

## 空間局在したクーパー対による超伝導と計算機シミュレーション

東大物性研 今田正俊

最近、実空間のせまい範囲に局在したクーパー対による超伝導の可能性がいろいろな場合に論じられている。電子間の有効引力のエネルギー $U$ が、バンド幅と同程度か、または大きくなってきたとき、空間局在したクーパー対が重要な寄与をするようになってくる。一つの典型的な例はバイポーラロンによる超伝導である。この場合、強い電子-格子相互作用のために、伝導帯よりも低いエネルギーのところに、クーパー対の束縛状態が生まれる。こうしてできた多数のバイポーラロン状態がバンドを形成することになる。しかしながら、有効引力を媒介するもの(バイポーラロンの場合のフォノン)の特徴的な振動数 $\omega$ が小さい場合には、band narrowing 効果が大きく、結局のところバイポーラロンによる金属的なふるまいは期待されない。これからここで考えようとしているのは、 $\omega$ がむしろバンド幅や電子間引力を引きおこす、電子格子相互作用の行列要素 $g$ よりも大きい場合であって、この場合にはretardationの効果はあまり重要ではなくなる。

一般的にいて、電子間のクーロン反発エネルギーを $U_c$ として、有効電子間引力というのは $g^2/\omega_c - U_c$ 程度の大きさをもつ。これが正の値をもち、かつ上記の条件が満たされるのは $U_c < g$ ,  $\omega_c > g > U_c$ が必要と考えられる。このような状況を実現するのは、そう簡単なことではないが、電子間引力の到達距離が、通常の格子間隔の数倍程度より大きい場合には、現実的な可能性を帯びてくると考えられる。なぜかという、この場合、形成されるバイポーラロンの半径はやはり、引力の到達距離程度かあるいはそれよりやや大きな値が期待され、強いクーロン反発力の効果を減じることが出来るからである。この意味で、ここで考える空間局在したクーパー対というのは、必ずしも格子上の同一サイトで形成されたペアに限定するのではなくて、ある程度の空間的ひろがりを持ったものを含めて考えている。

クーパー対が同一サイト上ではなく、ある程度の空間的ひろがりを持つ場合、超伝導の性質は物質の結晶構造や異方性の影響を大きく受ける。特にこの場合には、シングレットのクーパー対だけでなく、トリプレットの対による超伝導も可能となり、いわゆる重い電子系の超伝導の場合にその可能性が最近論じられている。またシングレット対に限るとしても、結晶構造を反映して、異方的なオーダーパラメータが可能となり議論されている。

一方、このように空間的に局在したクーパー対による超伝導が可能となるのは $U_c > g$ の場合であって、コヒーレンスの長さの短い、このような超伝導の場合、通常のBCS理論あるいは弱結合のがわからのアプローチは必ずしもよい結果を与えない。実際、BCS理論は $U_c/g$ の比が大きくなればなるほど高い転移温度を与え、強結合領域で使えたとされる表式も基本的な性格は変わらない。しかしながら実際には $U_c/g$ の比が大きくなっていけば転移温度は遂に下がっていくことは強結合極限の結果からわかっているから、弱結合の側か

らのアプローチはどこまで破綻していると考えなければならない。

このように、空間的に局在したクーパー対による超伝導の場合、通常の超伝導とはいくつかの点でことなつたふるまいを期待される。我々がここで考察するのは、弱結合からのアプローチを使えない場合に、モンテカルロ計算の結果を参考にしながら、空間局在したクーパー対の描像がどの程度まで正しいか、またその場合にどのような特徴を期待されるかという問題である。まず、この問題を議論することのできる最も簡単なモデルは、引力的な相互作用をもつハバード模型あるいは拡張されたハバード模型であろう。簡単のためにまずハバード模型を考えてみよう。このハミルトニアンは次式で与えられる。

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} [-t (C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} + h.c.) + U n_{i\sigma} n_{j\sigma}] \quad (1)$$

なおここで、 $C_{i\sigma}^{\dagger}$  はサイト  $i$  にスピン  $\sigma$  の電子を生成する演算子、 $n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma}$  である。ここでの  $U$  は値であると考えている。このモデルの範囲では、有効電子間引力は電子が同じサイトにある時だけ働くと考えており、いくつかの点で、上に述べた特徴が考慮されていない。すなわち、オーダーパラメタに関与するクーパー対は同一サイト上のペアだけであるから、トリプレットやあるいは異方的なオーダーパラメタについて議論することはできない。しかしながら異方性の重要でない、シングレットの超伝導について考えるならば、(1) をきちんと解けば、弱結合領域からの近似と強結合極限の結果がそれぞれどこまで妥当になりつつあるかを知ることができる。それぞれの近似の妥当性が等方的なシングレットの場合にわかれず、異方性の強い場合やトリプレットの場合にも目安を与えることはできるであろう。以上のことから、(1) は空間局在したクーパー対による超伝導の性格を議論するための最も簡単な出発点を与えている。

ハバード模型 ( $U < 0$ ) に話を限るとしても、このハミルトニアンから生ずる超伝導転移は弱結合と強結合の極限では、ある程度信頼できる形で解くことができるが、それぞれの極限で妥当な近似が、 $t/U$  が有限のときに、どの程度まで妥当であるかについては、あまり明らかでない。(1) をモンテカルロ法による計算機シミュレーションで評価することができれば、この問題に対する解答を与えることができるかと予想されるが、現在までのところ、(1) をまるごとシミュレーションして、超伝導転移やその他の物理的性質を超伝導相で評価するところみは成功していない。そこでまず、強結合の極限で正しい結果の漸近的なふるまいが、どの程度の  $t/U$  の値まで妥当であるかを評価する問題を考えてみよう。

まず強結合の極限では、ハミルトニアン(1)は以下の形に帰着される。

$$\mathcal{H}_s = \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left[ \frac{t^2}{U} (C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i-\sigma}^{\dagger} C_{j-\sigma} C_{j\sigma} + h.c.) \right] \quad (2)$$

このハミルトニアンは基本的にスピン  $1/2$  のハイゼンベルグ・ハミルトニアンで記述され、独立なパラメータは  $t^2/U$  しかなないので、超伝導転移の温度も  $t^2/U$  に比例している。すなわち、 $T_c$  は  $|U|$  が大きいときに、 $|U|$  に反比例して減少する。このような漸近的なふるまいは、 $t/U$  を増大させていったとき、どこまでよく成り立つであろうか。(2) 式では電子は常に on site でペアを成っており、解離することはなくて、ボース粒子のようにふるまう。

しかしながら $t_c$ が有限の値を持ったときには、クーパ対の解離や結合が生じるようになる。ここで(1)の系に一次元的な異方性がある場合を考えてみよう。即ち、 $t_c$ がchain方向とchainに垂直な方向で異なった値 $t_{||}$ ,  $t_{\perp}$  (但し $t_{||} > t_{\perp}$ )を持っているとする。擬一次元的な系でこのような状況になっている。この場合 $|U|/t_{||}$ の値をのからだんだん小さくしてゆけば、クーパ対がこわれて一粒子的にふるまうゆらぎは、まずchain方向に対して重要になってくるであろう。このため、(2)で記述される漸近的ふるまいがどこまで成り立ち、どこでくずれるのかを知るためには、chain方向は(1)の形にとり、chain間の結合に関して(2)の極限をとって調べてみればよい。実際、このような形のハミルトニアンは、計算速度の速いモンテカルロ計算の方法を用いて調べることもできる。また、擬一次元的な系を調べることによって、超伝導相と電荷密度波相の競合の問題をとりあつかうことも可能になる。以下では、ハバード模型のかわりに、最近接格子点間にも有効電子間相互作用が存在している、拡張されたハバード模型を用いて、さらに、chain間のカップリングが弱いときにより近似と思われる、chain間カップリングに関する平均場近似を採用して一次元のchainをモンテカルロ計算で評価して求めた超伝導転移について述べてみよう。

まず、超伝導の転移温度を、 $|U|$ の値を変えながら調べたのが図1である。ここで $t_{\perp}$ の値を1にとり、それ以外のパラメータについても適当な値が与えてある。○印のデータは最近接格子点間の電子間相互作用 $\Gamma$ が0の場合であり、×印のデータは $-0.4$ の場合である。実線は両方とも、強結合の極限で正しい(2)式を擬一次元系の場合に取り扱い求められた漸近的ふるまいを、未知の比例係数1つをadjustableなパラメータとして引いたものである。例えば $\Gamma$ が0の場合には、前述したように、転移温度 $T_c$ は $|U|$ に比例するというのが強結合のときのふるまいであるが、図1からわかるようにこれは $|U|/t_{||}$ が2程度まではよく成り立っている

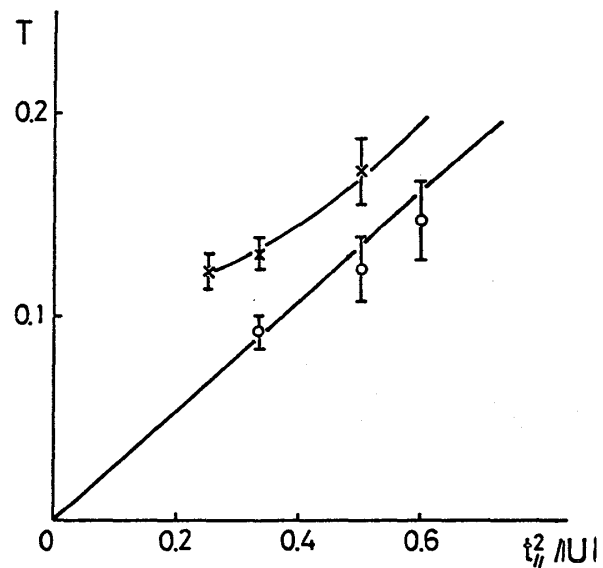


図 1

ことがわかる。実際、モンテカルロシミュレーションで、粒子の配置をしらべてみると、 $|U| > 2t_{||}$  では、大半の粒子がペアを作っている、転移温度付近以下では解離のゆらぎはあまり顕著ではない。一方、 $|U| \sim t_{||}$  の場合には急速にペアの解離のゆらぎが増大していることが観測される。このようなことから、空間的に局在したクーパ対の描像はかなり広い領域でなりたっていることがわかる。またここで得られた結果から超伝導の転移温度は、 $|U|$ の大きさを覚えていったとき、 $|U|$ と $t_{||}$ の値が等しい値の付近で最大値をとるであろうこと

がわかった。以下では  $t_{||}=1.0$ ,  $U=-3.0$  に固定してしらべた結果を示す,

まず超伝導状態と電荷密度波状態の

競合の問題を考えてみよう。

図2に示されているのが系が *half filled* の場合にシングレット状態の超伝導オーダーパラメータ  $\Delta_s$  と電荷密度波のオーダーパラメータ  $\Delta_c$  を横軸で, *chain* 周の最近接電子間相互作用をだんだん強くしながらしらべたものである。×印が超伝導のオーダーパラメータをあらわし, ○印が電荷密度波のオーダーパラメータをあらわしている。図からわかるように超伝導相から一次転移的に電荷密度波相へ移り, 共存状態は見られない。

一方, 図3は, 同じことを *quarter-filled* の場合について調べたものである。この場合には, かなり広い領域にわたって, 超伝導と電荷密度波の共存状態が実現されていることがわかる。一般に系が *half-filled* でない場合には両相は共存が可能であると考えられるが, これは弱結合の場合

にはバンドの描像が正しく, 両相の共存がまわめて限られていることとは対照的で, 強結合領域での特徴と考えられる。

この系に, サイトランダムなランダムネスを加えて超伝導に与える効果をしらべたシミュレーションでは, ランダムネスの大きさが,  $t_{||}$  の大きさと同程度になるまでは, 超伝導への顕著な影響は見られないことがわかった。一方, 不純物を1つだけ, サイトエネルギーの変化という形で与えたシミュレーションでは, 不純物周辺でのオーダーパラメータの大きな空間変化が見られ, コヒーレンスの長さの短い超伝導の場合には, 不純物によって顕著にオーダーパラメータの振幅が乱されることがわかる。このため弱結合の場合の非磁性不純物の効果とは違って, 超伝導状態での励起スペクトルに大きな影響を与える可能性

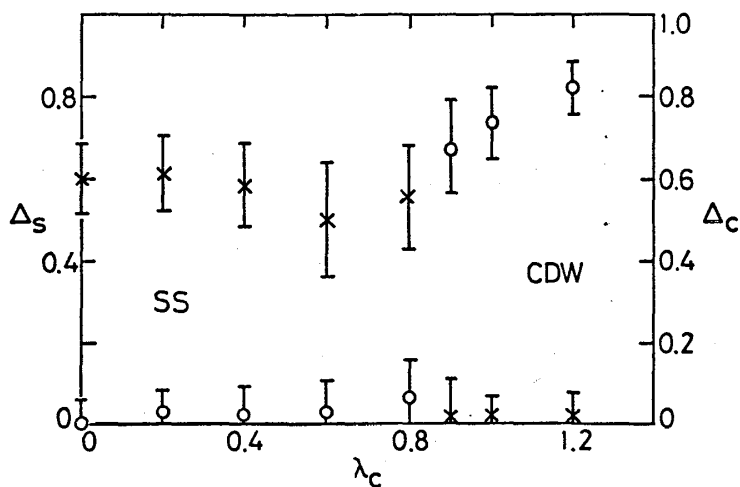


図 2

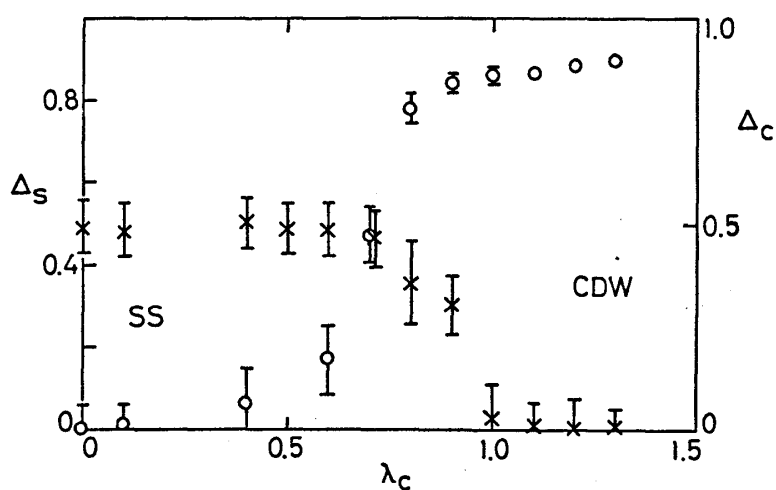


図 3

のあることが示された。結局、強結合でコヒーレンスの長さが短くても、バンド幅と同程度の大きさのランダムネスになるまでは、転移点降下等の影響はあまり大さくはないが、その場合でも励起スペクトルには重要な影響があると思われる。