

# 1 物性理論

## 1.1 青木

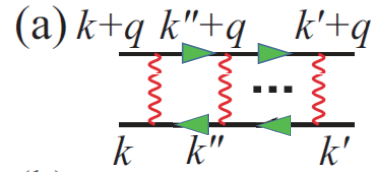
青木は一貫して、超伝導に代表される多体効果、ならびにトポジカル系の理論を主眼に研究を行ってきた。これらの現象では、強相関電子系やトポジカル系に特有な新奇現象が起きる。面白い物性を面白い物質構造で発現させる物質設計も目指している。さらに、強相関系やトポジカル系において、非平衡で生じる顕著な物性を探ることを最近の大きな柱としている。東大からの定年退職後の2016年度からは東大名誉教授として、ImPACT に関しては東大物理学教室において、科研費に関しては産総研（筑波）において研究を続けている。

### 1.1.1 超伝導

#### ダイナミカル・バーテックス近似 (DΓA)

銅酸化物超伝導体に対する代表的な2次元斥力 Hubbard 模型での d 波超伝導は、これまで様々な手法で調べられてきたが、特に超伝導転移温度 ( $\sim 100$  K) が電子のエネルギー・スケール ( $\sim 10000$  K) から二桁も落ちる理由は良く理解されていない。北谷、Held (ウィーン工科大学) 等と青木は、動的平均場理論 (DMFT) のダイアグラマティックな拡張の一つである動的バーテックス近似 (DΓA) を超伝導相に拡張して、2次元斥力 Hubbard 模型の超伝導不安定性を計算し (図 1.1.1)、バーテックス補正がどのように転移温度に影響するかを調べた [1]。その結果、 $T_c$  はドーピングに対しドーム状になり、そこで  $T_c$  を支配する主な要因を追跡することにより、多体相互作用において従来専ら扱われてきた particle-hole チャンネルに加え、particle-particle チャンネルのバーテックス関数の動的な構造 (振動数依存性) が、ペアリング相互作用を通して超伝導に重要な影響 (二桁落ち) をもたらすことを明らかにした。これにより  $T_c$  増強へのヒントが得られただけでなく、概念的にも、高温超伝導の理論が従来はスピン揺らぎ媒介などボソン交換機構にほぼ限定されていたのに対し、DΓA を用いればボソン交換を超えた機構が探索できる可能性がある。バーテックス補正が重要なモデルの候補の一つとしては、下記の平坦バンドをもつ系がある。

#### Weak $U$



#### Strong $U$ (DΓA)

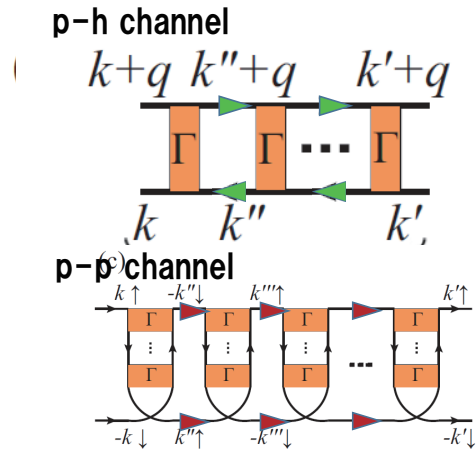


図 1.1.1: スピン揺らぎ媒介ペアリング相互作用に対して、(上段) 弱い斥力相互作用 (赤波線) に対して通常考察されるラダー・ダイアグラム。黒実線はグリーン関数。(中段) 強い斥力相互作用に対するダイナミカル・バーテックス近似 (DΓA) では、バーテックス  $\Gamma$  のラダー (particle-hole チャンネル; 緑矢印) となる。(下段) DΓA ではさらに、particle-particle チャンネル (赤矢印) も取り入れられる。[1]

#### 動的平均場理論 (DMFT) における slave-particle impurity solver

強相関電子系に対して、Mott 転移を記述できる数少ない方法として、動的平均場理論 (DMFT) がある。これは空間的には平均場近似をとるが、時間軸上での量子揺らぎを取り込む方法である。一方、斥力相互作用から生じる d 波ペアリング超伝導のような異方的超伝導を扱うには、運動量依存のペアリング相互作用を扱うことが必須であり、北谷、青木等は、これら二つの方法を合体させた “FLEX+DMFT” という方法論を提案していた。しかしそこでも、超伝導と磁性が同等な枠組みで扱われていない、等の不満点があった。Sayyad (物性研) 等と青木は、これに関して以下の方法論を提案した [2, 19]。すなわち、DMFT における自己無撞着ループを数値的に解く際に、1 サイトの多体問題を解く方法 (impurity solver) が鍵となる。そこにおいて、slave particle (補助場) を

用いた impurity solver を用いることを提案した。特に、Hubbard 模型には、スピン SU(2) 対称性だけでなく、もう一つの SU(2) 対称性 ( $\eta$ -SU(2) と呼ばれる) が内在しているが、この SU(2)  $\otimes$  SU(2) 対称性を尊重しながら slave particle 法を構成し、その上で DMFT と FLEX (揺らぎ交換近似) を組み合わせることで、超伝導と磁性などの対角秩序を同等に扱える枠組みが構築された。

### 多層銅酸化物系における高温超伝導

現在でも常圧下では最高の超伝導転移温度 ( $T_C = 135$  K) を持つ  $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$  (Hg-1223) は、結晶の単位胞に 3 枚の  $\text{CuO}_2$  面をもつ多層系銅酸化物超伝導体である。多層系銅酸化物では、単位胞中に非等価な  $\text{CuO}_2$  面 (3 層系では 2 枚の外側面 (OP) と 1 枚の内側面 (IP)) が生じ、キャリアドーピングの違いや、異なる  $\text{CuO}_2$  面における超伝導・反強磁性転移の分化、超伝導相と反強磁性相の共存や分離などが生じている。西口 (阪大) 等と青木は、Hg-1223 の第一原理有効模型である多層 Hubbard 模型を二体自己無撞着法 (TPSC) で解析した。これを用いて線形エリヤシュベルグ方程式を解くことにより超伝導を調べた [3, 17]。結果として、電子相関による“自己ドーピング効果”によって OP (IP) にホール (電子) キャリアの配分が生じ、OP (IP) で超伝導 (反強磁性) が支配的となることが示された (図 1.1.2)。この結果は層分解した核磁気共鳴の実験結果と定性的に一致する。更に、多層系における電子相関効果の差異によって、中相関領域において 3 層模型の超伝導性が 1 層模型を上回り得ることも示された。

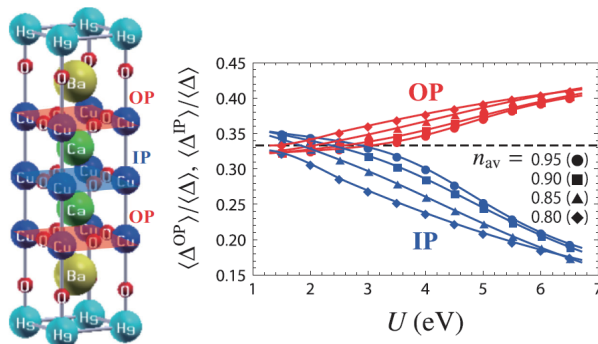


図 1.1.2: 左: Hg を含む高温超伝導 3 層銅酸化物 Hg-1223 の結晶構造単位胞。2 枚の外側面 (OP) と 1 枚の内側面 (IP) から成る。右: 層毎の超伝導ギャップ関数  $\Delta$  の斥力相互作用  $U$  への依存性を、様々な平均バンド・フィリング  $n_{av}$  に対してプロット。[3]

### 梯子系の物質設計

高温超伝導の  $T_C$  を増強するのが難しい根本的な理由として、ペアリング相互作用を強くすることと準粒子繰り込みを弱くすることが両立し難いというジレンマが挙げられる。これを克服する方策として、黒木等により提案された対角ホッピングを含む梯子格子がある。この系では幅の狭いバンドと広いバンドが共存しており、特に Fermi 準位が幅の狭いバンドの端付近に位置し、幅の広いバンドのみが Fermi 面を形成する状況を考えて、非常に多くのバンド間ペア散乱チャンネルが生じ、強いペアリング相互作用を生み出すことができ、同時に準粒子繰り込みを小さく保つことが可能となるので、高い転移温度が期待される。但し、梯子型銅酸化物に多量の電子ドーピングができればこの状況が実現されるが、このようなドーピングは実際上困難である。そこで、小倉、黒木 (阪大)、青木は、Ruddlesden-Popper 型化合物  $\text{Sr}_3\text{Mo}_2\text{O}_7$ ,  $\text{Sr}_3\text{Cr}_2\text{O}_7$  において、遷移金属の  $d$  軌道の異方性に起因した梯子的な電子状態が隠れており、Fermi 準位が好都合にも狭いバンドの端の直下に位置し、高温超伝導が期待されることを見出した [4, 15]。

### 平坦バンド系の設計と平坦バンド超伝導

強磁性をもつことが厳密に示せることで知られる平坦バンド系は、最近では超伝導やトポロジカル系の観点からも重要性が認識されつつある。特に電子間斥力を導入した場合、バンド間ペア散乱が、スピン揺らぎに媒介された高温超伝導を誘発する可能性が、上記のように黒木等により示唆されている。さらに最近では小林等により、平坦バンド超伝導相がトポロジカル相に隣接している平坦バンド模型があり、そこでは異常に大きな量子もつれが存在するので、それが超伝導を増強している可能性がある。しかし、2 次元系において通常の (Lieb あるいは Mielke による) 平坦バンド模型では、平坦バンドは分散バンドの端に接触するか、あるいはディラック点に一致するが、スピン揺らぎ媒介超伝導においては、平坦バンドが分散バンドを貫通して交叉する状況の方がこのメカニズムを増強することが期待される。このような背景下で「エネルギーを制御出来る平坦バンド模型の構成」が重要と考えられる。三角 (秋田大) と青木は、ユニットセルに 2 つの格子点を含む 2 次元格子において第 3 隣接ホッピングまで考慮したタイトバインディング模型を調べることで、平坦バンドが生じ得る条件を見出した。これにより、平坦バンド模型において分散バンドとの間にギャップを持ち、かつ平坦バンドのエネルギーがチューンできる模型が構成された [5]。この模型は正方形格子と六方格子において構成でき、既知の模型を含み、高次元への拡張も可能である。次に、この平坦バンド模型に変形を導入することで、平坦バンドと分散バンドが交差する模型を構成することができた。平坦バンドは僅かに歪むが、上記のバンド間ペア散乱の増強により超伝導に資することが期待される。

超伝導に関しては、Sayyad, Vaezi (スタンフォード大) 等と青木は、以下を明らかにした [6] [6]。上で解説した平坦バンド模型は一般に多バンド系 (平坦バンドと分散バンドが共存) である。しかし、より単純な系である 1 バンド系において、分散が、平坦な部分と分散的な部分からなる (部分的平坦) バンドの場合は何が起きるのであろうか。このような模型において、斥力 Hubbard 相互作用を考え、FLEX+DMFT 法を用いて調べたところ、(i) バンド・フィリングを変化させるにつれ、強磁性的スピン揺らぎから反強磁性的スピン揺らぎへのクロスオーバーが生じ、これに伴い、スピン・トリプレット超伝導からシングレット超伝導への転移が起きる (図 1.1.3)。これが起きる臨界フィリングは、平坦部分のサイズに支配される。(ii) 平坦バンドの効果は、超伝導ギャップ関数の対称性において、多数の nodes (実空間においては、拡がったペア) に現れる。(iii) さらに、平坦バンド部分で電子相関が強調されるため、非フェルミ液体の振る舞いが運動量分布、自己エネルギーの振動数依存性、スペクトル関数において発生する。これらは、平坦バンド系では電子相関効果が特徴的に現れる兆候といえる。

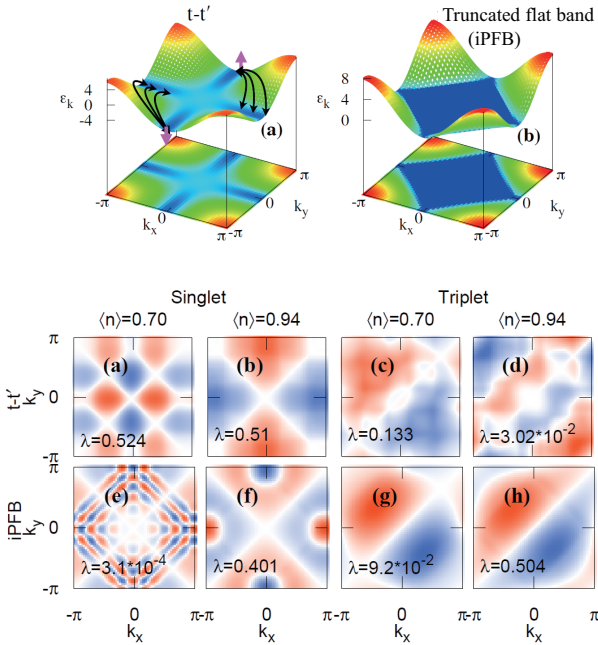


図 1.1.3: (上段) 平坦な部分をもつ 1 バンド系 (次隣接ホッピング  $t'$  をもつ  $t$ - $t'$  格子、底を平坦にした iPFB 模型)。矢印はペア・ホッピングを表す。(下段)  $t$ - $t'$  格子と iPFB 模型に対して数値的に得られたギャップ関数 (赤: 正、青: 負) を、異なるバンド・フィリング  $n$  に対して示す [6]。左二列はシングレット・ペアリング、右二列はトリプレット・ペアリング、 $\lambda$  は Eliashberg 方程式の固有値 (超伝導の指標)。

### 1.1.2 グラフェン関連物質

#### グラフェンとカイラル対称性

炭素が蜂の巣格子をなすグラフェンは massless Dirac 粒子のバンド分散 (Dirac cone) をもち、カイラル対称性のために電子状態は特徴的になる。河原林 (東邦大)、初貝 (筑波大)、青木は、有機導体に現れるような傾いた Dirac cone に対してもカイラル対称性が格子模型において一般化でき、これを用いてハミルトニアンを代数的連続変形を一般化されたカイラル対称性を保持しながら行うことにより、垂直なディラック電子系から傾いたディラック電子系が生成できることを具体的に示してきた。また、Lieb 格子やカゴメ格子など平坦バンドが Dirac cone と共存する模型においても、平坦バンドを保持したまま、代数的変形によって、ディラック・コーンを傾けられることがわかった。2018 年度には、2 次元系において、質量ゼロのディラックフェルミオン・ダブルリングが、通常のカイラル対称性が破れたときもトポロジカルに保護されることが、一般に 2 バンド格子系で起き、Nielsen・二宮定理の物性版ともいえることを示した [7,18]。

#### 2 層グラフェンにおける電子複屈折および谷偏極

グラフェン中の電子の伝播は、光学における負の屈折にアナログな現象を示すことが示唆されている。Maksym, 青木は、2 層グラフェンにおける電子伝播においては、正の屈折と負の屈折を併せもつ複屈折が起き得ることを 4 成分 Dirac 方程式から指摘し、現実的なパラメータ領域で興味深い現象がおきることをシミュレーションで示した。また、このように複屈折を示す 2 層グラフェンを用いて pn 接合をつくと、グラフェンの K 谷と K' 谷から成る電子状態について、片方の谷成分に偏った (valley-polarised) 電流を発生させられることも理論的に提案した [20, 22]。また Maksym と青木は、グラフェン (単層および二層) の磁場中での電子のダイナミクスの時間発展を数値計算するために、従来の split operator 法を改良して、計算速度が桁違いに早くなることを示した [8]。

### 1.1.3 非平衡および非線形現象

非平衡や非線形現象は、強相関電子系やトポロジカル系において特に興味深い。本年度は以下を行った。

#### 異方的バンドにおける運動量依存の非平衡ダイナミクス

強相関系を、系を支配するパラメータ (例えば斥力相互作用の大きさ) を急に変化させること (ramp) により非平衡にした場合、その後の時間発展がどう



なるかに興味もたれる。特に、高温超伝導銅酸化物のように、バンドが異方的な場合に、平衡への緩和が運動量空間でどのように起きるだろうか。Sayyad 等と青木は、これを FLEX を時間発展が扱えるように整備した上で数値的に調べ、緩和は (i) 確かに運動量に強く依存して起き、(ii) hole doping と electron doping の場合でも異なり、(iii) ramp をどの程度急に行うかにも依る。これらが、Keldysh グリーン関数の枠組みから求めた自己エネルギーが運動量に強く依存することから来ることを明らかにした (図 1.1.4) [9,16,21]。

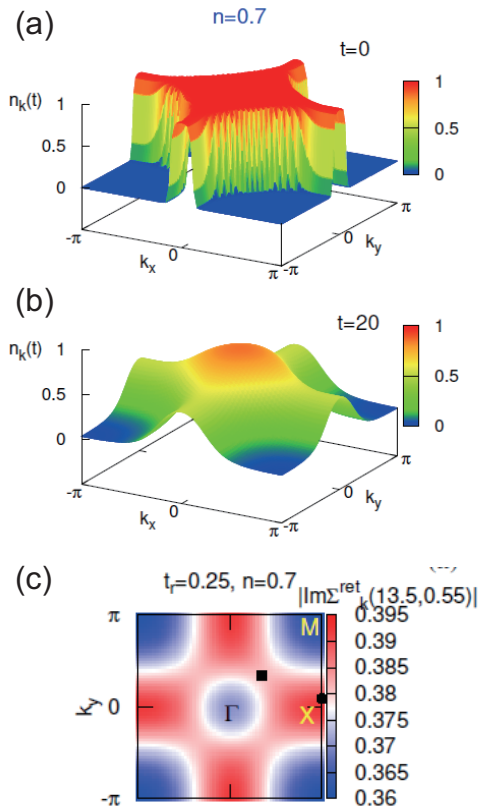


図 1.1.4: 斥力相互作用  $U$  を、ゼロから  $U = 3$  に変化 (ramp) させたときの、電子の運動量依存分布関数  $n_k(t)$  を、時間  $t = 0$  (a) と  $t = 20$  (b) に対してプロット。(c) 運動量依存の自己エネルギーを ramp 後に対してプロット。[9]

### 高温超伝導体における Higgs モード共鳴

超伝導体は、秩序パラメーターの振幅 (超流動密度) の集団励起振動モード (Higgs モード) をもつ。Higgs モードは電荷、分極などをもち、線形応答の範囲では電磁場と結合しないため実験観測が困難であったが、2013 年には島野グループにより高強

度 THz レーザーを用いて実験観測され、2014 年には Higgs モードとの共鳴により 3 次の非線形高調波 (THG) が発生することが観測され、青木グループにより理論解析された。その後、応答には準粒子励起 (電荷密度揺らぎ) も寄与し、BCS 近似の範囲内ではこれが大きいことが指摘された。しかし、平均場的な BCS 理論を超えた DMFT 等で調べると、フォノン媒介相互作用の遅延の効果等のために、Higgs モードの寄与は準粒子励起の寄与と同程度になり得ることが示され、BCS では無視されていた光と Higgs モードの間の非線形共鳴的結合に起因することも分かる。

より直接的に Higgs モードの寄与と準粒子励起 (密度揺らぎ) の寄与を分離するために、松永等の島野の実験グループと、辻等の青木の理論グループは共同で、THG 共鳴への Higgs モードの寄与と密度揺らぎの寄与の各々が、レーザーの偏光方向と結晶軸のなす角度に対して、異なった依存性をもつので、両者を分離でき、実験観測により Higgs の寄与が支配的であることも明らかにしていた。

次の強い興味は、d 波ペアリングをもつ高温超伝導体において Higgs モードがどうなるかである。島野の実験グループは青木の理論グループと協力して、銅酸化物高温超伝導体  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  に対して THz ポンプ・近赤外プローブ法を用いて調べた [10]。異方的 (d 波) 超伝導体に対しては、結晶の正方対称性の既約表現に分解して解析する必要があるが、単結晶試料に対してポンプ光、プローブ光の偏光を回転させて調べることにより、この分解を実行し、その結果、 $A_{1g}$  既約表現成分が大きく、これは理論的に Higgs モードの寄与が支配的であることを示す。この研究は Gallais 教授 (パリ・デイドロ大学; 東京大学理学系研究科国際卓越大学院コース (GSGC) 客員教授) との共同研究であり、*Phys. Rev. Lett.* の Editor's suggestion に選ばれた。

### 1.1.4 その他

青木は、2018 年 6 月から 7 月まで、ドレスデンのマックス・プランク研究所に滞在し、量子凝縮系ダイナミクス・グループの Andrea Cavalleri 教授のグループと共同研究・議論を行った。また、2018 年 11 月には、グルノーブルのフランス国立強磁場研究所 (LNCMI) に滞在し、Marek Potemsky 博士のグループと、グラフェンおよび関連物質についての議論を行った。青木はまた、2017 年度に ETH Zurich (スイス連邦工科大学) に客員教授として滞在した印象を記した [12]。

青木は国際会議等の招待講演で、高温超伝導の設計 [13]、トポロジカル系や超伝導の性質と設計 [14] について、また、1 バンドおよび多バンド超伝導体における超伝導最適化 [25]、異方的および多バンド超伝導体におけるヒッグス・モード [24, 26]、グラフェンおよび関連系における超伝導と谷偏極 [27] についてのセミナーを行った。国内でも量子シミュレーションによる高温超伝導の  $T_c$  増強を平衡と非平衡における新たなアルゴリズムとモデルの観点から解説した [23]。村上 (Fribourg 大、現在東工大)、辻 (理

研)、青木は、非平衡動的平均場の最近の進展と光誘起ダイナミクスについての解説を出版した [11]。

<報文>

(原著論文)

- [1] Motoharu Kitatani, Thomas Schäfer, Hideo Aoki and Karsten Held: Why  $T_c$  is so low in high- $T_c$  cuprates: importance of the dynamical vertex structure, *Phys. Rev. B* **99**, 041115(R) (2019).
- [2] Sharareh Sayyad, Naoto Tsuji, Massimo Capone and Hideo Aoki: SO(4) FLEX+DMFT formalism with SU(2) $\otimes$ SU(2)-symmetric impurity solver for superconductivity in the repulsive Hubbard model, submitted (arXiv:1903.05800).
- [3] Kazutaka Nishiguchi, Shingo Teranishi, Koichi Kusakabe and Hideo Aoki: Superconductivity arising from layer-differentiation in multi-layer cuprates, *Phys. Rev. B* **98**, 174508 (2018).
- [4] Daisuke Ogura, Hideo Aoki and Kazuhiko Kuroki: Possible high- $T_c$  superconductivity due to incipient narrow bands originating from hidden ladders in Ruddlesden-Popper compounds, *Phys. Rev. B* **96**, 184513 (2017).
- [5] Tatsuhiro Misumi and Hideo Aoki: A new class of flat-band models on tetragonal and hexagonal lattices: gapped vs crossing flat bands, *Phys. Rev. B* **96**, 155137 (2017) (Editor's suggestion).
- [6] Sharareh Sayyad, Edwin W. Huang, Motoharu Kitatani, Mohammad-Sadegh Vaezi, Zohar Nussinov, Abolhassan Vaezi and Hideo Aoki: Pairing and non-Fermi liquid behavior in partially flat-band systems, submitted (arXiv:1903.09888).
- [7] Tohru Kawarabayashi, Hideo Aoki and Yasuhiro Hatsugai: Topologically protected doubling of tilted Dirac fermions in two dimensions, *Proc. 34th Int. Conf. on Physics of Semiconductors*, Montpellier, France, July 2018 [*Phys. Status Solidi B*, 2019, 1800524].
- [8] P.A. Maksym and H. Aoki: Fast split operator method for computation of time-dependent quantum states of bilayer graphene in a magnetic field, *Physica E* **112**, 66 (2019).
- [9] Sharareh Sayyad, Naoto Tsuji, Abolhassan Vaezi, Massimo Capone, Martin Eckstein and Hideo Aoki: Momentum-dependent relaxation dynamics of the doped repulsive Hubbard model, *Phys. Rev. B* **99**, 165132 (2019).
- [10] Kota Katsumi, Naoto Tsuji, Yuki I. Hamada, Ryusuke Matsunaga, John Schneeloch, Ruidan D. Zhong, Genda D. Gu, Hideo Aoki, Yann Gallais, Ryo Shimano: Higgs mode in the d-wave superconductor  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  driven by an intense terahertz pulse, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 117001 (2018) (Editor's suggestion).

(国内雑誌)

- [11] 村上雄太, 辻 直人, 青木秀夫: 非平衡動的平均場の最近の進展と光誘起ダイナミクス, *固体物理* **53**, 209 (2018).

- [12] 青木秀夫: スイス ETH 滞在記, UP, No 555 (2019年1月), p.39.

<学術発表>

(国際会議)

招待講演

- [13] Hideo Aoki: Superconductivity in single- and multi-band Hubbard models: can we optimise them?, Int. Conf. "Quantum Complex Matter 2018", Frascati, June 2018.
- [14] Hideo Aoki: Theoretical possibilities for flat-band superconductivity, Int. workshop "Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid state physics to transdisciplinary concepts" [BEC2018X], Tokyo, Dec. 2018.

一般発表

- [15] Daisuke Ogura, Hideo Aoki and Kazuhiko Kuroki: Possibility of high- $T_c$  superconductivity in Ruddlesden-Popper type materials: Incipient narrow bands originating from "hidden ladder" electronic structure, M2S (Int. Conf. Materials and Mechanisms of Superconductivity), Beijing, Aug. 2018.
- [16] Sharareh Sayyad, Naoto Tsuji, Abolhassan Vaezi, Massimo Capone, Martin Eckstein and Hideo Aoki: Non-equilibrium electron dynamics after a quench of the interaction in the doped 2D Hubbard model, M2S (Int. Conf. Materials and Mechanisms of Superconductivity), Beijing, Aug. 2018.

(国内会議)

一般発表

- [17] 西口和孝, 寺西慎伍, 草部浩一, 青木秀夫: 電子相関の層分化から生じる多層系銅酸化物の高温超伝導 (日本物理学会、京都、2018年9月)。
- [18] 河原林透, 青木秀夫, 初貝安弘: 格子上的傾いたディラック電子のダブリングと一般化されたカイラル対称性 (日本物理学会、京都、2018年9月)。
- [19] Sharareh Sayyad, Naoto Tsuji, Abolhassan Vaezi, Massimo Capone, Martin Eckstein and Hideo Aoki: SO(4) DMFT+FLEX formalism for d-wave superconductivity (日本物理学会、京都、2018年9月)。
- [20] P. Maksym, H. Aoki: Valley asymmetric currents in bilayer graphene (日本物理学会、京都、2018年9月)。
- [21] Sharareh Sayyad, Naoto Tsuji, Abolhassan Vaezi, Massimo Capone, Martin Eckstein, and Hideo Aoki: Momentum-dependent relaxation dynamics in the doped 2D Hubbard model (日本物理学会、九州大、2019年3月)。

- [22] P. Maksym and H. Aoki: Reflection-induced valley polarisation in bilayer graphene (日本物理学会、九州大、2019年3月)。
- [23] 青木秀夫: 量子シミュレーションによる高温超伝導の  $T_c$  増強: 平衡と非平衡における新たなアルゴリズムとモデル (ImPACT workshop、東京、2018年12月)。
- (セミナー (国外) )
- [24] Hideo Aoki: Higgs mode in d-wave and multi-band superconductors , Max-Planck-Institut, Stuttgart, June 2018.
- [25] Hideo Aoki: Superconductivity in single- and multi-band Hubbard models: can we optimise them?, Max-Planck-Institut, Hamburg, June 2018.
- [26] Hideo Aoki: Higgs mode in d-wave and multi-band superconductors , Max-Planck-Institut, Hamburg, June 2018.
- [27] Hideo Aoki: Theoretical possibilities for graphene and related materials: Flat-band superconductivity, optical vortices and valley polarisation, Lab. National des Champs Magnétiques Intenses (LNCMI), Grenoble, Nov. 2018.