

論文審査の結果の要旨

氏名 村上 雄太

本論文は、5章と付録からなる。第1章は序論であり、本研究の背景および目的と論文の構成が簡潔に述べられている。電子・フォノン系の実験的研究によって平衡状態と非平衡状態について新しい現象の報告と問題提起がなされている。たとえばアルカリ金属ドープ C_{60} フラーレン超伝導体やアルカリ金属ドープ芳香族超伝導体では、従来の電子格子系超伝導体とは異なり、電子格子相互作用に寄与するフォノンの特徴的な周波数が電子のバンド幅と同程度であると考えられている。また THz 帯レーザー技術の発展により、超伝導体における集団励起モードであるヒッグスモードの観測や光によって誘起された超伝導的な振る舞いが実験的に報告されている。本論文は、摂動論的には扱いにくいパラメータ領域や電子と格子が絡み合ったダイナミクスを取り扱う理論的枠組みを動的平均場理論に基づき定式化し、それに基づき平衡状態と非平衡状態の性質を理論的に明らかにしたものである。

第2章では、動的平均場理論の基本的枠組みを平衡状態と非平衡状態を扱う場合にそれぞれ説明している。2.2節ではホルシュタイン・ハバード模型に対する連続時間モンテカルロ法において平衡秩序相を扱えるように村上氏が拡張した枠組みについて説明している。2.3節では、非平衡状態を取り扱う枠組みとして自己無撞着ミグダル近似を用いて村上氏らが定式化したものの説明がなされている。

第3章では、連続時間モンテカルロ法と動的平均場理論を組み合わせ、ベータ格子上的ホルシュタイン・ハバード模型を研究した成果について述べられている。具体的には3.1節でハーフフィリングにおける電荷秩序相、反強磁性相の競合について、3.2節ではハーフフィリングから離れた電子密度におけるホルシュタイン模型の電荷秩序相、超伝導相、共存相の相図について述べられている。この章での主な成果は、中間結合領域における電荷秩序と超伝導の共存状態（本論文では **supersolid** 超固体と呼んでいる）の発見である。この相は弱結合領域、強結合領域では存在しないこと、今回の結果は中間結合領域において信頼に足る理論的取り扱いによって得られた初めての成果であること、その2点においてその成果は重要である。

第4章では、2.3節で説明した枠組みを非平衡に適用した研究成果について述べられている。4.1節ではベータ格子上的ホルシュタイン模型における緩和ダイナミクスを調べ、電子間相互作用の強さによって、緩和の様子がどのように変わるかを調べた。4.2節ではクエンチダイナミクスを通して、強結合フォノン媒介超伝導体における集団励起、とくに超伝導秩序変数の振幅変化を伴うモードのダイナミクスを調べた。ヒッグスモード以外の第二の集団振幅モードを見出したことがここでの主な成果である。さらに二つの集団励起を時間分解光電子分光で観測する可能性について論じている。

第5章では、以上のまとめと今後の展望が述べられている。

本研究の成果とその意義は、電子・フォノン系を記述するモデルであるホルシュタイン・ハバードモデル、ホルシュタインモデルに対して、(1)平衡状態秩序相、非平衡状態を取り扱えるように拡張した方法論の開発、(2)中間結合領域における平衡状態における相図の決定と新たな相の発見、(3)非平衡状態、とくに超伝導秩序変数の振幅モードの実時間ダイナミクスを理論的に計算したこと、の3点に認めることができる。本研究の成果を踏まえた今後の展開としては、より一般の格子上での電子・フォノン系の平衡状態、非平衡状態の研究、線形応答領域を超える、強い外場に対する非線形応答や、第一原理計算と組み合わせた方法論の開発とそれを踏まえた光誘起超伝導の可能性とその物質探索の理論的予言などが挙げられる。本研究の成果はそれ自体に加えて、電子・フォノン系を研究する際に上記のような課題について重要な基盤を与えるという意味においてもその意義が認められる。

本論文の成果は、*Physical Review Letters* 1編、*Physical Review B* 誌本論文2編、*JPS conference proceedings* 1編として出版されている。それに加えて投稿中のものが一編ある。本論文は辻直人氏、青木秀夫氏、P. Werner氏との共同研究であるが、理論的定式化、計算コードの作成、結果の解析、ダイアグラム法に関する解釈および及び考察は全て論文提出者が主体となって行ったものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

以上の理由により、博士（理学）の学位を授与できると認める。