

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名：鉄ニクタイト系化合物超伝導体の微視的・非経験的理論研究

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）：

研究代表者

黒木 和彦（電気通信大学大学院情報理工学研究科 教授）

主たる共同研究者

青木 秀夫（東京大学 教授）

有田 亮太郎（東京大学大学院工学系研究科 准教授）

田仲 由喜夫（名古屋大学 准教授）

紺谷 浩（名古屋大学 准教授）

小形 正男（東京大学大学院理学系研究科 教授）

3. 研究実施概要

本研究課題では、①第一原理バンド計算に立脚した鉄系超伝導体の有効模型の構築、②鉄系超伝導の発現機構、物質依存性の理解とより高い T_c を得るための指針、③多バンド系超伝導状態の研究やペアリング状態を判別する手段の考案、④鉄系超伝導に限定しない広い視野からの高温超伝導研究の4つを主なテーマとして、研究を実施した。

有効模型の構築については、1111系、122系、111系、11系の第一原理計算より、低エネルギー有効模型の構築を行った。また、不純物効果について、フェルミ面の変化を **super cell** を用いた第一原理計算によって調べた。超伝導発現機構に関しては、スピンの揺らぎを媒介とした $s\pm$ ペアリングと、軌道揺らぎを媒介とする $s++$ ペアリングに関する研究を行い、ニクトゲンが正四面体構造をとる近傍においてフェルミ面の枚数が最大化されることに伴って T_c も最適化されることを示した。一方、クーロン相互作用と電子格子相互作用に着目し、フェルミ面の軌道間ネスティングによる軌道揺らぎについて、軌道揺らぎの発達によって符号反転の無い超伝導状態 ($s++$ 波状態) が発現すること、さらに斜方晶転移や弾性定数 C_{66} のソフニングがもたらされることを見出した。ペアリング状態の判別については、不純物効果や中性子散乱実験の解析などを行い、ペアリング状態を判定する手法の一つとして、鉄系超伝導体の5バンド模型を用い、**Bogoliubov-de Gennes** 方程式を解くことで、非磁性不純物近傍の局所状態密度を求め、非磁性不純物近傍の局所状態密度の測定によって、 $s\pm$ 状態と $s++$ 状態を実験的に区別する手法を提案した。また、多バンド超伝導体における位相モードについても研究を行い、3バンド以上の系に特徴的な複数のモードが存在することを示した。多軌道性の観点から、銅酸化物高温超伝導体について、物質依存性を再訪した。 T_c の低い La 系銅酸化物においてフェルミ面上における $d^3z^2-r^2$ 軌道成分の混成が強いことに着目し、 $dx^2-y^2+d^3z^2-r^2$ の二軌道模型を構築して、超伝導の解析を行った。その結果、この二つの軌道間のエネルギー差が T_c とフェルミ面の形状を決定する大きな要因となっていることを示した。

4. 事後評価結果

4-1. 研究の達成状況及び得られた研究成果

本研究課題では、次のような成果が得られた

① スピン揺らぎ理論に基づく鉄系超伝導の物質依存性に関する研究

第一原理バンド計算をもとに構築した鉄系超伝導体の多軌道有効模型に対して、RPA または FLEX 近似を適用することによって、 T_c や超伝導ギャップの物質依存性についての解釈をスピン揺らぎ機構の

観点から与えた。鉄系超伝導体が多軌道系であり、かつフェルミ面がポケット状の小さいものであることに起因して、小さな構造上の変化に対してフェルミ面が敏感に変化し、超伝導に影響を及ぼすことを示した。

②軌道揺らぎ理論に基づく超伝導発現機構および構造相転移の研究

鉄系超伝導体のクーロン相互作用に加えて電子格子相互作用に着目し、フェルミ面の軌道間ネスティングによる軌道揺らぎを研究した。軌道揺らぎの発達によって符号反転の無い超伝導状態 (s_{++} 波状態) が発現すること、さらに斜方晶転移や弾性定数 C_{66} のソフニングがもたらされることを見出した。

③鉄系超伝導体における不純物効果

鉄系超伝導体の5バンド模型を用い、Bogoliubov-de Gennes 方程式を解くことで、非磁性不純物近傍の局所状態密度を求めた。その結果、非磁性不純物近傍の局所状態密度の測定によって、 s_{\pm} 状態と s_{++} 状態を実験的に区別する手法を提案した。

4-2. 総合的評価

本チームは鉄系超伝導の発見当初から理論研究を世界的にリードしてきたが、TRIP の3年間でもその主導的役割を果たし続けた。第一原理計算と FLEX 近似などによる解析計算を組み合わせ、信頼度の高い理論研究を数多く発信した。超伝導機構としては、スピン揺らぎと軌道揺らぎの双方の観点から研究が進み、対応してペアリングの対称性、物質・構造依存性、不純物効果、など新しいテーマが次々にこのグループから発信されたことは特筆に値する。軌道揺らぎによって、 s_{++} ペアリング状態が発現すること、弾性定数 C_{66} のソフニングが起きることなど、最新の研究動向をも先導する理論を提出した。

また、第一原理計算を基礎として、精密なモデル化の手法開発が進んだことも大きな成果として挙げることができる。主張が異なる個性のある研究者が集まったグループであったが、お互いに刺激し合うことで、視点を多方面へと広げた功績は大きい。現段階では統一した結論が得られてはいないが、研究進展の過程として黒木代表のリーダーシップの下、小額の予算にもかかわらずプロジェクト全体の指針となる理論的研究成果を上げ続けたことは、多大なシナジー効果の成果として高く評価できる。今後も異なる立場の理論研究グループが切磋琢磨し、実験研究さらには応用研究の方向性を示唆する研究成果を期待したい。