

高温超伝導体の pseudogap の理論的解釈

— 反強磁性的短距離秩序の成長によるクロスオーバー —

姫路工業大学 理学部 坂井 徹¹, 高橋慶紀

高温超伝導体に対する NMR、中性子散乱等の実験で観測されている擬スピンギャップ現象について、文字どおりのスピンギャップの存在を仮定せずに、反強磁性的な短距離秩序の成長によるクロスオーバーとして説明できる可能性を、 t - J モデルの数値対角化の結果に基づいて議論する。

1 Introduction

低ドーピング領域の銅酸化物高温超伝導体において、“擬ギャップ”、あるいは“擬スピンギャップ”現象と呼ばれるふるまいが、NMR、中性子散乱、光電子分光等の実験で観測され、注目されている。とくに、NMR の場合に注目すると、これは、超伝導転移温度よりも高温で、核磁気緩和率 $1/T_1T$ の温度依存性に、あたかもスピンギャップに起因するような、ブロードなピークが見られるというもので、ホール濃度が最適値よりも小さい領域でのみ観測されている [1]。この現象は、スピノンのシングレット対形成によるクロスオーバー [2] や、2つの CuO_2 面の層間の結合によるメカニズム [3] などの理論により説明が試みられているが、まだ、はっきりとした原因は解っていない。そこで、我々は、この $1/T_1T$ の“擬ギャップ的ふるまい”に対して、ひとつの理論的解釈を試みる [4]。ただし、最近、単一層の物質でも同様のクロスオーバーが観測されていることから [5]、2層間の結合によるメカニズムは考えない。

2 擬スピンギャップ現象の解釈

$1/T_1T$ のピークが低ドーピング領域で観測されていることは、この現象が、ホールをドーピングする前の二次元ハイゼンベルグ反強磁性体の性質に起因していることを示唆する。二次元ハイゼンベルグ反強磁性体では、反強磁性的長距離秩序は絶対零度でしか実現しないことが知られているが、温度が隣接スピンの交換相互作用 J 程度まで減少すると、短距離秩序が成長してくることが予想される。この短距離秩序形成に伴い、スピン励起が抑制され、 $1/T_1T$ が Curie-Weiss 則からはずれてブロードなピークを持つことは、十分に考えられる。

¹E-mail:sakai@sci.himeji-tech.ac.jp

このように考えると、 $1/T_1T$ の温度依存性に現れるピークは、文字どおりのスピンギャップを仮定しなくても、反強磁性的短距離秩序形成というクロスオーバーによるものとして説明できる。実際、 $T \sim J$ 付近の $1/T_1T$ の異常なふるまいは、高温展開等による計算にも現れている [6]。しかし、残念なことに、ホールが存在しない反強磁性相においては、銅酸化物の J があまりにも大きいことや、より低温における長距離秩序への成長に伴う $1/T_1T$ の発散的なふるまいにかき消されてしまうこと等の理由により、このピークはまだ観測されていない。ところが、ホールがドーピングされた場合には、絶対零度でも長距離秩序が生じないため、低温での $1/T_1T$ の発散が無くなり、この短距離秩序形成によるピークが観測される可能性が生じる。ただし、ホールの運動は反強磁性的な秩序を壊すので、有効的な交換相互作用定数 J_{eff} はもとの J よりも小さくなり、ピークが生じるクロスオーバー温度は、ホール濃度が増すにつれて減少することが予想される。この傾向は、NMRで観測されたスピンギャップ温度の、ホール濃度依存性とつじつまが合っている。実際、このような擬ギャップ現象を、反強磁性的短距離秩序を仮定した現象論により説明しようという試みもある [7]。

3 t - J モデルの数値対角化

我々は、このような解釈の妥当性を確認するため、 t - J モデルに対する $\sqrt{10} \times \sqrt{10}$ サイトの有限クラスターの数値対角化 [8] により、有限温度における $1/T_1T$ と短距離秩序のふるまいを解析した。 $1/T_1T$ は次の関係式

$$\frac{1}{T_1T} \propto \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{\omega} \sum_q \text{Im} \chi(q, \omega) \quad (1)$$

により計算し、短距離秩序の指標として、最隣接スピン相関関数 C_1 を用いた。エネルギーの単位をホールのホッピング積分 t として、(a) $J=0.3$ と(b) $J=0.6$ の場合について、それぞれホール数を0、1、2（ホール濃度 $\delta=0, 0.1, 0.2$ ）としたときの $1/T_1T$ と C_1 の温度依存性を図1に示す。(a)(b)いずれの場合にも、ホールをドーピングしていないときには、 $T \sim J$ 付近で、 $1/T_1T$ がブロードなピークを持ち、これに対応する温度領域で、反強磁性的な短距離秩序が成長していることがわかる。また、(b)の1ホールの結果は、ホールをドーピングした場合にも、短距離秩序が成長する温度領域に、 $1/T_1T$ のブロードなピークが現れること、さらに、このピークがホールをドーピングしたことにより、低温側にシフトすることを示している。この(b)の1ホールの系の、最も低いスピン励起のエネルギーギャップは、0.146であるが、 $1/T_1T$ のブロードなピークは、もっと高温の領域にあることから、明らかにこのギャップ（バルクの系ではスピンギャップに相当）に起因するものではないことがわかる。なお、(a)の1ホールの場合には、 $1/T_1T$ のピークは現れないが、短距離秩序の顕著な成長も見られないことから、我々の予想とつじつまが合っている。

さらに、中性子散乱の測定結果と比較するため、同様の方法で、 t - J モデルの $\text{Im} \chi(Q, \omega)$ ($Q = (\pi, \pi)$)、及び $\text{Im} \chi(\omega) \equiv \int d^2q \text{Im} \chi(q, \omega)$ を低エネルギー ($\omega = 0.01$) で計算した結果

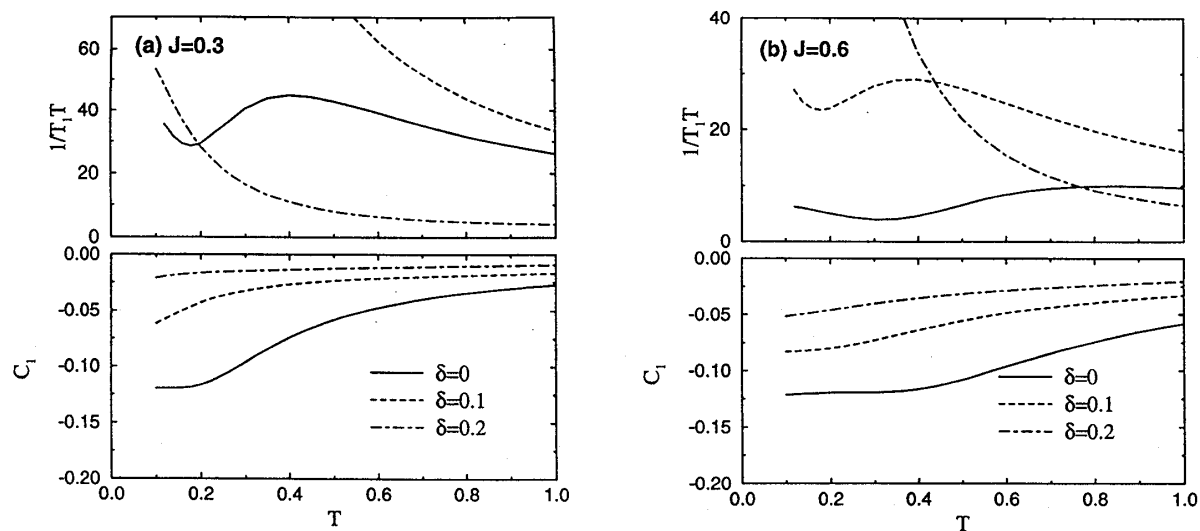


図 1: 10 サイト t - J モデルの $1/T_1T$ と最隣接スピン相関関数 C_1 の温度依存性

を図 2(a) と (b) にそれぞれ示す ($J = 0.6$)。 $\text{Im}\chi(Q, \omega)$ は、温度の低下とともに単調に成長するが、 $\text{Im}\chi(\omega)$ は、 $1/T_1T$ と同様のクロスオーバーを示し、実験結果 [9] を再現していることがわかる。また、計算された一様磁化率 χ (図 2(c)) の温度依存性にも、同様の振る舞いが見られ、La 系の実験 [10] とつじつまが合っている。ただし、今回の計算結果は、これらのクロスオーバー温度は、あまり測定する物理量に依らないことを示唆している。

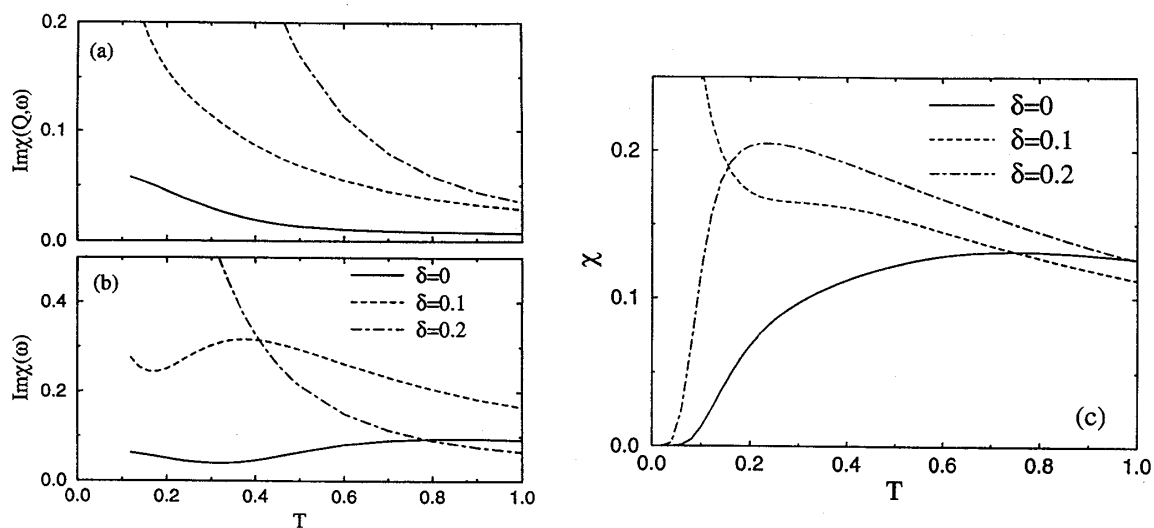


図 2: 10 サイト t - J モデルの (a) $\text{Im}\chi(Q, \omega)$ 、(b) $\text{Im}\chi(\omega)$ 、(c) 一様磁化率 ($J = 0.6$)。

4 考察

以上の解析により、高温超伝導体に見られる擬ギャップ現象は、反強磁性的短距離秩序の成長によるクロスオーバーとして解釈できることが解った。もし、反強磁性的短距離秩序の形成が、高温超伝導発現のためのひとつの必要条件と考えるならば、このクロスオーバー温度が常に超伝導転移温度の上にあることとつじつまが合っている。さらに、もうひとつの必要条件がホール濃度に支配されており、この両者が満たされたときに超伝導が起るとすると、これまでに得られている、高温超伝導体の温度-ホール濃度相図の概形はだいたい説明がつくと考えられる。

なお、本研究では、反強磁性的短距離秩序の指標として、最近接スピンの相関関数を用いたが、今後、反強磁性の成長と、シングレット形成の明確な区別をするため、他の相関関数のスペクトルも解析する予定である。

謝辞

数値計算には、東京大学物性研究所計算機室の富士通 VPP500 を用いた。

参考文献

- [1] A. Goto, H. Yasuoka and Y. Ueda: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3043 and references therein.
- [2] T. Tanamoto, K. Kuboki and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **60** (1991) 3072; T. Tanamoto, H. Kohno and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 2739.
- [3] M. U. Ubens and P. A. Lee: Phys. Rev. **B50** (1994) 438.
- [4] T. Sakai and Y. Takahashi: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 2630.
- [5] Y. Itoh *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3751; *ibid.* **66** (1997) 3383.
- [6] S. Chakravarty and R. Orbach: Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 224; R. R. P. Singh and M. P. Gelfand: Phys. Rev. **B42** (1990) 996.
- [7] K. Miyake and O. Narikiyo: J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 3821.
- [8] T. Tohyama, H. Okuda and S. Maekawa: Physica **C215** (1993) 382.
- [9] B. J. Sternlieb *et al.*: Phys. Rev. B **47** (1993) 5320.
- [10] T. Nakano *et al.*: Phys. Rev. B **49** (1994) 16000.