

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 31 日現在

機関番号：82401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26800179

研究課題名(和文)銅酸化物高温超伝導体における超伝導ギャップ関数の動的構造と擬ギャップ

研究課題名(英文) Dynamical structure of superconducting gap function and pseudogap in cuprate high-temperature superconductors

研究代表者

酒井 志朗 (Sakai, Shiro)

国立研究開発法人理化学研究所・創発物性科学研究センター・研究員

研究者番号：80506733

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：銅酸化物高温超伝導体の低エネルギー電子状態を表すと考えられている理論模型について、数値計算に基づいて高温超伝導機構を研究した。特に、電子相関効果を表現する自己エネルギーについて、これまであまり注目されてこなかった電子周波数に依存した構造の解明に主眼を置いて解析した。その結果、高温超伝導及びそれより高温側で見られる異常金属(擬ギャップ)的振る舞いが、電子相関効果によって生じた創発的なフェルミオン励起によって引き起こされていることを見出した。これは、従来のボソン媒介による高温超伝導機構とは一線を画し、また擬ギャップと超伝導の関係についても明確な数学的理解を与えた。

研究成果の概要(英文)：I studied a theoretical model, which is considered to describe the low-energy electronic structure of cuprate high-temperature superconductors, based on numerical calculations. I particularly focused on the frequency-dependent structure of the self-energy, which describes the electronic correlation effect. As a result, I revealed that the high-temperature superconductivity, as well as an anomalous metallic (pseudogapped) behavior observed on its higher-temperature side, is induced by a hidden fermionic excitation emergent from the electron-correlation effect. This high-temperature superconducting mechanism is distinct from the conventional one mediated by bosonic excitations. This study also clarified the mathematical relationship between the pseudogap and the superconductivity.

研究分野：物性理論

キーワード：高温超伝導 銅酸化物 動的平均場理論 動的構造 自己エネルギー 隠れたフェルミオン

1. 研究開始当初の背景

銅酸化物高温超伝導体の最初の発見から30年近くが過ぎようとしており、多くの理論・実験研究が蓄積されていた。特に、2000年代に入ってから、電子の周波数に依存した電子構造(動的構造)を見る角度分解光電子分光法や走査トンネル分光等の実験技術の進展が顕著で、高精度の実験データが報告されてきた。理論面においても動的平均場理論とその拡張手法の進展によって、動的構造を非摂動的に数値計算することが可能となってきた。

しかし、高温超伝導の起源は未解決な重要問題のまま残り続け、特にその高温側で観測される擬ギャップ状態との関係について多くの議論が続いていた。

2. 研究の目的

銅酸化物における高温超伝導発現機構を高精度な数値計算とそれを再現するような現象論の構築によって解明することを目指す。特に、これまでほとんど調べられてこなかった超伝導ギャップ関数の動的構造に注目し、それを先験的な仮定をおかない数値計算によって求め、クーパ対を作る引力の起源、超伝導転移温度が高温となる理由を探る。

また、超伝導相よりも高温側で見られる擬ギャップ状態の電子構造の中には、自己エネルギーが発散する、グリーン関数の零点と呼ばれる構造があり、その構造と超伝導発現機構との関連を明らかにする。

更に、より一般に非従来型超伝導において、超伝導ギャップ関数の構造を数値計算によって求め、その構造がどのように決まるのかという考察を通して、超伝導機構の解明に迫る。

3. 研究の方法

銅酸化物高温超伝導体の本質を抽出した理論模型と考えられている2次元ハバード模型について、先験的な仮定を置かず短距離電子相関効果を全て取り込む非摂動的理論手法であるクラスター動的平均場理論を用いた数値計算に基づく解析を行う。特に電子の周波数に依存した構造(動的構造)に注目する。この目的のために、クラスター動的平均場理論の枠組みの中で解く必要のある不純物問題については、実周波数を直接扱うことのできる厳密対角化法を用いる。この厳密対角化法は従来の適用範囲を超えて、有限温度かつ超伝導状態に拡張したものである。

得られた数値計算結果について、現象論的な模型に基づく考察を行い、物理的描像を明らかにする。

また、超伝導転移温度前後の電子構造の変化を詳細に調べ、擬ギャップと高温超伝導機構との関連を明らかにする。

更に、上述の有限温度・超伝導状態に適用可能な厳密対角化法を用いて、他の非従来型超伝導体を調べ、2次元ハバード模型の結果

と比較することで、その特異性もしくは普遍的な物理を明らかにする。

4. 研究成果

最も重要な成果は、高温超伝導が隠れたフェルミオン励起によって引き起こされることを見出した点にある[発表論文]。擬ギャップも同じフェルミオン励起が超伝導転移温度以上で引き起こすギャップとして自然に理解された。このことは、従来のボソン媒介の高温超伝導機構と一線を画し、また擬ギャップと高温超伝導の関係について明確な数学的理解を与えた。

まず、クラスター動的平均場理論を用いた数値計算によって、電子自己エネルギーの正常成分と異常成分の間の顕著な、しかし、これまで見過ごされてきた関係(ピーク-ピーク対応、重みの打ち消し合いなど)を明らかにした。

この数値計算結果が、従来の創発的ボソン励起では説明困難であり、創発的フェルミオン励起が低エネルギー電子と混成することによって説明できることを発見した。これによって、高温超伝導機構について新しい理解を得ると共に、擬ギャップとの関係も明らかとなった。

論文 では、この理論により電子ラマン分光の実験結果がよく理解できることを示した。また、論文 では、この隠れたフェルミオン励起を無限個考えることで一般の強相関金属・超伝導体の電子構造を一体のハミルトニアンで表現する、という多電子状態の新しい記述方法を提案した。

更に、本研究で開発した理論手法を応用して、冷却フェルミ原子気体と関連のある引力ハバード模型における強結合超伝導状態を調べ、同様の現象論でよく理解できることを示した[]。また、準結晶超伝導体という新たな分野の開拓にも着手した[]。

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 13件)

以下全て査読あり

酒井志朗、今田正俊「銅酸化物超伝導を

「高温」にする隠れたフェルミオン」

固体物理 **52**, No.2, 23-40 (2017).

S. Sakai, N. Takemori, A. Koga, and R.

Arita, 'Superconductivity on a

Quasiperiodic Lattice: Extended-to-

Localized Crossover of Cooper Pairs',

Physical Review B **95**, 024509 (2017).

DOI: 10.1103/PhysRevB.95.024509

R. Arita, T. Koretsune, S. Sakai, R. Akashi,

Y. Nomura, and W. Sano, 'Non-empirical calculation of superconducting transition temperatures in light-element superconductors', *Advanced Materials*, 1602421 (2017).
DOI: 10.1002/adma.201602421

B. Loret, S. Sakai, Y. Gallais, M. Cazayous, M.-A. Measson, A. Forget, D. Colson, M. Civelli, and A. Sacuto, 'Unconventional High-Energy-State Contribution to the Cooper Pairing in the Underdoped Copper-Oxide Superconductor $HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$ ', *Physical Review Letters* **116**, 197001 (2016).
DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.197001

S. Sakai, M. Civelli, and M. Imada, 'Hidden-Fermion Representation of Self-energy in Pseudogap and Superconducting States of Two-Dimensional Hubbard Model', *Physical Review B* **94**, 115130 (2016).
DOI: 10.1103/PhysRevB.94.115130

D. Kubota, S. Sakai, and M. Imada, 'Real-space renormalized dynamical mean field theory', *Physical Review B* **93**, 205119 (2016).
DOI: 10.1103/PhysRevB.93.205119

Y. Nomura, S. Sakai, M. Capone, and R. Arita, 'Exotic s-wave superconductivity in alkali-doped fullerides', *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**, 153001 (2016).
DOI:10.1088/0953-8984/28/15/153001

Shiro Sakai, Marcello Civelli, and Masatoshi Imada, 'Hidden Fermionic Excitation Boosting High-Temperature Superconductivity in Cuprates', *Physical Review Letters* **116**, 057003 (2016).
DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.057003

S. Sakai, M. Civelli, Y. Nomura, and M. Imada, 'Hidden fermionic excitation in the

superconductivity of the strongly attractive Hubbard model', *Physical Review B* **92**, 180503 (R) (2015).
DOI: 10.1103/PhysRevB.92.180503

R. Arita, H. Ikeda, S. Sakai, and M.-T. Suzuki, 'Ab initio downfolding study of the iron-based ladder superconductor $BaFe_2S_3$ ', *Physical Review B* **92**, 054515 (2015).
DOI: 10.1103/PhysRevB.92.054515

Yusuke Nomura, Shiro Sakai, and Ryotaro Arita, 'Nonlocal correlations induced by Hund's coupling: A cluster DMFT study', *Physical Review B* **91**, 235107 (2015).
DOI: 10.1103/PhysRevB.91.235107

Y. Nomura, S. Sakai, M. Capone, and R. Arita, 'Unified Understanding of superconductivity and the Mott transition in alkali-doped fullerides from first principles', *Science Advances* **1**, e1500568 (2015).
DOI: 10.1126/sciadv.1500568

Yusuke Nomura, Shiro Sakai, and Ryotaro Arita, 'Multi-orbital cluster dynamical mean-field theory with an improved continuous-time quantum Monte Carlo algorithm', *Physical Review B* **89**, 195146 (2014).
DOI: 10.1103/PhysRevB.89.195146

〔学会発表〕(計 24 件)

1. 酒井志朗, 「ペンローズ格子上の超伝導の理論研究」、日本物理学会春季大会, 2017/3/20, 大阪大学(豊中市・大阪府)
2. 酒井志朗, 「s 波擬ギャップと隠れたフェルミオン」日本物理学会春季大会, 2017/3/19, 大阪大学(豊中市・大阪府) (invited)
3. S. Sakai, "Hidden fermion connecting Mott physics and high-temperature superconductivity", CEMS-QPEC Symposium on Emergent Quantum Materials, 2017/1/19, 東京大学 (東京都)

4. S. Sakai, “*Superconductivity in a quasiperiodic system*”, CEMS-QPEC Topical Meeting on Superconductivity under Extreme Conditions, 2017/1/17, 東京大学 (東京都)
5. 酒井志朗, 「準周期系の超伝導の研究」, 第6回 強相関電子系理論の最前線 – 若手によるオープン・イノベーション –, 2016/12/20, 勝浦観光ホテル (那智勝浦町・和歌山県)
6. S. Sakai, “*Superconductivity on a quasiperiodic lattice*”, RIKEN-Tsinghua Joint Workshop on Emergent Matter Science, 2016/10/18, Beijing (China) (invited)
7. 酒井志朗, 「銅酸化物高温超伝導体の隠れたフェルミオン励起」, 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」, 2016/9/29, 京都大学 (京都市・京都府) (invited)
8. 酒井志朗, 「モット絶縁体・高温超伝導・擬ギャップを生み出す自己エネルギーの極の間の関係」, 日本物理学会秋季大会, 2016/9/13, 金沢大学 (金沢市・石川県)
9. S. Sakai, “*Hidden fermionic excitation as the origin of pseudogap and high-temperature superconductivity in cuprates*”, International Conference on Low-Energy Electrodynamics in Solids (LEES2016), 2016/5/29, ホテルラフォーレ琵琶湖 (守山市・滋賀県)
10. S. Sakai, “*High-temperature superconductivity induced by emergent fermionic excitation*”, APW-CEMS joint Workshop, 2016/01/26, 理化学研究所 (和光市・埼玉県)
11. S. Sakai, “*Hidden fermionic excitation in high-temperature superconductivity of cuprates*”, International USMM & CMSI Workshop, 2016/01/06, 東京大学 (東京都)
12. 酒井志朗, 「引力ハバード模型の強結合領域に存在する隠れたフェルミオン励起」, 日本物理学会秋季大会, 2015/09/16, 関西大学 (吹田市・大阪府)
13. S. Sakai, “*High-temperature superconductivity induced by a hidden fermionic excitation*”, Materials and Mechanisms of Superconductivity (M2S) 2015, 2015/08/26, Geneva (Switzerland) (invited)
14. 酒井志朗, 「グリーン関数の極と零点 – クラスタ動的な平均場理論に基づく自己エネルギーの非摂動的計算-」, 第一原理多体摂動論ワークショップ, 2015/08/18, 柏市 (invited)
15. 酒井志朗, 「銅酸化物高温超伝導体の動的電子構造の数値計算」, 第60回物性若手夏の学校, 2015/07/29, 岐阜市 (invited)
16. 酒井志朗, 「引力ハバード模型の BEC 領域に存在する隠れたフェルミオン励起」, 京都大学基礎物理学研究所研究会 「多自由度と相関効果が生み出す超伝導の新潮流 ~ BCS から BEC まで~」, 2015/06/10, 京都大学 (京都市・京都府)
17. 酒井志朗, 「動的な平均場理論による銅酸化物超伝導体の擬ギャップ状態と超伝導状態の研究」, 日本物理学会年次大会, 2015/03/21, 東北学院大学 (仙台市・宮城県) (invited)
18. 酒井志朗, 「ギャップ関数の動的構造が示唆する銅酸化物高温超伝導機構」, 日本物理学会春季大会 2015/2/22, 早稲田大学 (東京都)
19. S. Sakai, “*Cluster dynamical mean-field theory for real-frequency properties of cuprate high- T_c superconductors*”,

19. International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations — Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems, 2015/2/18, 東京大学 (東京都)
20. 酒井志朗、「銅酸化物の高温超伝導機構 隠れたフェルミオンの存在の数値計算による実証」、物性研究所計算物質科学研究センター第4回シンポジウム、2014/11/13、東京大学 (柏市・千葉県) (invited)
21. 酒井志朗、「隠れたフェルミオンとの混成による高温超伝導機構」、京都大学基礎物理学研究所研究会「多自由度電子状態と電子相関が生み出す新奇超伝導の物理」、2014/10/22、京都大学 (京都市・京都府)
22. S. Sakai, "High-Tc superconductivity induced by a hidden fermion-type excitation" Trends in Theory of Correlated Materials, 2014/10/8, 青山学院大学 (東京都)
23. S. Sakai, "Evidences of an s-wave structure of the pseudogap in high-Tc cuprate superconductors", Low Energy Electrodynamics in Solids, 2014/6/30, Loire (France)
24. S. Sakai, "Exploring the dark side of high-Tc cuprates: s-wave symmetry of the pseudogap" International Workshop of Computational Nano-Materials Design on Green Energy, 2014/6/1, 大阪大学 (豊中市・大阪府) (invited)

〔図書〕(計 0件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0件)

名称：
 発明者：
 権利者：
 種類：

番号：
 出願年月日：
 国内外の別：

取得状況 (計 0件)

名称：
 発明者：
 権利者：
 種類：
 番号：
 取得年月日：
 国内外の別：

〔その他〕
 ホームページ等
 プレスリリース：
 酒井志朗、Marcello Civelli、今田正俊、
 「銅酸化物の超伝導はなぜ高温か？- 計算シミュレーションにより常識とは異なる、隠れていた複合粒子を発見-」
 (2016年2月2日、東京大学工学部)
http://www.t.u-tokyo.ac.jp/foe/press/setnws_20160202130755407182439514.html

6. 研究組織

(1) 研究代表者
 酒井 志朗 (SAKAI, Shiro)
 国立研究開発法人理化学研究所
 創発物性科学研究センター・研究員
 研究者番号：80506733

(2) 研究分担者
 なし ()

研究者番号：

(3) 連携研究者
 なし ()

研究者番号：

(4) 研究協力者
 ()