

平成 23 年 5 月 9 日現在

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2007～2009

課題番号：19540356

研究課題名 (和文) 最適化変分モンテカルロ法による BCS 状態とボース凝縮のクロスオーバーの研究

研究課題名 (英文) Optimization variational Monte Carlo study of the crossover between BCS state and Bose-Einstein condensate

研究代表者

横山 寿敏 (YOKOYAMA HISATOSHI)

東北大学・大学院理学研究科・助教

研究者番号：60212304

研究成果の概要 (和文)：同一格子点で電子間に引力が働く系を記述する引力的ハバード模型で、相互作用エネルギー (U) と運動エネルギー (t) の比 U/t を大きくしてゆくと、低温で現れる超伝導の性質は、よく知られた BCS 型からボース凝縮 (BEC) 型へとクロスオーバーすると考えられていたが、信頼できる定量的な研究は殆ど無かった。本研究では局所相関を厳密に扱える最適化変分モンテカルロ法を用いて、クロスオーバーの性質を調べ、類似の現象が出現する銅酸化物高温超伝導体との比較検討を行った。

研究成果の概要 (英文)：Applying a trial wave function with onsite repulsive and near-neighbor doublon-holon attractive correlation factors to the attractive Hubbard model, we confirmed that the magnitude of the superconducting gap becomes the largest in the intermediate correlation strength. At the same time, the character of superconductivity changes through the crossover region. In the repulsive model as a model of cuprate superconductors, similar crossover is observed as a function of electron density, showing the similarity with the attractive model.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	1,800,000	540,000	2,340,000
2008 年度	700,000	210,000	910,000
2009 年度	700,000	210,000	910,000
年度			
年度			
総計	3,200,000	960,000	4,160,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性 II

キーワード：超伝導、BCS、ボース凝縮、クロスオーバー、変分モンテカルロ

1. 研究開始当初の背景

(1) 超低温に冷却した希薄原子気体の研究は、物理学の広範な分野にインパクトを与え、急速な発展を遂げてきていた。希薄原子気体の研究の中で、フェルミ原子種で起こる超流

動機構 (超伝導同様に 2 粒子がクーパー対を作る) が、粒子間引力相互作用強度 U/t の増大とともに BCS 型から BEC 型にクロスオーバーする現象が実験で見出され、理論的検討が重要な課題であった。弱相関と強相関両極

限で成り立つ方法を繋ぐ理論はあったが、強相関領域での局所相関を正確に取り扱う研究は無かった。また、実験でも十分強い相関域の結果は未だ出てない状況であった。

(2) 光学格子上での $|U|/W$ の変化に伴う BCS-BEC クロスオーバーの問題は、固体物理学、特に銅酸化物高温超伝導体でのドーブ率 δ に対する超伝導の振る舞いと共通点が多い。銅酸化物では、母物質は反強磁性モット絶縁体であるが、これにキャリア（特にホール）をドーブすると安定な超伝導が出現する。超伝導転移温度 T_c は最適ドーブ率 ($\delta \sim 0.15$) で最大を取り、その両側で減少する。様々な実験から、過剰ドーブ領域 ($\delta > 0.15$) では、超伝導の性質はほぼ BCS 理論に従うが、最適ドーブ領域から少量ドーブ領域 ($\delta < 0.15$) にかけては、 T_c 以上でギャップを有する振る舞いが見られ、BEC の振る舞いに類似している。冷却原子系と銅酸化物の関連性の解明は重要な課題であった。

2. 研究の目的

(1) 光学格子上の冷却原子系を適切に記述する引力的ハバードモデルに対し、弱相関側 ($|U| < W$) の理論的研究は量子モンテカルロ法など比較的信頼性の高い方法で研究されていたが、クロスオーバー領域 ($|U| \sim W$) から強相関領域 ($|U| > W$) にかけては、強相関からの平均場近似であるグッツヴィラー近似を用いた研究など、信頼性に疑問のある研究がほとんどであった。そこで、本研究では $|U|/W$ の全領域で適用可能な変分モンテカルロ (VMC) 法を用いて、フェルミ原子気体の BCS-BEC クロスオーバーの問題、特に基底状態と低エネルギー励起について計算し、これまで行われた研究の結果を吟味し、BEC 領域の性質（特に対生成機構）を明らかにすることが第一の目的である。

(2) 銅酸化物高温超伝導体の一つの重要なモデルである二次元正方格子上の斥力的ハバード ($t-t'-U$) モデルを考える。これまでの VMC 法による研究で、大凡の超伝導出現領域とその性質が明らかになっている。それによると、母物質に対応するハーフフィリングでは、反強磁性相関を顕わに導入しなければ、 $U=U_c \sim W$ においてモット転移が起こり、 U/U_c ではモット絶縁体となる。この強相関領域でホールをドーブした場合にのみ典型的な銅酸化物超伝導体の性質を示す。理論的には $t'=0$ の場合、ハーフフィリングでの粒子-ホール対称性において、引力と斥力ハバードモデルは密接に結びついている。(1) の問題との関連で、この強相関領域において、超伝導の様々な性質（超伝導相関の強さや異方性の変化など）の δ 依存性を調べ、ドーブ

率を減少させてゆく場合、BCS-BEC クロスオーバーに対応する現象が起こるのかどうか、またクロスオーバーするドーブ率が最適ドーブ率近傍であるのかなどを検討する。

(3) 近年銅酸化物の研究で話題になっている 2 ギャップ問題に関連し、擬ギャップは二重占有サイト (ダブロン) と空サイト (ホロン) の束縛エネルギーに密接に関連しているという議論がある (P. Phillips)。擬ギャップは超伝導転移温度より高い温度で出現するが、超伝導が仮に起こらないと仮定すると、この状態が $T=0$ でも現れる可能性がある。ダブロン-ホロン間引力相関 (束縛) が、超伝導の性質のクロスオーバーと如何に関連するかということを調べる。

3. 研究の方法

目的(1)では、電子間引力の強さの変化に伴う超伝導の性質の変化を調べなければならない。これまでの主な研究では $|U|/W$ の大小両極限域のみの研究か (例えば弱相関域の量子モンテカルロ法による研究など)、両極限から中間領域を大胆に近似する方法 (例えば、有名な Nozieres-Schmidt-Rink の研究) から全体像が考えられてきた。しかしそれでは運動および相互作用エネルギーが拮抗するクロスオーバー領域で、信頼できる議論をするのは難しい。そこで、本研究では $|U|/W$ の全領域で局所相関を厳密に扱える VMC 法を用いて、 $|U|/W$ 及び電子密度の変化によって、基底状態 (すなわち s 波超伝導状態) の性質が如何に変化するかを考える。

これまで変分的研究では、試行関数中の多体因子として、同一サイト上の相関のみを取り入れたグッツヴィラー射影 P_ϕ を用い、さらに $\Psi_\phi = P_\phi |\Phi\rangle$ に関する期待値の計算に付加的平均場型近似 (所謂グッツヴィラー近似) を併用していた。こういった方法には問題点がある; (i) Φ として正常状態を考えると、 $|U| \sim W$ で起こるべき金属絶縁体 (モット) 転移は Ψ_ϕ では記述できない。(ii) BEC 側で超伝導の強度 (ギャップの大きさ) が抑制されない。これらの難点を解消するために、斥力相関系でのダブロン-ホロン (D-H) 相関に対応する反平行スピン間の束縛因子 (P_ϕ) を導入する。この因子により正常状態でモット転移が記述されることを私自身が嘗て証明した。超伝導状態に $\uparrow\downarrow$ 相関因子を作用させた場合 ($\Psi_\phi = P_\phi \Psi_\phi$) (ii) の点の克服に関しては必ずしも確信がある訳ではないが、斥力系で反強磁性が強相関域で抑制されるのと同様な効果は期待できそうだ。超伝導状態 (s 波) では、斥力系 (d 波) との対比が重要である。この試行関数を基にさらに試行波動関数を改良して、クロスオーバーの物理を調べて行く。

次に目的 (2) および (3) では斥力相互作用が強い系 (モット絶縁体へのドーブ) を扱うので、この場合も基底状態を調べるには、局所相関が厳密に扱える VMC 法が数少ない有効な方法である。斥力相関系では、これまで銅酸化物の研究において培われた様々な知見を生かし、引力系同様、同一サイト相関の他にダブロン-ホロン間引力相関、及びダブロン相互間やホロン相互間の斥力相関の効果も考慮して研究を進める。いずれも距離依存性を最適化して考える。まず正常状態においてドーブ率を上げて行く場合、D-H 間の束縛因子がどのように変化するかを突き止める。更に、その因子は d 波超伝導状態の性質に対してどのような影響を与えるのを詳細に研究する。ちなみに光学格子上の冷却原子系ではサイト毎に何個の粒子が存在しているか (正確には個数の偶奇性) が原子顕微鏡で観測できるようになってきている。

4. 研究成果

(1) 二次元正方格子上の引力的ハバードモデルに、前節で述べた試行関数を適用して、まず s 波超伝導の凝縮エネルギー ΔE を計算した。 Ψ_0 を用いた場合は ΔE が $|U| = |U_0| \sim 10t$ 程度で最大値を取り、 $|U| < |U_0|$ では BCS 型である $\Delta E/t \propto \exp(t/|U|)$ で増大し、一方 $|U| > |U_0|$ では強相関極限からの展開値と符合する $\Delta E/t \propto t/|U|$ という振る舞いをする。このことから、 Ψ_0 を用いた場合でも BCS-BEC のクロスオーバーを記述できているように見える。ちなみに P_0 を作用させない生の BCS 関数を用いた場合でも、 $\Delta E/t$ は Ψ_0 と類似した振る舞いを示す。問題は $\Delta E/t$ の振る舞いとは対照的に、超伝導ギャップに対応するパラメーター Δ/t が $|U|/t$ の関数として単調増加してしまい、クロスオーバーしないことである。これは励起として \uparrow と \downarrow がギャップを超えて生成した場合、両スピンの乖離すること (高エネルギー状態の持続) を許すため、 Δ/t を大きくして対生成の補償をせざるを得なくなる所為であろう。

次に、 Ψ_0 の場合は、 $\uparrow-\downarrow$ 束縛によって正常状態のエネルギーが著しく低下するため、凝縮エネルギーは Ψ_0 の場合のおよそ半分程度に減少し、クロスオーバー値 $|U_0|/t$ もバンド幅 $8t$ 程度に小さくなる。超伝導状態のエネルギーの P_0 の導入による改善は必ずしも大きくないが、定性的に大きく異なる点がある。まず、ギャップパラメーター Δ/t は、上記の BCS 関数やそれに P_0 を作用させた Ψ_0 の場合とは対照的に、 $\Delta E/t$ が最大値を取る U/t 値近傍で極大値を取り、強相関側では U/t の増大に伴って緩やかに減少する。このことから、変分エネルギーの改善という定量的な改善を超えて、ギャップ値のクロスオーバーを正しく出すには、 $\uparrow-\downarrow$ 相関が本質的

であることを示唆している。

以上で考えた $\Delta E/t$ は正常状態の善し悪しに依存する物理量なので、超伝導状態を直接調べる必要がある。第一に s 波の秩序変数や超伝導ペア相関関数 P_s が BCS-BEC クロスオーバーを定める一つの指標である。さらに、コヒーレンス長やダブロン密度、D-H 束縛距離 (最近我々がモット転移系に対して提唱した概念) などの様々な物理量が重要である。これらの計算は現在さらに実行中であるが、予備的計算は、上記の結果を支持している。

以上から、引力系での超伝導状態の性質は斥力系の場合とは対照的に $\uparrow-\downarrow$ 相関因子による大きなエネルギーの改善はない (つまり $\uparrow-\downarrow$ 相関の効果が既に同一サイト対生成の中に入っていると見える) が、クロスオーバーに対して定性的に重要な改善であることが解る。これらの成果は近く出版論文としてまとめる予定である。

(2) 次に、斥力系に対する研究として、 U/U_c ($U_c \sim 7t$ はモット臨界値) にあるモット絶縁体状態にホールをドーブした系での BCS-BEC クロスオーバーの解析をした。銅酸化物の典型値 $U/t=12$ (銅酸化物で予想される値) の場合を例に取り、ドーブ率 (電子密度) を変化させた場合を考える。斥力系では、超伝導状態の変分エネルギー値自体も D-H 束縛因子によって著しく改善されるため、そのためにもこの因子は不可欠である。

まず既知事項として、 U/U_c の弱相関域では、銅酸化物の実験を説明できないことの確認を行った。超伝導とノーマル状態のエネルギー差 $\Delta E/t$ および d 波超伝導ペア相関関数 P_d を U/t の関数として考える。ドーブ率に関わらず、 $U/6t$ のときは両者とも無視できる程小さく、この領域のパラメーターで銅酸化物のような広範な物質および電子密度で安定した超伝導を記述できるとは考えられない。ハーフフィリングでは $U \sim 6t$ で $\Delta E/t$ と P_d が両方とも最大を取るが、 $U=U_c$ でモット転移を起こすため、 P_d は U/U_c で消失し、一方 $\Delta E/t$ は緩やかに減少する。 U/U_c でのドーブ率 δ 依存性を見ると、基本的に δ の単調減少関数であり、銅酸化物が示す T_c や凝縮エネルギーのベル (ドーム) 型構造を再現できない。 U/U_c でホールをドーブし、ドーブ率 δ を上げて行くと、 P_d の値も U_c で急に消失することはなくなり、 U/t の関数としてバンド幅程度で最大値を取り、緩やかに減少するようになる。従って、 $U \sim W$ 程度の相関強度で超伝導の性質が BCS 的なものから、運動エネルギーが転移の推進力となる強相関的な性質のものへとクロスオーバーすることが解る。

$U/t=12$ に固定した場合、一重項ギャップの大きさ Δ/t と $\Delta E/t$ とは δ 増大と共に減少するが、これは反強磁性スピン相関の強度

と相関する。一方、 Pd は最適ドープ率 $\delta=0.15$ まで増加するが、こちらは準粒子くり込み因子と相関しており、電荷の自由度(モット転移の物理)と密接に関係している。 Pd は $\delta \sim 0.15$ で最大値をとり、 $\delta > 0.15$ では減少する。銅酸化物の転移温度と同様な所謂ベル型(ドーム型)の振る舞いをする。

以上から、引力的モデルの $|U|/t$ 依存性と斥力的モデルの δ 依存性について、隣接サイトD-H($\uparrow-\downarrow$)相関を考慮する範囲(同等の近似)では、BEC側のギャップパラメータ依存性が異なっている(超伝導)。従って、両者が完全に同じBCS-BECのクロスオーバーの機構に従っているとは考えにくい。ちなみに、超伝導のペアリング対称性は常に dx^2-y^2 波が安定であり、 δ (< 0.3)の変化で対称性が変わることは無かった。

(3) 上記(2)の結果から、 $\delta \sim 0.15$ において斥力モデル特有のBCS-BECのクロスオーバーがあるかどうかを考えた。BEC側のノーマル状態で、銅酸化物で見出されているような擬ギャップが発生する可能性を考えるには、何らかの秩序や束縛状態によりギャップが生成することを示す必要がある。一つの可能性として、モット絶縁体の影響から考えるには、D-H束縛因子の影響を調べるのが第一である。今回の研究では隣接サイト間のD-H束縛因子のみを導入したが、典型的な最隣接サイト間の μ が解り易い。

まず、 $U \ll t$ の場合には μ はごく小さな値であり、D-H束縛の効果は事実上無視できる。 $U \sim t$ では $\delta=0$ では $\mu \sim 1$ であり、ダブロンとホロンは相互に最隣接サイトにほぼ完全に束縛されている。 δ をゼロから増大させて行くと、 $U/t \sim 8$ 程度の場合には μ は一旦急激に減少するので、D-H束縛の効果は少量ドープ域でもそれ程大きいとは言えない。ところが、 U/t が12程度に大きい場合は、 δ の増大に伴う μ の減少は小さく、 $\delta=0.25$ までほぼ線形にゆっくり減少して行くことが判った。このことから、銅酸化物の高温超伝導が $U/t \sim 12$ であるならば、将にドープされたモット絶縁体と呼ぶに相応しい。

一方、最適ドープ率あたりにおけるBCS-BECクロスオーバーの存在は、(この領域で特異性を示さない) μ の振る舞いだけでは結論できない。この点に関して、今後本研究を発展させて、次のことを明らかにしたいと考えている。最近我々が提唱したハーフフィリングでのモット転移の定量的な扱いをドープした場合に拡張し、様々なD-H束縛の態様(特にD-H完全束縛や指数関数型減衰関数、完全最適化型)を考慮し、D-H束縛効果がどのドープ量まで有効に働くのか、またD-H束縛長とD-D間最小距離の関係がどのようになっているのかなどを計算し、少量ドープ域

の銅酸化物の性質を明らかにして行きたい。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計19件)

- ① H. Yokoyama, T. Miyagawa, and M. Ogata, Mechanism of superfluid-insulator transition in two dimensional Bose Hubbard model, Physica C, 印刷中(2011), 査読有.
- ② T. Miyagawa and H. Yokoyama, Doubloon-holon-binding mechanism of Mott transition in low dimensional Hubbard model, Physica C, 印刷中(2011), 査読有.
- ③ K. Kobayashi and H. Yokoyama, Superconductivity and antiferromagnetism in phase diagram of frustrated Hubbard model within variational study, Physica C **470**, 2010, 1061-1064, 査読有.
- ④ K. Kobayashi, T. Watanabe and H. Yokoyama, Competition and coexistence of antiferromagnetism and superconductivity in Hubbard model, Physica C **470**, 2010, S947-S948, 査読有.
- ⑤ T. Watanabe, H. Yokoyama and K. Kobayashi, Antiferromagnetism and pairing symmetries in two-dimensional t - J model, Physica C **470**, 2010, S106-S108, 査読有.
- ⑥ 小形正男、横山寿敏、高温超伝導の物理---ドープされたモット絶縁体の具体的な描像---、固体物理 **44**、2009、515、査読無.
- ⑦ H. Yokoyama, M. Ogata and K. Kobayashi: Close relation between antinodal Fermi-surface effect and superconductivity in cuprates, Physica C **470**, 2009, S149-S150, 査読有.
- ⑧ T. Watanabe, H. Yokoyama, K. Shigeta and M. Ogata, Momentum dependence of pseudo-gap and superconducting gap in variation theory, New J. Phys. **11**, 2009, 075011. 査読有.
- ⑨ T. Watanabe, H. Yokoyama and M. Ogata, Momentum dependence of pseudogap and superconducting gap in variation theory, Physica C **469**, 2009, 1009-1012, 査読有.
- ⑩ K. Kobayashi and H. Yokoyama, Interplay between Antiferromagnetism and Superconductivity in the Hubbard model with frustration, Physica C **469**, 2009, 974-978, 査読有.
- ⑪ T. Watanabe, H. Yokoyama, Y. Tanaka and J. Inoue, Predominant Magnetic States in Hubbard Model on Anisotropic Triangular Lattice, Phys. Rev. B **77**, 2008, 214505, 査読有.
- ⑫ H. Yokoyama and M. Ogata, Doubloon-Holon

Binding Effects on Mott Transitions in Two-Dimensional Bose Hubbard Model, J. Phys. Chem. Solid **69**, 2008, 3356-3359, 査読有.

⑬ K. Kobayashi and H. Yokoyama, Interplay between Antiferromagnetism and Superconductivity in Two-Dimensional Hubbard model, J. Phys. Chem. Solid **69**, 2008, 3274-3276, 査読有.

⑭ T. Watanabe, H. Yokoyama, Y. Tanaka and J. Inoue, Effects of Off-site Coulomb Interaction in a Hubbard Model on a Triangular Lattice, J. Phys. Chem. Solid **69**, 2008, 3372-3374, 査読有.

⑮ S. Fujita, T. Watanabe, S. Onari, H. Yokoyama, Y. Tanaka and J. Inoue, Variational Monte Carlo study of pairing symmetry in Sr₂RuO₄, Physica C **463-465**, 2007, 134-137, 査読有.

⑯ S. Onari, H. Yokoyama and Y. Tanaka, Phase diagram of half-filled square lattice for frustrated Hubbard model, Physica C **463-465**, 2007, 120-122, 査読有.

⑰ K. Kobayashi and H. Yokoyama, Superconducting states in a two-orbital Hubbard model on a triangular lattices, J. Mag. Mag. Mat. **310**, 2007, 651-653, 査読有.

⑱ A. Koga, T. Yoshioka, N. Kawakami and H. Yokoyama, Quantum phase transitions in the Hubbard model on the planar pyrochlore lattice, J. Mag. Mag. Mat. **310**, 2007, 867-869, 査読有.

⑲ T. Watanabe, H. Yokoyama, Y. Tanaka and J. Inoue, Dominant Antiferromagnetism in the Hubbard model on anisotropic triangular lattices, J. Mag. Mag. Mat. **310**, 2007, 648-650, 査読有.

[学会発表] (計 14 件)

① 宮川智章、横山寿敏、ダブロン-ホロン束縛関数によるモット転移記述の再考、日本物理学会、2011年3月28日 新潟大学

② 横山寿敏、宮川智章、小形正男、ドーブされたモット絶縁体としての d 波一重項波動関数と銅酸化物、日本物理学会、2011年3月26日 新潟大学

③ 梅裕太、土浦宏紀、山下眞、横山寿敏、2次元 S=1 ボース・ハバードモデルの多重占有モット絶縁相近傍における量子相転移、日本物理学会、2011年3月25日 新潟大学

④ 梅裕太、土浦宏紀、山下眞、横山寿敏、スピン1のボース・ハバードモデルにおけるモット転移とスピン相関、日本物理学会、2010年9月26日 大阪府立大学

⑤ 宮川智章、横山寿敏、変分法による低次元ハバードモデルにおけるモット転移の機構、日本物理学会、2010年9月24日 大阪府立

大学

⑥ 横山寿敏、宮川智章、小形正男、ダブロン-ホロン相関によるモット転移機構の再考、日本物理学会、2010年9月24日 大阪府立大学

⑦ 梅裕太、土浦宏紀、山下眞、横山寿敏、佐久間昭正、スピン1のボースハバードモデルにおけるモット転移の解析、日本物理学会、2010年3月21日 岡山大学

⑧ 小林憲司、横山寿敏、二次元ハバードモデルにおける超伝導と反強磁性の関係 II、日本物理学会、2008年9月22日 岩手大学

⑨ 横山寿敏、多体 d 波超伝導波動関数の波数空間での性質、日本物理学会、2008年9月22日 岩手大学

⑩ 横山寿敏、小形正男、2次元ボースハバードモデルの性質、日本物理学会、2008年3月23日 近畿大学

⑪ 渡邊努、横山寿敏、田仲由喜夫、井上順一郎、変分モンテカルロ法を用いた $t-t'-J$ 模型における超伝導と反強磁性の関係、日本物理学会、2008年3月23日 近畿大学

⑫ 小林憲司、横山寿敏、二次元ハバードモデルにおける超伝導と反強磁性の関係、日本物理学会、2008年3月23日 近畿大学

⑬ 横山寿敏、日本物理学会、フェルミ系とボース系のモット転移機構、2007年9月21日 北海道大学

⑭ 渡邊努、横山寿敏、田仲由喜夫、井上順一郎、三角格子ハバードモデルにおけるサイト間クーロン斥力の効果、日本物理学会、2007年9月21日 北海道大学

[その他]

ホームページ等

<http://www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~yoko/yoko.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

横山 寿敏 (YOKOYAMA HISATOSHI)
東北大学・大学院理学研究科・助教
研究者番号：60212304

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

小形 正男 (MASAO OGATA)
東京大学・大学院理学系研究科・教授
研究者番号：60185501