

平成 21 年 5 月 22 日現在

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2006～2008

課題番号：18540331

研究課題名（和文） 物質の応答係数および第二種超伝導体の諸性質の定量的計算

研究課題名（英文） Quantitative calculations of response functions of materials and properties of type-II superconductors

研究代表者

北 孝文(KITA TAKAFUMI)

北海道大学・大学院理学研究院・准教授

研究者番号：20186224

研究成果の概要：

熱平衡超伝導電流に対するホール係数の理論的表式を導出し、符号反転の可能性を予言した。第二種超伝導体 $KO_sO_6$ の上部臨界磁場の特徴を理論的に明らかにした。ゴールドストーンの定理と保存則を同時に満足するボーズ・アインシュタイン凝縮相の平均場理論を初めて構成できた。相互作用する量子系の輸送方程式を微視的に導出し、時間発展するエントロピーの表式を得た。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	2,500,000	0	2,500,000
2007 年度	500,000	150,000	650,000
2008 年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	300,000	3,800,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性 II

キーワード：超低温・超伝導

## 1. 研究開始当初の背景

(1) 「熱平衡にある超伝導電流にローレンツ力が働くか否か」という基本的問題に関する明快な答えが存在せず、ホール係数の理論的表式もなかった。標準的なギンツブルグ・ランダウ方程式やそれを低温・高磁場に拡張した超伝導準古典方程式では、ローレンツ力が記述できない。

(2) 物質の応答係数を第一原理的に計算するための理論的表式がなかった。また、第二種超伝導体においては、球状フェルミ面等を用いたモデル計算がほとんどで、現実的なフェ

ルミ面を用いた上部臨界磁場の計算はなかった。

(3) ボーズ・アインシュタイン凝縮系では、ゴールドストーンの定理と動的保存則を満たす系統的な自己無撞着近似法が確立されていなかった。

(4) 非平衡統計力学において、系の時間発展を微視的に記述する量子輸送方程式の系統的導出法が確立しておらず、また、非平衡エントロピーの表式が得られていなかった。

## 2. 研究の目的

(1) ゲージ不変性を適切に考慮することにより、ローレンツ力を含む拡張された超伝導体準古典方程式が、筆者により 2001 年に導出された。この方程式を解くことにより、熱平衡超伝導電流に対するホール係数の理論的表式を導出すること。

(2) 次々に新たな超伝導物質が見つかる中で、第二種超伝導体の上部臨界磁場を、現実的なフェルミ面を取り込んで定量的に計算すること。

(3) ボーズ粒子系に対して、ゴールドストーンの定理と動的保存則を満たす系統的近似法を確立し、輸送係数等の定量的計算に向けた基礎を築くこと。

(4) 非平衡系の時間発展を記述する微視的方程式を導出し、非平衡エントロピーの表式を得ること。また、その方程式より、輸送係数を微視的に導出する基礎を築くこと。

## 3. 研究の方法

問題の定式化には、場の量子論的手法を用いる。この手法は、量子多体系に広く使われて、様々な物理現象の解明に大きな成果を収めてきた。現実の物質の性質の解明は、密度汎関数法等の第一原理的手法を援用して、数値的・定量的に行う。

## 4. 研究成果

(1) 熱平衡超伝導電流に作用するローレンツ力の効果を微視的に明らかにした。筆者が導出した「ローレンツ力を含む超伝導準古典方程式」を熱平衡状態に対して解析的に解き、ホール係数の理論的表式を与えた。特に、異方的超伝導体に対しては、ホール係数の符号が、温度の関数として反転する可能性のあることを理論的に予言した。

(2) パイロクロア超伝導体  $KO_2O_6$  における上部臨界磁場  $H_{c2}$  の詳細な研究を行った。この超伝導体では、温度にほぼ比例する特異な  $H_{c2}$  が観測され、絶対零度での値  $H_{c2}(0)$  は、簡単な評価から見積もられたパウリ極限  $H_p$  をはるかに超えている。まず、この物質では、空間反転対称性の破れによりパウリ常磁性効果が効かなくなっていることを指摘し、上記の特異な磁場依存性を定性的に説明した。つぎに、密度汎関数法により得られたフェルミ面を用いて  $H_{c2}$  の定量的な計算を行い、実験との良い一致を得た。

(3) 固体電子の非平衡な時間発展を記述する量子輸送方程式を微視的に導出した。固体電子の輸送現象は、多くの場合、久保公式等

の線型応答理論で解析される。しかし、線型応答理論では非線形現象は記述できず、また、非平衡系の時間発展を追うことも不可能である。一方、しばしば用いられるボルツマン方程式は、時間発展は記述できるものの、その微視的基礎はあいまいである。そこで、非平衡ケルディシュ・グリーン関数のダイソン方程式を用いて、固体電子の輸送現象を記述する時間発展方程式を微視的に導出した。導出の際には、格子のもつ周期性をきちんと取り入れ、また、方程式のゲージ不変性をきちんと考慮した。その結果、ホール効果も正しく記述できる量子輸送方程式が得られた。また、この方程式に準粒子近似を適用すると、ボルツマン方程式が再現できた。得られた方程式は、今後における固体電子の非平衡現象解明に大いに役立つと考えている。

(4) 1995 年に  $^{87}\text{Rb}$  気体で実現されて以来、ボーズ・アインシュタイン凝縮 (BEC) は実験・理論の両面で活発な研究が行われてきた。この系の特徴の一つは、粒子間相互作用が弱いことであり、理論と実験の定量的比較が可能であるとされている。しかし、BEC の理論には基本的・原理的な問題が残されてきた。つまり、超伝導の BCS 理論に相当する確立した平均場理論が無かったのである。凝縮したボーズ粒子系の低エネルギー励起は音波であることが実験的に知られている。しかし、この系に対して、通常のウィック分解を用いた平均場理論を作ると、励起に非物理的なエネルギー・ギャップが現れてしまう。この困難を解消するために、励起の場  $\psi(\mathbf{r})$  の非対角期待値  $\langle \psi(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_2) \rangle$  を 0 と置くという更なる近似 (ポポフ近似) が導入され、実験の解析に広く用いられてきた。しかし、ポポフ近似で凝縮相の動力学を扱うと、粒子数等の保存則が満たされない。また、ポポフ近似では、相互作用による転移温度  $T_c$  の変化を計算できない。実際、一様系の弱い斥力相互作用による転移温度の変化  $\Delta T_c$  に関しても理論家の間で合意が得られておらず、依然論争が続いている。そこで、従来とは違った視点から、ギャップのない励起を再現し、かつ保存則を満たす平均場理論を構成することを試みた。そして、自由エネルギーをグリーン関数の南部表示に関する汎関数 (ラティンジャー-ワード汎関数) として書き下すことで、所期の要請を満足する平均場理論が構成できた。この平均場理論は、BEC の今後の理論的發展において基本的役割を果たすと考えている。この平均場理論を一様系に適用し、 $\Delta T_c$  の表式や熱力学量の温度変化を明らかにした。特に、全温度領域における比熱・超流動密度等の温度依存性は、ここで初めて計算された結果である。

(5) ボーズ・アインシュタイン凝縮相に対する新たな平均場理論を、多成分ボーズ気体に拡張した。より具体的な内容は下記のとおりである。まず、1成分系におけるヒューゲンホルツ・パインズの定理を多成分系に拡張した。この定理によると、1粒子励起の分枝のなかで、少なくとも1つはギャップレスの分散を持つことになる。次に、(a)保存則を満足し、かつ(b)1粒子励起のひとつが長波長で音波の分散をもつような平均場理論を新たに構成した。この理論は、トラップ・ポテンシャル中の希薄原子気体や量子渦のある系など、一般の非一様系に適用することが可能である。さらに、この理論を一様系に適用し、その全温度領域における熱力学的諸性質と一粒子励起の特徴を明らかにした。

(6) 相互作用するボーズ/フェルミ粒子系に対して、非平衡状態における「エントロピー」の表式を曖昧さなしに導出した。このために用いた手法は、ケルディシュ・グリーン関数法に基づく非平衡摂動展開法である。この方法に基づく非平衡ダイソン方程式を重心座標について勾配展開し、スペクトル関数と分布関数に対する一対の閉じた時間発展方程式を導出した。そして、分布関数に対する時間発展方程式から、「エントロピー」に対する時間発展方程式を導いた。この方程式は、ある極限でボルツマンの「H 定理」を満たすことも示せる。また、このようにして得られた「エントロピー」の表式は、平衡統計力学における「エントロピー」の非平衡系への自然な拡張になっている。このようにして、非平衡状態におけるエントロピーの時間発展を計算できることが可能になった。次に、得られた「非平衡エントロピー」の表式に基づいて、非平衡定常状態に対する次の「エントロピー最大原理」を提唱した。「時間変化のない非平衡定常状態において、確率的にほぼ確実に実現される状態は、力学変数の関数としてのエントロピーを最大にする状態である」。この原理も、平衡状態の「エントロピー最大原理」の非平衡系への自然な拡張になっており、全エネルギー流 $J_e$ など非平衡系特有の力学変数が、エントロピーの新たな独立変数として加わる。最後に、この「エントロピー最大原理」の適用可能性を、パターン形成を伴う非平衡定常状態の典型例である「レイリー・ベナール」対流において確かめた。出発点はボルツマン方程式である。この方程式は、また、第一論文で導出したスペクトル関数と分布関数に対する非線形連立方程式から、希薄・高温極限を取ることで得られる。このボルツマン方程式から、エンスコグが開発した手法である「局所平衡からの展開」を用いて運動量変数を消去し、粒子数・運動量・エネルギー保存則の方程式に帰

着した。さらに、これらの方程式を、「レイリー・ベナール」対流系を念頭において更に単純化し、いわゆる「オーバーベック・ブシネ近似」の方程式系を導き、エントロピーの表式も導出した。最後に、得られた方程式系を数値的に解き、臨界レイリー数 $R_{c\$}$ 以上では、熱流状態よりも対流状態のほうがエントロピーが大きくなっていることを示した。このようにして、提唱した「エントロピー最大原理」が、非平衡定常状態に対する一般の原理として、かなり有望であることを示せたのではないかと思っている。今後は、他の非平衡系について「エントロピー」を導出・計算し、「非平衡系のエントロピー最大原理」の適用可能性を確かめていく必要があると考えている。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 10 件)

北 孝文

「ボーズ凝縮相の有限温度理論」  
日本物理学会誌 **64**, 170-178 (2009), 査読あり

T. Kita,

“Hall coefficient of equilibrium supercurrents flowing inside superconductors”  
Physical Review B **79**, 024521(1-6), 2009, 査読あり

北 孝文

「量子輸送方程式と非平衡エントロピー場の量子論による非平衡統計力学」  
物性研究 **90**, 1-95 (2008), 査読なし

T. Kita and H. Yamashita,

“Quantum Transport Equation for Bloch Electrons in Electromagnetic Fields”  
Journal of the Physical Society of Japan, **77**, 024711(1-9), 2008, 査読あり

T. Kita,

“Entropy Change through Rayleigh-Bénard Convective Transition with Rigid Boundaries”  
Journal of the Physical Society of Japan, **76**, 064006(1-4), 2007, 査読あり

K. Kondo and T. Kita,

“Conserving Gapless Mean-Field Theory of a Multi-Component Bose-Einstein Condensate”  
Journal of the Physical Society of Japan,

76, 024008(1-8), 2007, 査読あり

T. Shibauchi, L. Krusin-Elbaum, Y. Kasahara, Y. Shimono, Y. Matsuda, R. D. McDonald, C. H. Mielke, S. Yonezawa, Z. Hiroi, M. Arai, T. Kita, G. Blatter, and M. Sgrist,

“Uncommonly high upper critical field of the pyrochlore superconductor  $\text{KOs}_2\text{O}_6$  below the enhanced paramagnetic limit”  
Physical Review B **74**, 220506(1-4), 2006, 査読あり

T. Kita,

“Principle of Maximum Entropy Applied to Rayleigh-Bénard Convection”  
Journal of the Physical Society of Japan, **75**, 124005(1-11), 2006, 査読あり

T. Kita,

“Entropy in Nonequilibrium Statistical Mechanics”  
Journal of the Physical Society of Japan, **75**, 114005(1-18), 2006, 査読あり

T. Kita,

“Conserving Gapless Mean-Field Theory for Weakly Interacting Bose Gases”  
Journal of the Physical Society of Japan, **75**, 044603(1-16), 2006, 査読あり

〔学会発表〕(計 13 件)

T. Kita

「Nonequilibrium entropy: Can we defined it unambiguously?」

2009 年 3 月 5 日 ~ 19 日、YIPQS International Molecule Workshop on 「Nonequilibrium quantum field theories and dynamic critical phenomena」(Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University)

北 孝文

「超伝導電流に働くローレンツ力」

2008 年 12 月 8 日 ~ 10 日、第 16 回渦糸物理国内会議(東京工業大学)

近藤佳之・北 孝文・水島健

「Conserving-Gapless 理論による集団励起とその音波の解析」

2008 年 9 月 20 日 ~ 23 日、日本物理学会(岩手大学)講演番号 22aZD-7

近藤佳之・北 孝文・水島健

「Conserving-Gapless 理論による集団励起モードの計算」

2008 年 3 月 22 日 ~ 26 日、日本物理学会(近畿大学)講演番号 23pRF-8

北 孝文

「量子輸送方程式による非平衡統計力学」

2007 年 9 月 21 日 ~ 24 日、日本物理学会(北海道大学)講演番号 21pTJ-3

山下博雅・北 孝文

「固体電子に対する量子輸送方程式の導出」

2007 年 9 月 21 日 ~ 24 日、日本物理学会(北海道大学)講演番号 21 aWA-12

T. Kita,

「A Conserving Gapless Mean-Field Theory for Bose-Einstein Condensates」

2007 年 7 月 23 日 ~ 24 日、International Symposium TOP 2007 「Topology and Singularity in Optical Physics」(Hokkaido University)

北 孝文

「非平衡統計力学におけるエントロピー最大原理」

2007 年 3 月 18 日 ~ 21 日、日本物理学会(鹿児島大学)講演番号 19aWL-6

北 孝文

「エントロピー最大原理のレイリー・ベナル対流による検証」

2007 年 3 月 18 日 ~ 21 日、日本物理学会(鹿児島大学)講演番号 19aWL-8

近藤佳之・北 孝文

「トラップされた Bose 気体の熱力学特性平均場理論による有限温度 BEC の解析」

2007 年 3 月 18 日 ~ 21 日、日本物理学会(鹿児島大学)講演番号 19aWL-6

北 孝文

「非平衡統計力学におけるエントロピー最大原理」

2006 年 12 月 17 日 ~ 19 日、第 14 回渦糸物理国内会議(登別温泉ホテルまほろば会議場)

水島 健・北 孝文

「有限温度における一様ボーズ超流動体の準粒子スペクトルと集団励起モード」

2006 年 9 月 23 日 ~ 26 日、日本物理学会(千葉大学)講演番号 23pRB-8

山下博雅・北 孝文

「超伝導体の帯磁率と de Haas-van Alphen 効果への周期ポテンシャルの影響」

2006 年 9 月 23 日 ~ 26 日、日本物理学会(千葉大学)講演番号 25aZG-12

〔その他〕

ホームページ等

<http://phys.sci.hokudai.ac.jp/~kita/index.html>

<http://www.nims.go.jp/cmssc/staff/arai/index.html>

## 6．研究組織

### (1)研究代表者

北 孝文(KITA TAKAFUMI)

北海道大学・大学院理学研究院・准教授

研究者番号：20186224

### (2)研究分担者

新井 正男(KITA TAKAFUMI)

独立行政法人物質・材料研究機構

計算材料科学研究センター・主任研究員

研究者番号：40222723

### (3)連携研究者

該当なし