HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	μSR and DFT Investigations Quantum Electronic States of La2CuO4 [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_review.pdf (審査の要旨)

Instructions for use

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

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　　Muhammad Redo Ramadhan

	主査	客員教授　渡邊功雄
審査担当者	副査	教　授　　網塚　浩
	副査	教　授　　河本充司

学 位 論 文 題 名

μSR 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μSRとDFTによる研究）

博士学位論文審査等の結果について（報告）

申請者は、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、これまで得られてきたμSRの実験結果を再解析するとともに、その結果として銅酸化物高温超伝導体の電子状態の本質を理解するうえで最も重要な電子間相関ポテンシャルを求めることに成功しました。

本研究では、過去におこなわれたことがない超高統計でのμSRデータを測定することにより、ミュオンがLa_2CuO_4中で観測するミュオン位置での内部磁場と、その内部磁場成分数を精度よく求め、今までは測定されなかった３つのミュオン成分があることが明らかにしました。実験に平行して凡密度関数法を用いた第一原理計算を実施し、ミュオンが物質中で持つことが予想されている量子的な空間的広がりを解析しました。本研究で特筆すべき点は、μSRのデータを理解する上でスーパーコンピューターによる大規模計算を実施した点にあります。物質中のミュオンは超希薄磁性不純物とみなされます。この状態を実現するためにスーパーセルを用いた大規模計算を行い、世界で初めてミュオンの量子状態を解明する成果へとつなげることに成功しました。この計算結果より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とこを明らかにし、各パラメタを最適化して計算を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とともに、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ました。

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ます。