

機関番号：12612

研究種目：基盤研究(C)

研究機関：2008年度～2010年度

課題番号：20540350

研究課題名(和文)：特異なバンド構造と電子相関の協力効果による新奇量子伝導現象に関する理論的研究

研究課題名(英文)：Theoretical study on exotic quantum transport properties induced by Cooperation between peculiar band structures and electron correlation effects

研究代表者：

黒木 和彦 (KUROKI KAZUHIKO)

電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授

研究者番号：10242091

研究成果の概要(和文)：

量子力学によって支配される粒子である「電子」は波としての性質を持ち、その周波数と波長(あるいは逆数である波数)の間には一定の関係(分散関係)がある。波の分散関係は一般にそれが伝わる媒質によって異なるが、物質中では電子の分散関係が「バンド構造」となって現れ、物質の性質に重要な影響を及ぼす。一方、物質中には多くの電子が存在し、お互いに反発力(相互作用)を及ぼしあいながら運動している。本研究課題においては、物質が持つ「特異なバンド構造」と電子間の「相互作用」が協力しあうことで生み出される興味深い電子の伝導現象について、その起源と、そこで得た知見をベースにした新機能性物質開発のための設計指針についての理論的研究を行った。

研究成果の概要(英文)：

Electrons are particles governed by quantum mechanics, and therefore behave as waves. The frequency and the wavelength (or the wave number) of this wave are related by the dispersion relation, which is expressed in terms of the band structure in condensed matter. On the other hand, there are many electrons in condensed matter, and they repulsively interact with each other. In the present project, we have theoretically studied the origin of exotic electronic transport properties which are induced by cooperation of peculiar band structures and electron-electron interaction effects.

交付決定額

(金額単位：円)

| | 直接経費 | 間接経費 | 合計 |
|--------|-----------|---------|-----------|
| 2008年度 | 1,100,000 | 330,000 | 1,430,000 |
| 2009年度 | 900,000 | 270,000 | 1,170,000 |
| 2010年度 | 700,000 | 210,000 | 910,000 |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 総計 | 2,700,000 | 810,000 | 3,510,000 |

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性II

キーワード：超伝導、熱電効果、バンド構造、電子相関、鉄ニクタイト、銅酸化物、層状窒化物

1. 研究開始当初の背景

酸化物や有機物における超伝導や磁性に関するミクロなハミルトニアンに立脚した理論的研究が進むにつれ、電子相関が強い系と

いえどもバンド構造が重要であり、特異なバンド構造と電子相関が絡み合って新規な物性を生み出す可能性が認識されつつある。我々は、そのような流れの中で先駆的な役割

を果たし、研究開始当以前から、第一原理バンド計算で得られるバンド分散を考慮したモデルに基づいた、強相関電子系の理論的研究を行ってきた。例えば、コバルト酸化物 Na_xCoO_2 における大きな熱起電力、磁性と超伝導に関する研究や、有機物質における非従来型超伝導のペ어링対称性間の競合に関する研究などがあげられる。

2. 研究の目的

本研究課題では、特異なバンド形状を持つ相関物質に焦点をあて、バンド形状効果と電子相関効果の協力によって生み出される新奇な量子伝導現象について、理論的研究を行った。主な研究のターゲットは熱電酸化物、銅酸化物、層状窒化物、有機物質、そして本研究課題開始と時期を同じくして実験的に発見された鉄系超伝導体である。

3. 研究の方法

酸化物、窒化物、有機物に対し、第一原理バンド計算を元に理論モデルを構築し、多体論的手法を用いて、バンド効果と電子相関が協力して生まれる新奇な量子輸送現象に関する研究を行った。

4. 研究成果

(1) 熱電効果

本研究課題においてはまず、 SrTiO_3 の大きな熱起電力の起源について、第一原理バンド計算をもとにした研究を行い、バンド縮退の効果とバンド形状効果を議論した。ここでは、バンドの縮退による状態密度の増加がキャリアの増大に伴うフェルミ準位のバンド端からの遊離を抑制することがゼーベック効果の増大に有利にはたらき、かつ、バンドが平坦になることによる状態密度の増加とは異なり、フェルミ速度を大きく保つことによって電気伝導性を高めることを示した。また、 K_xRhO_2 の大きな熱電効果の起源をバンド形状と電子相関の観点から定量的に説明できることを示した。さらに、 CaMnO_3 の高スピン状態における大きな熱電効果の起源について、スピン偏極を考慮した第一原理計算を用いた解析を行った。黒木は本研究期間内に「熱電変換技術ハンドブック」(NTS)の一節を著した。

(2) 層状窒化物超伝導体

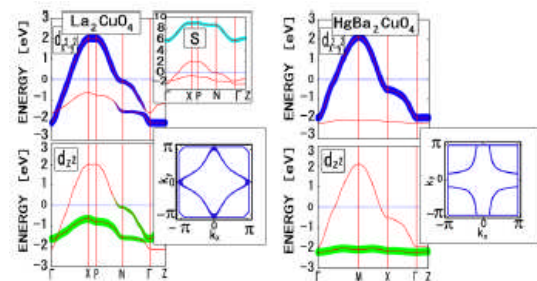
層状窒化物超伝導体 MNC1 ($M=\text{Hf}, \text{Zr}$) においては、状態密度が低く、電子・フォノン相互作用が小さいにも関わらず、超伝導臨界温度が高い理由が謎となってきた。我々はそれまで非従来型超伝導メカニズムの一つの候補と考えられてき

た電荷揺らぎによるメカニズムとは異なる、スピン揺らぎ媒介メカニズムを提唱した。スピン揺らぎをペ어링相互作用とすることにより、対称性から縮退する2種類のd波超伝導が混合したd+id超伝導状態が実現されることを示した。さらに、この状態において超流動密度を計算し、実験で観測されている超流動密度のキャリアドーピング依存性が理論的に理解できることを示した。

(3) 銅酸化物

銅酸化物高温超伝導体の臨界温度の物質依存性銅酸化物のうち、一層系に分類されるランタン系と水銀系において臨界温度が大きく異なる起源を理解するために第一原理計算から構築した2軌道モデルを導入した(図1)。従来の研究においては、フェルミ面の形状のみによって、物質依存性を理解しようとする研究が大勢であったが、このような視点に立つと、実験的に観測されるフェルミ面形状と臨界温度の相関関係は一見、理解しにくいように思われる。ところが2軌道モデルを考え、軌道間のエネルギー差の違いによって、フェルミ面形状が制御されていることを考慮すると、実験的に観測されている臨界温度の物質依存性が極めて自然に理解できることを示した。

図1：ランタン系(左)と水銀系(右)



銅酸化物の2軌道モデルのバンド構造とフェルミ面。

(4) 鉄系超伝導

本研究課題開始と時期をほぼ同じくして発見された鉄系超伝導体は、本研究課題に極めて整合した研究テーマであった。鉄系超伝導体は本質的に多軌道・多バンド系であり、そのバンド構造を正確に捉えた理論研究が不可欠である。我々は世界にさきがけて第一原理バンド計算に立脚した5軌道有効モデルを構築し、特異なバンド構造と電子相関効果が協力することで誘起されるスピン揺らぎが超伝導の発現に深く関わっているこ

とを提唱した。この成果は米国Physical Review Letters誌に掲載され、出版から約3年間の間に438回の被引用回数がある。さらにそれに引き続いて、複数ある鉄系超伝導体の中で、微妙な結晶構造の変化(図2)によって臨界温度や超伝導ギャップ構造が変化することについて、理論的な解釈を与えた。この論文についても、米国Physical Review Bの”Editor’s suggestion”に選ばれ、出版から約2年間の間に138回の被引用回数がある。その後も、フェルミ面の3次元性が超伝導ギャップ構造に及ぼす効果、並びに、鉄-ヒ素-鉄の結合角がフェルミ面の枚数と臨界温度の高低に及ぼす影響を研究し、実験結果に対する理論的解釈を与えた。

黒木は本研究課題期間内において鉄系超伝導に関する招待講演を国内外で12件行い、鉄系超伝導研究を含む超伝導理論全般にわたる業績が評価されて2009年5月に未踏科学技術協会より「超伝導科学技術賞」を授与された。

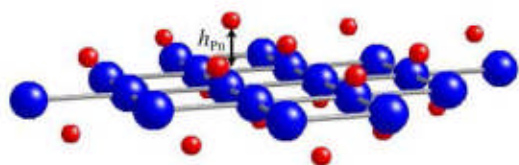


図2：鉄系超伝導体において、超伝導の性質を強く支配するニクトゲン原子の高さ。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計23件)

① K. Suzuki, H. Usui, K. Kuroki
Possible Three-Dimensional Nodes in the $s \pm$ Superconducting Gap of $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$,
J. Phys. Soc. Jpn. 80 巻 013710(1-4)
(2011) 査読あり

② H. Sakakibara, H. Usui, K. Kuroki, R. Arita, H. Aoki
Two-Orbital Model Explains the Higher Transition Temperature of the Single-Layer Hg-Cuprate Superconductor Compared to That of the La-Cuprate Superconductor, Phys. Rev. Lett. 105 巻 057003(1-4) (2010) 査読あり

③ H. Usui, S. Shibata, K. Kuroki
Origin of coexisting large Seebeck

coefficient and metallic conductivity in the electron doped SrTiO_3 and KTaO_3 , Phys. Rev. B 81 巻 215121(1-6) (2010) 査読あり

④ K. Kuroki
Spin-fluctuation-mediated $d+id'$ pairing mechanism in doped β -MnCl (M=Hf, Zr) superconductors
Phys. Rev. B 81 巻 104502(1-7) (2009) 査読あり

⑤ K. Kuroki, H. Usui, S. Onari, R. Arita, H. Aoki
Pnictogen height as a possible switch between high- T_c nodeless and low- T_c nodal pairings in the iron-based superconductors
Phys. Rev. B 79 巻 224511(1-16) (2009) 査読あり

⑥ H. Aizawa, K. Kuroki, Y. Tanaka
Pairing Competition in a Quasi-One-Dimensional Model of Organic Superconductors (TMTSF) $_2$ X in Magnetic Field,
J. Phys. Soc. Jpn. 78 巻 124711(1-10) (2009) 査読あり

⑦ 黒木和彦、有田亮太郎、青木秀夫

鉄系超伝導体における理論的研究の現状?有効模型とペアリング機構
日本物理学会誌(小特集：鉄系超伝導体)
64 巻 826-835 (2009). 査読あり

⑧ K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka,
H. Kontani, and H. Aoki Erratum:
Unconventional Pairing Originating from the Disconnected Fermi Surfaces of Superconducting $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$
Physical Review Letters 102 巻 109002(E) (2009). 査読あり

⑨ K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka,
H. Kontani, and H. Aoki Unconventional pairing originating from disconnected Fermi surfaces in the iron-based superconductor,
New Journal of Physics 11 巻 025017(1-8) (2009). 査読あり

⑩ K. Kuroki Unconventional pairing in doped band insulators on a honeycomb lattice: application to superconducting β -MnCl (M=Hf, Zr)

Journal of Physics : Conference Series
(proc. LT 25) 150 卷 052136(1-4) (2009).
査読あり

⑪ H. Aizawa, K. Kuroki, T. Yokoyama, and
Y. Tanaka Strong Parity Mixing in
the Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov
Superconductivity in Systems with
Coexisting Spin and Charge fluctuations,
Physical Review Letters 102 卷 016403(1-4)
(2009). 査読あり

⑫ R. Arita, K. Kuroki, K. Held, A. V.
Lukoyanov, S. Skornyakov, and V. I.
Anisimov Origin of large thermopower in
LiRh₂O₄ : Calculation of the Seebeck
coefficient by the combination of local
density approximation and dynamical
mean-field theory, Physical Review B 78
卷 115121(1-5) (2008) 査読あり

⑬ K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui,
Y. Tanaka, H. Kontani, and H. Aoki
Unconventional Pairing
Originating from the Disconnected Fermi
Surfaces of Superconducting LaFeAsO_{1-x}F_x
Physical Review Letters 101 卷
087004(1-4) (2008) 査読あり

[学会発表] (計 50 件)

① K. Kuroki
Maximizing the Fermi surface multiplicity
optimizes superconductivity in iron
pnictides, International Conf. on Novel
Superconductors and Supermaterials 2011
March 6-8, 2011 Tokyo, Japan

② K. Kuroki
Spin fluctuation mediated pairing and
lattice structure sensitivity of
iron-based superconductors, KITP
Miniprogram: Iron-Based Superconductors
January 10-21, 2011 Santa Barbara,
USA

③ 黒木和彦
有機超伝導体の理論, 日本物理学会秋季大
会 2010年9月23日-26日 大阪府
立大学

④ K. Kuroki
Unconventional superconductivity
originating from disconnected Fermi
surfaces in iron pnictides, Emergent
Quantum States in Complex Correlated
Matter August 22-27, 2010 Dresden,

Germany

⑤ K. Kuroki
The origin of the lattice structure
sensitivity of the superconductivity in
the cuprates and the iron pnictides,
Recent Progress on Spectroscopies and
High-T_c Superconductors August 9-11,
2010 Sendai, Japan

⑥ K. Kuroki
Peculiar Band Structures as Origin of the
Large Thermopower, CIMTEC2010 June
13-18, 2010 Montecatini Terme,
Italy

⑦ K. Kuroki
Anion height as an origin of the material
dependence of T_c in iron pnictides and
cuprates, International Conference on
Core Research and Engineering Science of
Advanced Materials May 30-June 5,
2010 Osaka, Japan

⑧ K. Kuroki
Anion height as a controlling parameter
for the superconductivity in iron
pnictides and cuprates, Int. Conf.
Spectroscopies of Novel Superconductors
2010 May 23-29, 2010 Shang-hai,
China

⑨ H. Usui, K. Kuroki
Effective five band model analysis of
iron-based phosphide superconductors,
Int. Conf. Spectroscopies of Novel
Superconductors 2010 May 23-29, 2010
Shang-hai, China

⑩ H. Sakakibara, H. Usui, K.
Kuroki, R. Arita, H. Aoki
A key parameter of the material dependence
of T_c in the cuprates, Int. Conf.
Spectroscopies of Novel Superconductors
2010 May 23-29, 2010 Shang-hai,
China

⑪ K. Suzuki, H. Usui, K. Kuroki
3 dimensional 5 orbital model for the 122
iron pnictide superconductors,
Int. Conf. Spectroscopies of Novel
Superconductors 2010 May 23-29, 2010
Shang-hai, China

⑫ S.-H. Choi, H. Aizawa, K.
Kuroki Theoretical study on the
superfluid density of superconducting

MnCl (M=Hf, Zr), Int. Conf. Spectroscopies of Novel Superconductors 2010 May 23-29, 2010 Shang-hai, China

⑬ 黒木和彦 「鉄系超伝導体のペアリング対称性の最前線：はじめに」
日本物理学会第 65 回年次大会 領域 8 シンポジウム 2010 年 3 月 21 日 岡山大学

⑭ K. Kuroki, K. Suzuki, and H. Usui
Origin of the lattice structure sensitivity of the superconductivity in the iron pnictides
American Physical Society 2010 March Meeting 2010 年 3 月 15-19 日
Portland, USA

⑮ K. Kuroki Unconventional pairings originating from disconnected Fermi surfaces in correlated superconductors
22nd International Symposium on superconductivity (ISS2009) 2009 年 11 月 2-4 日 エポカルつくば

⑯ H. Aizawa, K. Kuroki, H. Yoshino, K. Murata, Pudding mold'-type band as an origin of large thermopower in β -type organic conductors
The 8th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets 2009 年 9 月 12-17 日 ニセコヒルトンホテル

⑰ H. Usui, K. Kuroki Effective five band model analysis on the pressure effect of FeSe
9th International conference on materials and mechanisms of superconductivity (M2S2009) 2009 年 9 月 7-12 日
新宿京王プラザホテル

⑱ K. Kuroki Unconventional superconductivity originating from disconnected Fermi surfaces in iron pnictides
9th International conference on materials and mechanisms of superconductivity (M2S2009) 2009 年 9 月 7-12 日 新宿京王プラザホテル

⑲ K. Kuroki Unconventional pairing from multiple spin fluctuation modes in the iron pnictide superconductors
New directions of superconducting nanostructures 2009 (NDSN2009) 2009 年 9 月 4-5 日 名古屋大学

⑳ K. Kuroki Unconventional superconductivity originating from disconnected Fermi surfaces in iron based superconductors
New Developments in Theory of Superconductivity (NDTS09) 2009 年 7 月 8-10 日 東京大学物性研究所

㉑ K. Kuroki Pnictogen height as a possible switch between high T_c nodeless and low T_c nodal pairings in the iron pnictide superconductors
International Workshop on the Search for New Superconductors 2009 年 5 月 12-16 日 湘南国際村

㉒ K. Kuroki Spin fluctuation mediated extended s-wave pairing from multiple Fermi surfaces in iron pnictide superconductors
American Physical Society, March Meeting 2009 年 3 月 16-20 日
Pittsburgh, USA

㉓ 黒木和彦 特異なバンド形状が生み出す大きな熱起電力
研究会：新しい概念に基づく熱電材料とその物理 2008 年 12 月 12 日 東北大学金属材料研究所

㉔ K. Kuroki Peculiar band structures as origin of the large thermopower in Cobalt and Rhodium oxides
2nd International Symposium on Anomalous Quantum Materials 2008 年 11 月 7-10 日 東京大学

㉕ 黒木和彦 鉄砒素系超伝導体の有効模型とペアリング・メカニズム
学会等名 発表年月日 発表場所
日本物理学会 2008 年秋季大会
2008 年 9 月 21 日 岩手大学

㉖ K. Kuroki Unconventional Pairing in Doped Band Insulators on a Honeycomb Lattice : Application to Superconducting β -MnCl (M=Hf, Zr)
25th Int. Conf. Low Temp. Phys. 2008 年 8 月 6 日-13 日 Amsterdam, Netherlands

㉗ R. Arita, K. Kuroki, S. Onari, H. Usui, Minimal Model for Study on Superconductivity in $\text{La FeAsO}_{1-x}\text{F}_x$
25th Int. Conf. Low Temp. Phys. 2008 年 8 月 6 日-13 日 Amsterdam, Netherlands

㉘ H. Usui, R. Arita, K. Kuroki Study

on the origin of large thermopower in hole doped LaRhO₃ based on ab-initio downfolding

25th Int. Conf. Low Temp. Phys. 2008年
8月6日-13日 Amsterdam, Netherlands

⑳ H. Aizawa, K. Kuroki, Y. Tanaka
Competition between triplet, singlet and FFLO states in organic superconductors (TMTSF)₂X under magnetic field 25th Int. Conf. Low Temp. Phys. 2008年8月6-13日 Amsterdam, Netherlands

㉑ H. Usui, R. Arita, K. Kuroki
First-principles study on the origin of large thermopower in hole-doped LaRhO₃ and CuRhO₂
2nd Int. Workshop on Quantum Simulations and Designings 2008年5月31日-6月3日 東京、科学未来館

[図書] (計2件)

- ① 黒木和彦 「超伝導ハンドブック 福山秀敏、秋光純編 朝倉出版 (2009) 2.1.1節 p.30-34。
- ② 黒木和彦 「熱電変換技術ハンドブック」梶川武信監修 NTS (2008) 2.3.6節 p.237-248

[産業財産権]

- 出願状況 (計0件)
- 取得状況 (計0件)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

黒木和彦 (KUROKI KAZUHIKO)
電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授
研究者番号：10242091

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし