

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 窪田 大

強相関電子系に特有の強いゆらぎや競合を高精度に計算できる手法は限られており、その中の一つとして動的ゆらぎを高精度で取り入れられる手法として動的平均場近似がある。この手法を活用して、部分的に空間相関も考慮できるクラスター手法を用いて多様な強相関電子系の普遍性や個性、特長を解明する研究が世界的に展開されている。論文提出者はこの手法を適用し、強相関電子系が示す興味深い現象の中で、最も活発な研究が展開されている磁性と超伝導の中から 2 つの未解明のトピックスを取り上げて、その謎に迫ったもので “Numerical studies by dynamical mean-field theory on magnetism and superconductivity in strongly correlated electron systems” というタイトルで英文で五章からなる。

テーマの第一はスピン軌道相互作用が重要な寄与をする SrRuO_3 の強磁性相の磁気異方性、非従来の電気伝導特性に関する未解明の実験結果を理論的に解明することを通じて、磁気異方性、キュリー温度、磁化によって複合的に決まる産業応用上も重要な強磁性体の機能の解明、設計指針に対して、動的平均場近似の有効性、問題点に関する知見を得ることである。また SrRuO_3 自身の薄膜での量子ホール効果素子への期待などにも第一原理的な基礎に基づいて知見を与える方法を確立することを目的とした。第二のテーマでは界面の超伝導で実験報告されているバルクでは見られない優れた超伝導特性の一つに着目した。すなわち La 系銅酸化物高温超伝導体の母物質と過剰ドーパ物質といういずれもバルクでは超伝導でない化合物を貼り合わせた構造を持つ界面で、過剰ドーパ側のキャリア濃度に依存せず界面原子層一層で、超伝導転移温度がバルクの最高超伝導転移温度に常に最適化されているという Bozovic らの実験結果の機構の解明を目的とした。

一章での 2 つのトピックスに関する先行研究を紹介する導入部に続いて、二章ではこの論文で一貫して用いられているクラスター拡張した動的平均場近似の数値手法がレビューされている。

続いて第三章で SrRuO_3 の第一原理計算に基づいて導出されたパラメタ、バンド構造を用いてクラスター動的平均場近似を行い、立方晶近似のもとで、ハートレーフォック近似などとは対照的に、まずキュリー温度をほぼ定量的に再現できることを示した。また第一原理計算が予測する相互作用値では温度の低下とともに磁気容易軸がある温度で [101] 軸から [001] 軸方向に転移すること、さらにこの相互作用値よりも、より強相関側では [101] 軸が全温度領域で安定となり、弱相関側では [001] 軸が容易軸となることを示した。これは薄膜のような相対的に電子相関効果が増大すると期待される系での実験結果やバルクでのある温度での転移を示す実験など、多様な実験結果をすべて矛盾なく再現する。電子相関とスピン軌道相互作用が重要な役割を果たす強磁性で、容易軸や磁気異方性が決まる機構は長年の未解明の課題であり、本研究は実際の SrRuO_3 の結晶対称性であるわずかな斜方晶歪みを仮に考慮せずとも、電子相関という一つのパラメタがこの物質の微妙な磁気異方性を決める本質的な要素であるという、シンプルな描像を実験との定量的な一致に基づいて与えた。

またこの物質は強磁性相内の 50K 近辺で輸送現象や磁性が異常を示す。磁化、電気伝導度、磁気抵抗などに見られるこの異常も未解明の謎であったが、本論文では第一原理的なパラメタを用いた計算で実際に電子相関とスピン軌道相互作用が絡み合った効果で 50K 程度でスピンおよび軌道モーメントに強い

クロスオーバーが生じることを示した。さらにクロスオーバーより高温側でスピン/軌道ゆらぎが顕著に増大し、これが輸送現象等が非フェルミ液体的性質を示すなどの実験結果を説明しうることも示した。

以上、第一原理パラメタが実験結果を大変よく再現するという成果の一方で、磁気異方性や 50K 付近のクロスオーバーの起源のより深い理解、機構の直観的な解釈、検証実験の提案、設計指針の抽出には課題が残った。第一原理計算には現実の物質に即した複雑さが含まれ、機構のより深い理解はこの結果を基にした考察、洞察が多くの場合必要であり、本研究も研究潮流のなかによくみられる将来への一般的で普遍的な課題を提示している。

第四章では La_2CuO_4 と $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ を貼り合わせた構造の界面で見られる超伝導転移温度の自己最適化（転移温度のバルク最高転移温度へのピン止め）機構を考察している。すでに先行研究で、基底状態でモット絶縁体近傍の金属が持つ内在的な電荷不均一状態への不安定性を、並進対称性を破る界面が（層内相分離から層間相分離への変換機構により）回避し、不均一の生じないぎりぎりのキャリア濃度に界面を自己最適化することが転移温度をピン止めする原因であるという機構が提案されていた。一方これは基底状態での考察であり、実際に有限温度での転移温度の最適化が実現するためには、超伝導転移温度でも電荷不均一化、相分離の不安定性が保持されている必要がある。本研究はこの問題を考察し、クラスターサイズの限界を抱えながらも、相分離の臨界温度が超伝導転移温度を上回る様子を示し、層間不均一化による転移温度の自己最適化機構を実際の超伝導臨界温度付近でも示し、また超伝導臨界温度以上で指摘されているストライプを含む不均一化の秩序ないしゆらぎの機構への示唆を与えた。

以上、窪田大提出の本論文は、スピン軌道相互作用と電子相関が絡む磁性の解明、および界面が示す超伝導の機能特性という物性科学のフロンティアにクラスター動的な平均場近似を適用し、その有効性を示すとともに、2つの未解明の課題の解決に資するものである。より深い機構の解明などに課題は残るが、物性物理学の重要な課題に対して一定の貢献をし、物理学および物理工学への寄与が評価された。以上、本論文審査委員会は全員一致で本研究が博士(工学)の学位論文として合格であると判定した。

なお本論文は他の研究者との共同研究の部分があるが、論文提出者が主体となった計算、解析において、論文提出者の寄与が、学位授与に当たって十分であることが認められた。