

# 論文審査の結果の要旨

氏名 西 口 和 孝

銅酸化物高温超伝導体における超伝導機構の解明は、銅酸化物超伝導体の発見以来 20 年以上未解決で、物性物理学最大の難問として残されている。蓄積された多くの実験事実のなかでも最も顕著なもののひとつとして、単位胞当たりの  $\text{CuO}_2$  面の枚数の増加とともに超伝導臨界温度  $T_c$  が上昇する現象が広く見られ、高温超伝導機構解明の鍵を握る現象と考えられてきた。本論文は、このような多層系銅酸化物超伝導体の  $T_c$  上昇の機構を理論的に検討したものである。

本論文は 7 章からなる。第 1 章は本論文への導入として、銅酸化物高温超伝導体一般についての説明と、多層系銅酸化物超伝導体の物性の紹介、および本研究の目的が述べられている。

第 2 章では、本論文に用いた第一原理計算の手法とプログラムについて詳しく述べた後、 $\text{CuO}_2$  面を 1 枚、2 枚、3 枚持つ水銀系銅酸化物超伝導体についての計算結果が示されている。とくに、フェルミ面の形状とフェルミ準位を横切るバンドの軌道成分が示されている。続く第 3 章では、本論文で超伝導特性の計算に用いたモデルと手法である多バンド・ハバード・モデルと揺らぎ交換近似 (FLEX 近似) について説明している。

第 4 章以降は、計算内容の詳細と計算結果について述べられている。第一原理バンド構造のダウンフォールディングによって面内および面間のワニエ軌道間の移動積分が求められ、多バンド・ハバード・モデルのパラメータとして採用している。FLEX 近似を多バンド系へ拡張した後、多バンド・ハバード・モデルに対してエリアシュバーク方程式を FLEX 近似で解き、方程式の固有値が 1 を超える温度を  $T_c$  と見做して超伝導特性を議論している。第 4 章では、まず、 $\text{CuO}_2$  面間の 1 電子の移動が超伝導に及ぼす影響が調べられている。面間の移動積分を大きくすると多層系ではエリアシュバーク方程式の固有値が低下すること、 $\text{CuO}_2$  面の枚数が多いほど低下の程度が大きいことが示され、面間の 1 電子移動は超伝導を抑制する方向に働き、多層系における  $T_c$  の上昇を説明できないことが示されている。

第 5 章では 2 層系超伝導体に話を限り、前章で調べられた 1 電子移動の代わりに、Suhl および Kondo が最初に提唱した反平行スピンをもつ 2 電子の対がバンド間を移動することによって  $T_c$  が増強する機構を、多層系銅酸化物に適用し超伝導特性が調べられている。FLEX 近似を電子対移動も正しく扱えるように

拡張した後にエリアシュバーク方程式の固有値を求め、面間の電子対移動が実際に  $T_c$  を大きく上昇させることを見出している。面間の電子対移動により、運動量空間での電子間引力の異方性も強くなり、d波超伝導を増強することも示されている。このように、面間の電子対移動は  $T_c$  を上昇させる効果があるが、一方で電子の自己エネルギーを増加させて  $T_c$  を抑制する効果もあり、両者の競合の結果として前者が勝ち  $T_c$  が上昇していることが指摘されている。

続く第6章では、面間の電子対移動の超伝導特性に及ぼす影響を3層系超伝導体でも調べ、 $T_c$  が  $\text{CuO}_2$  面の枚数の増加とともにさらに上昇することが示されている。ただし、2層系から3層系への  $T_c$  の上昇は、1層系から2層系への  $T_c$  の上昇ほどは大きくなく、実験で観測されている3層系で  $T_c$  がピークをとる現象、4層系以降で  $T_c$  が低下する現象を反映している可能性がある。3層系では、両側を  $\text{CuO}_2$  面に挟まれた中間の  $\text{CuO}_2$  面が、 $T_c$  増強効果においても、自己エネルギーによる  $T_c$  抑制効果についても大きく、結果として  $T_c$  の上昇につながっている。

最後の第7章で以上の結果がまとめられ、本論文で得られた新しい知見と今後の展望がまとめて述べられている。とくに、面間電子対移動の行列要素を第一原理的に評価することが、本論文で提唱されている多層系高温超伝導体における  $T_c$  増強機構を確立するのに重要であることが述べられている。

以上のように、本論文では多層系銅酸化物高温超伝導体における  $T_c$  の上昇を説明するために、第一原理計算に基づいてモデルを構築し、面間の電子対移動が有力な機構であることを示しており、高温超伝導機構の理解に重要な寄与をしている。なお、本論文は青木秀夫、黒木和彦、有田亮太郎、岡隆史の各氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって計画し理論計算を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。