

○弘前大学大学院理学研究科物理学専攻

- | | |
|--|-------|
| 1. TiO_2 (Rutile) の 1 次ラマンスペクトルの温度依存性 | 井畑 克祥 |
| 2. ウルツ鉱型 CdS {0001} 面の溶液中及び超高真空中における仕事関数 | 平田 淳 |

○茨城大学大学院理学研究科物理学専攻

- | | |
|--------------------------|-------|
| 1. 反強磁性スピンと相互作用する電子系の超伝導 | 会沢 幸雄 |
|--------------------------|-------|

1. 反強磁性スピンと相互作用する電子系の超伝導

会 沢 幸 雄

反強磁性的に相互作用している局所スピンと磁氣的に相互作用している電子系（またはホール系）について考える。系の構造は局所スピンや電子等が互いに強く相互作用している面が層状にかさなっているようなものである。局所スピンは面間についてもある程度の強さの有効相互作用しているものとする。また、電子の面間の遷移マトリックス要素は充分小さいと仮定する。モデルハミルトニアンは次のようなものである。

$$H = \sum_{\mu, \nu} \epsilon_{\mu} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu} + \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} s_i \cdot s_j + K \sum_{\mu, \nu} s_{\mu} \cdot (c_{\mu+\nu}^{\dagger} c_{\mu})$$

ここで、 $c_{\mu}^{\dagger} = (c_{\mu\uparrow}^{\dagger}, c_{\mu\downarrow}^{\dagger})$ は電子の生成 2 成分スピノルで ϵ_{μ} は異方的な単一電子の励起エネルギーである。最後の項は伝導電子と局所スピンの近藤相互作用で、同一面内でしか働かないとする。K が充分大きいと局所スピンや電子の磁氣的状態は大きく影響をうけることが示されるが、ここでは、 $K = 0$ のときとあまり大きく変化しない場合を考える。このような場合、モデルハミルトニアンから導かれる電子の有効ハミルトニアンから、以下のことが分かった。

まず、面内電子間の相互作用は三重項状態のとき引力となり、パウリの排他原理のために、クーバー対を作るのは非常に困難である。しかしながら面間電子については一重項状態のクーバー対が、電子数密度がある値（面間の遷移マトリ

ックス要素の大きさで決まる)より充分大きければ可能である。そのとき、二つのBCS状態が現れる。一つはギャップレス超伝導状態で、もう一つはギャップの存在するものである。面間の遷移マトリックス要素が十分に小さい場合、温度を下げていくとき、まずギャップレス超伝導状態が現れ、次にギャップのある超伝導状態に移る。このときの相転移は一次となる。

○埼玉大学大学院理工学研究科物理学専攻

1. 高温超伝導に関する非対称2バンド模型の自己無撞着解

倉本 雅子

1. 高温超伝導に関する非対称2バンド模型の自己無撞着解

倉 本 雅 子

1986年以降に発見された酸化物超伝導体は、それまで20K程度であった超伝導転移温度の最高記録を次々に塗りかえ、その結果転移温度は100K以上も上昇した。この間酸化物超伝導についての数多くの研究が行われその物性の一部は明らかにされつつあるが、このような転移温度の高い超伝導の発現機構はほとんど解明されていない。物性についての実験結果に従来の超伝導を説明したBCS理論で説明できるものが多い中で、転移温度が高いこととアイソトープ効果に関する実験結果は従来の超伝導と顕著に異なっている。本論文で扱うbond asymmetric modelは、電子-格子相互作用に基づくBCS機構を適用した上で、この2つの実験事実を説明できるモデルとして提案された。 $T_c \sim 90\text{K}$ をもつ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ は斜方晶構造でのみ超伝導となることがわかっており、銅酸化物超伝導体の CuO_2 の2種類の酸素サイトが異なる1電子ポテンシャルを持つとしたこのモデルは現実的なモデルであると言える。

本論文では T_c の酸化物にドーピングしたホール密度への依存性を調べた実験結果に注目し、bond asymmetric modelにおいてホール密度を自己無撞着に扱う。ハミルトニアンに酸素原子内のクーロン反発エネルギー V を与える項を加えることにより、系の状態密度のホール密度依存性が得られるので、与えられたホール密度に対する系の状態を自己無撞着に解く必要がある。bond asymmetric modelのこのような取り扱いは今までに行われていない。

このようなハミルトニアンに対して、Hartreeの自己無撞着場とBCS理論で知られる対場の2つの場を導入して平均場近似を行う。絶対零度で実現するBCS基底状態に対してと有限温度の場合に対しての計算を行うが、この際有限温度に対する方程式の導出にはCTHFBは近似法を適用した。得られた拡張されたBCS方程式をホール密度についての補助条件下で自己無撞着に解くことにより、系の微視的な物理状態が決定される。方程式の解は、大型計算機(ベクトル・プロセッサ)を用いた数値計算により求められた。この計算から、与えられたパラメータに対するギャップ・パラメータの大きさ、化学ポテンシャルのホール密度依存性が求まり、有限温度についての計算からは比較的高い T_c とアイソトープ効果の消失が得られた。