

(続紙 1)

京都大学	博士 (理学)	氏名	野垣 康介
論文題目	Topology and Strong correlation effect of Hidden symmetry breaking superconductor (隠れた対称性の破れを伴う超伝導体におけるトポロジーと強相関効果)		
(論文内容の要旨)			
<p>自然界における対称性の破れは物理学における基本原理の一つである。また、物理学の各分野を横断する原則として、対称性の破れと系の内部自由度との間に密接な関係があることが知られている。物性物理学においては、磁性など、電子が持つスピン自由度に由来する諸現象が古くから調べられてきた。また近年では、局在電子の軌道自由度をスピン自由度と合わせて物性研究を行うことがしばしばなされるようになった。さらに最近では、新たな内部自由度として結晶の副格子自由度を考え、それに由来する物性現象を開拓する研究が重要なテーマとなっている。磁性分野では、拡張多極子秩序やアルターマグネティズムと呼ばれる研究トピックスがその代表例である。</p> <p>以上のような学術的背景のもと、副格子自由度がある超伝導が注目を集めている。その契機となったのが、2021年に報告されたCeRh₂As₂という超伝導体の発見である。そこで観測された磁場誘起超伝導相は副格子自由度に由来する新奇な超伝導相だと考えられている。CeRh₂As₂は結晶全体としては空間反転対称性を有するが、副格子自由度があるためにCeサイト上では空間反転対称性を持たない。この「隠れた対称性の破れ」は電子状態のみならず超伝導状態にも大きな影響を与え、磁場により超伝導相のパリティが偶から奇に転移する。特に、奇パリティスピン一重項超伝導という通常はフェルミ粒子の反交換性から禁止される超伝導が副格子自由度により可能となり、CeRh₂As₂の高磁場超伝導相において初めて発見されたと考えられている。</p> <p>このような背景のもと、本学位論文において野垣康介氏は、CeRh₂As₂の超伝導相を包括的に解明するとともに、さらに新奇な超伝導相を予言する理論研究を行った。本論文は、副格子自由度がある超伝導に関するイントロダクションとCeRh₂As₂に関する実験研究のレビュー (1章)に加えて、[1]CeRh₂As₂の電子状態の評価とトポロジカル超伝導相の同定 (2章)、[2]CeRh₂As₂における多重超伝導相図の理論的解明 (3章)、[3]磁場誘起奇パリティ超伝導の理論的予言 (4章)、の3つのオリジナルな研究内容から構成される。以下において、各研究内容を要約する。</p> <p>[1]非共型結晶対称性に保護されたトポロジカル数をバンド構造に基づいて評価するためのフェルミ面公式を導出した。第一原理計算によりCeRh₂As₂のバンド構造を計算し、CeRh₂As₂の高磁場奇パリティ超伝導相がトポロジカル結晶超伝導相であり、その表面にマヨラナ粒子が現れることを示した。</p> <p>[2] 隠れた対称性の破れに加えて強相関効果による磁気量子臨界性を考慮した量子多体計算を定式化し、それに基づいて副格子自由度がある2層ラッシュバーハバード模型の相図を計算した。その結果により、CeRh₂As₂の超伝導相図を定量的に再現することに成功した。</p> <p>[3] [2]の研究を副格子自由度がある強相関係超伝導に一般化し、スピン軌道相互作用がある2副格子ハバード模型を解析した。副格子間の結合が拡張多極子揺らぎの縮退を破り、奇パリティ多極子揺らぎが優勢となることで磁場誘起奇パリティ超伝導が起こること予言した。</p>			

(論文審査の結果の要旨)

未知の量子相を開拓する研究は、物質の基礎概念を更新する上で極めて重要である。また、未知の量子相はしばしば未解明の現象を実現する舞台になることから、基礎研究から応用研究に渡る広い研究領域において重要な課題となっている。未知の量子相を発見あるいは創出するための方法論は多様だが、その代表的なものとして、新規な自由度を導入することで量子相の概念を拡張する方法が挙げられる。物性物理学、なかでも固体物理学では長年にわたって電子のスピン自由度に由来する磁性現象が幅広く調べられてきた。そこでは、スピン自由度以外の内部自由度を導入し、新規な量子相を探索する研究の流れが近年ますます重要となっている。局在的な軌道自由度による現象として電子ネマティック秩序などが発見されており、さらに、副格子自由度に関する研究が拡張多極子秩序やアルターマグネティズムなどの重要なトピックスを生み出している。

一方、超伝導は2つの電子がクーパー対を形成し量子的に凝縮する現象である。したがって、超伝導現象についても、電子のスピン自由度に基づく研究が長年行われてきた。その標準的な理解によると、超伝導はスピン一重項超伝導とスピン三重項超伝導の2種類に分類される。フェルミ粒子の反交換性から、前者は偶の空間反転パリティを持ち、後者は奇パリティを持つことが知られている。このような分類に軌道自由度を導入することで新奇な超伝導相を理論的に提案する試みは古くからなされてきたが、2電子の量子凝縮という特異性により、有望とは考えられておらず、実現されてもいない。一方で、超伝導に副格子自由度を導入する理論研究が2010年頃から始まり、そこでは量子凝縮現象と矛盾しない形式で新奇な超伝導秩序相が可能となることが示された。その一つが奇パリティスピン一重項超伝導であり、これは副格子自由度があるためにフェルミ粒子の反交換性と矛盾しない。その理論的提案が2012年になされ、2021年にCeRh₂As₂において実験的発見が報告されたことが大きな注目を集めている。このような背景のもとで、本学位論文では3つの理論研究の成果をまとめている。以下では、それぞれの研究成果とその意義について述べる。

[1] 2021年の実験研究により、CeRh₂As₂の低磁場領域と高磁場領域に質的に異なる2つの超伝導相が存在することが示された。前者は偶パリティ超伝導であり、後者は奇パリティ超伝導であると考えられている。つまり、高磁場領域の超伝導相が前述の奇パリティスピン一重項超伝導相であると考えられている。本研究は、通常のスピン三重項超伝導など奇パリティ超伝導がトポロジカル超伝導になりやすい傾向を示すことに着目し、CeRh₂As₂がトポロジカル超伝導体である可能性を検証した。そのために第一原理計算を行い、また非共型対称性に守られたトポロジカル数を求めるためのフェルミ面公式を導出した。両者を組みあわせることで、CeRh₂As₂の高磁場領域でトポロジカル超伝導が実現されていることが示された。従来、内因的なトポロジカル超伝導の候補物質としてスピン三重項超伝導体と考えられてきたが、スピン三重項超伝導体は自然界に稀であることが当該分野の深刻な問題となっていた。本研究は自然界に遍在するスピン一重項超伝導体を用いてトポロジカル超伝導を実現することが可能であることを示し、具体的な例を発見した点で重要な意義がある。また、本研究で示したCeRh₂As₂のバンド構造は複数の後続研究において参照されており、当該分野の急速な進展に寄与したことが認められる。

[2] CeRh₂As₂が副格子自由度を有する超伝導体であると解釈された際に、2012年に計算された相図と実験結果がよく似ていることが重要な根拠となった。しかしながら、両者は定性的な一致を示すものの定量的には1桁程度一致しないことが知

られていた。本論文では、定量的な不一致の原因が強相関効果に由来する可能性を検討し、実際に2012年の理論では考慮されなかった多体効果を取り入れた計算を実施した。その結果、実験結果と定量的に一致する相関を示すことに成功し、強相関効果に由来する磁気量子臨界性が重要な寄与をしていることを突きとめた。当該分野の重要な問題となっていた理論と実験の定量的な不一致を解決したことにより、本論文はCeRh₂As₂の超伝導多重相関を解明する決定的な研究となった。そのため当該分野で高い評価を得ており、学位申請者は国際会議等における招待講演も複数行っている。

[3] 通常の場合、超伝導は磁場に対して脆弱であり、磁場印可とともに転移温度は減少する。それとは対照的に、磁場により超伝導転移温度が上昇する、あるいは磁場により超伝導が発現する現象を磁場誘起超伝導と呼ぶ。磁場誘起超伝導は重い電子系や有機伝導体などいくつかの物質群で観測されており、大変注目を集めているが、その微視的機構は幾つかの例を除いて解明されていない。本論文では、CeRh₂As₂に対する理論研究を一般化し、副格子自由度がある強相関電子系超伝導において磁場誘起超伝導が起こる一般的なメカニズムを解明した。ここでは、副格子自由度を用いて定義される拡張多極子揺らぎが重要な役割を果たす。特に、副格子間結合が複数の拡張多極子揺らぎの縮退を破り、それが磁場下で引力相互作用に寄与することが原因となって磁場誘起超伝導が起こることが示された。本論文は、このメカニズムが実現する例としてツイスト3層グラフェンを挙げている。磁場誘起超伝導は一般に非従来型の超伝導発現機構を示唆するが、それが具体的に示された例は少ない。本論文はその普遍的なメカニズムを解明した点に重要な意義が認められる。また、近年の磁性分野では拡張多極子秩序が重要なテーマとなっているが、それと超伝導の関係を明らかにした研究としても先駆的である。

総じて本論文は、副格子自由度がある超伝導体を舞台として、隠れた対称性の破れ、トポロジカル超伝導、強相関効果、量子臨界性など物性物理学の重要概念が結びつく現象を解明した理論研究として高く評価できる。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、令和6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。

要旨公表可能日： 年 月 日以降