

学位論文内容の要旨

博士の専攻分野の名称 博士(理学) 氏名 山下 博雅

学位論文題名

Quantum Transport Equation for Bloch Electrons and Hall Coefficient
of Nonequilibrium Supercurrents

(Bloch 電子に対する量子輸送方程式および
非平衡超伝導電流に対する Hall 係数に関する研究)

Boltzmann 方程式に代表される輸送方程式は、非平衡系における確率分布の時間発展を直接計算できるという点で非常に優れており、現代においてもその有用性は保たれている。これらの方程式は、確率分布関数に対する非線型方程式となっており、初期値と境界条件の決定により原理的に確率分布関数の時間発展を記述できる。Boltzmann 方程式はドリフト項と衝突項を含んでおり、電気伝導、熱伝導、拡散、粘性などの輸送係数を取り扱う上で極めて有用性が高い。一方、線型応答理論では、微小な外場に対する大域的な平衡状態の応答を計算する。そのため、線型応答理論で計算された輸送係数を含む外部の非線型方程式を解くことでしか外場の大きさを決めることはできない。一般に、輸送方程式は線型応答理論を超えた扱いを可能にする。しかし、Boltzmann 方程式は高温希薄極限でのみ適用可能であり、その導出も Boltzmann 自身の物理学的直観に依る部分が多い。したがって、Boltzmann 方程式に対して量子効果・多体相関を取り入れ、微視的な基礎付けを行なうことは非常に有用であると考えられる。場の量子論を用いた非平衡統計力学によって初めて輸送方程式の微視的導出を試みたのは、1962 年における Kadanoff と Baym の研究である。彼らはグリーン関数法を用いて量子輸送方程式の導出を実行した。その際の手法は次の三点：(i) 対応する Dyson 方程式の導出、(ii) Wigner 表示への変換、(iii) Groenewold-Moyal 積を勾配展開の一次で近似、であり、現代における量子輸送方程式導出の標準的なものであり続けている。しかし、彼らの用いたグリーン関数法は、虚時間を含む松原グリーン関数を実時間へ解析接続するという、複雑なものであった。この点は後に Keldysh により、Keldysh グリーン関数を用いた実時間摂動展開法を用いて取り除かれた。Keldysh はさらに、対応する Dyson 方程式を Keldysh 変換することで、方程式の構造を明瞭化し、Kadanoff らと同様の手続きを経て荷電系の Boltzmann 方程式を導出した。これにより、非平衡系での実時間摂動展開法が確立され、その実用的価値が広まった。以上の研究を通じて、これまで様々な研究者たちにより、固体中の電子に対する輸送現象の理論的枠組が確立されてきた。しかし、それらの研究は自由電子模型に基づいて、さらに電磁場の効果も含まれていないものが多い。1990 年における Buot と Jensen の研

究では Wannier 表示でのハミルトニアンに対して結晶の効果を取り入れたが、電磁場の効果が含まれていなかった。一般に電磁場と結晶の効果をゲージ不変な形で取り込むことは難しい。そこで本研究では、電磁場中における Bloch 電子に対する量子輸送方程式の微視的導出を行なった。まず、非平衡 Keldysh グリーン関数に対する Dyson 方程式を出発点とした。この際のハミルトニアンには結晶ポテンシャルが含まれている。グリーン関数には、Peierls 位相を取り込んだ Wannier 表示を用いることで、電磁場とバンドの効果を取り入れた。このグリーン関数を用いることで、結晶の効果とゲージ不変性を同時に満たすことが可能となる。さらに、結晶と電磁場の効果を取り入れた Groenewold-Moyal 積を導入し、Dyson 方程式に勾配展開を施すことで、量子輸送方程式を導出することができた。本研究で得られた量子輸送方程式の特徴は次の通りである：① 固体電子に対応（結晶運動量とバンドの効果を取り込んでいる）、② 方程式のゲージ不変性が保たれている、③ Landau 量子化の下での輸送現象が記述可能。さらに、導出された方程式は single-band モデルにおいて準粒子近似を施すことで、通常の Boltzmann 方程式に帰着させることができる。また、準古典近似の下では Boltzmann 方程式よりも有用な方程式の導出が可能である。したがって、本研究で得られた量子輸送方程式により、これまでの Boltzmann 方程式や線型応答理論を超える扱いが可能になると期待される。次に、我々は以上の計算で用いた電磁場中における実時間非平衡摂動展開法を、超伝導電流に対する Hall 係数の計算に適用した。超伝導体内部での渦糸運動を解明するため、混合状態での Hall 効果は長い間重要な研究対象とされてきた。様々な物質に対する実験の結果、高温超伝導体において数多くの興味深い現象が発見された。その中でも、転移温度付近における Hall 係数の符号反転は未だ理論的に定式化されておらず、多くの研究者の研究課題となっている。1993 年における Hagen らの実験によると、この符号反転は物質に依らず渦糸状態本来の現象であり、電子の平均自由行程がコヒーレント長と同じオーダーになると実現することが分かった。また、2009 年には Kita により平衡超伝導電流において微視的計算が為され、ギャップ異方性が平衡超伝導電流における Hall 係数の温度依存性に大きく寄与しており、その符号反転を引き起こすことが明らかとなった。一方、渦糸運動に関する現象論的枠組みでは、未だ Lorentz 力とギャップ異方性を同時に取り入れたものは無く、同様に時間発展 Ginzburg-Landau 方程式を基とする微視的理論の中でも、それらを取り入れたものは無い。今回、我々は Lorentz 力を微視的に取り込んだ時間発展する準古典方程式を出発点として、Hall 係数の符号反転の再現を試みた。この Lorentz 力はグリーン関数に対する Peierls 位相の寄与を起因とし、通常の Ginzburg-Landau 方程式や Eilenberger 方程式には含まれていない。また、ギャップ異方性をはじめから取り込んだ。Keldysh 形式を用いることで、グリーン関数の遅延成分と Keldysh 成分を個別に計算することができ、遅延成分から状態密度の線型応答が計算可能で、Keldysh 成分からは分布関数の線型応答が計算可能である。グリーン関数を求める実際の計算では Brandt-Pesch-Tewordt (BPT) 近似を用い、上部臨界磁場付近における平衡渦糸格子 (Abrikosov) 解を求めた。その結果、正常状態では外部電場がかかっても状態密度に変化が現れないことが示され、一方、Keldysh 成分からは超伝導状態に特有の項が現れた。この項は運動量空間における準粒子分布に新たな異方性をもたらし、Hall 係数の符号にも影響を与えるものと期待される。

学位論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称 博士 (理学) 氏名 山下博雅
主査 准教授 北孝文
審査担当者 副査 教授 大川房義
副査 教授 小田研

学位論文題名

Quantum Transport Equation for Bloch Electrons and Hall Coefficient
of Nonequilibrium Supercurrents
(Bloch 電子に対する量子輸送方程式および非平衡超伝導電流に対する
Hall 係数に関する研究)

博士学位論文審査等の結果について (報告)

電磁場中の金属電子が関与する非平衡現象を定量的に理解できるようにすることは、物性物理学における基本的課題のひとつである。しかし従来は、電磁場が小さい極限にのみ適用できる線型応答理論を用いた研究が主に行われてきた。この状況を打開するために、山下氏は、電磁場が強い場合にも使える金属電子の動力学理論を構築することを目指して研究を行った。具体的には、非平衡摂動展開法のケルディシュ・グリーン関数に対するダイソン方程式から出発し、ウィグナー表示と勾配展開法を用いて、金属電子に対するゲージ不変な量子輸送方程式を導出することに成功した。この量子輸送方程式は、ローレンツ力や固体の周期ポテンシャルの効果も取り込んでおり、また、その一極限としてボルツマン方程式を再現する。この方程式は、今後における金属電子の非平衡現象解明において基本的役割を担うものと期待される。

他方、電磁場中の超伝導体の振る舞いに関しても未解明な点が多い。例えば銅酸化物高温超伝導体においては、超伝導転移点近傍においてホール係数の符号が反転することが観測されているが、その起源は未だ不明である。この理論的状況の原因の一つに、超伝導体の基礎方程式であるギンツブルグ-ランダウ方程式や準古典方程式において、ホール起電力の起源となる磁気ローレンツ力が欠落している点が挙げられる。山下氏は、磁気ローレンツ力を含むように拡張された準古典方程式を用いて、超伝導体の電気伝導度テンソルの表式を導出した。この表式を用いると、与えられたフェルミ面に対してホール係数を計算できる。ホール係数は電気伝導度テンソルの非対角成分と関係し、正常状態におけるその符号はフェルミ面の曲率によって決まる。山下氏は、彼が導出した超伝導体のホール係数の表式に、準粒子励起の異方性に関連した超伝導特有の項が現われる事を指摘した。この研究は、ホール係数の符号反転を解明するための大きな一歩であると考えられる。

よって著者は、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。