# 高温超伝導の理論的研究

# 柳澤孝<sup>1</sup>, 宮崎真長<sup>2</sup>, 山地邦彦<sup>1</sup>

 <sup>1</sup> National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
 <sup>2</sup> Hakodate National College of Technology

# Outline

- 1. Introduction
- 2. Superconductivity
- 3. High Temperature Superconductivity
- 4. Hubbard Model
- 5. Variational Monte Carlo method
- 6. Stripes in high-Tc cuprates
- 7. Spin-orbit coupling and Lattice distortion
- 8. Summary

# 1. Introduction

### Key words: Physics from U (Coulomb interactions)

- •A possibility of superconductivity Superconductivity from U
- Competition of AF and SC
- Incommensurate state
   Stripes and SC
   Compete and Collaborate
- •Stripes in the lightly-doped region
- •Singular Spectral function



# Purpose of Theoretical study

- 1. Origin of the superconductivity
  - Symmetry of Cooper pairs
  - Mechanism of attractive interaction

Coulomb interaction U, Exchange interaction J

- 2. Physics of Anomalous Metallic behavior
  - Inhomogeneous electronic states: stripe
  - Pseudogap phenomena
  - Structural transition LTO, LTT

# 2. Superconductivity



Elements that become superconducting



Superconductive at low temperatures

Superconductive under pressure

# 巨視的量子現象

kと-kの電子がペアーを つくり、ゲージ(位相) 不変性が破れた状態

電子には位相という仮想的 空間内での回転の自由度が あり、勝手な方向を向いて いる。が、超伝導状態では すべての電子ペアが同じ方 向を向いている。



BCS理論

<u>対称性の破れ</u>

引力相互作用によるフェルミ面の 不安定性によって超伝導がひきお こされる

### 超伝導体の特徴

電気抵抗 0



マイスナー効果



フッシング効果 超伝導体に磁石を近付けておいて冷やすと超伝導体 内部に入り込んだ磁場により(第2種超伝導体)、 つりあげることができる。



 BCS理論
 どうして電子対を考えたか
 (近藤淳「超伝導」(固体物理)ょり)

 超伝導状態:
 一つのSlater行列式では表わせない

電子間引力  $H_1$   $H = H_0 + H_1$   $\Psi = \sum_j c_j \Psi_j$   $\Psi_j$ : Slater行列式  $\Psi_0$ : Fermi球

波動関数  $\Psi = c_0 \Psi + \sum_{j \neq 0} c_j \Psi_j$  摂動計算  $c_0 \approx 1$  $c_j \langle \Psi_0 H_1 \Psi_j \rangle < 0$ 

エネルギー 〈 $\Psi H\Psi$ 〉= $\sum c_j^2$ 〈 $\Psi_j H_0 \Psi_j$ 〉+ $\sum c_i c_j \langle \Psi_i H_1 \Psi_j$ 〉

もし、すべての  $\left\langle \Psi_i H_1 \Psi_j \right\rangle < 0$  なら、すべての  $c_j > 0$ 

Ψ<sub>j</sub>としてペアーの状態をとるならば、c<sub>j</sub>>0として エネルギーを下げることができる。

# BCS波動関数

電子対 
$$\Psi_i = |k_1 \uparrow - k_1 \downarrow, k_2 \uparrow - k_2 \downarrow, k_3 \uparrow - k_3 \downarrow, \rangle$$
 順番を変えても  
 $\Psi_j = |k'_1 \uparrow - k'_1 \downarrow, k_2 \uparrow - k_2 \downarrow, k_3 \uparrow - k_3 \downarrow, \rangle$  「特号は変わらない。  
 $\langle \Psi_i H_1 \Psi_i \rangle = \langle k'_1 - k'_1 | V | k_1 - k_1 \rangle < 0$  非対角要素を常に負にできる

基底状態はすべての対状態の一次結合で表わされる:

$$\Psi = \sum c_{k_1k_2} \left| k_1 \uparrow - k_1 \downarrow, k_2 \uparrow - k_2 \downarrow, \right\rangle$$

独立対近似(一体近似)をすると

$$\Psi = \sum c_{k_1} c_{k_2} \quad \left| k_1 \uparrow -k_1 \downarrow, k_2 \uparrow -k_2 \downarrow, \right\rangle$$

N電子項のみを取り出すとして

$$\Phi = \prod_{k} \left( u_{k} + v_{k} | k \uparrow -k \downarrow \right)$$
BCSの波動関数

$$\frac{\sqrt{(N-\langle N \rangle)^2}}{\langle N \rangle} \approx \frac{1}{\sqrt{\langle N \rangle}}$$
 粒子数のゆらぎは小さい

# 3. 高温超伝導

#### 超伝導臨界温度



# 高温超伝導体の相図



# 高温超伝導体のモデル

#### 銅と酸素を含む二次元面





#### 銅酸化物の特徴

- 二次元的である
- スピンが1/2(小さい)
- ・ 銅,酸素のhole levelが近い

# 電気抵抗の温度依存性



FIG. 1. The temperature dependence of the resistivity for  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ . (a)  $0 < x \le 0.15$ , (b)  $0.1 \le x < 0.35$ . Dotted lines, the in-plane resistivity ( $\rho_{ab}$ ) of single-crystal films with (001) orientation; solid lines, the resistivity ( $\rho$ ) of polycrystal-line materials. Note,  $\rho_M = (h/e^2)d = 1.7 \text{ m}\Omega \text{ cm}$ .

H. Takagi et al.



FIG. 1. (a) Temperature dependence of in-plane resistivity of twinned YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-y</sub> crystals with oxygen concentration 7-y ~6.90, 6.85, 6.78, 6.68, 6.58, and 6.45. Inset: Temperature dependence of  $\rho_a$  and  $\rho_b$  for detwinned crystals of  $T_c$ =90 and 60 K. (b) Temperature dependence of  $R_H$  of twinned crystals measured under  $\mathbf{j} \parallel ab$  plane and  $\mathbf{B} \parallel c$  axis at B = 5 T.

T. Ito et al.





FIG. 4. Electronic specific heat coefficient  $\gamma(x,T)$  vs T for YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+x</sub> relative to YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6</sub>. Values of x are 0.16, 0.29, 0.38, 0.43, 0.48, 0.57, 0.67, 0.76, 0.80, 0.87, 0.92, and 0.97.

Loram et al., Phys. Rev. Lett. 71, 1740 (1993)

LSCO



Loram et al., Physica C162-164, 498 (1989)

### 磁気緩和率



Fig. 1. Temperature dependence of the nuclear spin-lattice relaxation rate  $1/T_1T$  for Cu(2) sites of YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub>. The solid curve shows the best fit of the data to Eq. (1) for T > 250 K. The inset shows the Arrhenius plots for the ratio of the observed  $(1/T_1T)_{obs}$  to the expected  $(1/T_1T)_{cw}$  from Eq. (1), and the best fit of the data to Eq. (2) is shown by the solid line.

Yasuoka et al., Physica B199 (1994)278

YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub> アンダードープ域 T<sub>c</sub>= 81K Tcより上の温度から帯磁率が 下がりはじめる。 擬ギャップ スピンゆらぎ理論によると Tcより上から 減少すること はない。 χ

 $T_c$ 

# 量子臨界現象

#### 量子相転移

スピンゆらぎ理論 (Millis, Moriya)

•T=0で起こる相転移	3D	C/T	χ(Q)	ρ	$\chi_{s}$
・量子ゆらぎが重要	Ferro.	-InT	T <sup>-4/3</sup>	T <sup>5/3</sup>	T <sup>-4/3</sup>
量子ゆらぎにより引きおこされる ・圧力、磁場変化、元素置換等に	AF	T <sup>1/2</sup>	T <sup>-3/2</sup>	T <sup>3/2</sup>	T <sup>-3/4</sup>
よる相転移					
・量子臨界点(相転移点)の近く	2 D	C/T	χ(Q)	ρ	$\chi_{s}$
では非フェルミ流体の振る舞いが見られることがある。	Ferro.	T <sup>-1/3</sup>	(TInT) <sup>-1</sup>	T <sup>4/3</sup>	$\chi(Q)^{3/2}$
抵抗、比熱、帯磁率	AF	-InT	T <sup>-1</sup>	Т	T <sup>-1</sup>

# 4. Hubbard Model



Mott insulators MnO, FeO, CoO, Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, NiO, CuO

Insulators due to the Coulomb interaction

(Note: Antiferromagnets such as MnO and NiO are not Mott insulators in the strict sense.)

# **On-site Coulomb Interaction**

#### Coulomb interaction



# Gap in the Hubbard Model

Hartree-Fock theory (Half-filling)

AF Gap  $\Delta = Um$  $\Delta \sim t e^{-2\pi t/U}$ d = 1, 3 $\sim t e^{-2\pi (t/U)^{1/2}}$ d = 2

1D Hubbard model

Hubbard gap  $\Delta$ Spin-wave velocity  $2v_s/\pi = J$ 







## Cu-O<sub>2</sub> Model and Hubbard Model



# 5. Variational Monte Carlo method

#### 適当な波動関数の期待値をモンテカルロ法により計算する

Gutzwiller関数  $\Psi_G = P_G \Psi_0$  $\Psi_0$ :試行関数 フェルミ球、反強磁性、超伝導  $P_{G} = \prod_{i} \left( 1 - (1 - g) n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \right)$ Gutzwiller演算子  $0 \le g \le 1$ パラメータgによりオンサイトの相関を制御する weight 1 weight g

Coulomb +U



Normal state  $\Psi_0$  Slater 行列式

 $\Psi_0 = \sum_{l} a_l \Psi_l$   $\Psi_l$  : 実空間での粒子の配置

波数 k<sub>1</sub>, k<sub>2</sub>, …, k<sub>n</sub> 座標 j<sub>1</sub>, j<sub>2</sub>, …, j<sub>n</sub> を<sup>↑</sup>粒子が占めている時

det 
$$D_{\uparrow} = \begin{vmatrix} e^{ik_1j_1}e^{ik_1j_2} & e^{ik_1j_n} \\ e^{ik_nj_1}e^{ik_hj_2} & e^{ik_nj_n} \end{vmatrix}$$
 Slater

行列式

ウェイト 
$$a_{\downarrow} = \det D_{\uparrow} \det D_{\downarrow}$$

粒子の配置の総数は大きな数 → モンテカルロ法

# モンテカルロアルゴリズム

期待値  

$$\langle \psi Q \psi \rangle = \sum_{mn} a_m a_n \langle \psi_m Q \psi_n \rangle = \sum_m \frac{a_m^2}{\sum_{l=1}^{n} a_{l}^2} \sum_{n=1}^{n} \frac{a_n}{a_m} \langle \psi_m Q \psi_n \rangle$$
  
 $\psi_m$ の出現確率が  $P_m = \frac{a_m^2}{\sum_{l=1}^{n} a_{l}^2}$ に比例するようにサンプルを生成すると  
 $\langle \psi Q \psi \rangle = \frac{1}{M} \sum_m \left( \sum_{n=1}^{n} \frac{a_n}{a_m} \langle \psi_m Q \psi_n \rangle \right)$   $m = 1, L, M$ 

 Metropolis法
  $\Psi_j$ の次に  $\Psi_n$ を生成した時 (例えば、どれかの電子を動かす)

  $R = \left|a_n\right|^2 / \left|a_j\right|^2 \ge \xi$ なら  $\Psi_n$ を採用
  $\xi$ : 一様乱数
  $0 \le \xi < 1$ 

 $\langle \psi_m Q \psi_n \rangle$ の計算には余因子展開を使うとcpu時間を稼げる

# 超伝導状態の波動関数

$$\Psi_{s} = P_{N}P_{G}\Psi_{BCS} \qquad \qquad \Psi_{BCS} = \prod_{k} (u_{k} + v_{k}c_{k\uparrow}^{+}c_{-k\downarrow}^{+})|0\rangle$$

P<sub>N</sub>: 電子数をN個に固定

$$\Psi_{s} = P_{G}P_{N}\exp\left(\sum_{k}\frac{v_{k}}{u_{k}}c_{k\uparrow}^{+}c_{-k\downarrow}^{+}\right)|0$$
$$= P_{G}\left(\sum_{k}\frac{v_{k}}{u_{k}}c_{k\uparrow}^{+}c_{-k\downarrow}^{+}\right)^{N/2}|0\rangle$$
$$= P_{G}\left(\sum_{k}a_{ij}c_{i\uparrow}^{+}c_{j\downarrow}^{+}\right)^{N/2}|0\rangle$$
$$a_{ij} = \frac{1}{V}\sum_{k}\frac{v_{k}}{u_{k}}e^{ik(R_{i}-R_{j})}$$

 $N_{\uparrow}=N_{\downarrow}$ の時

↑電子がi<sub>1</sub>, i<sub>2</sub>, ... i<sub>N/2</sub>; ↓電子がj<sub>1</sub>, j<sub>2</sub>, ... j<sub>N/2</sub>
にいる時、ウェイトは行列式

$$egin{aligned} a_{i_1 j_1} & a_{i_1 j_{N/2}} \ a_{i_{N/2}} & a_{i_{N/2} j_{N/2}} \end{aligned}$$

▲ 一般のペアー状態は、近藤さんの レクチャーにあるように、一つの Slater行列式では書けないが、BCS 状態は一体近似をしているので、 行列式で書くことができる。

で与えられ、normal stateと同様に計算できる。

## Superconducting state



### Superconducting condensation energy

SC Condensation energy  

$$\Delta E_{SC} = \Omega_n - \Omega_s = \int_0^{T_c} (S_n - S_s) dT$$

$$= \int_0^{T_c} (C_s - C_n) dT$$





FIG. 4. Electronic specific heat coefficient  $\gamma(x,T)$  vs T for YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+x</sub> relative to YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6</sub>. Values of x are 0.16, 0.29, 0.38, 0.43, 0.48, 0.57, 0.67, 0.76, 0.80, 0.87, 0.92, and 0.97.

Loram et al. PRL 71, 1740 ('93) optimally doped YBCO

SC Condensation energy ~ 0.2 meV

### Evaluations in the superconducting state



# Condensation Energy for d-p model

#### Condensation energy

#### 2D d-p model 6x6 and 8x8



### Superconductivity and Antiferromagnetism



# Size dependence of SC condensation energy



# 6. Stripes in high-Tc cuprates

- Vertical stripes for x > 0.05
- Diagonal stripes for x < 0.05



M.Fujita et al. Phys. Rev.B65,064505('02)



S.Wakimoto et al. PRB61, 3699('00)

#### Vertical Stripes in the under-doped region

Vertical stripes: 8 lattice periodicity (Tranquada)



0.5

### Stripes and Superconductivity

#### **Compete and Collaborate**



SC coexists with stripes (AF)

Bogoliubov-de Gennes eq.

$$\begin{pmatrix} H_{ij\uparrow} + F_{ij} \\ F_{ji}^{*} - H_{ji\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{j}^{\lambda} \\ v_{j}^{\lambda} \end{pmatrix} = E^{\lambda} \begin{pmatrix} u_{i}^{\lambda} \\ v_{i}^{\lambda} \end{pmatrix}$$
$$\alpha_{\lambda} = u_{i}^{\lambda} a_{i\uparrow} + v_{i}^{\lambda} a_{i\downarrow}^{+}$$
$$\overline{\alpha_{\lambda}} = \overline{u}_{i}^{\lambda} a_{i\uparrow} + \overline{v}_{i}^{\lambda} a_{i\downarrow}^{+}$$

Wave function

$$V_{\lambda j} = v_j^{\lambda} \qquad (\overline{U})_{\lambda j} = \overline{u}_j^{\lambda}$$

Nano-scale SC

$$\psi_{SC} = P_G P_{N_e} \prod_{\lambda} \alpha_{\lambda} \overline{\alpha}_{\lambda}^{+} |0\rangle \propto P_G \left( \sum_{ij} (U^{-1}V)_{ij} a_{i\uparrow}^{+} a_{j\downarrow}^{+} \right)^{N_e/2} |0\rangle$$

### Diagonal stripes in lightly doped region

Diagonal stripes are observed for

 $\begin{array}{l} La_{2\text{-}x}Sr_{x}NiO_{4}\\ La_{2\text{-}x}Sr_{x}CuO_{4}\\ La_{2\text{-}x\text{-}y}Nd_{y}Sr_{x}CuO_{4} \end{array}$ 







#### Incommensurability: Comparison with Experiments



# Stripes and Structural transition



#### What happens under lattice distortions?

- Anisotropy of the transfer integrals Anisotropic electronic state vertical stripes Diagonal stripes x<0.05</li>
- 2. Spin-Orbit Coupling induced from lattice distortions
- 3. Electron-phonon interaction



#### Anisotropy of the transfer integrals in LTT phase



LTT structural transitions stabilize stripes.

#### **Possible Stripe Structure 1**





### 7. Spin-orbit coupling and Lattice distortion

Spin-Orbit Coupling induced by the Lattice distortion

Friedel et al., J.Phys.Chem.Solids 25, 781 (1964) Tilting  $\langle p_x(x-a/2, y) \uparrow | H_{dp} | d_{xz}(r) \uparrow \rangle = -t_{xz} e^{-ik_x/2 \cdot a}$ Oxygen  $\langle p_{v}(x, y-a/2) \uparrow | H_{dp} | d_{vz}(r) \uparrow \rangle = -t_{vz} e^{-iky/2 \cdot a}$  $H_{so} = \xi(r) L \cdot S$ (110)<sub>HTT</sub> Cũ  $\left\langle d_{xz}(r)\uparrow | H_{so} | d_{yz}(r)\uparrow \right\rangle = -\frac{i}{2}\xi$  $\left\langle d_{yz}(r)\uparrow | H_{so} | d_{xz}(r)\uparrow \right\rangle = -\frac{i}{2}\xi$ **Oxygen** 61 HTT  $\left\langle d_{x^2-y^2}(r) \uparrow | H_{SO} | d_{yz}(r) \downarrow \right\rangle = \frac{i}{2} \xi$  $t_{xz}, t_{yz} \neq 0 \sim \text{tilt angle}$  $\left\langle d_{x^2-y^2}(r)\uparrow |H_{SO}|d_{xz}(r)\downarrow \right\rangle = \frac{1}{2}\xi$ Five orbitals  $\times (\uparrow \downarrow)$ :

 $(d_{x^2-v^2}, d_{xz}, d_{vz}, p_x, p_v)$ 

Effective i $\xi$  term for p-p transfer

#### Dispersion in the presence of spin-orbit coupling



# Flux state



Inhomogeneous d-density wave

### Pseudo-gap in the density of states



### Diagonal stripes with Spin-orbit coupling

Spin-orbit coupling induces flux.



# d-density wave

d-density wave

$$i\Delta_Q Y(k) = \langle c_{k+Q\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle \quad Q = (\pi, \pi)$$

 $Y(k) = \cos(k_x) - \cos(k_y)$ 

Nayak, Phys. Rev. B62, 4880 ('00) Chakravarty et al., PRB63, 094503 ('01)



Ø

-0

Ø

Stripe

0

Inhomogeneous density wave

# 8. Summary

