

論文審査の結果の要旨

氏名 苅宿 俊風

本学位論文は6章からなり、1章はディラック電子系についての序論および本論文の概要、2章は逆ペロフスカイト物質 Ca_3PbO および同族物質についての解説、3章はこれらの物質に対する強束縛模型の構築、4章は低エネルギー有効ハミルトニアンへの導出、5章は Ca_3PbO の模型における物性の計算、6章は本論文で得られた結論および今後の展望を述べている。

ディラック電子系は、グラフェン（炭素原子一層からなる物質）において典型的に実現し、20世紀中頃にグラフェン中の電子がディラック電子と見なせることが示されたが、2000年代初頭からグラフェンが実際の試料として得られるようになり、その特異な物性が注目された。2010年にグラフェンがノーベル物理学賞を受賞した前後からは、物性物理学の大きな分野が創成されている。ディラック電子というのは、元来は場の理論において、電子を相対論的に扱う際に生じる電子であるが、一般には質量をもった相対論的粒子である。グラフェンで実現するのは、質量がゼロのディラック電子であり、それに伴う物性の特異性が興味の焦点となった。これから生じる興味深い問題は、ディラック電子が、グラフェン以外の物質でも実現するか、特に、グラフェンが原子一層からなる2次元系であるのに対して、3次元物質において質量ゼロのディラック電子が実現するか、という問題である。物質に関しては、単体のBiがディラック系であることは長年知られていたが、最近では或る種の有機導体、あるいは鉄系超伝導体において質量ゼロのディラック電子が実現することが知られている。また、最近物性物理学の重要な分野となっているトポロジカル系と呼ばれる物質（BiSb等の合金やIII-V族半導体関連物質）においても質量ゼロのディラック電子が実現し、詳しく調べられている。

本学位論文の主眼は、これらとは全く異なる物質族として、「逆ペロフスカイト」と呼ばれる構造をもつ Ca_3PbO という物質とその同族物質を新しいディラック電子系の候補として理論的に提案したことである。ペロフスカイトというのは、一般には遷移金属原子の周りを、酸素などの別の元素が8面体的に囲んだユニットが連結された構造であり、銅酸化物高温超伝導体が層状ペロフスカイト構造をもつという関連からも、1980年代から興味をもたれている構造である。「逆」ペロフスカイトというのは、酸素原子の周りを金属原子（ここではCa）が8面体的に囲んだユニットが連結された構造であるために、そのように呼ばれる。この物質群そのものは前世紀から合成はされていたが、その電子構造はあまり明らかでなかった。

学位申請者は、まず、 Ca_3PbO のバンド構造を第一原理電子状態計算によって調べ、3次元ディラック電子が存在することを見いだした。詳しくいうと、ディラック電子の分散（波数の関数としてのバンド・エネルギー）は、ごく小さいギャップ（質量項）を持ち、傾いてはいるが、ほぼ線形な分散（コーン）をもつ。これ以外のバンドが近くにいないために、フェルミ・エネルギーは厳密にコーンの頂点（ディラック点）に位置し、波数としては立方晶のブリルアンゾーンの Γ -X 線

上に存在する。Ca₃PbO 関連の他の物質についても第一原理計算が行われ、Sr₃PbO、Ba₃PbO、Ca₃SnO、Sr₃SnO についてはフェルミ・エネルギー近傍で Ca₃PbO とよく似たバンド構造を持つことが示された。他方、Ba₃SnO においては、2つのディラック点がエネルギー軸上でも波数軸上でも近接して存在することが示された。

次に、このように求められた Ca₃PbO の第一原理的バンド構造を再現するタイトバインディングモデルの構築が行われた。電子構造の物理的理解のため、また物性の計算のために、これは重要な手順である。第一原理計算で得られた電子状態を、最局在ワニエ軌道を基底波動関数としてタイトバインディングモデルを作る、という近年標準となっている手法が用いられた。得られたモデルを解析することにより、Ca₃PbO のハミルトニアンで低エネルギー極限が確かにディラック・ハミルトニアンであることが確認された。タイトバインディングモデルについてはさらに詳しく解析が行われ、Ca₃PbO におけるディラック電子の起源も議論された。結果として以下の3点がディラック電子の出現に本質的な役割を果たすことがわかった：(1) 結晶構造、及びフェルミ・エネルギー近傍のバンドを構成する軌道の対称性、(2) p バンド (Pb-6p 軌道由来のバンド) と d バンド (Ca-3d 軌道由来のバンド) の重なり合い、(3) スピン軌道相互作用。さらに、以上をもとに、Ca₃PbO のディラック電子を記述する必要最低限の (ミニマル) モデルも提案された。また、ディラック分散のわずかなギャップ (質量) の起源も明らかにされた。

最後に、導出されたタイトバインディングモデルを用いて、軌道帯磁率および表面状態が理論的に調べられた。軌道帯磁率については、化学ポテンシャルがディラック点のエネルギーに近い場合に、強い化学ポテンシャル依存性および温度依存性を持つことが明らかになった。この特性は、実験的にディラック電子の存在を明らかにするために用いることができると考えられる。一方、表面状態については、単なるバルク状態の表面への射影とは異なる表面状態モードが出現することが見出された。トポロジカル系との比較の観点からは、本学位論文で提案された逆ペロフスカイト系は、トポロジカル量子数と呼ばれる、系を特徴付ける量の計算から、トポロジカルではない (例えば、トポロジカルな性質に付随するスピン・ホール効果は示さない) と結論されたが、トポロジカルにする方策は将来の課題であろう。

以上のように、本学位論文では、Ca₃PbO をはじめとする逆ペロフスカイト構造をもつ一群の物質が3次元ディラック電子系であることが、先ず理論的に予言された。そして、その電子構造をもたらす理由が、タイトバインディングモデルという単純化されたモデルから明らかにされた。最後に、ディラック電子系であることを示唆する実験方法も提案された。実験的にこれらの物質が3次元ディラック電子系であるか、などの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、ディラック電子系の理解に重要な貢献をするだけでなく、将来的にも、多彩なディラック電子系の物理の発展にも資することが期待される。

なお、本論文の一部は小形正男教授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。