

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 6 日現在

機関番号： 82626
 研究種目： 基盤研究(C)
 研究期間： 2010～ 2012
 課題番号： 22540381
 研究課題名（和文） 強相関電子系の量子シミュレーションによる高温超伝導機構の研究
 研究課題名（英文） Study of Mechanism of High Temperature Superconductivity in Correlated Electron Systems using Quantum Simulation
 研究代表者
 柳澤孝 (YANAGISAWA TAKASHI)
 独立行政法人産業技術総合研究所・電子光技術研究部門・上級主任研究員
 研究者番号： 90344217

研究成果の概要（和文）：

高温超伝導機構の解明を目的として、強相関電子系の電子状態を明らかにするために、モンテカルロ法によるシミュレーションを行った。フェルミ粒子系に対する量子モンテカルロ法においては、フェルミ粒子の交換にともなって現れる負符号問題とよばれる問題があり、量子シミュレーションにおいては大きな障害であった。我々は、その困難を克服するために、量子シミュレーションに対角化の手法を用いて、負符号問題が現われない「対角化量子モンテカルロ法」（または、量子モンテカルロ対角化法）を開発した。この方法により、二次元モデルにおける超伝導相関関数を計算し、d 波の超伝導相関はキャリアーをドーピングすることにより実際に増大することを示した。また、キャリアーがドーピングされていない系では、超伝導相関関数は増大しないことも明らかになった。キャリアーがなければ超伝導転移が起こりにくいことを示した。

研究成果の概要（英文）：

We have investigated the electronic state of correlated electrons by using a quantum Monte Carlo method in order to clarify the mechanism of high temperature superconductivity. There is a serious problem, called the negative sign problem, in the method of quantum Monte Carlo simulation. We have proposed a method to avoid this difficulty by employing a diagonalization method in Monte Carlo simulation. This is a negative sign free method. We have evaluated pair correlation functions in the two-dimensional Hubbard model on the basis of the new method. The d-wave pair correlation function is indeed enhanced when carriers are doped away from half-filling, compared to that of the non-interacting case. We have also shown that the pair correlation function is not enhanced in the half-filled case.

交付決定額

(金額単位：円)

| | | 直接経費 | 間接経費 | 合計 |
|----|----|-----------|---------|-----------|
| 22 | 年度 | 1,600,000 | 480,000 | 2,080,000 |
| 23 | 年度 | 800,000 | 240,000 | 1,040,000 |
| 24 | 年度 | 800,000 | 240,000 | 1,040,000 |
| | 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：強相関電子系、計算物理

1. 研究開始当初の背景

銅酸化物高温超伝導体には銅原子と酸素原子から成る二次元面が存在し、超伝導の起源にこの二次元面上での電子状態が重要である。銅原子におけるクーロン斥力により超伝導が引き起こされるならば、高い臨界温度の超伝導が可能となるであろう。そこで、問題は原子上のクーロン斥力により超伝導相転移がおこるかかどうかである。銅原子上で電子が相互作用するモデルを単純化したものはハバードモデルと呼ばれている。そこで、考えるべき問題は、「ハバードモデルに超伝導相は存在するか」、である。これについていろいろな理論的手法により研究されてきたが、まだ答えは明らかになっていない。各種の研究の中で量子モンテカルロ法による計算がある。それによると、ハバードモデルにおいて超伝導相関関数はクーロン斥力により減少に超伝導の可能性はないというものである。量子モンテカルロ法は、有限系において計算が行われるがそれ以外の近似を用いない方法であるため、信頼できる結果を与えると考えられる。すなわち、ハバードモデルにおいて超伝導の可能性はないということになる。

クーロン力のように大きなエネルギースケールの相互作用が超伝導の起源であると、高温での超伝導が期待できる。量子モンテカルロ法の結果が正しいとすると、一つの可能性がなくなることになる。

2. 研究の目的

ハバードモデルに対する量子モンテカルロ法による結果が正しいかどうかは明らかでない。「オンサイトのクーロン斥力相互作用による高温超伝導の可能性」を明らかにするために、新しい量子モンテカルロ法を開発して、超伝導相関関数の振る舞いを明らかにする必要がある。また、量子モンテカルロ法には負符号問題があり、この方法で十分な計算ができるわけではない。

我々は、負符号問題のない新しい量子モンテカルロ法を開発し、それに基づいて超伝導相関関数を計算し、パラメータ依存性を明らかにする。それにより、高温超伝導の可能性を明らかにすることを目的とする。

3. 研究の方法

量子モンテカルロ法においては、乱数により状態を次々と生成し、各状態での物理量を求めてその平均として期待値を計算する。このとき、メトロポリス法などにより、状態を生成すると平均を計算する際に負符号問題が現われる。我々は、メトロポリス法等による手法を使わずに、行列の対角化の方法を使って物理量の期待値を計算するアルゴリズムを開発した。この方法には負符号問題は現れない。ただし、対角化

法を使うために、計算機のメモリーと計算時間が必要である。

新しい計算手法を対角化量子モンテカルロ法（または、量子モンテカルロ対角化法）と呼ぶ。この新しく開発した方法により、ハバードモデルにおける超伝導相関等の物理量を計算する。超伝導相関の距離依存性、物質パラメータ依存性を明らかにし、超伝導の可能性を明らかにする。

4. 研究成果

二次元ハバードモデルのd波超伝導相関関数を対角化量子モンテカルロ法により計算した。その際、プログラムを並列化し計算能力を向上させることができた。64並列までの計算を行った。

新しいモンテカルロ法とこれまでのモンテカルロ法により、相関関数を小さい系において計算し結果の比較を行った。小さい系においては両者の一致は非常によい。厳密な結果がある系ではそれらともよく一致する。

二次元ハバードモデルにおいて、ホールがドープされていない場合、電子対の相関関数、すなわち超伝導相関関数はクーロン相互作用により大きく減少する（図1参照）。この傾向は、これまでの量子モンテカルロ法による結果と同じである。すなわち、キャリアがドープされていない場合は超伝導相関は発達せず、超伝導の可能性はない、あるいは非常に小さい。ただし、以前の計算によると、超伝導相関関数はほとんどゼロに近いに減衰していたが、我々の計算ではそこまで減衰しない。減衰の度合いは小さくなって

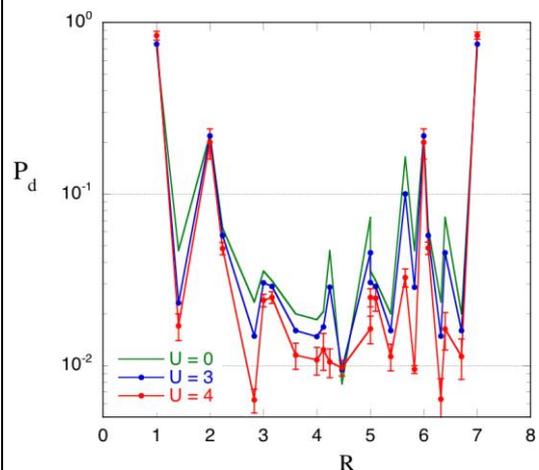


図1. キャリアをドープしない場合の超伝導相関関数（8×8の系）。

これに対し、キャリアをドープすると超

伝導相関はわずかであるが増大し、上とは定性的に異なる結果が得られる (図2参照)。

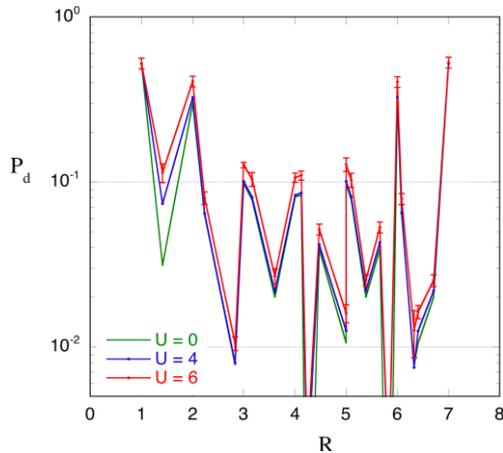


図2. キャリアをドーピングした場合の超伝導相関関数 (8×8 の系) .

相互作用がない場合と比べると、超伝導の d 波の電子対相関は大きくなるが、その大きくなる割合は、サイズが大きくなると共に増大する。また、超伝導相関はキャリアドーピングと共に大きくなり、実験で見られているようなドーム型のキャリア依存性を示すことが明らかになった。このように、ドーピングされた系ではハバード型の相互作用により超伝導の可能性がある。

上記以外にも、銅酸化物高温超伝導体の物質パラメータ依存性を明らかにするために、量子変分モンテカルロ法による計算を行った。物質ごとにフェルミ面の形状が異なっている。それぞれに対応するパラメータを用いて超伝導凝縮エネルギーを計算し比較を行った。YBCO 系や Hg 系のように湾曲したフェルミ面は、実は超伝導にとって不利であることが明らかになった。LaSrCuO 系の超伝導体は臨界温度 T_c が低いのであるが、理論計算からはもっと T_c が高くてもおかしくない。YBCO 系はクーロン相互作用 U が大きい可能性がある。

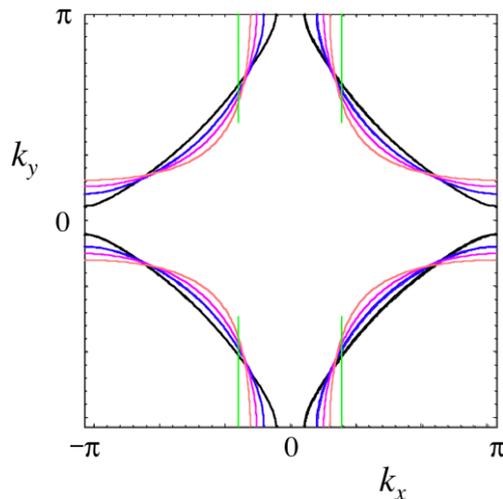


図3. くりこまれたフェルミ面。クーロン相互作用 U が大きいほど大きく湾曲する。

また、ストライプ的な非一様な電子状態が中性子実験などにより報告されているが、非一様状態の安定性は物質パラメータに大きく依存することが明らかになった。フェルミ面が湾曲していると、そのような状態が安定になりやすい。クーロン相互作用が大きいほど物質パラメータがくりこまれてフェルミ面の形状が変形し、非一様状態が安定に成り易いことが明らかになった (図3参照)。

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 10 件)

- ① T. Yanagisawa, M. Miyazaki, K. Yamaji: Strongly correlated electrons and high temperature superconductivity, Journal of Modern Physics, accepted for publication, 2013 年.
- ② T. Yanagisawa: Enhanced pair-correlation functions in the two-dimensional Hubbard model, New Journal of Physics 15, 33012, 2013 年.
- ③ I. Hase, T. Yanagisawa: Electronic band structure of LaNiGa₂, J. Physical Society of Japan 81, 103704, 2012 年.
- ④ M. Miyazaki, K. Yamaji, T. Yanagisawa, K. Yonemitsu: Renormalization of hopping integrals in coexistence phase of stripes and d-wave superconductivity in two-dimensional Hubbard model, Physics Procedia 27, 64-67, 2012 年.
- ⑤ T. Yanagisawa, Y. Tanaka, I. Hase, K. Yamaji: Chirality and vortices in multi-band superconductors, J. Physical Society of Japan 81, 024712, 2012 年.
- ⑥ S. Koikegami, T. Yanagisawa, S. Koike: Unrestricted Hartree-Fock Analysis of Sr_{3-x}CaxRu₂O₇, J. Physical Society of Japan 80, 124702, 2011 年.
- ⑦ K. Yamaji, T. Yanagisawa, M. Miyazaki, R. Kadono: Superconducting Condensation Energy of the 2D Hubbard model in the large negative t' region,

- J. Physical Society of Japan 80, 083702, 2011 年.
- ⑧ M. Miyazaki, K. Yamaji and T. Yanagisawa: Coexistence between checkerboard charge and striped spin in the two-dimensional Hubbard model, PhysicaC470, 5919, 2010 年.
 - ⑨ S. Koikegami and T. Yanagisawa: Three-Dimensional Multi-Band d-p Model of Superconductivity in Spin-Chain Ladder Cuprate, J. Physical Society of Japan 79, 064701, 2010 年.
 - ⑩ T. Yanagisawa: Kosterlitz-Thouless Transition in the Two-Dimensional Hubbard Model Evidenced by Quantum Monte Carlo Calculations of Susceptibilities, J. Physical Society of Japan 79, 063708, 2010 年.
- [学会発表] (計 7 件)
- ① 柳澤孝: 多ギャップ超伝導体における複数の位相がくりひろげる新しい物理、日本物理学会年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26 日 (招待講演) .
 - ② 柳澤孝: 二次元ハバードモデルの電子状態の数値的研究、計算物性物理学の新展開、東京大学物性研究所、2013 年 1 月 11 日 (招待講演) .
 - ③ T. Yanagisawa: Strongly Correlated Electrons and High Temperature Superconductivity, Theoretical and Experimental Meeting on Magnetism, Oxford University, Rutherford and Appleton University, 2012 年 6 月 28 日 (招待講演) .
 - ④ T. Yanagisawa: Numerical Study of High Temperature Superconductivity by Parallel Computing, International Workshop on Path-breaking Phase Science in Super-conductivity、大阪府立博物館、2012 年 1 月 14 日 (招待講演) .
 - ⑤ T. Yanagisawa: Fields, Universe and Superconductivity, International Workshop on “Super, Vacuum, Universe”、東京理科大学、2011 年 6 月 14 日 (招待講演) .
 - ⑥ 柳澤孝、多成分超伝導体におけるカイラル状態、ナノ超伝導体における渦糸状態ワークショップ、大阪府立大学、2011 年 1 月 27

日 (招待講演) .

- ⑦ T. Yanagisawa, I. Hase, Y. Tanaka, K. Yamaji: Ginzburg-Landau theory of multi-band superconductivity and applications to Fe pnictides, 22nd International Symposium on Superconductivity、つくば国際会議場、2010 年 11 月 2 日.

[図書] (計 3 件)

- ① T. Yanagisawa: Horizons in World Physics 279, Nova Science Publishers、2013 年
- ② T. Yanagisawa: Magnetic Mechanism of Superconductivity in Copper-Oxide, Nova Science Publishers、2012 年.
- ③ S. Koikegami, K. Odagiri, K. Yamaji, T. Yanagisawa, J. Kondo: The Physics of Dilute Magnetic Alloys, Cambridge University Press, 2012 年.

[その他]

ホームページ等

<http://staff.aist.go.jp/t-yanagisawa/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

柳澤 孝 (YANAGISAWA TAKASHI)

産業技術総合研究所・電子光技術研究部門・上級主任研究員

研究者番号：9034217

(2) 研究分担者

長谷 泉 (HASE IZUMI)

産業技術総合研究所・電子光技術研究部門・主任研究員

研究者番号：00357774