論 文 内 容 要 旨

(NO. 1)

氏　　名	田村　駿	提出年	平成 27 年
学位論文の 題　　目	変分モンテカルロ法を用いた d-p 模型の研究		

論 文 目 次

1　研究背景
1.1　銅酸化物超伝導体の概観
1.1.1　ホールドープ型銅酸化物超伝導体の物性
1.1.2　電子ドープ型銅酸化物超伝導体の物性
1.2　銅酸化物超伝導体に対する理論模型
1.2.1　d-p 模型
1.2.2　t-J 模型
1.2.3　ハバード模型
1.2.4　銅サイトと酸素サイトを考慮した t-J 模型
1.2.5　まとめ
1.3　理論的な先行研究
1.3.1　反強磁性状態と超伝導状態に関する先行研究
1.3.2　擬ギャップ状態に関する先行研究
1.3.3　まとめ
1.4　研究目的
2　手法
2.1　変分原理
2.2　モンテカルロ法による和の評価
2.3　変分パラメータの最適化方法
2.4　多体変分試行波動関数
3　結果
3.1　常磁性(正常)状態 $P_{\mathrm{Cu}}P_{\mathrm{O}}\Phi_{\mathrm{FS}}$ の性質
3.2　反強磁性状態と超伝導状態の波動関数を用いた d-p 模型の基底状態の計算
3.2.1　反強磁性状態
3.2.2　超伝導状態

3.2.3　まとめ　(NO．2)
3.3　交替電流状態とループ電流状態
3.3.1　交替電流状態
3.3.2　ループ電流状態
3.3.3　まとめ
4　結論
4.1　反強磁性状態と超伝導状態の波動関数を用いた d-p 模型の基底状態の計算についてのまとめ
4.2　交替電流状態とループ電流状態についてのまとめ
4.3　今後の課題

銅酸化物超伝導体は現在、常圧下において最も高い超伝導転移温度T_cを持つ物質である。銅酸化物超伝導体には様々な種類があるが、銅と酸素からなる2次元の伝導面(CuO_2面)を共通に持つ。銅酸化物超伝導体では、CuO_2面が高いT_cなど担っていると考えられている。また、ホールドープ型では$T < T^*$の温度領域では、異方的にギャップが開き、フェルミエネルギー近傍の状態密度が小さくなる擬ギャップと呼ばれる状態が存在する。擬ギャップ状態が超伝導状態と競合しているのか協調しているのかについては未だ解明されておらず、現在も多くの実験が行われている。高磁場などにより超伝導状態を壊すと擬ギャップ状態が基底状態になっていると考えられている。

本研究の目的は後に詳しく述べるが、銅酸化物超伝導体の理論的模型と考えられているd-p模型の基底状態の計算と、擬ギャップ状態の理論的候補である局所的に電流の流れている状態の計算についてである。

まずは基底状態に関する研究背景について述べる。理論的にはCuO_2面を表わすハミルトニアンとして有効的に銅サイトのみを考慮した正方格子上のハバード模型が研究されてきた。最近のモット絶縁体を扱うことのできる手法では極めて広いドープ率の範囲で反強磁性秩序が存在するという結果が次々と報告されており、また、この模型では電子ドーピングとホールドーピングの違いをあらわすことが出来ないといった問題点がある。より物質に近い模型としては銅(d軌道) と酸素(p軌道) の両方の自由度を考慮した次の式で表されるd-p模型がある。

$$\mathrm{H} = \sum_{i,j,\sigma} (t_{ij} d^{\dagger}_{j,\sigma} d_{j,\sigma} + \mathrm{H.c.}) + \sum_{i,j,\sigma} (t'_{i,j} p^{\dagger}_{i,\sigma} p_{j,\sigma} + \mathrm{H.c.}) + \Delta \sum_{j,\sigma} n^{p}_{j,\sigma} + U_d \sum_{j} n^{d}_{j,\uparrow} n^{d}_{j,\downarrow}.$$

ここで$d_{j,\sigma}(p_{j,\sigma})$は銅(酸素)サイト上のホールの消滅演算子であり、$n^{d(p)}_{j,\sigma} = d^{\dagger}_{j,\sigma} d_{j,\sigma}(p^{\dagger}_{j,\sigma} p_{j,\sigma})$である。

また、$t_{ij} = 1$とする。ドープゼロの場合には平均すると各ユニットセルに1 個のホールが存在し、ドープされたホール(電子) は酸素(銅) サイトに入ることが解っている。この模型に対してモット絶縁体を扱うことが出来、かつ超伝導状態の計算が行える手法は限られているため、摂動展開の手法や厳密対角化による計算が多く行われてきた。モット絶縁体と超伝導を扱える手法としては変分モンテカルロ(VMC)法がある。VMC法は変分パラメータを含む試行波動関数を設定し、この試行波動関数によるエネルギーが最小になるように変分パラメータを最適化する方法である。VMC法による先行研究ではd-p 模型では広いドープ領域で反強磁性秩序が存在し、更に反強磁性秩序が消失するドープ率近傍において超伝導状態が存在することが報告されている。VMC法は変分パラメータの数を増やすことにより、試行波動関数が基底状態に近づくが、d-p模型に対して行われた先行研

究ではハバード模型に対する研究で使われているものよりも変分パラメータの数は圧倒的に少ない。

次に、擬ギャップ状態に関する研究背景について述べる。擬ギャップ状態の温度領域においては時間反転対称性が破れていることが報告されており、各ユニットセル内で電流が流れている局所電流状態などが理論的に提案されている。擬ギャップ状態は有限温度において実現する状態なので、$T > 0$で計算が実行出来る手法が必要であるが、磁場等により超伝導状態が壊れた状態を仮定すると、$T = 0$で超伝導、反強磁性以外で最もエネルギーの低い状態が擬ギャップ状態に対応していると考えられる。このような考えからVMC法において、局所電流状態のエネルギーと常磁性(無秩序)状態のエネルギー(E_{PM})の比較が行われてきた。VMC法による計算では、局所電流状態のエネルギーがE_{PM}よりも小さくなるためにはホール配置に依存した位相の変分パラメータが必要であることが示されている。上記の変分パラメータを考慮したとしても、必ずしも局所電流状態のエネルギーが下がるというわけではないが、*d-p*模型に対する先行研究ではこのような変分パラメータは考慮されていなかった。

以上の点を踏まえて、本研究ではVMC法を用いて*d-p*模型に対して次の2点についての研究を行った。(1)先行研究よりも多くの変分パラメータを設定して*d-p*模型の基底状態を系統的に調べる。先行研究で使用されていた試行波動関数では高々数百個程度の変分パラメータであったが、本研究では百万個程度の変分パラメータを設定する。特に、反強磁性と超伝導の秩序を持つ試行波動関数によるエネルギーの比較を行う。(2)局所電流状態と常磁性状態のエネルギーの比較を、ホール間配置に依存した変分パラメータを考慮することにより行う。

(1) *d-p*模型の基底状態

本研究で用いた試行波動関数によるエネルギーは、先行研究で用いられている試行波動関数によるエネルギーに比べ、特に、ドーピングした場合に大きく低下する。この試行波動関数により、d-p 模型に含まれるパラメータであるΔ、t'_{ij}、U_dとドープ率(δ)を系統的に変化させて反強磁性状態と超伝導状態の試行波動関数によるエネルギーを比較した。本研究で使用した変分試行波動関数では反強磁性状態の方が超伝導状態よりもエネルギーが低いことが分かった。反強磁性が広く存在するパラメータ領域は、Δ またはU_d が大きいか、$\left|t'_{ij}\right|$が小さい領域である。ハミルトニアンのパラメータ値は、第一原理計算から$\left|t'_{ij}\right| = 0.4 - 0.6$、Δ =1-2、$U_d$ =5-10程度と考えられており、更に、電子ドープ型の物質ではホールドープ型に比べてΔ が小さいと考えられている。これらのパラメータ値近傍では電子ドープ型の物質で見られるようにノンドープにおいて反強磁性が存在しない領域が存在する。また、ホールドープ型で見られるように反強磁性が数%のドーピングにより消失するパラメータ領域が存在する。反強磁性の存在しない領域において超伝導が存在する機構を解明することが今後の課題である。

また、基底状態ではないものの、超伝導の関数により計算した*d*波の超伝導相関関数(P_d)は、ホールドーピングにおいてはT_cと同様にドーム形状になり、実験と同様に約30%程度のドーピングにより消失することが分かった。

(2) 局所電流状態

ホール配置に依存する変分パラメータを導入して局所電流状態のエネルギーを計算したところ、交替電流状態は常磁性状態よりもエネルギーが低いハミルトニアンのパラメータ領域が存在する

ことが分かった。特に、常磁性状態の試行波動関数がモット転移する点近傍において交替電流状態の方がエネルギーが小さくなる。しかし、ループ電流状態は本研究で調べた範囲では常磁性状態よりもエネルギーが下がるパラメータ領域は見つからなかった。

論文審査の結果の要旨

本論文は、銅酸化物超伝導体の性質を理論的に論じたものである。

最近の銅酸化物超伝導体の純良化物質の実験では電子ドープ系において、ホールドープ系とは異なる磁気的性質が報告され、両系を等価に扱う単一軌道模型の再検討が求められている。さらに、ホールドープ系で現れる擬ギャップ相での対称性の破れに関する多くの実験から、磁気モーメントを伴った秩序の形成が指摘され、二種類の局所電流状態が提唱されているが、その一つは多軌道模型でないと扱えず、その安定性については未だに明らかにされていない。

田村駿提出の博士論文は、単一軌道模型より実際の物質に近い d-p 多軌道模型に対して、強相関系を定量的に扱える数少ない方法である変分モンテカルロ法を適用し、(1)基底状態において、単一軌道模型では考察できない軌道間ポテンシャル差や酸素間の電子遷移などの変数が物理量に如何に反映するかを調べ、それらに関して相図を作成すること、(2)上記二種類の局所電流状態が、常磁性状態よりエネルギー的に安定化するかどうかを明らかにすることを目的とした。

計算手法としては Correlator Product State 法や共役勾配法など量子化学の分野で開発された方法を固体物理系に導入した多変数変分モンテカルロ法を用い、これまで数個程度であった変分変数の数を百万を超える程度まで拡張することで、以前より圧倒的に精度の高い計算を行った。その結果、以下の二点の成果を得た。(1) 電子ドープ系とホールドープ系で反強磁性が超伝導より優位となる領域が異なる相図を得た。 (2)これまで無視されていた位相因子を導入した高精度の計算を行った結果、有力視されていた対称性を破らない電流状態は安定化されず、交替磁束状態が安定化される領域を得た。

この研究は銅酸化物の物性に対して新しい知見をもたらし、提出者は自立して研究活動を行うに必要な研究能力と学識を有することを示している。したがって、田村駿提出の博士論文は、博士（理学）の学位論文として合格と認める。