



|              |   |
|--------------|---|
| Title        | Microscopic Theory of Strontium Ruthenates on the Basis of d-p Model  |
| Author(s)    | 吉岡, 由宇  |
| Citation     | 大阪大学, 2011, 博士論文  |
| Version Type |   |
| URL          | <a href="https://hdl.handle.net/11094/58254">https://hdl.handle.net/11094/58254</a>   |
| rights       |   |
| Note         | 著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。 |

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

| 【65】          |  |           |   |   |
|---------------|--|-----------|---|---|
| 氏 名           | よし   | おか        | ゆ | う |
|               | 吉  | 岡         | 由 | 宇 |
| 博士の専攻分野の名称    | 博 士（理 学）   |           |   |   |
| 学 位 記 番 号     | 第  | 2 4 6 3 3 | 号 |   |
| 学 位 授 与 年 月 日 | 平 成 23 年 3 月 25 日  |           |   |   |
| 学 位 授 与 の 要 件 | 学位規則第4条第1項該当<br>基礎工学研究科物質創成専攻  |           |   |   |
| 学 位 論 文 名     | Microscopic Theory of Strontium Ruthenates on the Basis of d-p Model<br>(ストロンチウム-ルテニウム酸化物に関するd-pモデルを用いた研究) |           |   |   |
| 論 文 審 査 委 員   | (主査)<br>教 授 三宅 和正<br>(副査)<br>教 授 井元 信之 教 授 北岡 良雄   |           |   |   |

論 文 内 容 の 要 旨

ストロンチウム-ルテニウム酸化物はさまざまな物理的性質を示すため、実験的にも理論的にも興味深い物質群である。Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>は数少ないスピン三重項超伝導体として知られており、超伝導状態のスピン の異方性が一つの大きな問題として残っている。またSr<sub>2</sub>Ru<sub>2</sub>O<sub>7</sub>は磁場化で現れるnematic相と呼ばれている相において2段のメタ磁性転移、残留抵抗の上昇と電気抵抗の異方性が観測されている。これら二つの系についてd-pモデルを用いた解析を行った。

まず、Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>における超伝導ギャップと転移温度を相互作用の3次摂動を用いて求めた。d-pモデルを用いた場合、Hubbardモデルとは異なり、2次摂動の範囲においてもスピン三重項超伝導状態が安定化する。また3次摂動の転移温度に対する影響は少なく、d-pモデルがこの系についてよいモデルであることが示された。超伝導ギャップについてはUppが小さい場合にはHubbardモデルの結果と同じsin kx cos kyの形をしている。一方で、Uppが大きい場合には実験結果との整合性があるsin kx型の形をとる。

次にdベクトルの異方性について、スピン軌道相互作用とフント相互作用を取り入れた摂動計算を行った。Uppが小さい領域においてdベクトルはc軸を向いている。しかしUppが大きな領域、つまりsin kx型の超伝導の場合、dベクトルはab面内を向くという結果が得られた。この結果はNMRやNQRの実験と矛盾しない結果である。

Sr<sub>2</sub>Ru<sub>2</sub>O<sub>7</sub>のnematic相についても同様にd-pモデルを用いた計算を行った。nematic相においてはPomeranchuk不安定性が期待されておりランダウ相互作用関数を微視的に求め、どのようなタイプの不安定性が生じるかについて調べた。UppがUddに比べ非常に小さい場合、d波型の不安定性が現れるが、Uppが大きな領域では新たなスピンに関して反対称的タイプの不安定性が現れるという結果が得られた。またこの不安定性を用いて実験結果を再現する相図を得た。

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

ストロンチウム-ルテニウム酸化物はさまざまな物理的性質を示し、実験的にも理論的にも興味深い物質群である。その中でも層状構造をもつ Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> は数少ないスピン三重項超伝導体として知られており、そのクーバー対のスピン状態を表す d ベクトルの異方性が一つの大きな問題として残っていた。また、2 層構造をもつ Sr<sub>2</sub>Ru<sub>2</sub>O<sub>7</sub> では磁場下において 2 段のメタ磁性転移を示し、残留抵抗の上昇と電気抵抗の異方性が観測されており、その相は ネマティック相と呼ばれて活発な研究が展開されている。本論文では、これら二つの系について拡張された（遷移金属酸化物の基本的なモデルである） d-pモデルを用いて理論的な分析が行われた。このモデルでは、ルテニウムの 4 d 電子間の局所クーロン相互作用U<sub>dd</sub>のみならず酸素の 2 p 電子間の局所クーロン相互作用U<sub>pp</sub>が取り入れられている点

が従来のいわゆるd-pモデルとの大きな相違である。

まず、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ における超伝導ギャップと転移温度が対形成相互作用の $U_{dd}$ および $U_{pp}$ に関する3次摂動の計算にもとづいて求められた。このd-pモデルを用いた場合、先行研究のHubbardモデルによる結果とは異なり、2次摂動の範囲においてもスピン三重項超伝導状態が安定化すること、また3次摂動項の転移温度に対する影響は少ないことが示された。超伝導ギャップの波数( $k$ )依存性については、 $U_{pp}$ が $U_{dd}$ に比べて小さい場合にはHubbardモデルの結果と同じ $\sin k_x \cos k_y$ の形をしている。一方、 $U_{pp}$ が $U_{dd}$ 程度に大きくなると $\sin k_x$ 型の形をとり、実験結果との整合性もよい。

次に、dベクトルの異方性について、スピン軌道相互作用とフント相互作用を取り入れた摂動計算が行われた。 $U_{pp}$ が小さい領域においてdベクトルはc軸を向いている。しかし $U_{pp}$ が大きな領域、つまりギャップ関数が $\sin k_x$ 型の超伝導の場合、dベクトルはab面内を向くという結果が得られた。この結果は、NMRやNQRの実験を説明できなかった先行の理論研究と対照的である。

さらに、 $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$ のネマティック相についても同じd-pモデルを用いた計算が行われた。先行研究では、ネマティック相においてはフェルミ面の対称性の低下をともなうボメランチュク不安定性が期待されていたが、本論文ではこのd-pモデルを用いて $U_{dd}$ および $U_{pp}$ に関する2次摂動の範囲でランダウ相互作用関数を微視的に求め、どのようなタイプの不安定性が生じるか調べられた。 $U_{pp}$ が $U_{dd}$ に比べ非常に小さい場合にはd波型の不安定性が現れるが、 $U_{pp}$ が $U_{dd}$ と同程度あるいは大きな領域ではスピンに関して反対称なp型のボメランチュク不安定性が現れるという新しい可能性が得られた。またこの不安定性を用いて実験結果を再現する相図が得られた。

以上の研究は、ストロンチウム-ルテニウム酸化物において酸素サイトでのクーロン相互作用 $U_{pp}$ が決定的な役割を演じていることを解明したことにより、強相関酸化物金属の研究分野の発展に貢献するものであり、その学術的意義は大きく、博士(理学)の学位論文として価値のあるものと認める。