

# 論文審査の結果の要旨

氏名 AMBOLODE, Leo Cristbal II Castro

レオ クリスタバル カストロ アンホロテ II

本論文は6章からなる。

第1章はイントロダクションであり、高温超伝導発見の歴史と、その過程で注目をされた電子相関の役割が述べられ、本論文における研究の位置付けが示されている。また、本論文の構成について簡潔に示されている。

第2章では本論文の研究対象である、鉄系超伝導体の研究背景について述べられている。5種類の鉄系超伝導体が報告されていることが紹介され、これらのいずれも、**FeAs/FeSe** の層状構造を有するという共通点を持つことが説明されている。本論文では、このうち最も単純な構造を持つ **FeSe** 系 (1 1系) を研究対象としており、配位子原子の **Se** を **Te** に置換した系の電子構造の変化に着目している。**FeSe** は超伝導を示すのに対し、**FeTe** は超伝導を示さないことから、電子構造の比較を通して鉄系超伝導発現の機構に関しての知見を得るといふ本論文の意義が述べられている。先行の研究において、**FeTe** では **FeSe** に比べて電子相関が強いことが報告されているが、理論で指摘されている軌道に依存した電子相関に関しては、検証が十分に行われていない。本論文は、この電子相関の軌道依存性を明らかにすることを目的としている。

第3章は本論文の研究手法である光電子分光法について説明されている。一般的な光電子分光から、本論文で利用されている共鳴光電子分光と角度分解光電子分光のそれぞれの手法の原理について説明がなされている。また後半では、使用した装置の構成に関して解説されている。

第4章は共鳴光電子分光法を用いた **FeTe<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub>** の電子状態に関する実験結果が示されている。**Fe** の **3p** 軌道から **3d** 軌道への励起エネルギーに相当するエネルギーを有する入射光子に対し、フェルミ準位近傍における光電子スペクトル強度の増大を報告している。この結果より、フェルミ準位近傍の電子状態が、主として **d** 軌道から構成されていることが示され、第一原理計算とも整合性が確認された。また、共鳴スペクトルと非共鳴スペクトルの差をとることで、**d** 軌道から成る電子状態の部分状態密度に相当する差分スペクトルを求め、配位子を **Te** から **Se** へと変えた際の **d** 軌道に起因した電子構造の変化を調べている。第一原理計算の結果と比較を行うことで、**d<sub>z<sup>2</sup></sub>** 軌道に起因するバンドの位置が、**FeSe** から **FeTe** へと移るにつれてフェルミ準位から離れていく様子が示された。いずれの系でもフェルミ準位近傍には、他の **d** 軌道に起因したバンドが存在し

ている為、FeTe では FeSe に比べて  $d_z^2$  軌道バンドが他の  $d$  軌道バンドから離れて存在していることが明らかにされた。この軌道シフトに関しては、Fe 近傍の配位子構造の違いによるものと解釈されている。

第5章では、角度分解光電子分光法 (ARPES) を用いた実験結果が示されている。前章の共鳴光電子分光法では観測出来なかった、 $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$  ( $x = 0, 0.1, 0.2, 0.4$ ) のフェルミ準位近傍の  $d_z^2$  軌道以外の  $d$  軌道に起因したバンドの分散を調べ、各軌道 ( $d_{xy}, d_{yz}, d_{zx}$ ) への同定を行っている。各バンドの同定は第一原理計算の結果との比較を通して行っており、その結果、軌道に依存したバンドシフトと有効質量が観測されている。この結果は、先行の理論研究で指摘されているように、軌道に依存した電子相関によるものと解釈されている。特に  $d_{xy}$  軌道に起因したバンドの有効質量の増大因子が 10 程度と大きく、FeTe ではフェルミ面がほぼ  $d_{xy}$  軌道バンドから形成されていることが示された。鉄系超伝導体では、 $d$  軌道縮退の超伝導発現への寄与が指摘されている為、軌道に依存した電子相関が強く観測された FeTe では、Se に比べ  $d$  軌道の縮退が大きく解けており、超伝導発現の抑制につながっていることが述べられている。

第6章では、研究のまとめが行われている。

以上のように、本論文では、軌道に依存した電子相関を光電子分光法により系統的に調べ、 $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$  系の超伝導発現との関連を示すことに成功している。

なお、本論文第4章、5章は、堀尾眞史氏、鈴木博人氏、出田真一郎氏、吉田鉄平氏、岡崎浩三氏、藤森淳氏、劉亮氏、三上拓也氏、掛下照久氏、内田慎一氏、小野寛太氏、組頭広志氏、橋本信氏、Donghui Lu 氏、Zhi-Xun Shen 氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって測定及び解析を行ったもので、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 (理学) の学位を授与できると認める。