

電総研 柳沢孝, 小池聡, 山地邦彦
 Antiferromagnetic correlations and Stripes in d-p model
 Electrotechnical Laboratory

T. Yanagisawa, S. Koike and K. Yamaji

酸化物高温超伝導体はアンダードープ領域で特徴的なスピン構造があるらしいことが実験によって示唆されている。これはストライプと呼ばれており、長距離秩序がある反強磁性状態にドープされたホールが、一次元的に並んだ構造である。理論的にストライプ状態が安定に存在するかどうかは自明でない問題である。

ここでは高温超伝導体の基底状態を d-p モデルに基づいて研究する。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。超伝導凝縮エネルギーもハバードモデルに近く、また実験値にも近い。^{1,2)} 考える波動関数は反強磁性状態、d(ext-s) 波超伝導状態とストライプ的な空間的変調のある反強磁性状態である。特に 1/8 ドーピングでどのようなスピン構造がより安定であるかを調べる。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。³⁾ 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っている。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。

Gutzwiller の演算子をモンテカルロ法により取り扱うことにより期待値を計算した。16 × 4 の格子(全原子数は 64 × 3)上でホールドープ量をちょうど 1/8 とした。計算の結果、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 t_{pp} と $\epsilon_p - \epsilon_d$ に大きく依存することがわかった。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く、 t_{pp} の値が大きいほうが 4 格子のストライプにとって有利になる傾向がある。どちらも、commensurate と incommensurate の場合を比べると antiphase のある incommensurate 相のエネルギーが低い。

図 1 に 4 格子のストライプの $S_z(L) \times 2$ を示す。パラメータは $\epsilon_d = -2$, $\epsilon_p = 0$, $t_{pp} = 0.1$, $U = 8$ ($t_{pd} = 1$) であり、4 格子のストライプが安定である。 $S_z(L)$ は d 電子のスピン密度を表す。実線が $S_z(L)$ で点線は $(-1)^{(L-1)}S_z(L)$ である。

References

- 1) T. Yanagisawa, S. Koike and K. Yamaji: *Physica B (Proceedings of LT22, SCES99)* (2000).
- 2) K. Yamaji, T. Yanagisawa and S. Koike: *Advances in Superconductivity XI*, pp.343 (1999).
- 3) J.M. Tranquada *et al.*: *Phys. Rev. B* 54 (1996) 7489.

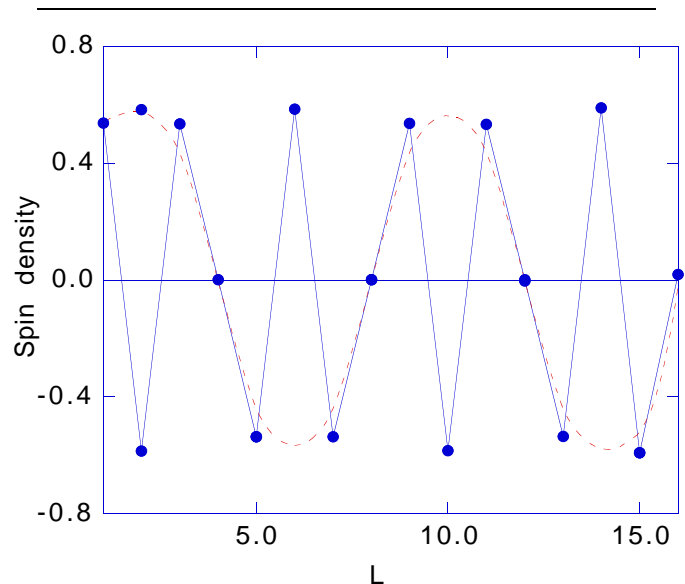


図 1