

酸化物高温超伝導の発見以来、物理や化学の分野で強相関電子系の実験的および理論的研究が盛んに行われてきた。最近では電子間有効相互作用と超伝導ギャップの対称性が議論されている。また、 MgB_2 超伝導体の発見により多重バンド超伝導の実験および理論的研究が盛んに行われてきた。

現在までに二バンドモデルを用いた多重バンド超伝導の理論的研究を行ってきた[1]。多重バンド効果による超伝導状態の安定化と多重超伝導ギャップ関数の存在が示された[3-5]。フェルミ面が二つのバンドを横切るときに、各フェルミ面に超伝導ギャップを生成する可能性がある。電子-格子相互作用による超伝導発現の場合、バンド間電子トンネルがない場合は二つの異なる超伝導ギャップが存在し、バンド間トンネルがある場合は区別がなくなると予想される。また、フェルミ面が二つのバンドを横切の場合は、斥力電子間相互作用でも超伝導発現の可能性がある。さらに電子間相互作用の対称性によっては同一バンド内でも超伝導発現の可能性がある。

本研究の目的はハバードモデルを用いて磁性と超伝導性についての多重バンド効果に関する理論的研究である。さらに物性量とスピン帯磁率との関係を理論的に考察することである。主な研究項目は以下に示す。

- (1) 結晶構造と磁性発現における多重バンド効果
- (2) 超伝導における磁氣的性質と多重バンド効果

図1に示す 2-サイト 2-副格子系を考える。各同一副格子間の transfer 積分を t_1 および t_2 とし、副格子間は t_{12} とする。また、電子間相互作用は各副格子に対して on-site クーロンポテンシャル U_1 および U_2 のみ (ハバードモデル) を考える。

はじめに tight-binding 近似内でグリーン関数を得る。グリーン関数法を用いるとサイト間のスピン帯磁率が計算できる。次に、RPA の範囲内でこのスピン帯磁率と on-site クーロン項 U を無次元まで繰り込むと、on-site および最隣接サイト間有効電子間相互作用が計算できる。また、有効スピン帯磁率も計算できる[6]。

(1) 磁性発現における多重バンド効果

最隣接サイト間有効電子間相互作用から Heisenberg モデルにおける有効交換積分 J が近似的に on-site クーロン斥力の二乗に有効スピン帯磁率を掛けたものに等しくなることが解析的に示される。この有効交換積分の波数は有効スピン帯磁率と等しくなる。有効スピン帯磁率および有効交換積分から磁性における多重バン

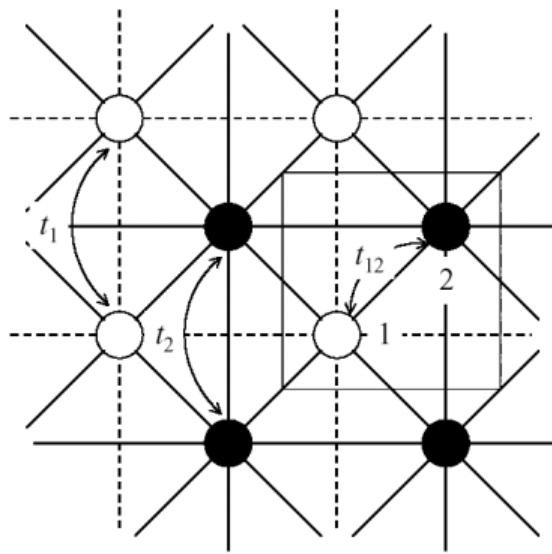


図1 2-サイト 2-副格子系

ド効果が解析できる。

単一バンド系では **half-filling** で反強磁性長距離秩序が現れる。ホールあるいは電子が注入されると反強磁性長距離秩序は弱くなり、長距離秩序ではない弱い反強磁性を示しながら最後に金属へと転移する。2バンド系では以下のようなより複雑な磁氣的性質を示すことが見出せる。**Half-filling** で反強磁性長距離秩序を持つ系にホール注入をすると、その反強磁性秩序は弱まり、代わって短距離強磁性秩序が現れる。さらにホール注入を行うと再び弱い反強磁性に転移を起こす(図2参照)。これらの転移はバンド構造と深く関係している。

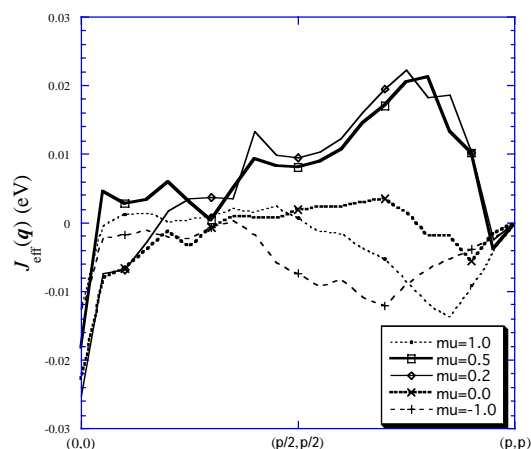


図2 2バンド系の有効交換積分

(2)超伝導における多重バンド効果

ハバードモデルにおいて **ladder** 近似を用いた場合、散乱過程 (**t-matrix**) は近似的にバンド幅に比例する。あるいは有効 **on-site** クーロンポテンシャルはバンド幅に比例するといえる。従ってバンド幅が狭い程、磁氣的相互作用が大きくなるのがわかる。

ladder 近似を用いて同様の取り扱いを行うとバンド間有効電子対散乱過程も評価できる。バンド間有効電子対散乱過程は超伝導状態を安定化させ、超伝導の多重バンド効果をもたらす。同時に有効交換積分は小さくする。2バンド系において **half-filling** で反強磁性長距離秩序を持つ系にホール注入すると磁気秩序は弱くなり、2バンド超伝導が安定になることが示される。

本発表では上記の磁性および超伝導に関する結果および最近得られた結果を報告する。いくつかの結晶構造に対して、グリーン関数法を用いて有効交換積分と有効電子間相互作用が数値的に見積もられ、結晶構造と多重バンド効果の関連性が示される。フェルミ面が二つのバンドを横切る場合、フェルミ面の増減により反強磁性-強磁性転移が見い出される。また斥力 **on-site** クーロンにより超伝導安定領域も見い出された。

References

- [1] H. Nagao et al., *Int. J. Quantum Chem.*, **75**(1999)549.
- [2] H. Nagao et al., *J. Chem. Phys.*, **113**(2000)11237.
- [3] H.Nagao et al., NATO Science Series, II Mathematics, Physics and Chemistry -Vol.67 "New Trends in Superconductivity", (Edited by J.F.Annett and S.P.Kruchinin) Kluwer Academic Publishers (2002), 155.
- [4] H. Nagao et al., *Int. J. Mod. Phys B.*, **16**(2002)3419.
- [5] H. Nagao et al., *Mod. Phys. Lett. B*, **17** (2003) 423.
- [6] H. Nagao, *Int. J. Quantum Chem.*, in press (2004).