高速並列コンピューターによる高温超伝導体の研究

電子技術総合研究所　山地　邦彦、○柳沢　孝、小池　聡

多体量子系の研究において計算物理的方法が有効である。並列コンピューターにおいてモンテカルロシミュレーションを行い、典型的多体問題である高温超伝導体の研究を行った。

1．はじめに

コンピューターの進歩により、計算物理的方法がより有効になってきている。理論物理学には紙と鉛筆と言う伝統的方法があるが、自由度の大きい多体量子系の理論においてはコンピューターによる数値的方法が必須のものとなっている。最近のコンピューターの進歩には目をみはるべきものがあり、並列化により高い能力をひきだすことができる。

2．コンピューターと多体問題

強く相互作用する多体量子系についての研究は多体問題といわれ、非常に難しい問題である。数値的シミュレーションにより問題を考えようとする時、よく使われる方法は量子モンテカルロ法といわれるものである。しかし、量子力学におけるフェルミオンのように交換するとマイナスの符号がつくような粒子を扱うと、負符号問題と言われる問題が現れ、物理量の期待値を計算することができなくなる。そこで、標準的な量子モンテカルロ法ではなく、何らかの近似、修正を施した方法を使わなければならない。考えられる方法としては、(1) 波動関数を近似する（量子変分モンテカルロ法など)、(2) サンプリングの方法を修正する、例えば負符号が生じるようなパスを避ける（Constrained path モンテカルロ法など)、(3) サンプリング数を少なくするかわりに、サンプルした状態の線形結合を波動関数として期待値を計算する（モンテカルロ対角化法、モンテカルロ線形結合法）などがある。(1) の変分モンテカルロ法では波動関数を近似するが、より大きな系で計算を行うことができる。系統的な波動関数の改良も可能である。(2) の方法ではサンプリング法に手を加えることにより近似が入る。この近似がどのようなものであるかはわかりにくい。かなり有力な方法ではあるが負符号が生じる領域ではやはり計算が難しくなる。(3) のモンテカルロ対角化法は波動関数とサンプリングに手を加えないために厳密な方法であるが、サンプル数が少ないために数値的誤差がより大きくなる。我々はより大きなサイズの系で計算することができる変分モンテカルロ法で研究した。いろいろな状態の波動関数の期待値をモンテカルロ法で計算し、可能な状態を調べることができる。並列化したコンピューターにより、大きなサイズのモデルの研究が可能である。

3．高温超伝導体－ハバードモデルと *d-p* モデル

高温超伝導体の二次元面のモデルは *d-p* モデルであるが、より簡単化した一バンドのモデルであるハバードモデルもよく研究されている。ハバードモデルとは、トランスファー積分 *t* で電子が動きまわり、同一サイトをアップ、ダウンのスピンをもった電子がしめた時エネルギーが *U* だけ上がるというモデルである。もともとは金属絶縁体転移を説明するために考えられ、ハバードらによって考察されたが、高温超伝導体のモデルとしても研究されている。乱雑位相近似（RPA 理論）やスピンゆらぎの理論（FLEX 近似）などにより超伝導の性質が研究されている。

二次元ハバードモデルにおいて超伝導相が現れるかどうかは、サイズ効果や *U* が大きい時のモンテカルロ法の困難さ等から最終的な結論は得られていない。我々は並列計算によりハバードモデルの超伝導凝縮エネルギーのバルク極限を計算するのに成功した。それを図 1 に示す。最大サイズは 22x22 であり、このサイズまでの計算を行うことによりサイズが無限大の極限への外挿が可能となった。その値は比熱や臨界磁場 *Hc* から得られた値に非常に近い。[1] t=0.5 とするとサイトあたりの凝縮エネルギーの計算値は 0.59meV/site であり実験値は 0.26meV/site である。[2,3]

非常によく実験値と計算値が合うことから、ハバードモデルは高温超伝導について真実を含んでいると考えられる。

また、*d-p* モデルは高温超伝導体のより基本的なモデルであり、反強磁性相と d 波超伝導相の存在など近似的に高温超伝導体の相図を再現することが確かめられている。6x6 の系での超伝導凝縮エネルギーはハバードモデルにおける値に近く、また実験値にも近い。[4,5]

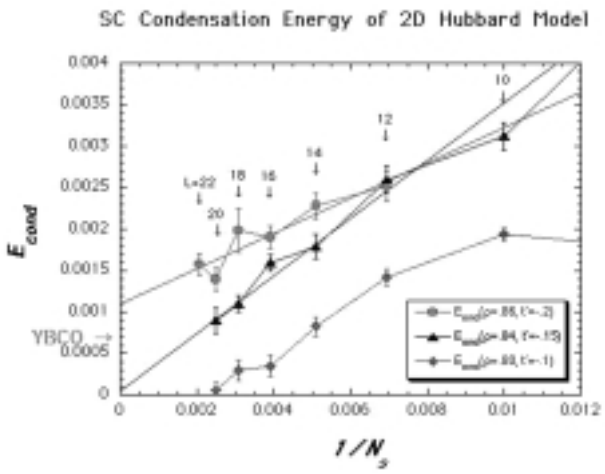

図１　超伝導状態での凝縮エネルギーをサイト数の逆数に対してプロットしたもの。電子数密度ρ=0.86、次近接トランスファー t'=-0.2、クーロン相互作用 U=8 の時、サイズ無限大の極限で有限の値にのこる。YBCO 系に対する実験値が縦軸上に示されている。

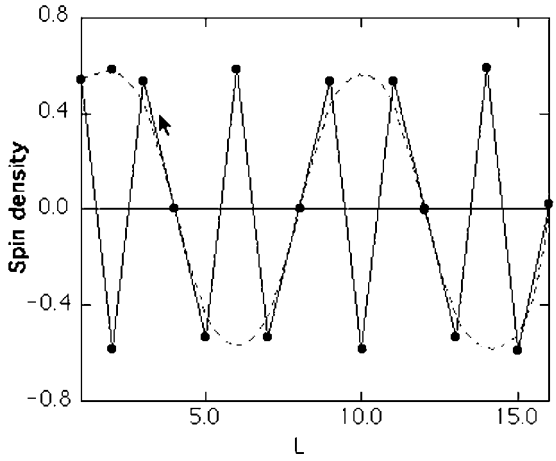

図２　局所スピン密度の空間依存性。16x4 格子におけるストライプ状態の d 電子のスピン密度 S_z(L) x2 を示す（実線）。
パラメーターは Δ =2（ε_d=-2、ε_p=0）、t_{pp}=0.1、U=8（t_{pd}=1）である。点線は（-1）$^{(L-1)}$ S_z(L) x2 である。

酸化物高温超伝導体はアンダードープ領域からオプティマム領域にかけて特異な性質を示す。特に、スピン構造においてストライプと言われる特徴的な状態の存在が実験によって示唆されている。
ストライプ仮説においては、長距離秩序がある反強磁性状態にホールをドープしたとき、ホールが一次元的に並んだ構造をとるとされている。
1/8 ドーピングでは 4 格子にひとつずつホールの一次元鎖が存在するようなストライプが実験結果から示唆されている。[6] t-J モデルやハバードモデルにおける計算ではより周期の長い構造がむしろ安定となりやすい。例えば、8 格子に一つホールの鎖が入ったものがより低いエネルギーの状態になりうる。我々はホールドープ量をちょうど 1/8 として計算を行った。一様な反強磁性、4 格子のストライプ、8 格子のストライプの安定性は *d-p* モデルのパラメーター t_{pp} と Δ に大きく依存する。ここで、t_{pp} は酸素の p 電子間のトランスファー積分であり、Δ は p 電子と d のエネルギーレベルの差である。計算によると 4 格子と 8 格子のストライプ構造はエネルギーがかなり近い。図 2 にストライプ状態でのスピン密度 S_z（L）を示す。$(-1)^L S_z$（L）が 4 箇所で 0 になることから 4 格子のストライプが存在することがわかる。

参考文献

[1] K. Yamaji, T. Yanagisawa and S. Koike: Advances in Superconductivity XI,pp.343 (1999); Proccedings of M²S 2000 (2000).
[2] Z. Hao et al.: Phys. Rev. B53 (1991) 2844.
[3] J. W. Loram et al.: Phys. Rev. Lett. 71 (1993) 1740.
[4] T. Yanagisawa, S. Koike and K. Yamaji: Physica B(Proceedings of LT22, SCES99) (2000).
[5] S. Koike, T. Yanagisawa and K. Yamaji: Physica Bin Proceedings of M²S 2000.
[6] J.M. Tranquada et al.: Phys. Rev. B54 (1996) 7489.

これは平成１２年３月９日に開催した
計算科学技術活用型特定研究開発推進事業
研究報告会（主催 科学技術振興事業団）
の予稿集から抜粋したものです。

識別記号 OY_H10S_???_H11