

銅酸化物高温超伝導体に対する第一原理低エネルギー有効モデルの導出及び解析

Derivation and analysis of *ab initio* low-energy effective models for high- T_c cuprate superconductors

宮谷昂佑^A、三宅隆^B、今田正俊^A

Kosuke Miyatani^A, Takashi Miyake^B, Masatoshi Imada^A

^A 東京大学工学系研究科物理工学専攻、^B 産業技術総合研究所

^ADepartment of Applied Physics, The University of Tokyo, Hongo Tokyo 113-8656

^BNanosystem Research Institute, AIST, Tsukuba 305-8568

銅酸化物高温超伝導体は様々な相が共存または競合する相境界近傍に存在することがわかってきており、高温超伝導の機構の正しい理解には第一原理に基づく電子状態の理解が望まれている。近年、強相関物質に対して第一原理的に取り組む手法(MACE)[1]が提案され、様々な物性の解明に貢献してきた。この手法は密度汎関数法によって導出した大域的なバンド構造を出発点としてフェルミエネルギーから離れた高エネルギー自由度を最局在ワニエ軌道[2,3]と制限乱雑位相近似法[4,5,6]とを組み合わせたダウンフォールディング法によって低エネルギー自由度に反映し、低エネルギー有効モデルを導出する。導出した低エネルギー有効モデルは多変数変分モンテカルロ法[7]などの低エネルギーソルバーによって平均場近似を越えて電子相関と量子揺らぎを考慮し、高精度で解析できる。

本研究では、MACE を超伝導転移温度が2倍近く異なる銅酸化物高温超伝導体(La₂CuO₄ と HgBa₂CuO₄)に適用し、CuO₂ 平面の銅と酸素との反結合性軌道を考慮した1軌道有効モデルを導出した。その結果 La 系銅酸化物に対して $U/t=5.6$ 、水銀系銅酸化物に対して $U/t=7.2$ (U はオンサイトの有効クーロン相互作用、 t は最近接飛び移り積分)であることがわかった。この差の原因を明らかにするために、反結合性軌道に加え CuO₂ 平面の銅と頂点酸素から成る dz^2 軌道を考慮した2軌道有効モデルを構築した。その結果、軌道間の混成の違いによって生じる遮蔽過程の差異が1軌道モデルを構築した場合の有効相互作用の差として明確に現れることで、両物質の違いが生じることがわかった。またサイト間の有効クーロン相互作用はどちらの物質も最近接でオンサイトの20%程度存在し、多変数変分モンテカルロ法によって基底状態を求めると、これらが超伝導に対して破壊的に働くことを明らかにした。この結果は銅酸化物高温超伝導体の発見以来提唱されているオンサイトの相互作用のみを考慮したハバードモデルでは現実的な超伝導の説明に対して不十分であることを示唆している。また長距離の有効クーロン相互作用の存在下で超伝導を安定化させる一つの候補として、現在のダウンフォールディングの枠組みでは考慮されていない多軌道との混成によって有効的に生じるスピンに依存する相互作用を提案する。

[1] M. Imada and T. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 112001

[2] N. Marzari and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B. **56** (1997) 12847

[3] I. Souza, N. Marzari, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B. **65** (2001) 035109

[4] F. Aryasetiawan, M. Imada, A. Georges, G. Kotliar, S. Biermann, and A. I. Lichtenstein, Phys. Rev. B. **70** (2004) 195104

[5] I. V. Solovyev and M. Imada, Phys. Rev. B. **71** (2005) 045103

[6] T. Miyake, F. Aryasetiawan, and M. Imada, Phys. Rev. B. **80** (2009) 155134

[7] D. Tahara and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 114701