された。RPA 計算で得られたフェルミ面近傍の超伝導ギャップが図 3 である。フェルミ面に沿って、4 回符号変化するため d 波的超伝導でありつつも、結晶構造の低い対称性を反映したフェルミ面の形状から、2 回の回転対称性であることがわかる。また、図からは分かりにくいですが、超伝導ギャップを対称性の高いギャップで成分分解することにより、拡張 s 波成分が比較的大きく混合してくることも明らかとなった。この結果は、一見矛盾し得る実験を説明する超伝導ギャップであり、ファン・ホーベ特異点を引き起こす平坦バンド近傍のフェルミ面上の超伝導ギャップが強固なものであることに由来すると考えられる。

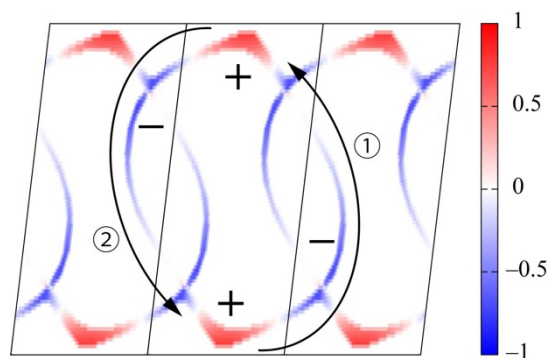


図 3 : λ 型有機導体のフェルミ面近傍の超伝導ギャップ

＜引用文献＞

- [1]. Z. Y. Meng, T. C. Lang, S. Wessel, F. F. Assaad and A. Muramatsu, Nature **464**, 847 (2010)
- [2]. S. Sorella, Y. Otsuka and S. Yunoki, Sci. Rep. **2**, 992 (2012)
- [3]. V. L. Berezinskii, JETP Lett. **20**, 287 (1974)
- [4]. Y. Tanaka and A. A. Golubov, Phys. Rev. Lett. **98**, 037003 (2007)
- [5]. K. Shigeta, Y. Tanaka, K. Kuroki, S. Onari, and H. Aizawa, Phys. Rev. B **83**, 140509 (2011)
- [6]. N. Furukawa, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 1483 (2001)
- [7]. Y. Otsuka, S. Yunoki, and S. Sorella, Phys. Rev. X **6**, 011029 (2016)他
- [8]. F. L. Pratt, T. Lancaster, S. J. Blundell, and C. Baines, Phys. Rev. Lett. **110**, 107005 (2013)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 (計 4 件)

- [1]. Hirohito Aizawa, Takashi Koretsune, Kazuhiko Kuroki, and Hitoshi Seo, Electronic Structure Calculation and Superconductivity in λ -(BETS)₂GaCl₄, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 87, pp. 093701-1-5 (2018) 査読有
DOI: 10.7566/JPSJ.87.093701
- [2]. Hirohito Aizawa, and Kazuhiko Kuroki, Microscopic theory of the superconducting gap in the quasi-one-dimensional organic conductor (TMTSF)₂ClO₄: Model derivation and two-particle self-consistent analysis, Physical Review B, Vol. 97, pp. 104507-1-12 (2018) 査読有
DOI: 10.1103/PhysRevB.97.104507
- [3]. Hirohito Aizawa, Phase diagram of the magnetic state obtained from a two-particle self-consistent analysis of the half-filled Hubbard model on a honeycomb lattice, Journal of Physics: Conference Series, Vol. 969, pp. 012095-1-5 (2018) 査読有
DOI: 10.1088/1742-6596/969/1/012095
- [4]. Hirohito Aizawa and Kazuhiko Kuroki, Superconductivity in an effective model derived from Wannier orbitals for an organic conductor (TMTSF)₂ClO₄, Physics Procedia, Vol. 81, pp. 21-24 (2018) 査読有
DOI: 10.1016/j.phpro.2016.04.009

〔学会発表〕 (計 1 1 件)

- [1]. H. Aizawa, T. Koretsune, K. Kuroki and H. Seo, Electronic Band Structure and Anisotropy of Superconducting Gap in Molecular Conductor λ -(BETS)₂GaCl₄, 4th

- International Conference on Functional Materials Science 2018 (ICFMS 2018) (招待講演) (国際学会), 2018年
- [2]. H. Aizawa, T. Koretsune, K. Kuroki and H. Seo, Electronic Band Structure and Superconducting Gap Symmetry in Organic Conductor λ -(BETS)₂GaCl₄, 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (M²S-2018) (国際学会), 2018年
- [3]. 相澤啓仁, 是常隆, 黒木和彦, 妹尾仁嗣, 有機導体 λ -(BETS)₂GaCl₄ のスピン揺らぎ媒介による超伝導ギャップの異方性 II, 日本物理学会 2018年秋季大会, 2018年
- [4]. H. Aizawa, T. Koretsune, K. Kuroki and H. Seo, Anisotropy of the Superconducting Gap Symmetry in a Model for λ -(BETS)₂GaCl₄ Derived from First-Principles Calculation, 12th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM2017) (国際学会), 2017年
- [5]. H. Aizawa, Two-particle self-consistent analysis for the magnetism and superconductivity in honeycomb lattice Hubbard model, 28th international conference on Low Temperature Physics (LT28) (国際学会), 2017年
- [6]. 相澤啓仁, 是常隆, 黒木和彦, 妹尾仁嗣, 有機導体 λ -(BETS)₂GaCl₄ のスピン揺らぎ媒介による超伝導ギャップの異方性, 日本物理学会 2017年秋季大会, 2017年
- [7]. 相澤啓仁, ハニカム格子ハバード模型における磁気相図と超伝導に関する二体自己無撞着法による解析, 日本物理学会 第72回年次大会, 2017年
- [8]. 相澤啓仁, ハニカム格子ハバード模型におけるキャリアドーピングが磁性と超伝導に与える影響, 第10回物性科学領域横断研究会「凝縮系科学の最前線」, 2016年
- [9]. 相澤啓仁, ハニカム格子ハバード模型におけるキャリアドーピングが引き起こす磁性と超伝導の二体自己無撞着法による解析, 京都大学基礎物理学研究所研究会「超伝導研究の最先端: 多自由度、非平衡、電子相関、トポロジー」, 2016年
- [10]. 相澤啓仁, 黒木和彦, 有機導体 (TMTSF)₂ClO₄ の超伝導ギャップに対するアニオン秩序化ポテンシャルの影響, 日本物理学会 2016年秋季大会, 2016年
- [11]. 相澤啓仁, 黒木和彦, 擬一次元有機導体 (TMTSF)₂ClO₄ における超伝導ギャップとアニオン秩序化ポテンシャルの関係, 平成28年度物性研究所短期研究会「パイ電子系物性科学の最前線」, 2016年

[図書] (計0件)

なし

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

なし

○取得状況 (計0件)

なし

[その他]

ホームページ等

研究代表者

<http://www.n.kanagawa-u.ac.jp/~aizawa/>

6. 研究組織

(1) 研究分担者

なし

(2) 研究協力者

なし

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。