

学位申請論文公聴会

申請者： 川口 功起 (Sc 研)

日時： 2021年1月29日 13:00 ~

場所： Zoom

題目： 銅酸化物高温超伝導体における電子相関に由来する電子ネマティック秩序

主論文の要旨

強相関電子系は多様な電子状態を形成する。特に近年では回転対称性が破れるネマティック秩序が注目されている。銅酸化物高温超伝導体の電子状態は磁性, 超伝導, ネマティック秩序が相関し合う複雑な電子状態を形成する。常圧で最も高い超伝導転移温度 T_C を持つことから、この電子状態の起源と性質を解明することは凝縮系物理学の重要な問題である。その中でも特に重要なものが、 $T > T_C$ でギャップが開いているように観測される擬ギャップ現象である。近年、擬ギャップ温度 T^* 以下で2つの電子ネマティック転移が起こることが観測された。1つは $T = T^*$ での一様 ($\mathbf{q} = \mathbf{0}$) な電子ネマティック転移であり、Y系銅酸化物では B_{1g} 対称性である一方で、Hg系銅酸化物では B_{2g} 対称性である。もう1つは T^* 以下での $T = T_{CDW}$ で起こる $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a = (\delta, 0); \delta \sim \pi/2$ となる、3~4倍周期の電子ネマティック転移である。これら2つの電子ネマティック転移は擬ギャップや超伝導と密接な関係が指摘されるも、その正体や微視的起源は未だ議論されており、また統一的に説明した理論もない。そこで申請者は2つの電子ネマティック転移を統一的に説明できる理論を提案した。

申請者は電子ネマティック転移が反強磁性相近傍で起こることからスピン揺らぎ誘起電子ネマティック転移について考えた。そのためには平均場近似を超えてバーテックス補正を考慮する必要がある。銅酸化物を含む様々な超伝導体の先行研究から特にスピン揺らぎの2次のAslamazov-Larkin バーテックス補正 (AL-VC) が重要であることが示されている。そこで従来考慮されていなかった無限次のAL-VCと、秩序変数の波数依存性であるform factorを導入して第一原理計算によるハバード模型に基づいて解析を行った。その結果、スピン揺らぎが強いときに $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ の電荷揺らぎが発達し、最も高温で $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ の B_{1g} 対称性を持つ一様なボンド秩序が誘起することを示した。ボンド秩序とはサイト間のホッピングに変調が生じる非局所的な電荷秩序である。また次に大きい電荷揺らぎは $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a$ のボンド揺らぎであり、これは一様な B_{1g} ボンド秩序下で増強される。これは一様な B_{1g} ボンド秩序下で、次に $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a$ のボンド秩序が起こることを意味する。また準粒子ダンピングの波数依存性 (hot-spot 構造) を導入することで、hot-spot 構造が顕著であれば一様ボンド秩序の対称性が B_{1g} から B_{2g} へと変わることを示した。

さらに申請者は、これら一様な B_{1g}, B_{2g} 対称性のボンド秩序が帯磁率の面内異方性を誘起することを示した。 $T = T^*$ でのネマティック転移は磁気トルク実験で観測されているが、 $3d$ 電子系のスピン軌道相互作用は小さく、ボンド秩序で帯磁率に異方性が生じることは非自明である。そこで申請者は d, p 軌道角運動量による帯磁率を考えた。ボンド秩序によってフェルミ面の4回回転対称性が破れ、低エネルギーに存在する他の軌道との遷移確率が非等価になることで、van-Vleck 帯磁率から面内異方性が生じる。