

多変数変分モンテカルロ法を用いたハバード模型における高温超伝導機構の解析

東大院工 三澤 貴宏, 今田 正俊

最近接のホッピング t とオンサイトのクーロン相互作用 U のみを考慮した、正方格子上的ハバード模型は銅酸化物における高温超伝導を記述する最も基本的な模型の一つである。しかしながら、長年の精力的な研究にも関わらず[1-4]、ハバード模型における高温超伝導の存在およびその起源についてはいまだ完全な決着はついていない。今回の研究では、ドーブしたハバード模型における超伝導の発現可能性及びその機構を明らかにするために、我々は大規模かつ高精度の多変数変分モンテカルロ計算を実行した[5]。我々が用いた変分モンテカルロ法の大きな特徴としては一体波動関数として一般化されたペアリング波動関数を採用していることである[6]。このペアリング波動関数が含む多数の変分パラメータを適切に調節することによって、反強磁性絶縁体及び金属、さらには異方的超伝導を対等に取り扱うことができる。相関因子としては、グッツヴィラー、長距離ジャストロー、ダブルロン-ホロン束縛因子を導入した。また、系がもつ対称性を回復させるために、スピン及び運動量に関する量子数射影を行った。厳密対角化及び量子モンテカルロ法などの結果との比較から、この変分モンテカルロ法が数値的に厳密な結果をよく再現できることを確認している[5,6]。

この多変数変分モンテカルロ法を用いてドーブしたハバード模型を解析したところ、強相関領域($U/t > 6$)でポテンシャルエネルギーの利得(二重占有度の減少)によって d 波の超伝導がハーフフィリング近傍で安定化することを明らかにした。しかしながら、このハーフフィリング近傍で実現している超伝導のほとんどが相分離によって覆い隠されてしまうことを明らかにした。この超伝導はオフサイトクーロン斥力にも弱く、 U の 1/10 程度の最近接の斥力 V で、相分離の領域の縮小とともに、超伝導がほとんど消失してしまった。この結果は超伝導発現と相分離の近接効果として現れる電荷揺らぎの増大が密接に関わっていることを強く示唆している。その一方で、最近接の反強磁性相互作用 J は相分離領域を広げ、それと同時に超伝導の領域も広げることを見出した。さらに、これらのサイト間の相互作用の V と J の適切な組み合わせのもとで、相分離に覆い隠されない超伝導が広い領域で発現することを見出した。この結果は、 V 及び J といった従来の理論計算では簡単化のために無視されることの多かったサイト間の相互作用が、現実物質の高温超伝導を発現させるのに重要な役割を果たしていることを示している。

参考文献

- [1] N. Furukawa and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 61, 3331 (1992).
- [2] T. Aimi and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 76, 113708 (2007).
- [3] H. Yokoyama et al. J. Phys. Soc. Jpn 73, 1119(2004).
- [4] D. Baeriswyl et al. New J. Phys. 11 075010 (2009).
- [5] T. Misawa and M. Imada, arXiv:1306.1434.
- [6] D. Tahara and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 114701 (2008).