

交換相互作用と超伝導電子対の生成の関係

(名大院情・金沢大理¹・阪大院理²) ○山木大輔・安田耕二・長尾秀実¹・山口兆²

【序】 高温超伝導の機構の議論のために Hubbard モデルと t-J モデル (式 1・2) が多く利用されている。このような有効モデルは ab initio 計算の結果の解釈や、ab initio 量子化学計算で用いた近似の補正に利用することができる。[1,2]

$$\hat{H}_{\text{Hubbard}} = -t \sum_{i,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}) + U \sum_{i,\sigma \neq \tau} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{i\tau}^+ a_{i\tau} \quad (1)$$

$$\hat{H}_{t-J} = -t \sum_{i,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}) + J \sum_{i,j} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j \quad (2)$$

これらのうち、Hubbard モデルは、サイト内電子反発 U と電子遷移のパラメータ t からなるモデルである。t-J モデルは Hubbard モデルの状態に対し 2 重占有を禁止することにより導出されるモデルであり、サイト間の有効交換積分 J と電子遷移のパラメータ t からなる。Hubbard モデルから導出した場合、この有効交換積分は U の関数として表される。

Hubbard モデルと t-J モデルではサイト間の有効交換相互作用の取り扱いが異なる。Hubbard モデルでは t による一重項の安定化の効果を U により弱めることによりサイト間の有効交換相互作用を間接的に調節する。一方、t-J モデルではパラメータ J により直接的に取り扱う。ここで、2 電子 2 サイトの双方のモデルの基底状態を考えると、Hubbard モデルは、どのようなパラメータを選んでも常に一重項なのに対し、t-J モデルは一重項と三重項の両方をとりうる。t-J モデルは Hubbard モデルから導出されることが多いにもかかわらず、Hubbard モデルでは表現できない状態をカバーしていることになる。

本研究では Hubbard モデルに直接的な交換相互作用の項を加えることにより、モデルの電子状態にどのような影響があらわれるかを検討する。妥当な形で交換相互作用の効果を取り入れるため、ab initio の積分の形式よりモデルを導出する。そして、クラスター計算の範囲内で超伝導電子対 (クーパー対) の生成の関係を明らかにする。直接スピン演算子を導入した t-U-J モデル[3]との比較も行う。

【Modified Hubbard モデル】 Ab initio 計算において 2 個の同じ形状の基底関数からなる 2 電子積分

は $U=(11|11)=(22|22)$ 、 $V=(11|22)=(22|11)$ 、 $x=(12|21)=(12|12)=\dots$ の 3 種であるがこれらの基底関数からなる 2 電子 2 サイトモデルを考えると V の値は U に繰り込めるためモデルに含めないことにする。これにより、次のようなモデルが得られる。

$$\hat{H}_{\text{MH}} = -t \sum_{i,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}) + U \sum_{i,\sigma \neq \tau} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{i\tau}^+ a_{i\tau} + x \sum_{i,j} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{i\tau}^+ a_{j\tau} + a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{i\tau}^+ a_{j\tau}) \quad (3)$$

この 2 電子 2 サイト系の一重項と三重項の差、つまり有効交換相互作用にあたるエネルギーは、

$$\Delta E_{T-S} = \frac{1}{2} (-U + \sqrt{U^2 + 16t^2}) - 2x \quad (4)$$

である。第一項の U に依存する部分は常に正の値だが、 x に依存する項は正負両方の値をとることが出来る。また $U \rightarrow \infty$ のとき、 U に依存する部分がゼロとなり x が有効交換積分となる。

【計算】 Modified Hubbard モデルの U - x 依存性を調べるために 4 電子 4 サイトモデル (図 1) の計算を行った。超伝導電子対 (クーパー対) の生成を調べるために二次縮約密度行列の固有値を計算した。ハートリーフォック法での最大固有値は 1 なので、1 より大きい場合、クーパー対が生成し凝縮していることを示す。

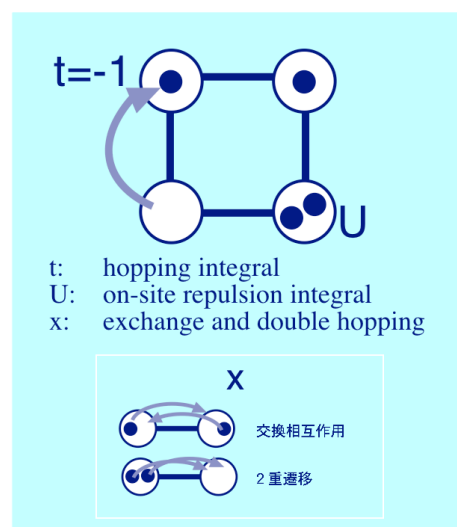


図 1 計算モデル

【結果と考察】 図2に二次縮約密度行列の最大固有値の x - U 依存性を示す。通常 Hubbard モデルでは、この小さなクラスターでは引力的相互作用がない限りクーパー対は生成しない。実際に $x=0$ の直線上では $U < 0$ の領域のみが大きな値となっている。しかし、相互作用 x を含むこのモデルは $U=2x$ 付近で固有値の異常があり、パラメータ $x \cdot U$ が正の領域において大きな固有値を与えることがわかる。

図3に基底状態の電子配置の x - U 依存性を示す。主要な電子配置から I~IV の4種の領域に分割することができた。領域 I では4個の電子が隣り合うサイトを占有している配置が主要な配置であった。領域 II も I 同様4個の電子が隣り合うサイトを占有している状態が主要である領域だが、領域 I とは位相の関係が異なり同符号の線形結合となっている。領域 I と II の境界では二つの配置の位相が反転する。この境界では固有値の異常がみられる。領域 III の主要な配置では対角線上の二つのサイトに4個の電子が占有している。領域 IV では各サイトに電子が一つずつ局在する状態が主要な配置となっている。II の領域と領域 IV と III の境界付近で最大固有値が大きな値を示している。 $U=2x$ の直線が IV と III、I と II の境界になっているが、IV と III の境界では双方の領域の電子配置が同じ重みで混ざっているが、I と II の境界では位相の違いから一部の電子配置が打ち消し合っている。最大固有値が値の定性的な違いは、この点が原因と考えられる。

【まとめ】 直接的な交換相互作用の効果を考慮したモデルを導出した。このモデルの2電子2サイト系においては一重項-三重項間のエネルギー差は電子反発 U による効果と直接的な交換相互作用 x による効果か

らなる。

このモデルの基底状態の二次縮約密度行列の固有値からクーパー対の生成の傾向がみられた。 U が斥力的なとき、交換相互作用に対応する x と電子反発 U の両方が必要であった。これは交換相互作用と電子反発が関与するクーパー対生成機構の可能性を示唆している。

モデルが *ab initio* ハミルトニアンから導いたモデルなので対応した近似波動関数の計算が行いやすい。そのため、このモデルを利用した *ab initio* 計算の補正につかうことができる。

このモデルでは *ab initio* の積分の対称性より、 x 項の電子の交換の項と2重遷移の項に対して同じパラメータを与えた。この影響により交換相互作用の項の効果が薄められ、計算した4サイトモデルでは全領域で一重項が基底状態となった。この項の独立な効果については今後検討する。*t*-*U*-*J* モデルとの比較は当日発表する。

参考文献

- [1] D. Yamaki et al. *Int. J. Quant. Chem.* **96**, 10 (2004).
- [2] D. Yamaki et al. *Int. J. Quant. Chem.* **103**, 73 (2005).
- [3] L. Arrachea, D. Zanchi, *Phys. Rev. B* **71**, 064519(2005)
S. Daul, D. J. Scalapino, and S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4188 (2000).

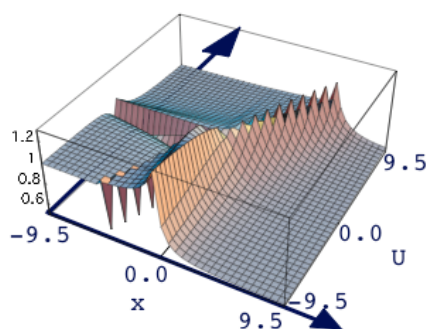


図2 二次縮約密度行列の最大固有値

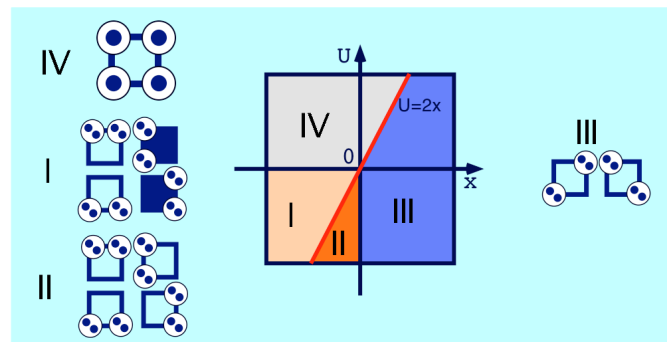


図3 4サイトモデルの基底状態の主要な電子配置