

別紙 4

報告番号	※ 甲 第 号
------	---------

主 論 文 の 要 旨

論文題目 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

氏 名 川口 功起

論 文 内 容 の 要 旨

強相関電子系は多様な電子状態を形成し、その解明に向けて世界中で活発に議論が行われている。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。銅酸化物は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。その複雑な電子状態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実験で観測された。1 つは $T = T^*$ での一様 ($q = 0$) な電子ネマティック転移であり、Y 系銅酸化物では $B1g$ 対称性である一方で、Hg 系銅酸化物では $B2g$ 対称性である。もう 1 つは T^* 以下での $T = T_{cdw}$ でおこる $q = Q_a = (\delta, 0)$; $\delta \sim \pi/2$ 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。そこで本論文では 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する。

電子ネマティック秩序は平均場近似では説明できず、その発現機構は様々な理論が提案されている。本論文では 2 つの電子ネマティック転移は反強磁性相近傍で起こること、異常物性の多くがスピン揺らぎを起源とする理解されてい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る。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。これまでの銅酸化物を含む様々な超伝導体の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。AL-VC に記述される 2 つのスピン揺らぎの干渉機構による強いスピン-電荷モード間結合効果がスピン揺らぎ誘起電子ネマティック転移を起こす。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。form factor を導入することで非局所的な相転移を解析できる。その結果、スピン揺らぎが強いときに $q = 0$ の電荷揺らぎが発達し、最も高温で $q=0$ の $B1g$ 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 $q = Q_a$ のボンド揺らぎであり、これは一様な $B1g$ ボンド秩序下で増強される。これは一様な $B1g$ ボンド秩

序下で、次に $q = Qa$ のボンド秩序が起こることを意味する。この多段ボンド転移は Y 系銅酸化物の実験と整合する。また自己エネルギーによる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 B1g から B2g へと変わる。一様な B2g ボンド秩序は Hg 系銅酸化物の実験と整合する。

さらに、これら一様な B1g, B2g 対称性のボンド秩序が帯磁率の面内異方性を誘起する。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。そこで本論文では 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。このため、ボンド秩序の対称性が磁気トルク実験から決定できる。

本論文により銅酸化物の 2 つの電子ネマティック転移は、AL-VC のスピン揺らぎ誘起機構による多段ボンド転移シナリオで統一的理解できる。強いスピン揺らぎはパーテックス補正によるモード間結合効果と form factor によって様々な相転移を誘起する。この結果は銅酸化物のみならず、スピン揺らぎの強い様々な物質の電子状態の理解に役立つことが期待される。