

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 野村 悠祐

第一原理的に超伝導状態を解明する理論研究は、近年定量的な予測能力を追求するようになってきた。従来型の BCS 理論の枠内にある超伝導については、実際に超伝導密度汎関数法によって、1 割程度の誤差の範囲で転移温度が実験と一致するという検証が多くなされている。しかしながら電子相関の効果の大きな非従来型の超伝導にこの手法を応用すると、多くの場合転移温度を過小評価しており、この手法の限界を示している。銅酸化物や鉄系超伝導体はもとより、アルカリ元素 (A) をドーピングしたフラーレン化合物 A_3C_{60} のように従来型の BCS 超伝導体ではないかと推定する研究も多くある物質についてもこの不一致は顕著である。

一方、電子相関の大きな系に対して、第一原理的に物性を解明しようとする研究が、強相関電子系の持つエネルギー階層構造を利用する形で、階層的な第一原理強相関電子状態計算法 (Multi-scale ab initio scheme for correlated electrons (MACE)) として急速に発展してきた。

本論文は MACE を電子格子相互作用も含めて扱えるように拡張した上で、低エネルギーソルバーとしての動的平均場近似を用いて、 A_3C_{60} に適用したものである。適用の結果、この化合物に生じる超伝導を再現し、その機構を考察したもので、英文で 5 章と 3 つの付録からなる。

構成は、1 章の導入部で A_3C_{60} に関するこれまでの研究をレビューした後、第 2 章において本論文で採用している枠組みである MACE について述べ、特にその中で論文申請者が貢献した電子格子相互作用を含む取り扱いについて説明している。この拡張は制限密度汎関数摂動論を開発することによって可能になった。第 3 章では制限密度汎関数摂動論を A_3C_{60} に適用し、従来の MACE と合わせることによって、電子格子相互作用の効果を取り込んだ上での低エネルギーの第一原理有効モデルを導出している。第 4 章では得られた有効モデルを A_3C_{60} に適用し、動的平均場近似を用いることで、実験事実と定量的にも一致する超伝導およびモット絶縁体相を再現することに成功した。続いてモット絶縁相の性質と超伝導の発現機構を考察している。ここで得られた A_3C_{60} の有効モデルでは、分子内に広がるワニエ軌道から作られる 3 つのバンドがハーフフィリングになっている。またフラーレン分子が大きいことを反映して、遮蔽された交換相互作用が大変小さく、さらに電子格子相互作用の効果を取り入れると、有効フント相互作用が負になることと、同一軌道内のオンサイト有効相互作用 U よりも軌道間のオンサイト有効クーロン相互作用 U' の方が大きくなるという顕著な特徴を持つ。この負のフント相互作用はモット絶縁相でスピン状態が低スピンになっていることをよく説明し、また軌道偏極が生じやすくなっていることから、動的なヤーンテラーひずみのゆらぎが生じている実験事実を説明する。さらに超伝導が実験で見られるアルカリの種類に関する物質依存性や圧力依存性にかなり良く一致する形で再現された。この超伝導の機構について考察し、有効モデルに含まれるペアホッピング項や軌道内より軌道間のクーロン相互作用の方が大きいという特徴を取り除くと超伝導がなくなることを示した。これは低スピン状態で U が U' より小さいために同一軌道をしめる 2 つの電子に有効的に引力が生じ、これがペアホッピング項によって強化されることを示唆する。またそうではあっても、束縛エネルギーのスケールは小さく、これと競合する運動エネルギーが強い電子相関による繰り込み効果で繰り込み因子が小さくなっている

ことも有効に働いていることを議論した。これによって A_3C_{60} の超伝導は電子格子相互作用が決定的な役割を果たす超伝導でありながら、強い電子相関が本質的な役割を果たしていることを解明した。

以上、野村悠祐提出の本論文は、超伝導転移温度が圧力(アルカリ原子)依存性にみせるドーム構造を十分に再現できないことや、動的平均場近似に含まれる誤差に関する考察を今後の課題として残しているものの、新たな理論的枠組みの拡張に成功し、これを用いて今まで未解明であった A_3C_{60} の超伝導機構についての重要な知見を得て解明を行ない、物性物理学の重要な課題に対して顕著な貢献をしたものと認められ、物理学および物理工学への寄与は大きい。以上議論した結果、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。