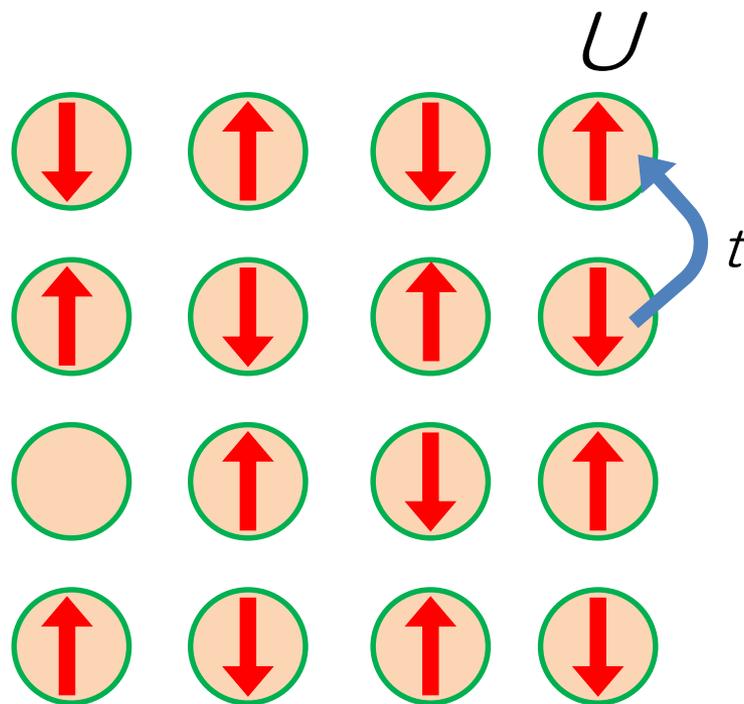


単一軌道ハバード模型

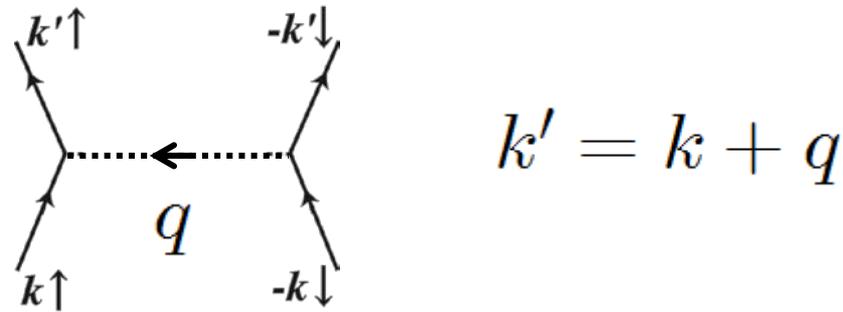


電子数=サイト数のとき：half-filled 銅酸化物母物質に対応

電子間斥力のみ・フォノンを考えない

→ホールが入ったとき、超伝導を記述し得るか？

斥力相互作用媒介の超伝導???



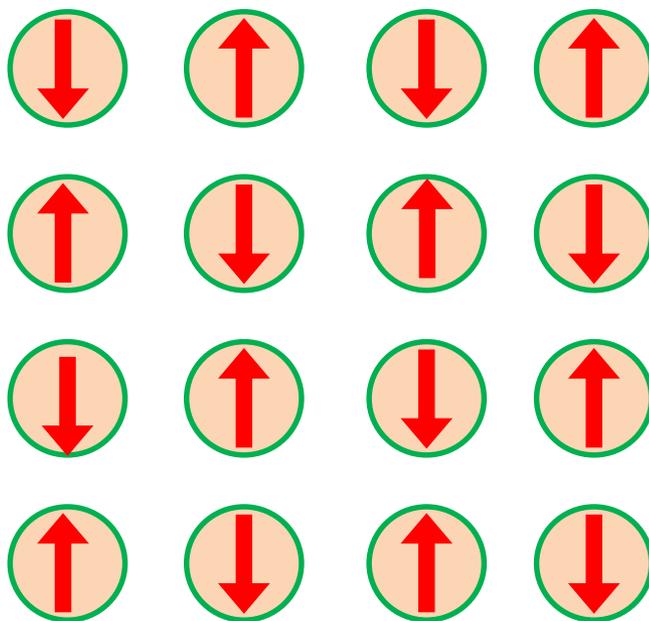
ギャップ方程式

$$\Delta(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\tanh[E(\mathbf{k}')/k_B T]}{2E(\mathbf{k}')} V \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\Delta(\mathbf{k}')}{\parallel}$$

$U > 0$

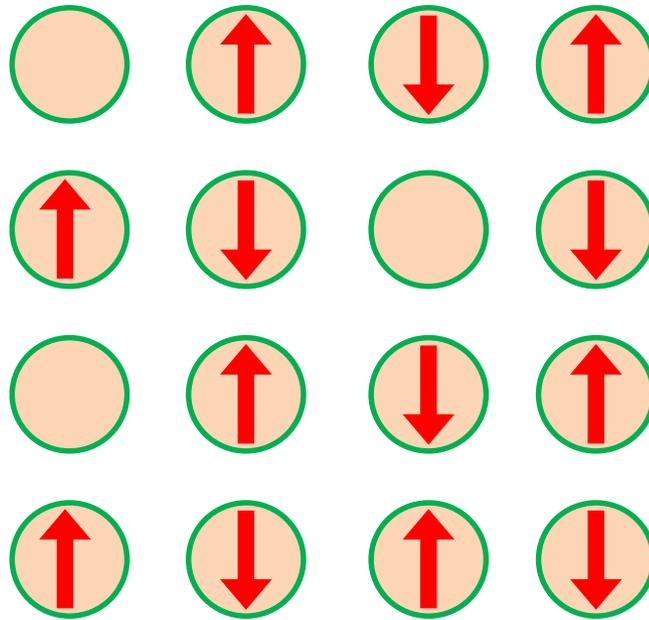
この方程式は自明に非ゼロの Δ の解を持たない。

反強磁性的なスピンの配置



スピンの並びの波数は (π, π)

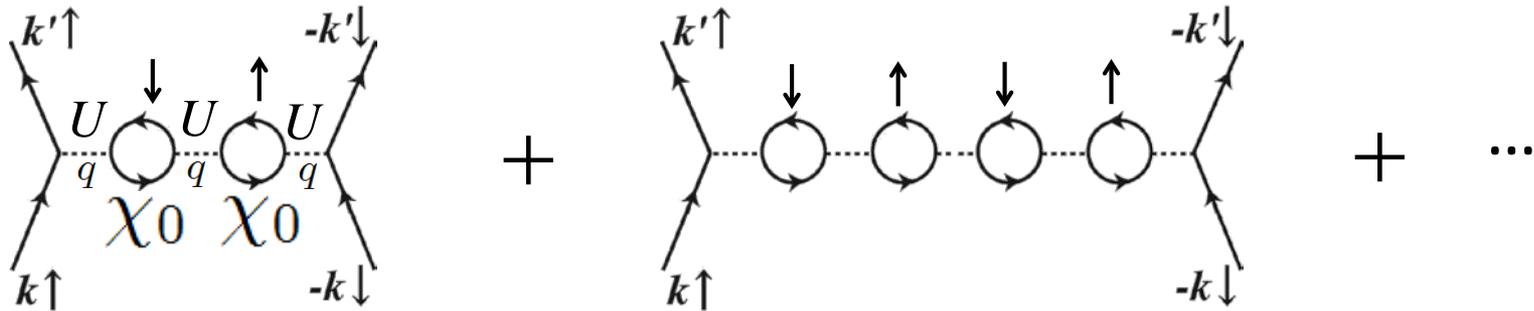
スピンの「揺らぎ」



ホールが入ると反強磁性状態は壊れるが、
反強磁性になろうとする性質の名残は残る。
この名残はフォノンのような「波」の性質を持ち、
「スピン揺らぎ」と呼ばれる。

スピン揺らぎ媒介ペアリングの数学的記述

弱結合的アプローチ U の小さい極限を出発点として、 U/t に関する摂動論的



このような特定の形のダイアグラムのみを集める近似
(摂動展開の無限和)

$$= \text{Diagram} \quad k' = k + q$$

The diagram shows a pair of electrons ($k \uparrow$, $-k \downarrow$) interacting via a potential V with a pair of electrons ($k' \uparrow$, $-k' \downarrow$). The momentum transfer is q . The equation states $k' = k + q$.

有効ペアリング相互作用

$$V(q) = \frac{U^3 \chi_0(q)^2}{1 - (U \chi_0(q))^2} = \left\{ \frac{\chi_0(q)}{1 - U \chi_0(q)} - \frac{\chi_0(q)}{1 + U \chi_0(q)} \right\} U$$

磁気感受率

$$M = \chi H$$



$$\begin{aligned} M(\mathbf{q}, \omega) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t) \\ = \chi(\mathbf{q}, \omega) H(\mathbf{q}, \omega) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t) \end{aligned}$$

電子間相互作用がないときの、 $\omega=0$ での磁気感受率

$$\chi_0(q) = \sum_k \frac{f(\varepsilon(k+q)) - f(\varepsilon(k))}{\varepsilon(k) - \varepsilon(k+q)}$$

電子間相互作用 U による磁気感受率の増強 (RPA近似)

$$\chi_s(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 - U\chi_0(q)}$$

expression is valid for $U\chi_0 < 1$

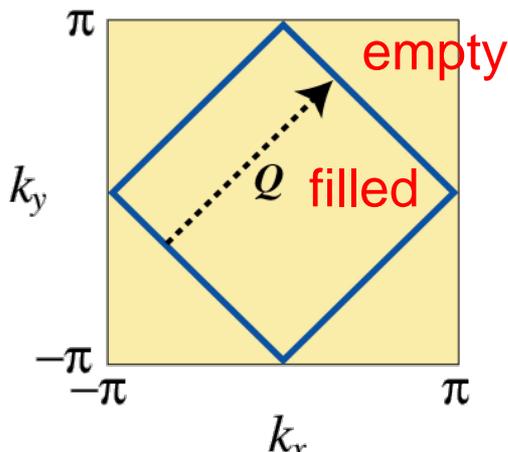
$$\chi_s(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 - U\chi_0(q)} \rightarrow \infty \quad \text{as} \quad U\chi_0(q) \rightarrow 1$$

at a certain wavevector $q=Q$ where $\chi_0(q)$ is maximized

- 無限小の磁場に対して磁荷が発生
- 感受率の発散は、自発的な磁気秩序の発生を意味する

固定された U に対して、感受率の発散は、温度低下によって生じる。
 $\chi_0(q)$ は温度低下に伴ってある特別な波数ベクトル周辺で大きくなる。

Half-filled系におけるフェルミ面: 強いネスティング(nesting)



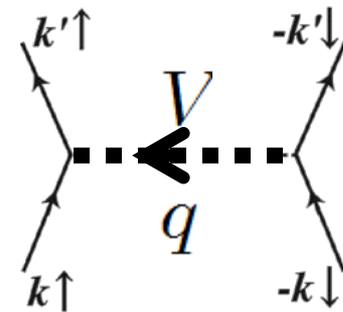
$$\frac{f(\varepsilon(k+q)) - f(\varepsilon(k))}{\varepsilon(k) - \varepsilon(k+q)}$$

はnesting vector $q=Q$ 周辺で大きくなる。

フェルミ面が強くネスティングしているとき、波数 Q の磁気秩序が生じやすい。

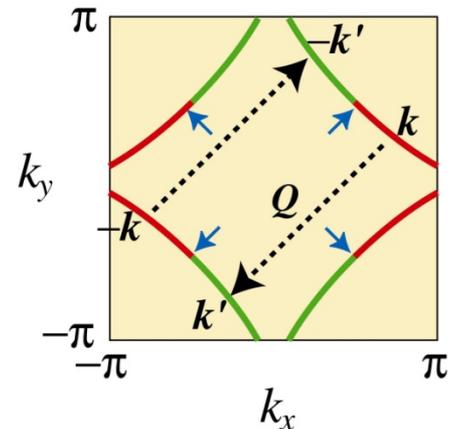
フェルミ面のネスティングがある程度悪くなると、磁気秩序は阻害されるが、秩序が立とうとする揺らぎ（スピン揺らぎ）は存在している。それは、特定の波数近傍での大きな $\chi_s(Q)$ として現れる。

$$\text{large } V(Q) > 0$$



超伝導の条件: $V(k - k')\Delta(k)\Delta(k') < 0$

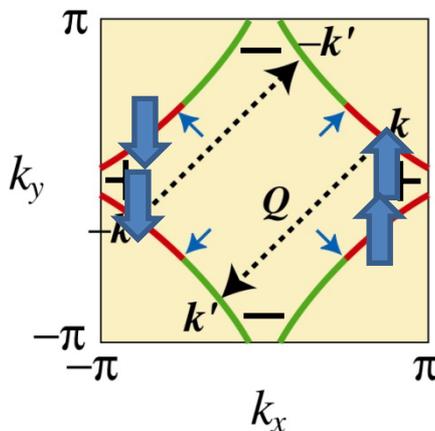
$q=Q$ 近傍のスピン揺らぎによるペアリング相互作用
 →超伝導ギャップ: $\Delta(k) = -\Delta(k+Q)$
 →d波超伝導ギャップ



ギャップ関数の符号

$$\Delta(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\tanh[E(\mathbf{k}') / k_B T]}{2E(\mathbf{k}')} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}')$$

フォノンの替りにスピン揺らぎをペアリングの「ノリ」として使うと、 $V_{sp}(q) > 0$ で、 $q = Q$ で最大銅酸化物の場合、 $Q = (\pi, \pi)$

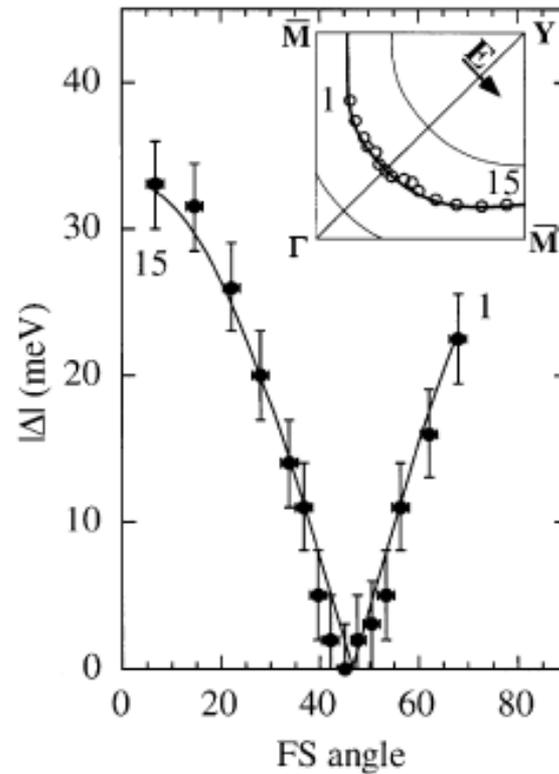


$$\Delta(k_x, k_y) \propto \cos(k_x) - \cos(k_y)$$

ギャップ関数が負になっても、エネルギーの励起ギャップはその絶対値

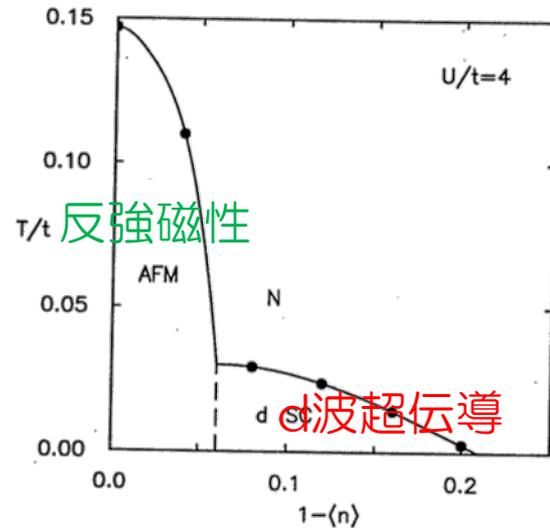
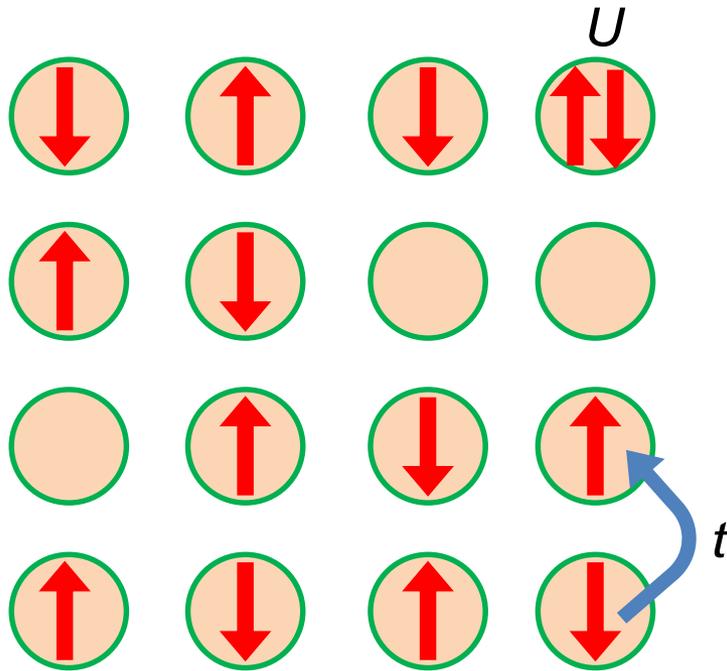
銅酸化物はd波超伝導→斥力Uが起源

角度分解型光電子分光実験



H.Ding, J. Phys. Chem Solids Vol 59, 1888-1891, 1998

FLEXによるハバード模型の相図

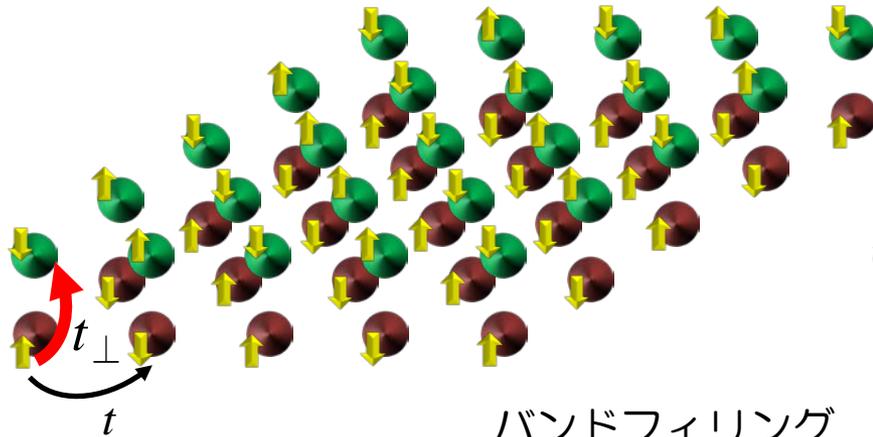


Bickers et al, PRB **43** (1991) 8044

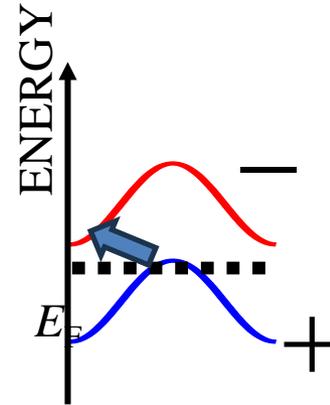
d波超伝導 $T_c = 0(0.01 t) \sim 100K$

銅酸化物において $t \sim 0.5eV \sim 5000K$
 T_c は t に比べて非常に低い!

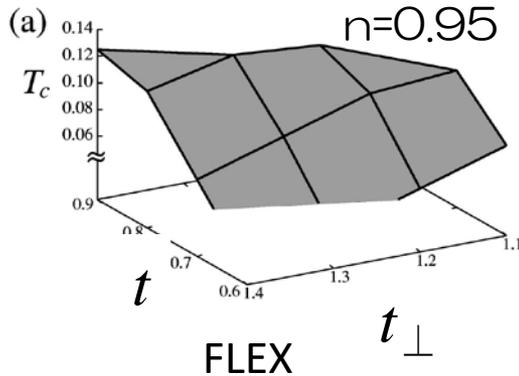
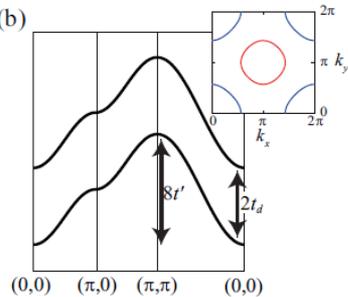
二層ハバード模型における高温超伝導



バンドフィリング
 $n=0.95$



バンド間のクーパー対散乱により、
 大きな t_{\perp} + ハーフフィルド近傍で
 バンド間で超伝導ギャップの符号を
 反転させる高温超伝導

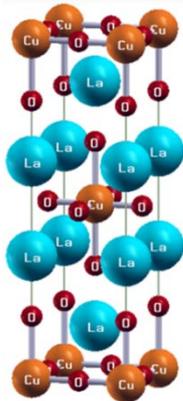


KK and R. Arita, PRB **66**, 184508 (2002)

also T. Maier & D.J. Scalapino PRB **84**, 180513 (2011)

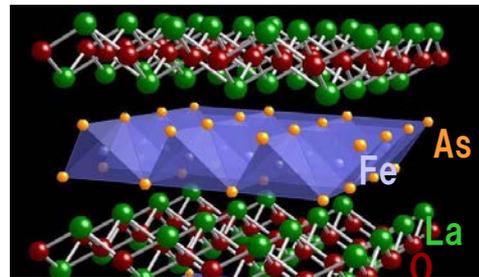
高温超伝導・従来型と非従来型

銅酸化物



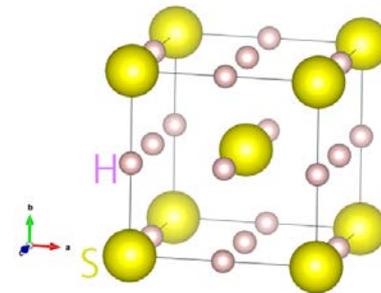
Bednorz & Muller
1986

鉄系超伝導



Kamihara, Hosono *et al.*
2008

水素化物



Drozdov, Erements *et al.*
2015

非従来型

電子相関によるペアリング

実験による発見以前に理論なし

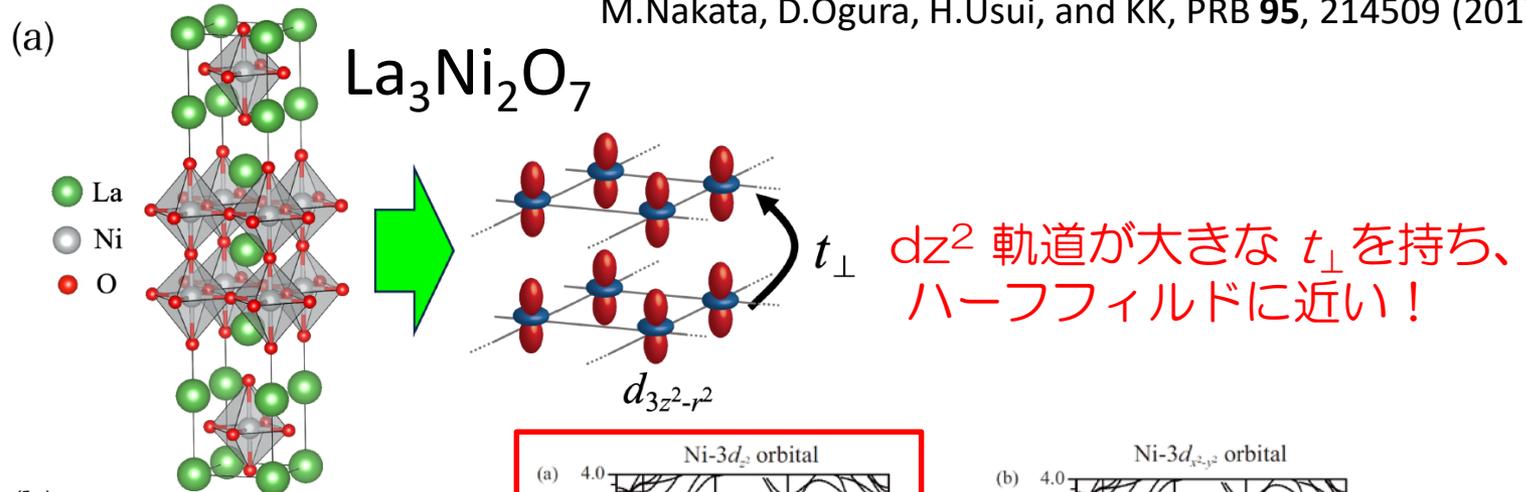
従来型

フォノン媒介によるペアリング

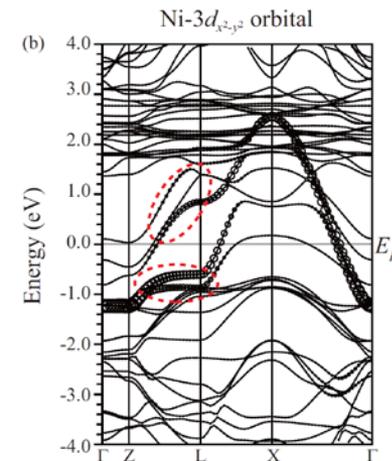
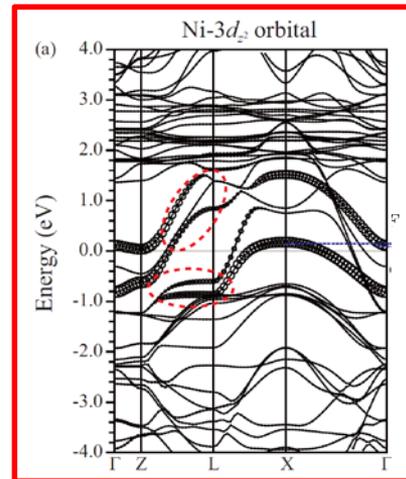
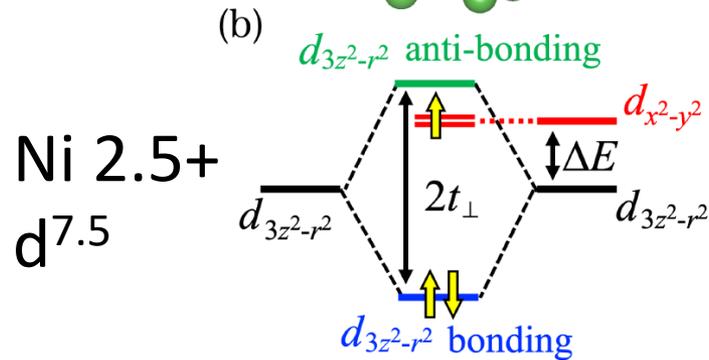
第一原理計算による理論予言

現実の物質での実現は？

M.Nakata, D.Ogura, H.Usui, and KK, PRB **95**, 214509 (2017)



dz² 軌道が大きな t_{\perp} を持ち、ハーフフィルドに近い！

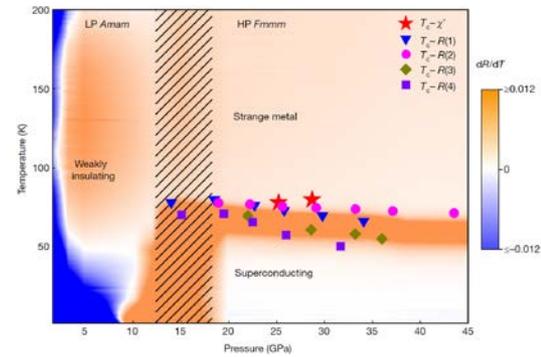
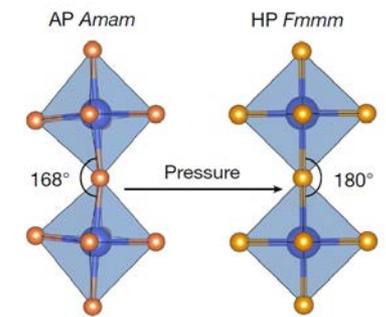
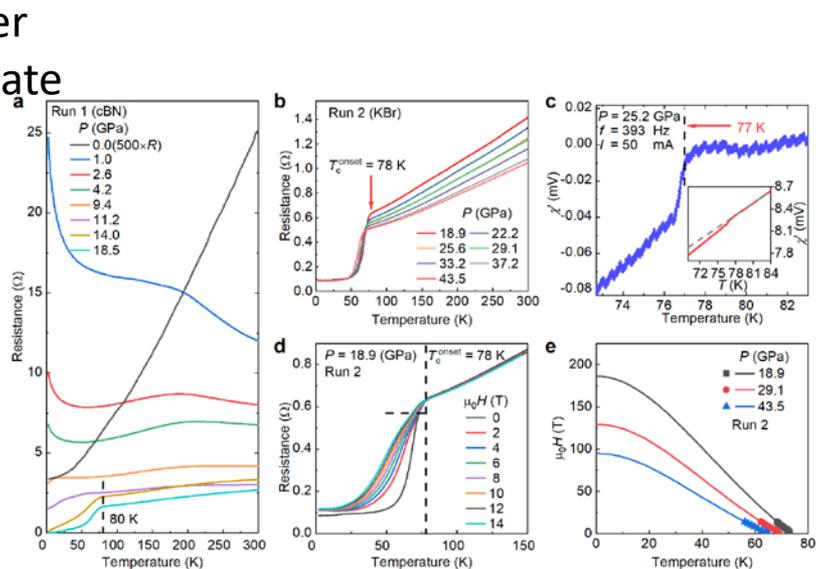
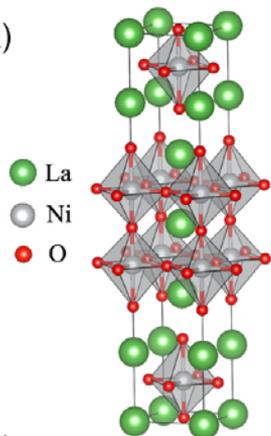


Superconductivity near 80 Kelvin in single crystals of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under pressure

Hualei Sun^{1,7}, Mengwu Huo^{1,7}, Xunwu Hu¹, Jingyuan Li¹, Yifeng Han², Lingyun Tang³, Zhongquan Mao³, Pengtao Yang⁴, Bosen Wang⁴, Jinguang Cheng⁴, Dao-Xin Yao¹, Guang-Ming Zhang^{5,6,*} & Meng Wang^{1,*}

Ruddlesden-Popper type bilayer Nickelate

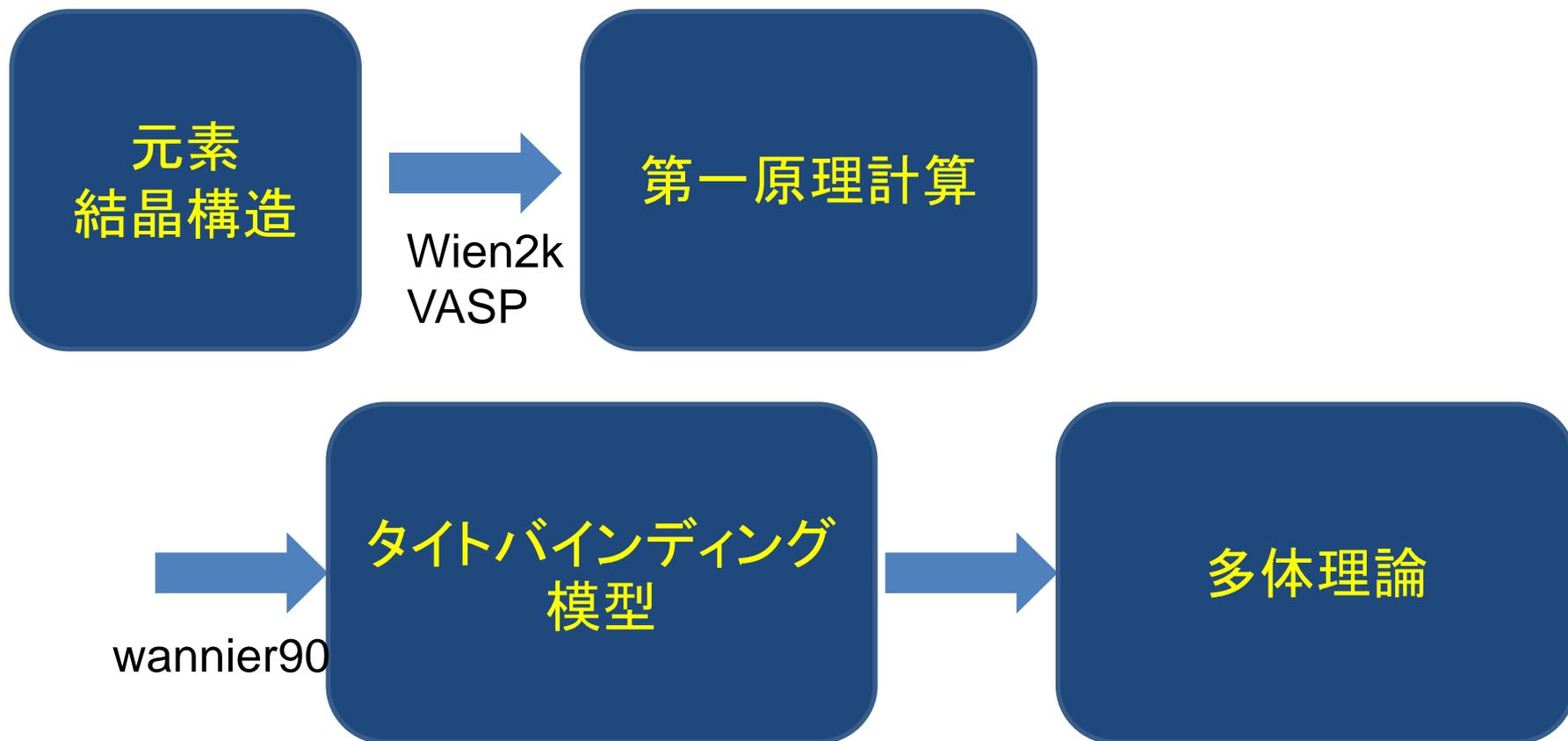
(a)



H. Sun et al. Nature **621**, 493

圧力で斜方晶から正方晶になり、そこで超伝導が発現

電子相関起源の超伝導 物質に対する計算



Possible high T_c superconductivity in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under high pressure through manifestation of a nearly-half-filled bilayer Hubbard model

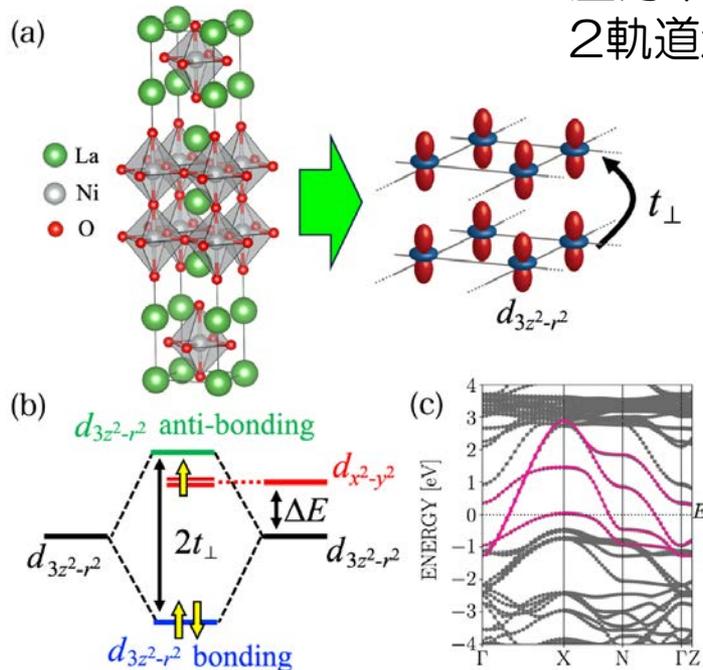
Hirofumi Sakakibara,^{1,*} Naoya Kitamine,² Masayuki Ochi,^{2,3} and Kazuhiko Kuroki²

¹Advanced Mechanical and Electronic System Research Center (AMES), Faculty of Engineering, Tottori University, 4-10 Koyama-cho, Tottori, Tottori 680-8552, Japan

²Department of Physics, Osaka University, 1-1 Machikaneyama-cho, Toyonaka, Osaka 560-0043, Japan

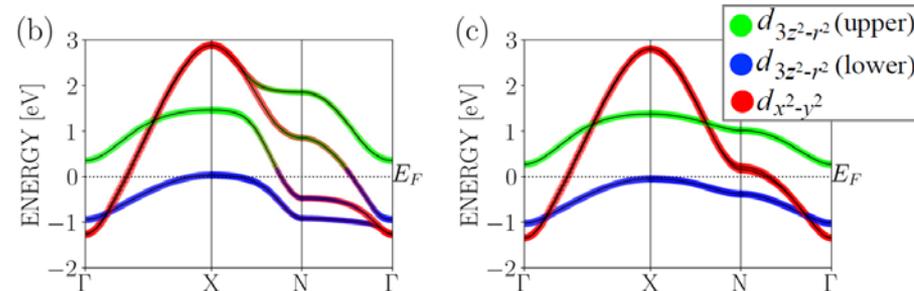
³Forefront Research Center, Osaka University, 1-1 Machikaneyama-cho, Toyonaka, Osaka 560-0043, Japan

圧力下の正方晶構造を用いてバンド計算を行い
2軌道x2層のタイトバインディングモデルを構築



[eV]	ΔE	t_{\perp}	$t_{3z^2-r^2}$	$t_{x^2-y^2}$	$t_{x^2-y^2-3z^2-r^2}$
	0.372	-0.664	-0.117	-0.491	-0.242

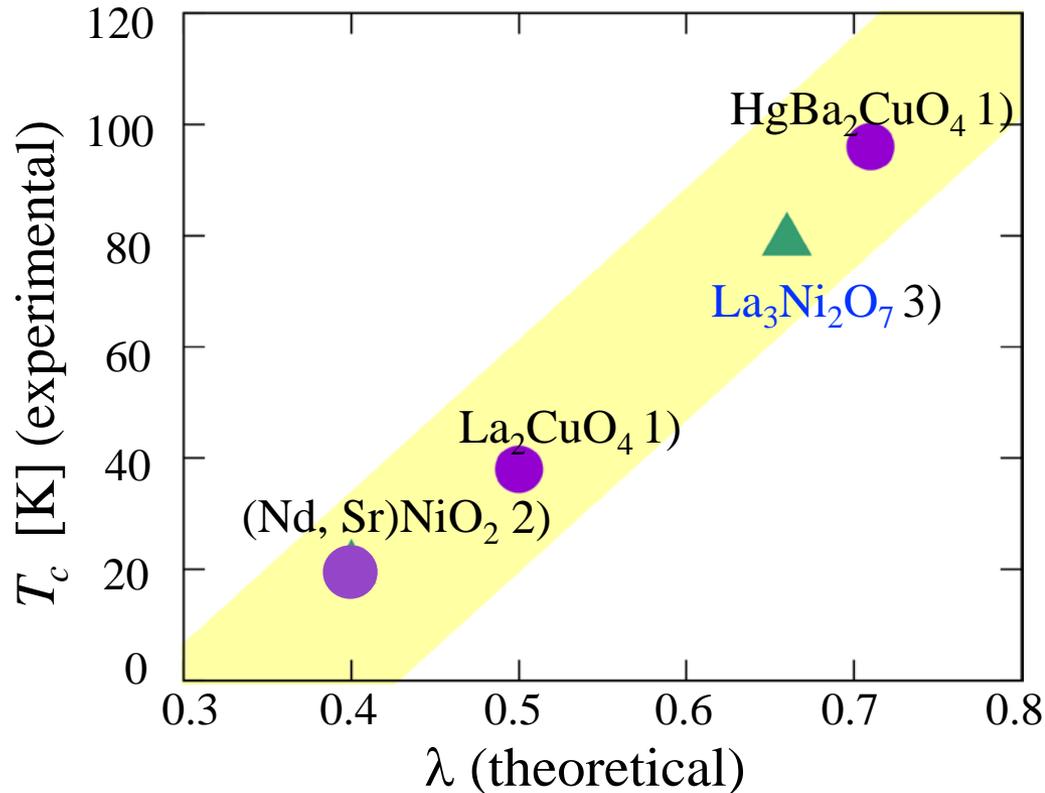
人工的に軌道混成を切ると



H.Sakakibara, N. Kitamine, M. Ochi, and KK, PRL **132**, 106002 (2024)

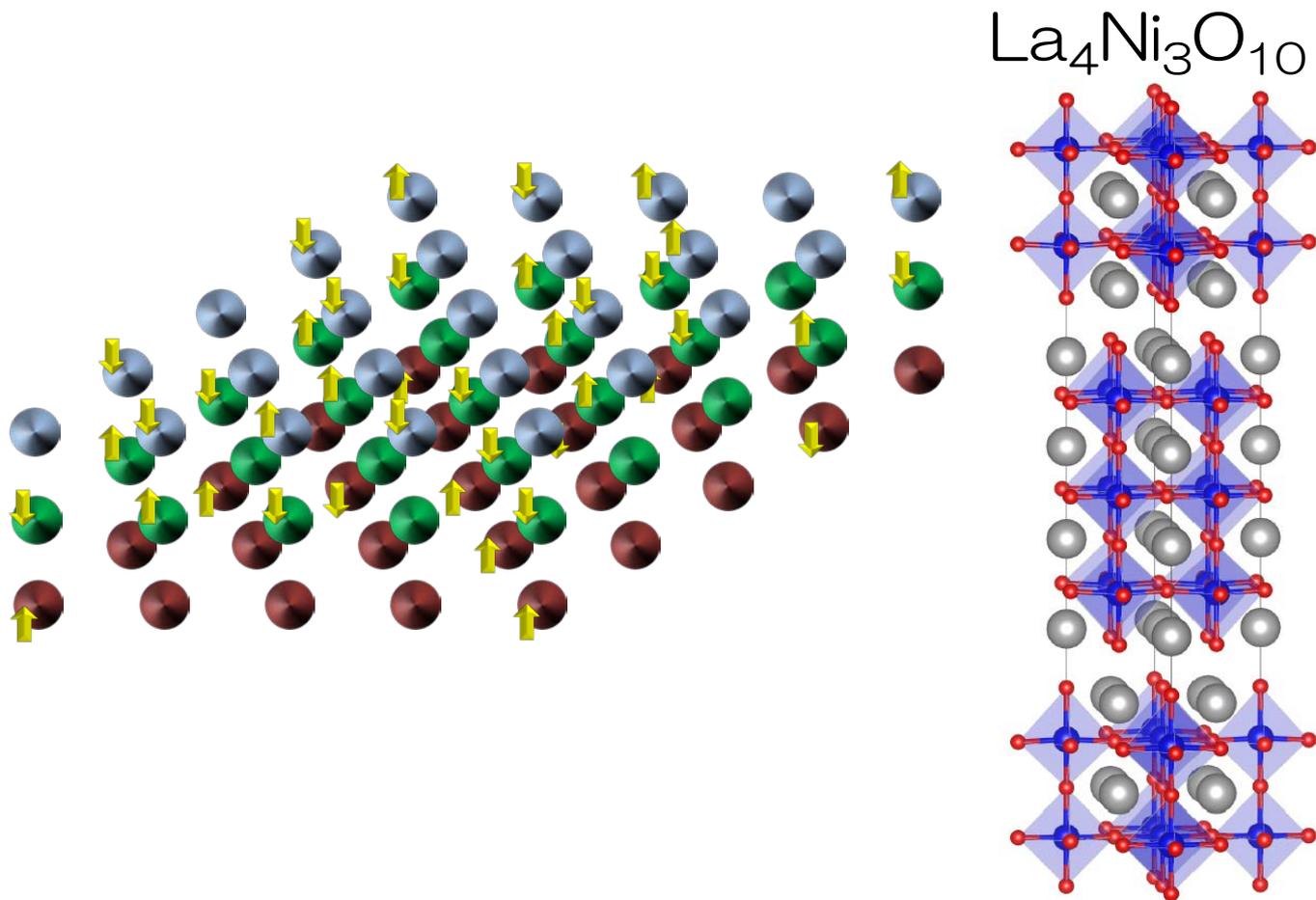
超伝導に関するFLEX計算結果

λ : FLEX計算において、超伝導の T_c の相対的目安を与える量



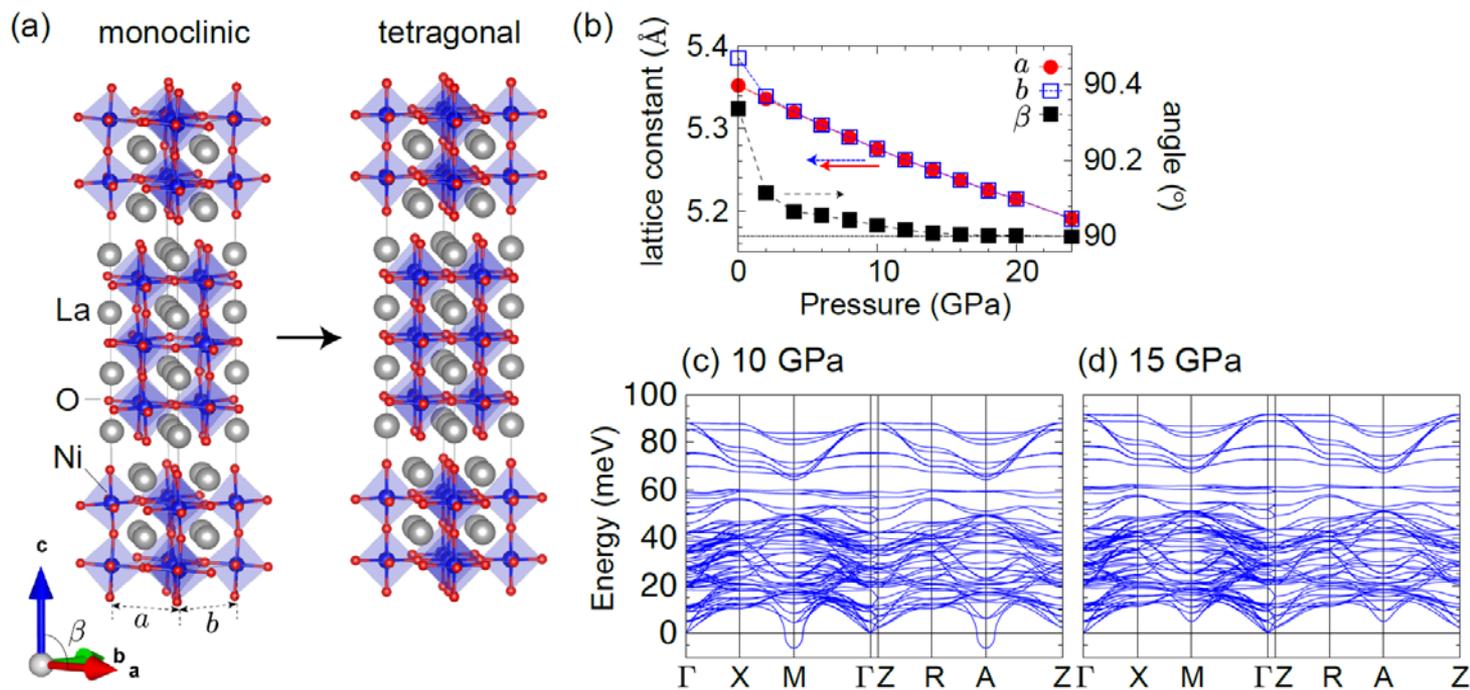
- 1) H.Sakakibara and T. Kotani, PRB **99**, 195141 (2019) 2) H.Sakakibara, KK *et al.*, PRL **125**, 077003 (2020)
3) H.Sakakibara, KK *et al.*, PRL **132**, 106002 (2024)

三層型では？



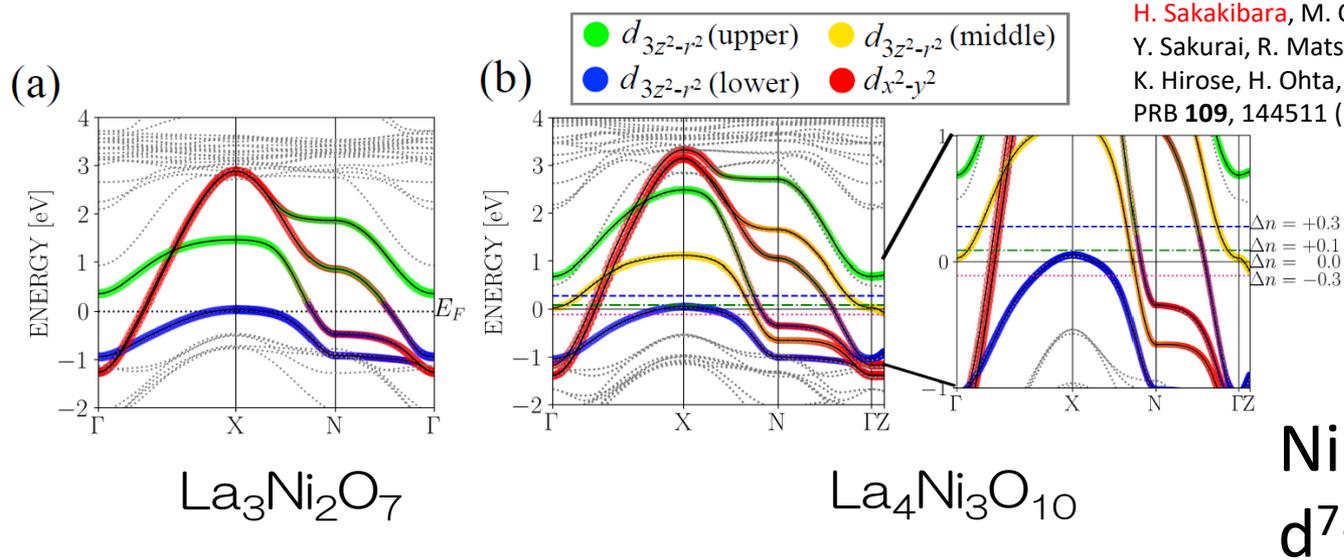
第一原理計算：圧力下の構造とフォノン計算

H. Sakakibara, M. Ochi, H. Nagata, Y. Ueki, Y. Sakurai, R. Matsumoto, K. Terashima, K. Hirose, H. Ohta, M. Kato, Y. Takano, KK, PRB **109**, 144511 (2024)



15 GPa程度以上で正方晶に

第一原理計算: バンド構造 @40GPa

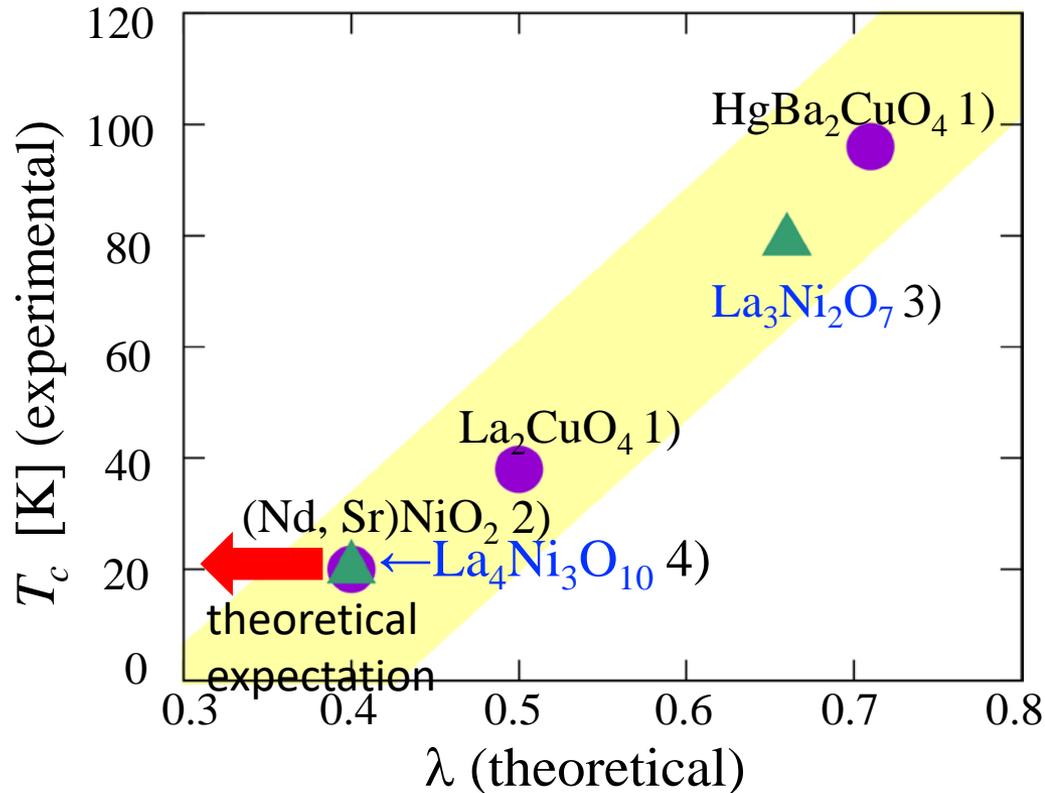


H. Sakakibara, M. Ochi, H. Nagata, Y. Ueki, Y. Sakurai, R. Matsumoto, K. Terashima, K. Hirose, H. Ohta, M. Kato, Y. Takano, KK, PRB **109**, 144511 (2024)

	[eV]	ΔE	t_{\perp}	$t_{3z^2-r^2}$	$t_{x^2-y^2}$	$t_{x^2-y^2-3z^2-r^2}$
$\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$	inner	0.105	-0.712	-0.163	-0.541	-0.294
	outer	0.257	-0.712	-0.117	-0.538	-0.285
$\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$		0.372	-0.664	-0.117	-0.491	-0.242

超伝導に関するFLEX計算結果

λ : FLEX計算において、超伝導の T_c の相対的目安を与える量



- 1) H.Sakakibara and T. Kotani, PRB **99**, 195141 (2019) 2) H.Sakakibara, KK *et al.*, PRL **125**, 077003 (2020)
3) H.Sakakibara, KK *et al.*, PRL **132**, 106002 (2024) 4) H.Sakakibara, KK *et al.*, arXiv : PRB **109**, 144511 (2024)

NIMS高野グループにおける実験結果

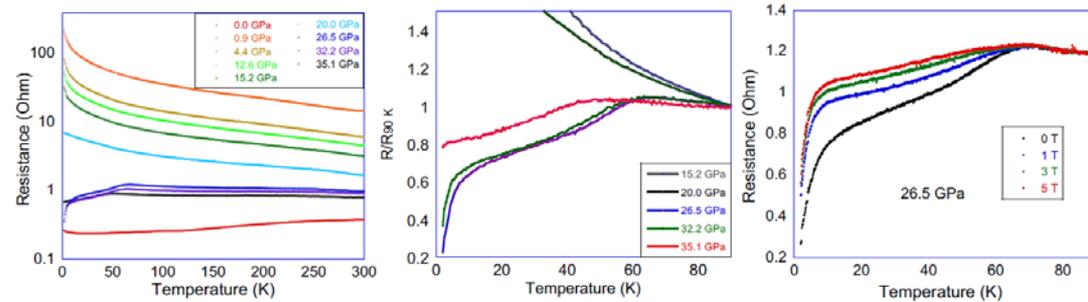


FIG. 4. Temperature dependence of electrical resistance of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_{7.01}$ (a) under several pressures from 0.0 GPa to 35.1 GPa, (b) normalized at 90 K under 15.2 - 35.1 GPa, (c) under magnetic fields from 0 to 5 T at 26.5 GPa.

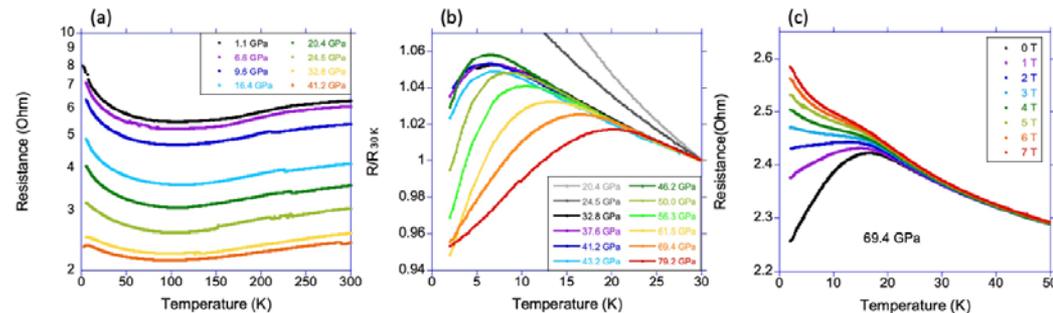
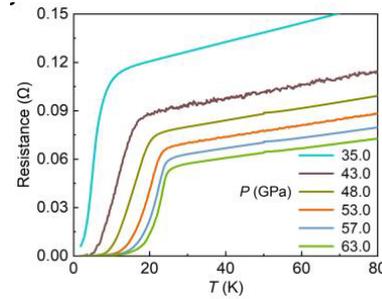
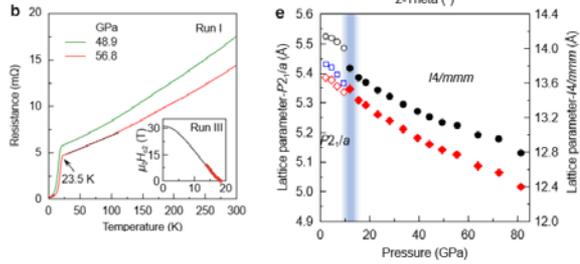


FIG. 5. Temperature dependence of the electrical resistance of $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{9.99}$ (a) under several pressures from 1.1 to 41.2 GPa, (b) normalized at 30 K, under several pressures from 32.8 to 79.2 GPa, (c) under magnetic fields from 0 to 7 T, at 69.4 GPa

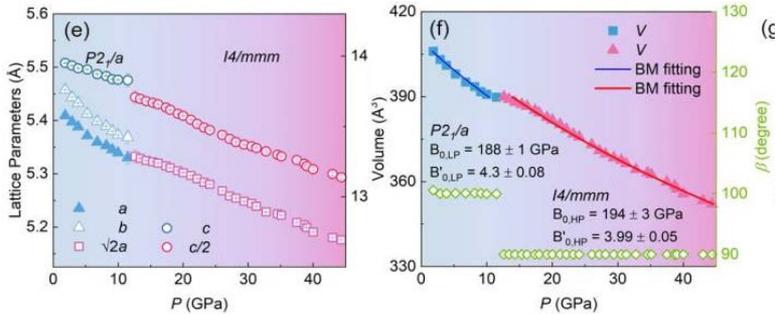
H. Sakakibara, M. Ochi, H. Nagata, Y. Ueki, Y. Sakurai, R. Matsumoto, K. Terashima, K. Hirose, H. Ohta, M. Kato, Y. Takano, *PRB* **109**, 144511 (2024)

三層系 $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$
 高圧下において、 $T_c=20\text{K}$ 程度の超伝導の兆候

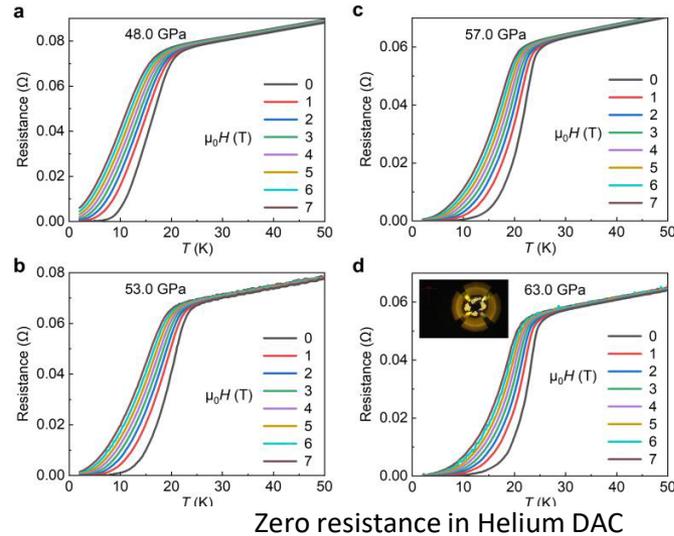
その後の三層系 $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ の超伝導の追試



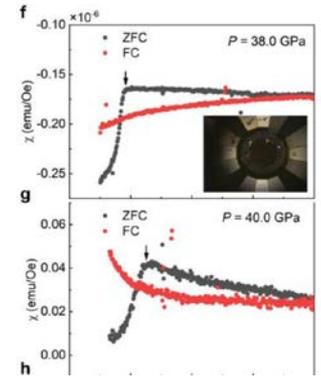
M. Zhang et al., arXiv:2311.07423



J. Li, M. Wang et al., arXiv:2311.16763



Zero resistance in Helium DAC

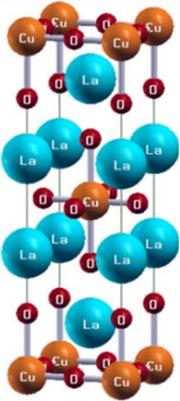


Y. Zhu et al., arXiv:2311.07353

ゼロ抵抗とマイスナー効果の観測

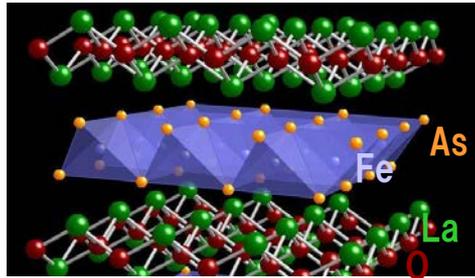
非従来型高温超伝導

銅酸化物



Bednorz & Muller
1986

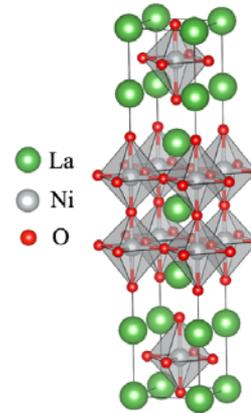
鉄系超伝導



Kamihara, Hosono *et al.*
2008

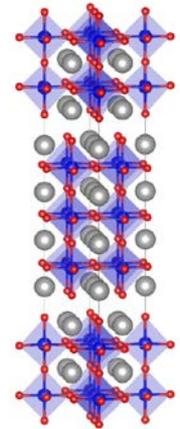
実験による発見以前に理論なし

$\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$



Sun, Wang *et al.*
2023

$\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$



Nagata, Ueki,
Sakurai, Takano *et al.*
2023

超伝導の可能性を論じた理論が
実験による超伝導発見以前に存在