

(続紙 1)

京都大学	博 士（理 学）	氏名	野本 拓也
論文題目	Pairing symmetry and gap structure in heavy fermion superconductors （重い電子系超伝導体における超伝導対称性とギャップ構造）		
(論文内容の要旨)			
超伝導の微視的理論は、二電子間の引力相互作用による束縛状態（クーパー対）の凝縮として超伝導相を記述するBCS理論を基礎としている。単純な系を対象とする限り、BCS理論が記述するクーパー対状態はスピン一重項と三重項の成分に分類され、対凝縮により生じるフェルミ粒子励起エネルギーのギャップ（以下、超伝導ギャップ）の波数依存性に軌道自由度の対称性が反映される。ところが近年研究対象となっている重い電子系超伝導物質や2008年ごろに発見された鉄系超伝導体では、クーパー対が異なるフェルミ面にわたって形成される多軌道性とその結果生じるスピン軌道結合が無視できず、スピン一重項と三重項とに分類できない超伝導対称性となりうるということがわかっていた。本論文では、多軌道超伝導体を対象に、電子状態の第一原理計算と結晶対称性に関する群論的分類という一般論とを併用した超伝導対称性の理論研究を行い、超伝導ギャップの波数依存性に関する実験事実から超伝導対称性を読み取る手法の提案が行われている。具体的に、本論文は次の3つの内容からなる。 [1] 第一原理計算により明らかにされた超伝導体 UPt3 の異常な多ギャップ構造 超伝導体 UPt3 は非常に複雑な多バンド構造を有しており、約30年間にわたり超伝導対称性が明らかにされなかった物質であるが、近年の熱伝導実験が契機となって可能な超伝導対称性が推測された。そこで、本研究ではウラン5f軌道の電子間相関を有する微視的モデルに対する第一原理計算によりバンド構造を調べ、並びに平均場近似による超伝導ギャップの調査を行った。その結果、この系ではスピン軌道相互作用は強いが、奇パリティ多軌道超伝導が実現しているとみなせることを確認し、実験事実から現象論的に推察された超伝導対称性を微視的計算により確立することに成功した。 [2] 多軌道系物質に起こる可能な多極子超伝導の分類 本研究では、UPt3 での結果を踏まえて、スピン軌道結合の強い多軌道系で実現可能な超伝導対称性の群論を用いた分類を行った。多軌道系での可能な対称性の分類は、鉄系超伝導体に限った題材とした調査は海外で過去に行われていたが、重い電子系超伝導を含む一般的な調査は実行されていなかった。この分類により、例えば、単軌道系において s 波対称性につながる点状相互作用を仮定したモデルにおいても、波数依存する、つまり異方的な超伝導ギャップ関数が多軌道系では実現可能となることがわかる。 [3] 非共型磁性超伝導における超伝導ギャップのノード構造 重い電子系などの強相関系において実現する超伝導はしばしば、磁気秩序との共存という形で実現することがある。この場合、波数空間での副格子の自由度が新たな多軌道性として関与してくる。具体的には、超伝導ギャップ関数を非定形型磁気空間群での既約表現として考える必要があり、波数空間でのブリルアンゾーンの境界での超伝導ギャップの線状ノードという、単軌道系でのスピン一重項と三重項への分類に基づいた従来の見方では説明できない超伝導ギャップ構造の特徴が得られることを示した。実際、UCoGe やUPd2Al3 といった磁性超伝導体のバンド構造を説明する微視的モデルにおいてギャップ構造の具体的な計算を行い、群の既約表現として考えられるギャップ関数の対称性の中に微視的計算により得られたギャップ構造が含まれることを確認した。			

(論文審査の結果の要旨)

電子相関の強い系で実現される重い電子系超伝導や鉄系超伝導では、電子状態が複数の軌道にまたがる複雑な構造を有し、異なる軌道間にわたる二電子束縛状態を形成する。そのため、従来の単軌道系で起こる超伝導を対象とした群論的手法によって得られる超伝導対称性のリストには見出されない超伝導ギャップ関数が、鉄系超伝導体や重い電子系超伝導体 UPt₃ の近年の実験によって見出され、理論的理解が急務であった。野本氏は、この複雑な問題に第一原理計算という物質に即した理論計算と群論による対称性の分類という一般的考察とを併用し、実験データから推察される超伝導対称性に確固たる知見を与えることができる理論的手法を提案し、実行したものである。本論文は[1]第一原理計算により明らかにされた超伝導体 UPt₃ の異常な多ギャップ構造、[2]多軌道系物質に起こる可能な多極子超伝導の分類、[3]非共型磁性超伝導における超伝導ギャップのノード構造、の3つの部分からなる。以下、項目に分けて記述する。

[1]では、約30年間にわたり超伝導対称性が明らかでなかった重い電子系物質 UPt₃ の超伝導の微視的理論研究を行った。この系の非常に複雑な多バンド構造を念頭に、ウラン5f軌道の電子間相関を有する微視的モデルに対する第一原理計算を実行して既知のバンド構造が再現されることを確認し、平均場近似による超伝導ギャップの調査を行った。その結果、この系ではスピン軌道相互作用が強いが、二次元表現に属する既約表現で軌道成分が記述できる奇パリティ超伝導が実現していることがわかり、実験データと符合する電子対状態の姿が明らかとなった。

[2]は、[1]の UPt₃ 超伝導の微視的理論研究から派生した題材で、重い電子系超伝導を念頭に置いた多軌道系で可能な超伝導対称性の一般的な分類が過去に行われていなかったことから、スピン軌道結合の強い多軌道系で実現可能な超伝導対称性の群論による分類を行った。この分類により、例えば、単軌道系において s 波対称性につながる点状相互作用を仮定したモデルにおいても、波数依存する、つまり異方的な超伝導ギャップ関数が多軌道系では実現可能となる、という重要な知見を得るに至った。この研究により、実験データをもとに現象論的に超伝導対称性を推察することが容易になり、[1]で実行されたような第一原理計算を併用した超伝導電子状態の行うべき理論研究の道筋が明確になったといえるであろう。

[3]では、重い電子系物質などの強相関系において実現する超伝導がしばしば、磁気秩序との共存という形で実現されるという点に着目し、波数空間での副格子の自由度が新たな多軌道性として関与してくる場合に [2]の群論的分類の手法を拡張した。具体的には、超伝導ギャップ関数を非定形型磁気空間群での既約表現として考え、波数空間におけるブリルアンゾーンの境界での超伝導ギャップの線状ノードという、単軌道系でのスピン-重項と三重項への分類に基づいた従来の見方では説明できない超伝導ギャップ構造の特徴が得られることを示した。実際、UCoGe や UPd₂Al₃ といった磁性超伝導体のバンド構造を説明する微視的モデルにおいてギャップ構造の具体的な計算を行い、群の既約表現として考えられる超伝導対称性の中に微視的計算により得られたギャップ構造が含まれることを確認した。

以上の結果は、重い電子系物質や鉄系物質といった複雑な電子状態を有する系にみられる多軌道超伝導において可能な超伝導対称性を明らかにするための理論的手法を独自に提案した、独創性の高い理論研究の成果であり、今後実験事実の解析にとって重要な役割を果たすと期待できる。よって、本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。また、平成29年1月12日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。

