

課題名 (タイトル) :

Sr₂IrO₄ の超伝導性に関する研究

利用者氏名 : ○西口 和孝

所属 : 柚木計算物性物理研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年、5d 遷移金属酸化物 Sr₂IrO₄ が実験と理論の両方から注目されている。イリジウム酸化物 Sr₂IrO₄ は、銅酸化物高温超伝導体とよく似た結晶構造を持つとともに、Ir の t_{2g} 軌道が強いスピン軌道相互作用によって分裂することによって、反強磁性絶縁体状態が実現している。この銅酸化物高温超伝導体とのアナロジーから、キャリアがドーブされることによって Sr₂IrO₄ において超伝導が発現することが期待されている。本研究課題においては、5d 遷移金属酸化物 Sr₂IrO₄ を中心とするイリジウム酸化物の超伝導の発現の可能性を数値的に解析する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

弱結合理論の一つである乱雑位相近似 (random phase approximation (RPA)) を用いて、イリジウム酸化物 Sr₂IrO₄ を中心とするスピン軌道相互作用の強い多軌道 Hubbard model の磁性と、超伝導の発現の可能性について解析を行った。

3. 結果

スピン軌道相互作用を考慮することの出来るスピン依存の RPA の定式化と実装を行った。また、それを用いて Sr₂IrO₄ の解析を行うことによって、

- (a) スピン軌道相互作用と Hund 結合による縦・横 (擬) スピン感受率の異方性
- (b) 反強磁性的な (擬) スピンの揺らぎの増大
- (c) キャリアドーブした Sr₂IrO₄ での擬スピン揺らぎによる d-wave 擬スピンシングレット超伝導の可能性

を示した。

4. まとめ

RPA 計算で解析したイリジウム酸化物 Sr₂IrO₄ の磁気的な性質は、定性的に実験結果と一致する。従って、RPA はイリジウム酸化物のような系に対しても有効な近似となっている。

5. 今後の計画・展望

乱雑位相近似 (random phase approximation (RPA)) は計算量が比較的軽く、数値解析も定性的には良い結果を得ているが、定量的には現実の物質と比較して不満が残る。今後の展望としては、RPA を拡張し、多軌道・スピン依存揺らぎ交換 (fluctuation exchange (FLEX)) 近似を実装することを念頭に、より定量的に精度の高い計算を目指す。

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

【国際会議などの予稿集、proceeding】

Kazutaka Nishiguchi, Hiroshi Watanabe, Seiji Yunoki,
“Magnetism in Sr₂IrO₄: a weak coupling study”,
JPS Conference Proceedings (To be published).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

(a) Kazutaka Nishiguchi, Hiroshi Watanabe, and Seiji Yunoki,
“Theoretical study for the superconductivity in Sr₂IrO₄”,
The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES),
Tokyo, Aug, 2013.

(b) 西口和孝、白川知功、渡部洋、柚木清司、
“イリジウム酸化物における磁性と超伝導”、日本物理学会、徳島、2013 年 9 月。

【その他】