

論文内容の要旨

論文題目 鉄系超伝導体の超伝導対称性に関する理論的研究

(Theoretical study of pairing symmetries
in iron-based superconductors)

氏名 永井 佑紀

2008年2月に東工大細野グループによって報告された鉄系超伝導体は、その超伝導転移温度 T_c の高さや組成の組み合わせの豊富さから現在世界中で非常に精力的に研究されている。鉄系超伝導体は鉄を含む二次元的な伝導層を持ち、ドーピングを行うことで超伝導相が生じる。また、何もドーピングをしない場合には磁性相を持つ。これらの性質は、二次元的な伝導層を持ち母物質が絶縁体である銅酸化物超伝導体によく似ている。鉄系超伝導体が高々 T_c が高いのか、どのような超伝導発現機構を持つのか、を調べることは、鉄系超伝導体に限らず高温の超伝導体を探索する上で重要である。また、鉄系超伝導体は鉄の複数の $3d$ 軌道がフェルミ面を構成しておりマルチバンド的な系となっている。鉄系超伝導体の研究を通じて、より普遍的な、系のマルチバンド性が様々な物理量に与える影響を研究することも大きな目的の一つである。

鉄系超伝導体で実現している超伝導の候補の一つに、 $\pm s$ 波超伝導がある。 $\pm s$ 波超伝導とは、超伝導ギャップはフェルミ面上のすべての領域で開いているという意味で s 波超伝導的であり、複数のフェルミ面間で超伝導秩序変数の符号が異なる超伝導である。しかしながら、異なるフェルミ面上で超伝導秩序変数の符号が異なるという性質を実験的に確認することは難しい。なぜなら、バルクの系では、超伝導秩序変数の情報は多くの場合絶対値として現れ、符号の変化という超伝導秩序変数の位相は検出することが難しいからである。

本論文では、鉄系超伝導体の超伝導秩序変数の対称性の同定の為の実験を提案するため、現象論的理論手法を用いる。特に、超伝導秩序変数の符号が各フェルミ面上で異なるという情報を、どのような実験手法で取り出すことができるかについて考察する。ここで言う現象論的理論手法というのは、超伝導秩序変数がある形に仮定するという意味である。

本論文では、鉄系超伝導体の超伝導状態の性質に関する現状についてまとめ、その超伝導対称性の実験的同定を行うための方法を理論的に研究した。具体的には、

- 核磁気緩和率及び超流動密度の温度依存性の測定：バルク系での物理量
- ポイントコンタクトスペクトロスコピー等界面に敏感な実験：界面での準粒子の散乱に起因する束縛状態
- STM/STS による準粒子干渉効果測定実験：渦糸コア中の準粒子の不純物散乱
- 磁場回転比熱・熱伝導率実験による超伝導ギャップ異方性の測定：状態密度の磁場回転依存性

等の実験を解析および予言する。その際、鉄系超伝導体に特徴的なマルチバンド性と、 $\pm s$ 波という新奇な超伝導秩序変数がこれらの実験結果にどのような影響を及ぼすかを調べる。以下に各章で行った研究について述べる。

第2章では、有効二次元5バンドモデルを用いて、核磁気緩和率 $1/T_1$ と超流動密度の温度依存性を計算した。そして、核磁気緩和率 $1/T_1$ が T_c 直下でコヒーレンスピークを持たず、低温で $1/T_1 \propto T^3$ となることと、超流動密度が低温でフラットになることは、異方的 $\pm s$ 波超伝導シナリオによって説明できることを示した。このときの異方性の強さは、超伝導ギャップの最大値が最小値の四倍程度である。また、この章のもととなった論文が出版されたあとの研究の進展として、第一原理計算結果による複数のバンドからなる三次元的フェルミ面と等方的 $\pm s$ 波超伝導を用いての実験の説明についても述べた。このとき、 BaFe_2As_2 (122系と呼ぶ) に関しては、角度分解光電子分光で得られた超伝導ギャップを使うことで、核磁気緩和率の $1/T_1$ の振る舞いを説明することに成功した。 LaOFeAs (1111系と呼ぶ) に関しては、各バンドごとに異なる大きさの超伝導ギャップを用意し、あるバンドのフェルミ面上の超伝導ギャップが他のバンドの超伝導ギャップよりもかなり小さいと仮定することで、核磁気緩和率の $1/T_1$ の振る舞いを説明することができた。有効二次元5バンドモデルの結果も、第一原理計算結果による三次元的フェルミ面を用いた結果も、フェルミ面上のある場所での超伝導ギャップが他の場所よりも小さくなっていないければ、核磁気緩和率 $1/T_1$ の低温での振る舞いを説明できないという意味では同じ結論となっている。

第3章では、 $\pm s$ 波超伝導を検出するための方法として界面にできる Andreev 束縛状態に着目した。界面にできる Andreev 束縛状態はポイントコンタクトスペクトロスコピーによって検出可能である。我々は、マルチバンド系の界面束縛状態を調べるために、松本と斯波によるシングルバンド系の界面束縛状態の理論を n バンド系へと拡張した。我々は、準古典近似を用いることによって、マルチバンド系の無摂動 Green 関数を界面に垂直な運動量 k_x で積分する方法を開発した。そして、準古典条件 $\Delta/E_f \ll 1$ が成り立つマルチバンド系における界面にゼロバイアスコンダクタンスピーク (ZBCP) が出現する条件を導出し、その条件式は超伝導秩序変数の大きさに依存せず相対的な位相差に依存することを見

いだした。鉄系超伝導体もフェルミエネルギー E_F が超伝導ギャップ Δ よりはるかに大きいため、準古典条件は適用可能であるはずである。我々は、今回開発した手法を用いて、2バンドモデルと5バンドモデルの両方の場合の、 $\pm s$ 波超伝導を仮定した時の界面での状態密度のエネルギー依存性を計算した。その結果、どのエネルギーで状態密度のピークが出るか（Andreev 束縛状態がどのエネルギーに出現するか）は、超伝導ギャップの大きさの異方性にほとんど依らず、界面の角度と常伝導状態の性質に依っていることがわかった。我々のこの結論は、 $\pm s$ 波超伝導体でのポイントコンタクトスペクトロスコピーの結果が、物質の組成やドーパ量という常伝導状態の性質に依存して非常に複雑になるであろうことを示唆している。

第4章では、様々な超伝導対称性における渦糸コアでの不純物効果を調べた。STM/STS を用いた準粒子干渉効果の測定を用いると、超伝導状態の不純物散乱のコヒーレンス因子を調べることができる。我々は、渦糸まわりにできる低エネルギー Andreev 束縛状態が非磁性不純物によってどのように散乱するかを、渦糸近傍低エネルギー領域で有効な解析的理論である Kramer-Pesch 近似 (KPA) を用いて、不純物自己エネルギーの虚部をとって不純物散乱率を計算することで調べた。マルチバンド系の渦糸コア中では、シングルバンド系には存在しない符号反転前方散乱が生じうる。ここで、符号反転前方散乱とは、超伝導秩序変数が散乱の前後で符号が変化し、散乱前後の準粒子のフェルミ速度がほとんど変わらない散乱である。この散乱の不純物散乱強度は非常に強い。電子的フェルミ面とホールのフェルミ面の複数のフェルミ面を持つ鉄系超伝導体の場合、 $\pm s$ 波超伝導を仮定すると、 \vec{q} 空間中の広い領域にわたって強いアーク状ピークが現れる。したがって、クリーンな $\pm s$ 波超伝導体は、STM/STS 測定による dI/dV の \vec{q} 依存性を調べることで特定できるはずである。

第5章では、超伝導ギャップノードの運動量空間中の位置を実験的に検出できる方法のひとつである磁場回転比熱・熱伝導率測定の低磁場領域での新しい理論解析手法として、Kramer-Pesch 近似を導入した。我々は KPA を用いて典型的なフェルミ面を持つ系をいくつか仮定し、面内で磁場を回転した場合のゼロエネルギー状態密度 (ZEDOS) を計算した。この結果は、実験結果を解析する際に現実的なフェルミ面をきちんと考慮しなければ、誤った結論を出してしまう可能性があることを示唆している。複雑なフェルミ面を持つ系への KPA の適用例として、 $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ を考えた。第一原理計算によって得られたフェルミ面と STM/STS 実験の結果を再現する超伝導ギャップ構造を用いれば、Izawa らや Park らの磁場回転比熱・熱伝導率実験の結果を再現できることを見いだした。最後に、もう一つの KPA として、Mel'nikov らが用いていた KPA を Riccati 方程式から導出し、その精度がいままで使っていた KPA よりもよいことを確かめた。

本論文においては、鉄系超伝導体の超伝導対称性が $\pm s$ 波超伝導であるかどうかを実験的に調べる手段について理論的に研究した。その結果、第3章で研究した界面束縛状態の観測では $\pm s$ 波超伝導に関する確定的な情報を得ることができず、第4章で研究したクリーンな系での STM の QPI パターンの解析であれば、 $\pm s$ 波超伝導と他の超伝導を十分に区別できることがわかった。また、それらの研究を通じて、鉄系超伝導体に限らない一般的なマルチバンド超伝導体の物性に関する研究を行った。その結果、準古典近似においても「非連結なフェルミ面を持つシングルバンド系」と「マルチバンド系」に違いが現れる場合（第3章）と現れない場合（第4章）があることがわかった。