



Title	Theoretical study of electron correlation driven superconductivity in systems with coexisting wide and narrow bands
Author(s)	小倉, 大典
Citation	大阪大学, 2019, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/72640
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

論文内容の要旨

氏 名 (小倉 大典)	
論文題名	Theoretical study of electron correlation driven superconductivity in systems with coexisting wide and narrow bands (ワイドバンド・ナローバンド共存系における電子相関を起源とする超伝導の理論的研究)
論文内容の要旨	
超伝導の発現機構は、1950年代にBardeen, Cooper, Schriefferによる理論(BCS理論)により微視的理解が与えられた。BCS理論においては、電子-フォノン結合を起源とする電子間引力により、Cooper対と呼ばれる電子対が形成され、それが凝縮することにより超伝導が発現するとされることから、この機構における超伝導転移温度(T_c)はフォノンのエネルギースケール(Debye周波数)で特徴づけられ、したがって高いT_cを得ることは難しいと考えられる。これを解決する方策として、純粋に電子相関を起源としフォノンが介在しない超伝導機構を考えることができる。 そうした超伝導機構に基づくと考えられる超伝導体の典型として、常圧下のバルク物質で液体窒素温度以上のT_cを持つ唯一の物質系である銅酸化物高温超伝導体が知られる。現在、常圧下で最も高いT_cはおよそ135 Kであるが、電子のエネルギースケールは$O(1)$ eVであることを思えば、T_cはその1%程度に過ぎないことに気が付く。これはBCS理論でよく理解される超伝導のT_cがDebye周波数の数%に達するのとは対照的である。この意味で、電子相関起源の超伝導にはT_c増強の余地が残されていると期待できる。超伝導に理想的な状況として、単純には、電子の有効質量を軽く、Cooper対形成のペアリング相互作用(“糊”)を強くすればよいように思われるが、実際には、糊をあまり強くすると、電子が強く繰り込まれて有効質量が増大し、T_cを下げることにつながる。たとえば銅酸化物の場合、磁気的な揺らぎによるペアリング相互作用が最大となるキャリア数のときは、系がMott絶縁体となり超伝導を示さない。 こうした問題を解決するために、先行研究ではワイドバンド・ナローバンド共存系と呼ばれる多バンド系が提案された。Fermi準位がナローバンドには掛からないが、その直下/直上に位置する場合、Fermi準位を切るワイドバンド上の電子はそれほど強くは繰り込まれず、一方でナローバンドの大きな状態密度に起因して、強いペアリング相互作用を得ることができ、超伝導に有利な状況になると期待される。ここで重要なのは、Fermi準位をナローバンド中に置いてしまうと、その電子の重さが超伝導に不利に働くという点である。この機構に基づき先行研究では、梯子型銅酸化物への多量の電子ドーブによる高温超伝導が提案されたが、揺らぎ交換近似という弱結合理論に基づく提案であり、その妥当性には疑問が残る。また、実際の梯子型銅酸化物に対するキャリアドーブは困難であることが知られており、より現実的な候補物質の提案が望まれる。 以上の背景を受けて、本研究では、これらの点に関して理論研究を行った。第1章では、超伝導及び典型的な高温超伝導体である、銅酸化物超伝導体、鉄系超伝導体を紹介し、第2章では、本研究に関連する先行研究について説明した。第3章では、本研究で用いた理論・計算手法に関して述べた。ここで、揺らぎ交換(FLEX)近似と動的平均場理論(DMFT)を組み合わせた手法(FLEX+DMFT法)の多バンド系への拡張を行った。この手法を単一バンドの系に適用した先行研究はあるが、多バンド系に拡張したのは本研究が初めてである。この手法を採用した理由は、(1)ワイドバンド・ナローバンド共存系における超伝導では、DMFTで記述されるような、局所的な強い電子相関と、FLEX近似で記述されるような非局所的なスピンや電荷の揺らぎを考慮する必要があるため、(2)DMFTの他の拡張理論に代表される、局所・非局所的な電子相関の効果を取り扱うことのできる手法は、通常、計算コストが大きく、系統的な解析を行うのには向かないが、FLEX+DMFT法では計算コストがそれほど大きくならないためである。 第4章では、FLEX+DMFT法を実際に多バンド系に適用し、ワイドバンドとナローバンドの共存を利用したペアリング機構において、強相関効果がどのような役割を果たすのかを系統的に解析した。その結果、擬一次元・二次元的な電子状態においては、強相関効果を考慮したとしても超伝導の増強が期待できること、また、常伝導状態において、強結合の補正項に起因して、強相関系に特徴的な擬ギャップ構造がみられることを明らかにした。また、ナローバンドとワイドバンドのバンド幅が等しい状況においても同様の傾向が得られたが、これは相互作用によるバンドの変形の効果を考慮すると自然に理解できる可能性があることを提案した。第5章では、Ruddlesden-Popper型というある種の層状化合物において、遷移金属のd軌道の異方性に起因した梯形的な電子状態が隠れていること、さらに$\text{Sr}_3\text{TM}_2\text{O}_7$ ($\text{TM}=\text{Mo}, \text{Cr}$)が多量に電子ドーブされた梯子型銅酸化物と類似の電子状態をもち、これに起因して高温超伝導が期待できることを、第一原理計算と揺らぎ交換近似に基づき提案した。層状化合物において梯子型化合物に類似の電子状態	

が隠れていることは、本研究で初めて明示的に指摘されたものである。また、これらの化合物は既に合成の報告があるが、現在のところ超伝導は観測されていない。本研究ではその理由及び解決策も提案した。第6章では本研究の総括を行った。

これらの結果から、本研究は上述のワイドバンド・ナローバンド共存系における超伝導増強機構における問題点に対し、一定の解決を与えるものと考えられる。

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (小 倉 大 典)			
	(職)	氏 名	
論文審査担当者	主 査	教授	黒木和彦
	副 査	教授	阿久津泰弘
	副 査	教授	小口多美夫
	副 査	准教授	Slevin, Keith
	副 査	准教授	宮坂茂樹

論文審査の結果の要旨

超伝導に理想的な状況として、単純には、電子の有効質量を軽く、Cooper 対形成のペアリング相互作用(“糊”)を強くすればよいように思われるが、実際には、糊をあまり強くすると、電子が強く絡り込まれて有効質量が増大し、 T_c を下げることにつながる。電子相関起源の超伝導においてこの問題を解決するために、先行研究ではワイドバンド・ナローバンド共存系と呼ばれる多バンド系が提案された。Fermi 準位がナローバンドには掛からないが、その直下/直上に位置する場合、Fermi 準位を切るワイドバンド上の電子はそれほど強くは絡り込まれず、一方でナローバンドの大きな状態密度に起因して、強いペアリング相互作用を得ることができ、超伝導に有利な状況になると期待される。この機構に基づき先行研究では、梯子型銅酸化物への多量の電子ドーピングによる高温超伝導が提案されたが、揺らぎ交換近似という弱結合理論に基づく提案であり、その妥当性は十分に検証されていない。また、実際の梯子型銅酸化物に対するキャリアドーピングは困難であることが知られており、より現実的な候補物質の提案が望まれる。

本研究では、以上の背景のもと、理論研究を行った。まず、計算手法として、揺らぎ交換(FLEX)近似と動的平均場理論(DMFT)を組み合わせた手法(FLEX+DMFT 法)の多バンド系への拡張が行われた。この手法を単一バンドの系に適用した先行研究はあるが、多バンド系に拡張したのは本研究が初めてである。この手法を採用した理由は、(1)ワイドバンド・ナローバンド共存系における超伝導では、DMFT で記述されるような、局所的な強い電子相関と、FLEX 近似で記述されるような非局所的なスピンや電荷の揺らぎを考慮する必要があるため、(2)DMFT の他の拡張理論に代表される、局所・非局所的な電子相関の効果を取り扱うことのできる手法は、通常、計算コストが大きく、系統的な解析を行うのには向かないが、FLEX+DMFT 法では計算コストがそれほど大きくならないためである。

FLEX+DMFT 法を実際に多バンド系に適用し、ワイドバンドとナローバンドの共存を利用したペアリング機構において、強相関効果がどのような役割を果たすのかについて系統的な解析がなされた。その結果、擬一次元・二次元的な電子状態においては、強相関効果を考慮したとしても超伝導の増強が期待できること、また、常伝導状態において、強結合の補正項に起因して、強相関系に特徴的な擬ギャップ構造がみられることが明らかにされた。また、ナローバンドとワイドバンドのバンド幅が等しい状況においても同様の傾向が得られたが、これは相互作用によるバンドの変形の効果を考慮すると自然に理解できる可能性があることが提案された。

次に、ナローバンド・ワイドバンド共存系を現実の物質で実現し得る可能性を探究する研究がなされた。Ruddlesden-Popper 型というある種の層状化合物において、遷移金属の d 軌道の異方性に起因した梯子的な電子状態が隠れていること、さらに $\text{Sr}_3\text{TM}_2\text{O}_7$ ($\text{TM}=\text{Mo}, \text{Cr}$) が多量に電子ドーピングされた梯子型銅酸化物と類似の電子状態をもち、これに起因して高温超伝導が期待できることが、第一原理計算と FLEX 近似に基づき提案された。層状化合物において梯子型化合物に類似の電子状態が隠れていることは、本研究で初めて明示的に指摘されたものである。また、これらの化合物は既に合成の報告があるが、現在のところ超伝導は観測されていない。本研究ではその理由及び解決策も提案された。

以上より、本研究はワイドバンド・ナローバンド共存系における超伝導増強機構における問題点に対し、一定の解決を与えるものである。よって、本論文は博士(理学)の学位論文として十分価値あるものと認める。