

氏名	飯村 翔馬
博士の専攻分野の名称	博士（理学）
学位記号番号	博理工甲第 1195 号
学位授与年月日	令和 3 年 3 月 25 日
学位授与の条件	学位規則第 4 条第 1 項該当
学位論文題目	補償金属的バンド構造を持つ近藤系の超伝導
論文審査委員	委員長 助 教 星野晋太郎 委 員 教 授 佐藤 一彦 委 員 助 教 品岡 寛 委 員 教 授 吉永 尚孝

論文の内容の要旨

超伝導体は完全導電性や完全反磁性、磁束の量子化を伴う渦の形成などの多彩な物性を示し、多くの研究者の興味を惹きつけてきた。その発現機構の研究は既存の現象の解明だけでなく、将来的には新たな超伝導体の設計にもつながる重要な研究課題である。超伝導の微視的な発現機構は Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) の 3 人によって提案され、彼らは「伝導電子間の局所的な引力によって s 波 Cooper 対が形成され、フルギャップ超伝導が実現する」(BCS 理論) と論じた。しかし、f 電子系超伝導体の発見に始まり、BCS 理論ではその発現機構が説明できない非従来型超伝導体が現在に至るまでに数多く発見されている。

f 電子系では、局在性を示す f 電子間の強い斥力に起因して重い電子の形成などの多彩な物性が発現する。重い電子の形成に重要であるのが近藤効果、すなわち「局在スピンとして振る舞う f 電子と伝導電子が低温領域で一重項（近藤一重項）を形成する」現象である。一方、超伝導に関しては、強い斥力が s 波対形成を阻害するため、非 s 波対の形成によるノーダルギャップ超伝導が実現すると考えられてきた。しかし近年、f 電子系超伝導体 $CeCu_2Si_2$ や UBe_{13} においてフルギャップ状態の実現が報告されており、これらの超伝導体では非 s 波対の形成とは異なる発現機構が実現している可能性がある。

本研究では強い斥力を伴う f 電子系におけるフルギャップ超伝導の発現機構を提案した。その際、我々は「 UBe_{13} は f 電子を供給する U 元素に比べて Be 元素を多く含む」ことから、その伝導バンド構造に Be の性質を強く引き継いでいる可能性に着目した。単体の Be は Fermi 準位上に電子バンドと正孔バンドを持つ補償金属であるため、我々は超伝導発現機構を論じる舞台として「補償金属的バンド構造を持つ近藤系」を着想した。この系では電子と正孔が近藤一重項の形成に関して競合するため、低温領域における基底状態は「近藤効果を通じた電子と正孔の量子力学的重ね合わせ」によって実現し、ゲージ対称性の破れた超伝導状態の出現が期待される。f 電子系の超伝導発現機構としては磁気秩序などが抑制される量子臨界点近傍における揺らぎを媒介した対形成などが議論されてきた。一方、「補償金属系における電子と正孔による競合の効果」に着目したのは本研究が初めての例である。

本研究では「補償金属的バンド構造を持つ近藤系」の超伝導発現機構の確立とその物理的性質の解明を目的とする。微視的なモデルに対して平均場理論を適用し、解析計算・数値計算の両面から研究を行った。以下に本研究の主な成果を記す。

【超伝導発現機構：秩序変数と電磁応答】

補償金属バンドの低エネルギー領域を記述する有効模型を用いて超伝導発現機構を調べた。その結果、補償金属的バンド構造を持つ近藤系ではBCS理論とは異なり、電子・正孔・局在スピンの3体の束縛状態である「複合体ペア」の形成によってフルギャップ状態が実現することを明らかにした。また、1粒子励起スペクトルが従来のBCS超伝導とは異なる間接ギャップ構造を持つことを示した。さらに電磁応答関数を微視的に計算し、「複合体ペアの形成によって2次的に誘起された伝導電子間のCooper対が電流を運ぶ」というMeissner応答の機構を解明した。

【磁場誘起相転移】

提案した発現機構の同定には、その物性におけるBCS超伝導との差異を明らかにすることが重要である。BCS理論では常伝導状態のZeemanエネルギーがCooper対の凝縮エネルギーを上回ることで1次転移が生じるPauli対破壊効果が知られている。この対破壊効果に着目し、強束縛模型を用いて解析を行った。その結果、補償金属的バンド構造を持つ近藤系にもフルギャップ状態から常伝導状態への1次転移が存在することを示した。この転移は近藤一重項に対するPauli対破壊効果のアナロジーとして理解できる。一方、通常のBCS超伝導には見られないギャップレス超伝導状態へのLifshitz転移が存在し得ることを明らかにした。

【超伝導渦の特性】

超伝導の代表的な物性である渦の性質を解明した。BCS理論では超伝導渦の中心付近に低エネルギーの束縛状態が出現することが知られている。実空間強束縛模型による数値解析の結果、我々が提案した超伝導状態における渦は以下のような特性を持つことを明らかにした。(i) 空間変調のスケールが相互作用の値に依存しない。(ii) 束縛エネルギーはバルクギャップと同程度のエネルギースケールを持つ。これらはBCS超伝導とは対照的な特性であるため、その物理的起源の解明を目指し、準古典Green関数の理論を構築した。その結果、上述した渦の特性は伝導電子の自己エネルギーが周波数の逆数に比例するという特徴的な構造に起因することを明らかにした。

本研究によって補償金属的バンド構造を持つ近藤系ではフルギャップ超伝導が実現し、様々な物性にBCS超伝導との差異が現れることを明らかにした。また、この超伝導状態は伝導電子間のCooper対の形成ではなく、電子と正孔の近藤効果への競合による複合体ペアの形成によって実現する。したがって、本研究の結果は補償金属系における強相関現象の概念を拡張するものであると考えられる。

論文の審査結果の要旨

低温において電気抵抗が消失する超伝導現象は、その劇的な性質から学術的な興味を惹くのみならず、今日における量子エレクトロニクスの根幹を成す基本的な物理となっている。1980年代よりも以前の超伝導に対してはその発現機構は確立されており、電子・格子相互作用に基づく電子間の有効的な引力により電子対（クーパー対）が形成され、それが量子凝縮した状態として理解される。このような超伝導体は Bardeen-Cooper-Schrieffer による超伝導の標準理論（BCS 理論）によって記述され、BCS 超伝導体または従来型超伝導体と呼ばれる。一方で、近年において研究対象となっているのは、電子間のクーロン相互作用が顕著となるような強相関電子系と呼ばれる物質群である。この系は高い超伝導転移温度を持つことや、量子コンピュータへの応用が期待されているトポロジカル超伝導体の候補物質を含むことから、その発現機構および低温での量子状態を理解することは重要な研究課題である。

BCS 超伝導体における電子対は空間的に局所的かつ等方的な構造を持つ。このとき、超伝導体のエネルギースペクトル構造には、相転移に伴ってエネルギーギャップが形成され、超伝導状態の熱力学的安定性を反映する。それに対して、強相関系のクーパー対は、強いクーロン反発によるエネルギー損を避けるため、空間または時間的に非局所的かつ異方的となり、一般に従来型と著しく異なる性質を持つ。本論文で強相関系の対象物質として着目したのは、重い電子系と呼ばれるランタノイド・アクチノイド元素を含む化合物群である。これらの系は原子の内殻に f 電子を持つことが特徴的であり、局在性が強いために電子間クーロン相互作用に基づく多彩な現象を生み出し、かつ非従来型超伝導体の宝庫でもある。このうち、 CeCu_2Si_2 や UBe_{13} という物質は 1980 年頃に発見された初期の非従来型の超伝導体であり、長らくそのクーパー対は強相関電子系に特有な異方性を持つものであると考えられてきた。ところが、2014 年以降、角度分解磁場中比熱測定の結果から、これらの物質では等方的なクーパー対が形成されている可能性が指摘された。 f 電子を含む系では電子間クーロン相互作用のために素朴には等方的な電子対は考えにくいいため、従来型超伝導とは異なる描像で発現機構を理解する必要がある。

本論文はこの観測結果に触発され、 f 電子系における局所的かつ等方的なクーパー対形成の可能性について、理論的に検討したものである。特に UBe_{13} の化学的組成比について注目し、Be が U に比べて十分多いことから、伝導電子のバンド構造は主に Be 単体の性質を引き継いでいると考えた。Be 単体は電子と正孔が同数の補償金属であるという特徴を備えており、そこに局在 f 電子を持つ U を導入した相互作用モデル（近藤格子）として UBe_{13} の電子系を捉えることができる。本論文ではこのモデルを理論的に定式化し、量子統計力学による解析が行われている。実際に物理量を計算することにより、補償金属と f 電子の相互作用に起因する等方的な超伝導状態が現れることを見出し、相転移温度以下における特徴的な振る舞いを詳細に調べている。

電子系の低温・低エネルギーの振る舞いは長波長成分が主要な寄与をする。そこで、本論文では連続体近似を施した局在スピンと補償金属的伝導バンドの相互作用モデルから出発する。伝導電子と局在電子のスピン自由度が結合した一重項状態（近藤効果）を有効的に記述することのできる平均場近似を適用することで、種々の物理量が解析的に計算されている。特にエネルギースペクトルの構造を調べることで、比熱などの熱力学量に現れる励起エネルギーと、光学遷移に現れる励起エネルギーが異なることを見出した。従来型の超伝導ではこれらは同じであるため、本論文で提案される超伝導を同定するための手掛かりとなる。さらに、電磁応答関数も計算され、超伝導状態に特有の完全反磁性（マイスナー効果）の性質についても明らかにされている。すなわち、本論文で考えた超伝導状態では、パラメータに依らずに磁場下で磁束が侵入しやすい

ことがわかり、この点も BCS 超伝導体とは異なる性質である。

超伝導体に磁束が侵入する際、ローレンツ力の作用によって渦電流が形成され、かつその渦度が量子化されることから量子渦と呼ばれる。本論文では、従来型超伝導状態との差異が、量子渦のコアに束縛された電子状態にも現れることを数値解析により明らかにしている。BCS 超伝導体では、コアの半径はバルクのエネルギーギャップに逆比例し、束縛エネルギーは角運動量に比例する分散関係を持つ。一方、論文中で議論されている近藤系の超伝導状態では、特徴的な長さがパラメータに依らずフェルミ波数の逆数程度で与えられ、また束縛エネルギーもバルクギャップと同程度となっており、その特徴が鮮明に表れている。さらに、得られた数値データを、物理的描像がわかりやすい長波長成分を抽出した準古典理論によって解釈することも試みられている。その結果、電子の自己エネルギーが振動数に逆比例するという性質から上記の特異な振る舞いが説明されている。

このように本論文は重い電子系における超伝導の発現機構および基底状態に対して新しい知見をもたらしており、博士論文としてふさわしいものと考えられる。