

論文審査の結果の要旨

氏名 河村 光晶

YNi₂B₂C は転移温度 $T_c = 15.6\text{K}$ の超伝導体である。その結晶は YC 層と Ni₂B₂ 層が交互に積み重なった 2 次元的構造を持つが、電子状態は 3 次元的で、バンド計算の結果と整合的であることが知られている。そして、B の同位体効果の観測 (その指数 α は 0.2 程度) などからフォノン機構の超伝導と想定される。しかしながら、その超伝導ギャップは単純な s 波的なものではなく、強い異方性を持つことが多くの実験 (磁場下比熱、STM、ARPES、磁場下熱伝導度、超音波吸収) を通して示唆される。そこで、本論文では、密度汎関数超伝導理論で第一原理的に計算される電子構造、フォノン構造、電子フォノン相互作用、そして、ギャップ関数の波数依存性が十分に現実を反映するものと仮定して、フォノン機構で超伝導ギャップが異方的になるか、なるとすれば、その出現の起源は何かを微視的な理論計算を通して探られた。

さて、英文で 6 章から成る本論文の第 1 章では、YNi₂B₂C とその関連物質における超伝導研究の歴史、とりわけ、ギャップの異方性を示唆する数々の実験結果、がとりまとめられた。そして、本論文の目的、そのための理論手法の選択について述べられた上で、本論文の構成に沿って各章の内容が手短かに紹介された。

次の第 2 章では、密度汎関数超伝導理論が初歩から解説され、導入される近似が明確にされると同時に、数値的に計算されるべき物理量の具体的な表式が与えられた。ところで、この計算ではブリルアン帯での数値積分を精度よく実行することが不可欠になるが、これは複雑な構造のフェルミ面を持つ系では克服すべき大きな課題になっている。そこで、第 3 章では、その積分を高効率で高精度に実行する手法として、「最適化テトラヘドロン法」が提案された。そして、それが計算コードへ実装され、検証された結果、従来の手法に比した優位性が明らかにされると同時に、その汎用性についても言及された。

数値計算の結果が報告された第 4 章では、まず、正常相では先行の計算や実験の結果がよく再現されること、そして、超伝導相でも、何らの調整パラメータを用いずに T_c や同位体効果の α が 15% 程度の誤差で実験値と合うことが示された。さらに、ギャップ関数の波数依存性は大きく、最大のギャップと最小のその比は 2.4 程度になることが報

告された。得られたギャップ関数を用いて、準粒子状態密度や超音波吸収係数などの実験で測定される物理量の計算も行われた。

得られた結果の考察と実験との比較は第5章でなされた。確かに、実験と比べて得られたギャップ関数の異方性の大きさは十分ではないが、定性的な振る舞いは実験のそれと一致している。そして、ギャップ関数が小さいところはNiの3d軌道がフェルミ面にかかる場所であること、また、そこでは電子フォノン結合が最小（最大値と比べて約1/5）であることなどから、見かけ上、このフォノン機構ではNiが超伝導を抑制するように働いていることを見いだした。最後に第6章では、本研究で得られた成果が要約されると同時に、 $T_c = 23\text{K}$ の $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ を含めた今後の課題にも触れている。

以上、各章の紹介とともに本論文で得られた物理学上の知見を解説した。とくに、金属の第一原理計算では必要不可欠な最適化テトラヘドロン法を開発したこと、フォノン機構でNiの3d軌道に由来するギャップ関数の異方性を見いだしたことは非常に高く評価される。そして、これらは計算物性物理学上の重要課題に十分な貢献があり、審査員全員が学位論文として十分な水準にあると認めた。なお、本論文第3章は常行真司氏、合田義弘氏との共同研究として既にPhysical Review B誌で公表されているが、論文提出者が主体となって計算及び結果の解釈を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。また、この件に関して、常行氏や合田氏から同意承諾書が提出されている。本論文の残りの部分も投稿予定である。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。