

## 論文の内容の要旨

論文題目     Antiferromagnetism and d-wave superconductivity  
                  in the two-dimensional  $t$ - $J$  model  
(2次元  $t$ - $J$  モデルにおける反強磁性と d 波超伝導)

氏名           姫田 章宏

高温超伝導体の発見以来、基底状態の解明のための理論的実験的研究がなされ、d波対称性の超伝導であることが確立してきた。さらに、高温超伝導体は反強磁性秩序を示すモット絶縁体にホールキャリアをドーピングすることによって得られるため、反強磁性とd波超伝導の相互の関係が極めて重要な課題となっている。

実際、最近のLa系高温超伝導体における実験で、ストライプ状態と呼ばれる電荷整列を伴った非整合反強磁性秩序と超伝導が共存している状態が実現しているのではないかと示唆されている。この場合、反強磁性秩序が強くなる程、超伝導転移温度が下がっていく傾向にあり、両者は競合していると考えられる。このような両秩序の共存および競合はLa系特有の性質である可能性が強く、La系のフェルミ面の形状を考慮に入れることが重要と考えられる。

理論的にはLa系のフェルミ面の形状は、次近接ホッピング項  $t'$  を最近接ホッピング  $t$  に対して負の値 ( $\sim -0.15t$ ) で導入することで、取り扱うことができる。これまでの研究により、このフェルミ面の形状効果はハバードモデルの超伝導相関を強める働きをする事が変分法などによって示されている。また磁気秩序に対しては、整合反強磁性よりも非整合反強磁性秩序を安定化させることが平均場近似で確かめられている。しかし、実験で示唆されているような共存状態を調べるには、超伝導と反強磁性秩序を同時に扱う必要がある。そ

のために我々は2次元  $t$ - $J$  モデルを用いて、共存状態の実現の可能性とフェルミ面の形状効果を調べる。 $t$ - $J$  モデルは同一サイト2重占有を禁止するという強い電子相関の取り扱いが重要であり、たとえば従来の平均場近似では反強磁性磁気秩序を適切に扱うことができないことがわかっている。したがってこの論文では、強い電子相関を厳密に扱える変分モンテカルロ法を用いた。

はじめに、整合反強磁性と  $d$  波超伝導の様な共存状態を調べ、フェルミ面の効果を調べた。まず  $t' = 0$  の場合はホール濃度 10% 程度まで反強磁性と超伝導が共存する。 $t'/t = -0.15$  を導入すると、共存の領域は 8% 程度まで減少する事がわかった。この減少は次近接方向への運動エネルギーを調べることで理解できる。次近接方向へは反強磁性磁気秩序が発達するほど電子が飛び移りやすくなる。これは  $t'$  が負の場合にはエネルギーを損することになるため、反強磁性秩序は抑えられる。また、ホール濃度 10% 以上の超伝導状態における  $t'$  の効果も調べたところ、ハバードモデルで報告されているように超伝導相関の増大が見られた。これはバンドの分散が緩やかな波数  $(\pi, 0)$  近傍 (鞍点) の状態が  $t'$  によって移動しフェルミ面に近付くためにフェルミ面の状態密度が増え、その結果超伝導相関が増したと考えられる。したがって、様な状態におけるフェルミ面効果は、反強磁性を抑えると同時に超伝導相関を増強させることがわかる。

ただし  $t$ - $J$  モデルには  $J$  の大きい領域での相分離という問題があるので注意しなければならない。我々の調べた共存状態の安定性を調べたところ、無限系では相分離が起こった方がエネルギーが低くなることがわかった。 $t' = 0$  の時の相分離の領域はグリーン関数モンテカルロ法による最近の研究と一致した。また、 $t'/t = -0.15$  の時は相分離の境界は低ドーピング側へ移動することがわかった。これもフェルミ面の形状が超伝導相に有利に働いたためと考えられる。

次にわれわれはこの変分モンテカルロ法の結果を用いて、2重占有禁止の効果に対する近似の一種である Gutzwiller 近似を数値的に評価し、反強磁性と  $d$  波超伝導に対する変分モンテカルロの結果を再現するように Gutzwiller 近似を数値的に改良することを試みた。Gutzwiller 近似は 2重占有禁止の効果のために、物理量の期待値が平均場の値に比べ増大するという効果 ( $g$ -因子) によって特徴づけられる。我々は交換相互作用  $J$  の  $g$ -因子が反強磁性秩序がある場合その量子化軸方向に異方的に増大し、その結果磁気秩序を助けていることを見出した。ホール濃度を増やすと、その異方的な増強は弱まり、適切なホール濃度で反強磁性秩序が消失することが示された。

$t'/t = -0.15$  のフェルミ面は、フェルミ面の状態密度の増大により超伝導相に有利に働くことを見たが、われわれは  $t' = 0$  の場合にも同様のメカニズムによって、フェルミ面があたかも負の次近接ホッピング  $t'/t = -0.1$  を持つときのような形状に自発的に変形することを見出した (図 1)。エネルギー利得が一番大きいのはホール濃度 12% 付近で、それは、フェ

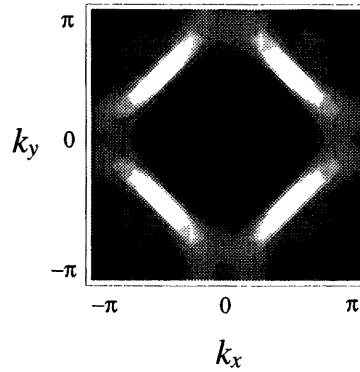


図 1:  $t$ - $J$  モデルの運動量分布関数の波数微分  $|\nabla_k n(k)|$ 。明るいところは  $n(k)$  が急激に変化していることを表している。フェルミ面の位置に対応している。ハミルトニアンには  $t'$  項がないが、基底状態の波動関数は負の  $t'$  項があるときのフェルミ面の形を持つことがわかる。

ルミ面とバンドの鞍点  $(\pi, 0)$  が近づくホール濃度に対応している。この結果は  $t$ - $J$  モデルにおける高温展開によるフェルミ面の結果と一致した。同様に  $t'/t = -0.15$  のときにもフェルミ面は見かけ上  $t'/t = -0.25$  のときの形に変形する。その場合にはエネルギー利得の大きいホール濃度はより高ドープ側になり、やはりフェルミ面の状態密度の増大により説明できる事がわかった。

次に我々は、ストライプ秩序と超伝導の共存状態の可能性を変分モンテカルロ法を用いて調べた。ストライプ状態とはホール密度の大きい領域が 1 次元的な縞状になり、その間に反強磁性のドメインがはさまっているという状態である。もしこの状態に超伝導が共存すると考えると、超伝導秩序と反強磁性秩序は互いに避けあうことが予想される。我々は、超伝導がホール密度の大きな領域に縞状に発達していると考え、さらに隣り合った超伝導ストライプの位相がそろったパターンと (in-phase)、位相が互い違いのパターン (anti-phase) の 2 種類を調べた。このような空間変化をもつ超伝導秩序は、いままでの変分モンテカルロ法では研究されてこなかったものなので、我々はまず波動関数の取り扱いを開発した。その方法を利用して変分エネルギーの超伝導秩序  $\Delta_d$  依存性を in-phase と anti-phase のパターンに対して計算したのが図 2 である。矢印は d 波超伝導状態の変分エネルギーを表しており、それぞれのエネルギーは近いことがわかる。

さらに驚くべき事に、anti-phase のようなこれまで考えられて来なかった空間パターンの超伝導状態が、最低エネルギー状態になっていることがわかった。このような状態のエネルギーが下がる理由として、アンダーソン不純物を介したジョセフソン接合との類似が考え

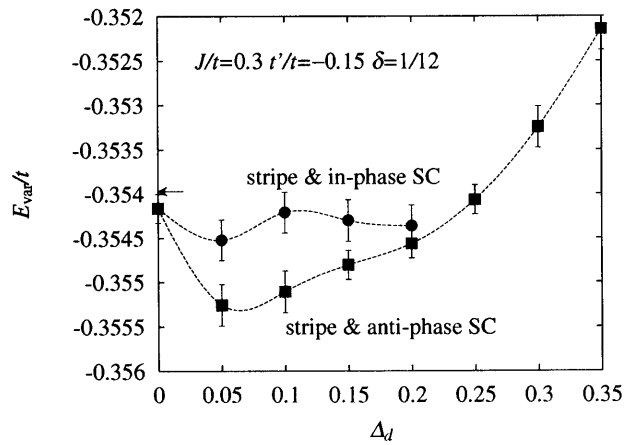


図 2: 変分エネルギーの超伝導秩序  $\Delta_d$  依存性。矢印は d 波超伝導状態の変分エネルギーを表している。

られる。アンダーソン不純物では電子が不純物サイトに同時に 2 つ来ることができないので、通常のジョセフソン接合と違ってクーパー対が対電子の一つを不純物サイトの電子と交換しなければならない。そのため符号が反転し、 $\pi$  接合が実現することが知られている。これと同様のプロセスで、クーパー対が反強磁性ドメインを通過するさいに符号が反転すると我々は推測している。このような超伝導状態を考えると  $\text{La}_{1.6-x}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  の  $c$  軸ジョセフソン接合が極めて弱いという実験事実が説明できる。ストライプ状態は隣り合う  $\text{CuO}_2$  面で 90 度回っているので、位相がかならず打ち消しあう。したがって、 $c$  軸ジョセフソンプラズマが観測されないと考えられる。

最後に、ストライプ状態に対する  $g$  の効果、および LTT 相という結晶構造を反映したモデルにおけるストライプ状態の安定性についても調べ、La 系の実験事実とコンシステントであることを示した。