

博士論文

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

名古屋大学大学院理学研究科

川口功起

## 概要

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 ( $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ) 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  $T = T_{CDW}$  でおこる  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a = (\delta, 0)$ ;  $\delta \sim \pi/2$  となる、格子間隔の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と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  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  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。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  $B_{1g}$  から  $B_{2g}$  へと変わる。一様な  $B_{2g}$  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  $B_{1g}, B_{2g}$  対称性のボンド秩序が帯磁率の面内異方性を誘起する。 $T = T^*$  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な理解できる。強いスピン揺らぎはバ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。

## 目次

1	Introduction	5
1.1	結晶構造とバンド構造	7
1.2	異常金属相 ( $T > T^*$ )	8
1.3	超伝導 ( $T < T_c$ )	10
1.4	擬ギャップ相 ( $T < T^*$ ) と電荷密度波相 ( $T < T_{CDW} < T^*$ )	10
1.5	擬ギャップの先行研究	11
1.6	ボンド秩序の理論: バーテックス補正と form factor	13
2	Motivation	15
3	Model and Formulation	17
3.1	3 軌道 $d-p$ ハバードモデル	17
3.2	乱雑位相近似 (RPA)	17
3.3	Density Wave (DW) 方程式	19
4	Result 1: $B_{1g}$ ボンド秩序	23
4.1	DW 方程式の解析結果: 自己エネルギーに波数依存性がない場合	23
5	Result 2: $B_{2g}$ ボンド秩序	27
5.1	hot spot 構造を持つ自己エネルギーの導入	27
5.2	DW 方程式の解析結果: hot spot 構造の影響	29
6	ボンド秩序による磁気感受率の面内異方性	33
7	Summary and Discussion	37
8	謝辞	39

## 1 Introduction

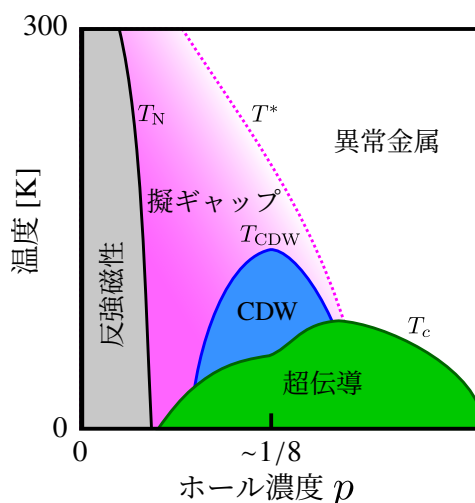


図 1 典型的な銅酸化物高温超伝導体の相図。 $T_N$ ,  $T_{CDW}$ ,  $T_c$  はそれぞれ反強磁性, 電荷密度波 (CDW), 超伝導の転移温度であり、 $T^*$  は擬ギャップ温度である。

超伝導とは低温において電気抵抗ゼロかつ内部磁場ゼロ (Meissner 効果) となる現象である。超伝導は数多くの応用が実用化もしくは期待されているが、超伝導が常圧では低温でのみ起こる現象であることが問題となっている。そのため超伝導転移温度  $T_c$  を向上させることは凝縮系物理の最重要課題の一つである。その指針を得るためには超伝導体の電子状態を解明する必要がある。超伝導の基本的な原理は Bardeen, Cooper, Schrieffer による BCS 理論によって解明されたが、BCS 理論では説明できない超伝導体も見つかっており、銅酸化物高温超伝導体もその一つである。

銅酸化物高温超伝導体は 1986 年に Bednorz と Müller によって発見された超伝導体 [1] であり、常圧で最も高い  $T_c$  を持つ。そのためその電子状態と超伝導転移機構を完全に解明する必要がある。しかし銅酸化物は多彩な相転移現象と異常物性を示し、その電子状態は未だ完全には解明されていない。銅酸化物の未解決問題として、特に重要だと考えられているものが擬ギャップ現象である。

擬ギャップ現象の解明の重要性を説明するため、まず銅酸化物の相図について簡単に解説する。図 1 は典型的な銅酸化物の相図であり、擬ギャップ相や CDW 相など、多様な相を示す。銅酸化物は母物質 (ホール濃度  $p = 0$ ) において反強磁性を示す Mott 絶縁体である。そこにキャリアであるホールをドーピングすると、Mott 絶縁体が壊れて金属となる。

元々の母物質が反強磁性体だったことから、銅酸化物は広い温度とホール濃度領域において強い反強磁性スピン揺らぎを持つ。この強いスピン揺らぎこそが多様な相の原因であると考えられている。

まず初めに、すでに理解されている異常金属相と超伝導相について説明する。本論文では  $T > T^*$  は異常金属相と呼ぶ。そこでは本来 Fermi 液体論から電気抵抗  $\rho \propto T^2$  のはずが  $\rho \propto T$  となるなど、非 Fermi 液体的な異常物性が生じる [2]。しかしこの非 Fermi 液体の振る舞いは、強いスピン揺らぎで理解できる [3–6]。また  $T < T_c$  では超伝導が起こっている。この超伝導は  $T_c \sim 100\text{K}$  であることなど、電子-フォノン媒介の BCS 理論では説明できない超伝導状態であることがわかっている。しかしこの超伝導状態もまた、強いスピン揺らぎで誘起されることが理論的に示されている [7]。

次に  $T < T^*$  で出現する擬ギャップ相について説明する。この  $T < T^*$  の温度領域では Fermi 面の一部が消えるなどのような現象が観測されている [8–10]。相図において擬ギャップの終端で超伝導相がドーム状に起こっていることから、擬ギャップは超伝導と密接に関わっていることと考えられている。また擬ギャップは銅酸化物で普遍的な現象のみならず、他の超伝導体でも見つかっている。しかし、擬ギャップの原因は解明されていない。

しかし最近になって擬ギャップについて、興味深い実験結果が報告されている。その 1 つが擬ギャップ温度  $T^*$  以下、 $T < T_{\text{CDW}}$  における電荷密度波 (CDW) の発見である [11–23]。電荷密度波とは、本来一様である電荷密度が非一様になる状態である。この CDW は Cu-Cu 最近接方向かつ格子定数の 3 ~ 4 倍周期の変調を持つ。また、この CDW 転移は結晶構造から本来持つ回転対称性を破るネマティック転移でもある。擬ギャップ相内において CDW が起こることは、擬ギャップの正体を探る上で大きなヒントになる。またもう 1 つの大きな発見として、擬ギャップ温度  $T^*$  におけるネマティック転移の発見である [24–28]。このネマティック転移は一様であり、また異方性の方向が銅酸化物の種類によって異なることがわかっている。よく似た性質を示す銅酸化物同士でネマティック転移の方向が異なることは非常に興味深い。これらの発見から、銅酸化物は  $T = T^*$  でネマティック転移をした後に  $T = T_{\text{CDW}}$  で並進対称性の破れを伴うネマティック転移をする、多段ネマティック転移が起きていることがわかった。この多段ネマティック転移の解明は擬ギャップ解明に繋がるはずである。

またネマティック転移と超伝導の関係も、近年注目が集まっている。銅酸化物と同じ高温超伝導体である鉄系超伝導体でも  $B_{1g}, B_{2g}$  ネマティック転移は観測されており、高温超伝導とネマティック転移には繋がりがあると考えられる [29–32]。そのためネマティック転移の起源の解明することは、超伝導機構の完全解明に必要な不可欠な問題である。

これらのことから、銅酸化物の多段ネマティック転移を解明しなければならない。しかしこの多段ネマティック転移を統一的に説明できる理論はない。そこで本論文では多段ネマティック転移における統一的な理論を構築する。異常金属相と超伝導相がスピン揺らぎで説明できることから、それらの中間温度領域で起こる多段ネマティック転移もスピン揺らぎで説明できると考える。スピン揺らぎ誘起ネマティック転移は鉄系超伝導体でもよく研究がなされており、従来の理論では無視されていた高次の多体相関であるバーテックス補正を導入することで、Fermi 面の多軌道性由来のネマティック転移が起こることが示されている [33–35]。バーテックス補正が記述するスピン-電荷チャンネル間のモード間結合が、軌道自由度を使ってネマティック転移を引き起こす。しかし銅酸化物の Fermi 面はほぼ 1 軌道で構成されているため、バーテックス補正のみを取り入れてもネマティック転移は起こらない。そこで我々はバーテックス補正に加えて、ホッピングの変調を記述する form factor を導入する。この form factor により軌道自由度がなくとも、異方的なホッピング変調によるネマティック転移が生じる。つまり、我々はバーテックス補正と form factor を考慮したスピン揺らぎ誘起電荷揺らぎによる多段ネマティック転移の理論を構築する。

本節では銅酸化物の現在までにおける実験と理論について説明した後、本研究につながるネマティック秩序に関する実験について説明する。その後、ネマティック転移に関する理論の先行研究について説明した後、本研究のバーテックス補正と form factor を考慮したスピン揺らぎ誘起電荷揺らぎの理論を説明する。

## 1.1 結晶構造とバンド構造

まず初めに銅酸化物の結晶構造について説明する。銅酸化物は伝導面である  $\text{CuO}_2$  面とブロック層が交互に積み重なる結晶構造となっており、 $\text{CuO}_2$  面での 2 次元的な電気伝導が生じる [36]。またこれら銅酸化物は酸素欠損を持ち、 $\delta = 0 \sim 1$  を取る。この酸素量を制御することで、銅酸化物の伝導面にホールをドーピングすることができる。電気伝導は主に Cu の  $3d_{x^2-y^2}$  軌道が担っており、また強いオンサイトの Coulomb 相互作用  $U$  を持つ。この  $U$  が大きなスピン揺らぎを生み、銅酸化物の様々な異常物性を引き起こしていると考えられる。

次にバンド構造について説明する。銅酸化物は Cu  $3d_{x^2-y^2}$  軌道を主とした単一の Fermi 面を構成する。図 2 (a) は第一原理計算を元に作られた Cu  $3d_{x^2-y^2}$  軌道と O  $2p_{x,y}$  軌道を考慮した 3 軌道  $d$ - $p$  ハバードモデルの Fermi 面である。フェルミ面を構成しているバンドは主に  $d$  軌道ではあるが、X,Y 点近傍にはそれぞれ  $p_x, p_y$  軌道が混成している。ま

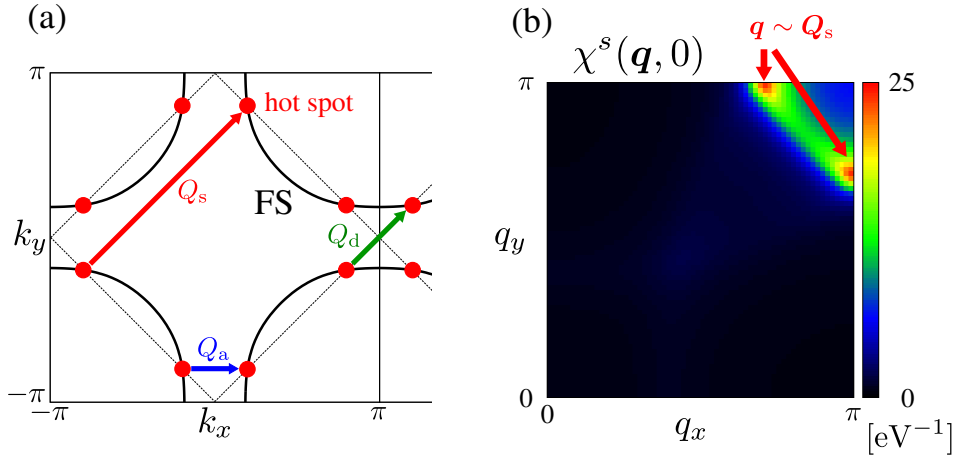


図2 (a) 銅酸化物の Fermi 面と代表的なネスティングベクトル  $Q_s, Q_a, Q_d$ 。(b) 平均場近似によるスピン感受率。

た X,Y 点の下にはバンド構造に鞍点があり、状態密度 (DOS) に van-Hove singularity がある。 $Q_s$  は主なネスティングベクトルであり、このネスティングと強い  $U$  から反強的なスピン揺らぎが生じる。図 2 (b) は平均場近似によって得られるスピン感受率であり、 $q \sim Q_s$  に大きなピークを持つ。赤い点は hot spot である。主なネスティングベクトル  $Q_s$  で結ばれる hot spot では強い準粒子ダンピングが生じ、準粒子の寿命が短くなる。また  $Q_a$  は  $T < T_{\text{CDW}}$  以下で生じる CDW の波数に対応している考えられている。 $Q_d$  はネスティングベクトルとして存在するが、対応する波数の相転移は実際の銅酸化物では観測されていない。

## 1.2 異常金属相 ( $T > T^*$ )

本小節では、 $T > T^*$  で生じる異常金属相について説明する。図 3 (a,b) はそれぞれ電気抵抗  $\rho$ , 核スピン-格子緩和率  $(T_1 T)^{-1}$  の温度依存性であり、 $T > T^*$  で  $\rho \propto T, 1/T_1 T \propto 1/T$  となる [2, 37]。  $(T_1 T)^{-1} \propto \sum_{\mathbf{q}} \text{Im} \chi^s(\mathbf{q}, \omega)/\omega$  として与えられ、動的スピン感受率の虚部に比例する。Fermi 液体論からこれらの振る舞いは  $\rho \propto T^2, 1/T_1 T = \text{const}$  となるはずであり、この実験結果は Fermi 液体の描像の破綻かとも議論された。しかしこれらの異常物性は、現在では強い反強磁性揺らぎのある Fermi 液体における現象であると理解されている。

これら異常物性は Self-consistent renormalization (SCR) 理論から次のように理解でき



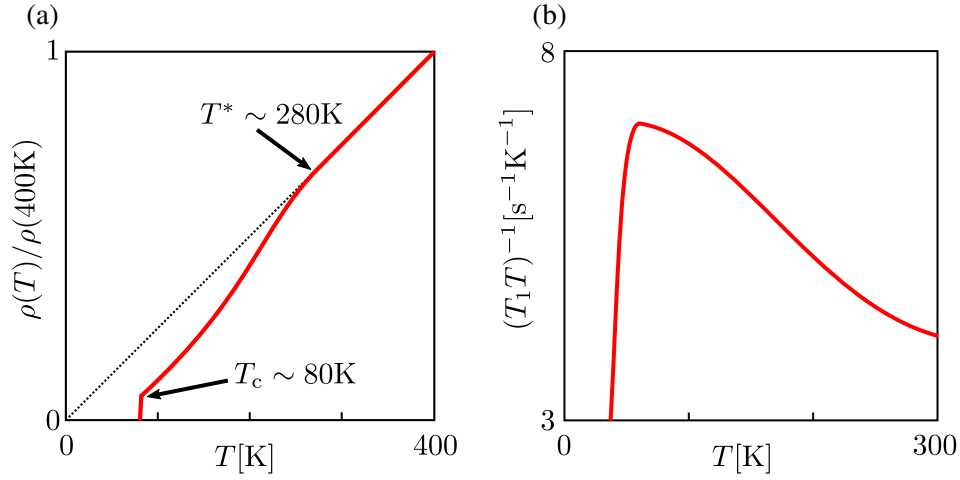


図3 (a) Hg1201 の電気抵抗の温度依存性 [2]。 (b) YBCO の  $(T_1 T)^{-1}$  の温度依存性 [37]。

る [3–6]。動的スピン感受率は次のような温度依存性を持つ。

$$\chi^s(\mathbf{q}, \omega) = \frac{a\xi^2}{1 + \xi^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q}_s)^2 - i\omega/\omega_{sf}} \quad (1)$$

ここで  $\xi$  は磁気相関長であり、 $\omega_{sf} \propto \xi^{-2}$  はスピン揺らぎのエネルギースケールである。また  $a$  は定数である。FLEX 近似及び SCR 理論によると  $\xi^2 \propto (T - \theta_s)$  が示される。 $\theta_s$  はスピンゆらぎのワイス温度である。このスピン感受率による自己エネルギーの虚部は次のようになる。

$$\text{Im } \Sigma_{\mathbf{k}} \propto \sum_{\mathbf{q}} \frac{(\pi T)^2}{2} \frac{3}{2} U^2 \text{Im } \chi^s \frac{1}{\omega} \rho_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(0) \quad (2)$$

$$\langle \text{Im } \Sigma \rangle \propto T^2 \xi^2 \sim T \quad (3)$$

ここで  $\rho_{\mathbf{k}}(0)$  は状態密度である。ただし  $U$  は  $d$  電子間の Coulomb 斥力である。これを用いて、 $\rho, 1/T_1 T$  の温度依存性は次のようになる。

$$\rho(T) \propto \langle \text{Im } \Sigma \rangle \propto T \quad (4)$$

$$\frac{1}{T_1 T} \propto \sum_{\mathbf{q}} \frac{\text{Im } \chi^s(\mathbf{q}, \omega)}{\omega} \propto \xi^2 \propto \frac{1}{T - \theta_s} \quad (5)$$

このように従来では非 Fermi 液体的な振る舞いと考えられていた現象は、反強磁性揺らぎの強い Fermi 液体として理解できる。

### 1.3 超伝導 ( $T < T_c$ )

本小節では超伝導相について解説する。銅酸化物は  $T < T_c$  で超伝導相となり、その超伝導ギャップ対称性は  $d$  波であることがわかっている。この  $d$  波超伝導についても、異常金属相と同様に、反強磁性揺らぎで理解できる。

超伝導揺らぎを導出する線型 Eliashberg 方程式について、スピン揺らぎによる寄与は次のようになる。

$$\lambda_c \Delta(\mathbf{k}) = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \left[ -\frac{3}{2} U \chi^s(\mathbf{k} - \mathbf{k}') U \right] |G(\mathbf{k}')|^2 \Delta(\mathbf{k}') \quad (6)$$

ここで  $\Delta$  が超伝導ギャップ関数であり、 $\lambda_c$  が超伝導固有値、 $G$  はグリーン関数である。 $U$  は onsite Coulomb のエネルギーである。超伝導揺らぎは  $1/(1 - \lambda_c)$  となり、 $\lambda_c = 1$  で超伝導相転移が起こる。この式において、スピン感受率に由来する項  $U \chi^s U$  は正なので、 $\Delta(\mathbf{k})$  は波数  $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$  間で符号を反転する。よって反強磁性スピン揺らぎから、超伝導ギャップは  $q = (\pi, \pi)$  で符号反転する対称性をもつ  $d$  波超伝導が生じる。

### 1.4 擬ギャップ相 ( $T < T^*$ ) と電荷密度波相 ( $T < T_{\text{CDW}} < T^*$ )

本小節では擬ギャップと、その擬ギャップ領域内で起こる電荷密度波について説明する。 $T < T^*$  で擬ギャップ領域と呼ばれる。この領域では、図 2 (a) のように斜方晶の X 点 ( $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ ), Y 点 ( $\mathbf{k} = (0, \pi)$ ) 近傍の Fermi 面が消える Fermi arc が形成される。またナイトシフトが現象することも観測されている。これらの現象は X, Y 点近傍のみにあかかもギャップが開いているかのような現象であり、擬ギャップ現象と呼ばれる。これは同じ高温超伝導体である鉄系超伝導体でも観測されている現象であり、超伝導との関係が広く議論されている。

しかし最近の実験によって、擬ギャップ領域内で 2 つのネマティック転移が起こっていることがわかり、大きな注目を集めている。その 1 つが X 線散乱 [11–18], STM [19–22], local lattice deformation [23] によって観測された  $T < T_{\text{CDW}}$  以下での電荷密度波 (CDW) である。これは本来一様な電荷密度が何らかの変調を起こして非一様になる現象である。銅酸化物では Cu-Cu 最近接方向の 3 ~ 4 倍周期 ( $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a = (\delta, 0), (0, \delta); \delta \sim \pi/2$ ) の変調が起きている。この CDW は様々な銅酸化物で観測されており、銅酸化物の特徴的な秩序の 1 つである。

もう 1 つが  $T = T^*$  でのネマティック転移である。これは近年、共鳴超音波スペクト

ル [24], ARPES [25, 26], 磁気トルク実験 [27, 28] から指摘されている。このネマティック転移は、誘起される結晶格子の異方性の小ささから電子系が自発的にネマティック転移を起こしていると考えられる。また APRES [26] から  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  の一様な秩序であると考えられる。この一様な電子ネマティック転移は興味深いことに、ネマティック秩序の対称性に化合物依存性があることが指摘されている。Y, Bi 系銅酸化物の異方性の方向は Cu-Cu 最近接方向 ( $B_{1g}$  対称性) であるのに対し、Hg 系は Cu-Cu 次近接方向 ( $B_{2g}$  対称性) となる。これら 2 つの電子ネマティック転移は擬ギャップ現象や超伝導を密接に関係することが議論されながらも、これらを統一的に説明する理論はない。

またネマティック転移と超伝導は関係することが、近年様々な研究によって明らかにされている。銅酸化物の  $d$  波超伝導の起源はスピン揺らぎであるが、ネマティック転移を起こす  $\mathbf{q} = \mathbf{0}, Q_a$  の電荷揺らぎもまた  $d$  波超伝導転移温度を向上させると理論的に議論されている。また銅酸化物と同じ高温超伝導体である鉄系超伝導体でも  $B_{1g}, B_{2g}$  ネマティック転移は観測されている [29–32]。鉄系超伝導体ではスピン揺らぎによって  $B_{1g}, B_{2g}$  ネマティック転移が軌道秩序として誘起されることが示されている。さらにこの軌道秩序を起こす軌道揺らぎによる超伝導機構も提案されており、多くの実験が説明できることがわかっている。これらから、超伝導機構の完全解明にはネマティック転移の解明をする必要がある。

次小節では擬ギャップに関わる理論の先行研究について解説する。その次小節では本論文に関わる先行研究について解説する。そしてその問題点について議論した後、我々の研究について説明する。

## 1.5 擬ギャップの先行研究

擬ギャップの理論は広く議論されており、それらは大きく 2 つに分けることができる。まず一つは何らかのクロスオーバーによって擬ギャップができるという理論である。スピン揺らぎや超伝導揺らぎを考え、その準粒子ダンピングが生じる [38–40]。これにより、揺らぎによって特徴付けられる波数である X, Y 点近傍の電子の寄与が消えることでギャップが開いているかのように観測される。

もう一つは、相転移によって擬ギャップが起こるという理論である。平均場では電荷秩序は起こらない [41, 42]。そのため超伝導理論 [43–46], スピン揺らぎ誘起理論 [47–55] によって議論されている。また計算手法として、量子モンテカルロ [56, 57], 密度行列くりこみ群 [58, 59], functional renormalization group [60] が用いられ議論されている。これらにより、CDW, ボンド秩序, Pomeranchuk 不安定性, staggered flux, pair density wave (PDW)

など様々な起源が提案されている。CDW, ボンド秩序, Pomeranchuk 不安定性は電子数やホッピング積分の回転, 並進対称性の破れであり、staggered flux は自発的に閉ループ電流が流れる秩序であり、PDW は超伝導ギャップが空間的に変調する状態である。しかしこれらの理論では多段電子ネマティック転移は説明できない。

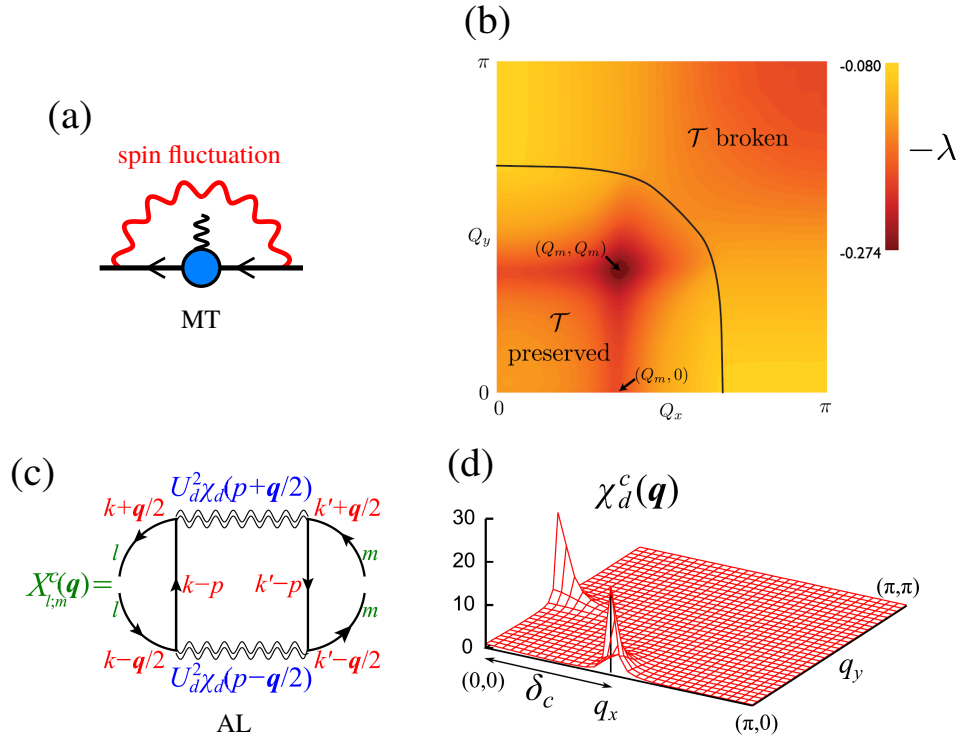


図4 (a) MT 項 (b) MT 項によって誘起される電荷揺らぎ。(c) 電荷感受率の AL 項。(d) AL 項の 1 次のみを導入した電荷感受率。

そこで本論文では多段電子ネマティック転移について研究を行う。反強磁性相近傍の現象であること、相図の大部分はスピン揺らぎによって理解できることから多段電子ネマティック転移もまたスピン揺らぎで説明できると考える。そこでスピン揺らぎ誘起電子ネマティック転移の重要な 2 つの先行研究について紹介する。まずスピン揺らぎの 1 次のバーテックス補正の Maki-Thompson (MT) 項 (図 4 (a)) を無限次まで導入して電荷揺らぎについて解析した先行研究を説明する [54, 55]。バーテックス補正とは平均場近似では考慮されていない多体相関である。スピン揺らぎのバーテックス補正がスピン-電荷のモード間結合を生み、スピン揺らぎ誘起電荷揺らぎを誘起する [33, 34, 61–63]。スピン揺らぎによるバーテックス補正は鉄系超伝導体 [33], Ru 系超伝導体 [34], 銅酸化物 [47–55] の電子ネマティック相誘起することが示されている。図 4 (b) は無限次まで導入された MT 項によって誘起される電荷揺らぎの  $q$  依存性であり、 $q = Q_d = (\delta, \delta)$  で最も固有値が大き

くなる。 $q = Q_d$  の電荷秩序は観測されていないため、MT 項のみの解析では実験と整合しない。

次に、スピン揺らぎの 2 次のバーテックス補正である Aslamazov-Larkin (AL) 項の 1 次 (図 4 (c)) と  $d$ - $p$  間の offsite Coulomb 相互作用  $V$  を導入した先行研究 [42] を説明する。図 4 (d) は得られた電荷感受率であり、 $q = Q_a$  に大きなピークが存在する。これは AL 項によって  $q = Q_a$  で  $V$  が大きく増強されることで電荷揺らぎが発散する。この結果は  $T < T_{CDW}$  の電荷秩序は説明できるが、 $T = T^*$  の一様な電子ネマティック転移は説明できない。

本論文では MT 項と AL 項を無限次まで導入して解析を行う。AL 項は鉄系超伝導体 [33] や重い電子系 [64–66] などでも重要性が指摘されている。特に無限次の AL 項は次小節で説明する、非従来型の電荷秩序を誘起すると考えられる。

## 1.6 ボンド秩序の理論: バーテックス補正と form factor

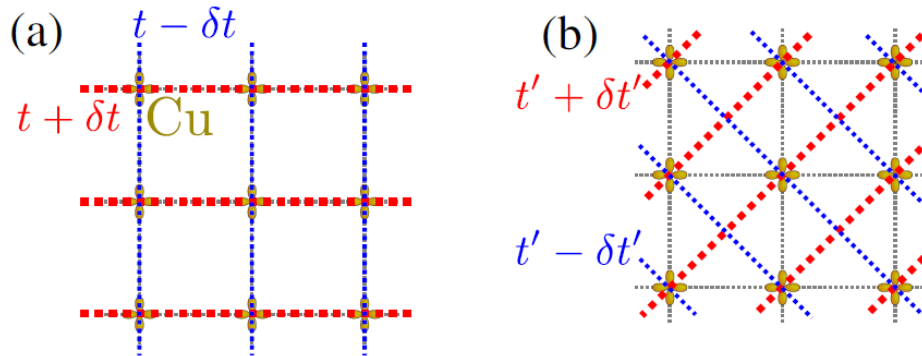


図 5  $q = 0$  の (a)  $B_{1g}$ , (b)  $B_{2g}$  対称性のボンド秩序。それぞれ元々の最近接, 次近接ホッピング  $t, t'$  がボンド秩序によって  $\pm\delta t, \pm\delta t'$  変調している。

本小節では本論文による解析で得られるボンド秩序について説明する。そのためにまずバーテックス補正と form factor の重要性について説明する。バーテックス補正とは平均場近似を超えた多体効果である。バーテックス補正を考慮しない場合、電荷揺らぎは主なネスティングベクトル  $q = Q_s$  の揺らぎが最も大きくなる。しかしバーテックス補正による複雑な励起過程を考慮することで非自明な  $q$  の電荷揺らぎが誘起される。特に AL 項による 2 つのスピン揺らぎの干渉機構によって、実験と整合する波数の電荷揺らぎが起こることが期待される。またバーテックス補正を無限次まで導入することで、form factor が導入される。form factor とは秩序変数の波数依存性であり、これをフーリエ変換すると

電荷秩序によるホッピングの変調成分が得られる。そのため form factor を考慮することで非従来型の電荷秩序を解析することができる。また form factor 波数  $\mathbf{k}$  の総和で 0 となるような波数依存性を持つ時、平均場近似によって導入される onsite Coulomb 相互作用  $U$  による強い電荷揺らぎの抑制を回避することができる。その結果、スピン揺らぎによるバーテックス補正が磁気量子臨界点近傍で大きくなることで、電荷揺らぎが発散する。

ボンド秩序とは電子のホッピングに変調が起こる電荷秩序である。これは form factor の波数依存性を考慮することで解析できる秩序である。図 5 (a) は  $B_{1g}$  対称性を持つ  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  のネマティックなボンド秩序である。元々の最近接ホッピング  $t$  が  $B_{1g}$  ボンド秩序によって、横方向では  $\delta t$  だけ増大し、縦方向では  $\delta t$  だけ減少する。このような  $B_{1g}$  ボンド秩序は form factor が  $f_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}(\mathbf{k}) \propto \cos k_x - \cos k_y$  のような  $B_{1g}$  対称性の波数依存性を持つ必要がある。図 5 (b) は  $B_{2g}$  対称性を持つ  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  のボンド秩序であり、元々の次近接ホッピング  $t'$  がボンド秩序によって  $\pm\delta t'$  だけ変調する。この  $B_{2g}$  ボンド秩序を起こすには、 $f_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}(\mathbf{k}) \propto \sin k_x \sin k_y$  となる必要がある。このようなボンド秩序を起こすボンド揺らぎは平均場近似では存在しない。そのためボンド秩序は平均場近似を超えた効果である MT, AL 項によって誘起される秩序である。



## 2 Motivation

近年の実験によって、銅酸化物には2つの電子ネマティック転移が存在することがわかった。一つは磁気トルク実験や ARPES で得られた、 $T = T^*$  での  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  の一様な電子ネマティック転移である。この電子ネマティック転移は、ネマティシティの方向が Y, Bi 系銅酸化物では Cu-Cu 最近接方向 ( $B_{1g}$  対称性) であるのに対し、Hg 系銅酸化物では Cu-Cu 次近接方向 ( $B_{2g}$  対称性) である。もう一つは X 線散乱や STM で得られた、 $T = T_{CDW}$  での  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a$  の Cu-Cu 最近接方向, 3 ~ 4 倍周期である電子ネマティック転移である。これらは銅酸化物の重要な未解決問題である擬ギャップ領域内で起こることから、擬ギャップの起源と密接に関係すると考えられる。

ネマティシティと超伝導の関係は近年注目されている。特に銅酸化物と同じ高温超伝導体である鉄系超伝導体ではネマティシティを誘起する軌道揺らぎが、従来予測されていなかったギャップ構造をもつ超伝導を誘起し、多くの実験を説明できることが指摘されている。銅酸化物においても、超伝導はスピン揺らぎで誘起されることが理論的に示されている。しかし、ネマティック揺らぎがスピン揺らぎと協力して超伝導転移温度を上昇させている可能性が理論的に考えられている。このように超伝導機構の完全解明にはネマティック転移の微視的な解明をする必要がある。しかし銅酸化物の2つの電子ネマティック転移を統一的に説明した理論はない。この2つの電子ネマティック転移の正体および微視的な起源を解明する必要がある。

本論文の目的は銅酸化物の2つの電子ネマティック転移を統一的に説明することである。これらは反強磁性相近傍で起こることや異常金属相の物性や超伝導はスピン揺らぎで説明できることから、2つの電子ネマティック転移もスピン揺らぎで説明できると考えられる。そこで本研究では第一原理計算に基づいた強束縛模型に、スピン揺らぎを誘起する Cu の  $d_{x^2-y^2}$  軌道の onsite Coulomb 相互作用  $U$  のみを導入したハバードモデルを考える。平均場近似では電子ネマティック転移は起こらないため、平均場を超える高次の多体相関であるバーテックス補正を取り入れる必要がある。従来考慮されていないスピン揺らぎによるバーテックス補正の無限次の AL 項を取り入れ、form factor を考慮して電荷揺らぎを解析する。特に AL 項は多くの超伝導体でその重要性が指摘されており、銅酸化物でもまた実験と整合する波数の電荷揺らぎが誘起されることが期待される。また form factor を考慮することで、 $U$  による強い電荷揺らぎの抑制を避け、非自明な電荷秩序が起こる。

また本研究では、得られた電子ネマティック秩序によって帯磁率に面内異方性が生じることも示す。一様なネマティシティは磁気トルク実験で得られているが、3d 軌道のスピ

ン軌道相互作用は小さく、電荷秩序で帯磁率に異方性が生じることは自明ではない。そこで本研究では  $d, p$  軌道角運動量による帯磁率を考える。ボンド秩序により Fermi 面の 4 回回転対称性が破れ、バンド間の遷移確率が非等価になることで帯磁率に異方性が生じることが示された。



### 3 Model and Formulation

#### 3.1 3 軌道 $d$ - $p$ ハバードモデル

本小節では、本研究で用いる 3 軌道  $d$ - $p$  ハバードモデルについて説明する。ハミルトニアン  $H$  は次の式で表せられる。

$$H = H_0 + H_U \quad (7)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{h}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (8)$$

$$H_U = U \sum_i n_{d,i,\uparrow} n_{d,i,\downarrow} \quad (9)$$

$H_0$  は運動エネルギー項であり、 $H_U$  は  $d$  軌道のオンサイトの Coulomb 相互作用項である。 $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = (c_{d,\mathbf{k},\sigma}^\dagger, c_{p_x,\mathbf{k},\sigma}^\dagger, c_{p_y,\mathbf{k},\sigma}^\dagger)$  は波数  $\mathbf{k}$  スピン  $\sigma$  を持つ  $d, p_x, p_y$  軌道の電子の生成演算子のベクトルである。 $\hat{h}_{\mathbf{k}}$  は第一原理計算から得られた  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  強束縛模型 [67] に、Hg1201 や YBCO の Fermi 面に合わせるために  $d$  軌道間の第三近接ホッピング  $t_{dd}^{(3)} = -0.1\text{eV}$  を導入した模型である。 $n_{d,i,\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} c_{d,\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{d,\mathbf{k},\sigma}$  は  $d$  軌道、スピン  $\sigma$ 、サイト  $i$  の密度演算子である。 $U$  はオンサイトの Coulomb 相互作用のパラメータである。

#### 3.2 乱雑位相近似 (RPA)

本小節ではスピン・電荷感受率  $\chi^s, \chi^c$  について、乱雑位相近似 (RPA) による平均場近似での計算について説明する。本研究では相互作用は  $d$  軌道のみを導入されているため、1 軌道系における RPA について解説する。線型応答理論から  $\chi^s, \chi^c$  は次のように与えられる。

$$\chi^s(q) = \frac{1}{2} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_l \tau} \langle A_q^-(\tau) A_{-q}^- \rangle \quad (10)$$

$$\chi^c(q) = \frac{1}{2} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_l \tau} \langle A_q^+(\tau) A_{-q}^+ \rangle \quad (11)$$

ここで  $q = (\mathbf{q}, i\omega_l)$  であり、 $\langle A \rangle = \text{Tr}(e^{-H/T} A) / \text{Tr}(e^{-H/T})$  である。 $i\omega_l = 2\pi l/T$  はボゾンの松原振動数である。また  $A^{+(-)}$  は次のように与えられる。

$$A_q^{+(-)} = \frac{1}{2} [n_{q,\uparrow} + (-)n_{q,\downarrow}] \quad (12)$$

$$n_{\mathbf{q},\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \quad (13)$$

$$\chi^{\uparrow\uparrow} \simeq \chi^0 + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots$$

$$\chi^{\uparrow\downarrow} \simeq \text{diagram 3} + \dots$$

図6 RPA で計算する  $\chi^{\sigma\sigma'}$  のダイアグラム。実線はグリーン関数であり、点線が  $U$  である。 $U$  は異なるスピン間で働くため、 $\chi^{\uparrow\uparrow}$ ,  $\chi^{\uparrow\downarrow}$  はそれぞれ  $U$  が偶数, 奇数回働くダイアグラムとなる。

この  $\chi^s, \chi^c$  は次のように変形できる。

$$\chi^s(q) = \chi^{\uparrow\uparrow}(q) - \chi^{\uparrow\downarrow}(q) \quad (14)$$

$$\chi^c(q) = \chi^{\uparrow\uparrow}(q) + \chi^{\uparrow\downarrow}(q) \quad (15)$$

$$\chi^{\sigma\sigma'}(q) = \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega\tau} \langle n_{\mathbf{q},\sigma}(\tau) n_{-\mathbf{q},\sigma'} \rangle \quad (16)$$

この  $\chi^{\sigma\sigma'}$  を解くことで  $\chi^s, \chi^c$  を求めることができる。そこで RPA を用いて平均場レベルで  $\chi^{\sigma\sigma'}$  を導出し、 $\chi^s, \chi^c$  を求める。

図6 は RPA での  $\chi^{\sigma\sigma'}$  のダイアグラムである。RPA では最も簡単な既約感受率  $\chi^0$  を  $U$  で連結させたダイアグラムのみを考える。 $\chi^0$  は次の式で与えられる。

$$\chi^0(q) = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k} + \mathbf{q}) G(\mathbf{k}) \quad (17)$$

$\mathbf{k} = (\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$  であり、 $i\varepsilon_n = (2n + 1)\pi T$  はフェルミオンの松原振動数である。 $G$  は  $d$  軌道の温度グリーン関数であり、次の式で与えられる。

$$G(\mathbf{k}) = - \int_0^{1/T} d\tau e^{i\varepsilon_n \tau} \langle T_\tau c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \quad (18)$$

$$\simeq [(i\varepsilon_n + \mu)\hat{1} - \hat{h}_{\mathbf{k}}]_{d,d}^{-1} \quad (19)$$

ここで  $\mu$  は化学ポテンシャルであり、最後の近似は相互作用がない場合に等しくなる。

$\chi^0$  を用いて RPA での  $\chi^s, \chi^c$  は次のようになる。

$$\chi^s(q) = \frac{\chi^0(q)}{1 - U\chi^0(q)} \quad (20)$$

$$\chi^c(q) = \frac{\chi^0(q)}{1 + U\chi^0(q)} \quad (21)$$

RPA の感受率から平均場近似によって導出されるスピン・電荷秩序について考える。 $\chi^0(\mathbf{q}, 0) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [n(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n(\varepsilon_{\mathbf{k}})] / [\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}] > 0$  であることから、 $U\chi^0(\mathbf{q}, 0) > 0$  である。ここで  $n$  は Fermi 分布関数であり、 $\varepsilon$  は  $d$  軌道が主に Fermi 面を構成することから、Fermi 面を構成するバンドの分散である。よって  $\chi^s$  は Stoner 因子  $\alpha_s \equiv U \max_{\mathbf{q}} \chi^0(\mathbf{q}, 0) = 1$  で発散し、一方で  $\chi^c$  は発散しない。これは平均場近似ではスピン秩序は起こるが、電荷秩序は起こらないことを意味する。

実際に銅酸化物に RPA を適応させたとき、 $\mathbf{q} \sim (\pi, \pi)$  の反強磁性揺らぎが大きく発達する。しかし  $\mathbf{q} = \mathbf{0}, (\delta, 0)$  の電荷揺らぎは発達せず、 $T = T^*, T_{\text{CDW}}$  のネマティック転移や CDW は説明できない。そのためこれら電荷秩序を説明するには RPA を超えた近似としてバーテックス補正を含む既約感受率を取り入れる必要がある。

最後に RPA の感受率を用いたスピン・電荷揺らぎ  $V^s, V^c$  について定義しておく。スピン  $\sigma, \sigma'$  間に働く相関  $V^{\sigma\sigma'}$  を用いて、 $V^{s(c)} = V^{\uparrow\uparrow} - (+)V^{\uparrow\downarrow}$  とすると、RPA の  $\chi^s, \chi^c$  を用いて次のようにかける。

$$V^s(q) = U + U\chi^s(q)U \quad (22)$$

$$V^c(q) = -U + U\chi^c(q)U \quad (23)$$

RPA で  $\chi^s$  が発散することから、 $V^s$  も発散的に増大する。銅酸化物の異常物性はスピン揺らぎに起因していると考えられるため、バーテックス補正を考えると  $V^s$  の寄与を考慮することが重要となる。

### 3.3 Density Wave (DW) 方程式

本小節では、RPA では無視されていた高次の補正項であるバーテックス補正を取り入れて解析を行うことができる、DW 方程式 [?, 35] について説明する。先の小節では電荷感受率の発散による相転移について考えたが、DW 方程式では自己エネルギーの解析から電荷チャンネルの相転移について調べる。

電子ネマティック転移や CDW 転移など、相転移の秩序変数は自己エネルギー  $\Sigma$  の対称性の自発的な破れ  $\Delta\Sigma$  として与えられる。そこで  $\Delta\Sigma$  を求める方法として、自己エネル

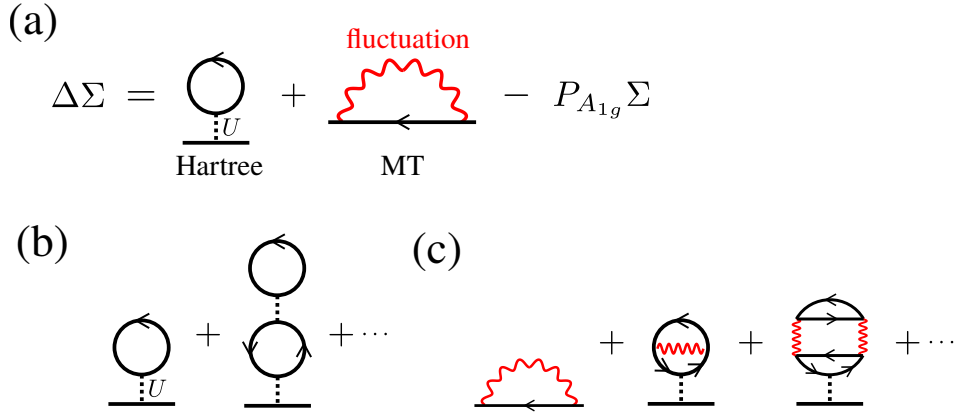


図7 (a) DW 方程式のダイアグラム。(b) Hartree 項のみによって導入されるダイアグラム。(c) Hartree と MT 項によって導入されるダイアグラム。第三項のような既約な部分に揺らぎの 2 次となるダイアグラムは、揺らぎにグリーン関数が内包されていることで導入される。

ギーの  $A_{1g}$  対称性の成分を除いて自己無撞着に計算する手法である DW 方程式が提案された。次の式は揺らぎの 1 次までの自己エネルギーを考慮したときの、 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  における DW 方程式である。

$$\Delta\Sigma(k) = (1 - P_{A_{1g}}) \frac{T}{N} \sum_q \left( \frac{3}{2} V^s(q) + \frac{1}{2} V^c(q) - U^2 \chi^0(q) \right) G(k+q) \quad (24)$$

ここで  $P_{A_{1g}}$  は  $A_{1g}$  対称性の射影演算子である。自己エネルギーが存在するときグリーン関数は  $G(k) = [(i\varepsilon_n + \mu)\hat{1} - \hat{h}_k - \Delta\hat{\Sigma}]_{d,d}^{-1}$  となる。図 7 (a) は DW 方程式のダイアグラムであり、図 7 (b,c) はそれぞれ Hartree 項のみ、MT 項まで考慮したときに導入されるダイアグラムである。Hartree 項のみを考慮した場合によって導入されるダイアグラム (図 7 (b)) は、RPA によって導入される  $\chi^0$  を  $U$  で連結したダイアグラムと対応している。MT 項を導入することは、RPA を超える近似をすることであり、バーテックス補正を含む既約感受率を導入することに対応する。対応する既約感受率は、図 7 (c) の第 2,3 項のバブルのような、揺らぎの 1,2 次項のダイアグラムとなる。

DW 方程式は多くのダイアグラムを取り入れながら自己エネルギーの自発的な破れを解析できる手法である。特に  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  の秩序ならば既約感受率を実際に計算するよりも計算コストを小さくしながら解析でき、さらに RPA では取り入れられない秩序変数  $\Delta\Sigma$  の  $k$  依存性を取り入れることができる。高温超伝導体である FeSe の  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  の  $B_{1g}$  対称性ネマティック秩序は DW 方程式を用いて説明できることが知られている。しかし  $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$  のような、任意の  $\mathbf{q}$  の秩序の解析においては DW 方程式をそのまま用いると、ユニットセル

内に多サイトがあるモデルを用いる必要があり、非常に大きな計算コストがかかる。そのため銅酸化物のような、多サイト秩序を考える系では DW 方程式をそのまま用いることは難しい。

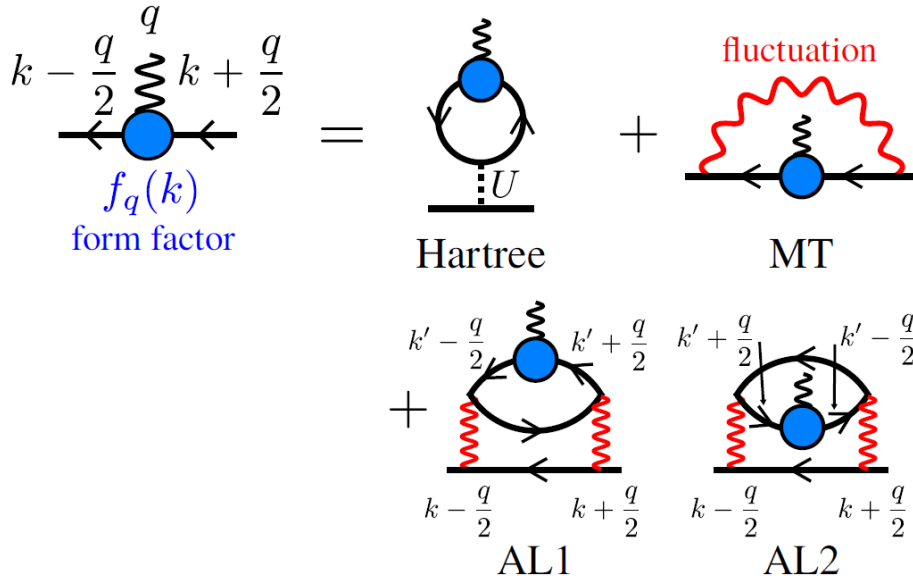


図8 線形 DW 方程式のダイアグラム。

任意の波数  $q$  の電荷秩序を解析するため、式 (25) を線形化する。線形化した方程式を解析することで、秩序変数ではなく揺らぎを計算する。これにより任意の  $q$  でも計算コストを増大させずに解析することができる。線形 DW 方程式 (図 8) は次の式で与えられる。

$$\lambda_q f_q(k) = \sum_{k'} K_q(k, k') f_q(k') \quad (25)$$

$\lambda$  が固有値、 $f$  が form factor である。Form factor が自己エネルギーの自発的な破れ  $\Delta\Sigma$  と対応している。ここでカーネル  $K_q(k, k')$  について、以下のように有効相互作用  $I_q(k, k')$  とグリーン関数に分解する。

$$K_q(k, k') = -I_q(k, k') G(\mathbf{k}' - \frac{q}{2}, i\varepsilon_{n'}) G(\mathbf{k}' + \frac{q}{2}, i\varepsilon_{n'}) \quad (26)$$

このとき  $I_{\mathbf{q}}(k, k')$  は次のように与えられる。

$$\begin{aligned}
I_{\mathbf{q}}(k, k') = & - \left[ \frac{3}{2} V^s(k - k') + \frac{1}{2} V^c(k - k') - U^2 \chi^0(k - k') \right] \\
& + T \sum_{\mathbf{q}'} \left[ \frac{3}{2} V^s(\mathbf{q}' - \frac{\mathbf{q}}{2}, i\omega_{\nu'}) V^s(\mathbf{q}' + \frac{\mathbf{q}}{2}, i\omega_{\nu'}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{2} V^c(\mathbf{q}' - \frac{\mathbf{q}}{2}, i\omega_{\nu'}) V^c(\mathbf{q}' + \frac{\mathbf{q}}{2}, i\omega_{\nu'}) - U^2 \right] \\
& \times G(k - q') [G(k' - q') + G(k' + q')] \tag{27}
\end{aligned}$$

右辺第 1 項が Hartree 項と MT 項であり、第 2 項が AL 項である。ここで AL 項は  $V^s(\mathbf{q}' - \frac{\mathbf{q}}{2}, i\omega_{\nu'}) V^s(\mathbf{q}' + \frac{\mathbf{q}}{2}, i\omega_{\nu'})$  因子をもつ。この因子から、AL 項は  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  やスピン揺らぎのピーク間の波数において非常に大きな寄与を与える [33, 42, 68]。そのため AL 項は  $\mathbf{q} = \mathbf{0}, (\delta, 0)$  の電荷揺らぎを誘起する。一方で MT 項はこれらの電荷揺らぎに対して、AL 項に比べて小さな補正しか与えない。RPA の際に議論したように、Hartree 項は form factor に  $k$  依存性がないとき、電荷揺らぎを抑制する。しかし符号反転がある  $d$  波のような、波数  $\mathbf{k}$  和で 0 となる form factor の場合、Hartree 項からの寄与がなくなり抑制されなくなる。つまり MT 項や AL 項を考えることで、MT や AL 項のみで形成される無限次までのダイアグラムの和から電荷揺らぎが発散する。

## 4 Result 1: $B_{1g}$ ボンド秩序

本節では自己エネルギーに定数のダンピングのみを導入した  $\Sigma(k) = i\gamma \text{sgn}(\varepsilon_n)$  場合の DW 方程式の結果について説明する。

### 4.1 DW 方程式の解析結果: 自己エネルギーに波数依存性がない場合

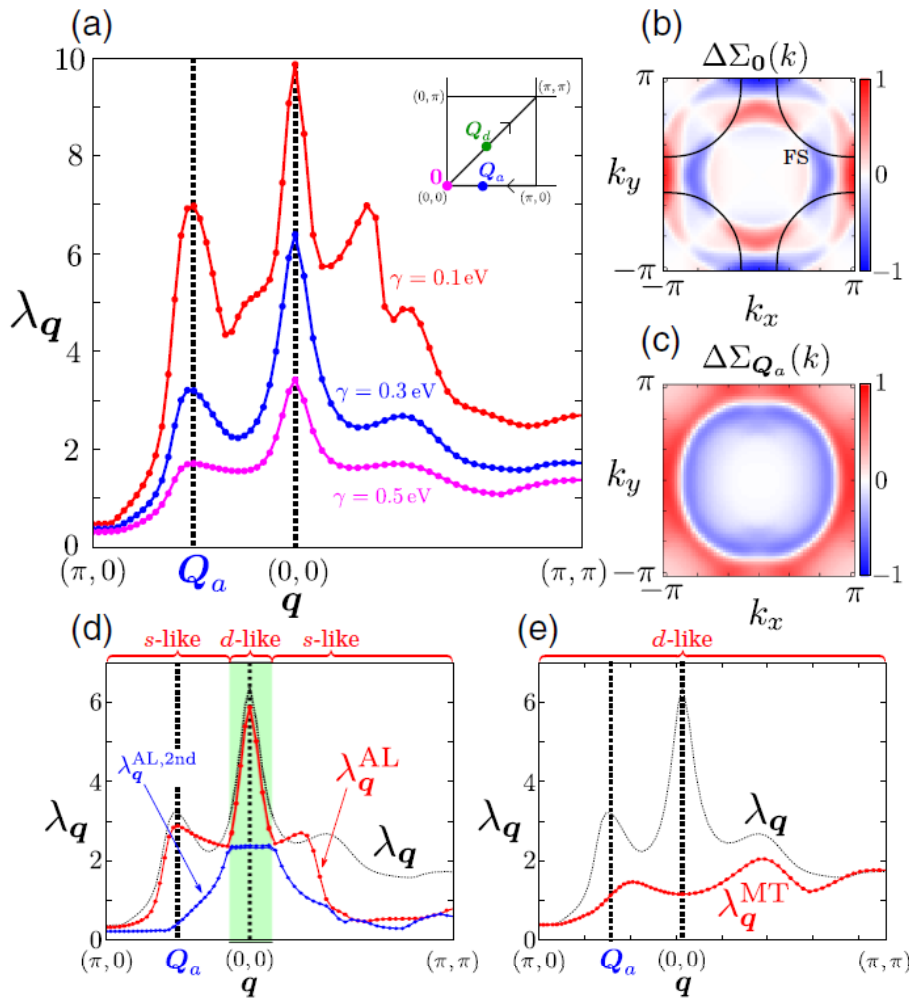


図9 (a)  $\gamma = 0.1, 0.3, 0.5$  eV における最大固有値  $\lambda_q$  の  $q$  依存性。(b)  $q = 0$  における form factor であり、 $B_{1g}$  対称性を持つ。(c)  $q = Q_a$  における form factor。(d) AL 項のみを導入したときの最大固有値  $\lambda_q^{AL}$  と第2固有値  $\lambda_q^{AL,2nd}$  の  $q$  依存性。(e) MT 項のみを導入したときの最大固有値  $\lambda_q^{MT}$  の  $q$  依存性。黒い点線は MT, AL 項両方を取り入れたときの固有値である。



本小節では DW 方程式によって導出された結果について説明する。図 9 (a) は  $\alpha_s = 0.995$ ,  $\gamma = 0.1, 0.3, 0.5$  eV における最大固有値  $\lambda_q$  の  $q$  依存性である。ダンピングの値に関わらず、最も固有値が大きいのは  $q = \mathbf{0}$  の固有値である。これは最も高温で  $q = \mathbf{0}$  の電荷秩序が起こることを意味する。この  $q = \mathbf{0}$  の固有値に対応する form factor は図 9 (b) であり、 $B_{1g}$  対称性を持つ。そのためこの  $q = \mathbf{0}$  の電荷秩序は図 5 (a) のような、 $B_{1g}$  ボンド秩序である。また  $d$  軌道  $B_{1g}$  ボンド秩序は  $p_x, p_y$  軌道の電子数  $n_{p_x}, n_{p_y}$  について、 $n_{p_x} \neq n_{p_y}$  となる  $p$  軌道分極をもたらす。また 2 番目に大きいピークは  $q = Q_a$  のピークであり、対応する form factor は図 9 (c) である。このピーク  $T = T_{CDW}$  で起こる CDW に対応する。この時 form factor は  $s$  波形的ではあるが、符号反転を持つことで Hartree 項による抑制を避けることができ、ボンド転移が起こる。最も高温で  $q = \mathbf{0}$  の  $B_{1g}$  のネマティックなボンド秩序を起し、その次に  $q = Q_a$  のボンド転移が起こることは、YBCO などの実験と整合している。

次にこれら  $q = \mathbf{0}, Q_a$  が MT と AL 項のどちらが誘起しているかについて調べるため、AL 項のみ、MT 項のみ DW 方程式に導入した場合での解析を行った。図 9 (d,e) はそれぞれ AL 項のみ、MT 項のみを導入した時の固有値の  $q$  依存性である。図 9 (d) に示す通り、 $q = \mathbf{0}, Q_a$  のピークはほぼ AL 項によって構成されている。また  $q = \mathbf{0}$  の form factor は  $B_{1g}$  対称性を持つが、 $Q_a$  に向かっていくにつれて別の対称性を持つ form factor に移り変わり、 $q = Q_a$  では  $s$  波動的となる。一方で、MT 項は実験で観測されている電荷秩序に大きなピークを持たず、 $q = (\delta, \delta)$  にピークを持つ。これらの結果から、実験で観測されている  $q = \mathbf{0}, Q_a$  の電荷秩序に相当するピークは AL 項によって誘起されていることがわかる。これは AL 項 (式 (27)) が  $V^s(q' - q/2)V^s(q' + q/2)$  を持つためである。スピン感受率が図 2 (b) となる 4 つのピークを持つことから、 $q = \mathbf{0}$  とボンド揺らぎが発達した後、スピン揺らぎのピーク間波数  $q = Q_a$  のボンド揺らぎが発達する。

次に AL 項による  $q = \mathbf{0}$  の form factor の起源について説明する [69]。式 (27) から、AL1 の項は particle-hole チャンネル  $\phi_{p-h} \equiv T \sum_{q'}^{|\omega_{q'}| < \omega_c} G(k - q')G(k' - q')$  を持つ。ここでカットオフエネルギー  $\omega_c \ll E_F$  はスピン揺らぎのエネルギースケールに対応する。これにより  $\phi_{p-h}$  は  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$  に強い引力相関を与える。加えて、AL2 項は particle-particle チャンネル (Cooper チャンネル)  $\phi_{p-p} \equiv T \sum_{q'}^{|\omega_{q'}| < \omega_c} G(k - q')G(k' + q') \propto \sum_{q'} [1 - f(\xi_{\mathbf{k}-q'}) - f(\xi_{\mathbf{k}'+q'})] / [\xi_{\mathbf{k}-q'} + \xi_{\mathbf{k}'+q'}]$  を持ち、これは  $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$  に強い引力相関を与える。ここで  $f$  は Fermi 分布関数であり、 $\xi$  は FS を構成するバンド分散である。加えて、この 2 つの AL 項は  $\mathbf{k} = \pm \mathbf{k}'$  以外で弱い斥力相関を起こす。状態密度 (DOS) は van Hove 特異点のある X, Y 点近傍で大きくなることから、form factor は  $B_{1g}$  対称性を持つ。

図 10 は  $q = \mathbf{0}, Q_a, Q_d$  の固有値の  $\alpha_s$  依存性である。スピン揺らぎが小さい場合 ( $\alpha_s \lesssim$



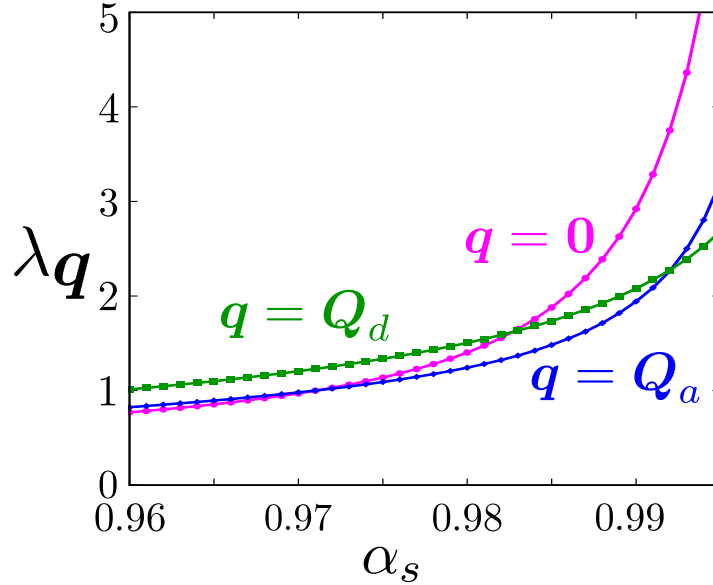


図 10  $q = 0, Q_a, Q_d$  の固有値の  $\alpha_s$  依存性。

0.98)、スピン揺らぎによる VC は小さく、MT 項で誘起される  $q = Q_d$  の揺らぎが最も大きくなる。スピン揺らぎを大きくしていく ( $\alpha_s \rightarrow 1$ ) と、VC は大きくなり AL 項による寄与が支配的となり、 $q = 0$  の揺らぎが最大となる。また  $\lambda_{q=Q_a} > \lambda_{q=Q_d}$  は  $\alpha_s \geq 0.99$  のときに起こる。

$q = 0$  の  $B_{1g}$  ボンド秩序下での線形 DW 方程式について解析について説明する。 $\Delta E = \max_k f_{q=0}(k)$  として、秩序パラメータを導入する。図 11 (a) は  $B_{1g}$  ボンド秩序下における DW 方程式の固有値の  $q$  依存性である。 $B_{1g}$  ボンド秩序が誘起されるに従って、 $q = Q_{a,y} = (0, \delta)$  の揺らぎが大きく増大していることがわかる。これは軸方向の電荷揺らぎは  $B_{1g}$  ボンド秩序によって増大することを意味する。図 11(h,i) はそれぞれボンド秩序下における  $C_2$  対称の Fermi 面と  $\chi^s(q)$  である。ボンド秩序によって変調する Fermi 面は非常に小さいが、 $\chi^s(q)$  の変化は大きくなる。これは RPA の発散機構 (式 (20)) から、 $\chi^0(q)$  の小さな変調が  $\chi^s(q)$  の大きな変調となるためである。このような、 $C_2$  対称なスピン感受率は低ドープの YBCO における中性子散乱で観測されている [70]。

最後に、我々の研究室による functional renormalization group (fRG) による銅酸化物の電子ネマティック転移の解析 [60] と、本論文での結果との比較について説明する。fRG による  $B_{1g}$  対称性を持つ  $p$  軌道秩序の電荷感受率の解析結果は、本論文と同じく初めに  $q = 0$  の電荷秩序が生じ、その秩序下で  $q = Q_a$  の電荷秩序が生じる結果となった。本論文による  $B_{1g}$  対称性を持つボンド秩序でも、 $d$ - $p$  軌道間のホッピングを介した  $B_{1g}$  対称性

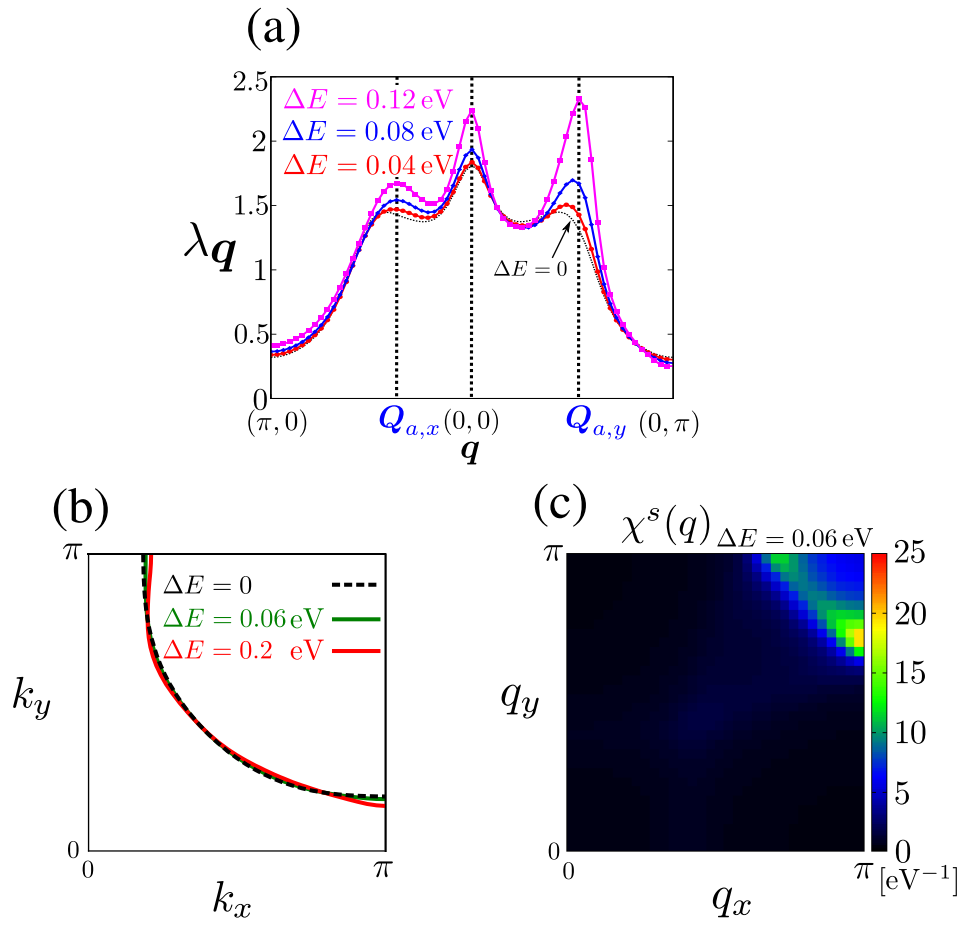


図 11 (a)  $\Delta E = 0.04, 0.08, 0.12$  eV での  $B_{1g}$  ボンド秩序下における固有値  $\lambda_{\mathbf{q}}$  の  $\mathbf{q}$  依存性。(b)  $\Delta E = 0.06, 0.2$  eV での FS。(c)  $\Delta E = 0.06$  eV でのスピン感受率。

を持つ  $p$  軌道秩序が生じる。そのため fRG と DW 方程式の結果はよく一致し、双方の理論の正当性を高めている。

## 5 Result 2: $B_{2g}$ ボンド秩序

本説では hot spot 構造を導入した場合での  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  ボンド秩序の対称性の変化について解説する。銅酸化物では Fermi arc が観測されており [8–10]、準粒子ダンピング  $\gamma(\mathbf{k})$  が  $\mathbf{k} \sim (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$  にピークを持つような、著しい波数依存性 (hot spot 構造) が存在すると考えられる。この準粒子ダンピングは超伝導揺らぎやスピン揺らぎによって起こると提案されている [38–40]。

次小節ではこの hot spot 構造を導入する 2 つの手法について説明し、その次の小節で hot-spot 構造を導入した時における DW 方程式に結果について説明する。

### 5.1 hot spot 構造を持つ自己エネルギーの導入

本小節では hot spot 構造を作る自己エネルギーの導入について説明する。スピン揺らぎによる自己エネルギーを計算する手法として、揺らぎの 1 次項の自己エネルギーを self-consistent に計算する fluctuation exchange (FLEX) 近似が良く用いられる。しかしこの手法は磁気量子臨界点近傍の自己エネルギーを計算することは難しい。

そこで本論文は自己エネルギーとして、次の 2 つの手法で導入する。1 つが自己エネルギーとして手で準粒子ダンピング  $\gamma_{\mathbf{k}}$  を hot spot 近傍にのみ導入する。

$$\Sigma(k) = i\gamma_{\mathbf{k}} \operatorname{sgn}(\varepsilon_n) \quad (28)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \gamma_0 & (\text{within } S_{\text{HS}}) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (29)$$

$S_{\text{HS}}$  は中心  $\mathbf{k} = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$  かつ半径  $R = 0.4\pi$  の円である。このようにダンピングを導入することで、Fermi arc を再現することができる。

次に揺らぎの 1 次みの自己エネルギー (図 12 (a)) を計算する。自己エネルギーは次のように与えられる。

$$\Sigma(k) = T \sum_{k'} V_0(k - k') G_0(k') \quad (30)$$

$$V(q) = \frac{3}{2} V^s(q) + \frac{1}{2} V^c(q) - U^2 \chi^0(q) - U \quad (31)$$

下付き文字 0 は自己エネルギー  $\Sigma = 0$  を意味する。これは FLEX 近似を自己無撞着に計算しない場合の自己エネルギーの計算である  $\alpha_s \gtrsim 0.99$  のとき、FLEX 近似のように自己エネルギーを自己無撞着に解くと  $U$  を非常に大きく ( $U \gg 10\text{eV}$ ) する必要がある

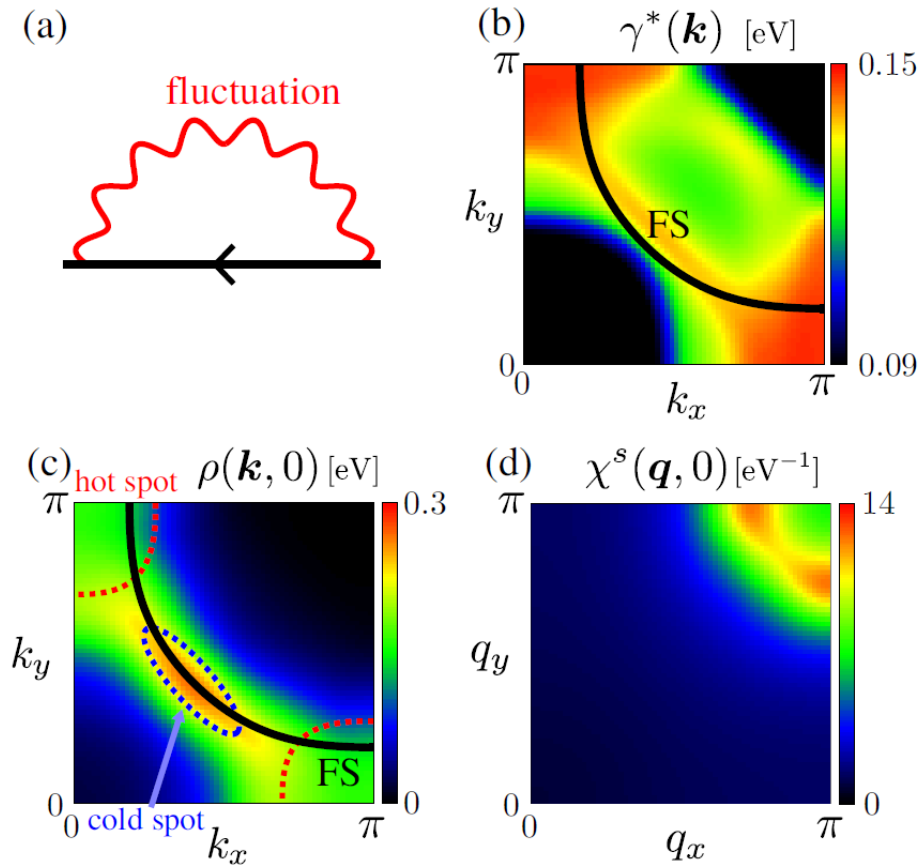


図 12 (a) 揺らぎの 1 次の自己エネルギーのダイアグラム。(b) 自己エネルギーによって得られたダンピング  $\gamma^*$ , (c) スペクトル関数  $\rho$  の  $\mathbf{k}$  依存性。(c) 自己エネルギー導入後のスピン感受率の  $\mathbf{q}$  依存性。

ある。これは自己無撞着条件において、自己エネルギーのフィードバック効果による既約感受率の抑制が過大評価されていることを示す。そのため本研究では自己無撞着条件を課さない。自己無撞着条件がないことによるパラメータの変化は、Stoner 因子  $U_0 \max_{\mathbf{q}} \chi_0^0(\mathbf{q}, 0) = U \max_{\mathbf{q}} \chi^0(\mathbf{q}, 0)$  として、パラメータを決定する。

図 12 (b) は  $\alpha_s = 0.99, p = 0.1$  における質量増強因子  $Z(\mathbf{k})$  を考慮した準粒子ダンピング  $\gamma^*(\mathbf{k})$  である。 $\gamma^*(\mathbf{k})$  は次の式で与えられる。

$$\gamma^*(\mathbf{k}) = -\frac{\text{Im} \Sigma^{\text{R}}(\mathbf{k}, 0)}{Z(\mathbf{k})} \quad (32)$$

$$Z(\mathbf{k}) = \frac{m^*(\mathbf{k})}{m} = 1 - \left. \frac{\partial \Sigma^{\text{R}}(\mathbf{k}, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \quad (33)$$

上付き文字 R は解析接続  $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta$  によって与えられる遅延関数であることを表す。

スピン揺らぎが  $\mathbf{q} \sim \mathbf{Q}_s$  で大きな値を持つことから、その波数  $\mathbf{Q}_s$  で結ばれる FS 近傍の  $\mathbf{k} = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$  で準粒子ダンピングは非常に大きな値を持ち、hot spot を作る。図 12 (c) はスペクトル関数  $\rho(\mathbf{k}, 0) = -\text{Im} G(\mathbf{k}, 0)/\pi$  である。準粒子ダンピングが大きい hot spot 近傍ではスペクトルがほとんど消えているのに対し、準粒子ダンピングが小さい cold spot 近傍ではスペクトルが残り、Fermi arc 構造が得られる。このスペクトル構造は、非常に単純な hot spot モデルである式 (29) によって得られるスペクトルと似ている。そのため、自己エネルギーを導入することによって cold spot による寄与が相対的に強調される。図 12 (d) はスピン感受率である。RPA の結果と比較すると、自己エネルギーの効果によってピーク構造が緩やかになる。

## 5.2 DW 方程式の解析結果: hot spot 構造の影響

まずはじめに単純な hot spot モデル (式 (29)) を導入した場合における結果について説明する。図 13 (a) は  $\alpha_s = 0.99, p = 0.2$  のときの  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  の固有値  $\lambda_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}$  であり、図 13 (b,c) はそれぞれ  $B_{1g}, B_{2g}$  対称性の form factor で  $f_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}^{B_{1g}}, f_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}^{B_{2g}}$  ある。  $\gamma_0$  の増加に従って、  $B_{1g}$  対称性の固有値は大きく減少する。これは hot spot ( $S_{\text{HS}}$  内) で  $|f_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}^{B_{1g}}|$  は最大値をとることから、ダンピングの影響を大きく受けるためである。その一方で  $B_{2g}$  対称性の固有値はほとんど減少しない。これは  $f_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}^{B_{2g}}$  は hot spot 内にノードを持つためである。また図 13 は有効相互作用  $I_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}(k, k')$  (式 (27)) から MT 項を削除し、AL 項のみを考慮した場合の解析での固有値  $\lambda_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}^{\text{AL}}$  である。この場合では  $\gamma_0 \geq 0.6\text{eV}$  において  $B_{2g}$  の固有値が優勢となる。これは MT 項は  $B_{1g}$  ボンド秩序に有利に働くことを意味する。

次に AL 項による  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  の form factor の起源について説明する [69]。式 (27) から、AL1 の項は particle-hole チャンネル  $\phi_{\text{p-h}} \equiv T \sum_{q'}^{|\omega'| < \omega_c} G(k - q')G(k' - q')$  を持つ。ここでカットオフエネルギー  $\omega_c \ll E_F$  はスピン揺らぎのエネルギースケールに対応する。ここで  $\omega_c \ll E_F$  のとき (磁気量子臨界点近傍)、  $\phi_{\text{p-h}}$  は  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$  に強い引力相関を与える。加えて、AL2 項は particle-particle チャンネル (Cooper チャンネル)  $\phi_{\text{p-p}} \equiv T \sum_{q'}^{|\omega'| < \omega_c} G(k - q')G(k' + q') \propto \sum_{q'} [1 - f(\xi_{\mathbf{k}-q'}) - f(\xi_{\mathbf{k}'+q'})]/[\xi_{\mathbf{k}-q'} + \xi_{\mathbf{k}'+q'}]$  を持ち、これは  $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$  に強い引力相関を与える。ここで  $f$  は Fermi 分布関数であり、  $\xi$  は FS を構成するバンド分散である。加えて、この 2 つの AL 項は  $\mathbf{k} = \pm\mathbf{k}'$  以外で弱い斥力相関を起こす。2 つの AL 項の波数依存性が form factor を、  $B_{1g}, B_{2g}$  対称性を含む、いずれかの  $d$  波を起こす。

hot-spot 構造がない場合、状態密度 (DOS) は van Hove 特異点のある hot spot 近傍で大きくなる。そのため、この場合は図 14 (a) のように hot spot 間の相関が支配的となる。

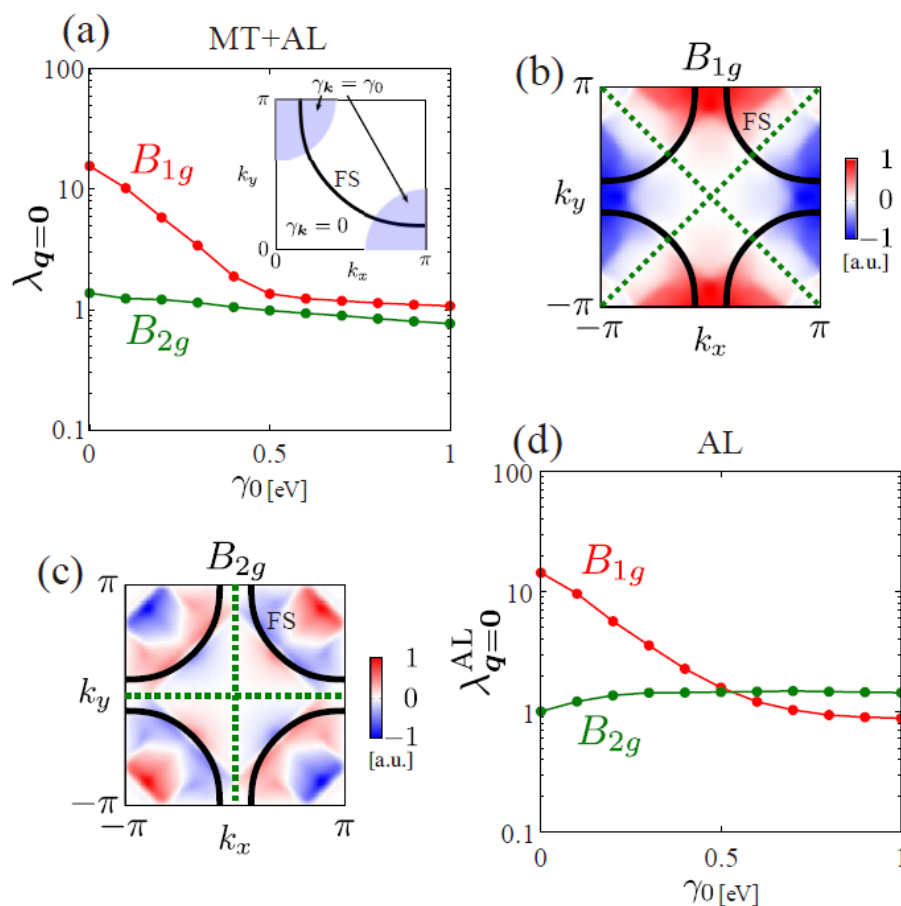


図 13 (a) 得られた  $B_{1g}, B_{2g}$  対称性の form factor と対応する固有値の  $\gamma_0$  依存性。(b,c)  $\gamma_0 = 0.5\text{eV}$  における  $f_{q=0}^{B_{1g}}(\mathbf{k}), f_{q=0}^{B_{2g}}(\mathbf{k})$  の  $\mathbf{k}$  依存性。(d) AL 項のみを導入したときにおける  $B_{1g}, B_{2g}$  対称性の form factor と対応する固有値の  $\gamma_0^{\text{AL}}$  依存性。

$\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$  を満たす hot spot 間  $h_1-h_3, h_2-h_4$  間の引力相関を与え、加えて  $\mathbf{k} \neq -\mathbf{k}'$  となる hot spot 間では、AL 項と MT 項は弱い斥力相関を与える。これによって hot spot 構造がない場合は  $B_{1g}$  対称性の form factor が誘起される。一方で hot-spot 構造がある場合、hot spot 近傍の DOS は大きく減少し、Fermi arc 構造が現れる。その結果、hot-spot 相関は抑制され、14 (b) のように cold-spot 相関が重要となる。AL 項によって cold-spot 間で  $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$  のとき引力相関、そうでないとき斥力相関を与えられることで  $B_{2g}$  対称性の form factor が誘起される。

ここで、MT 項が与える form factor の対称性について補足する。MT 項は参考文献 [大成さん dweq-al] で報告されているように、hot-spot 間のネスティングベクトル  $\mathbf{Q}_s$  によっ

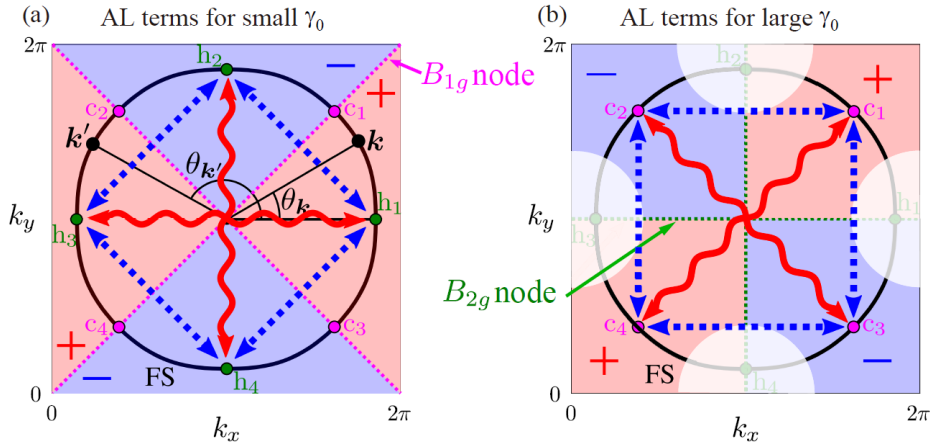


図 14  $\gamma_0$  が小さい時 (a) と大きい時 (b) における AL 項によって誘起される FS 上の相互作用である。赤い矢印は引力相関を示し、青い矢印は斥力相関を示す。白い影がついている領域は準粒子ダンピングが働く領域を示す。

て斥力相関を与える。そのため MT 項は  $B_{1g}$  ボンド揺らぎを増強する。その一方で、銅酸化物の場合、 $B_{2g}$  ボンド揺らぎは抑制される。ただし  $B_{1g}, B_{2g}$  ボンド揺らぎは AL 項が主要な寄与を及ぼし、MT 項はそれと比べて小さな補正を与えている。

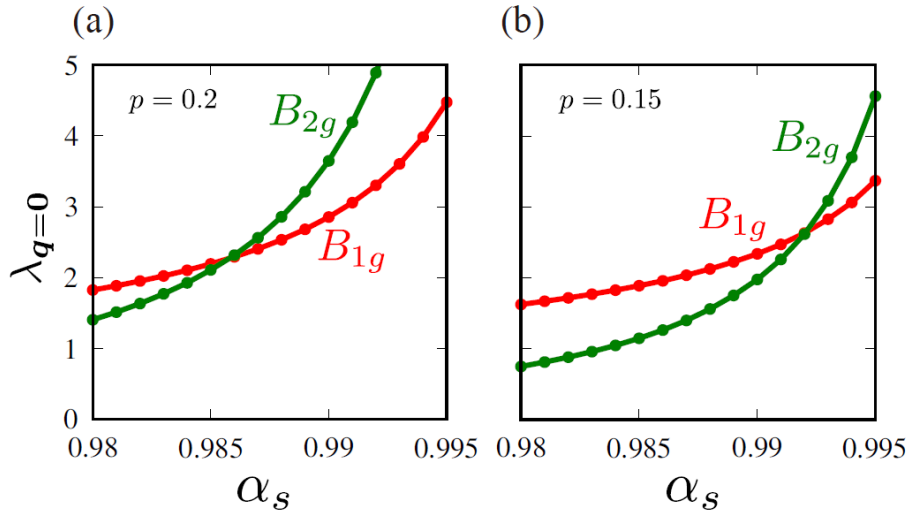


図 15 (a)  $p = 0.2$ , (b)  $p = 0.15$  における  $B_{1g}, B_{2g}$  対称性の固有値  $\lambda_{q=0}$  の  $\alpha_s$  依存性。

次に揺らぎの 1 次の自己エネルギーを導入したときの DW 方程式の解析結果について説明する。図 15 (a,b) はそれぞれ  $p = 0.2, 0.15$  における固有値の  $\alpha_s$  依存性である。どち



らの場合もスピン揺らぎが強い場合、 $B_{2g}$  ボンド揺らぎの固有値は  $B_{1g}$  ボンド揺らぎの固有値よりも大きくなる。つまり  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  の form factor の対称性はスピン揺らぎの増大に伴って、 $B_{1g}$  から  $B_{2g}$  へと変化する。この結果は、 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  の  $B_{2g}$  対称性のボンド秩序が起こることを示す。Hg 系銅酸化物では  $T^*$  以下での hot-spot 近傍の準粒子スペクトルの強い抑制が、いくつかの実験で報告されている [71–73]。そのため Hg 系銅酸化物において観測された  $B_{2g}$  対称性ネマティシティ [28] が説明できると考えられる。

この  $B_{2g}$  ボンド秩序は、先に説明した通り、hot-spot 構造によるものである。スピン揺らぎの増大によって、自己エネルギーによる準粒子ダンピングが増大し、hot-spot 構造が顕著になる。Hot-spot 構造によって  $B_{1g}$  ボンド揺らぎは抑制され、 $B_{2g}$  ボンド揺らぎは相対的に優位になる。その結果、 $\alpha_s \rightarrow 1$  につれて  $B_{2g}$  ボンド秩序が誘起される。

最後に自己エネルギーを導入した場合における、 $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a$  のボンド揺らぎについて補足する。前節で示した通り、この  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a$  ボンド揺らぎは AL 項で説明される。しかし自己エネルギーを導入した場合、本研究の数値計算では  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a$  のボンド揺らぎは起こらなかった。しかし準粒子ダンピングは低温になれば減少することから、より低温での数値計算を行うことで  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a$  のボンド揺らぎが発生すると考えられる。このことは、将来解決すべき課題である。



## 6 ボンド秩序による磁気感受率の面内異方性

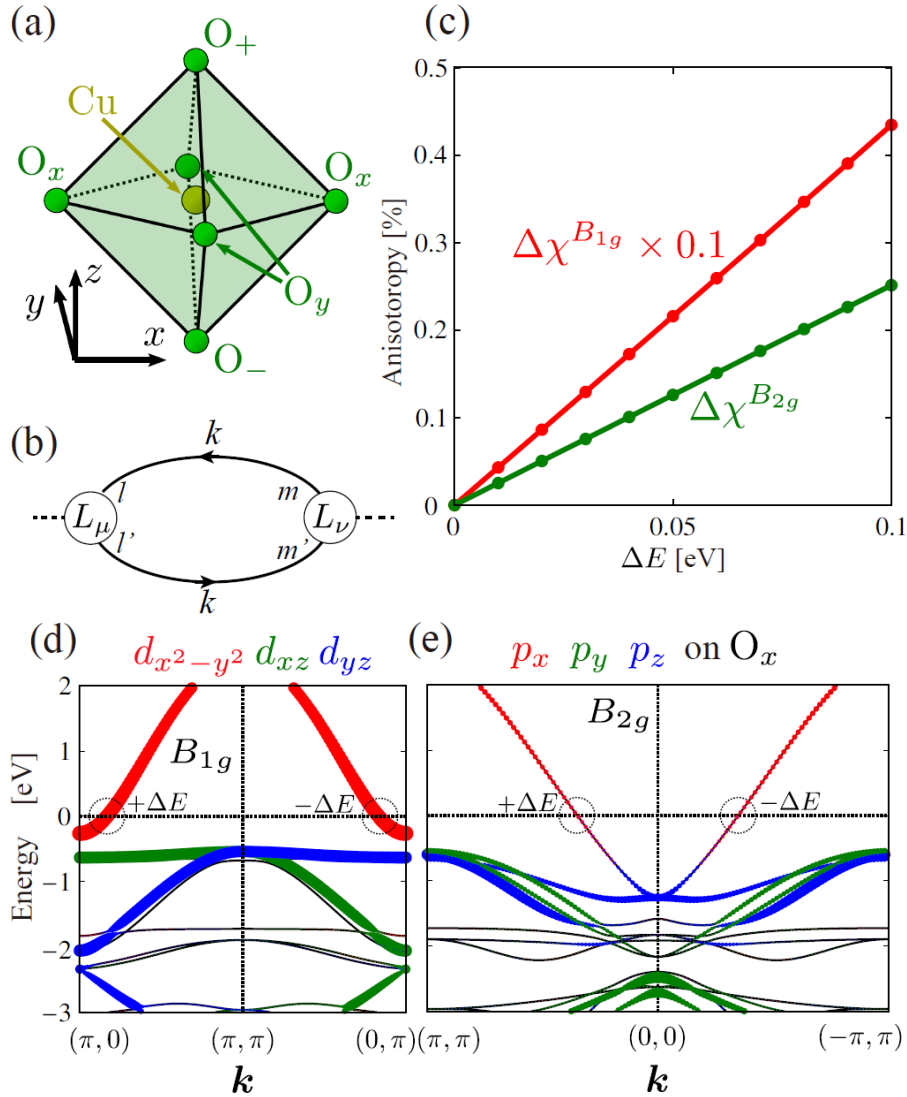


図 16 (a) Cu,  $O_x$ ,  $O_y$ ,  $O_+$ ,  $O_-$  で構成される  $\text{CuO}_6$  八面体。Cu $O_2$  面は Cu,  $O_x$ ,  $O_y$  で構成される。(b)  $\chi_{\mu\nu}^{\text{orb}, l'l'mm'}$  のダイアグラム。(c) 磁気異方性の  $\Delta E$  依存性。(d) 17 軌道模型のバンド構造  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ 。赤, 青, 緑の円はそれぞれ  $d_{x^2-y^2}$ ,  $d_{xz}$ ,  $d_{yz}$  軌道の混成の大きさを示す。ボンド秩序によって  $\varepsilon_{\mathbf{k}}^c$  は  $\varepsilon_{\mathbf{k}}^c \pm \Delta E$  となる。(e) バンド構造であり、赤, 青, 緑の円はそれぞれ  $O_x$  の  $p_x, p_y, p_z$  軌道の混成の大きさを示す。

本節では、ボンド秩序によって帯磁率に面内異方性が誘起されることを示す。実験的には、 $T < T^*$  で異方性  $\chi_{xx} \neq \chi_{yy}$ ,  $\chi_{xy}$  がそれぞれ Y 系, Hg 系銅酸化物で報告されている。

銅酸化物はスピン軌道相互作用 (SOI) が非常に小さく、そのため電荷チャンネルの秩序であるボンド秩序が帯磁率に異方性を引き起こす理由は自明ではない。そこで Cu の 3d 軌道、O の 2p 軌道全てを考慮し、これら軌道の角運動量による帯磁率  $\chi_{\mu\nu}^{\text{orb}}$  を考える。

ここで図 16 (a) に示すように、WIEN2k, WANNIER90 を用いて、Cu,O のそれぞれ 3d, 2p 軌道を取り入れた Hg 系銅酸化物  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$  の 17 軌道強束縛模型を構築する [74]。ハミルトニアンは次のようになる。

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{h}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (34)$$

$c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$  は 17 軌道の電子の生成演算子のベクトルであり、 $\hat{h}_{\mathbf{k}}$  は  $17 \times 17$  の行列である。ここで Cu の 3d 軌道  $d_{x^2-y^2}, d_{xz}, d_{yz}, d_{xy}, d_{3z^2-r^2}$  についてそれぞれ  $l = 1, 2, 3, 4, 5$  として表すこととする。さらに O<sub>x</sub> の 2p 軌道  $p_x, p_y, p_z$  について  $l = 6, 7, 8$  として表す。他の酸素の 2p 軌道は  $l = 9 \sim 17$  である。また単純化のため、Coulomb 相互作用は考慮しない。

ボンド秩序が存在する場合、軌道表示の Green 関数は次のようになる。

$$G_{ll'}(\mathbf{k}) = [(i\varepsilon_n + \mu)\hat{1} - \hat{h}_{\mathbf{k}} - \hat{f}^\Gamma(\mathbf{k})]_{ll'}^{-1} \quad (35)$$

$\hat{f}^\Gamma(\mathbf{k})$  は  $\Gamma = B_{1g}, B_{2g}$  対称性を持つボンド秩序の form factor である。ここで FS を主に構成する  $d_{x^2-y^2}$  軌道のボンド秩序を考え、 $\{\hat{f}^\Gamma(\mathbf{k})\}_{lm} = f^\Gamma(k)\delta_{l,1}\delta_{m,1}$  とする。また  $f^{B_{1g}}(\mathbf{k}) = \Delta E(\cos k_x - \cos k_y)/2$ ,  $f^{B_{2g}}(\mathbf{k}) = \Delta E \sin k_x \sin k_y$  と過程する。この Green 関数を用いて、軌道角運動量による感受率  $\chi_{\mu\nu}^{\text{orb}}(\mu, \nu = x, y, z)$  は次のように与えられる。

$$\chi_{\mu\nu}^{\text{orb}} = \sum_{l, l', m, m'} \chi_{\mu\nu}^{\text{orb}, ll' mm'} \quad (36)$$

$$\chi_{\mu\nu}^{\text{orb}, ll' mm'} = -2\mu_B^2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} L_\mu^{l'l} G_{lm}(\mathbf{k}) G_{m'l'}(\mathbf{k}) L_\nu^{mm'} \quad (37)$$

図 16 (b) は上式のダイアグラムである。松原振動数の総和を取ることで、次のように書き直される。

$$\begin{aligned} \chi_{\mu\nu}^{\text{orb}, ll' mm'} &= \frac{2\mu_B^2}{N} \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \left( -\frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon_{\mathbf{k}}^\alpha} L_\mu^{l'l} L_\nu^{mm'} U_{ll', mm'}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) \\ &+ \frac{2\mu_B^2}{N} \sum_{\alpha \neq \beta, \mathbf{k}} \frac{n(\varepsilon_{\mathbf{k}}^\alpha) - n(\varepsilon_{\mathbf{k}}^\beta)}{\varepsilon_{\mathbf{k}}^\beta - \varepsilon_{\mathbf{k}}^\alpha} L_\mu^{l'l} L_\nu^{mm'} U_{ll', mm'}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (38)$$

$l, l', m, m'$  は軌道を指し、 $\alpha, \beta$  はバンドを指す。 $L_\mu^{ll'}$  は  $d(p)$  軌道の角運動量 [75] であり、 $l, l' = 1 \sim 5(6 \sim 17)$  である。 $n(\varepsilon)$  は Fermi 分布関数、 $\varepsilon_{\mathbf{k}}^\alpha$  はボンド秩序下における

るバンド  $\alpha$  のエネルギー分散である。また  $U_{ll',mm'}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \equiv u_{\mathbf{k}}^{l,\alpha}(u_{\mathbf{k}}^{m,\alpha})^* u_{\mathbf{k}}^{m',\beta}(u_{\mathbf{k}}^{l',\beta})^*$  であり、 $u_{\mathbf{k}}^{l,\alpha} = \langle l\mathbf{k}|\alpha\mathbf{k} \rangle$  はバンド-軌道表示のユニタリ-行列要素である。また式 (38) の第 1 項と第 2 項はそれぞれ Pauli 項と van-Vleck 項に対応する。

$B_{1g}(B_{2g})$  のネマティック秩序下では、点群の理論から、帯磁率が  $\chi_{xx} \neq \chi_{yy} (\chi_{xy} \neq 0)$  となる。これ以降  $B_{1g}$  異方性を  $\Delta\chi^{B_{1g}} = |(\chi_{xx} - \chi_{yy})/(\chi_{xx} + \chi_{yy})|$ 、 $B_{2g}$  異方性を  $\Delta\chi^{B_{2g}} = |2\chi_{xy}/(\chi_{xx} + \chi_{yy})|$  として導入する。

図 16 (c) は  $p = 0.2$  における異方性  $\Delta\chi^\Gamma$  である。得られる異方性は  $p$  の変化について大きく変わらない。 $\Gamma = B_{1g}, B_{2g}$  の両方の場合において、 $\Delta\chi^\Gamma$  は  $\Delta E$  に線形に比例する。また  $\Delta\chi^{B_{1g}}$  は  $\Delta\chi^{B_{2g}}$  の約 10 倍大きい。

ここで  $\Gamma = B_{1g}$  における  $\Delta\chi^\Gamma$  の起源について詳細に議論する。単純化のため  $B_{1g}$  異方性に主要な寄与を与える  $d_{x^2-y^2}, d_{xz}, d_{yz}$  軌道のみを考慮して考える。これら 3 軌道について、 $L_x^{13} = -L_x^{31} = i, L_y^{12} = -L_y^{21} = i$  であり、それ以外は  $L_\mu^{lm} = 0$  である。伝導バンド ( $\alpha = c$ ) はほぼ  $d_{x^2-y^2}$  軌道で構成されていることから、 $\Delta\chi^{B_{1g}}$  は主に van-Vleck 項から与えられる。また図 16 (d) に示す、 $d_{xz}, d_{yz}$  軌道で構成されるバレンスバンド ( $\alpha = v$ ) は van-Vleck 項に主要な寄与を与える。まとめると、 $|u_{\mathbf{k}}^{2,c}|, |u_{\mathbf{k}}^{3,c}|, |u_{\mathbf{k}}^{1,v}| \ll 1$  である。加えて図 16 (d) の通り、 $X = (\pi, 0)$  点近傍で  $|u_{\mathbf{k}}^{2,v}| \gg |u_{\mathbf{k}}^{3,v}|$  であり、 $Y = (0, \pi)$  点近傍では逆が成り立つ。

上記の関係から、van-Vleck 帯磁率による  $B_{1g}$  ボンド秩序下における  $\Delta\chi^{B_{1g}}$  は次のようになる。

$$\chi_{xx} - \chi_{yy} \approx \frac{2\mu_B^2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n(\varepsilon_{\mathbf{k}}^c) - n(\varepsilon_{\mathbf{k}}^v)}{\varepsilon_{\mathbf{k}}^v - \varepsilon_{\mathbf{k}}^c} (|u_{\mathbf{k}}^{3,v}|^2 - |u_{\mathbf{k}}^{2,v}|^2) \quad (39)$$

ここで  $|u_{\mathbf{k}}^{1,c}| \simeq 1$  として落としてある。ここで  $|u_{\mathbf{k}}^{3,v}|^2 - |u_{\mathbf{k}}^{2,v}|^2$  は  $X$  点近傍で正であり、 $Y$  点近傍で負である。 $B_{1g}$  ボンド秩序がない場合、 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  かつ  $\mathbf{k}' = (k_y, k_x)$  において  $|u_{\mathbf{k}}^{3,\alpha}|^2 - |u_{\mathbf{k}}^{2,\alpha}|^2$  かつ  $\varepsilon_{\mathbf{k}}^\alpha = \varepsilon_{\mathbf{k}}^\alpha$  から、式 (39) は厳密に 0 となる。しかし  $B_{1g}$  ボンド秩序が存在すれば、 $X$  点近傍で  $\varepsilon_{\mathbf{k}}^c + \Delta E$ 、 $Y$  点近傍で  $\varepsilon_{\mathbf{k}}^c - \Delta E$  となることから、先の関係が破れる。そのため式 (39) は  $\Delta E$  に比例して有限に残り、図 16 (c) となる。

最後に  $B_{2g}$  ボンド秩序下における帯磁率の異方性について説明する。 $d$  軌道角運動量における  $B_{2g}$  異方性は次のように与えられる。

$$\chi_{xy} \approx \frac{2\mu_B^2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n(\varepsilon_{\mathbf{k}}^c) - n(\varepsilon_{\mathbf{k}}^v)}{\varepsilon_{\mathbf{k}}^v - \varepsilon_{\mathbf{k}}^c} \{u_{\mathbf{k}}^{3,v}\}^* u_{\mathbf{k}}^{2,v} \quad (40)$$

これは  $C_4$  対称性が存在する場合、正確に 0 となる。しかし  $B_{2g}$  ボンド秩序下では  $C_4$  対称性が破れて有限となる。ただし、 $X, Y$  点近傍では  $|(u_{\mathbf{k}}^{3,v})^* u_{\mathbf{k}}^{2,v}| \ll 1$  となる関係から、得

られる異方性は非常に小さくなる。実際に図 16 (c) で得られた有限の  $\chi_{xy}$  の起源は、図 16 (e) で示されている伝導バンドにおける X,Y 点近傍での  $d_{x^2-y^2}$  軌道と  $p_x, p_y$  軌道の混成による、 $p$  軌道角運動量である。

## 7 Summary and Discussion

銅酸化物は  $T = T^*$  で  $B_{1g}$  もしくは  $B_{2g}$  対称性を持つ一様な電子ネマティック転移が起こり、その秩序下の  $T = T_{\text{CDW}}$  で  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a = (\delta, 0)$ ;  $\delta \sim \pi/2$  となる電子ネマティック転移が起こる。この2つの電子ネマティック転移は擬ギャップや超伝導と関係していると予想されるも、統一的に説明した理論が存在しない。そこで本論文ではこの2つの電子ネマティック転移を統一的な理解を目指した。銅酸化物の異常物性相と超伝導相がスピン揺らぎによって説明できることから、スピン揺らぎ誘起機構で2つの電子ネマティック転移が説明できることが期待される。そこでスピン揺らぎによるバーテックス補正である MT, AL 項を無限次まで取り入れ、さらに form factor を導入して解析を行う。第一原理計算による3軌道  $d$ - $p$  ハバード模型に基づいて、MT, AL バーテックス補正を自己無撞着に取り込める線形 DW 方程式を用いて電荷揺らぎを解析した。

第4節では、hot-spot 構造がない場合について解析した。その結果、スピン揺らぎが大きい時 ( $\alpha_s \gtrsim 0.98$ ) に一様な  $B_{1g}$  対称性を持つボンド揺らぎが最も大きくなった。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、このボンド揺らぎは一様な  $B_{1g}$  ボンド秩序下で増強されることを示した。これらの結果は、まず一様な  $B_{1g}$  ボンド秩序が  $T^*$  で起こり、次に  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_a$  のボンド秩序が  $T < T_{\text{CDW}}$  で起こるという理論的予言を与える。これは Y, Bi 系銅酸化物の2つのネマティック転移と整合している。この2つのボンド転移は無限次まで取り入れられた AL 項によって生じている。

第5節では、hot-spot 構造がある場合について解析した。その結果、hot-spot 構造が顕著でない場合には  $B_{1g}$  ボンド秩序が与えられる一方で、hot-spot 構造が顕著な場合には  $B_{2g}$  ボンド秩序が得られることがわかった。後者は Hg 系銅酸化物の  $T = T^*$  での  $B_{2g}$  電子ネマティック転移に対応すると考えられる。事実、Hg 系銅酸化物では  $T^*$  以下での hot-spot 近傍の準粒子スペクトルの強い抑制が、いくつかの実験で報告されている。たとえば Hg1201 における  $T_c$  以下でのスピン共鳴の欠如 [71] や  $T_c$  での  $B_{1g}$  ラマンスペクトルの抑制 [72, 73] は、 $T^*$  以下での顕著な hot-spot 構造を示す。また Hg1201 での擬ギャップ領域での明確な抵抗率  $\rho \propto T^2$  [2] によっても示唆されている。Hg 系銅酸化物でのこれらの実験結果は、本研究での hot spot 構造によって誘起される  $B_{2g}$  ネマティシティと整合する。Hg1201 において、顕著な hot-spot 構造が出現する微視的理由は、将来の重要な課題である。

第6節では、一様な  $B_{1g}, B_{2g}$  ボンド秩序によって帯磁率に面内異方性が誘起することを示した。銅酸化物は  $3d$  電子系であるためスピン軌道相互作用が小さく、ボンド秩序に

よって帯磁率に異方性が生じることは自明ではない。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。その結果、ネマティックなボンド秩序によって伝導バンドの  $C_4$  対称性が破れることで、van-Vleck 過程から帯磁率に面内異方性が誘起されることを示した。本理論は、磁気トルク実験からボンド秩序の対称性を決定することに対する微視的根拠を与える。

本論文でスピン揺らぎ誘起機構により銅酸化物の 2 つの電子ネマティック転移が起こることを示した。2 つの電子ネマティック秩序はボンド秩序であり、その微視的な機構は AL バーテックス補正である。バーテックス補正によって様々なスピン揺らぎ誘起の電荷秩序が引き起こされ、その対称性は hot-spot 構造と密接に関係する。これらの結果は銅酸化物や、他の磁気量子臨界点に近い金属における多様なネマティシティへの洞察を与える。

## 8 謝辞

本研究を行う際、指導教員である紺谷浩教授、大成誠一郎准教授、山川洋一助教にご指導を受けました。最先端の研究を進められたのは研究室での丁寧な指導によるものです。非常に苦しい時期も助けられ、大変感謝しております。研究室の皆さんにも多く支えてもらい、大変感謝しております。また小林義明准教授には本論文に丁寧なご指摘をいただき大変感謝しております。最後に物性理論研究室の今後益々の発展を祈り、謝辞とさせていただきます。

## 参考文献

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [2] N. Barišić, M. K. Chan, Y. Li, G. Yu, X. Zhao, M. Dressel, A. Smontara, and, M. Greven,
- [3] T. Moriya and K. Ueda, *Adv. Phys.* **49**, 555 (2000).
- [4] K. Yamada, *Electron Correlation in Metals* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2004).
- [5] D. J. Scalapino, *Phys. Rep.* **250**, 329 (1995).
- [6] H. Kontani, *Phys. Rep.* **71**, 026501 (2008); H. Kontani, *Transport Phenomena in Strongly Correlated Fermi Liquids* (Springer, Heidelberg, 2013).
- [7] T. Moriya, Y. Takahashi, and K. Ueda *J. Phys. Soc. Jpn.* **59**, 2905 (1990).
- [8] T. Yoshida, X. J. Zhou, T. Sasagawa, W. L. Yang, P. V. Bogdanov, A. Lanzara, Z. Hussain, T. Mizokawa, A. Fujimori, H. Eisaki, Z.-X. Shen, T. Kakeshita, and S. Uchida, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 027001 (2003).; T. Yoshida, M. Hashimoto, I. M. Vishik, Z.-X. Shen, and A. Fujimori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 011006 (2012).
- [9] A. Kanigel, M. R. Norman, M. Randeria, U. Chatterjee, S. Souma, A. Kaminski, H. M. Fretwell, S. Rosenkranz, M. Shi, T. Sato, T. Takahashi, Z. Z. Li, H. Raffy, K. Kadowaki, D. Hinks, L. Ozyuzer, and J. C. Campuzano, *Nat. Phys.* **2**, 447 (2006).
- [10] T. Kondo, Y. Hamaya, A. D. Palczewski, T. Takeuchi, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. Gu, J. Schmalian, and A. Kaminski, *Nat. Phys.* **7**, 21 (2011).
- [11] G. Ghiringhelli, M. L. Tacon, M. Minola, S. Blanco-Canosa, C. Mazzoli, N. B. Brookes, G. M. D. Luca, A. Frano, D. G. Hawthorn, F. He, T. Loew, M. M. Sala, D. C. Peets, M. Salluzzo, E. Schierle, R. Sutarto, G. A. Sawatzky, E. Weschke, B. Keimer, and L.

- Braicovich, *Science* **337**, 821 (2012).
- [12] J. Chang, E. Blackburn, A. T. Holmes, N. B. Christensen, J. Larsen, J. Mesot, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, A. Watenphul, M. v. Zimmermann, E. M. Forgan, and S. M. Hayden, *Nat. Phys.* **8**, 871 (2012).
- [13] E. Blackburn, J. Chang, M. Hücker, A. T. Holmes, N. B. Christensen, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, U. Rütt, O. Gutowski, M. v. Zimmermann, E. M. Forgan, and S. M. Hayden, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 137004 (2013).
- [14] R. Comin, A. Frano, M. M. Yee, Y. Yoshida, H. Eisaki, E. Schierle, E. Weschke, R. Sutarto, F. He, A. Soumyanarayanan, Y. He, M. L. Tacon, I. S. Elfimov, J. E. Hoffman, G. A. Sawatzky, B. Keimer, and A. Damascelli, *Science* **343**, 390 (2014).
- [15] E. H. da Silva Neto, P. Aynajian, A. Frano, R. Comin, E. Schierle, E. Weschke, A. Gyenis, J. Wen, J. Schneeloch, Z. Xu, S. Ono, G. Gu, M. L. Tacon, and A. Yazdani, *Science* **343**, 393 (2014).
- [16] W. Tabis, Y. Li, M. L. Tacon, L. Braicovich, A. Kreyssig, M. Minola, G. Dellea, E. Weschke, M. J. Veit, M. Ramazanoglu, A. I. Goldman, T. Schmitt, G. Ghiringhelli, N. Barišić, M. K. Chan, C. J. Dorow, G. Yu, X. Zhao, B. Keimer, and M. Greven, *Nat. Commun.* **5**, 5875 (2014).
- [17] M. Hücker, M. v. Zimmermann, G. D. Gu, Z. J. Xu, J. S. Wen, G. Xu, H. J. Kang, A. Zheludev, and J. M. Tranquada, *Phys. Rev. B* **83**, 104506 (2011).
- [18] R. Comin, R. Sutarto, F. He, E. da Silva Neto, L. Chauviere, A. Frano, R. Liang, W. N. Hardy, D. Bonn, Y. Yoshida, H. Eisaki, J. E. Hoffman, B. Keimer, G. A. Sawatzky, and A. Damascelli, *Nat. Mater.* **14**, 796 (2015).
- [19] T. Hanaguri, C. Lupien, Y. Kohsaka, D.-H. Lee, M. Azuma, M. Takano, H. Takagi, and J. C. Davis, *Nature* **430**, 1001 (2004).
- [20] Y. Kohsaka, T. Hanaguri, M. Azuma, M. Takano, J. C. Davis, and H. Takagi, *Nat. Phys.* **8**, 534 (2012).
- [21] M. J. Lawler, K. Fujita, J. Lee, A. R. Schmidt, Y. Kohsaka, C. K. Kim, H. Eisaki, S. Uchida, J. C. Davis, J. P. Sethna, and E.-A. Kim, *Nature* **466**, 347 (2010).
- [22] K. Fujita, M. H. Hamidian, S. D. Edkins, C. K. Kim, Y. Kohsaka, M. Azuma, M. Takano, H. Takagi, H. Eisaki, S. Uchida, A. Allais, M. J. Lawler, E.-A. Kim, S. Sachdev, and J. C. S. Davis, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **111**, E3026 (2014).
- [23] A. Bianconi, N. L. Saini, A. Lanzara, M. Missori, T. Rossetti, H. Oyanagi, H. Yamaguchi, K. Oka, and T. Ito, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3412 (1996).



- [24] A. Shekhter, B. J. Ramshaw, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, F. F. Balakirev, R. D. McDonald, J. B. Betts, S. C. Riggs, and A. Migliori, *Nature* **498**, 75 (2013).
- [25] R.-H. He, M. Hashimoto, H. Karapetyan, J. D. Koralek, J. P. Hinton, J. P. Testaud, V. Nathan, Y. Yoshida, H. Yao, K. Tanaka, W. Meevasana, R. G. Moore, D. H. Lu, S.-K. Mo, M. Ishikado, H. Eisaki, Z. Hussain, T. P. Devereaux, S. A. Kivelson, J. Orenstein, A. Kapitulnik, and Z.-X. Shen, *Science* **331**, 1579 (2011).
- [26] S. Nakata, M. Horio, K. Koshiishi, K. Hagiwara, C. Lin, M. Suzuki, S. Ideta, K. Tanaka, D. Song, Y. Yoshida, H. Eisaki, and A. Fujimori, arXiv:1811.10028 (2018).
- [27] Y. Sato, S. Kasahara, H. Murayama, Y. Kasahara, E.-G. Moon, T. Nishizaki, T. Loew, J. Porras, B. Keimer, T. Shibauchi, and Y. Matsuda, *Nat. Phys.* **13**, 1074 (2017).
- [28] H. Murayama, Y. Sato, R. Kurihara, S. Kasahara, Y. Mizukami, Y. Kasahara, H. Uchiyama, A. Yamamoto, E.-G. Moon, J. Cai, J. Freyermuth, M. Greven, and Y. Matsuda, *Nat. Commun.* **10**, 3282 (2019).
- [29] M. Yi, D. H. Lu, J.-H. Chu, J. G. Analytis, A. P. Sorini, A. F. Kemper, B. Moritz, S.-K. Mo, R. G. Moore, M. Hashimoto, W.-S. Lee, Z. Hussain, T. P. Devereaux, I. R. Fisher, and Z.-X. Shen, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **108**, 6878 (2011).
- [30] J. Li, D. Zhao, Y. P. Wu, S. J. Li, D. W. Song, L. X. Zheng, N. Z. Wang, X. G. Luo, Z. Sun, T. Wu, and X. H. Chen, arXiv:1611.04694 (2016).
- [31] X. Liu, R. Tao, M. Ren, W. Chen, Q. Yao, T. Wolf, Y. Yan, T. Zhang, and D. Feng, *Nat. Commun.* **10**, 1039 (2019).
- [32] K. Ishida, M. Tsujii, S. Hosoi, Y. Mizukami, S. Ishida, A. Iyo, H. Eisaki, T. Wolf, K. Grube, H. V. Löhneysen, R. M. Fernandes, and T. Shibauchi, arXiv:1812.05267 (2018).
- [33] S. Onari and H. Kontani, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 137001 (2012).
- [34] S. Onari, Y. Yamakawa, and H. Kontani, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 187001 (2014).
- [35] S. Onari, Y. Yamakawa, and H. Kontani, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 227001 (2016).
- [36] N. Barišić *et al.*, *Nat. Phys.* **9**, 761 (2013).
- [37] J. A. Gillet, T. Auler, M. Horvatić, C. Berthier, Y. Berthier, P. Ségransan, and J. Y. Henry, *Physica C* **235-240**, 1667 (1994).
- [38] D. Sénéchal and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126401 (2004).
- [39] B. Kyung, S. S. Kancharla, D. Senechal, A.-M. S. Tremblay, M. Civelli, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **73**, 165114 (2006).
- [40] T. A. Maier, M. S. Jarrell, and D. J. Scalapino, *Physica C* **460-462**, 13 (2007).
- [41] S. Bulut, W. A. Atkinson, and A. P. Kampf, *Phys. Rev. B* **88**, 155132 (2013).

- [42] Y. Yamakawa and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. **114**, 257001 (2015).
- [43] E. Berg, E. Fradkin, S. A. Kivelson, and J. M. Tranquada, New J. Phys. **11**, 115004 (2009).
- [44] E. Fradkin, S. A. Kivelson, and J. M. Tranquada, Rev. Mod. Phys. **87**, 457 (2015).
- [45] Y. Wang, D. F. Agterberg, and A. V. Chubukov, Phys. Rev. Lett. **114**, 197001 (2015).
- [46] P. A. Lee, Phys. Rev. X **4**, 031017 (2014).
- [47] T. Holder and W. Metzner, Phys. Rev. B **85**, 165130 (2012).
- [48] Y. Wang and A. V. Chubukov, Phys. Rev. B **90**, 035149 (2014).
- [49] J. C. Davis and D.-H. Lee, Proc. Natl. Acad. Sci. **110**, 17623 (2013).
- [50] C. Husemann and W. Metzner, Phys. Rev. B **86**, 085113 (2012).
- [51] K. B. Efetov, H. Meier, and C. Pépin, Nat. Phys. **9**, 442 (2013).
- [52] V. Mishra and M. R. Norman, Phys. Rev. B **92**, 060507 (2015).
- [53] P. P. Orth, B. Jeevanesan, R. M. Fernandes, and J. Schmalian, NPJ Quantum Materials **4**, 4 (2019).
- [54] M. A. Metlitski and S. Sachdev, New J. Phys. **12**, 105007 (2010).
- [55] S. Sachdev and R. La Placa, Phys. Rev. Lett. **111**, 027202 (2013).
- [56] K. Ido, T. Ohgoe, and M. Imada, Phys. Rev. B **97**, 045138 (2018).
- [57] A. S. Darmawan Y. Nomura Y. Yamaji, and M. Imada, Phys. Rev. B **98**, 205132 (2018).
- [58] S. R. White and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **80**, 1272 (1998).
- [59] G. Hager, G. Wellein, E. Jeckelmann, and H. Fehske, Phys. Rev. B **71**, 057108 (2005).
- [60] M. Tsuchiizu, K. Kawaguchi, Y. Yamakawa, and H. Kontani, Phys. Rev. B **97**, 165131 (2018).
- [61] M. Tsuchiizu, Y. Ohno, S. Onari, and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. **111**, 057003 (2013).
- [62] H. Kontani and Y. Yamakawa, Phys. Rev. Lett. **113**, 047001 (2014).
- [63] M. Tsuchiizu, Y. Yamakawa, and H. Kontani, Phys. Rev. B **93**, 155148 (2016).
- [64] R. Tazai and H. Kontani, Phys. Rev. B **98**, 205107 (2018).
- [65] R. Tazai and H. Kontani, J. Phys. Soc. Jpn. **88**, 063701 (2019).
- [66] R. Tazai and H. Kontani, Phys. Rev. B **100**, 241103(R) (2019).
- [67] P. Hansmann, N. Parragh, A. Toschi, G. Sangiovanni, and K. Held, New J. Phys. **16**, 033009 (2014).
- [68] S. Caprara, C. Di Castro, M. Grilli, and D. Suppa, Phys. Rev. Lett. **95**, 117004 (2005).
- [69] S. Onari and H. Kontani, Phys. Rev. B **100**, 020507(R) (2019)..
- [70] V. Hinkov, D. Haug, B. Fauque, P. Bourges, Y. Sidis, A. Ivanov, C. Bernhard, C. T. Lin,

- and B. Keimer, *Science* **319**, 597 (2008).
- [71] M. K. Chan, C. J. Dorow, L. Mangin-Thro, Y. Tang, Y. Ge, M. J. Veit, G. Yu, X. Zhao, A. D. Christianson, J. T. Park, Y. Sidis, P. Steffens, D. L. Abernathy, P. Bourges, and M. Greven, *Nat. Commun.* **7**, 10819 (2016).
- [72] Y. Li, M. Le Tacon, Y. Matiks, A. V. Boris, T. Loew, C. T. Lin, Lu Chen, M. K. Chan, C. Dorow, L. Ji, N. Barišić, X. Zhao, M. Greven, and B. Keimer *Phys. Rev. Lett.* **111**, 187001 (2013).
- [73] M. Le Tacon, A. Sacuto, A. Georges, G. Kotliar, Y. Gallais, D. Colson, and A. Forget, *Nat. Phys.* **2**, 537 (2006).
- [74] A. Asab, A. R. Armstrong, I. Gameson, P. P. Edwards, *Physica C* **225**, 180 (1995).
- [75] T. Tanaka, H. Kontani, M. Naito, D. S. Hirashima, K. Yamada, and J. Inoue, *Phys. Rev. B* **77**, 165117 (2008).