

論文審査の結果の要旨

氏名 吉見 一慶

本学位論文は5章からなり、1章は有機導体における電荷秩序についての序論、および本論文の概要、2章は有機導体における電荷秩序についての実験と理論の概観、3章は電荷秩序転移近傍でのスピン帯磁率の増大についての序、およびバーテックス補正の効果を取りこみながら逐次的にワード恒等式を満たす近似理論を生成する方法論で得られた理論的結果、4章はベイム・カダノフの保存近似に基づいた自己エネルギーに対する自己無撞着方程式により得られた理論的結果、5章は本論文の結論を述べている。

物性物理学において近年最も重要な分野の一つとして確立しつつあるのが強相関電子系の物理である。これは、1980年代に銅酸化物において高温超伝導が発見されたことに発し、遷移金属酸化物においては関与する電子軌道が空間的に局在したものであり、電子間クーロン斥力相互作用が大きいので、現在では強相関電子系と呼ばれる。その後、強相関電子系には様々なカテゴリーが存在することが認識され、本論文で特に着目したのは、その中でも興味深いカテゴリーである有機導体である。有機導体では、超伝導、磁性などの物性を示すものが多く発見されており、これらが電子相関に起因するのではないか、ということが精力的に研究されている。特に、無機物の強相関電子系と対比させると、有機導体は (i) 比較的大きな分子の上に電子の波動関数が乗っているために、電子間には比較的長距離のクーロン斥力相互作用が働く、これと関連して、(ii) 系がとる様々な秩序状態のなかに、電荷が空間的に秩序化した「電荷秩序」状態をとる物質（典型的に θ -(BEDT-TTF)₂RbZn(SCN)₄）が存在する、という特徴をもつ。電荷秩序については膨大な研究があるが、一つの未解明な点として、電荷秩序が生じると系は絶縁体となるが、この相転移の近傍で、単純に考えれば無関係と思われるスピンの挙動も変更を受ける（スピン帯磁率がなだらかに増大する）という現象が観測されており、謎となっている。

本学位論文のテーマは、これに対して、電荷の自由度とスピンの自由度、ならびに両者の相互作用を取り込める一般的な理論的枠組みを先ず構築し、電荷秩序相転移の近傍でスピンの振舞うかという点を明らかにすることである。一般に、電荷自由度とスピン自由度が強相関系においてどの様に絡むか、というのは興味深い問題であり、上記の謎に関しては、電荷秩序転移の高温側（金属側）においては長距離秩序は無いが、実験（NMR、ラマン分光）の測定によれば電荷の揺らぎは存在することが示されている。従って、問題は、このような電荷揺らぎが、スピン状態（帯磁率）にどのような影響を与えるか、ということになる。本研究ではこれを、長距離クーロン相互作用を最近接分子間まで取り入れた2次元拡張ハバード模型に基づき、2段階のアプローチにより調べた。

第一のアプローチは以下の様である。電荷揺らぎのスピン感受率への影響を見るには通常用いられる乱雑位相近似 (RPA) を超える（相互作用過程を表すファインマン・ダイアグラムの言葉で

例えば、パーテックス補正と呼ばれるものを取り込む)が必要になる。そこで、拡張ハバード模型に対して、逐次的に、しかも電荷の保存を保つように近似理論を生成する方法論が構築された。最低次で生成される項は真木・トンプソン (MT) タイプおよびアスマラゾフ・ラーキン (AL) タイプとよばれる揺らぎダイアグラムを含む。この近似に基づいて電荷秩序の相図を求めると、電荷秩序転移近傍で発達した電荷揺らぎがパーテックス補正を通じてスピン感受率を増加させることが初めて示された。しかし、以上の近似では、電荷揺らぎの増大に伴う相関長の発散が有効相互作用に正しくフィードバックされていないために、近似の信頼性は必ずしも明らかでない。

そこで第二のアプローチとして、電荷揺らぎの増大を有効相互作用に反映させる、shielded interaction approximation (SIA) に基づく計算が行われた。これはペイムとカダノフによって提案された保存近似の一種であり、RPA 型の有効相互作用とその一次までの自己エネルギーに対する自己無撞着方程式から一体のグリーン関数を求める枠組みである。ハミルトニアン中に外場を導入して SIA を行い、微分によって一様感受率を求めると、SIA の枠内ですべてのパーテックス補正を含む感受率が求められる。この結果、隣接サイト間相互作用 V を増加させて金属相側から電荷秩序転移に近づけるにつれて、一様スピン感受率は電荷秩序転移に向かって増大し、かつ電荷秩序近傍においても有限にとどまることがわかった。また一様電荷感受率は、電荷秩序から十分遠く電荷揺らぎが小さい場合には、第一のアプローチと同様に電荷秩序転移に向かって抑えられるが、電荷秩序のごく近傍では一様電荷感受率は増大に転じ、電荷秩序転移点の直前で発散することがわかった。この後に続く議論においては、この発散の後でどのような状態になるかの可能性の一つとして、電荷感受率の逆数が正から負に変わり相分離を起こすことが示唆された。

以上のように、本学位論文は、一般に電子間相互作用に対する拡張ハバード模型に対して、電荷自由度とスピン自由度、ならびに両者の相互作用を取り込める理論的枠組みの一つを、摂動論による視点から構築した。結果として、電荷秩序相の近傍でスピン自由度も影響を受けることが分かった。この結果が、具体的な有機導体にどの様に適用されるか、また有機導体に対してどの程度普遍的な現象であるか、という点は今後の研究をまつ必要があると思われるが、本学位論文で得られた成果は、相関電子系における電荷自由度とスピン自由度の理解に重要な貢献をするだけでなく、将来的にも、圧力や分子種に応じて結晶構造・電子構造を制御できる自由度が高い有機導体の物理の発展にも資することが期待される。

なお、本論文の一部は加藤岳生准教授および、前橋英明氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって研究したものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断される。

したがって、審査員全員により、博士(理学)を授与できると認める。