



Title	μ SR and DFT Investigations Quantum Electronic States of La ₂ CuO ₄ [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	RAMADHAN, MUHAMMAD REDO
Citation	北海道大学. 博士(理学) 甲第15272号
Issue Date	2023-03-23
Doc URL	http://hdl.handle.net/2115/89413
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	theses (doctoral - abstract and summary of review)
Additional Information	There are other files related to this item in HUSCAP. Check the above URL.
File Information	Muhammad_Ramadhan_abstract.pdf (論文内容の要旨)



[Instructions for use](#)

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 Muhammad Redo Ramadhan

学位論文題名

μ SR and DFT Investigations Quantum Electronic States of La_2CuO_4 (La_2CuO_4 中の量子的電子状態に関する μ SRとDFTによる研究)

銅酸化物高温超伝導体が発見されてからすでに40年近い年月がたつが、超伝導の本質にかかる電子状態の研究は未だに個体物性研究の最先端研究の一つであり、世界中で様々な観点からの研究が継続されている。ミュオンを用いた物質科学研究法であるミュオンスピン緩和法(μ SR)による研究も銅酸化物高温超伝導体の歴史とともに継続されている。多くの重要な研究成果が積み上げられたが、物質中のミュオンの量子状態が未解決の問題として取り残されている。近年、計算機性能の向上と電子状態を計算するプログラムの改良が進み、素粒子であるミュオンが物質中でどのような状態にあり、その状態を通じてどのように実験結果を定量的に理解するかという計算科学の手法が急速に発達してきた。これにより、 μ SRデータからより本質的な電子状態を議論することが可能になり、銅酸化物高温超伝導体の μ SR研究においても、最新の計算科学的手法を駆使して過去のデータをより深く理解する研究が行われ出した。

本研究は、この計算科学研究の手法を用いて、銅酸化物高温超伝導体中で最もよく電子状態が研究されている La_2CuO_4 に対して凡密度関数法を用いた第一原理計算を応用することにより、物質中のミュオンの量子的状態を解明して実験結果を再解析するとともに、銅酸化物高温超伝導体の電子状態の本質を理解する上で最も重要な電子間相関ポテンシャルを求めることに挑戦した。

本研究では、これまでにない超高統計で μ SRデータを測定し、ミュオンが La_2CuO_4 中で観測する内部磁場と成分数を精度よくとめた。この測定から、3つのミュオン成分があることが明らかになった。 μ SR測定と平行して凡密度関数法を用いた第一原理計算を実施し、ミュオンが持つと予想される量子的な空間的広がりを解析した。本研究で特筆すべき点は、これまで実施されてはいないスーパーコンピュータによる大規模計算を実施した点にある。ミュオンは物質中では超希薄磁性不純物とみなされる。この状態を実現するには、1つのミュオンを含むスーパーセルを用いた大規模計算が必要である。このような大規模計算はミュオンの量子状態の研究としては初の試みであり、今後の同様な研究に対する指標的研究計画となった。計算の結果、ミュオン自身の存在確率が量子的に空間分布を持つこと、またそれに伴ってミュオンが持つスピン成分も空間的に広がることを解明した。これら一連の計算を、各パラメータを最適化しつつ繰り返すことにより、実験結果を過去にない精度で再現することに成功した。また、これらの研究の成果として、最後に、定量的な解明が困難であった電子間相関ポテンシャルをこれまでにない精度で実験的・計算科学的に決定することに成功した。