

## 論文審査の結果の要旨

氏名 堀 知新

超伝導研究のフロンティアは、実験的にも理論的にも広がり続けている。近年のおもな進展に限っても、重い電子系の超伝導、銅酸化物高温超伝導、鉄ヒ素系超伝導の発見などが列挙される。それらの超伝導はそれぞれ超伝導の新しい側面に光を当てることになったが、比較的最近発見された鉄ヒ素系超伝導では電子状態の多軌道性があらためて注目を集めている。

複数のフェルミ面を構成する電子状態が局所的に縮退した軌道に起源をもつ場合、その多軌道性は本質的に重要であると考えられる。鉄ヒ素系のような遷移金属化合物の超伝導体では、電子相関の効果を無視できないのは当然であるが、局所的に縮退した軌道に対しては、格子との結合（ヤーン・テラー結合）もまた重要になると考えられる。当学位論文では、この場合の超伝導の特徴を理論的に明らかにしようとするものである。

第1章では、電子間相互作用と電子・格子相互作用が複合的に作用する場合の研究の歴史が概観され、多軌道系では電子・格子相互作用としてヤーン・テラー型の結合が重要になる可能性が指摘される。最近発見された鉄ヒ素系の超伝導はこの場合にあっており、それを動機として多軌道系の超伝導の特性を電子間相互作用と電子・格子相互作用の両者を同じ土俵で扱うことによって明らかにしようとする当研究の研究目的が述べられている。

第2章では、当論文で研究の対象とする多体系のハミルトニアンが提示されている。電子系の軌道とその運動エネルギー、また局所的格子振動を量子化したフォノンが導入され、電子間相互作用については各サイトにおけるクーロン相互作用、交換相互作用、ペアホッピングの項を考える。電子・格子相互作用については局所的対称性を考慮して相互作用が導入されている。

第3章では、通常及び異常二種類のグリーン関数を定義し、南部表示を用いたダイソン・ゴルコフ方程式が超伝導を記述する枠組みとして導入される。その自己エネルギーはスピン、電荷あるいは軌道のゆらぎを交換することによって生じるが、これらのゆらぎについては乱雑位相近似 (RPA) で扱うこととし、電子間相互作用と電子・格子相互作用の両者を考慮した感受率を求めている。この感受率の発散点は秩序状態への不安定性を決定するが、どの成分が発散を示すかが秩序状態を決定することになる。臨界点周りのゆらぎが超伝導クーパ対形成の引力の起源となるが、どのような超伝導状態が実現するかはエリアシュベルグ方程式を解いて決定される。

第4章は本論文の中核部分である。まず、軌道自由度に対する見通しを良くするためには擬スピンの概念を導入することが有効であることが指摘されている。スピン空間のSU(2)対称性のような完全な回転対称性は持たないが、擬スピンの大きさおよびその $y$ 成分は良い量子数になっている。

局所的な対称性によって縮退した多軌道系を考えるとその対称性に応じたヤーン・テラー結合が重要になる。典型例としては立方対称群 $O_h$ の二次元表現 $E_g$ に属する二重縮退した軌道を考え、各サイトで $E \otimes e$ ヤーン・テラー型の電子・格子相互作用を主として考えている。

運動エネルギーの項で異なる種類の軌道間のホッピングを無視すると、軌道を表わす擬スピンの大きさとその $y$ 成分は良い量子数のままであるから、超伝導のクーパー対の状態の分類にもその量子数を用いることが出来る。軌道の自由度を使って電子の入れ替えに対して反対称にすればスピントリプレットでありながら $B_1$ の既約表現に属するクーパー対のような通常分類では出てこない状態の可能性が生じる。本論文では、その分類をすべて求め、実際に線形化されたエリアシュベルグ方程式を解くことによって、電子間相互作用および電子・格子相互作用のパラメータスペースで相図を求めている。

異種軌道間のホッピングを取り入れると、擬スピンは保存しなくなるので擬スピンの大きさおよびその $y$ 成分の値が異なる状態も混ざることになる。このとき、奇周波数の成分も混ざることが指摘されている。その混ざりを含めたクーパー対の分類を行い、異種軌道間ホッピングを入れたときに、固有値がどのように変化するかを調べている。異種軌道間のホッピングが大きくなるとバンド指標による表示が良くなり、異なるバンド間のクーパー対の振幅は抑えられて、通常群論的分類に次第に漸近していく様子を明らかにした。またその場合にも、反強磁性と軌道秩序の境界付近で、電子・格子相互作用による軌道ゆらぎと電子間相互作用によるスピンゆらぎの協力現象の結果生じる新しいタイプのスピントリプレット相が出る可能性があることを見出した。

以上見てきたように、本論文では多軌道系が電子間相互作用および電子・格子相互作用の両方で結合した時の超伝導について系統的な理論研究を展開し、軌道縮退が超伝導に対してもつ役割の理解を深めると同時に、軌道ゆらぎとスピンゆらぎの相関による新しいタイプの超伝導相の可能性を見出した。なお当論文の議論は偶周波数のクーパー対が主成分である範囲にとどめられているが、その制限を外すと奇周波数が主成分であるクーパー対の可能性があると付録としてまとめられている。

本論文は指導教員である高田康民教授および同研究室前橋英明助教との共同研究に基づいているが、本人の寄与は主体的で十分であると認められる。

よって論文審査委員会は全員一致で博士(理学)の学位を授与できると認めた。