

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 10 日現在

機関番号：82110
 研究種目：若手研究(B)
 研究期間：2011～2012
 課題番号：23740280
 研究課題名（和文）スピン三重項超伝導体 Sr₂RuO₄ における d ベクトルの異方性と安定性の精密な解析
 研究課題名（英文）Precise analysis of anisotropy of the d-vector in spin-triplet superconductor Sr₂RuO₄
 研究代表者
 野村 拓司 (NOMURA TAKUJI)
 独立行政法人日本原子力研究開発機構・量子ビーム応用研究部門・研究副主幹
 研究者番号：90373240

研究成果の概要（和文）：

擬二次元ルテニウム酸化物 Sr₂RuO₄ はスピン三重項超伝導体であると考えられてきた。このためその超伝導状態はいわゆる d ベクトルで特徴付けることができると考えられている。本研究では、第一原理計算に基づく精密な電子構造に基づいて、この物質の超伝導対称性を解析した。その結果、ハバード模型に基づく先行研究の結果とは対照的に、スピン三重項 p 波状態よりもむしろ一重項 dx²-y² 波状態が安定になることを発見した。スピン三重項 p 波状態については、Ru4d 軌道におけるスピン軌道相互作用を導入することによって d ベクトルの縮退を解き、その向きについては RuO₂ 面に垂直なカイラル状態がもっとも安定になることを示すことができた。

研究成果の概要（英文）：

It has been considered that a quasi-two-dimensional ruthenate Sr₂RuO₄ is a spin-triplet superconductor and therefore its superconducting state is characterized by so-called “d-vector”. In the present study, we analyzed the pairing symmetry, on the basis of the precise electronic structure obtained from first-principles calculation. As a result, the favorable pairing symmetry was turned out to be singlet dx²-y²-wave, rather than triplet p-wave, in contrast to precedent studies based on simple Hubbard models. Concerning the triplet pairing state, removing degeneracy of d-vector states by the Ru4d spin-orbit coupling, we could demonstrate that the chiral state with d//c is the most stable.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	1,200,000	360,000	1,560,000

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： 強相関係、スピン三重項超伝導、Sr₂RuO₄、d-ベクトル

1. 研究開始当初の背景

擬二次元的ルテニウム酸化物超伝導体 Sr₂RuO₄ はスピン三重項超伝導体の有力な候補であると考えられている。NMR ナイト

シフトが超伝導転移で不変であるなどの実験結果がそのもっともらしいと考えられる根拠になっている。しかしながら、最近の NMR 実験によれば、印加する磁場の向きによって d ベクトルが回転していると考えな

ればならない結果が得られており、d ベクトルの異方性とその安定性を精密に求めることが重要な課題の1つになっていた。

他方で、第一原理計算による電子構造からいわゆる最局在 Wannier 軌道を用いてタイトバインディングパラメタを求めるスキームが確立され、それによって得られる精密な電子構造を強相関電子系における磁性や異方的超伝導などの理論研究に積極的に活用できるようになってきた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、第一原理計算に基づいて精密な電子構造を持つ有効模型を構築し、それを用いて、 Sr_2RuO_4 の超伝導対称性（特に d ベクトルの異方性）を精密に解析することである。

3. 研究の方法

(1) WIEN2k コードを用いた第一原理バンド計算と有効模型の構築：

まず、第一段階として、WIEN2k コードによる第一原理計算を実施する。得られた電子構造に対して、WANNIER90 コードを実行することによって最局在 Wannier 軌道を作成し、タイトバインディング近似に基づいて、有効模型を構築する。この時、WANNIER90 の入力情報は WIEN2WANNIER (W2W) コードによって作成することができる。

(2) Ru4d 軌道におけるクーロン積分に関する摂動論とエリアッシュベルグ方程式：

クーパー対を形成するための有効相互作用は、量子力学的多体効果によってもたらされる。そこで、これを、Ru4d 軌道間のオンサイトクーロン斥力について3次までの摂動展開で求める。有効相互作用を用いてエリアッシュベルグ方程式を数値計算で解き、その固有値と固有関数を求めることによって超伝導対称性を決定することができる。

4. 研究成果

(1) 第一原理計算、有効模型：

フェルミ準位近傍の電子状態は、主に Ru4d(t2g)軌道と $02p(x, y, z)$ 軌道によって構成されていることが第一原理計算の結果明らかになる。そこで、Ru4d(t2g)軌道 (3本) と面内(in-plane)酸素の 2p 軌道 (6本)、頂点(apical)酸素の 2p 軌道 (6本) の計 15本の Wannier 軌道を用いて、フェルミ準位近傍の電子状態を再現する有効模型を作成し

た。しかしながら、この第一段階の有効模型では、各バンドの有効質量の比やフェルミ面の体積について、ARPES や de Haas-van Alphen 実験で得られている数値を精密に再現することは全くできていないことが明らかになった。特に、最も主要なバンドと考えられている γ バンドにおいては、その部分状態密度が 47 パーセントしかない。実際、このままで超伝導の計算を実行すると、超伝導転移を牽引するバンド、つまり超伝導ギャップが最大となるバンドが定性的に異なってしまう結果となる。このため、電子構造を修正することがどうしても必要となる。また、Ru4d 軌道の 1 粒子エネルギー準位も、RuO₆ 八面体の局所的なひずみの方向から期待されるものとは逆になるという不都合も生じる。そこで、Ru4d(t2g) 軌道の準位を完全に縮退させ、Ru4d 軌道の Wannier 軌道の振幅を 6 パーセントだけ小さくすることによって、de Haas-van Alphen 実験で観測されている部分状態密度の比を概ね再現することができた。第一原理計算のバンドと、この時の有効模型によるバンドを下に示す (図 1)。

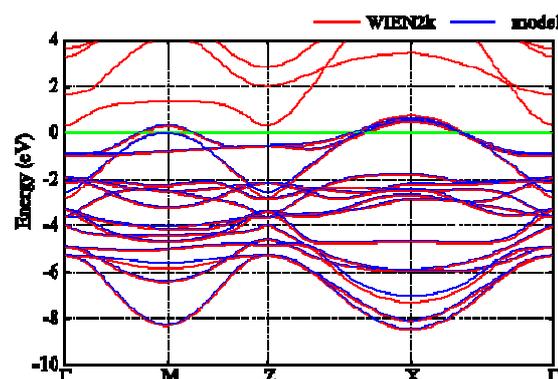


図 1 第一原理計算と有効模型のバンド

このような結果は以下の事実が明らかになった点で重要である。最局在 Wannier 軌道に基づく有効模型を用いる方法が最近広く用いられつつあるが、定性的な性質がうまく再現できたとしても (例えばフェルミ面のトポロジーなどが再現できているとしても)、各バンドの部分状態密度の比など、多バンドの磁性や超伝導を議論する上で重要となる量が定量的に再現できていない場合が生じ得る。そのような場合には必ず修正しなければならない。

(2) 超伝導対称性：

第一原理計算で作成した有効模型を用いて、エリアッシュベルグ方程式を数値的に解き、期待される超伝導対称性を調べた。ここでは、まずスピン軌道相互作用をゼロにして、さまざまな Ru4d 軌道間クーロン積分 (U' ,

$J=J'$) について、エリアッシュベルグ方程式の固有値を求めた (図2)。

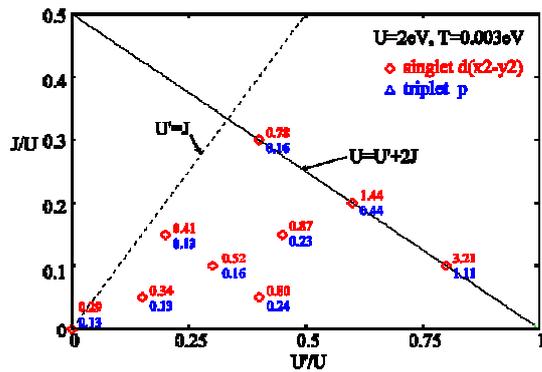


図2: エリアッシュベルグ方程式の固有値
スピン一重項: 赤字、スピン三重項: 青字

固有値が最大のものが期待される超伝導対称性になるが、当初の期待に反して、全領域でスピン一重項 $d(x^2-y^2)$ 波状態が三重項 p 波状態に勝る結果となっている。このことは、第一原理計算による電子構造に問題があるか、あるいは、スピン一重項 $d(x^2-y^2)$ 波超伝導状態である可能性がまだ否定できないことを示唆している。特に最近、低温 Hc2 近傍における 1 次相転移の発見にともなってスピン一重項超伝導の可能性がにわかに議論されつつあることとも関連して、スピン三重項超伝導である可能性をあらためて再検証し直すべきことを意味している。一方、第一原理計算による電子構造に問題があるとすれば、第一原理計算には見落とされている自己エネルギー補正を考慮する必要がある。これを考慮することによって、 $d(x^2-y^2)$ 波状態が抑制される一方で、 p 波状態が安定化される可能性がある。実際、有効モデルのフェルミ面は、ARPES 実験によって得られるフェルミ面に比べてより M 点近傍を通過するため、 $d(x^2-y^2)$ 波超伝導状態に有利な状況となっている。これは、自己エネルギー補正を考慮することによって改善されるであろう。これは今後の課題である。

スピン三重項超伝導状態に関しては、ハバード模型に基づく先行研究による結果を概ね再現する秩序変数の波数依存性が得られた (図3)。このことは、ハバード模型で導かれた先行研究の超伝導ギャップ構造 (異方性およびギャップノードの位置) を再び支持する結果となるが、第一原理計算に基づく精密な電子構造を用いて導かれた点に意義があるといえよう。

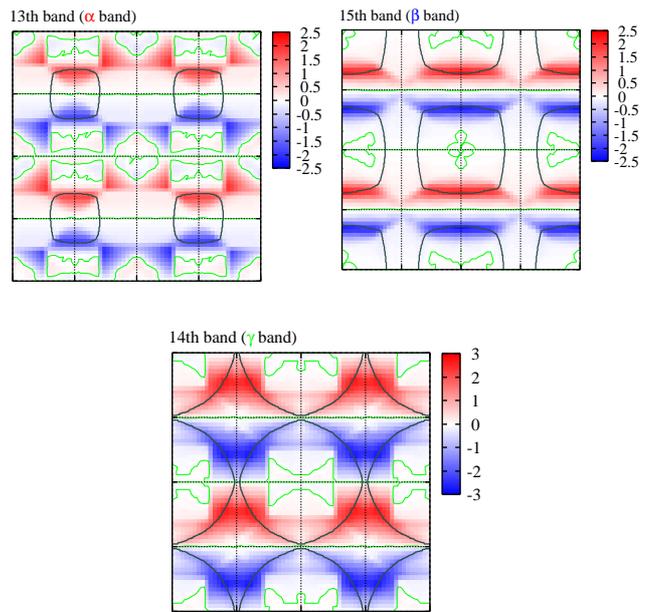


図3: スピン三重項状態の秩序変数の波数依存性

(3) dベクトルの異方性:

(2) の段階で示されたように、第一原理計算で求められた電子構造をそのまま用いると、当初の期待に反して超伝導対称性はスピン一重項 $d(x^2-y^2)$ 波という結果になるが、スピン三重項状態の範囲で d ベクトルの異方性を求めることができる。具体的に、Ru4d 軌道間にスピン軌道相互作用を導入して、さまざまな Ru4d 軌道内クーロン積分 (図4 (a)) について、 d ベクトルの縮退の解け方を調べた。エリアッシュベルグ方程式の固有値は E_u 状態 ($d(k) \sim kx \pm iky$) に対して最大となる (図4 (b))。この結果は、単純なハバード模型や dp 模型による先行研究の結果と整合する結果であるが、第一原理計算に基づく精密な電子構造を用いて導かれた点に意義がある。こうして、 p 波超伝導状態が実現しているとすれば、 d ベクトルは c 軸に平行であり、時間反転対称性を破ったカイラル状態が実現されるべきことが、精度の高い計算によって示された。また、その異方性の大きさは、転移温度にして $\Delta T_c/T_c \sim \Delta \lambda/\lambda \sim 0.01 - 0.1$ のオーダーとなる。これは、ハバード模型にスピン軌道相互作用を摂動で扱った先行研究と概ね整合する結果であるが、本研究では、スピン軌道相互作用がバンドの対角化行列中に無限次まで考慮されている点で、より正確な評価となっている。

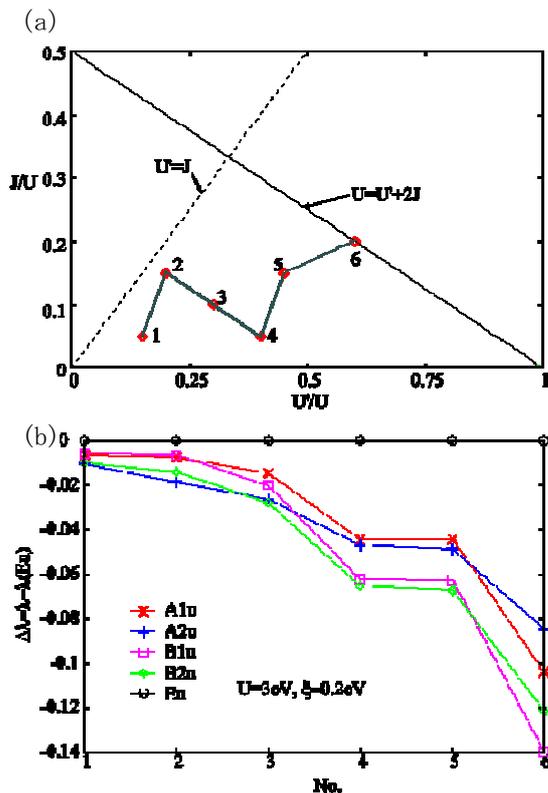


図4 (a)d-ベクトルの異方性を調べる Ru4d 軌道間クーロン積分の値と、(b) (a) で示したクーロン積分に対するエリアッシュベルグ方程式の固有値 (Eu 状態に対する相対値)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

野村 拓司 (NOMURA TAKUJI)

独立行政法人日本原子力研究開発機構・量子ビーム応用研究部門・研究副主幹

研究者番号： 90373240

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 1 件)

Y. Maeno, S. Kittaka, T. Nomura, S. Yonezawa, & K. Ishida, "Evaluation of Spin-Triplet Superconductivity in Sr2RuO4", J. Phys. Soc. Jpn., J. Phys. Soc. Jpn. 81, 011009 (2012). 査読有. DOI: 10.1143/JPSJ.81.011009

[学会発表] (計 2 件)

野村拓司、池田浩章

「第一原理計算に基づく Sr2RuO4 の有効模型と超伝導状態の解析」、日本物理学会、2012年9月20日、横浜国立大、神奈川。

野村拓司

「微視的理論から見た Sr2RuO4 の超伝導対称性 (含 Review)」、第12回集中連携研究会「Sr2RuO4 の超伝導対称性とトポロジカル超伝導」(新学術領域研究「対称性の破れた凝縮系におけるトポロジカル量子現象」主催) 2013年6月8日、京都大学、京都。

[図書] (計 0 件)