

研究会番号 : YITP-W-12-03

## 研究会「鉄系高温超伝導の物理 ～スピン・軌道・格子～」報告

開催日時 : 2012 年 6 月 21 日～2012 年 6 月 22 日

開催場所 : 京都大学基礎物理学研究所 パナソニック国際交流ホール

参加者数 : 59 名

## [研究会の目的・趣旨]

2008 年に日本で発見された鉄系超伝導体は、その超伝導転移温度が銅酸化物高温超伝導体以外で初めて 50K を超えた。1111 系、122 系と呼ばれる鉄系超伝導体の母物質は、正方晶から斜方晶への構造相転移とストライプ型反強磁性相転移を示すとともに、低温まで金属状態を維持している。母物質に電子やホールがドーピングされるとどちらの転移も消失し、超伝導が出現する。母物質での反強磁性の存在は、銅酸化物高温超伝導体と共通であり、電子間に働くクーロン相互作用とその結果生じる磁気揺らぎ（スピン揺らぎ）がこの系でも重要であることを示唆している。超伝導機構として、このスピン揺らぎを起源とする  $s_+$  波超伝導（電子のフェルミ面とホールのフェルミ面の間で超伝導ギャップ関数が符号反転する超伝導）がいち早く提案された。 $s_+$  波では、不純物散乱による顕著な電子対破壊効果が期待されるが、鉄系超伝導体では鉄原子の不純物置換に対して超伝導がしぶとく生き残っている。これは磁気揺らぎ以外に他の自由度が対形成に関与している可能性も示唆している。最近の超音波実験では、構造相転移温度および超伝導転移温度まで続く特定の弾性定数の巨大なソフト化が観測されており、構造変化と結合した軌道揺らぎが、電子状態、ひいては超伝導機構に関与しているという指摘がされている。鉄系超伝導体における軌道自由度の重要性は、すでにその母物質の性質に表れている。非双晶化された 122 系母物質の電気伝導度、光学伝導度の鉄砒素面内の異方性やディラック電子の形成は鉄の 3d 軌道の特性が本質的役割を果たしている。また、超伝導対形機構に関しても、格子と 3d 電子軌道との結合効果を取り入れたモデルが提案され、軌道揺らぎを起源とする  $s_{++}$  波超伝導が実現することが示されている。このように鉄系超伝導体ではクーロン相互作用による電子相関効果・スピン揺らぎの効果の他に 5 個の 3d 軌道が関与する多バンド性とその結果としての軌道自由度の存在が本質的な役割を果たしていると考えられる。

これまでの遷移金属化合物の物理では、軌道自由度の効果は絶縁体状態でのみ議論されていた。しかし、鉄系超伝導体の発見を契機として金属状態における軌道自由度が初めてクローズアップされた。その結果、鉄系超伝導のクーパー対形成機構に対して、多バンド系のスピン揺らぎ、軌道揺らぎ、軌道-格子結合が、それぞれどのように働き、お互いに関連付いているかという新しい問題が提起されている。

このような状況を踏まえ、日本国内で鉄系高温超伝導の理論研究で成果を挙げている第

一線の研究者を集め、最近の成果について討論するとともに、実験研究者の講演も織り交ぜて今後の鉄系高温超伝導研究の方向性について議論を行った。2011年6月には「鉄系高温超伝導の物理」という同様な基研研究会を開催したが、そのときは、「スピン・軌道」が個別に生み出す現象に焦点を当てていた。本研究会では、その後の研究の発展に基づいて、「スピン・軌道・格子」の3者の関連に関して焦点を当てた。具体的には、「スピン・軌道・格子」の競合・協力という観点から、第一原理計算による電子状態研究、反強磁性金属相の磁氣的・電子的性質、ネマティック状態の起源、反強磁性・超伝導共存相の物性と起源、超伝導ペアリング対称性、ペアリングの起源、三次元性の効果、量子臨界点・非フェルミ液体的振る舞いの研究など幅広い問題を取り上げた。

### [研究会の内容]

研究会では、59名の参加者を得て、30分講演15件、15分講9件、ポスター講演11件の計35件の講演が二日間にわたって行われた。初日の午前中の最初の講演は、軌道と格子自由度を使った新超伝導物質開発の講演があり、軌道自由度という新しい観点からの物質開発の方向性が示された。次いで、核磁気共鳴を用いた講演が3件あり、 $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  (Ba122) の FeAs 面内異方性の高温からの発達、反強磁性と超伝導の共存に関する最新の成果、超伝導対称性のドーピングによる変化等が報告された。異方性の起源や、共存が異なるものか相分離によるものか等活発な討論が行われた。

休憩をはさみ、引き続き核磁気共鳴に関する成果が報告された。As を P で置換した試料での量子相転移の存在が議論された。また、最高の超伝導転移温度を示す 1111 系での系統的な研究からスピン揺らぎだけでなく他の効果も超伝導発現機構に寄与しているという指摘があった。理論からは、核磁気緩和率の計算が報告され、 $s_+$  波と  $s_{++}$  波のどちらも類似の振る舞いをするのが指摘された。STM/STS 実験からはクリーンな系として知られている LiFeAs に対する磁束状態が調べられ、磁束の形状がフェルミ面の形状を反映していることが報告された。

午後からは、高温から発達する異方的な電子状態（ネマティック状態）に関する講演があった。弾性定数の測定からはこれまで知られていた  $C_{66}$  の異常ほほかに  $C_{33}$  にも異常が存在することが報告された。また、磁場中トルク測定や放射光による構造測定から、構造相転移温度以上から電子状態の異方性が生じることが示された。この成果は偶然にも講演当日出版された Nature 誌に掲載されている。ネマティック状態形成にはスピン自由度よりも、軌道自由度と格子自由度の結合が重要ではないかということが示唆された。11 系の反強磁性状態でも異方的な電子状態が出現していることが STM/STS 測定により報告された。超伝導状態に関しては、レーザーを用いた角度分解光電子分光 (ARPES) 測定から、11 系においてフェルミ準位直上の状態が見出され、通常の準粒子分散でギャップ構造が理解できることが指摘された。

二日目の午前中は、鉄系超伝導体の最近の理論研究が発表された。まず、As-Fe-As 角の変化によるホールフェルミ面の一部消失を第一原理計算により詳細に調べ、その消失直前

で波数空間での軌道成分によるフラストレーション効果が顕著になることが報告された。次いで、バーテックス補正の効果を正確に取り込んでいくと、 $s_{++}$  波実現のために必要な軌道揺らぎが電子間相互作用だけで増大し得ることが報告された。また、自己無撞着揺らぎ理論を  $d$  軌道はバード模型に適用し、スピンと軌道に対するバーテックス補正の効果が異なることが報告された。

午後からの講演では、まず、ARPES による擬ギャップの存在の指摘と、P 置換 122 系における超伝導ギャップのノード位置に関する報告があった。dHvA 測定からは、 $KFe_2As_2$  のフェルミ面が完全に決定されたとの報告があった。理論の講演では、二体自己無撞着法によりバーテックス補正の効果を検討した結果が報告された。休憩をはさんで、電気抵抗の面内異方性についての報告があり、磁気・構造秩序相で見られる電気抵抗異方性は化学置換による不純物散乱と関連していることが指摘された。量子臨界性に関しては、超伝導状態における磁場侵入長の測定から、超伝導転移温度以下で隠されていた量子臨界点の存在が指摘された。この成果も、偶然にも講演当日発行された *Science* 誌に掲載されている。また、ARPES に関する報告もあり、P 置換 122 系では擬ギャップが存在しておりその発達温度が前日報告されたトルク測定のコリネティック状態への転移温度と一致していることが指摘された。さらに、K 置換 122 系に対する ARPES の結果から超伝導ギャップの系統的变化が明瞭に示された。

研究会最後のセッションは英語による 2 件の理論に関する講演であった。最初の講演では、 $s_{++}$  波超伝導とコリネティック状態に対する軌道揺らぎの効果が実験結果と比較しながら議論された。次の講演では、局在スピンを仮定したスピン・軌道模型による理論計算が報告され、電子状態の異方性やそれを確認した X 線分光実験との対応などが示された。講演のあとの質疑応答では活発な議論が行われた。休憩時間にも様々な議論が続き、大変有意義な研究会となった。JST による鉄系超伝導研究プロジェクト(TRIP)も終了した現在、鉄系超伝導の基礎研究を推進する研究者が集う機会が失われつつある状況の中で、本研究会が果たした役割は大きいといえる。この研究会を土台として、今後この分野のコミュニティーの維持・発展されることが望まれる。

なお、研究会プログラムおよび講演のアブストラクトは下記 web ページの「プログラム」欄から閲覧できる。

<http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~fesuper/2012/>

#### [世話人]

遠山 貴己 (京都大学基礎物理学研究所) (代表)、

有田 亮太郎 (東京大学大学院工学研究科)

池田 浩章 (京都大学大学院理学研究科)

黒木 和彦 (東京電子通信大学大学院理学研究科)

紺谷 浩 (名古屋大学大学院理学研究科)

松田 祐司 (京都大学大学院理学研究科)