

[ポスター 5]

Holstein-Hubbard 模型におけるバンド構造に依存した超伝導相関

手塚 真樹：東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻

電子間斥力相互作用と電子・格子相互作用が共存する系で、half-filling 付近では、電子相関が強いときにはスピン密度波 (SDW)、電子・格子相互作用が強いときには電荷密度波 (CDW) となるが、これらの相の間に金属相が提案され超伝導も示唆されてきた。ただ、電子・電子と電子・格子相互作用を equal footing で扱うような研究は多くなかった。

超伝導と、密度波のような対角的秩序相の競合を調べるために、電子・電子と電子・格子相互作用を取り入れた代表的模型である Holstein-Hubbard model において、密度行列繰り込み群 (DMRG) を用いて、1 次元系で種々の相関関数を初めて計算し [1]、フォノン・エネルギーと電子エネルギーが同程度の（断熱近似などが成立しない）場合について以下の結果を得た [2]。

- 最隣接 transfer の場合 CDW 相と SDW 相の間に、超伝導（同一サイト上の singlet ペア; on-site SC）の相関が距離の巾で減衰する場合があるが、巾は常に CDW の巾より大きく、これは超伝導が CDW を超えては支配的にならないことを示す。
- 次近接ホッピング t' を導入した場合 $|t'|$ の増大に対して超伝導相関の巾はほとんど変化しないのに対し、CDW の巾は急速に増大し、超伝導が優勢となる。また、 $t' \sim -0.5$ 付近では、隣接サイト間の singlet ペアも CDW より優勢（遅い減衰）となる。

[1] M. Tezuka, R. Arita and H. Aoki, Physica B 359-361, 708 (2005).

[2] M. Tezuka, R. Arita and H. Aoki, preprint(cond-mat/0507226), to appear in PRL.

[ポスター 6]

変分モンテカルロ法による異方的三角格子ハバード模型の計算

渡邊 努：名古屋大学工学研究科マテリアル理工学専攻

有機超伝導体である κ -(BEDT-TTF)₂X (κ -ET 塩) は、外圧をかけることにより Mott 転移近傍で超伝導を発現し、またその伝導面が磁気フラストレーションを持つ異方的三角格子であることから、新規の超伝導状態を持つ可能性のある物質として注目されている。しかし、超伝導状態に対するこれらの効果を同時に調べることは解析的には困難であるため、現在までこの問題を取り扱った詳細な計算結果はほとんど報告されていない。

κ -ET 塩における超伝導状態を詳しく調べるために、私たちは half filling の異方的三角格子ハバードモデル（2 方向の飛び移り積分 t に対し、残りの 1 方向に t' ）に、最適化変分モンテカルロ法を適用する。試行波動関数としては、通常の BCS 波動関数に、on-site クーロン斥力の効果である Gutzwiller 因子と、ダブロン-ホロン間の結合因子を掛けた波動関数を使用する。

私たちはあらゆる t'/t に対して、バンド幅 (U/t) を変えたときに、一次の Mott 転移が起こることを示している。 $t'/t = 0.4$ のとき、転移点近傍の金属相では、AF 揺らぎによる高い d 波の超伝導相関が得られる。しかし、 $t'/t = 0.8$ のとき、強いフラストレーションによりこの超伝導相関は大きく抑制される。