

学位申請論文公開講演会

日時：2015年1月30日（金）10:00～

申請者：齋藤 哲郎（S研）

場所：理学館 506

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）

主論文の要旨

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 $\sim 55\text{K}$ ）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。

鉄系超伝導体は、相図上で構造相転移相・反強磁性相の近くに超伝導相があることから、超伝導相ではスピンと軌道揺らぎが両方発達していることが示唆される。このことから、スピン揺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、軌道揺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の2つが提案された。

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。角度分解光電子分光（ARPES）実験などにより超伝導ギャップの波数依存性が詳細に測定されている。本研究では、超伝導のギャップ構造の理論研究を行うことにより、超伝導発現機構の解明を行う。この目的を達成するため、まず各種鉄系超伝導体の現実的な3次元多軌道モデルを構築し、軌道ゆらぎとスピン揺らぎの超伝導の理論により、 s_{++} 波と s_{\pm} 波の超伝導ギャップ構造を計算する。さらに、理論計算と実験結果を比較し、超伝導発現機構の特定を行う。

まず、 LiFeAs の超伝導ギャップ構造を3次元モデルを用いて計算した。この結果、軌道揺らぎによる超伝導では、ARPESで観測される小さなホール面の大きな超伝導ギャップを再現した。一方、スピン揺らぎによる超伝導では、小さなホール面のギャップは非常に小さく、実験を再現しない。さらに、スピン軌道相互作用（SOI）を考慮した、より実験を再現するモデルで超伝導ギャップの計算を行い、SOIがない場合と同様の結果が得られた。以上より、 LiFeAs では軌道揺らぎによる超伝導が実現していると考えられる。

次に、 $\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$ の超伝導ギャップ構造の計算を行った。スピン揺らぎによる超伝導では、 d 軌道を含むフェルミ面の超伝導ギャップが、非常に小さくなり、実験を再現しない。一方、軌道揺らぎによる超伝導では、そのギャップは他のギャップとほぼ同じ大きさとなり、実験を再現する。また、軌道揺らぎとスピン揺らぎの競合を考えることにより、電子面のラインノードの再現に成功した。

本研究により、軌道揺らぎ機構に基づき、 LiFeAs と $\text{BaFe}_2(\text{As,P})_2$ の超伝導ギャップの再現に成功した。また、軌道揺らぎ機構により、鉄系物質の構造相転移や弾性定数のソフト化の定量的な再現が可能である。本研究の結果と合わせて考えると、様々な鉄系超伝導体で軌道ゆらぎを媒介とした超伝導発現機構が実現していると考えられる。