

氏 名 (本 籍)	にし 西	お 尾	たか 隆	ゆき 行	(兵 庫 県)
学 位 の 種 類	博 士 (情 報 科 学)				
学 位 記 番 号	情 博 第 57 号				
学 位 授 与 年 月 日	平 成 10 年 1 月 16 日				
学 位 授 与 の 要 件	学 位 規 則 第 4 条 第 1 項 該 当				
研 究 科 , 専 攻	東 北 大 学 大 学 院 情 報 科 学 研 究 科 (博 士 課 程) 情 報 基 礎 科 学 専 攻				
学 位 論 文 題 目	超 伝 導 磁 束 格 子 状 態 に お け る 準 粒 子 励 起 の 理 論 的 研 究				
論 文 審 査 委 員	(主 査)				
	東 北 大 学 教 授	海 老 澤 丕 道	東 北 大 学 教 授	沢 田 康 次	
	東 北 大 学 教 授	潮 田 資 勝 (工 学 研 究 科)	東 北 大 学 教 授	山 下 努 (工 学 研 究 科)	

論 文 内 容 要 旨

第 1 章 序 論

本章では高温超伝導体を中心とした混合状態下での準粒子状態と磁気振動効果について最近の実験と理論を採り上げて議論し、これに関連して本論文の動機と目的を述べている。

高温超伝導体は発見以来その発現機構とともに、異方的クーパーペアの可能性と混合状態での特異な性質が数多く議論されてきた。最近の混合状態における YBCO サンプルを用いた STM/STS の実験の成功はクーパーペアの対称性を定める上で磁場をプローブとして計測できる可能性を開くと同時に、混合状態下における準粒子状態について新しい知見をもたらすものとして多くの研究者の注目を集めている。またここ数年来、混合状態下での高温超伝導体を含めた多くの超伝導体で磁気振動が観測されランダウ準位と超伝導の関係について盛んに議論がなされている。

本論文では s , d それぞれの対称性を持つ超伝導をもたらすモデルハミルトニアンを解析し、これまで磁場下での解析を困難にしていた技術的問題を解決するとともに、混合状態での超伝導体の準粒子励起とランダウ量子効果についてこれまで予想されていなかった新たな結果を提示し、それらの意義について考察した。

第 2 章 本研究の背景と問題の定式化

本章では本論文の意義を明確にするためにこれまでの理論を検討しその問題点について述べるとともに、本論文で用いた新しいゲージの取り方を提案しその詳細について述べている。

混合状態下での準粒子状態については、Caroli *et al.* による議論があるがこれは s 波のクーパーペア及び、球対称なフェルミ面を仮定して得られたものである。本論文で議論の対象となっている高温超伝導体を含めた超伝導体はいずれもコヒーレンスの短いフェルミ面の異方性の強い物質である。また高温超伝導体については異方的ペアの可能性が議論されているため、これらを考慮した新たな理論的枠組みが必要である。

本論文では高温超伝導体の Cu-O 面に対応して以下に示す 2 次元の正方格子状の引力ハバードモデル及び拡張ハバードモデルを導入し、磁場の効果を Peierls 位相として取り入れ平均場近似による計算手法を用いた。

磁場のとり方については、系が単位磁束量子を一つずつ含む長周期構造 (磁気ユニットセルと呼ぶ) に対し並進不変性を保つようなゲージを新たに提案した。これにより系のバルクな性質についてのみ議論する事を可能にした。

なお Caroli *et al.* による議論では磁場は下部臨界磁場の直上で単一の磁束が仮定されている。これは現実の混合状

$$\hat{H}_1 = \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} - \frac{1}{2} U \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_2 = & \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} + \frac{1}{2} U \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \\ & - \frac{1}{2} V \sum_{ij\sigma\tau} n_{i\sigma} n_{j\tau} \end{aligned} \quad (2)$$

$$t_{ij} = -t \exp\left(-\frac{ie}{hc} \int_{\vec{j}}^{\vec{i}} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r})\right), \quad (3)$$

態が磁束格子を組んでいることを考えると不十分な議論である。混合状態におけるより進んだ取り扱いは近年 Dukan *et al.* による議論があるが、s波ペアのみで、フェルミ面に等方性を仮定している点で不十分である。またその計算結果は自己無撞着なものではない。

本論文では、クーパーペアおよびフェルミ面の異方性を考慮して自己無撞着な方法により混合状態における準粒子状態を求めたが、この結果は第4章で述べている。

第3章 低エネルギー励起状態におけるフェルミ面効果

本章では第2章で示したモデルから自己無撞着な計算方法により得られたオーダーパラメータ及び準粒子波動関数の特徴について述べている。

オーダーパラメータについてはその形状はそれぞれ引力ハバードモデル（s波ペア）で軸対称、拡張ハバードモデル（d波ペア）では4回対称構造を有し、微視的なモデルには殆ど依存しないことが得られた。この事実は、超伝導体のオーダーパラメータの特徴が個々の微視モデルに依らない現象論的 Ginzburg-Landau 理論により記述されるというこれまでの結果を支持するものである。またd波オーダーパラメータの4回対称構造は温度依存性が強く、およそ0.5Tcでははっきりとした4回対称構造は見えなくなる。

これに対し、磁束コア内に大きな振幅を持つ低エネルギーの準粒子波動関数はフェルミ面の形状を強く反映する。引力ハバードモデルではその振幅が(1,1)方向に足の伸びた4回対称構造を示す。これは粒子密度が半充填に近い領域で評価しているためフェルミ面の異方性が強く反映されたことによる。磁束コアの最隣接方向は(1,0)方向であるにも関わらず、半充填に近い領域ではその方向に強いBragg反射を生じるため振幅は(1,0)方向に裾を引かない。拡張ハバードモデルでは逆に対称性が高くなり弱い軸対称構造を示す。これはdオーダーパラメータが(1,1)方向に大きくギャップが開いた構造を持つため波動関数の足が伸びることができないことがその理由である。すなわち、フェルミ面の異方性とオーダーパラメータの異方性の競合の結果として生じる。準粒子波動関数について得られた結果はこれまで予測されていた結果とはそれぞれ反対であるという結果を得た。この結果、混合状態下での低エネルギー励起状態にはフェルミ面の異方性が強く反映されることが判明した。

この結果、混合状態下での低エネルギー励起状態にはフェルミ面の異方性が強く反映されることが判明した。

第4章 磁束格子状態における磁気振動効果

本章では、磁束格子形成が準粒子状態に及ぼす影響を明らかにし、高磁場領域でのランダウ準位と超伝導の関係について述べる。

ハミルトニアン	オーダーパラメータ	低エネルギー励起波動関数
引力 Hubbard	軸対称	4回対称
拡張 Hubbard	4回対称	ブロードな軸対称

表1：それぞれのモデルハミルトニアンにおけるオーダーパラメータと準粒子波動関数の対称性

第2章で指摘したように混合状態においては磁束格子形成が生じることにより、コア内に大きな振幅を持った準粒子波動関数がコアの外への拡がりを通して互いに重なり合う。本論文では磁束格子の効果を複数の磁気ユニットセルを導入することにより考慮した。その結果、*s*波超伝導体であってもコア内の準粒子波動関数の重なりによりバンドが形成され励起スペクトルはギャップレスであることが示された(図1, 2)。このギャップレス状態の可能性は *Dukan et al.* により示されているが、自己無撞着な方法よる結果ではなかった。本論文ではこれを自己無撞着な計算により示し、さらに第二臨界磁場 H_{c2} の $\frac{1}{4}$ 程度の弱磁場領域までギャップレス状態が存在する事を数値計算によりはじめて確認した。この結果は H_{c2} の20%程度の低磁場領域までギャップ構造が観測されないとする *Corcoran et al.* による実験結果を支持する。また *d*波超伝導体においても磁場の増大とともにギャップ内に明確なランダウサブバンドが形成される事が状態密度の計算から初めて示された。その結果バンド構造にはオーダーパラメータの対称性が反映されることが見いだされた。

第5章 総括

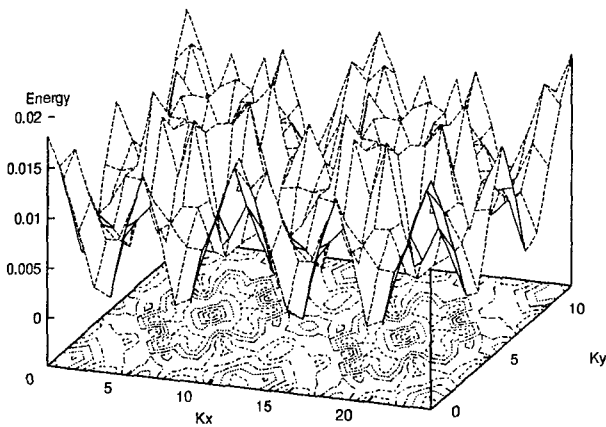


図1 : *s*波 最も低いエネルギーバンド

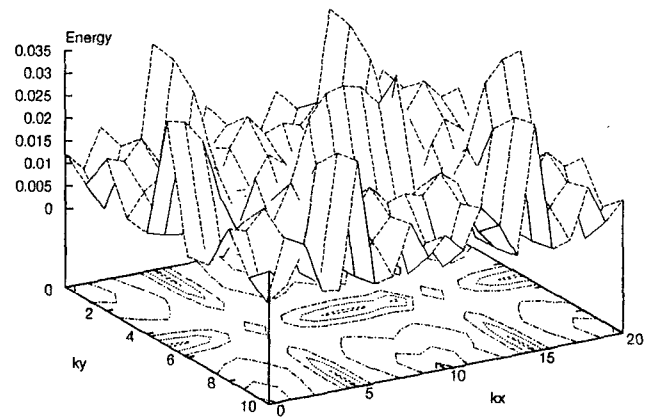


図2 : *d*波 最も低いエネルギーバンド, オーダーパラメータの対称性を反映して4回対称構造をとる

本章では本研究で得られた知見をまとめ、本論文での結論を述べている。

審査結果の要旨

銅酸化物高温超伝導の機構の解明と基本的性質の理解には未だ課題が多い。超伝導の対称性および電子状態についての金属超伝導との相違の研究は最近の進展が著しく、ドハースファンアルフェン (dHvA) 効果の観測やトンネル顕微鏡・分光などの進歩により磁場の下での電子状態を知ることが重要な問題になっている。

著者は、格子モデルを用いてその特徴を巧妙に利用した高磁場中の電子状態の計算方法を提案し、準粒子励起とランダウ量子効果について新しい結果を得た。本論文はその成果を取りまとめたもので全文6章よりなる。

第1章は序論である。

第2章では2次元正方格子上の引力ハバードモデルおよび拡張ハバードモデルに磁場を導入する際にベクトルポテンシャルがボンド位相のみに含まれることを利用して、ハミルトニアンが長周期構造をもつようなゲージを提案している。また、自己無撞着ペアポテンシャルと準粒子状態の数値計算の定式化を与えている。この周期性による磁気ブロッホ状態を用いることにより超伝導量子磁束格子のもとでの計算が実行可能になった。これは計算機による超伝導の研究を飛躍的に進める重要な成果である。

第3章では、この方法を用いて得られた *s* 波超伝導及び *d* 波超伝導における準粒子波動関数の特徴について述べている。従来の常識に反して、この波動関数が、*s* 波でむしろ銅の正方格子に起因する4回対称構造をもつことが示された。これは超伝導の対称性についての重要な知見である。

第4章では、常伝導状態におけるランダウ量子化と dHvA 効果が磁場を減らすに従って超伝導秩序によってどのように影響されるかの観点から、数値計算の結果を整理して述べている。この結果、単一磁束の効果で dHvA 振幅が急激に減少するとの従来の理論の結果に反して、格子状磁束の場合上部臨界磁場の $\frac{1}{4}$ 程度の弱磁場でも観測できるとの予想を立てている。これは超伝導状態での dHvA 効果による電子状態の研究上有用な知見である。

第5章は総括であり、第6章は解析計算による関連の近似理論を述べた補章である。

以上要するに本論文は、ゲージの取り方を工夫して格子モデルにより超伝導磁束状態における電子の準粒子励起の数値解析を行い、超伝導対称性との関係および dHvA 振動の観測可能性について明らかにしたものであり、電子物性工学および情報基礎科学の発展に寄与するところが少なくない。

よって、本論文は博士(情報科学)の学位論文として合格と認める。