



### 13. $c$ 軸に平行な磁場中における高温超伝導磁束格子融解の機構

Mechanism of the flux-line-lattice melting in high-temperature superconductors in  $\vec{B} \parallel \vec{c}$

科学技術庁金属材料技術研究所 野々村 禎彦、胡 暁、立木 昌

高温超伝導体の磁束格子融解は、実験的には試料の高純度化、理論的には計算機の高速度化によって研究が進み、 $c$ 軸に平行な磁場をかけた場合には、この現象が熱力学的な1次相転移で記述されることは、既に実験的にも [1-6] 理論的にも [7-14] 確立している。

しかし、この相転移の機構については、まだ十分な理解は得られていない。高温超伝導体のこの現象を最初に理論的に解析した Nelson ら [15] は、2次元ボゾンモデルを用いた定式化を行い、磁束線の entanglement [16] が相転移を特徴づけると主張した。2次元ボゾンモデルの範囲内では、この主張は数値計算 [13] によって確認されている。しかし、このモデルには、相転移を引き起こすような励起は entanglement しか存在しないので、この理論だけで磁束格子融解の機構を完全に説明したことにはならない。実際、3次元 frustrated XY モデルの数値計算 [17, 18] に基づいて、Nelson らのモデルには含まれていない、熱的なループ励起の重要性が主張されている。この主張では、多数のループ励起によって磁束線間の相互作用が遮蔽され、磁束線に基づいた系の記述が意味を失うこと (loop-excitation blowout) によって磁束格子融解は特徴づけられる。

我々は、このような磁束格子融解相転移の機構をめぐる理論的研究の矛盾点を解決するために、 $c$ 軸に平行な磁場中の3次元 frustrated XY モデルの大規模モンテカルロシミュレーションを行った。モデルと計算手法は我々のグループがこれまでに行ってきた研究 [11] を踏襲したもので、Nguyen らの最近の計算 [18] もこの枠組に沿っているが、本研究の特徴は、ループ励起が存在するモデルでは初めて磁束線とループ励起の直接測定を行い、磁束線の entanglement とループ励起の様子を、本来の定義に忠実に観測したことである。我々のモデルは、以下のハミルトニアン [11, 19] で記述される：

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j \in ab \text{ plane}} \cos(\varphi_i - \varphi_j - A_{ij}) - \frac{J}{\Gamma^2} \sum_{i,j \parallel c \text{ axis}} \cos(\varphi_i - \varphi_j), \quad (1)$$

$$A_{ij} = \frac{2\pi}{\phi_0} \int_i^j \mathbf{A}^{(2)} \cdot d\mathbf{r}^{(2)}. \quad (2)$$

ここで  $\varphi_i$  は超伝導秩序パラメータの位相成分を表し、境界の有限サイズ効果を減らすために全方向に周期的境界条件を課す。本講演では1格子あたりの平均磁束線数として主に  $f = 1/25$  の場合を扱い、異方性定数としては  $\Gamma = 2$  と  $\Gamma = 5$  の場合の結果を報告する。ある格子のまわりの位相差の和は

$$\sum_{i,j \in \square} (\varphi_i - \varphi_j - A_{ij}) = 2\pi(n - f), \quad n = 1, 0, -1 \quad (3)$$

で表され、隣り合う  $n = \pm 1$  の格子を結んだ線を渦糸と呼ぶ。渦糸が途中で切れることはなく、系の内部で閉じているものをループ励起と呼び、磁場の方向に沿って一方の境界から他方の境界まで走っているものを磁束線と呼ぶ(図1参照)。ループ励起は熱的なもので、基底状態では存在しない。磁束線は基底状態では真っ直ぐだが、有限温度ではゆらぎ、ゆらぎの大きさが磁束格子の格子間隔  $a_0 = (2/\sqrt{3})^{1/2}/f^{1/2}$  程度になると、entanglement という励起が可能になる。周期的境界条件下では、下端と上端の横座標が異なっている磁束線(図1参照)を entangle していると定義する。

磁束格子融解転移の機構を解明するには、この相転移を渦糸に関する物理量の振舞とは独立に特徴づける必要がある。本講演では、helicity modulus の  $c$  方向成分  $\Upsilon_c$  [11, 20] を用いて転移

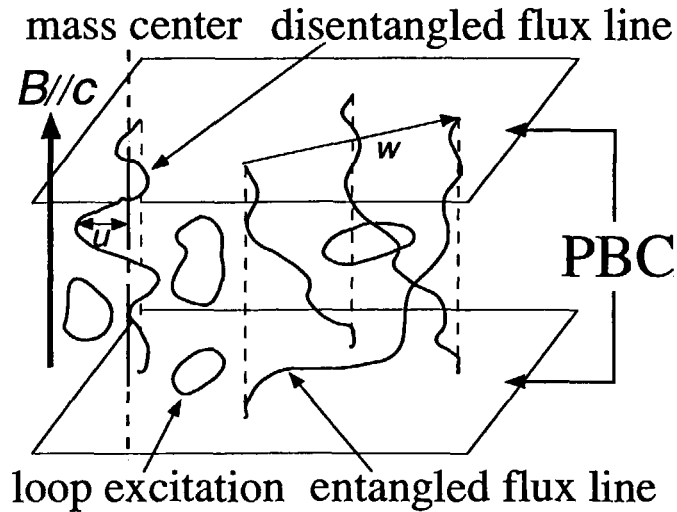


図 1: ループ励起、entangle していない磁束線、entangle している磁束線の概念図。磁束線の両端での横方向の距離  $w$  と磁束線の変位  $u$  の定義も図示した。

温度  $T_m$  を決める。この物理量は超流動密度に比例するので、超伝導相のみで有限の値を取る。本シミュレーションでは、ループ励起の数  $N_{\text{loop}}$  と entangle した磁束線の数  $N_{\text{ent}}$  を数え、また磁束線の両端での横方向の距離  $w$  (図 1 参照) を測定して平均値  $L_{\text{diff}}$  を求め、磁束線の重心からの変位  $u$  (図 1 参照) を測定して平均値  $\langle u^2 \rangle^{1/2}$  を求める。さらに、リンデマン数  $c_L$  は、

$$c_L \equiv \lim_{T \rightarrow T_m - 0} \langle u^2 \rangle^{1/2} / a_0, \quad (4)$$

で定義される。本講演で紹介するのは主に  $L_x = L_y = 50$ ,  $L_c = 80$  の系の結果で、 $f = 1/25$  の場合の総磁束線数は  $N_{\text{flux}} = 100$  である。これ以外の大きさの系も、物理量のサイズ依存性を議論するために計算した。典型的なシミュレーションの規模は、平衡化が  $1.0 \times 10^5$  MCS、測定が  $1.5 \times 10^5$  MCS であるが、転移温度とリンデマン数を精密に決めるために、転移温度近傍では最大  $5 \times 10^6$  MCS 規模の計算を行った。

シミュレーションの結果を図 2 と図 3 に示した。  $\Gamma = 2$ ,  $\Gamma = 5$  いずれの場合も、 $\Upsilon_c$  の値が不連続に零になる温度 = 1 次転移温度で、entangle した磁束線数と総磁束線数の比が不連続かつ急激に増加していることがわかる (図 2a)。一方、ループ励起の数は、やはり転移温度近傍で増加するものの、その変化は entangle した磁束線の場合ほど急激ではないし、また転移温度におけるループ励起の数は、異方性定数によって大きく異なる (図 2b)。以上の結果は、磁束格子融解転移の起源は磁束線の entanglement で、ループ励起の増加は付随的な現象であることを強く示唆している。磁束線のゆらぎを表す物理量については、 $L_{\text{diff}}$  を  $\Gamma = 5$  の場合に計算し、転移温度よりも高いある温度領域で、 $c$  軸方向の系の大きさ  $L_c$  に対して  $L_{\text{diff}} \sim \text{const.} \times L_c^{1/2}$  というスケールリングが成立する (図 3a) ことを見出した。この結果は、磁束線が  $c$  軸方向に random walk していることを示しており、磁束線を用いた描像は転移温度以上でも意味を持つことがわかる。このスケールリングが、 $L_c$  に依存するある温度領域のみでしか成立しないのは、 $L_{\text{diff}}$  が大きくなってくると、entangle した磁束線どうしの再結合が無視できなくなるという幾何学的理由による。また、 $\langle u^2 \rangle^{1/2}$  は  $\Gamma = 2$ ,  $\Gamma = 5$  いずれの場合も転移温度で不連続に変化し、リンデマン数の定義 (4) と比較すると、異方性定数によらず  $c_L \approx 0.30$  となる (図 3b)。この結果は、1 次相転移はゆらぎの大きさが“定数”  $c_L$  を超えた時に起こるとするリンデマンの現象論が、高温超伝導磁束格子融解でも有効であることを意味している。

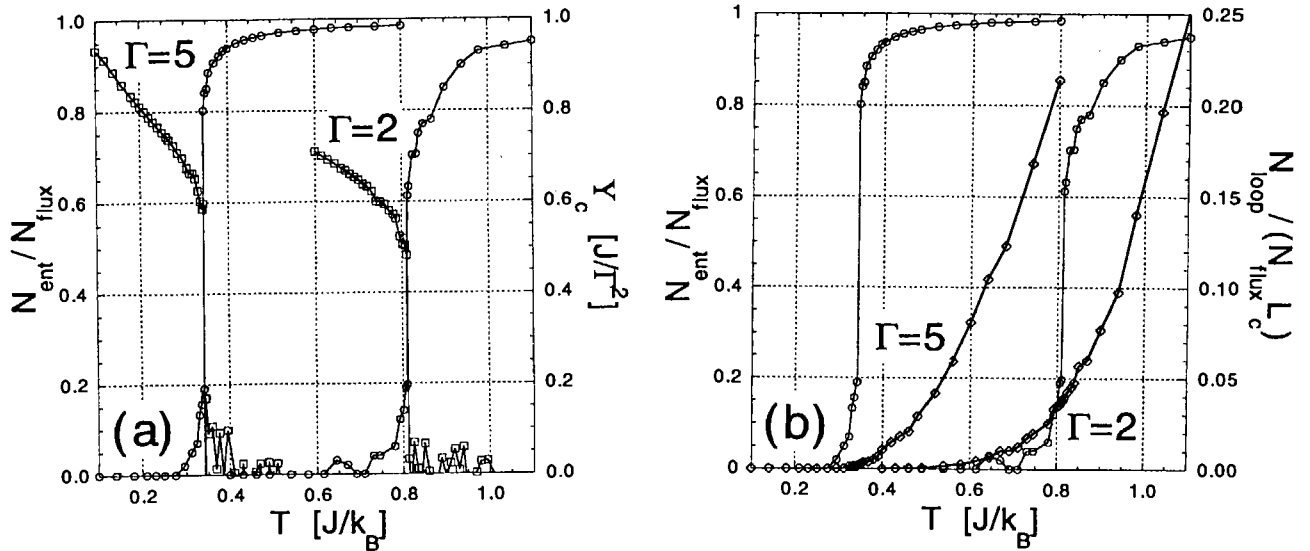


図 2: (a)  $\Gamma = 2, \Gamma = 5$  における helicity modulus の  $c$  方向成分 (□) と entangle した磁束線の総磁束線中の割合 (○) の温度依存性。 (b)  $\Gamma = 2, \Gamma = 5$  における 1 磁束線、 $1ab$  面あたりに規格化されたループ励起数 (◇) の温度依存性。 entangle した磁束線の割合 (○) も、比較のため図示した。

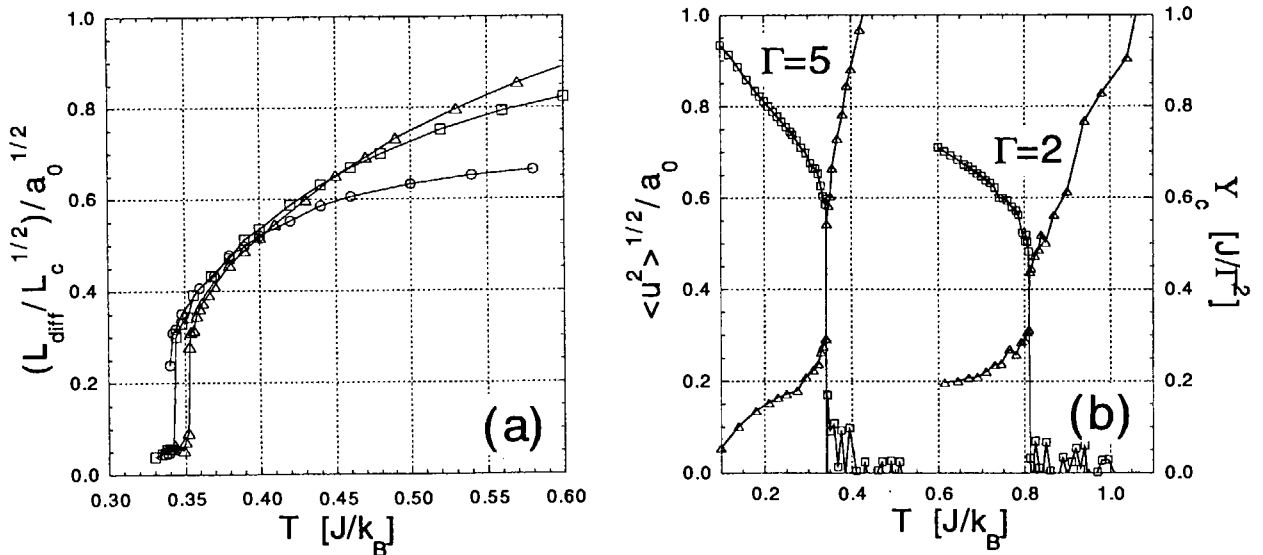


図 3: (a)  $\Gamma = 5$  における、磁束線の両端の横方向距離の平均値を  $L_c^{1/2}$  でスケールした量の温度依存性。  $L_c = 40(\Delta)$ ,  $L_c = 80(\square)$ ,  $L_c = 160(\circ)$  の結果を重ね書きした。 (b)  $\Gamma = 2, \Gamma = 5$  における、磁束線のゆらぎの平均値を磁束格子の格子間隔  $a_0$  で規格化した量 ( $\Delta$ ) の温度依存性。 helicity modulus の  $c$  方向成分 (□) も、比較のため図示した。

本研究における数値計算は、科学技術庁金属材料技術研究所の計算材料シミュレーター (NEC SX-4) を用いて行った。

## 参考文献

- [1] H. Safar *et al.*, Phys. Rev. Lett. **69**, 824 (1992).
- [2] W. K. Kwok *et al.*, Phys. Rev. Lett. **72**, 1092 (1994).
- [3] U. Welp *et al.*, Phys. Rev. Lett. **76**, 4809 (1996).
- [4] J. A. Fendrich *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 2073 (1996).
- [5] E. Zeldov *et al.*, Nature (London) **375**, 373 (1995).
- [6] A. Schilling *et al.*, Nature (London) **382**, 791 (1996); Phys. Rev. Lett. **78**, 4833 (1997).
- [7] R. E. Hetzel, A. Sudbø, and D. A. Huse, Phys. Rev. Lett. **69**, 518 (1992).
- [8] R. Šášik and D. Stroud, Phys. Rev. Lett. **75**, 2582 (1995).
- [9] S. Ryu and D. Stroud, Phys. Rev. B **54**, 1320 (1996).
- [10] S. Ryu and D. Stroud, Phys. Rev. Lett. **78**, 4629 (1997).
- [11] X. Hu, S. Miyashita, and M. Tachiki, Physica C **282-287**, 2057 (1997); Phys. Rev. Lett. **79**, 3498 (1997); Phys. Rev. B **58**, 3438 (1998).
- [12] J. Hu and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **56**, 2788 (1997).
- [13] H. Nordborg and G. Blatter, Phys. Rev. Lett. **79**, 1925 (1997).
- [14] A. E. Koshelev, Phys. Rev. B **56**, 11201 (1997).
- [15] D. R. Nelson and H. S. Seung, Phys. Rev. B **39**, 9153 (1989).
- [16] D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **60**, 1973 (1988).
- [17] A. K. Nguyen, A. Sudbø, and R. E. Hetzel, Phys. Rev. Lett. **77**, 1592 (1996).
- [18] A. K. Nguyen and A. Sudbø, Phys. Rev. B **57**, 3123 (1998); **58**, 2802 (1998).
- [19] Y. -H. Li and S. Teitel, Phys. Rev. Lett. **66**, 3301 (1991); Phys. Rev. B **47**, 359 (1993).
- [20] M. E. Fisher, M. N. Barber, and D. Jasnow, Phys. Rev. A **8**, 1111 (1973).