

別紙 4

報告番号	※	第	号
------	---	---	---

主 論 文 の 要 旨

論文題目 Theoretical study on superconducting gap structures and pairing mechanisms of iron based superconductors

(鉄系超伝導体における超伝導ギャップ構造及びペアリング機構の理論研究)

氏 名 齋藤 哲郎

論 文 内 容 の 要 旨

鉄系超伝導体は、2008年に新しく発見された超伝導体である。この物質は超伝導転移温度 T_c (最高で~55K) が比較的高いだけでなく、他の超伝導体とは異なるペアリング機構により超伝導が発現している可能性があり、重要な物質として研究がおこなわれている。

超伝導相は相図上で、反強磁性相転移と、構造相転移の近傍にあることから、スピンゆらぎ、軌道ゆらぎの両方が発達していることが示唆される。このため、鉄系超伝導体の超伝導発現機構として、スピンゆらぎによりギャップに符号反転のある s_{\pm} 波超伝導が発現するという理論と、軌道ゆらぎにより、符号反転のない s_{++} 波超伝導が発現するという理論が提案された。 T_c に対する不純物効果が小さい実験結果は、 s_{++} 波超伝導を支持している。

超伝導発現機構解明のためには、超伝導ギャップ構造の研究が重要である。鉄系超伝導体においては、角度分解光電子分光 (ARPES) 実験などにより超伝導ギャップ構造 (波数依存性) が詳細に測定されている。一方、それぞれの超伝導発現機構を仮定して超伝導ギャップ方程式を解くことにより、 s_{++} 波と s_{\pm} 波超伝導のギャップ構造を計算することが可能である。したがって、実験、理論のギャップ構造を比較することにより、超伝導発現機構を見分けることが可能である。そこで、本研究では鉄系超伝導体の超伝導発現機構解明のため、ギャップ構造の計算を行った。

各種鉄系超伝導体の現実的な多軌道モデルを導入した。また、相互作用として、クーロン相互作用に加えて、四重極相互作用を導入した。四重極相互作用は、クーロン斥力のパーテックス補正と、電子フォノン相互作用に由来する。まず、RPAによりスピン・軌道感受率を求め、その後、線形化ギャップ方程式を解くことにより超伝導ギャップ構造の計算を行った。

まず、過剰電子ドーパ系 KFe_2Se_2 の超伝導ギャップ構造を、10 軌道モデルを用いて計算を行った。この結果、スピンゆらぎによる超伝導では d 波となり、必ずフェルミ面上にノードが必ず生じることが分かった。一方、軌道揺らぎによる超伝導では、等方的な s_{++} 波ギャップ構造が実現する。これは、等方的なギャップを観測する ARPES 実験などを再現する。この結果から、 KFe_2Se_2 では s_{++} 波超伝導が発現していると考えられる。

続いて、ドーパなしで超伝導となる LiFeAs について研究を行った。 LiFeAs は高品質な単結晶を作ることができ、不純物の影響のない超伝導ギャップ構造を観測することができるため、超伝導発現機構研究に適した物質である。 LiFeAs の ARPES により観測されたバンド構造を再現する 3 次元強束縛モデルを用いて、超伝導ギャップ構造を計算した。この結果、軌道揺らぎによる s_{++} 波超伝導では、小さなホール面の超伝導ギャップが最も大きくなり、実験を再現することに成功した。これは、小さなホール面 ($xzyz$ 軌道) と電子面 (xy 軌道) 間の異なる軌道間のネスティングにより、軌道揺らぎが発達するためである。一方、スピン揺らぎによる s_{\pm} 波超伝導では、大きなホール面のギャップは極めて小さくなり実験を再現しない。これは、小さなホール面 ($xzyz$ 軌道) と電子面間の同じ軌道内のネスティングがなく、 $xzyz$ 軌道のスピン揺らぎが発達しないためである。さらに、スピン軌道相互作用 (SOI) を考慮し、より実験を再現するモデルを構築し、超伝導ギャップの計算を行った。この結果、SOI がいない場合と同様の結果が得られた。以上の結果から、 LiFeAs は軌道揺らぎによる s_{++} 波超伝導が発現していると考えられる。

最後に、 $\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$ の超伝導ギャップ構造の計算を行った。この物質では ARPES 実験によれば、ホール面では、すべての軌道についてほぼ同じ大きさのギャップが観測されている。まず、スピンゆらぎだけが強い場合の s_{\pm} 波超伝導の場合のギャップ構造の計算を行うと、ホール面に存在する z^2 軌道のギャップが非常に小さくなり実験を再現しない。これは、電子面に z^2 軌道が存在しないため、ホール・電子面間の z^2 軌道の軌道内ネスティングがなく、 z^2 軌道のスピン揺らぎが発達しないためである。一方、軌道ゆらぎのみが強い場合の s_{++} 波超伝導では、 z^2 軌道のホール面のギャップは他の軌道と同程度となり、実験を再現する。ホール面の z^2 軌道と、電子面間の軌道間ネスティングにより、 z^2 軌道を含む軌道揺らぎが発達するためである。ただしこの場合も、実験で観測される電子面のラインノードを再現しない。そこで、 s_{++} 波状態で、スピンゆらぎが発達する場合に、ギャップの一部が符号反転する (または小さくなる) という理論を考慮する。 $\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$ では特に、構造相転移温度と反強磁性転移温度が近い場合、両方のゆらぎが強いと考えられる。そこで、2 つのゆらぎの競合により現れる符号反転を議論した。スピン揺らぎと軌道揺らぎの両方が強い場合について超伝導ギャップ構造を計算すると、 s_{++} 波状態と、 s_{\pm} 波状態の間のパラメータ領域において、電子面のギャップの符号が一部反転し、実験を再現するラインノードのあるギャップが得られた。ホール面に比べて、電子面の電子質量が小さいため、電子面にラインノードが現れたと考えられる。また、この場合においても、ホール面のギャップはすべての軌道でほぼ同じ大きさとなり ARPES 実験結果を再現する。したがって、軌道揺らぎとスピン揺らぎの競合によって、実験で観測されるギャップを再現する。

KFe_2Se_2 、 LiFeAs 、 $\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$ の超伝導ギャップ構造が軌道揺らぎ理論によりよく実験を再現することが分かった。以上の研究の結果から、様々な鉄系超伝導体の超伝導発現には、軌道揺らぎが重要な役割をしていると考えられる。