

## 学位論文題名

Theory of Impurity Effects and Vortex-State  
Thermodynamics of Superconductors

(超伝導の不純物効果と渦糸状態の熱力学の理論)

## 学位論文内容の要旨

近年、2つのギャップが寄与しているtwo-band modelの超伝導として、 $\text{MgB}_2$ の超伝導が注目を集めている。この超伝導は、アイトソープの実験などから電子フォノン相互作用によるものと考えられ、その中でも比較的高い転移温度( $T_c = 40\text{K}$ )を持っていることが報告されている。 $\text{MgB}_2$ は、 $\sigma$ 軌道による円柱状のフェルミ面と $\pi$ 軌道による3次元のフェルミ面を持ち、これらがそれぞれ超伝導ギャップを持っていると考えられている。実験の結果からこれらの大きさは、 $\sigma$ バンドのギャップ $\Delta_\sigma = 6\text{meV}$ 、 $\pi$ バンドのギャップ $\Delta_\pi = 2\text{meV}$ と測定されている。一方、GolubovとMazinは、two-band modelの非磁性的不純物効果を理論的に研究し、転移温度の低下を予想した。 $\text{MgB}_2$ では、neutron照射の実験により転移温度の低下が観測されている。また、カーボンやアルミニウムをドーピングする実験によっても転移温度の急激な低下が観測されているが、この低下が不純物効果によるものかどうかは議論の余地がある。このことから、 $\text{MgB}_2$ の不純物効果を定量的に計算することは重要なものとなっている。今回の研究では、two-band modelに拡張したEilenberger方程式を用いて、 $\text{MgB}_2$ の実験結果に即したモデルでの非磁性不純物効果を数值的に計算する。そして、その結果をneutron照射の実験結果と比較する。

さらに、本研究では、第2種超伝導の物理量の磁場依存性について計算する。超伝導のギャップの異方性やペアの対称性などの性質を決定するためには、磁場中の物理量の測定が重要な決め手となっている。これらの実験の解析には、ドップラーシフト法などの現象論が、よく用いられている。しかし、実験結果の解析をより正確に行うには、微視的な理論に基づいた定量的な研究が必要である。全磁場領域の定量的な計算を行うには、Eilenberger方程式を解くことが有効な手法となっている。Ichiokaらの精力的な研究などにより、Eilenberger方程式を解いて、状態密度やペアポテンシャルなどの計算がなされてきた。しかし、これらの研究は円柱や球など簡単なフェルミ面に対してなされたもので、実際の物質に即したフェルミ面を取り入れた研究はまだなされていない。最近、KitaとAraiによりなされた、tight-binding modelのフェルミ面を取り入れた $\text{H}_{c2}$ の計算は、定量的な計算におけるフェルミ面の詳細の重要性を示唆している。これらのことから、今回の研究では、実際の物質に基づいたフェルミ面の詳細を考慮した場合でも全磁場領域でEilenberger方程式を効率的に解く解法を開発した。さらに、この方法を用いてモデルフェルミ面を持つ系に対し、s-波と $d_{x^2-y^2}$ -波、不純物のある場合とない場合の、いくつかの物理量の磁場依存性を計算する。

## ・ Eilenberger方程式

2章では、はじめに本研究で数値計算の際に用いられるEilenberger方程式について、簡単に紹介する。さらに、Suhl, Matthias, Walkerの研究で提案されたモデルを採用して、two-band modelにEilenberger方程式を拡張する。その際に、方程式に対応する自由エネルギーの表式も与えられる。零磁場でのこの方程式により、バンド間の非磁性不純物散乱があるときの $T_c$ の式

を求めることができる。

次に、磁場中でのEilenberger方程式を、より効率よく解く方法を開発する。考え方の鍵になるのは、微分方程式内の量を、基底関数で展開し、代数方程式に変換して解くというものである。この方法は、Ginzburg-Landau方程式を解く際や、 $H_{c2}$ を求める際に有効的に用いられた。この方法は、フェルミ面の情報を簡単に取り入れることができ、複雑なフェルミ面のデータを用了計算の際に特に強力であると期待される。

・  $MgB_2$  の不純物効果

3章のはじめでは、 $MgB_2$ の実験結果を再現するようなパラメータを用いて、2章で導いた0磁場でのtwo-band modelの方程式を数値計算し、非磁性的不純物効果を調べた結果を示す。本研究では3つの特徴的な場合について計算した。 $T_c$ の不純物依存性では、ある場合に $T_c=0$ となる点があることがわかった。これはまだ実験的には観測されておらず、より不純物効果を強くした実験が求められる。ペアポテンシャルと状態密度の不純物による変化も計算し、特に、状態密度の閾値が不純物に対して単調な変化をしない場合があるということがわかった。最後に、比熱を計算し、neutron照射の実験と比較することによりよい一致が見られた(図1)。この計算により、実験の不純物濃度を正確に評価することができる。

・ 物理量の磁場依存性

3章の後半では、2章で開発した手法を用いて、いくつかの物理量の磁場依存性を計算する。系は、円柱状のフェルミ面を持ち、磁場がz軸方向にかけられているものを考慮し、ギャップの異方性はs-波と $d_{x^2-y^2}$ -波の場合を考え、s-波の場合は特にclean limitとdirty limitに対して計算した。物理量は、ペアポテンシャル、磁化、エントロピー、パウリ常磁性による磁化を計算し、いくつかの温度での磁場依存性を明らかにした。特に、エントロピーとパウリ常磁性による磁化について、s-波と $d_{x^2-y^2}$ -波の場合を比較すると、 $d_{x^2-y^2}$ -波の方が、磁場の増加による増加量が大きく、コア外の準粒子の存在を反映した結果が得られた。また、不純物の増加によって、磁場依存性が線形に近づいていく様子が見られるが(図2)、これは実験と定性的に一致した結果である。

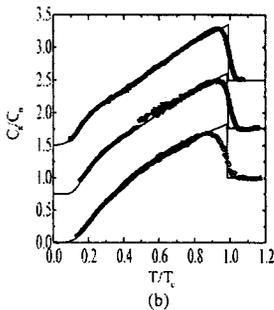


図1 : 比熱の温度依存性を実験と比較。上から、  
 $\tau_{0r} \Delta_{0r} = 10000.0, 3.3, 1.0$

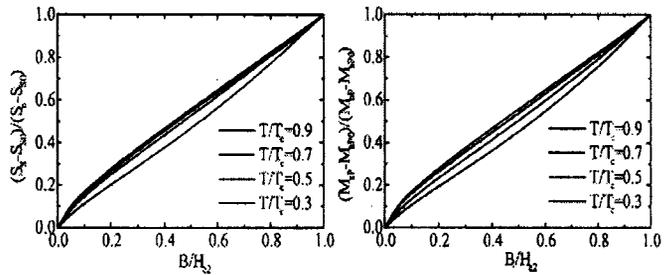


図2 : dirty limitにおけるいくつかの温度でのエントロピー(a)とパウリ常磁性による磁化(b)の磁場依存性。線形に近い依存性を示す。

# 学位論文審査の要旨

主査	助教授	北	孝文
副査	教授	大川	房義
副査	教授	山本	昌司
副査	助教授	小田	研

学位論文題名

## Theory of Impurity Effects and Vortex-State Thermodynamics of Superconductors

(超伝導の不純物効果と渦糸状態の熱力学の理論)

この学位論文は二つの主題からなる。第一は、超伝導  $\text{MgB}_2$  における不純物効果の理論的解析である。第二は、磁場中の第二種超伝導体における熱力学量の新たな計算手法を開発し、モデル計算を行ってその基本的性質を解明したことである。

$\text{MgB}_2$  は、40K という高い超伝導転移温度を示し、かつ、フェルミ面ごとに大きさの異なるエネルギー・ギャップを持つことで注目を集めている物質である。室温付近で金属の性質をもち、 $\sigma$  バンドと  $\pi$  バンドという二種類の軌道が、それぞれ性質の異なるフェルミ面を形成している。この物質に不純物を添加すると、上部臨界磁場が上昇することも報告されている。

本論文では、この  $\text{MgB}_2$  のゼロ磁場における不純物効果を、超伝導の準古典理論を用いて理論的に解析した。まず、従来の準古典理論を、不純物散乱のある2バンド・モデルに拡張した。そして、このモデルを用いて、転移温度の理論的表式を導出し、その不純物濃度依存性を解析的な式として表した。また、状態密度の不純物濃度依存性を計算し、 $\sigma$ - $\pi$  バンド間の不純物散乱が大きくなるにつれ、二つのエネルギー・ギャップに対応した状態密度の二つのピークが、一つに収斂していく様子を明らかにした。最後に、中性子を照射して不純物散乱を増加させた試料における比熱のデータを、上記のモデルを用いて理論的に解析し、実験結果との非常に良い定量的一致を得た。また、この解析により、 $\sigma$ - $\pi$  バンド間の不純物散乱の大きさを定量的に見積もることができた。

一方、第二種超伝導体における物理量の磁場依存性は、エネルギー・ギャップの対称性やクーパー対生成機構に関して、他の実験からは得られない重要な情報を提供する。このような観点から、近年、磁場中における熱伝導率や比熱の磁場方向依存性の実験が活発に行われている。しかし、それらの実験結果の理論的解析は、磁束格子による系の非一様性のため非常に難しく、フェルミ球等の極めて単純化されたモデルを用い、かつ荒い近似を施して理論解析が行われている。

非一様な超伝導体を扱うためにもっとも適した手法の一つが、上記でも触れた準古典アイレンバーガー方程式である。この方程式は、グリーン関数に対するダイソン-ゴルコフ方程式から変数をひとつ消去して得られる。しかも、この操作により物理的本質はほとんど失われない。磁場中の第二種超伝導体に対する従来の理論計算では、簡単なフェルミ面を仮定し、かつ、微分方程式を差分化する方法でアイレンバーガー方程式が解かれてきた。しかし、この方法は計算に時間を

要し、現実の物質における複雑なフェルミ面構造を取り入れることは困難である。しかも、このフェルミ面構造の重要性は、最近の上部臨界磁場の計算でも明らかになっている。この論文では、アイレンバーガー方程式を固有関数で展開し、微分方程式を連立代数方程式に変換して解くという新たな手法を開発している。そして、この手法を用いてモデル計算を行い、エントロピーやスピンド率の磁場依存性を、高温から低温まで、すべての温度で明らかにした。この計算法は、他の物理量の計算にも応用が見込まれ、また、ここでの計算結果は、今後の理論計算の発展における基礎としての重要性を持つと考えられる。

以上の理由により、著者は、北海道大学博士（理学）の学位を授与される資格あるものと認める。