OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Theoretical Study on Material Dependence of Superconductivity in Cuprates
Author(s)	寺西, 慎伍
Citation	大阪大学, 2021, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/82327
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

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　名	（　寺西　慎伍　）
論文題名	Theoretical Study on Material Dependence of Superconductivity in Cuprates （銅酸化物における超伝導の物質依存性に関する理論研究）

論文内容の要旨

室温近傍で超伝導転移を示す物質は現代社会に大きな影響を与える。現在知られている超伝導転移温度の高い物質は強い電子相関を持つと考えられるものも多く、物質内部の電子相関を詳細に議論することが高温超伝導物質設計には必要である。本研究では、銅酸化物超伝導体の電子相関の物質依存性を計算物理的手法に基づいて明らかにし、従来の理論では理解出来なかった超伝導転移温度の高低を説明した。また、磁性揺らぎの起源を解明した。さらに、得られた知見を用いて超伝導転移温度の高い物質を提案した。

本博士論文は、申請者が博士課程において行った以下に示す成果を纏めたものである。

(1) 類似の構造をもつ二種の一層型銅酸化物 $HgBa_2CuO_4$ (Hg1201,$T_c \fallingdotseq 100$ K)と$TlBa_2CuO_5$ (Tl1201, $T_c \fallingdotseq 50$ K)に着目した。電子状態計算の結果はHg1201に比べTl1201が超伝導にとって有利な電子状態を保持していることを示唆し、これは現実の転移温度を説明しない。そこで、オンサイトクーロン相互作用の評価を行った。結果としてHg1201における強い電子相関効果がTl1201に比べ高い超伝導転移温度の起源であることが分かった。さらに結晶構造、電子状態を詳細に検討することで、今回評価した電子相関強度の違いは、バッファ層の構造の違いに由来することがわかった。このようなバッファ層による相関効果の整調作用は、超伝導を担うCuO_2面だけでなくバッファ層の効果をも慎重に考慮する必要があることを示唆している。

(2) 近年実験的に示唆されている過剰ドープされた銅酸化物における強磁性揺らぎの発現機構を議論した。ホールドープに伴いオンサイト遮蔽クーロン相互作用は減少し、過剰ドープ領域における反強磁性揺らぎの相対的な減少と強磁性揺らぎの顕在化に寄与しているとの結論を得た。

(3) バッファ層内のドーパントを制御することで、CuO_2面のフィリングを最適ドープ濃度近傍に保ちつつ、さらに超伝導にとって必要となる強い電子相関を持つ一層型銅酸化物の構造をいくつか発見した。これらの物質は一層型銅酸化物において最高T_cの記録を持つHg系銅酸化物の超伝導転移温度を超える可能性があることを明らかにした。

様式７

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　　名　（　寺西　慎伍　）		
論文審査担当者	（職）	氏　　名
	主査　教授	石原　一
	副査　教授	清水克哉
	副査　教授	芦田昌明
	副査　教授	黒木和彦　(理学研究科)
	副査　准教授	草部浩一

論文審査の結果の要旨

超伝導現象が示す多様性は、銅酸化物、鉄系超伝導体、金属水素化物など、複数の系列からなる超伝導体群の存在にも表れている。その元となる個々の超伝導体の固有の性質と多様性の反映として、一群の類似性をもつ物質群に含まれる物質間でも大きな相転移温度の差異が現れる。その起源の解明は、超伝導発現メカニズム自体に対しての理解を深化させることも結びつく。そのため、実際の観測データが示す物質依存性を、系統性をもって説明する理論的な枠組みを与えることは、物理学上の重要な課題と言える。

論文提出者の寺西は、一群の銅酸化物高温超伝導体のうち、特に一枚の銅酸化物面がバッファ層に挟まれている構造が積層して形成される一層系銅酸化物に着目した。この系に含まれるHg1201とTl1201は、結晶構造が類似しているにも関わらず、その超伝導転移温度に２倍ほどの差異がある。

寺西は、銅酸化物系特有のバッファ層が与える遮蔽効果にも有意な物質依存性が現れることを世界的にも初めて理論的に提起し、この効果を考慮しなければ従来理論を適用してもなお物質依存性の一部が説明仕切れないことを、本論文第３章で結論している。また本論文の４章においては、遮蔽相互作用強度の物質ごとの決定とバンド構造の同定から定まるハバード型模型を通した超伝導評価法が、確かに超伝導相が現れる銅酸化物系の相図をある範囲で説明できることを議論している。

さらに寺西は、これらの測定データと理論評価値の直接比較に基づき、未だ合成の報告が見られない複数の類似物質系にこの方法を適用し、既知の一層系銅酸化物において最高の超伝導転移温度を発生させているHg1201系をも超える超伝導特性が現れる可能性がある物質構造を提案している。

このように、物質中の電子状態をより忠実に再現しようとする試みから、既知の実験事実に基づく物質依存性を説明し、さらに未知の物質構造の探索にも寄与しうることを示した、本論文に記載の寺西による理論は、学術的価値が高いものと評価される。よって、本論文を、博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。