

計算科学フロンティアの展開 その5

— 異方的超伝導の発現機構 —

大 成 誠一郎

I. はじめに

1911年の水銀における超伝導の発見以降、超伝導発現のメカニズムについて、研究が盛んになされてきた。通常の金属超伝導については1957年のBardeen Cooper Schriefferらの理論(BCS理論)により、ようやく説明された。BCS理論においては、超伝導を特徴付けるギャップ関数が等方的であることが示されたが、BCS理論は電子格子相互作用が弱い場合にのみ適応でき各物質の超伝導転移温度 T_c を評価することができない。特に1986年の銅酸化物高温超伝導体の発見以降、BCS理論を越える理論の探求が盛んになされてきた。実験により銅酸化物高温超伝導体のギャップ関数は等方的な s 波ではなく、異方的な d 波であるとわかっており、従来のBCS理論で説明することが不可能であることは明白であった。近年、ギャップ関数が異方的である超伝導体が次々と発見されており、微視的に超伝導を説明する理論が必要である。

我々はBCS理論を一般化したEliashberg方程式に揺らぎ交換(FLEX)近似[1]を用いて、電子間斥力相互作用に起因する超伝導状態の計算を行った。この手法は反強磁性揺らぎを媒介とする銅酸化物高温超伝導体のギャップ関数や、 T_c を評価する際に有力な方法である。具体的な物質として、我々は擬2次元系である Sr_2RuO_4 の超伝導状態について計算を行った。 Sr_2RuO_4 は従来のスピンスグレット超伝導ではなく、スピントリプレット超伝導である可能性が高く[2]、現象論ではない微視的理論によりスピントリプレット超伝導を導くことは非常に重要である。

II. 計算手法

Sr_2RuO_4 は本来3バンド系であるが、単純化のため状態密度が大きく重要であると考えられている γ バンドについて考える。電子間斥力を取り扱う簡単なモデルとして正方格子Hubbardモデルを用いた。ハミルトニアンは以下の通りである。

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma}^{n.n.} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} U n_{i\sigma} n_{i-\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma\sigma'}^{n.n.} V n_{i\sigma} n_{j\sigma'}$$

ここで、 t_{ij} は*i*サイトから*j*サイトへのホッピングエネルギー、 $c_{i\sigma}^{\dagger}$ は*i*サイトに σ スピンの電子を生成する演算子、 $c_{j\sigma}$ は*j*サイト σ スピンの電子を消滅させる演算子、 U は同一サイト内のクーロン斥力、 $n_{i\sigma}$ は*i*サイト σ スピンの電子数、 V は隣接サイト間のクーロン斥力を表わす。ホッピ

ングエネルギーについては、図1にあるように最近接ホッピング t と次近接ホッピング t' を用いて、サイト間クーロン斥力は最近接のみを考え、それを V とした。以降、エネルギーの単位として $t=1$ を用い、 Sr_2RuO_4 の γ バンドのフェルミ面を再現するために $t'=0.5$ とし、フィリング $n=1.333$ ($n=1$ がハーフフィリング)とする。

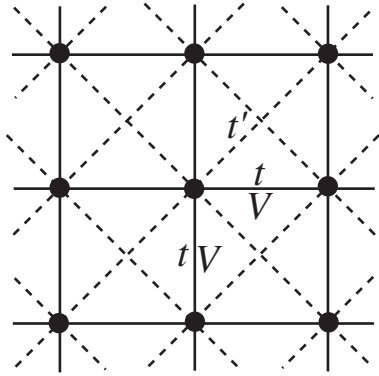


図1 第2近接ホッピングまで入れた正方格子

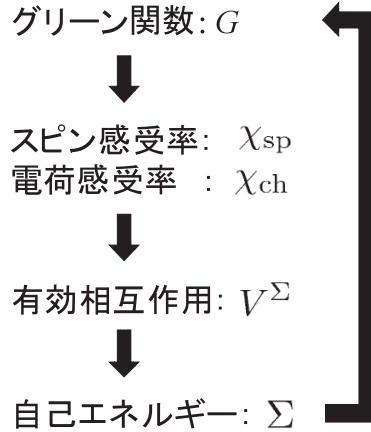


図2 常伝導状態の計算の流れ

はじめに、常伝導状態を調べるために物理系を記述する際に有用なグリーン関数を求める。計算の流れは図2にあるように、まず適当なグリーン関数 G を仮定し、それを用いてスピン感受率 χ_{sp} と電荷感受率 χ_{ch} を得る。そして、自己エネルギー Σ に対する有効相互作用 V^{Σ} を χ_{sp} と χ_{ch} から求め、 V^{Σ} と G から Σ を得る。その後Dyson方程式 $G^{-1}=G_0^{-1}-\Sigma$ を利用し、 Σ と $U=0$ のときのグリーン関数 G_0 から新しい G を得る。

以上の操作を G が収束するまで自己無撞着に計算することで、各関数を決定する。ここで、感受率や有効相互作用を求める際に詳細な波数依存性を取り扱えるようFLEX近似を用いた。

次に、超伝導状態を調べるため、線形化されたEliashberg方程式を用いて計算を行う。スピンスングレット超伝導についてはスピンスングレットに対する有効相互作用 V_s 、スピントリプレット超伝導についてはスピントリプレットに対する有効相互作用 V_t を用いてEliashberg方程式は以下のようにかける。

$$\lambda\Delta(k) = \sum_{k'} V_{s(t)}(k-k')G(k')G(-k')\Delta(k')$$

ここで、 $k=(\omega_n, k_x, k_y)$ $\omega_n=(2n+1)\pi T$ は松原周波数であり、温度 T を低くすると計算精度を保つために整数 n の最大値を大きくとる必要がある。また、固有値 λ は超伝導転移温度で $\lambda=1$ となり、 λ が大きいほどその超伝導の対称性が出現しやすい傾向がある。

III. 計算結果

まず、図3で超伝導状態に対する $U-V$ 相図を示す。

これを見てわかることは、広い領域でスピンシングレット超伝導 (singlet SC) が現れ、 V が大きい領域で電荷密度波 (CDW) 状態が出現するが、その CDW 近傍でスピントリプレット超伝導 (triplet SC) が現れるということである。

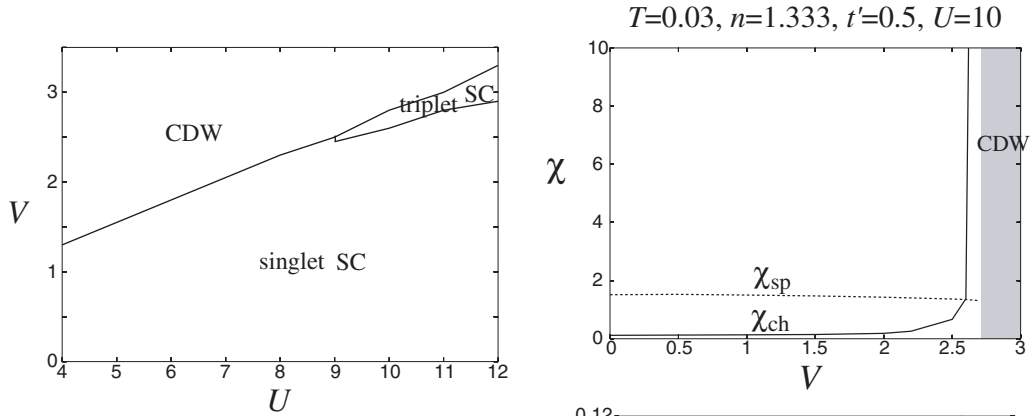


図3 $t' = 0.5$ 正方格子の U - V 相図

詳しく調べるために $U=10$ に固定して V を変化させた際のスピン感受率 χ_{sp} 、電荷感受率 χ_{ch} 、Eliashberg 方程式の固有値 λ を図4に示す。 V が大きくなるにつれて χ_{ch} が大きくなり CDW 近傍でかなり増大することがわかる。 λ の値も χ_{ch} が大きくなるにつれて増大するが、トリプレット $\sin(k_x + k_y)$ (p 波) の増大率が V の小さい領域で λ が最大であったシングレット

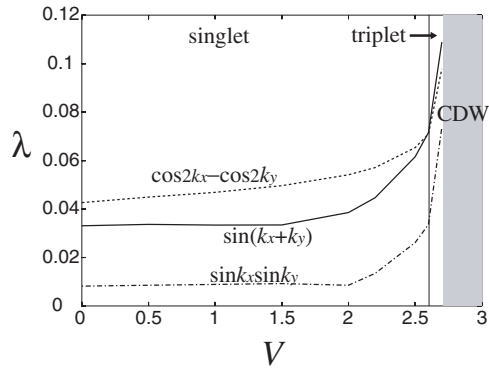


図4 感受率 (上) と Eliashberg 方程式の固有値 λ (下)

$\cos 2k_x - \cos 2k_y$ の増大率よりも大きく CDW 近傍においては逆転することがわかった。一方、スピンシングレット $\sin k_x \sin k_y$ (d_{xy} 波) は V による増大率は高いが固有値が最大になることはなかった。実際計算で求められたギャップ関数の波数依存性を図5に示す。ここで、実線はフェルミ面、点線はノード (ギャップ関数の値が0になる点の集合) を表す。

スピントリプレット超伝導 $\sin(k_x + k_y)$ は現在考えている系が4回対称であることを反映して、90度回転させた $\sin(k_x - k_y)$ と固有値 λ が必然的に縮退する。熱力学的な要請からフェルミ面上のギャップ関数はなるべく大きいほうが安定になるため、自然に現れるギャップ関数はカイラル状態である $\sin(k_x + k_y) + i \sin(k_x - k_y)$ になると予想される。この結果は $k_x=0, k_y=0$ 方向のギャップ関数がフェルミ面上で最小となり比熱の実験 [3] と一致する。

IV. 考察

本研究においては最近接サイト間にクーロン斥力を導入したため、この斥力の効果により、最近接サイト間でペアを組む $dx^2 - y^2$ 波のようなギャップ関数は出現することはなく、対角線方向

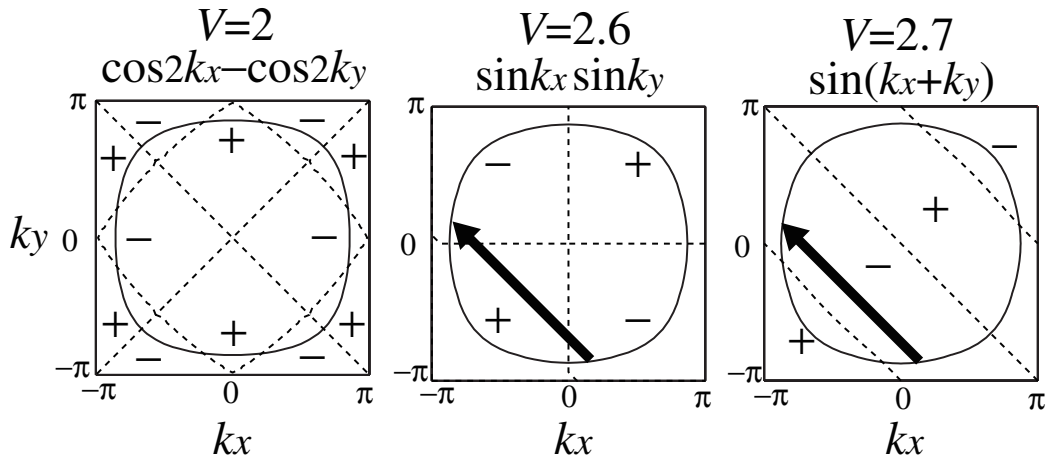


図5 ギャップ関数の波数依存性，実線はフェルミ面，点線はノードを表す。

でペアを組むスピントリプレット超伝導である $\sin(k_x + k_y)$ が現れる可能性があることがわかった。また， V によりこの場合，電荷感受率が (π, π) ， $(-\pi, \pi)$ でピークを持つことになるが図5の矢印にあるように，この差し渡しでギャップ関数の符号が変化しないことがEliashberg方程式の固有値 λ を増大させるためには重要になる。

V. 計算における困難

本研究の計算における困難として，まず低温領域を計算する際に松原周波数を大きくとる必要があり，計算規模が増大することがある。また，高速フーリエ変換 (FFT) 等を駆使して計算を行っているが V を導入するとフーリエ変換する際の位相の影響で，感受率と有効相互作用が正方格子で 5×5 (三角格子においては 7×7) の行列となり計算規模が極めて膨大になる。現在は大型計算機を用いて計算を遂行しているが，多バンド等へ拡張するには大幅に計算時間を削減するアルゴリズムを考案するか，次世代の大型計算機等を利用する必要がある。

参考文献

- [1] K. Ishida *et al.* Nature (London) **396**, 658 (1998)
- [2] N. E. Bickers *et al.* Ann. Phys. (N. Y.) **193**, 206 (1989); G. Esirgen and N. E. Bickers, Phys. Rev. B **55**, 2122 (1997); S. Onari *et al.* Phys. Rev. B **68**, 024525 (2003)
- [3] K. Deguchi *et al.* Phys. Rev. Lett. **86**, 2653 (2001)

(おおなり せいいちろう)：名古屋大学工学研究科マテリアル理工学専攻 助教
前名古屋大学大学院工学研究科計算理工学専攻 21 世紀 COE プログラム
「計算科学フロンティア」COE 研究員)