

論文内容の要旨

論文題目 High-Tc superconductivity studied by diagrammatic extensions of the dynamical mean field theory

(動的平均場理論のダイアグラマティックな拡張による
高温超伝導の研究)

氏名 北谷基治

序論

銅酸化物高温超伝導体は、発見されて30年近く経った今でもその転移温度の高さから固体物理学の中心的なテーマであり続けているが、未解決の謎も多い。高温超伝導体を記述する最も簡単なモデルと考えられている2次元斥力ハバードモデルについても、超伝導や磁性を始めとして様々な不安定性についての議論が現在も盛んに行われている。このモデルには、反強磁性的スピン揺らぎを媒介とした異方的ペアリングに起因する超伝導が存在すると考えられている。その一方で、強相関領域ではモット転移を起こして絶縁化することが知られている。実際、モット絶縁体領域に近づくと超伝導転移温度は抑制されるが、スピン揺らぎ媒介超伝導とモット転移の物理を同時に取り扱うのは、現存の手法で両方を取り込める数値法は扱える系のサイズに限界がある、など難しいのが現状であった。スピン揺らぎ媒介超伝導の方は、格子モデルに対してしばしば用いられる揺らぎ交換(FLEX)近似ではアンダードープ領域のスペクトルや超伝導転移温度のドーム構造を再現できないことが知られている。一方で、動的平均場理論(DMFT)はモット転移を扱える数少ない手法であり、強結合極限で厳密となることが保証されているが、自己エネルギーの波数依存性が無視されており、異方的超伝導を記述することが出来ない。また、DMFTのクラスター拡張で異方的超伝導は記述できるものの、そこで無視されている長距離の揺らぎの効果がハバードモデルのスペクトルを理解するには重要であることが認識されてきている。

このような背景から、本論文ではDMFTの拡張として、FLEXのようなスピン揺らぎ効

果を取り込んだファインマンダイアグラムを用いた展開法と合体させることを提案し、この方法論を用いて斥力ハバード模型における超伝導やその他の秩序について明らかにした。

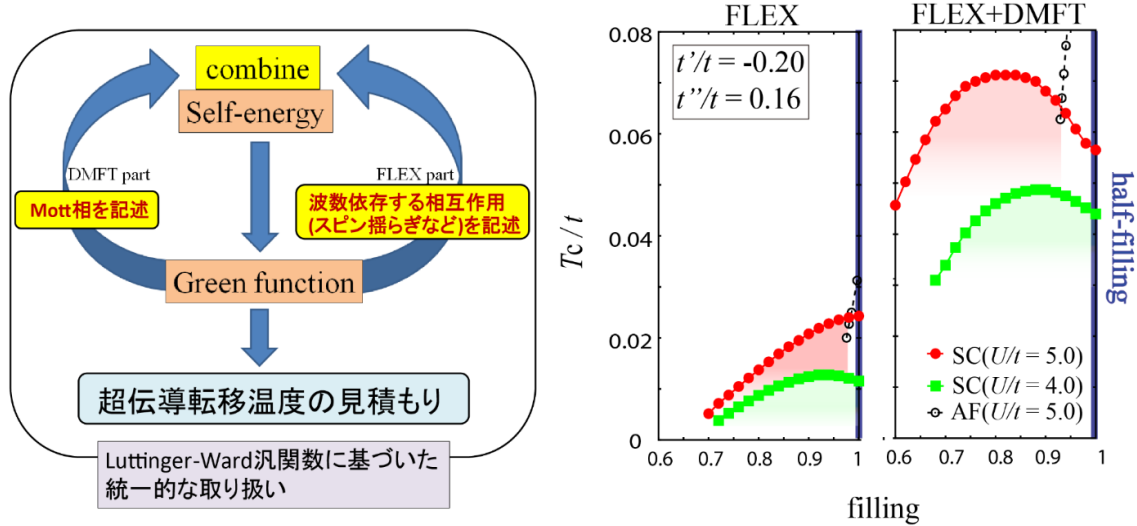


図 1。左：提案する FLEX+DMFT 法の概念図。右：得られた相図を従来の FLEX と新たな FLEX+DMFT で比較。SC, AF は各々超伝導、反強磁性の相境界を表す。

FLEX+DMFT 法、およびそれに基づく超伝導相図

これまでにも DMFT の拡張として FLEX のようなスピン揺らぎの効果を取り込んだファインマンダイアグラムを用いた展開がいくつか考えられてはいたが、本著者は DMFT と FLEX の組み合わせを Luttinger-Ward 汎関数に基づいて自己無撞着に定式化することで、ダブルカウンティング項が一意に定まることを示し、その汎関数形に基づいて超伝導転移温度計算への拡張を行った (図 1、左)。

この方法を 2 次元斥力ハバード模型に応用したところ、超伝導転移温度が担体密度に対しドーム構造となる顕著な実験結果が従来は理論的に説明されていなかったのに対し、本方法では明確に再現された (図 1、右)。このドーム構造は、FLEX 的なペ어링相互作用がハーフフィリングへ向かって単調に増大する一方、FLEX に対するバーテックス補正がハーフフィリングに向かって T_c を抑制する、という 2 つの傾向の相乗として理解できる。本手法では、ハーフフィリング近傍で厳密な量子モンテカルロ法で示唆されているような状態密度のダブルピーク構造も得られた。また、FLEX ではオーバードープ領域で 2 重占有率が負になるという問題点があったが、DMFT を用いて局所的なバーテックス補正の効果を取り入れることにより、これも改善された。

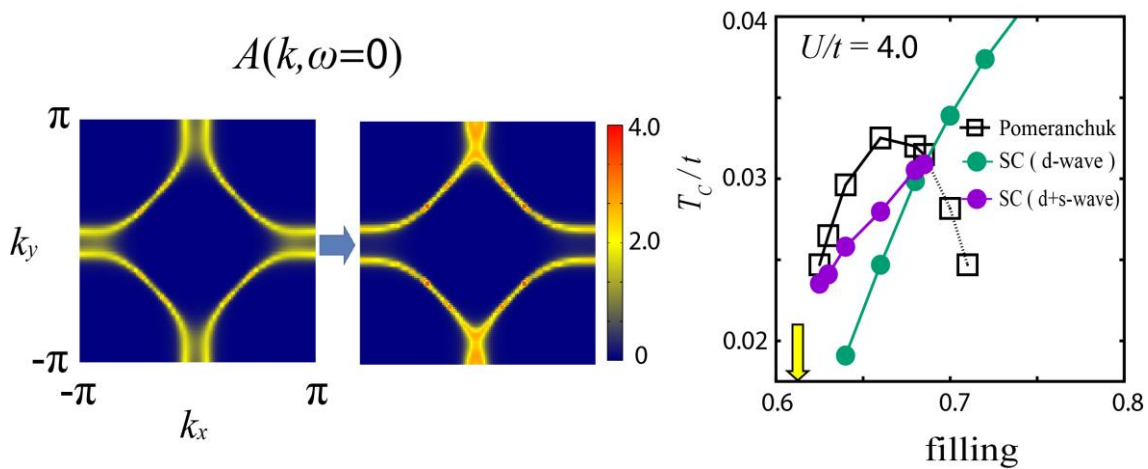


図2。左: Pomeranchuk 不安定性によるフェルミ面の歪み。右: 相図。黒線は Pomeranchuk 不安定性の転移温度、紫線は Pomeranchuk 歪みの元での超伝導転移温度、緑の線は歪みを抑制したときの超伝導転移温度を表す。黄矢印は van Hove フィリングを表す。

Pomeranchuk 不安定性

d 波超伝導の舞台である 2 次元強相関模型では、フェルミ面の対称性が多体相互作用のために自発的に破れる Pomeranchuk 不安定性 (図2、左) の可能性が議論されてきた。これまでも繰り込み群の計算などで、ハバード模型におけるこの不安定性の存在は知られていたが、超伝導不安定性との比較や共存した場合の転移温度への影響などはあまり議論されてこなかった。本著者は、2 次元斥力ハバード模型に対して FLEX+DMFT 法を用いて超伝導の T_c と Pomeranchuk の転移温度を計算し (図2、右)、パラメータを系統的に変えたところ、Pomeranchuk 温度はフェルミ面形状の影響を T_c より強く受けることが分かった。

さらに、Pomeranchuk 不安定性によりフェルミ面が歪んだ状態下での超伝導について調べた。この状況では超伝導ギャップ関数も 4 回対称性を破り d-wave から d+s-wave の超伝導になること (図3) が先ず示され、さらに 4 回対称性を強制した場合と比較すると、フェルミ面の歪みによって T_c が上昇する場合があることが見出された (図2、右)。

従来の現象論的なモデルと超伝導とフェルミ面の歪みの共存の平均場解析では歪みによって T_c が減少しているのが、平均場近似で無視されているギャップ関数の変形の効果が重要と考えられ、これを摂動論で考察すると T_c を上昇させる項が実際生じることを導いた。また、この微小な歪みによる T_c 上昇の機構が他の手法でも起こることを弱相関の領域で乱雑位相近似を用いて確認し、どのようなパラメータ領域でこの機構が働きやすいかを調べた。

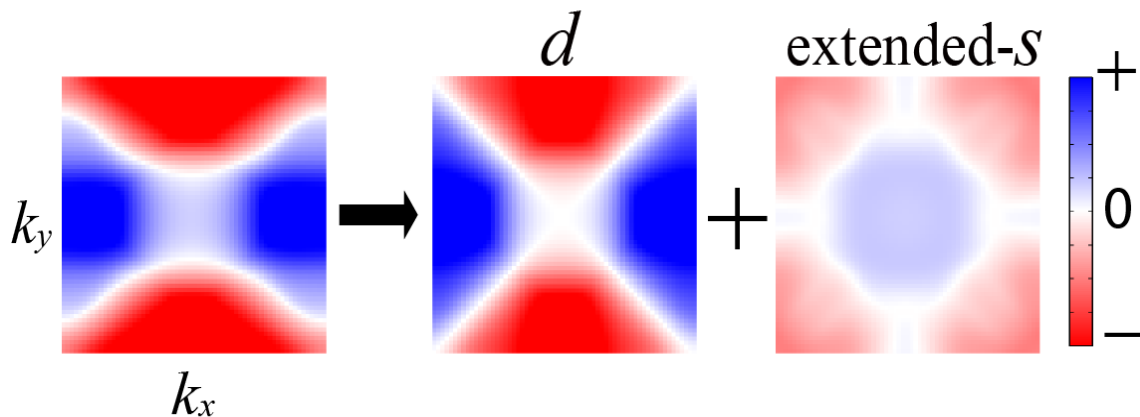


図3。Pomeranchuk 不安定性により歪んだフェルミ面での超伝導ギャップ関数の波数依存性（左）。これは、d 波成分（中）と拡張 s 波成分（右）から成る。

DΓA(dynamical vertex 近似)の超伝導相への拡張：ペアリング相互作用に対するバーテックス補正の効果

ペアリング相互作用に対するバーテックス補正の効果は、重要である可能性があるが従来はあまり調べられていなかった。これを探るために、従来常伝導相に対して開発されている dynamical vertex 近似(DΓA)を超伝導相に拡張し、これを用いて超伝導転移温度を見積もった。その結果、FLEX+DMFT と同様に、ペアリング相互作用のフィリング依存性と自己エネルギー効果のフィリング依存性の組み合わせによって Tc ドームが現れるが、Tc の全体的値は低く評価されることがわかった。さらに重要な点として、ペアリング相互作用自体の構造についても議論し、超伝導電子機構で一般に考えられている「ボソン交換」描像の枠外にある顕著なスクリーニングの効果が存在することが見出された。

まとめと展望

以上のように、本論文では 2 次元斥力 Hubbard 模型における超伝導、Pomeranchuk 不安定性について動的平均場理論のダイアグラマティックな拡張を用いて研究し、Tc ドーム、歪み下でのペアリング対称性混成、非ボソン交換描像などが得られた。

今後の課題としては、d 波超伝導揺らぎの取り込み、有限の波数を持った電荷秩序への適用、多軌道系への拡張、第一原理計算と組み合わせた現実の結晶の計算、などが挙げられる。