

学位申請論文公開講演会

日時：1月23日（火）13:30～

申請者：矢田 圭司

場所：理学館 506 講義室

題目：「層状コバルト酸化物 Na_xCoO_2 の磁氣的性質および
超伝導発現機構の理論的研究」

（主論文の要旨）

水分子を挿入された層状コバルト酸化物 $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ ($x=0.35, y=1.3$) は Co 酸化物として初めての超伝導体 ($T_c=4.5\text{K}$) であることに加えて、Co 原子が三角格子状に並ぶために幾何学的フラストレーションが存在するなど、極めてユニークな特徴を有する強相関超伝導体である。本論文では 11 軌道 $d-p$ モデルに基づき、Co 原子軌道の強いクーロン斥力や CoO_6 の八面体の振動に由来する電子・格子相互作用を考慮して、多体電子状態や超伝導発現機構について詳細に解析した。本論文ではまずクーロン相互作用の効果を fluctuation-exchange (FLEX) 近似に基づき解析し、状態密度や動的帯磁率の計算を行った。その結果、帯磁率や状態密度が低温で緩やかに減少する現象（弱い擬ギャップ的振舞い）を再現するフェルミ面のトポロジー（円柱状のフェルミ面）を理論的に同定した。この結論は近年のバルク敏感な ARPES の実験により、ほぼ確立しつつある。

この物質では非磁性不純物による T_c の変化が小さいため、非 s 波超伝導体である可能性は低い。そこで本論文では、電子-格子相互作用に基づく s 波超伝導状態の可能性を考えた。Co の $3d$ 電子との結合が強いブリージングフォノン及びシアフォノンとの結合定数を見積もり、電子状態の変化の解析を行った。この系は多軌道系であり、Eg 表現に属するシアフォノンによってクーパー対の軌道間遷移が可能である（Suhl-Kondo 機構）ことから強い s 波の引力が存在することを導いた。更に本論文では電子・格子相互作用に加えてクーロン斥力を考慮して強結合エリアシュベルグ方程式を解析し、 T_c の定量的評価を行った。現実的なパラメーターを仮定した解析では、ブリージングフォノンによる引力はクーロン斥力によって打ち消されるため、ブリージングフォノンのみを考慮した場合には超伝導は起きなかった。一方、シアフォノンによる引力（Suhl-Kondo 機構）はクーロン斥力の影響を殆ど受けないため、シアフォノンを考えることで現実の T_c に近い値が得られた。これらのことから、上に提案した Suhl-Kondo 機構による s 波超伝導状態が実現している可能性が非常に高いことがわかった。

以上のように本論文では $\text{Na}_x\text{CoO}_2(\cdot y\text{H}_2\text{O})$ の正常状態および超伝導発現機構を理論的に研究し、(i) 円柱状のフェルミ面が実現すること、(ii) シアフォノンによる Suhl-Kondo 機構により s 波超伝導状態が実現している可能性が非常に高いこと、を示すことができた。