

論文審査の結果の要旨

氏名 荒川 直也

Sr_2RuO_4 はカイラル p 波の超伝導の可能性が高いことで良く知られている物質であるが、その基本的な物性についても詳細な研究が積み重ねられ、酸素の 8 面体に囲まれた Ru の d 軌道のうち t_{2g} 軌道が基本的な物性を支配していることが明らかになっている。Ru イオンは 4 価で 4 個の d 電子が t_{2g} 軌道にほぼ均等に分布していて、典型的な多軌道遍歴電子系となっている。この論文の主要な目的は、 Sr_2RuO_4 を具体的な対象として、多軌道系における磁氣的性質と輸送現象を保存則を満たす近似で取り扱う理論的枠組みを開発することにある。

本論文は 5 章からなっている。 Sr_2RuO_4 の磁氣的性質及び輸送現象に関する実験と理論の概観をまとめた第 1 章に続き、第 2 章では理論の構成が議論されている。本論文では、対象とする系が層状構造を取っているので、2 次元の正方格子上に t_{2g} 軌道を置いた軌道縮退のあるハバード模型を考える。運動エネルギーについては、バンド計算のフェルミ面を再現するような飛び移り積分を考え、相互作用についてはサイト内のクーロン相互作用とフント結合を考慮する。一電子状態についてはゆらぎ交換近似(FLEX)を用いてグリーン関数を計算し、輸送現象については保存則を満たすようにバーテックス補正を取り入れる。ゆらぎ交換近似と整合性のあるバーテックス補正はゆらぎの一次の項からの寄与である Maki-Thompson(MT)項とゆらぎの二次の項である Aslamasov-Larkin(AL)項からなる。バーテックス補正を取り入れる際に必要な解析接続が詳細に議論されている。当論文においては、準粒子のダンピングの大きな場合を考え、AL 項は無視できるとして MT 項の効果を研究している。

第 3 章に Sr_2RuO_4 に関する具体的な計算結果がまとめられている。FLEX 近似では、一電子グリーン関数とスピンのゆらぎを自己無撞着に決めることになる。 t_{2g} 軌道ハバード模型のように軌道縮退がある場合には、スピンのゆらぎが最も成長する波数ベクトルの位置という基本的な性質も単純な乱雑位相近似(RPA)とは異なる結果が得られるなど特徴的な多体効果が見られる。これは、スピンのゆらぎと電子状態間の結合も軌道により異なっているので、自己エネルギー

ギーへのスピンのゆらぎの寄与が軌道と波数ベクトルによって異なり、準粒子のダンピングが強い軌道・運動量依存性を持つためである。

引き続き面内の電気伝導度に対する結果がまとめられている。自己エネルギーの運動量依存性が重要であることが指摘され、電気抵抗は量子臨界領域から離れている場合温度の 2 乗に比例するが、量子臨界点近傍では温度の 1 次に比例するようになり非フェルミ液体的な挙動を示すことが示される。バーテックス補正については、電気抵抗の値を大きくすることになるが、定性的な温度依存性を変更するものではないことが示される。また、電気伝導度への各軌道の寄与を分析し、面内の伝導度には d_{yz} および d_{zx} 軌道の寄与が重要であることが示されている。

これに対してホール係数の計算はもう少し複雑になっている。 t_{2g} 軌道ハバード模型ではフェルミ面も 3 枚あり、 d_{yz} および d_{zx} 軌道と d_{xy} 軌道では非対角伝導度に対する寄与は逆符号で、ホール係数はそれらの打ち消し合いで決まっている。非対角伝導度については自己エネルギー補正は重要ではなく、MT 項のバーテックス補正が重要であることが示されている。これは、バーテックス補正が電流の方向を曲げる効果を持つためである。このバーテックス補正に重要な寄与を与えるのは、 d_{yz} および d_{zx} 軌道と d_{xy} 軌道間の軌道非対角なスピンのゆらぎであることが明らかにされている。

第 4 章で Sr_2RuO_4 に関する先行研究と実験結果の比較がなされたのち、第 5 章でこの論文で得られた理論的考察の結果と今後の課題がまとめられている。今後の課題としては、バーテックス補正の AL 項についての検討の必要性と面間伝導度の半導体的温度依存性に対する d_{xy} 軌道の重要性が指摘されている。

以上みてきたように、当論文では多軌道系の磁氣的性質と輸送現象に対して FLEX 近似をもとに保存則を満たすように理論を定式化し、2 次元 t_{2g} 軌道系での理論解析が実行可能であることを実証した。多軌道効果は鉄ヒ素系超伝導体を含む多くの遷移金属化合物、また重い電子系で重要であり、それらへの理論的アプローチを確立した意義は大きい。本論文は指導教官である小形教授の指導を受けながら本人が独自に研究を進めた成果であり、論文提出者の荒川直也氏に博士(理学)の学位を授与できると認める。