

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 山地 洋平

物質中で起きる相転移は、熱的なゆらぎによって自発的な対称性の破れた状態と対称性を回復した状態の間に起きるものが良く知られている。一方対称性の破れを妨げるような量子力学的なゆらぎの効果は顕著になるときは、相転移は絶対零度において量子ゆらぎによって駆動されるものと捉えることができる。これを量子相転移とよぶが、連続的な量子相転移点—量子臨界点—近傍の物理に対して、近年活発な研究が展開されるようになった。

なかでも遍歴電子系に生じる量子臨界点は、本来の臨界ゆらぎとフェルミ縮退に伴う低エネルギー励起がカップルして、通常の準粒子が従うフェルミ液体的な性格や古典相転移では説明できない新しい物理が生み出され、新奇な量子相や非従来型の超伝導の発現の宝庫となり、基礎・応用の両方の観点から広範な研究対象となっている。量子臨界点近傍での非フェルミ液体的挙動を説明する従来の理論としては、守谷・Hertz・Millisらによって提唱されている、スピンゆらぎ理論がある。この理論はいくつかの物質の非フェルミ液体的挙動を説明することに成功し、幅広く用いられている。しかし、近年の実験で、この従来の理論では説明できない非従来型の量子臨界性が数多くの物質で発見され、量子臨界現象を統一的に理解するためには、新しい視点が必要なことを示している。

本論文では、強相関物質で観測されている非従来型の量子臨界性や物性を説明するために、今まで十分な注意が払われてこなかった系のフェルミ面のトポロジーの変化が果たす役割に焦点を当てた。トポロジーの変化と深く絡み合って、新しい型の量子相転移や、新奇な量子相が生み出され、これが謎を解明する鍵になり得ることを提案している。

構成は、導入部に続いて、リフシッツ転移と電子間相互作用の絡み合いによる新しい量子相転移機構を研究した第2章、モット転移近傍に生じる新しい量子相を提唱し、銅酸化物の物理を研究した第3章、まとめと議論の第4章からなり、全体として英文で4章および5つの補遺からなる。

第1章は導入部である。申請者の独自の視点であるフェルミ面のトポロジーの変化と電子間相互作用（電子相関）の絡み合いから、従来の謎を解明する理論を構築することが本節で予告される。

§1.2では1960年にリフシッツによって提唱されたリフシッツ転移について実験、理論両面から今までの研究がレビューされている。また、§1.3は低ドープ域の銅酸化物に見られる非フェルミ液体的な物性とフェルミ面の構造やトポロジーの特異性について、実験事実を紹介し、さらに§1.4は1.3の実験事実を踏まえた上で、ドープされたモット絶縁体に生じうるフェルミ面のトポロジー変化を理論的に理解するための申請者の視点と研究動機がまとめられている。

第2章は申請者が提唱するリフシッツ転移の理論に充てられている。リフシッツ転移は結晶の周期ポテンシャルのもとで、電子相関のない自由フェルミ粒子系に生じる転移であり、自発的な対称性の破れとは無関係なフェルミ面のトポロジーの変化だけから生じる。申請者はこの従来のリフシッツ転移が電子相関によって大きな変更を受け、(1)連続相転移である(2)絶対零度のみで生じるというこの転移の基本性格そのものが変更されることを明らかにした。また、本来対称性の破れとは無縁であったリフシッツ転移が、電子相関の効果のために有限温度の臨界点では対称性の破れと同じ性格を持つという、予想外の顕著な基本性質を申請者は明らかにした。さらに臨界温度が絶対零度を横切る量子臨界点—マージナルな量子臨界点—は従来知られていなかった普遍性を持つことを申請者はリフシッツ転移について初めて示した。また量子臨界点からさらに絶対零度で量子臨界線が延びるという特異な性格がトポロジーの変化の反映であり、自発的対称性の破れでは起きない特徴であることを示した。本論文ではさらに特異な量子臨界性の特徴が $ZrZn_2$ の弱強磁性転移近傍に見られる顕著な特徴を説明することを示した。また本論文の理論を実証するために、磁場と圧力を制御した $ZrZn_2$ においてマージナル量子臨界点や量子臨

界線を同定検証する実験を提案している。

第3章はドーピングされた2次元モット絶縁体の基礎物理を再考し、低ドーピング域の銅酸化物の物性を再吟味して新たな物理を提案したものである。特に本論文ではKotliarとRuckensteinが提唱したスレーブボソンによる平均場近似を拡張し、低エネルギー領域（フェルミレベルの近く）での電荷の揺らぎを従来の平均場近似を超えて取り入れる手法を開発した。この定式化に基づいた数値計算の結果、低ドーピング域での電子励起（準粒子励起）とスレーブボソン理論を担う空のサイトや二重占有サイトを表現する励起（それぞれホロン、ダブロンと呼ぶ）の複合した励起が、今まで知られていなかった複合フェルミオン励起として登場し、重要な役割を果たすことを明らかにした。本論文ではこの新奇な励起を考慮することによって、ドーピングされた2次元モット絶縁体や低ドーピング域銅酸化物の物理が自然に理解できることを提案している。まず申請者はこの複合フェルミオン励起が準粒子励起と混成することによって、対称性の破れなしに、準粒子分散に混成ギャップを生み出し、フェルミ面のポケットが生じることも明らかにした。さらに準粒子のグリーン関数のゼロ面の影響で、ポケットはアークのような構造に見えることも示した。これらは角度分解光電子分光で観測されている銅酸化物の特徴をよく捉えている。本論文では定量的な比較によって、混成ギャップを実験で観測される擬ギャップと解釈し、フェルミアークの運動量依存性、ドーピング濃度依存性が実験結果と理論に基づく数値計算結果とよく一致することを明らかにした。

また、この複合フェルミオン励起が準粒子のペアリングに寄与し、新奇な超伝導メカニズムを生むことを提案している。新たなペアリング機構に基づいてギャップ方程式を解いた結果、銅酸化物の実験で得られる $d_{x^2-y^2}$ の対称性を持つ超伝導ギャップと定量的にもほぼ一致するようなギャップの大きさ、対称性、ドーピング濃度依存性を得た。複合フェルミオンは絶縁体的な混成ギャップと同時にペアリングも生み出しており、矛盾する二つの側面を統一的に理解できる道を開いている。未解決の銅酸化物高温超伝導機構を理解する上でも洞察を与え、大きなインパクトがある。

新たに提案された複合フェルミオン励起はまだ実験的には検証されていないものの、銅酸化物の実験で見られるいくつもの謎を自然に説明する独創的な理論提案として高く評価できる。本論文ではさらにこの複合フェルミオンを検証する実験として、Wiedeman-Franz則の破れと擬ギャップがブリルアンゾーン全面で開くs波的な対称性の構造を持つことの検証を提案した。これらは将来的に非占有部分の準粒子励起の構造や、低温で超伝導を抑制したときの輸送、熱伝導特性を観測することによって、帰趨を決めることができる。複合フェルミオン理論の正しさの実験検証に対して方向性と刺激を与えるものとして評価できる。

第4章は全体のまとめと今後の展望を含む議論に充てられている。

以上、山地洋平提出の本論文は、強相関電子系の物性を理解する上での困難な問題や謎に正面から取り組んだものである。特にフェルミ面のトポロジーとその変化が電子相関と絡み合うときに、リフシッツ転移やモット転移の近傍で新しいタイプの量子相転移と新しいタイプの量子相など、いくつもの新概念を提唱した点は高く評価できる。また、提唱した新しい機構を実験的に検証する方法も提案し、この分野の研究に新たな地平を切り開き、実験研究を刺激することが期待できる。

本論文で導入された新たな概念をもとに、さらなる発展によって、強相関電子系の未解明の問題である、高温超伝導や量子臨界現象などの特異な現象の最終的な解明に結びつくこと期待され、物理学および物理工学への寄与は大きい。以上の成果について議論した結果、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。

なお本論文は三澤貴宏氏、および指導教員今田正俊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。