

酸化物超伝導体の理論における数値的手法の役割

浅井 美博

電子技術総合研究所

酸化物超伝導体の理論研究の現場でどのような数値的手法が用いられ、どのような成果を出しているかを解説する。特に量子モンテカルロ法を用いたハバードモデルの低温及び基底状態の研究を取り上げる。

Numerical Approaches to Mechanism of High- T_C Copper Oxides - An Overview -

Asai Yoshihiro

Electrotechnical Laboratory,

Tsukuba Ibaraki 305, Japan

I will give an overview on numerical methods and their results frequently used in theoretical studies of mechanism of High- T_C copper oxides. Especially, studies of low temperature and ground state properties of Hubbard model using quantum monte carlo simulation will be focussed.

酸化物超伝導体の理論における数値的手法の役割

電子技術総合研究所 浅井 美博

酸化物超伝導体の超伝導相は反強磁性を示す母体物質に、化学的置換を行ないキャリアをドーピングすることにより出現する。この反強磁性相は電子間の反発が大きいため電子が *half-filled state* で各サイトに局在する事により実現すると考えられている。キャリアがドーピングされた金属的状态においても電子間反発を十分に考慮することは重要であろう。この電子間反発中で最も大きな寄与をするのが

$H_1 = \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ という項である。この項は i 番目の銅サイトに *up-spin* の電子と *down-spin* の電子が同時に入った時に U だけエネルギーが上昇する事を表わす。電子は隣り合うサイト間を *transfer integral t* で移る。

$$H_0 = -t \sum_{\langle i, j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + h. c.)$$

従って強い電子相関を示す系の状態を調べる出発点は次のハバードモデルである。

$$H = -t \sum_{\langle i, j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + h. c.) + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

このハミルトニアンは銅サイトのみを考慮に入れている。現実の銅酸化物ではドーピングされたホールが酸素サイトに入るとされているから、また他の項も重要であろうから、上のモデルでは不十分であると言う意見も多いが、全ての本質的な点はこのハミルトニアン又は、このハミルトニアンから得られる t - J モデルという有効ハミルトニアンで記述できるという立場の人も多い。この問題は未解決である。困難は強い電子相関をしめす物質への理論的アプローチの難しさある。特に第一原理からのアプローチが非常に難しいためどのようなハミルトニアンが現実の物質に対応するのかが決着しにくかった事による。ここでは実際の銅酸化物との整合性は度外視して強相関系の基本的なモデル

(1) のお話をする。一見簡単に見えるハミルトニアンであるが (1) の *half-filled* から少しずれた状態で U が大きいときの低温状態及び基底状態の性質は殆ど理解されていない。最近主に量子モンテカルロ法を用いた数値的手法で理解が進んだ。これに寄与したのは文献 [1-3] の著者達である。私と同じ研究所に所属する関口氏の甘言に騙されて筆者がソレラのことを紹介する羽目に成ってしまった。詳しくは [1-3] の文献を見て頂きたい。ここではより一般的なグランドカノニカル集合の場合のお話をする。

(1) のハミルトニアンの取り扱いで難しいのは $\sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ の項である。量子モンテカルロ法では次の離散型ストラトノヴィッチ ハバード変換をもちいる。

$$\exp(-U n_{\uparrow} n_{\downarrow}) = \text{Tr}_\sigma \exp(\lambda \sigma (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) - U/2 (n_{\uparrow} + n_{\downarrow}))$$

$$\lambda = 2 \tanh^{-1} (\tanh (U/4))^{1/2}$$

この変換を用いることによりハミルトニアンはオペレータの *bilinear* な形になる。例えば分配関数は Trotter 分解

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \exp(-\beta H) = \text{Tr} \prod_{l=1}^L \exp(-\Delta\tau H) \\ &\approx \text{Tr} \prod_{l=1}^L \exp(-\Delta\tau H_0) \exp(-\Delta\tau H_1) \end{aligned}$$

を行なう事により

$$Z = \text{Tr}_\sigma \text{Tr} \prod_{\alpha=1}^L \Pi_{l=1}^L D_l(\alpha)$$

$$D_l(\alpha) = \exp(-\Delta\tau c^+ K_{ij} c_j) \exp(c^+ V^\alpha(1)_{ij} c_j)$$

$$V^\alpha(1)_{ij} = \delta_{ij} \{ \lambda \alpha \sigma_i(1) + \Delta\tau (\mu - U/2) \}$$

$$K_{ij} = \begin{cases} -t & i, j \text{ 最近接} \\ 0 & \text{その他} \end{cases}$$

と表わされる。フェルミオン行列のトレースは [4] により与えられており結局、

$$Z = \text{Tr}_\sigma \prod_{\alpha=1}^L \det [1 + B_L(\alpha) B_{L-1}(\alpha) \cdots B_1(\alpha)]$$

$$= \text{Tr}_\sigma \det O_\uparrow \det O_\downarrow$$

$$B_l(\alpha) = \exp(-\Delta\tau K) \exp(V^\alpha(1))$$

と表わされる。イジング型のストラトノヴィッチ ハバード フィールド $\sigma_i(1)$ の和を実行することは不可能なのでモンテカルロ サンプリングを行なう。ここで

$$W = \det O_\uparrow \det O_\downarrow$$

を重みとする一種のインポートランス サンプリングを行なえばよいのであるが W は一般には正ではないから代わりに $|W|$ を重みとして用いる。一般に高温では $W < 0$ の”

負のサンプル”が現われることはないが低温の *non half-filled state* では”負のサンプル”が多く発生しこの領域で正しい結果を得るのは一般に難しい。以上は *grand canonical ensemble* の話であるが、*canonical ensemble* においても”負のサンプル”の問題は残る。試行関数を選ぶ事によりある程度は回避できるが本質的には未解決である。[1]の著者達は *canonical ensemble* を用いる場合、 $\beta = 1/k_B T$ 無限大の極限でも正のサンプルの発生確率が有限に残ると言う仮定のもとに、符号を無視したサンプリングを行なっても正しい結果が得られると主張したが、最近 *d* 波超伝導相関関数の計算を例に、これが一般には正しくない事が示されている。

低温及び基底状態の計算でもう一つの困難は重みを計算するときに必要な行列式の計算や、同時刻松原 *Green* 関数

$$\langle c_i c_j^+ \rangle = [1 / \{1 + B_L B_{L-1} \cdots B_1\}]_{ij}$$

等を計算する時に必要な逆行列の計算が低温で出来なくなることであった。これは低温で行列が数値的に不安定になるためであるが、この不安定性は *B* 行列を掛けていくときに積行列の列ベクトルを直交化していくことにより避けられることが [1] で示されている。以上述べてきた様に低温のシュミレーションでの困難が全て解決されたわけではないがハバード モデルの基底状態に対して重要な知見がいくつか得られている。そのうちの一つは *half-filled* から少しずれた状態では *U* が大きい時の基底状態はフェルミ流体ではないと言うことである。フェルミ流体の運動量分布は k_F で”跳び”を持つ。ソレラは 1次元ハバード モデルの *half-filled* から少しずれた状態を計算した。一見 k_F に”跳び”がある様に見える結果が得られたが”跳び”のシステム サイズ依存性を調べる事により k_F 付近で運動量分布 $n(k)$ は

$$n(k) = n_{k_F} + A |k_F - k|^\theta \text{sgn}(k_F - k)$$

($U = \infty$, $1/4$ フィリングの時、 $\theta = 1/8$)

と冪で表わされる事をソレラは示した。2次元に対しても同様である。1次元の場合ベータ仮説を用いた厳密解の解析からも同じ結果が得られている。

もう一つの重要な知見は *half-filled* から少しずれた状態で *spin-spin correlation* が *incommensurate* になっている事である。これは [2] の著者が得た結果である。2次元の場合 ($\pi/a \pm \delta$, π/a)、(π/a , $\pi/a \pm \delta$) にピークを持つ。 *half-filled state* で反強磁性を示す時は (π/a , π/a) にピークが一つある。この *incommensurability* は実際の物質 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ の中性子散乱で観測されているものと対応すると思われる。

以上酸化物超伝導体の理論の中で量子モンテカルロ法を用いた研究を紹介してきた。

強結合系において解析的手法には限界があり量子モンテカルロ法や大次元対角化法等の数値的手法は今後とも重要な役割を果たすであろう。

文献

- [1] S.Sorella et al, Int.J.Mod.Phys.B1,993(1988)
S.Sorella et al, Europhys. Lett.,8,663(1989)
S.Sorella et al, preprint
- [2] M.Imada et al, J.Phys.Soc.Jpn.,58,3752(1989)
- [3] S.R.White et al, Phys.Rev.B40,506(1989)
- [4] R.Blankenbecler et al, Phys.Rev.D24,2298(1981)