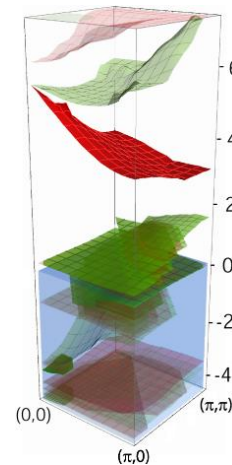
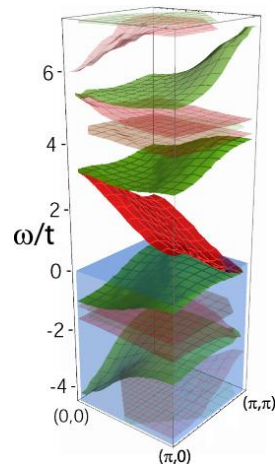


# 銅酸化物高温超伝導体の動的電子構造の数値計算

理化学研究所 創発物性科学研究センター  
酒井 志朗



2015年7月29日 物性若手夏の学校

# 強相関(電子)系

冷却フェルミ原子系

${}^6\text{Li}$ ,  ${}^{40}\text{K}$

The periodic table is color-coded and annotated with several regions:

- Blue boxes:** Highlighted around Li and K in the first column.
- Red box:** Encloses the transition metal block (groups 3-10).
- Green box:** Encloses the lanthanide and actinide series.
- Pink box:** Encloses Carbon (C) in group 14.
- Purple box:** Encloses Helium (He) in group 18.

	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	H															He		
2	Li	Be										B	C	N	O	F	Ne	
3	Na	Mg										Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	L	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	A															
	L			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
	A			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

有機導体( $p$ 電子系)

超流動  
 ${}^3\text{He}$

遷移金属化合物( $d$ 電子系)

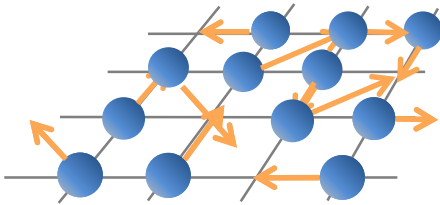
半導体界面

ランタノイド・アクチノイド化合物( $f$ 電子系)

# 強相関電子系とは？

運動エネルギー ～ 相互作用エネルギー

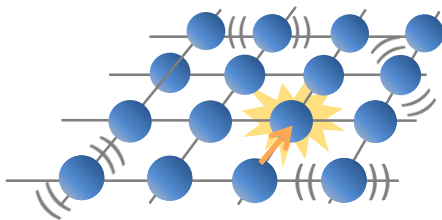
- 運動エネルギー  $\gg$  相互作用エネルギー のとき



金属(フェルミ液体)

遍歴性

- 運動エネルギー  $\ll$  相互作用エネルギー のとき

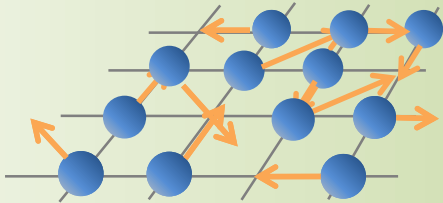


モット絶縁体

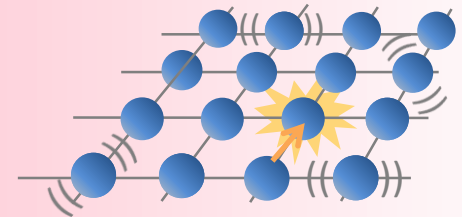
局在性

# 強相関電子系の多彩な物性

遍歴性



局在性



- 高温超伝導
- 分数量子ホール効果
- 巨大磁気抵抗
- モット転移
- 金属強磁性

...

Bednorz, Muller

Laughlin, Stoermer, Tsui

Gruenberg, Fert

Anderson, Mott, van Vleck

ノーベル物理学賞

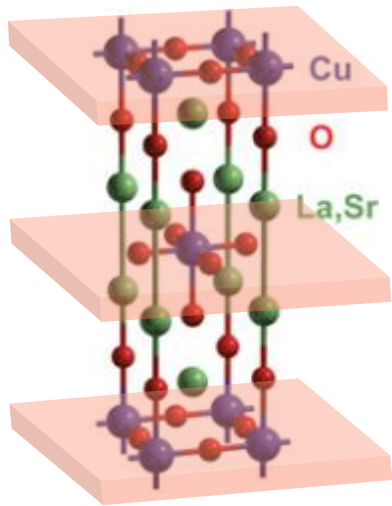
1987

1998

2007

1977

# 銅酸化物高温超伝導体



普通の金属

遍歴性

ホール濃度

25%

15%

5%

0%

擬ギャップ状態  
(異常金属)

$d$ 波超伝導

温度

200K (反強磁性)

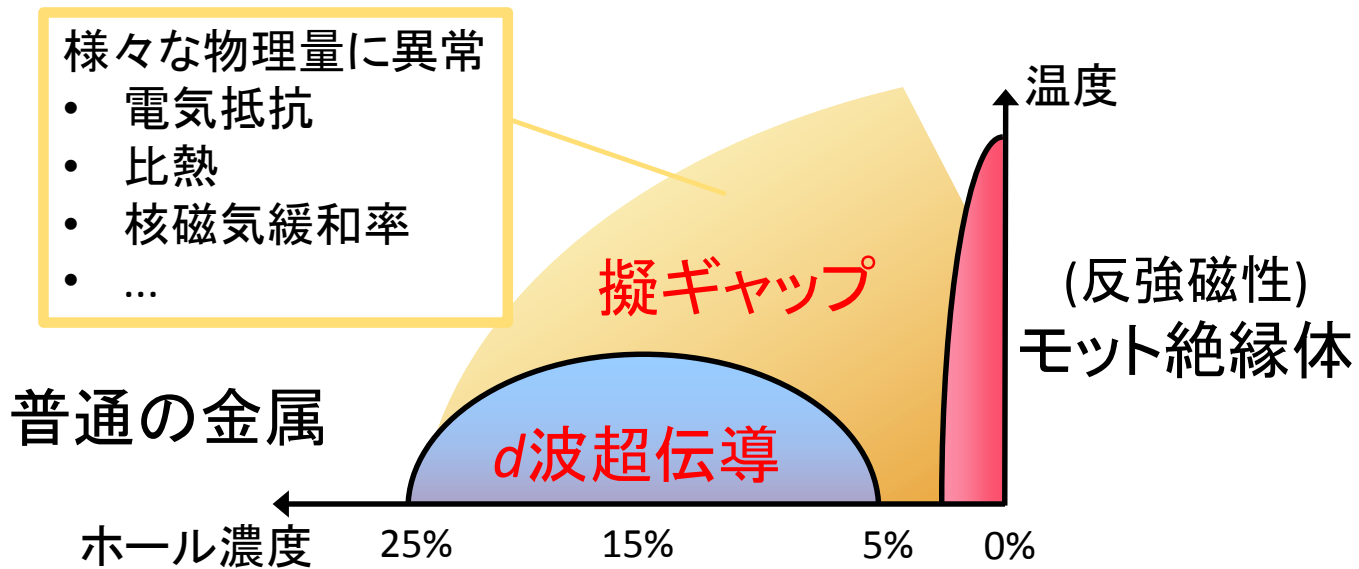
モット絶縁体

100K

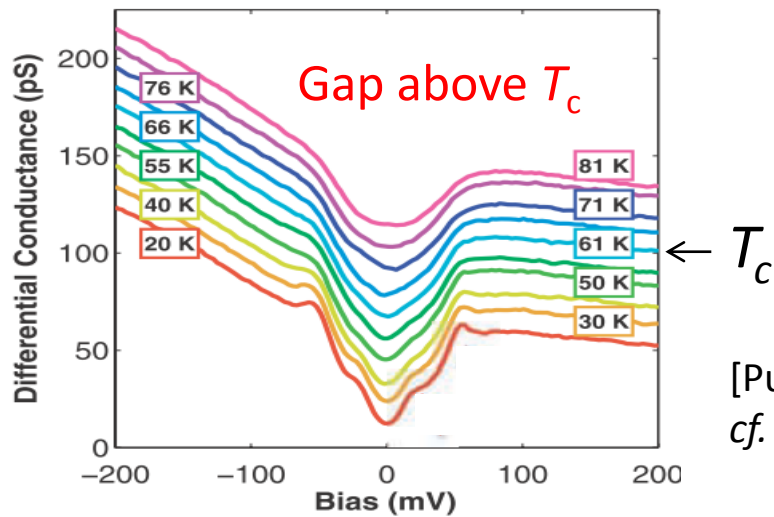
局在性

強相関電子系の典型問題

# 超伝導と擬ギャップの関係は未解明



STM for  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  ( $T_c=61\text{K}$ )

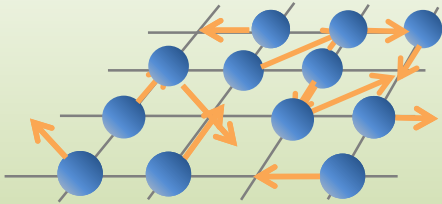


- 超伝導の前駆現象??
- それとも別物??

[Pushp *et al.*, Science'09]  
cf. Renner *et al.*, PRL'98

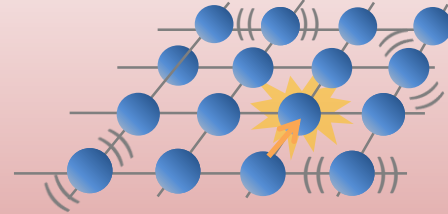
# 遍歴性と局在性

## 遍歴性



金属(フェルミ液体)

## 局在性



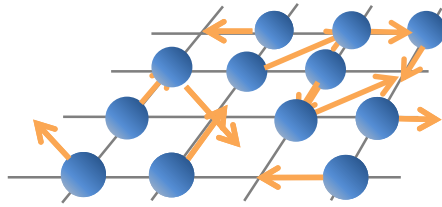
モット絶縁体

電子の平均自由行程が  
電子の有効質量が

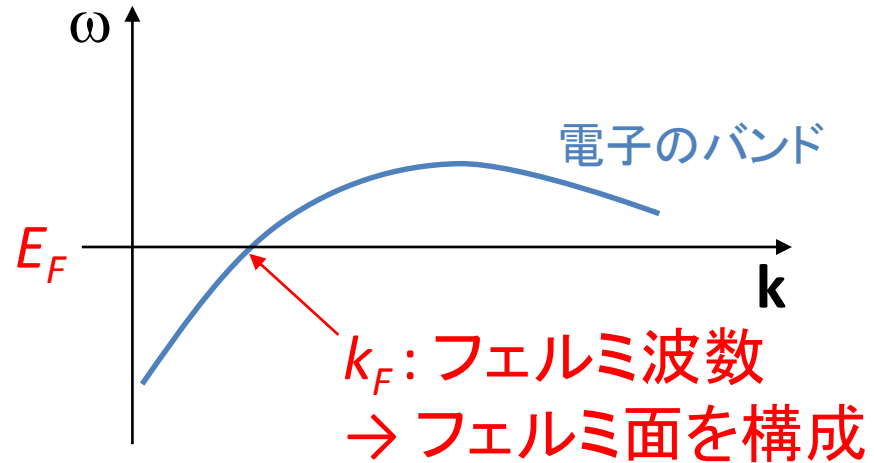
長い / 短い  
軽い / 重い

もっと根本的に、グリーン関数(場の理論)の言葉では？

# “遍歴性”の微視的表現



金属(フェルミ液体)



金属 = (フェルミ面が存在)  
= (電子のバンドが $E_F$ を横切る)

## 電子のバンド

準粒子方程式  $\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = 0$  の解  $\omega = \omega(\mathbf{k})$

$\Sigma$ : 自己エネルギー

## 一電子グリーン関数

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}$$

$G^{-1}$ の実部 = 準粒子方程式



# “遍歴性” = “ $G$ の極”

金属 = (フェルミ面が存在)

= (電子のバンドが $E_F$ を横切る)

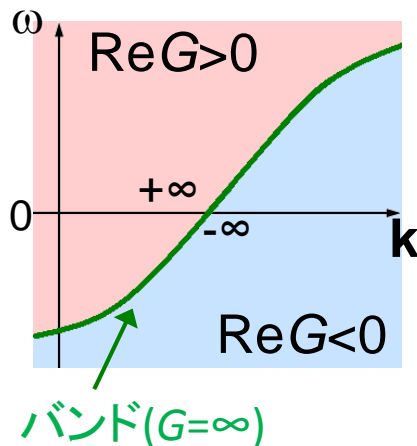
バンド  
= ( $\omega - \varepsilon_k - \text{Re}\Sigma = 0$ の解)

= (準粒子方程式が $E_F$ に解をもつ&準粒子が存在)

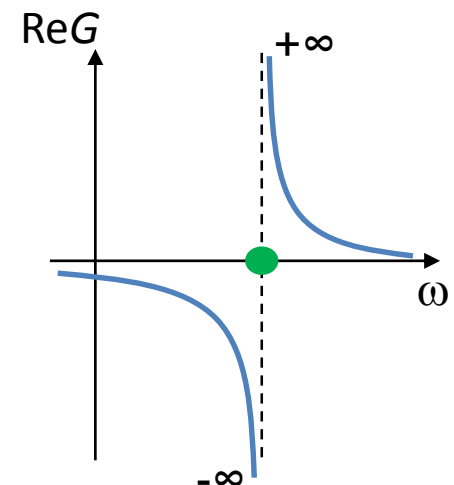
= ( $\exists k, E_F$  で  $\text{Re}G^{-1} = 0$ 、 $\text{Im}G^{-1} = \text{Im}\Sigma \rightarrow 0$ )

$$G = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma}$$

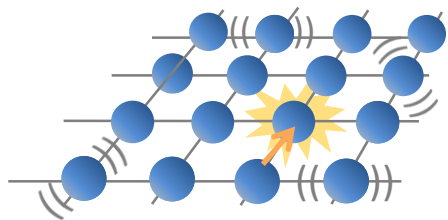
= ( $G$ が $E_F$ に発散点(一位の極)をもつ)



$k$ を固定して見ると

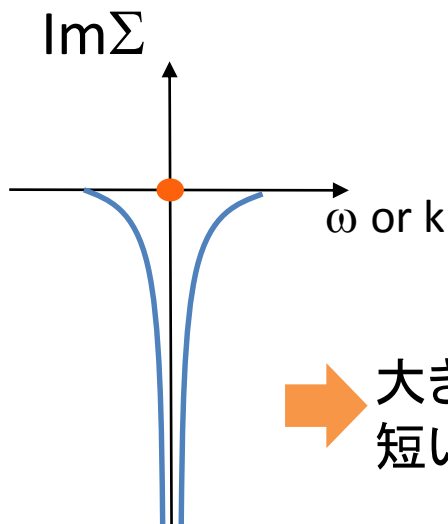
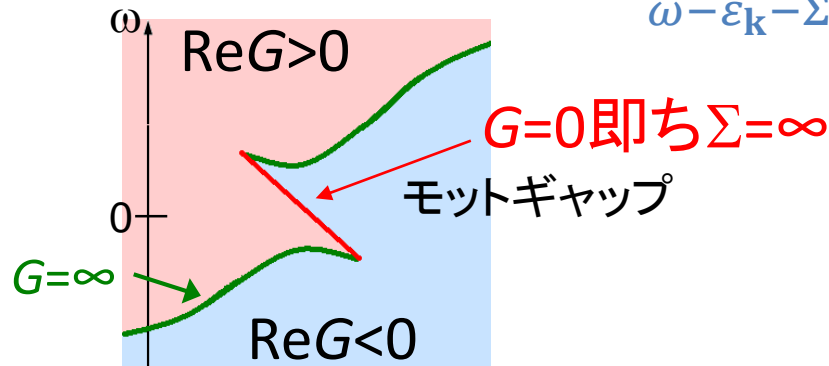


# “局在性”=“ $\Sigma$ の極”

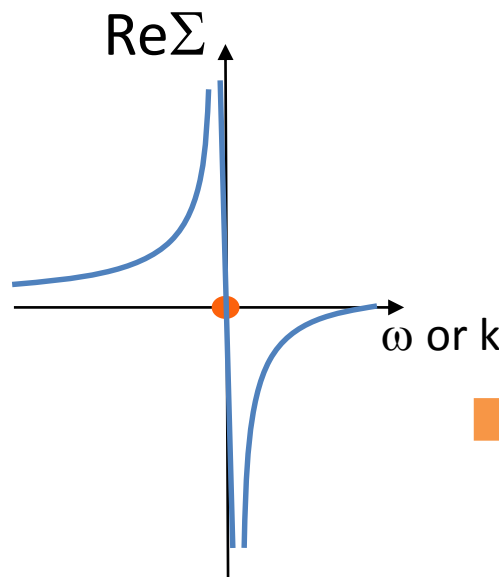


モット絶縁体

$$G = \frac{1}{\omega - \epsilon_k - \Sigma}$$



➡ 大きな散乱  
短い平均自由行程



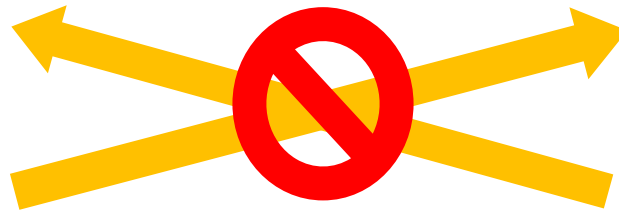
➡ 有効質量の発散

準粒子方程式  
 $\omega - \epsilon_k - \text{Re}\Sigma = 0$

# $G$ の極と $\Sigma$ の極

$G$ の極  
(遍歴性)

弱結合摂動論



$\Sigma$ の極  
(局在性)

強結合摂動論

非摂動論的手法が必要

- 密度行列繰り込み群
- 厳密対角化
- 量子モンテカルロ法
- 変分モンテカルロ法
- (クラスター)動的平均場理論

2次元

熱力学極限

低温

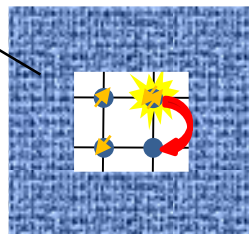
動的な量(実周波数)

# クラスター動的平均場理論(CDMFT)

[Kotliar *et al.*, PRL **87**, 186401 (2001)]

有効クラスター模型(解ける)

$g_0(i\omega_n)$ : 動的平均場



厳密対角化

量子モンテカルロ法

数値解

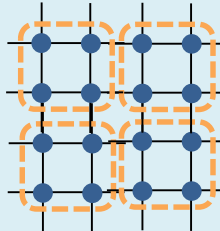
$\hat{\Sigma}^c(i\omega_n)$

自己無撞着条件

$$[\hat{g}_0(i\omega_n)]^{-1} = [\hat{G}(i\omega_n)]^{-1} + \hat{\Sigma}^c(i\omega_n)$$

Hubbard模型(解けない)

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$



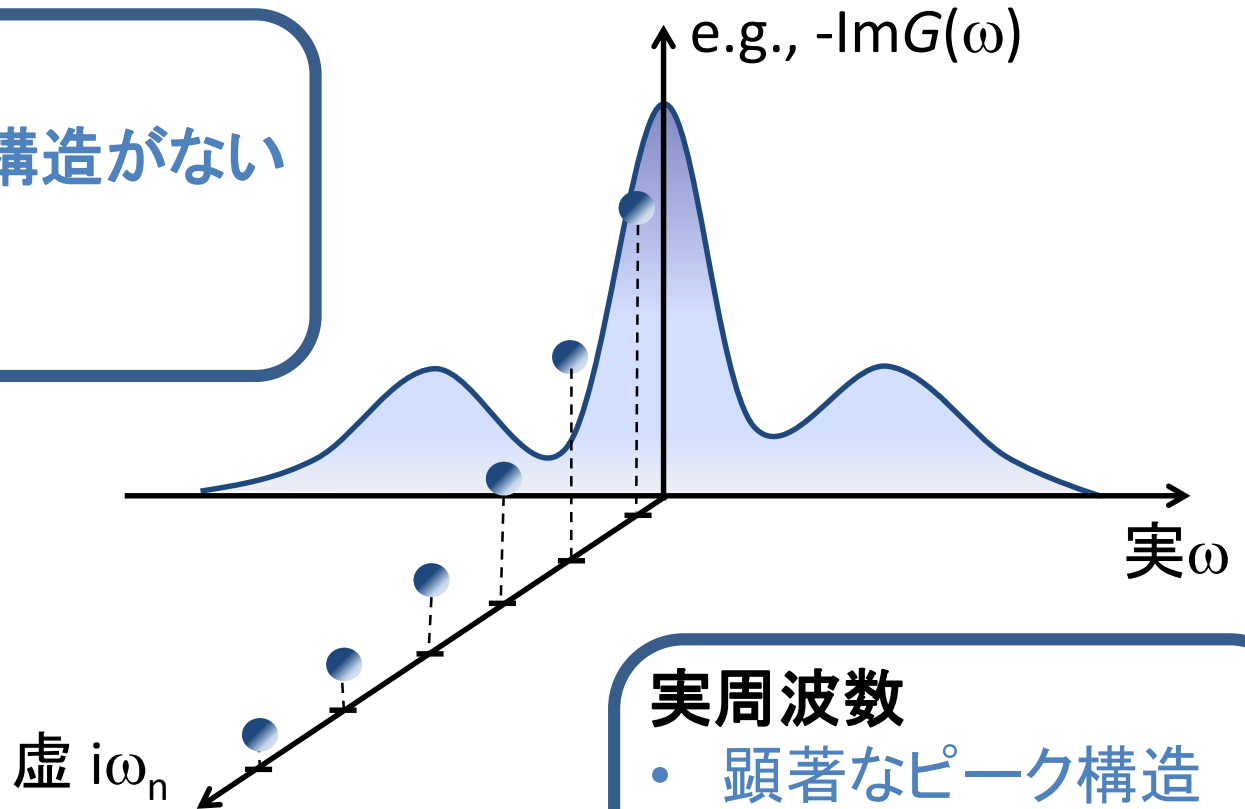
$$\hat{G}_{ij}(i\omega_n) = \int_{\text{RBZ}} d\mathbf{k} \left[ (i\omega_n + \mu)\hat{I} - \hat{\varepsilon}(\mathbf{k}) - \hat{\Sigma}^c(i\omega_n) \right]_{ij}^{-1}$$

クラスター内の相関は全て取り入れる

# 動的電子構造

## 松原(虚)周波数

- パツと見、あまり構造がない
- 計算しやすい
- 先行研究多数



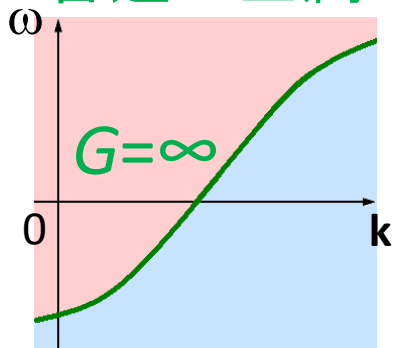
## 実周波数

- 顕著なピーク構造
- 手法が限られる
- 先行研究も多くない
- 実験と直接対応

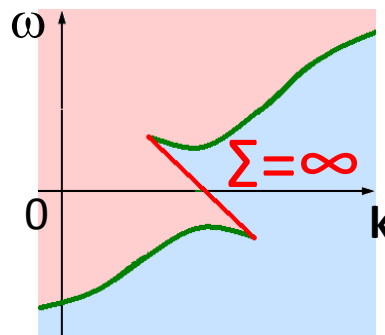
数学的には等価だが、数値計算結果から電子状態に関する情報を読み取るには実 $\omega$ が有利！

# 擬ギャップ状態の動的電子構造

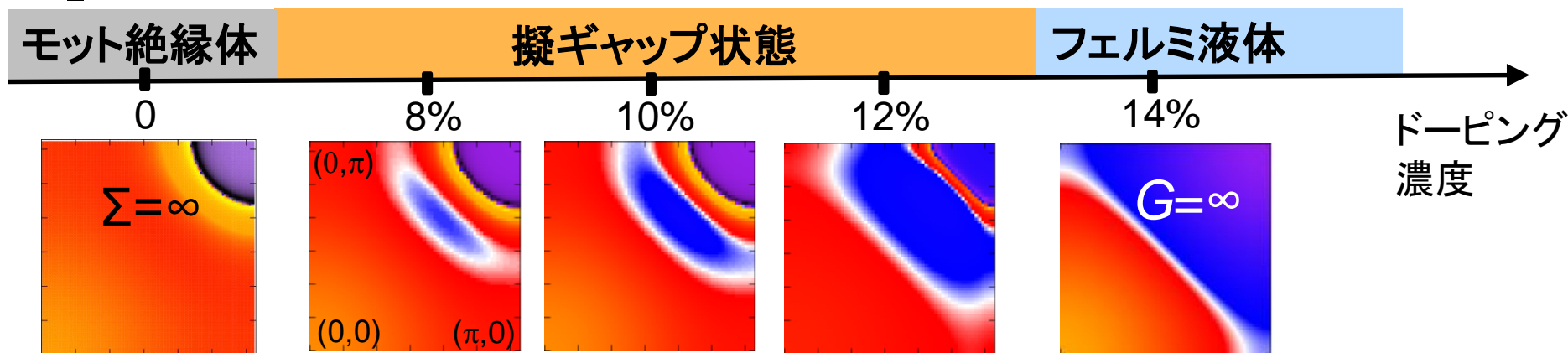
普通の金属



モット絶縁体

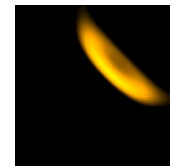


$\omega = E_F = 0$ での構造

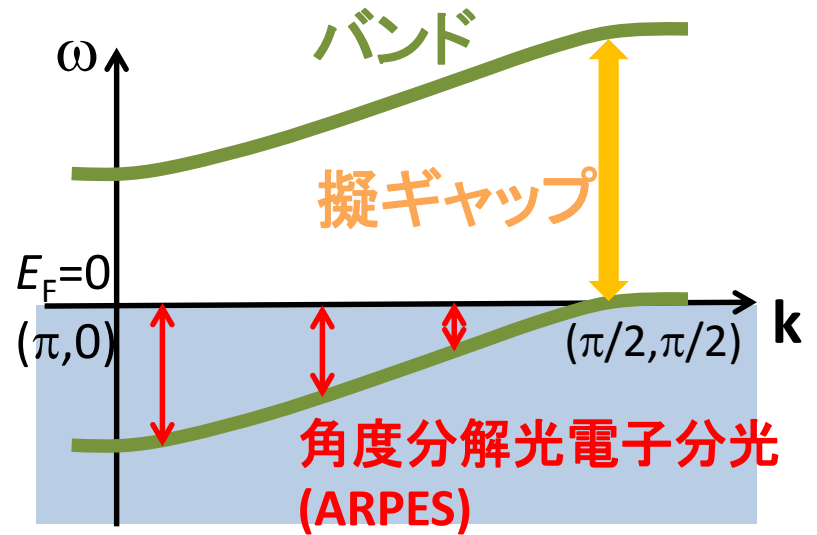
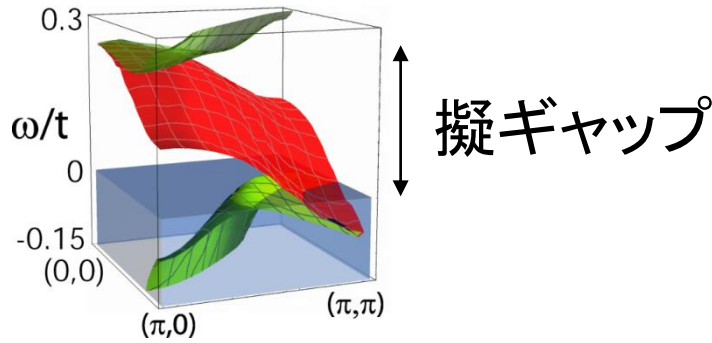


フェルミアークなどの様々なスペクトル異常を説明

[S.S., Y. Motome, and M. Imada, PRB82, 134505 (2010).]



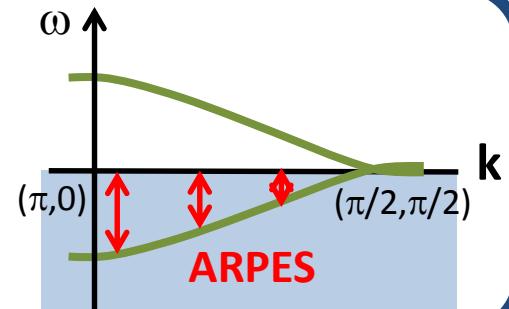
# “s”波擬ギャップ



- ギャップがk空間全体で有限
- ギャップのエネルギー位置がk依存  
→ s波なのにフェルミ面あり

## 通常「仮定」されてきたd波擬ギャップと

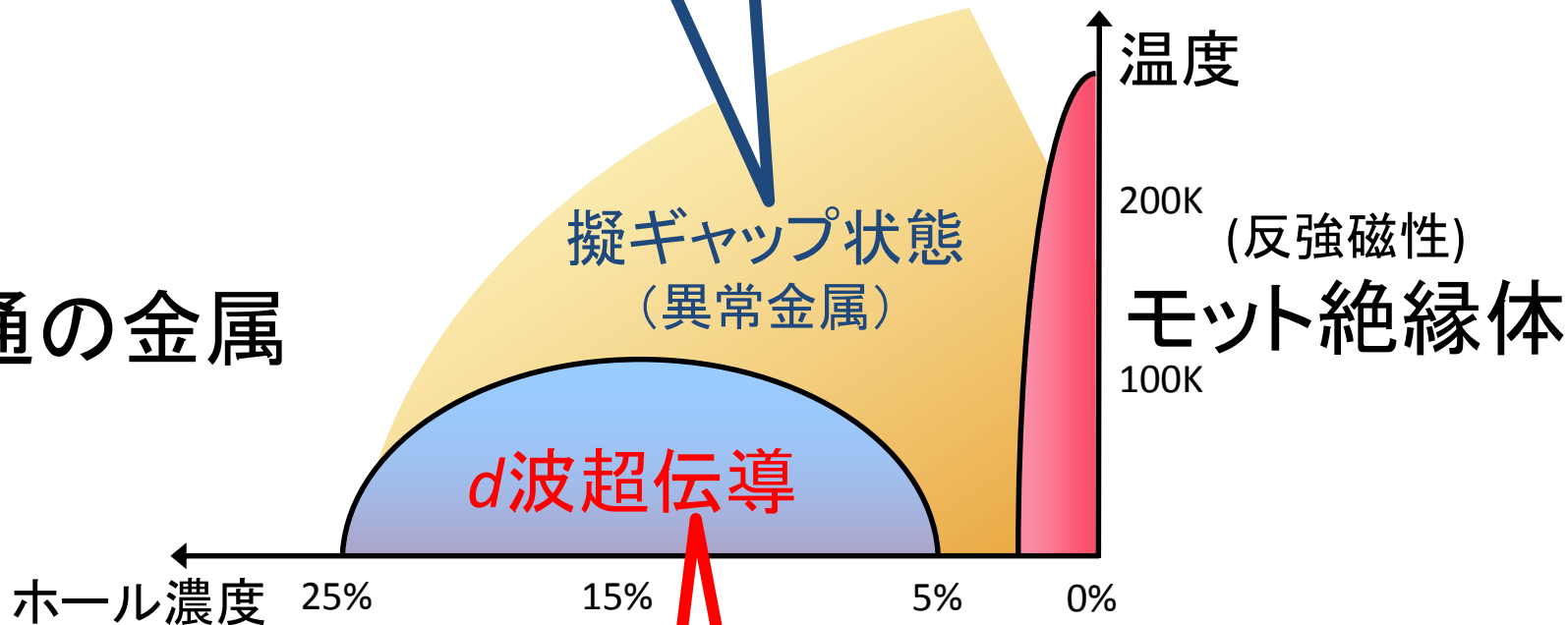
- $E_F$ 以下は同じ
- $E_F$ より上が違う



ARPES、STM、ラマン分光のデータに間接的な証拠あり

[SS, S. Blanc, M. Civelli *et al.*, PRL **111**, 107001 (2013).]

普通の金属

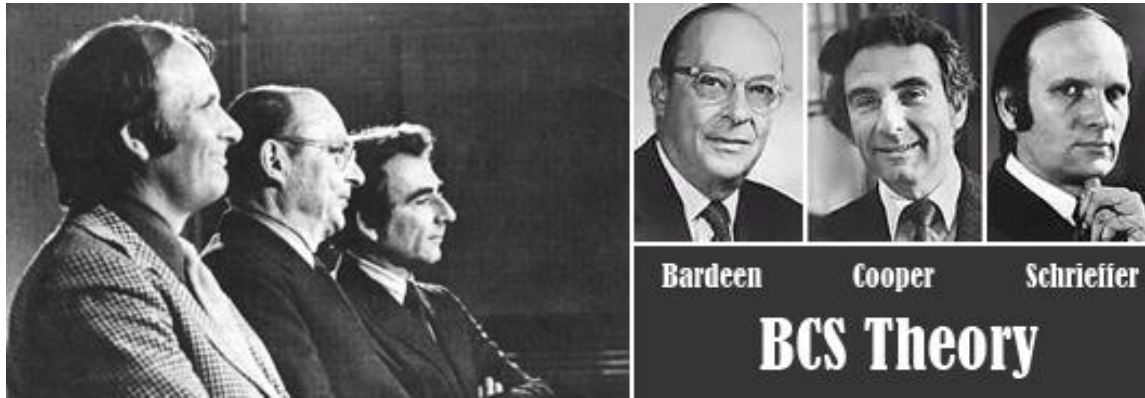


ここまで

ここから



# BCS理論 (1957)



<http://physics.illinois.edu>

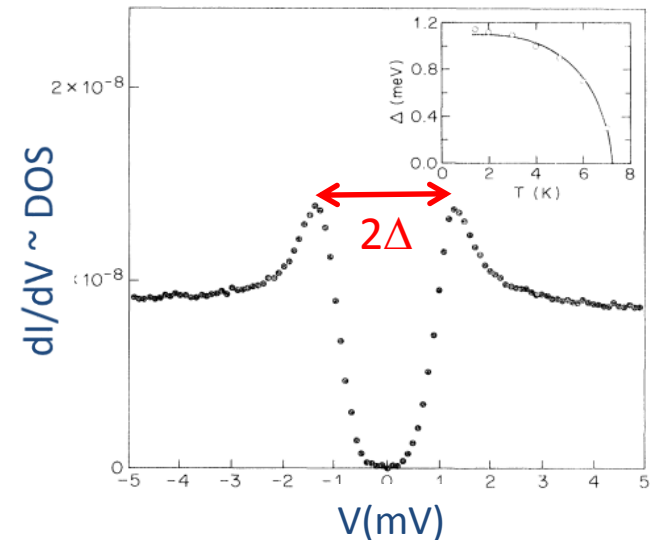
平均場ハミルトニアン

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta (c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)$$

→  $\text{DOS}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega \pm \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2})$

$\Delta$ : 超伝導ギャップ

静的な量 ( $\omega$  に依存しない)



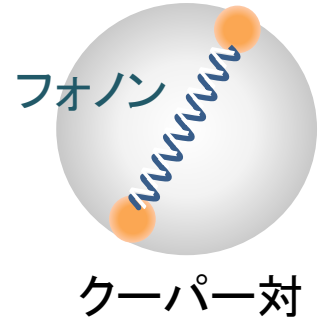
STM for NbSe<sub>2</sub> [Hess et al., PRL'89]

# 実は $\Delta$ は $\omega$ に依存する

Eliashberg理論(1960): フォノン媒介超伝導体の微視的理論

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} \alpha_{\mathbf{q}} (b_{-\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$$

電子 フォノン



$$\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \begin{pmatrix} \overset{\text{正常部分}}{\Sigma^{\text{nor}}(\mathbf{k}, \omega)} & \overset{\text{異常部分}}{\Sigma^{\text{ano}}(\mathbf{k}, \omega)} \\ \Sigma^{\text{ano}}(\mathbf{k}, \omega) & -\Sigma^{\text{nor}}(\mathbf{k}, -\omega)^* \end{pmatrix}.$$

ギャップ関数の定義

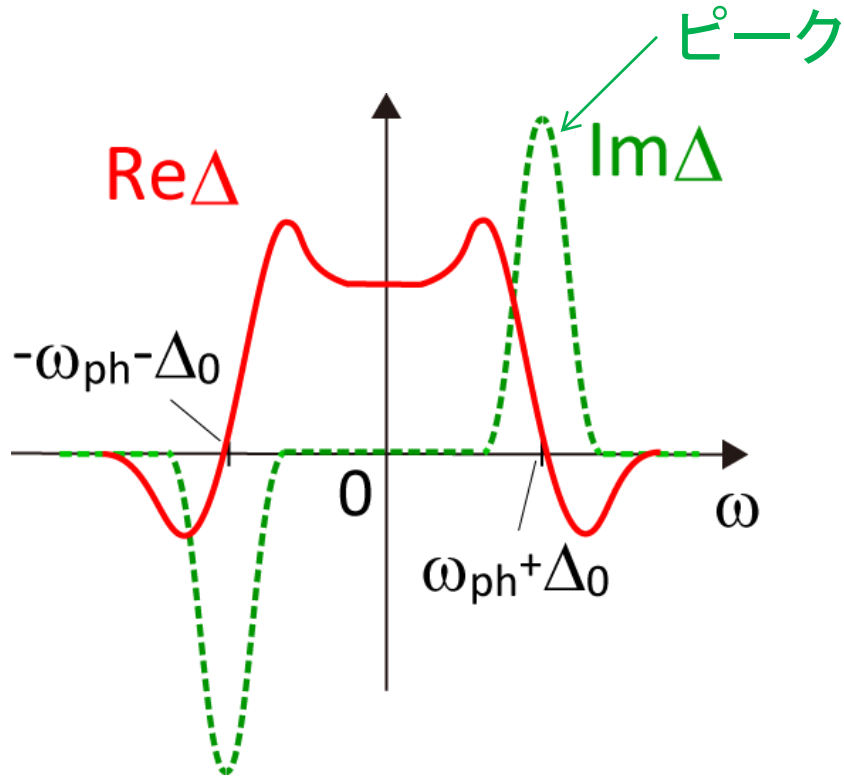
[Scalapino, Schrieffer, Wilkins, PR 148, 263 (1966)]

$$\Delta(\mathbf{k}, \omega) \equiv \frac{\Sigma^{\text{ano}}(\mathbf{k}, \omega)}{1 - \frac{1}{2\omega} \left[ \Sigma^{\text{nor}}(\mathbf{k}, \omega) - \Sigma^{\text{nor}}(\mathbf{k}, -\omega)^* \right]}$$

BCS的な意味でのギャップは $\Delta(\mathbf{k}, \omega=0)$

# 普通の超伝導体の場合

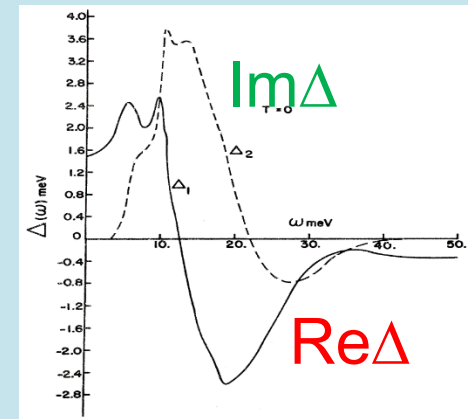
① 依存性はフォノンで決まる！



$\omega_b =$  フォノン振動数  
 $\Delta_0 =$  ギャップ端(定数)

フォノン機構を決定づけた！

トンネル伝導度の実験



一致！  
フォノンピーク構造

中性子散乱

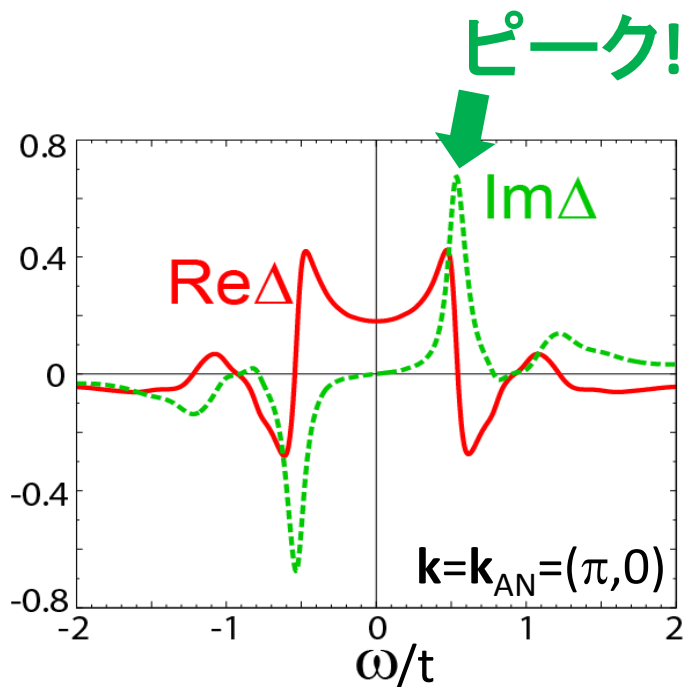
[McMillan&Rowell'65;  
Vashishta&Carbotte'73]

# 銅酸化物高温超伝導体の場合

$\Delta$ の $\omega$ 依存性は未解明

理論予測(2次元ハバード模型のCDMFT)

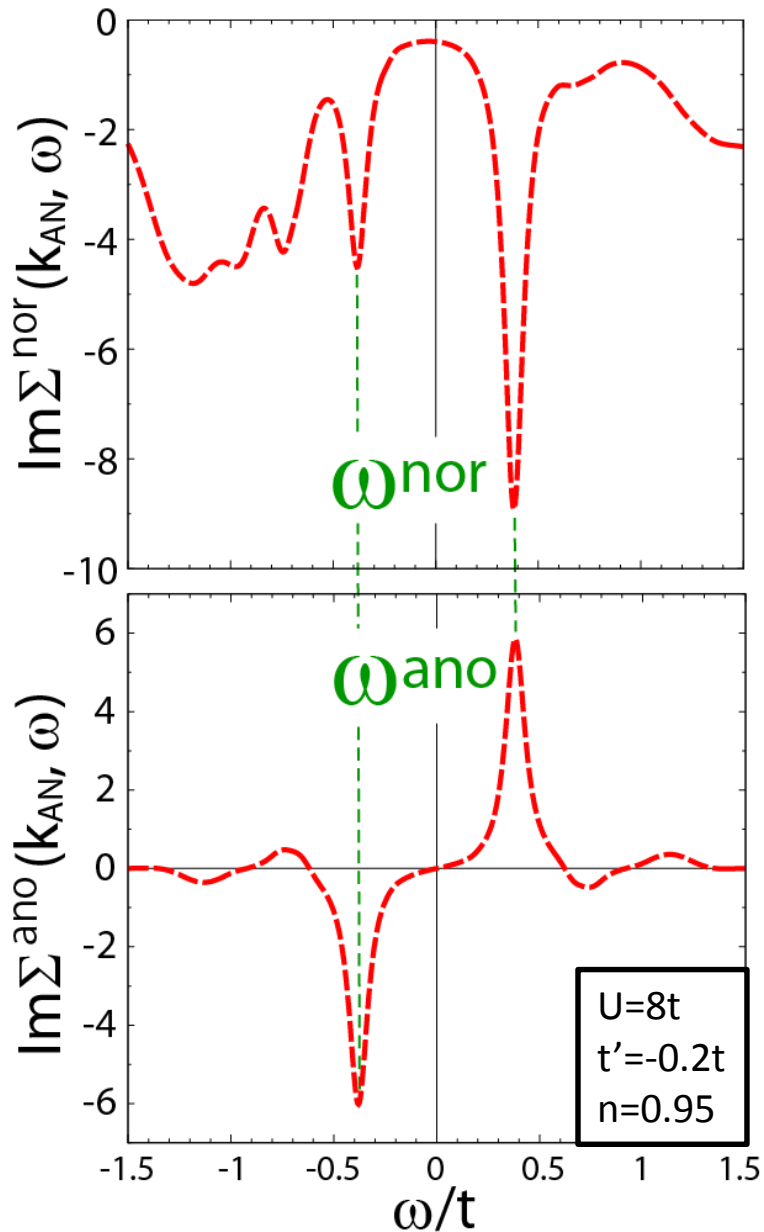
[Maier, Poilblanc & Scalapino, PRL **100**, 237001 (2008)]



$\text{Im}\Delta$ のピークが $\text{Re}\Delta(0)$ の値を押し上げている  
(Kramers-Kronig変換)、つまり、  
超伝導を“高温”にしている!!

ハバード模型に自明なボソンはいない・・・  
このピークの起源はなんだろう？

# $\Sigma^{\text{nor}}$ と $\Sigma^{\text{ano}}$ の密接な関係

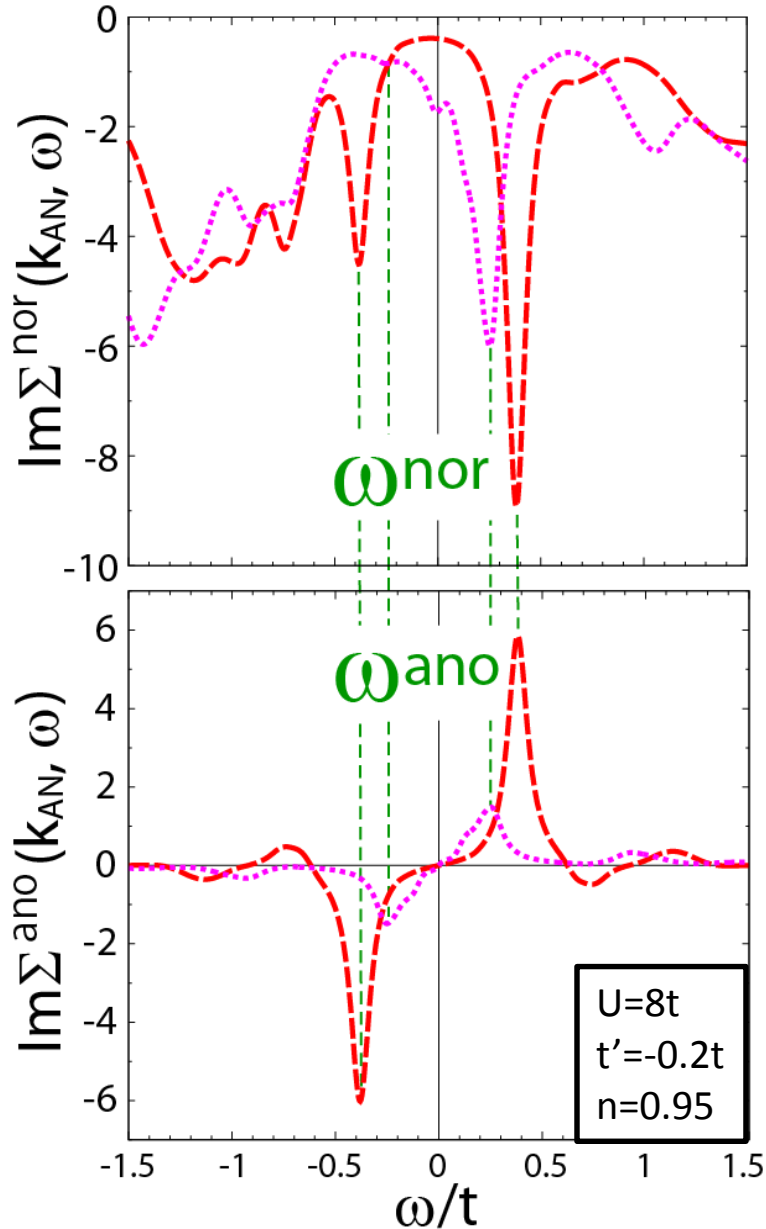


$T=0.01$  ---

$\text{Im}\Delta$ のピークと関連

- $\text{Im}\Sigma^{\text{nor}}$  と  $\text{Im}\Sigma^{\text{ano}}$  は、同じエネルギーにピークを持つ！

# $\Sigma^{\text{nor}}$ と $\Sigma^{\text{ano}}$ の密接な関係



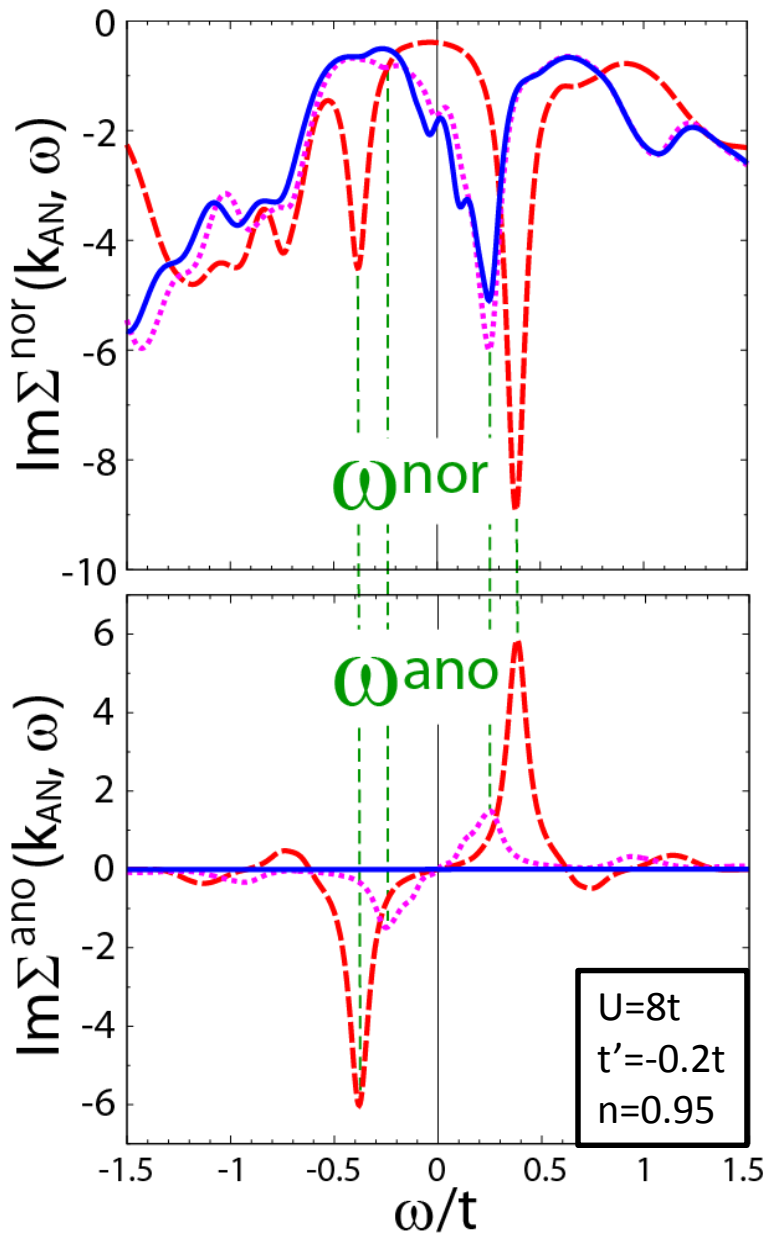
$T=0.01$  ---

$0.05$  .....

Im $\Delta$ のピークと関連

- $\text{Im}\Sigma^{\text{nor}}$  と  $\text{Im}\Sigma^{\text{ano}}$  は、同じエネルギーにピークを持つ！
- ピークが縮小

# $\Sigma^{\text{nor}}$ と $\Sigma^{\text{ano}}$ の密接な関係



$T=0.01$  ---

$0.05$  .....

$0.06$  — (above  $T_c$ )

$\text{Im}\Delta$ のピークと関連

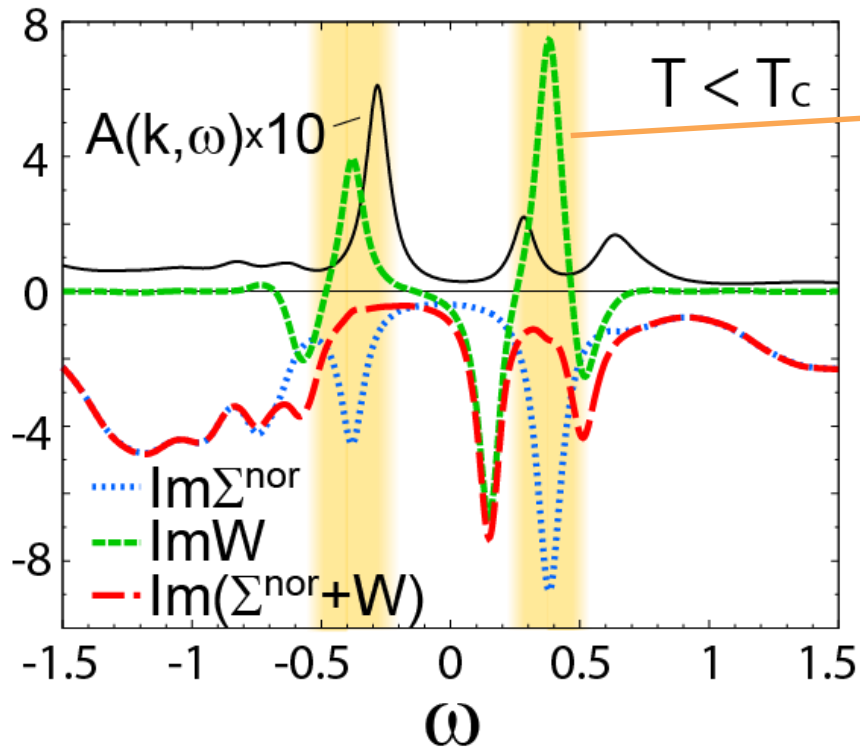
- $\text{Im}\Sigma^{\text{nor}}$  と  $\text{Im}\Sigma^{\text{ano}}$  は、同じエネルギーにピークを持つ！
- ピークが縮小
- $\Sigma^{\text{ano}}$ は消え、 $\Sigma^{\text{nor}}$ は残る。  
→ 擬ギャップ
- $\text{Im}\Sigma^{\text{nor}}$ は $T_c$ 前後でほぼ不変  
→ 擬ギャップと超伝導に関係

# 自己エネルギーの極の打ち消し合い

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \left[ \omega + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma^{\text{nor}}(\mathbf{k}, \omega) - W(\mathbf{k}, \omega) \right]^{-1}$$

$$W(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\Sigma^{\text{ano}}(\mathbf{k}, \omega)^2}{\omega - \mu + \varepsilon_{\mathbf{k}} + \Sigma^{\text{nor}}(\mathbf{k}, -\omega)^*}$$

$U=8t$   
 $t'=-0.2t$   
 $n=0.95$   
 $T=0.01$   
 $k=k_{\text{AN}}$



$\Sigma^{\text{nor}}$  と  $W$  が打ち消し合う!

$\Sigma^{\text{nor}}$  と  $\Sigma^{\text{ano}}$  の極の"重み"  
 にも非自明な関係



# 低エネルギー有効模型(現象論)

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[ \varepsilon_c(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_f(\mathbf{k}) f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + V(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}) \right] \\ - \sum_{\mathbf{k}} \left[ D_c(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} + D_f(\mathbf{k}) f_{\mathbf{k}\uparrow} f_{-\mathbf{k}\downarrow} + \text{h.c.} \right]$$

$c$ : 準粒子、 $f$ : 隠れたフェルミオン励起(未同定)

$f$ 自由度を積分して消すと

$$\Sigma_c^{\text{nor}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{V^2(\omega + \varepsilon_f(\mathbf{k}))}{\omega^2 - \varepsilon_f(\mathbf{k})^2 - D_f(\mathbf{k})^2}, \quad \Sigma_c^{\text{ano}}(\mathbf{k}, \omega) = D_c(\mathbf{k}) - \frac{V^2 D_f(\mathbf{k})}{\omega^2 - \varepsilon_f(\mathbf{k})^2 - D_f(\mathbf{k})^2}$$

- 同じエネルギー  $\omega = \pm \sqrt{\varepsilon_f^2 + D_f^2}$  に極をもつ
- $\Sigma^{\text{nor}}$  と  $W$  の極が打ち消し合うことも示せる
- その他にもいろいろと、**CDMFTの結果をととてもよく説明**

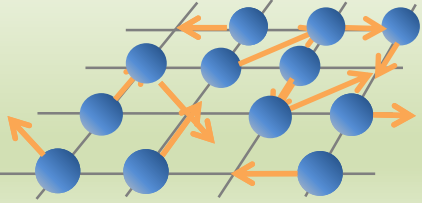


**$\Delta$ のピークの起源は、何らかのフェルミオン励起**

**↔ Eliashberg理論(ボソンを仮定)**

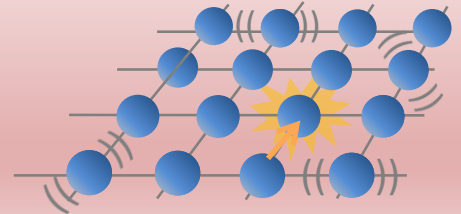
# まとめ

遍歴性=“ $G$ の極”



強相関電子系

局在性=“ $\Sigma$ の極”



## 銅酸化物高温超伝導体

- 実 $\omega$ 構造解明が大事
- 擬ギャップと超伝導ギャップは異なるが、互いに強く関連
- 隠れたフェルミオンの励起が超伝導を高温にする

