

論文内容の要旨

論文題目 Quasi-One-Dimensional Picture of Fermi Surface
in La-Based High- T_c Cuprates — A View from t - J Model

(t - J 模型に基づく、La 系銅酸化物高温超伝導体における
フェルミ面の擬一次元描像)

氏名 山瀬 博之

高温超伝導体はモット絶縁体にキャリアをドーブした強相関電子系であり、新奇で多彩な磁気現象や輸送現象が観測されている。これらの現象を調べるモデルの一つとして正方格子上に定義された2次元 t - J 模型が知られている:

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t^{(l)} f_{i\sigma}^\dagger b_i b_j^\dagger f_{j\sigma} + J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1)$$

$$\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + b_i^\dagger b_i = 1 \quad \text{各サイト } i \text{ に対して。} \quad (2)$$

ここで、 $t^{(l)}$ は第 l 最近接サイト間のホッピング積分 ($l \leq 3$)、 $J (> 0)$ は最近接間超交換相互作用、 $f_{i\sigma}^\dagger$ (b_i^\dagger) はスピン σ (電荷 e) を持ったフェルミオン (ボソン) の生成演算子、 \mathbf{S}_i はパウリ行列 σ を用いて $\frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} f_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta} f_{i\beta}$ として定義される。式 (2) は局所拘束条件を表している。

この模型の磁氣的性質は1992-1994年頃、棚本らによって精力的に調べられた。主な結果の一つとして、 (π, π) を中心とした丸い‘ホールの’なフェルミ面 (角度分解型光電子分光 (ARPES) の実験で観測された $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$ (YBCO) 系のフェルミ面と一致する) では、 (π, π) の波数をもった整合反強磁性揺らぎが、一方 Γ 点を中心としたダイヤモンド型の‘電子的’なフェルミ面では、 (π, π) からずれた波数を持ついわゆる非整合反強磁性揺らぎが存在することが示された。中性子散乱実験から、YBCO 系は整合反強磁性揺らぎを、 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) 系は非整合反強磁性揺らぎを持つことが示されていたことから、棚本らはこの磁気励起の物質依存性をフェルミ面の相違 (前者は‘ホールの’なフェルミ面、後者は‘電子的’なフェルミ面) で理解出来ることを指摘した。

ところが、最近 LSCO 系で ARPES の実験が初めて行われ、フェルミ面の断片が観測された。その結果は、ホール濃度がおよそ 0.20 以下では YBCO 系と同様な ‘ホールの’ なフェルミ面である可能性を示唆しているように思われた。このことは磁気励起を、フェルミオロジーではなく、むしろ 2 次元 CuO_2 面での電荷の一次元オーダーの形成によって理解しようという、いわゆる ‘スピン-電荷ストライプ’ 仮説 (1995 年に Tranquada らによって提唱された) の可能性を支持しているように思われた。

そこで、本論文では

LSCO 系の磁気励起の背後にある物理はいったい何か?

と問題設定をし、 t - J 模型の観点から追求した。

その結果、我々は図 1 に示すようなフェルミ面の擬一次元描像 — 各 CuO_2 面では擬一次元フェルミ面が実現しており、それが c 軸方向に交互に積層している — を LSCO 系において提案し、磁気励起は擬一次元フェルミ面を用いたフェルミオロジーで理解出来ることを指摘した。

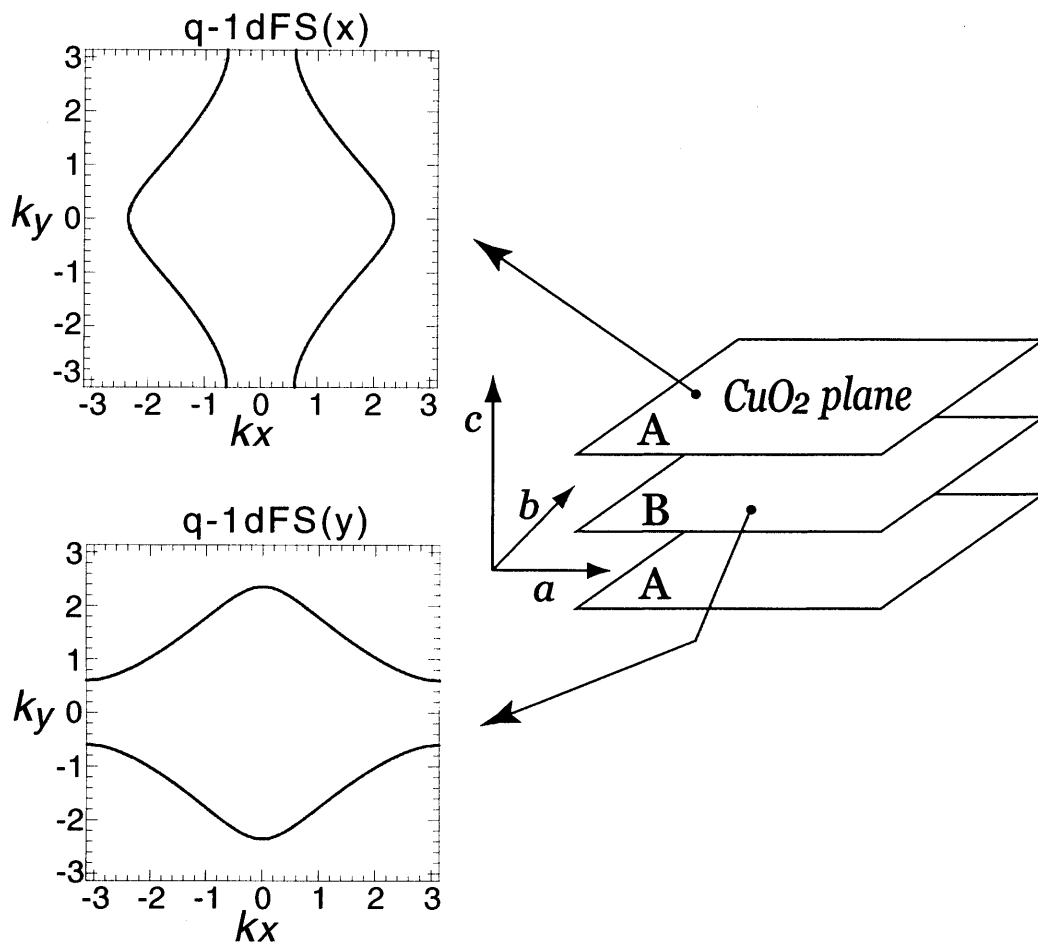


図 1: 提案するフェルミ面の擬一次元描像。各 CuO_2 面で擬一次元フェルミ面が実現し、それが c 軸方向に交互に積層している。

まず、この擬一次元描像が ARPES の結果と矛盾しないことを、面間の結合の効果を考えることで示した。次に以下に示すように、(1) 擬一次元フェルミ面を考える理論的根拠、(2) 擬一次元描像のもとでの磁気励起、について調べた。

(1) 2次元 t - J 模型のフェルミ面の擬一次元不安定性

2次元 t - J 模型にサイト i に依存しない、3種類の実の平均場、 $\chi_\tau \equiv \langle \sum_\sigma f_{i\sigma}^\dagger f_{i+\tau\sigma} \rangle$ (フェルミオンのホッピング秩序)、 $\Delta_\tau \equiv \langle f_{i\uparrow} f_{i+\tau\downarrow} - f_{i\downarrow} f_{i+\tau\uparrow} \rangle$ (シングレットオーダー)、 $\langle b_i^\dagger b_{i+\tau} \rangle$ (ボソンのホッピング秩序)、を導入しセルフコンシステントな解を探した。ボソンは近似的にボーズ凝縮状態にある (したがって電荷分布は一様) とし、 $\langle b_i^\dagger b_{i+\tau} \rangle \approx \delta$ (δ はホール濃度) とした。その結果、 $\Delta_\tau \equiv 0$ の条件下では χ_τ が図 2 に示すようにある温度以下で自発的に 4 回対称性を破り ($\chi_x \neq \chi_y$)、結果としてフェルミ面が擬一次元的になること (擬一次元状態) を見出した。この擬一次元状態は $(\pi, 0)$ 、 $(0, \pi)$ 近傍のフェルミ面の不安定性に起因したものであった。一方、 $\Delta_\tau \neq 0$ の条件下でのセルフコンシステントな解は等方的な d 波シングレット状態 ($\Delta_x = -\Delta_y$) であり、擬一次元状態は安定化されなかった。ところが、式 (1) の $t^{(1)}$ と J にわずかな空間的異方性を与えると、異方性が低温で大きく増大され、擬一次元状態は d 波状態と競合しつつも共存できることを突き止めた。このような擬一次元不安定性は、ホール濃度 0.30 の LSCO のフェルミ面 (実験的に全体の形が確かめられている) を再現するバンドパラメータで最も顕著であった。これらの結果を踏まえ、LSCO 系で擬一次元状態が実現している可能性を指摘した。 $t^{(1)}$ と J の空間的異方性の主な起源として、LTT 構造またはその構造揺らぎを考えた。

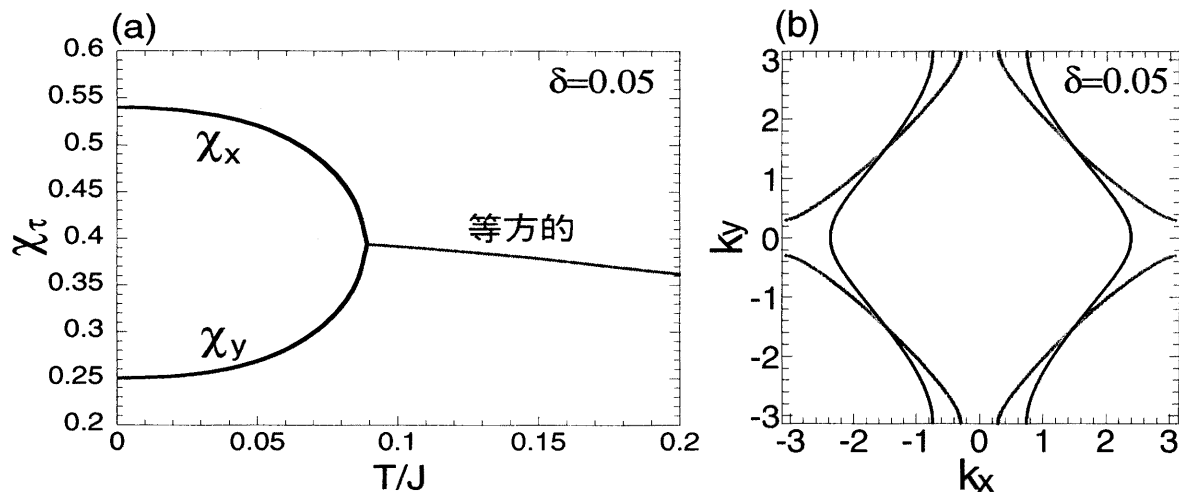


図 2: (a) $\Delta_\tau \equiv 0$ の条件下での χ_τ の温度依存性。低温で 4 回対称性が自発的に破れる ($\chi_x \neq \chi_y$)。 (b) 高温での 4 回対称なフェルミ面 (灰色の線) が低温で擬一次元的 (実線) になる。

(2) 擬一次元フェルミ面を用いた 2次元 t - J 模型の磁気励起

図 1 に示したフェルミ面の擬一次元描像に基づいて、'RPA' 動的帯磁率の虚部 $\text{Im}\chi(\mathbf{q}, \omega)$ を t - J 模型で計算した。温度は $T = 0.01J$ に固定した。まず、面間の結合を無視し、 ω を固定した時の $\text{Im}\chi(\mathbf{q}, \omega)$ の \mathbf{q} 依存性を調べた。その結果、 (π, π) 近傍に鋭い非整合ピークがあり、それは (i)

広いホール濃度領域 ($\delta \gtrsim 0.02$) で存在する、(ii) d 波シングレット秩序の有無に関わりなく存在する、また、(iii) ピーク位置の ω 依存性は $\omega \approx 0.1-0.2J$ 以下でほとんど無視出来る、等の特徴を持つことが分かった。面間の結合の効果を取り込んでも、これらの特徴は保たれた。以上の結果は LSCO 系の中性子散乱実験データの特徴をよくとらえたものであった。特に d 波シングレット秩序が期待出来ない温度でも非整合ピークが存在しているという実験事実は、フェルミ面の擬一次元描像を直接支持するものであることを、2次元フェルミ面との磁気励起の相違、及び温度依存性の効果を調べた上で指摘した。これらの結果を踏まえ、LSCO 系の磁気励起を理解する上での本質的な概念は、‘スピン-電荷ストライプ’の描像ではなく、擬一次元フェルミ面を用いたフェルミオロジーである可能性を主張した。

LSCO 系における、ARPES と中性子散乱実験のデータを統一的に理解する描像として、擬一次元フェルミ面を用いたシナリオを t - J 模型に基づいて提案した。本理論研究では、ボソン (電荷) をボーズ凝縮状態にある (電荷分布は一様) と近似して、フェルミオン (スピン) のみに注目した。今後、フェルミ面の擬一次元状態でのボソンの状態を調べ、我々の擬一次元描像と ‘スピン-電荷ストライプ’ 描像との関係を明確にすると共に、LSCO 系のホール濃度 $1/8$ 近傍でのいわゆる ‘ $1/8$ 異常’ の理論的理解に向けて研究を進展させたいと考えている。