

氏名(本籍)	小池 聡 (東京都)
学位の種類	博士(工学)
学位記番号	博甲第1,892号
学位授与年月日	平成10年3月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審査研究科	工学研究科
学位論文題目	二鎖ハバード模型における超伝導出現の可能性に関する数値的研究
主査	筑波大学併任教授 理学博士 山地邦彦 (電子技術総合研究所)
副査	筑波大学教授 理学博士 住 斉
副査	筑波大学教授 理学博士 植 寛 素
副査	筑波大学教授 理学博士 高 田 慧
副査	筑波大学助教授 工学博士 常 次 宏 一

論文の内容の要旨

電子的機構の超伝導モデルとして最も簡単な二鎖ハバード模型について数値的研究により次の3点の結論を導く。即ち(1)比較的小さいモデル系で見出された超伝導性がバルクの極限でも生き残る、(2)現実には除くことのできない電子間長距離クーロン相互作用が超伝導を消滅させることはない、(3)現実の系に存在するトランスファー・エネルギーの長距離部分が好適な値を取る場合に超伝導を強化する、の3点である。

まず変分モンテカルロ法で Gutzwiller 斜影した BCS 型超伝導波動関数を用いて決めたラング (横木) 当たりの超伝導凝縮エネルギー ΔE のサイズに関するスケール則を研究し、バルクの極限で超伝導状態が生き残るかどうかを研究している。ラング方向のトランスファー・エネルギー $t_d = 1.5t$ (t は鎖方向の最近接サイト間トランスファー・エネルギー)、オンサイト・クーロン・エネルギー $U = 8t$ 、電子密度 = 電子数 / 電子サイト数 = $5/6$ 、という特定のパラメーター・セットの場合、ラング数 N が $12 \sim 72$ の時 ΔE が $\Delta E/t = 0.00138 + 0.413 \times (1/N)^{1.83}$ というスケール則を満たすことを示し、バルクの極限で $0.00138t$ という有限なラング当たりの凝縮エネルギーが生き残ることを結論する。また運動量分布関数 $\langle n_k \rangle$ を計算してこの時結合性バンドはフェルミ準位までバンド的に占有されているが、反結合性バンドの電子はすべての k 点に 10% 程度にほぼ一様に、従って、非バンド電子的に入っており、この意味でバンド占有状況がワンバンド的であることを示し、ワンバンド的である範囲内で t_d が最下限の値を取る時に超伝導が最も安定であることを示唆する。スピン密度波相の凝縮エネルギーも計算するが、超伝導相の方がより安定であることを確かめる。

現実には二鎖ハバード系を合成すると、最も簡単な二鎖ハバード模型で考慮していないクーロン相互作用の長距離部分が必ず存在し、2バンド模型の超伝導相を壊す可能性が指摘されていた。6ラング10電子の系を厳密対角化法で取り扱い、超伝導相の発達したパラメーター領域がクーロン相互作用の遠達部分の増大と共にどの程度縮小するかを計算する。その結果は、現実的なパラメーターセットでも、超伝導相が減少はするが消滅する程劇的な超伝導破壊効果はもたらされないことが示される。その原因としてクーロン相互作用の中にラング上のスピン-重項を安定化させる作用があること、遠達成分が実効的に次近接サイト間の斥力を実効的に小さくすることなどを指摘する。

第三の問題として、遠達的なトランスファー・エネルギーによる二鎖ハバード模型のバンドを修飾する、即ち、反結合性バンドの下端がフェルミ準位近傍にある場合にその付近の状態密度を増大させることにより、超伝導相をより安定化させ得る可能性を変分モンテカルロ法により研究する。鎖間の第二近接サイト間のトランスファー・エネルギー t_{d2} および鎖方向のそれ t_2 を導入し、上述の観点からそれらに好適な値を与えた時、超伝導電子対相関関数をはっきりと増大することが示される。現実には超伝導の見つかった梯子系 $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ の電子帯がこの好適な状況に近い特徴を示していることを指摘し、二鎖ハバード超伝導機構がこの物質で働いている可能性が強いことを示唆する。

審 査 の 結 果 の 要 旨

梯子型の物質の超伝導の研究は理論的にも実験的にも近年非常に盛んになった。二鎖ハバード模型の超伝導の安定度を支配する物質パラメーターとパラメーターへの依存性を明らかにするこの研究は研究の最前線への重要な貢献であり、物質工学の学位論文に相応しい内容である。

よって、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。