

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

5d 遷移金属酸化物 Sr₂IrO₄ は強いスピン軌道相互作用を持つ強相関物質であり、近年、実験と理論の両方から注目されている。特にイリジウム酸化物 Sr₂IrO₄ は、銅酸化物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とされている。このような銅酸化物超伝導体とのアナロジーから、キャリアがドーパ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

乱雑位相近似 (Random phase approximation) は、保存近似の一種である揺らぎ交換近似 (Fluctuation exchange approximation) のワンショット計算であり、強相関系の超伝導に対する弱結合理論からのアプローチの一種である。本研究では、超伝導が期待されている 5d 遷移金属酸化物 Sr₂IrO₄ の超伝導の可能性を理論的に明らかにするために、Sr₂IrO₄ の有効モデルである強いスピン軌道相互作用を有する 3 軌道ハバードモデルを乱雑位相近似で数値解析を行った。

3. 結果

Sr₂IrO₄ の 5d 電子は強いスピン軌道相互作用によってスピン (s) と軌道 (角運動量) (l) の自由度がエンタングルすることによって擬スピン $j_{\text{eff}} = |-l+s|$ が良い量子数となり、フェルミ面の $j_{\text{eff}}=1/2$ バンドの 1 バンド系的な性質が支配的となる。超伝導性の数値計算においても、この $j_{\text{eff}}=1/2$ バンドの電子が反強磁性的な擬スピン揺らぎの媒介によってクーパ対を形成し、擬ス

ピンシングレット d 波超伝導が実現されることが示された。

一方、Sr₂IrO₄ と類似した物質の超伝導を想定し、スピン軌道相互作用やフント結合の大きさを変化させて、超伝導性のパラメーター依存性を調べた。スピン軌道相互作用を小さくしていくと、フェルミ面には $j_{\text{eff}}=1/2$ バンドだけではなく $j_{\text{eff}}=3/2$ バンドも関与し、2 バンド系的な性質が支配的となる。また、フント結合を大きくすることによって 2 バンド間の相互作用が大きくなり、数値計算の結果、 $j_{\text{eff}}=1/2$ バンド内超伝導ギャップ関数と $j_{\text{eff}}=3/2$ バンド内超伝導ギャップ関数が異符号となる s_{\pm} 波超伝導が実現する。

4. まとめ

弱結合理論のアプローチの一種である乱雑位相近似を適用し、5d 遷移金属酸化物 Sr₂IrO₄ の超伝導の可能性を明らかにすることが出来た。Sr₂IrO₄ の超伝導は、従来のスピニングレットを形成する超伝導と異なり、強いスピン軌道相互作用による擬スピニングレットを形成するエキゾチックな超伝導となることが予測される。このことは、今後の Sr₂IrO₄ の実験の発展に対しても重要な寄与を果たすと期待される。

5. 今後の計画・展望

乱雑位相近似は多軌道スピン依存系においても比較的計算コストが少なく済むが、フェルミ面の効果が過大評価され、超伝導転移も現実の温度よりも高温になる。今後の課題としては、自己エネルギーを考慮する揺らぎ交換近似のコードを実装することを目指す。またそれによって、強いスピン軌道相互作用を持つ強相関系の超伝導のより精密な数値解析を行う。

平成 26 年度 RICC 利用研究成果リスト

【国際会議などの予稿集、proceeding】

K. Nishiguchi, H. Watanabe, S. Yunoki, “Magnetism in Sr_2IrO_4 : a Weak Coupling Study”, JPS Conf. Proc. 3, 015037 (2014).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

西口和孝, “イリジウム酸化物における超伝導 --- 弱結合理論からのアプローチ ---”, 京都大学基礎物理学研究所研究会「多自由度電子状態と電子相関が生み出す新奇超伝導の物理」京都大学, 2014 年 10 月.

【その他】

ポスター発表

西口和孝, 白川知功, 渡部洋, 有田亮太郎, 柚木清司, “イリジウム酸化物における核磁気共鳴の乱雑位相近似による理論的解析”, 日本物理学会第 70 回年次大会, 早稲田大学, 2015 年 3 月.