

論文審査の結果の要旨

氏名 杉本 拓也

本論文では、フェルミ面近傍において軌道不安定性を有する 2 種類の層状カルコゲン化合物超伝導体、鉄系超伝導体 $\text{Fe}(\text{Se},\text{Te})$ と BiS_2 系超伝導体 $\text{RE}(\text{O},\text{F})\text{BiS}_2$ (RE : 希土類元素) の電子構造の研究結果について述べられている。本論文は 8 章から成り、第 1 章は導入、第 2 章は研究背景と動機、第 3 章は計算原理、第 4 章は実験原理、第 5 章は実験条件、第 6 章は $\text{Fe}(\text{Se},\text{Te})$ の電子構造、第 7 章は $\text{RE}(\text{O},\text{F})\text{BiS}_2$ の電子構造、第 8 章は結論、という章構成となっている。

第 1 章では、本研究に関連した歴史的な進展として、バンド理論、超伝導の発見、電子相関と銅酸化物高温超伝導体の発見について述べられた後、鉄系超伝導体と BiS_2 系超伝導体について述べられている。その後、本論文の構成について述べられている。

第 2 章では、研究背景と動機について述べられている。まず、Kugel-Khomskii モデルによる軌道自由度の取り扱い、軌道揺らぎと軌道不安定性について述べられた後、スピン-軌道相互作用について述べられている。

第 3 章では、計算手法の原理として、非制限ハートリーフォック近似による多軌道 d - p モデルとアンダーソン不純物モデルの 2 種類のモデル計算、第一原理計算について述べられている。

第 4 章では、本研究で用いられた実験手法の原理について述べられている。まず導入として、電子-光子相互作用と双極子近似による遷移確率について述べられた後、光電子分光の一般的な定式化、フランクコンドン原理、クーブマンズの定理、光電子スペクトル、角度分解光電子分光 (ARPES)、共鳴光電子分光、光電子の脱出深さ等について述べられている。最後に X 線吸収分光の定式化、透過法、TEY、TFY、PFY 等の測定方法について述べられている。

第 5 章では、実験条件について述べられている。つくば KEK の Photon Factory、広島大 HiSOR、広島大のレーザー ARPES 装置、イタリアのトリエステにある Elettra 等における光電子分光の測定条件、Elettra、フランスのグルノーブルにある ESRF 等における吸収分光の測定条件について述べられている。

第 6 章では、鉄系超伝導体 $\text{Fe}(\text{Se},\text{Te})$ の電子構造についての研究結果について述べられている。まず導入として、スピン及び軌道揺らぎ、 $\text{Fe}(\text{Se},\text{Te})$ の物性、軌道の特徴、ARPES における解析の問題、磁気秩序とスピン-軌道相互作用等について述べられた後、本研究の動機が述べられている。その後、 $\text{FeSe}_{0.4}\text{Te}_{0.6}$ の軌道状態とスピン-軌道相互作用について、レーザー ARPES と第一原理計算による研究結果、 FeTe における非制限ハートリーフォックによる計算結果について述べられている。

第7章では、 Ce(O,F)BiS_2 と EuFBiS_2 の電子構造の研究結果について述べられている。まず、 BiS_2 系超伝導体の特徴とこの系における問題点として、バンド構造と擬一次元性、フォノン、スピン揺らぎと軌道揺らぎ、F置換等について述べられた後、 Ce(O,F)BiS_2 と EuFBiS_2 の物性、研究動機等について述べられている。その後、 Ce(O,F)BiS_2 における F置換の効果、 Ce(O,F)BiS_2 における Ce の異常な原子価状態、 EuFBiS_2 における Eu の混合原子価状態と相分離、 $\text{CeO}_{0.5}\text{F}_{0.5}\text{BiS}_2$ の軌道状態等の結果について述べられている。

最後に第8章では、全体の結論として層状カルコゲン化合物超伝導体 Fe(Se,Te) と RE(O,F)BiS_2 の電子構造について得られた結果の要点が述べられた後、両物質系において軌道不安定性の重要性を明らかにしたと結論されている。

なお、本論文第6章は野地尚、小池洋二、岩澤英明、Eike Fabian Schwier、島田賢也、Naurang Lal Saini、溝川貴司との共同研究、第7章は出村郷志、高野義彦、水口佳一、浅野卓也、梶谷丈、東中隆二、松田達磨、青木勇二、Viktor Kyandyba、Alexey Barinov、Antonella Iadecola、Murielle Salome、小野寛太、生天目博文、谷口雅樹、小島耀平、Mingtian Zheng、岩澤英明、Eike Fabian Schwier、島田賢也、有田将司、Corentin Morice、Emilio Artacho、Siddharth S Saxena、Boby Joseph、Eugenio Paris、Naurang Lal Saini、高橋雅也、大槻太毅、溝川貴司との共同研究であるが、論文提出者が主体となって実験、計算、解析等を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士(科学)の学位を授与できると認める。

以上1967字