

論文内容の要旨

論文題目 Superconductivity mediated by spin and charge fluctuations

(スピン揺らぎおよび電荷揺らぎに媒介された超伝導)

氏名 大成 誠一郎

強相関電子系における超伝導の発現機構については、スピン揺らぎ媒介機構、電荷揺らぎ媒介機構等が研究されてきた。等方的ではなく電子間斥力メカニズムを示唆する異方的なペアリング対称性を持つ銅酸化物高温超伝導体の発見以降、強相関電子系の超伝導発現機構の研究は精力的に行われており、銅酸化物超伝導体は反強磁性近傍に超伝導を持つことを一つの根拠として、スピン揺らぎ媒介機構に由来するものではないかというコンセンサスが得られつつある。

電子機構超伝導による異方的ペアリングにおいては超伝導のギャップ関数は節（ノード）をもつが、普通の結晶格子の場合、ギャップ関数のノードがフェルミ面を横切ることになる。このことや、ペアリング相互作用が元の斥力相互作用よりも小さいことから、出発点となる電子エネルギーのスケールから2桁も超伝導転移温度が低くなると考えられる。しかし最近、黒木・有田の研究により、2次元の非連結フェルミ面をもつ系においては、超伝導ギャップ関数がフェルミポケット内で一様な符号を持ちフェルミポケット間では反対の符号を持つことが可能であり、これにより著しく超伝導転移温度を上昇させ得ることが理論的に提案された。

本論文の目的は、

- (1) スピン揺らぎの構造と超伝導との相関を詳細に調べるため、3次元系で非連結なフ

フェルミ面を持つ格子について、系統的にスピン揺らぎの構造（スピン感受率の大きさや波数・振動数依存性）と超伝導転移温度、ペアリング対称性との関係を特にフェルミポケットの形状やサイズとの関連も含めて解明すること、

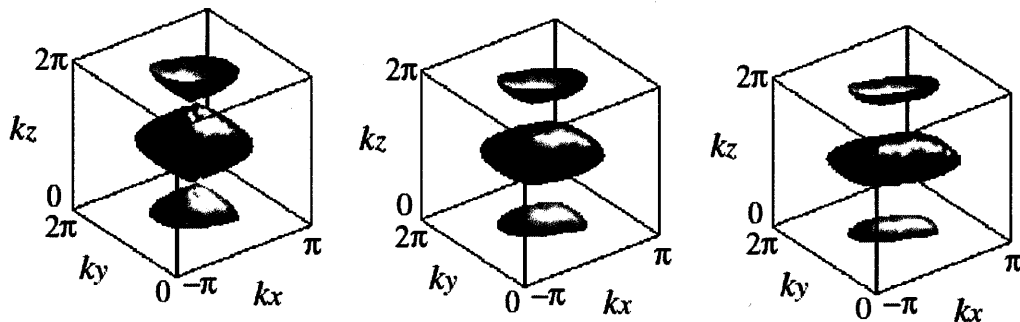
- (2) 一般的にスピン揺らぎだけではなく電荷揺らぎも考慮することにより、従来発現することが困難であったスピン・トリプレット超伝導が理論的にどのように実現させ得るかを解明し、さらにスピン揺らぎと電荷揺らぎが共に大きい場合に超伝導対称性に及ぼす影響を詳細に研究すること、
- (3) 遠距離相互作用の極限であり、連続空間（並進対称）系である電子ガスにおける超伝導と、近距離相互作用の極限である on-site 斥力を格子上で考えるハバードモデル（ハーフフィリングが特別な点であり、モット・ハバード転移等がある）における超伝導の間のクロスオーバーを調べること

である。

結果として、

- (1) 3次元において複数のバンドを持つ格子上でハバードモデルを考えた。自己エネルギー、感受率、ギャップ関数の波数依存性を取り入れることが出来、揺らぎ交換のファインマンダイアグラムをRPA的に足し合わせたものを有効相互作用とする、揺らぎ交換（FLEX）近似を用いて、セルフコンシステントにグリーン関数、自己エネルギー、感受率を求め、それらをエリアシュベルグ方程式に代入することにより超伝導転移温度と超伝導ギャップ関数を得た。その際、エリアシュベルグ方程式の最大固有値 λ が1より小さい場合においても、様々なペアリング対称性に対する λ の大きさの順番が、より低温でも変わらないと仮定した。

これにより、3次元でも非連結フェルミ面を持つ格子を考案し、3次元系においてもフェルミポケット内で同符号を持ちフェルミポケット間で異符号を持つ場合に、超伝導転移温度が飛躍的に大きくなり得ることを見出した。さらに、ポケットがコンパクトでありポケット間があまり接近していないほうが、フェルミ面内でギャップ関数が同符号を取ることをバンド内のペア散乱が妨げにくいので、超伝導転移温度が上昇することが分かった。（図1）



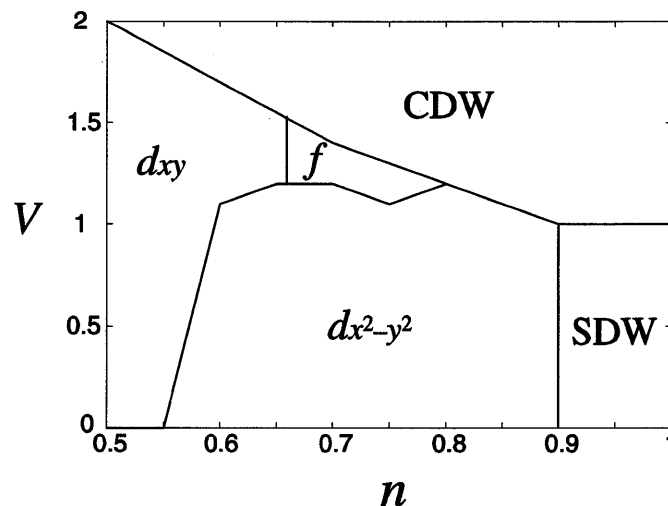
(図1) フェルミ面の形状をコントロールする格子パラメータを変化させた時の3次元フェルミ面の変化の例、右に行くほど超伝導転移温度が上昇。

スピン揺らぎの構造と超伝導の関係としては、一般的に、ネスティングが良くスピン揺らぎのピーク値が大きいほうが超伝導には有利に働くが、ネスティングが強すぎると反強磁性がオーダーしてしまう。また、場合によってはピークだけでなくピークの広がりの方が重要になってくることがあり、ピーク値とピークの広がりとの競合が重要な要因でありうることを提案した。ピークを広くする要因としては、フェルミ面近傍の状態密度が密接に関わっていることが分かった。

3次元において非連結フェルミ面を持ついくつかの格子を提案した中に層状蜂の巣格子があるが、この格子は現実物質としては、近年発見された MgB_2 がもつ。この物質パラメータについて電子相関からの超伝導を見積もったところ、電子相関のみでは超伝導が発現できない領域にあるが、エリアシュベルグ方程式の解の一つにバンド内で符号が一樣であるものが存在するので、超伝導の主因がフォノン機構だとしても電子間斥力がこのペアリングを助け得ることを示唆した。

- (2) 電荷揺らぎをコントロールするため、on-site 斥力に加えて隣接 site 間斥力相互作用 V を導入した2次元拡張ハバードモデルに FLEX 近似を用いて求めた結果は以下のようなものである。

正方格子について相図(図2)を作成したところ、 V の大きな領域では電荷密度波(CDW)が発生するのが分かった。また、超伝導転移温度より高温における計算ではあるが中間的な電子密度(n)において CDW に隣接した領域でスピン・トリプレット f -wave 超伝導が発現する可能性があることが新たに見出された。またスピン・シングレット d 波の領域内でも n や V を変化させると dx^2-y^2 と dxy ペアリング間で遷移が起こることが分かった。



(図2) 正方格子の相図、横軸：電子密度 n 、縦軸：最近接電子間斥力 V 。

これらの超伝導対称性を支配する要因として、同程度の大きさで共存するスピン揺らぎと電荷揺らぎのピークの高さや位置、特に両者のピーク位置が格子や電子

密度に応じて同じであるのか違うのかが重要な要因になりうることを見出した。

現実物質との対応として、実験的にスピン・トリプレット超伝導であることが明らかになっている Sr_2RuO_4 に対して、この物質の γ バンドについて次近接ホッピングまで考慮した計算を行った結果、高温における計算ではあるが、やはり V が大きく CDW に隣接した領域でスピン・トリプレットが発現しうることが分かった。その際得られたペアリング対称性は $\sin(k_x+k_y)$ であり、実際に超伝導転移温度以下ではこれと縮退した解を重ね合わせ、時間反転対称性を破る $\sin(k_x+k_y) + i \sin(k_x-k_y)$ であることを予想した。この解は、出口らによる最近の回転磁場中の比熱の実験とコンシステントである。

- (3) (2)では隣接サイト間の相互作用（電荷揺らぎを増大させる）を取り入れたが、相互作用をさらに長距離 ($1/r$ 的) にした場合を考慮するために第 1 2 近接までの電子間斥力を考えた拡張ハバードモデルに乱雑位相近似 (RPA) を用いて計算を行った。

ハーフフィリング近傍では長距離相互作用でも依然としてスピン揺らぎが電荷揺らぎに比べて大きいため dx^2-y^2 と dxy が最も転移温度の高いペアリングになったが、この場合もスピン揺らぎのピーク位置が重要な役割を担っており、格子系である効果が生きている。一方希薄な電子密度においては、電荷揺らぎはスピン揺らぎに匹敵する大きさを持ち、 s -wave と p -wave が発現することを見出した。これは高田による電子ガスの超伝導理論で結論されている電子密度に対する超伝導対称性の発現順と一致している。

第 1 2 近接まで電子間斥力を考えたモデルでもプラズモン機構やモット転移を取り込めないという点で、両極端のクロスオーバーを記述している訳ではないが、電子ガスと格子モデルを繋ぐモデルとして超伝導対称性を議論しうることが示唆される。

全体を通して得られた描像は、超伝導対称性を決定する要因としてスピン揺らぎと電荷揺らぎの大きさの競合とピークの位置及び広がりが必要であり、バンド間ネスティングは基本的には超伝導に有利にはたらくが、強いほど良いわけではなく、反強磁性との競合も含め上記のピーク位置・広がりを考慮する必要がある。例えば非連結フェルミ面において、各ポケットのギャップ関数を定符号にしたい場合、フェルミ面が離れてコンパクトであることも重要であるというところに現れる。

また、一般的に電荷揺らぎはスピン・トリプレット超伝導に有利に働き、CDW 近傍にスピン・トリプレット超伝導が発生する相図が示唆される。