

鉄系超伝導体のフェルミ面の軌道依存性

— LDA+DMFT による解析 —

東京大学 大学院工学系研究科 有田 亮太郎¹

鉄系超伝導体の超伝導を非経験的アプローチで理解するための必要条件の一つとして、フェルミ面のキャラクターや形状が正しく理論的に記述できることがあげられる。鉄系超伝導体の発見以来これまでに数多くなされてきた局所密度近似 (LDA) に基づく第一原理計算の結果は、LDA が非磁性相における鉄系超伝導体のフェルミ面のおおまかな特徴 (Brillouin zone のどこにホールポケットや電子ポケットがあるか、どの程度の 3 次元性が存在するか、など) をある程度正しく記述できることを示唆する。

しかしながら、系によっては、計算結果と実験事実で各軌道が作るフェルミ面のサイズの大小がいれかわっているなどの顕著な差異がみられることがある。超伝導のギャップ関数の波数依存性から超伝導の対称性を議論するときなど、超伝導の発現機構を考察する際にはフェルミ面の軌道のキャラクターが正しく理解されている必要があるため、実験と第一原理計算の間のずれの起源を正しく理解することは重要な問題である。

本研究では、鉄系超伝導体の低エネルギー電子構造を精密に議論するためには、LDA に対して多体効果の補正を考慮する必要があるという立場にたち、LDA+DMFT(動的平均場近似) の計算を行った。文献 [1] で、1111、122、111、11 系の電子相関を系統的に比較し、11 系では他の系と比べて多体効果の影響が強く、1111 系は影響が弱いという結果を得ている。この結果に基づけば、11 系では多体効果の補正が大きく、1111 系では比較的小さくなることが予想される。実際、過去の LDA+DMFT の計算結果において [2]、一粒子スペクトル関数の大域的構造において顕著な差が表れることが指摘されている。そこで、11 系と 1111 系で、多体効果の補正によって各軌道が作るフェルミ面の形状変化がどのように表れるかを検討したのでその結果を報告する。

本研究はウィーン工科大学の A. Toschi, P. Hansmann, G. Sangiovanni, K. Held 氏との共同研究である。

参考文献

- [1] T. Miyake, K. Nakamura, R. Arita and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn., **79** 044705 (2010)
- [2] M. Aichhorn *et al.*, Phys. Rev. B **82** 064504 (2010)

¹E-mail: arita@ap.t.u-tokyo.ac.jp