# ○新潟大学大学院理学研究科物理学専攻


1．　$Cu_{1.8}S$と$Cu_2Se$のマキシマムエントロピー法による構造解析　山本　一樹

2．　銅酸化物高温超伝導体の準粒子状態とその性質　西川泰一郎

3．　銅酸化物高温超伝導体における磁気的相互作用　森　哲

4．　逆磁場配位（FRC）プラズマの傾角モード安定性　菅野龍太郎

5．　非晶質 $Ge_xS_{1-x}$及び $Ge_xSe_{1-x}$化合物の構造　笛木　信宏


## 1．$Cu_{1.8}S$ と $Cu_2Se$ のマキシマムエントロピー法による構造解析

山　本　一　樹

反螢石型の銅カルコゲナイド $Cu_{1.8}S$ と $Cu_2Se$ の高温相と室温相の平均構造と、$Cu_{1.8}S$ の変調構造を単結晶 X 線回折により解析した。平均構造には主反射を使い、変調構造は主反射と 1 次 2 次衛星反射を使いマキシマムエントロピー法により構造を求めた。マキシマムエントロピー法は、モデルを仮定せず、つまり、観測データを先入観なしで処理する。また、求めるのは電子密度分布そのものである。この方法は、電子密度分布が低密度まで明確であり、データに含まれる電子密度分布に関する情報を取り出すのに有利である。

平均構造は、結晶系に cubic をとり、空間郡 $F_{m3m}$ を仮定した。カルコゲン原子は面心立法格子を作り、Cu 原子はその tetrahedral 位置と trigonal 位置を占有している。$Cu_2Se$ の高温相は octahedral 位置を大きく占有される。また高温相は超イオン伝導相であるのでこの位置を経由して Cu 原子は拡散する。一方 $Cu_{1.8}S$ は高温相と室温相ともに octahedral 位置は占有されず、$(00\xi)$、$(0\zeta\zeta)$ 位置が占有される。両相間に大きな差は見られず、室温相は高温相がそのまま秩序化したものと考えられる。イオン拡散は、その位置を経由して行なわれる。

$Cu_{1.8}S$ の変調構造は cubic の<111>方向への変調であり、そこで、結晶系に<111>方向を同一とする rhombohedral をとり、空間郡 $R_{3m}$ を仮定した。この構造は各位置での Cu 原子の占有率の変調が原因であり、単位胞中の 2 カ所の tetrahedral 位置の一方がかなり強く他方がある程度占有される領域から、両方弱い領域を通して、逆が強くなる領域へと移っていく。また Cu 原子は基本格子がずれた格子を作り、これが Cu 原子の薄い領域で不連続となるドメイン構造をもつ。

## 2．銅酸化物高温超伝導体の準粒子状態とその性質

西　川　泰一郎

銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構の解明の手がかりとして、現在この物質が示す正常状態での多くの異常な性質を理解する努力が行われている。特に、ホール係数は通常の場合と異なり、温度依存性を示し、ドーピングに対して、正孔及び電子ドープ超伝導体共に、極めて特徴のある依存性を示す

ことが知られている。これらはバンド理論で解明できないばかりか、強結合相を作用のいろんな現論による解明の試みをも今のところ拒んでいる。一方、最近の角度分解光電子放出の実験によると、これらの超伝導体では大きなフェルミ面が見つかっており、これは定性的にはバンド計算の結果と一致している。また超伝導状態になると、フェルミ面のところにバンドキャップが現われる様子も実験的に見つかっている。

本研究は、2次元 $CuO_2$ハミルトニアンに基づいて、その準粒子のフェルミ液体状態での性質から、上記のようなフェルミ液体描像と一方で矛盾し一方で矛盾しない如く見える多くの実験事業を理解できるとの考察に基づいて、その平均場の基底状態を中心に調べたものである。理論的方法としては、強相関系を扱う為に重い電子系の研究などで開発された、スレーブボゾンの方法を用い、正孔、電子の全ドーピング領域に亘って調べてある。計算は連立積分方程式を系統的に解くもので、この様な精密な計算はスレーブボゾン法でも他にないものである。結果についてはホールドープでは正孔は主に酸素軌道に、電子ドープでは銅の3d軌道に入り、光吸収の実験結果を説明できる。ホール係数の計算では、準粒子が担う電子の電流密度と準粒子のフェルミ面のドーピング依存性とから、ホール係数のドーピング依存性のなぞが説明できることが分った。最後に、光電子スペクトルの計算の為にこの研究で導いた、銅d電子のグリーン関数は、その自己エネルギーを正しく取り込んで閉じ形で初めて求めたもので、最近 Doniach 等によって出されたものより正確で、きれいな形になっている。

## 3．銅酸化物高温起伝導体の磁気的相互作用

森　　哲

銅酸化物高温超伝導体はドーピングのない化合物において、いづれの場合も高い温度（250～300K）で反強磁性相に転移し、その反強磁性相互作用定数 $J$ の非常に大きな物質であることが分っている。高温超伝導は、この状態に少量のキャリヤーをドープすることによって現われるので、そのメカニズムを研究するために、反強磁性状態がドーピングによってどのように壊れていきどんな基底状態が出現するかについて、理論、実験、両面から精力的な研究が現在行われている。この様な物質の反強磁性状態は陰イオンのスピンを媒介とした超交換相互作用で実現していることは古くから知られていたが、ドーピングによるその消失のメカニズムや消失後に現われる新しい状態については、高温超伝導体の発見までは殆ど研究されていなかった。また、その後の研究においても、通常の $t$-$J$ モデルやハバードモデルに代表されるように超交換相互作用定数 $J_S$を一定にした、$-\sum_{\langle ij\rangle} J_S \vec{S_i}\cdot\vec{S_j}$のハミルトニアンを用いて、銅サイトの反強磁性状態やそのゆらぎと超伝導の関係を研究したものが主流である。しかし、ドープされたホールはほとんど酸素軌動に入ることが分っており、酸素スピンを媒介として生じている超交換相互作用の結合定数 $J_S$はドーピングと共に著しく減少する筈である。

本研究は、この様な動機のもとに、反強磁性的な超交換相互作用 $J_S$ のドーピング $\delta$ 依存性と共に、同時にドーピングによって現われる RKKY 交換相互作用 $J_R$ の依存性を系統的に調べたものである。この効果の研究は、近年モスクワの Gorkov グループやシカゴ行の Leoin グループでも行われているが、ここでは2次元（2D）$CuO_2$ 格子の現実的モデルに基づいて、$J_S$ や $J_R$ の $\delta$ 依存性を具体的に示した。また、これらの相互作用定数の表式を具体的に検討し、ドーピングによる $J_S$ や $J_R$ の特徴的変化の様子や、クーロン反発 $U_d$ や酸素 p バンド幅による影響を理解することが出来た。これら相互作用の基本的な物理は、$J_S$ は銅スピンと埋っている酸素スピン間の反強磁性的結合が2回行われる銅サ