

論文審査の結果の要旨

氏名 手塚 真樹

銅酸化物高温超伝導体の研究経過からも明らかなように、超伝導機構を微視的に解明する作業は大変な困難を伴う。修士（理学）手塚真樹提出の学位請求論文もこの種の難問にアタックしている。とりわけ、電子間クーロン斥力とフォノンを媒介とする電子間引力が共に強く、お互いに競合する系での超伝導発現条件を大規模な数値計算を駆使して明確にしようとするものである。なお、この論文では、このタイプの斥力引力競合系のすべてについて調べ尽くしたわけではないが、少なくとも1次元系に対して、これまでになされた同種の研究よりもずっと確度の高い有用な結果を得た。また、密度行列繰り込み群(DMRG)法の改良に向けた試みはこの系への応用だけに止まらず、汎用性があると判断され、これも高く評価される。

さて、英文で4章からなる本論文の第1章では、まず、アルカリ原子添加のフラレン固体を含む有機超伝導体が紹介された。そして、そのような物質系をうまく記述すると思われるハバード・ホルスタイン(HH)モデルが導入された。このHHモデルが本理論研究の具体的な対象であるが、このモデルには電子の隣接サイト間跳び移り積分 t を単位として独立な3つのパラメータが含まれる。それらはオンサイト・クーロン斥力 U 、局所フォノンエネルギー ω_0 、および、そのフォノンを媒介とした電子間引力の大きさ λ である。そして、これら3つのパラメータ空間における基底状態相図の作成が本研究の主要目的である。この際、超伝導出現の可能性が高いのは $U \sim \lambda \sim \omega_0$ の場合ではないかと想像されるが、これは解析的な手法があまり有効に働かない状況であるため、数値的研究、特に、DMRGの必要性が明確にされた。なお、DMRGの特徴から基本的に系の空間次元は1とされ、また、電子密度はハーフフィルドが中心とされた。

次の第2章では、まず、既に長い研究の歴史を持つHHモデルに対する過去のアプローチとそれぞれの研究結果が取り纏められた。なかでもDMRGについては、初歩的な紹介から始めて現状の分析まで行い、それらを踏まえてDMRG法を一層強力にしてフォノン空間の大自由度を取り扱う上で計算の精度・速度共に格段の向上をもたらす(Recursive Sweep法と名付けられた)改良法を提案した。

本論文の中心である第3章では、DMRG-Recursive Sweep法を最大64サイトの1次元HHモデルに適用した結果が示された。特に、各種の相関関数のべき的

減衰指数を比べることによって、この模型の相図が与えられた。なお、ここで考慮されたものは、 $\lambda \gg U$ で安定化される電荷密度波(CDW)相 (あるいは、電荷秩序(CO)相)、 $\lambda \ll U$ で安定化されるスピン密度波(SDW)相、そして、その中間の $\lambda \sim U$ の状況で出現するかもしれない金属相、なかんずく、s波、p波、d波の各超伝導相である。また、非断熱効果を制御するものとしての ω_0 の重要性にも十分な注意が払われた。

得られたハーフフィルドの系における相図は図 3.15 にまとめられた。基本的な状況は事前に予想されたものから大きく外れてはいないが、超伝導が支配的になる領域は存在しないことが明言された。一方、具体的な応用対象は明確でないが、ハーフフィルドからはずれた場合や次近接サイト間跳び移り積分 t' がゼロでない場合には、超伝導が支配的になる領域があると言及した。なお、十分な解析がなされていないものの、 ω_0 が有限のある領域で、いわゆる g オロジーの結果とは一致しない (朝永ラッティンジャー液体からはずれる) と示唆される結果も得ていて、大変に興味深い。

最後に第 4 章では、本研究で得られた新しい研究結果が要約され、将来の課題が列挙された。なお、本論文の末尾には第 2 章の補遺として計算技法、とりわけ、DMRG と動的平均場近似 (DMFT) との結合法に関する解説がつけ加えられた。

以上、各章の紹介とともに本論文で得られた物理学上の知見を解説した。有機超伝導体を理解する上で重要な模型の一つである 1 次元ハバード・ホルスタイン模型の物理的性質、とりわけ、超伝導状態の出現状況に関して確度の高い結果を得たこと、そして、それを可能にした DMRG-Recursive Sweep 法の開発など、基礎物理学への十分な貢献が認められる。したがって、審査員全員が学位論文として十分な水準にあり、博士 (理学) の学位を授与できると判定した。なお、本論文の内容の大部分は青木秀夫氏や有田亮太郎氏らとの共著として Physical Review Letters 誌や Physica B: Condensed Matter 誌、AIP Conference Proceedings 誌に既載されているが、これら 3 つの論文の第一著者である論文提出者が主体となって計算及び結果の解釈を行ったものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断される。また、この件に関して青木氏や有田氏の同意承諾書が提出されている。