

鉄系超伝導体における結晶構造と臨界温度の相関の起源

電気通信大学 黒木和彦¹, 白井秀知

鉄系超伝導体においては、その発見からまもなくして、結晶構造と臨界温度 (T_c) の間の相関関係が注目されるようになった。特に李らによる鉄・ニクトゲン・鉄の結合角が正四面体をなす角度において T_c が最大となることを示したいわゆる Lee's plot[1] は大きなインパクトを与えた。

我々はこの発見当初から結晶構造と T_c の相関関係の問題に取り組み、鉄面から測ったニクトゲンの高さに注目した [2]。そして、スピン揺らぎを媒介とする超伝導においては、鉄の高さに応じて、 T_c の高いフル・ギャップの $s\pm$ 波と T_c の低いノードル・ギャップ状態が切り替わることを示した。Lee's plot における低角度領域における T_c の低下は面内の格子定数の減少で説明できるものの、高さが非常に高い物質において T_c が低くなる理由は十分に理解されていなかった。

最近、砒素の高さが高く、面内格子定数が小さいために極度の挟結合角系となっている超伝導体 $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{As}_2$ ($T_c = 28.3\text{K}$) が合成された [3]。三宅らによって行われたバンド計算により、興味深いことに通常の鉄系超伝導体で波数 (0,0) のまわりに出現する $d_{xz/yz}$ 軌道起源の 2 枚のフェルミ面のうち、1 枚が消失していることが見出された [4]。この研究に動機付けられ、我々は LaFeAsO の Fe-As 結合長を一定に保ち、結合角を仮想的に変化させた結晶構造を元にバンド計算を行い、5 軌道有効モデルを得て、FLEX 近似による計算を行った [5]。ホール・フェルミ面は広結合角側で (0,0) まわりの 2 枚、挟結合角側で (0,0) まわりと (π, π) まわりの 2 枚となり、正四面体の結合角の近傍の一定領域で 3 枚ホール面となった。その結果、スピン揺らぎ媒介超伝導の T_c の目安となるエリアシュベルグ方程式の固有値 λ は 110° あたりで最大となり、Lee's plot と整合する。一方、低エネルギーのスピン揺らぎの指標となるストーナー因子は角度に対して超伝導とは異なった振舞を示し、超伝導とスピン揺らぎは必ずしも相関しない。特に挟結合角域ではスピン揺らぎが顕著になるのに対して、超伝導は抑制される。

参考文献

- [1] C.H. Lee *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 083704 (2008).
- [2] K. Kuroki, *et al.*, Phys. Rev. B **79**, 224511 (2009)
- [3] P. M. Shirage *et al.*, Appl. Phys. Lett. **97**, 172506 (2010).
- [4] T. Miyake *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 123713 (2010).
- [5] H. Usui and K. Kuroki, arXiv: 1102.3765.

¹E-mail: kuroki@vivace.e-one.uec.ac.jp