単一成分分子性導体における超伝導とディラック電子

理化学研究所 加藤 礼三 *1

通常、単一成分分子性結晶は、構成分子の HOMO と LUMO が各々形 成するバンドの間にギャップが存在し、電気を流さない絶縁体である。し かし、HOMO と LUMO の準位差が小さい金属—ジチオレン錯体では、 HOMO バンドと LUMO バンドとが重なって金属状態を実現させること が可能である。我々は、このような複数のバンドが伝導に関与する「マル チバンド系」単一成分分子性結晶において、ダイヤモンドアンビルセル (DAC) による静水圧性の良い超高圧を用いた電子物性制御、および第一原 理 DFT バンド計算・強結合近似モデルによる電子状態解析を行った。ま ず、[Ni(dmit)₂] (dmit = 1,3-dithiole-2-thione-4,5-dithiolate) 単結晶の電 気抵抗測定を行い 15.9 GPa 以上で金属的電気伝導を観測するとともに、 第一原理 DFT バンド計算により 3 次元フェルミ面が形成されることを 見出した ¹⁾。さらに、最初の単一成分分子性超伝導体 [Ni(hfdt)₂] (hfdt = bis(trifluoromethyl)tetrathiafulvalenedithiolate) (*T*c = 5.5 K at 8.1 GPa)



図 1 [Pd(dddt)₂] 分子と Dirac cones

を見出した²⁾。[Ni(hfdt)₂] で注目すべきは、その電子構造がディラックコーンを有する可能性を示している点 である。そこで、我々は他の金属—ジチオレン錯体を探索し、[Pd(dddt)₂] (dddt = 1,4-dithiin-2,3-dithiolate) が、高圧下でゼロギャップ状態を示唆する「温度に依存しない電気抵抗」を示し、第一原理 DFT バンド計算 もディラックコーン構造の存在を示すことを見出した(図)。[Pd(dddt)₂] では、複数のディラックコーンが形 成されるが、少なくともその一部は簡単な 2 次元強結合近似モデルを使って説明することが可能である。

謝辞

本研究は、崔亨波、圓谷貴夫(理研)、石橋章司(産総研)、小林速男、小林昭子(日大)の各氏との共同研 究である。

- H. B. Cui, T. Tsumuraya, T. Miyazaki, Y. Okano, and R. Kato, Eur. J. Inorg. Chem., (2014) 3837.
- H. B. Cui, H. Kobayashi, S. Ishibashi, M. Sasa, F. Iwase, R. Kato, and A. Kobayashi, J. Am. Chem. Soc., 136 (2014), 7619.

^{*1} E-mail: reizo@riken.jp

ドープされた三角格子モット絶縁体の電子状態と超伝導

東大工、埼玉大理 A 鹿野田一司,大池広志(現:理研),井深純,古川哲也,宮川和也,谷口弘三 A

擬2次元三角格子有機伝導体κ-(ET)₄Hg_{2.89}Br₈の常伝導電子状態と超伝導について報告 する。本物質はバンド充填 1/2 にホールが 11%ドープされた系である。オンサイトクーロ ンエネルギーUとバンド幅Wの比U/Wは、1/2 充填でモット絶縁体となっている同型の化

合物よりも大きな値を取ることから、3角格子 モット絶縁体に11%のホールがドープされた系 と見なせる [1,2]。ドープ系であることを反映し て金属そして低温で超伝導となるにもかかわ らず、磁化率は3角格子ハイゼンベルグモデル でよく再現される。スピン電荷分離を思わせ る。スピン磁化率がスピン液体物質と同様な温 度依存性を示すことから、ドープされたスピン 液体となっている可能性がある。この物質の温 度圧力相図を図1に示す[2]。低温では、0.5 GPa 付近に Tc の最大を持つ超伝導ドームが現れ、 この圧力がフェルミ液体と非フェルミ液体を 分けている。図2に示すように、0.5GPaを境に ホール係数が大きく変化することから、この圧 力で有効キャリアー数が変化していると考えら れる [2]。つまり、低圧では、ドープされたホー ルがキャリアーであるのに対し、0.5GPa 超では 2重占有が許されることで全電子(大きなフェ ルミ面)がキャリアーとなるという解釈である。 この状況で超伝導の Hc2 を調べたところ、その 振る舞いが 0.5 GPa 付近を境に大きく変化する ことがわかった。結果は、圧力の印加によって BEC から BCS 的なものへとクロスオーバーす ることを示唆している [3]。



図2 κ-(ET)₄Hg_{2.89}Br₈の10K でのホール係数

- [1] H. Taniguchi et al., J. Phys. Soc. Jpn. 76, 113709 (2007).
- [2] H. Oike et al., Pys. Rev. Lett. 114, 067002 (2015).
- [3] J. Ibuka et al, unpublished.

高圧下硫化水素の高温超伝導の第一原理的研究

理化学研究所 創発物性科学研究センター 有田 亮太郎 ¹

高圧下の硫化水素の超伝導 [1] について、超伝導密度汎関数理論による解析を行った [2]。超伝 導密度汎関数理論は、密度汎関数理論の拡張のひとつである。この枠組では、超伝導転移温度を 見積もるギャップ方程式が導かれる。ギャップ方程式のカーネルは交換相関汎関数を異常密度につ いて汎関数微分することによって求められる。交換相関汎関数は物質によらない普遍的なもので、 この形が具体的に定まれば、あらゆる物質の超伝導転移温度が非経験的に計算できる。現在のと ころ、そのような汎関数は得られていないが、2005 年にフォノンを媒介とする超伝導体の転移温 度を精度よく与える汎関数が提案されている [3, 4]。最近、我々は、フォノンの寄与にくわえ、誘 電関数の周波数依存性を考慮した定式化を行い、高圧下のリチウムの転移温度が定量的に正しく 再現されることを示した [5]。

そこで、この汎関数を用いて、高圧下の硫化水素の転移温度の計算を行った。我々の計算によれ ば、実験で観測されている 190K の転移温度は H₂S ではなく H₃S において実現されている可能性 が高いことがわかった。さらに、H₃S について、実験で実現されていると思われる R3m と Im3m 相では後者の方が系統的に転移温度が高く、実験で観測されている 190K の転移温度が前者によっ て実現されているならば、後者の相でよりさらに高い転移温度が実現する可能性があることがわ かった [2]。講演では、同位体効果の問題にくわえ、この系のフォノンのゼロ点振動(量子効果) が電子状態に重要な役割を果たすことも議論する。

本研究は明石遼介、野村悠祐、河村光晶、常行真司、佐野航、是常隆の各氏との共同研究である。

- [1] A. P. Drozdov, M. I. Eremets, and I. A. Troyan, arXiv:1412.0460.
- [2] R. Akashi and R. Arita, Phys. Rev. Lett. 111, 057006 (2013), J. Phys. Soc. Jpn. 83, 061016 (2014).
- [3] M. Lüders *et al.*, Phys. Rev. B **72**, 024545 (2005).
- [4] M. A. L. Marques et al., Phys. Rev. B 72, 024546 (2005).
- [5] R. Akashi, M. Kawamura, S. Tsuneyuki, Y. Nomura and R. Arita, arXiv:1502.00936.

¹E-mail: arita@riken.jp

半金属におけるエキシトン凝縮とBCS-BEC クロスオーバー

理化学研究所 CEMS 渡部洋¹, 柚木清司

理化学研究所 柚木計算物性物理研究室 関和弘

クーロン相互作用によって束縛された電子・ホール対は励起子(エキシトン)と呼ばれ、半金属 や半導体において低温で自発的に凝縮し、新たな量子状態を形成する可能性が 1960 年代から指摘 されていた [1]。半金属で完全ネスティングがある状況では、エキシトン凝縮の波動関数やギャッ プ方程式は超伝導の BCS 理論とほぼ同様に記述される [2]。以降、エキシトン凝縮に関する理論研 究は大きく進展したが、現実の物質で観測された例はまだ無い。近年では、1T-TiSe₂ や Ta₂NiSe₅ においてエキシトン凝縮の可能性が示唆されているが、確証を得るには至っていない。

本研究では現実の物質でのエキシトン凝縮の可能性を調べるため、変分モンテカルロ法を用い て2バンド・ハバード模型の解析を行った [3, 4]。二次元正方格子では、基底状態相図において金 属相とバンド絶縁体相の間にエキシトニック絶縁体相が安定化することが分かった。また、バンド 間クーロン相互作用を変化させることで、エキシトニック絶縁体相の中で BCS-BEC クロスオー バーが起こることを示した。これに対し、二次元三角格子ではエキシトニック絶縁体相が安定化 する領域は見られなかった。これはフェルミ面のネスティングがエキシトン凝縮の安定性に大き く影響することを示している。様々なパラメータ領域を系統的に調べた結果、エキシトン凝縮が 起こる領域はあまり広くないことが分かった。現実の物質でエキシトン凝縮を実現するには、理 想的な条件をうまく用意する必要があると考えられる。

一方、電子・フォノン相互作用を導入すると二次元三角格子においてもバンド間混成に伴う CDW 絶縁体相が安定化することが分かった [4]。これをエキシトニック絶縁体相と呼ぶべきかどうかは 注意を要するが、クーロン相互作用と電子・フォノン相互作用が協力的に働くことは確かであり、 1T-TiSe₂ や Ta₂NiSe₅ で見られる特異な低温相はこのような協力現象によって引き起こされてい ると考えられる。

- [1] N. F. Mott, Phil. Mag. 6 (1961), 287.
- [2] D. Jérome, T. M. Rice, and W. Kohn, Phys. Rev. 158 (1967), 462.
- [3] H. Watanabe, K. Seki, and S. Yunoki, J. Phys.: Conf. Ser. 592 (2015), 012097.
- [4] H. Watanabe, K. Seki, and S. Yunoki, submitted to Phys. Rev. B.

¹E-mail: h-watanabe@riken.jp

ヘリカル磁性体 CrAsの圧力誘起超伝導と NQR 測定

神戸大学 理学研究科 小手川 恒1, 中原 真悟, 藤 秀樹, 菅原 仁, 播磨 尚朝

CrAs は $T_N \sim 265$ K に一次の磁気転移点を持つヘリカル磁性体であり、最近、圧力下で超伝導 を示すことが Wu らと我々の研究によって独立に報告された。[1, 2] 図1 に CrAs の温度-圧力相 図を示すが、常圧で 265 K であった磁気転移点は圧力下で急激に減少し、 $P_c \sim 0.7$ GPa で磁気的 な基底状態はヘリカル磁性(HM)から常磁性(PM)となる。超伝導は HM 相の消失と共に出現 し、約 1.0 GPa で最大 $T_c = 2.2$ K のゼロ抵抗が観測される。相図を見ると磁気的な量子臨界点近 傍で超伝導が出現しているように見えるが、この磁気転移は大きな磁歪を伴う 1 次相転移であり、 相境界に臨界揺らぎを伴う必然性は無い。実際に電気抵抗測定では温度に対して明確なヒステリ シスをもち、 P_c 近傍でもその特徴は失われない。そこで我々はこの相境界の磁気的特性、微視的 状態を明らかにするため、また超伝導の対称性を明らかにするために As 核の NQR 測定を行い、 以下のような結果を得た。[3]

1. 臨界圧 $P_c \sim 0.7$ GPa の低温で HM 相と PM 相の相分 離が観測される。 2. 超伝導が出現する PM 相において低 温に向けて磁気揺らぎの発達が確認できる。 3. PM 相の 超伝導状態で核スピンー格子緩和率 $1/T_1$ にコヒーレンス ピークが観測されない。 以上のことから、CrAs の HM – PM 転移は低温においても 1 次相転移であり、量子臨界点 はこの相図上には存在しないことが示唆される。一方で、 超伝導は磁気揺らぎの発達と共に出現しており、CrAs が Cr 系初の非従来型超伝導であることを強く示唆している。



- [1] W. Wu et al., Nature Commun. 5, 5508 (2014).
- [2] H. Kotegawa et al., J. Phys. Soc. Jpn. 83, 093702 (2014).
- [3] H. Kotegawa et al., Phys. Rev. Lett. 114, 117002 (2015).

¹E-mail: kotegawa@crystal.kobe-u.ac.jp

$LnOBi(S,Se)_2$ におけるトポロジカル状態の解析

大阪大学大学院理学研究科 臼井 秀知¹, 黒木 和彦

理研 有田 亮太郎

2012年に Bi₄O₄S₃[1]を皮切りに発見された BiS₂系超伝導体は層状構造を持つ新しい超 伝導ファミリーとして注目されている。Bi₄O₄S₃の発見からその後間もなく発見された LaOBiS₂[2]では、ランタノイド (*Ln*)を変化させることや、S の一部を Se に置換するな ど [3] 様々な方法で現在多くの超伝導物質が得られている。*Ln*OBi(S,Se)₂の結晶構造はブ ロック層である *Ln*O 層と伝導層である Bi(S,Se)₂層で構成され、酸素をフッ素に置換する など電子ドープを行うことで超伝導が発現する。

LaOBiSe₂はBiとSeから構成される結晶構造であるため、Bi₂Se₃のようにトポロジカ ル絶縁体となる可能性に興味がもたれる。実際、LaOBiS₂からLaOBiSe₂にすることでバ ンドギャップが減少することが知られている。そこで我々はLnOBi(S,Se)₂に対して第一 原理計算を行い、ノンシモルフィック対称性に起因するトポロジカル結晶絶縁体 [4]の解 析を行った。スラブ模型による計算結果から、BiSe₂層のBiSe面を仮想的に平面とし、圧 力印加を仮定した結晶構造において (110) 面で表面状態のバンド構造の異常が得られ、ト ポロジカル絶縁体となる可能性が示唆される (図1)。本発表では、結晶構造に対するト ポロジカル状態の変化など、その詳細について発表を行う。



図 1: NdOBiSe2 の仮想結晶構造におけるスラブ模型のバンド構造

- 1) Y. Mizuguchi *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 220510(R) (2012).
- 2) Y. Mizuguchi et al., J. Phys. Soc. Jpn. 81, 114725 (2012).
- 3) A. Krzton-Maziopa et al., J. Phys.: Condens. Matter 26, 215702 (2014).
- 4) C.-X. Liu *et al.*, Phys. Rev. B **90**, 085304 (2014).

 $^{^{1}}E\text{-mail:h_usuidpresto.phys.sci.osaka-u.ac.jp}$

実験実証に適したトポロジカル超伝導体の探索

東京工業大学応用セラミックス研究所 笹川崇男1

近年、固体中におけるトポロジカルな電子状態に注目が集まり、絶縁体から超伝導体まで研究が盛んに行われるようになった。しかしながら、トポロジカル"絶縁体"に比べてトポロジカル"超伝導体"では、未だ「候補」と呼ばれる物質ですら数は少ない。トポロジカル超伝導状態の実験検証には、バルクと表面の電子状態を詳細に調べる必要があるが、角度分解光電子分光(ARPES)法で超伝導状態を観察できるほど *T*c が高く(>3 K)、ARPES にも走査トンネル顕微鏡/分光(STM/STS)法にも適する電気的に中性なへキ開面をもつ化合物となると、これまでに有望な候補物質はなかった。

そこで本研究では、定比組成、化学的に安定、層状結晶構造、 $T_c > 3K$ を条件に 物質の選定を行い、実験に先立って第一原理計算により電子状態を検討した。その 結果、空間反転対称性を持つ β -PdBi₂($T_c = 5.5$ K)と、空間反転対称性の破れた α -PdBi($T_c = 3.8$ K)および PbTaSe₂($T_c = 3.8$ K)を、実験実証に適したトポロジカル超 伝導体の有力な候補物質として見出した。いずれも、純良で大型な単結晶試料を作 製することに成功しており、バルク超伝導特性の評価や、ARPES および STM/STS に よるバルクおよび表面における電子状態の検証が進行中である。

これらの物質は、バルクと表面、マルチバンドやスピン分裂バンド、トポロジカル普遍量といった様々な自由度をもつ超伝導体という観点からも興味深い。

本研究において、単結晶育成と物性評価は大川・並木・加納(以上 東工大)、角度 分解光電子分光実験は坂野・三條・石坂(以上 東大)と奥田(以上 広大)、走査トン ネル顕微鏡/分光実験は岩谷・幸坂・町田・花栗(以上 理研)の各氏との共同研究とし て行われた。

¹E-mail: sasagawa@msl.titech.ac.jp

岩佐義宏 (東大院工・理研 CEMS)

LaALO₃/SrTiO₃やFeSe/SrTiO₃など、今世紀になって異種材料の界面で実現する超伝導がいくつ か登場し始めた。その中で、表題の電界誘起超伝導は、電界効果トランジスタの原理によって絶 縁体と半導体の界面において静電的電荷蓄積を行うことによって実現するもので、これまで SrTiO₃, (La,Sr)₂CuO₄などの酸化物、ZrNCl, MoS₂など層状物質、有機物質などに対して報告さ れている。電界誘起超伝導は、原理的には、特定の物質の特性に縛られない一般的な概念である ため、今後も新しい超伝導体開発の一手法として有効であることが期待される。

また、電界誘起超伝導は、不純物ドープのない半導体で実現されるため、比較的クリーンである ことが期待される。しかしながら、多くの電界誘起超伝導は、電気化学的なデバイスである電気 2重層トランジスタ(EDLT)を用いているため、超伝導層の直近にランダムに配置されたイオ ンが存在するとともに、電気化学反応のような複雑な状況が無視できないといったところが現実 である。実際のところ、電界誘起によって実現される超伝導が、そもそもどのような性質をもっ ているのかという問題は、これまでほとんど検討されてこなかったといえよう。ここでは、最近 の上部臨界磁場の測定などを通して、上記の複雑な状況にも関わらず、電界誘起超伝導が意外に も比較的理想に近い形で実現されていることを示したい。

FeSe の超伝導; 固体電子における BCS-BEC クロスオーバー

京都大学大学院理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 松田祐司

弱結合 BCS 超伝導から強結合 BEC 超伝導へのクロスオーバーの物理は、強く相互作 用するフェルミオンにおける興味ある問題の一つである。特にクロスオーバー領域では、 クーパー対同士が最も強く相互作用するため、様々な興味ある現象が観測されることが予 想できる。このクロスオーバーは、これまで冷却原子でのみ実現されてきた。その中で 大きな未解決問題として残っているのは、クロスーバー領域における preformed pair、擬 ギャップの問題、そして非フェルミ液体的な振る舞いである。この問題は、冷却原子にお いて散乱長が発散するいわゆるユニタリー・フェルミガスにおいても、論争となったが、 今のところ明確な答えは出ていない。またクロスオーバー領域に近いかもしれない、アン ダードープ領域における銅酸化物高温超伝導体においては、擬ギャップと非フェルミ液体 的振る舞いは観測されているが、preformed pair の存在は論争となっているだけでなく、 3者の関係は明らかではない。

最近、様々な実験から FeSe(T_c =9 K)のフェルミエネルギーは極めて小さく、さらに超 伝導ギャップも大きいことが明らかになってきており、すべてのバンドで超伝導ギャップと フェルミエネルギーの比 Δ/ε_F は1のオーダーになっており、この系は固体電子系でもっ ともクロスオーバー領域に近い超伝導体である可能性が指摘されている。本講演では、最 近の磁化、磁気トルク,輸送係数、熱電係数の結果をもとに、この系の超伝導揺らぎと 擬ギャップについて議論する。この系の超伝導揺らぎは、 $T^* \sim 20$ K 以下から大きく発達 し、その大きさは従来の物質の超伝導揺らぎよりも桁違いに大きく、preformed pair の存 在を強く示唆している。さらに輸送係数、熱電係数は T^* 近傍で大きく散乱時間が変化す ることを示しており、擬ギャップの存在を示唆している。さらに電気抵抗は非フェルミ液 体的振る舞いを示し、これらは preformed pair、擬ギャップそして非フェルミ液体的振る 舞いの密接な関係を示している。

本研究は、笠原成、芝内孝禎、山下卓也、綿重達哉、下山祐介、寺嶋太一、花栗哲郎、 H.V. Löhneysen, T. Wolf, C. Meingast, A. Levchenko との共同研究である。

- [1] S. Kasahara *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **111**, 16309 (2014).
- [2] S. Kasahara *et al.*, a preprint.

FeSeにおける軌道秩序と超伝導: デツイン試料を用いた角度分解光電子分光

東京大学 工学系研究科 下志万貴博

鉄系超伝導体の多くは格子変形、磁気秩序および軌道秩序を示すことが 知られている。これらは4回対称から2回対称へと対称性を下げる性質が共通 しており、各相転移の因果関係に注目が集まっている。特に、斜方晶歪みがス ピンあるいは軌道の揺らぎにより引き起こされる可能性が盛んに議論されてい る。FeSe は 90K において斜方晶歪みを示し、10K 以下では超伝導が発現する。 反強磁性秩序を示さないことから、格子変形における軌道自由度の役割を調べ る格好の舞台として注目を集めている。これまで角度分解光電子分光による多 くの先行研究がなされ、斜方晶歪みとほぼ同温度における軌道秩序の形成が報 告されてきた。しかし斜方晶歪みに伴う双晶形成により、FeSe における電子状 態の二回対称性を直接検出することは困難であった。

本研究では、軌道秩序相におけるバンド分散とその軌道成分の決定を目 的として、デツインした FeSe 単結晶に対して角度分解光電子分光を行った。ブ リルアンゾーンの中心と端において、長軸が互いに直行した楕円形のホール面 と電子面を観測した。偏光依存測定から、これらのフェルミ面では Fe 3*d*xz と 3*d*yz 軌道間の縮退が解け、さらに軌道分極の符号が異なることを見出した。軌道秩 序がもたらす電子状態の二回対称性は、フェルミ面のネスティング条件を悪化 させる方向に働くことが明らかとなった。講演では、このような回転対称性の 破れた電子状態において生ずる超伝導ギャップの観測結果についても紹介する 予定である。

Email : shimojima@ap.t.u-tokyo.ac.jp

FeSe の電子状態と圧力相図

物材機構 寺嶋太一

FeSe is an intriguing member of the iron-based superconductors. It undergoes a structural transition at $T_s \sim 90$ K but no antiferromagnetic transition at ambient pressure. Although the superconducting transition temperature T_c at ambient pressure is low, ~ 8 K, it can be enhanced remarkably by pressure or in single-layer films.

We have performed resistance and ac magnetic susceptibility measurements on FeSe single crystals under high pressure up to 27 kbar [1]. Our resistance data clearly show anomalies most likely associated with the pressure-induced antiferromagnetic transition, which was previously suggested by muSR measurements [M. Bendele et al., PRL 104, 087003 (2010)]. The superconducting and antiferromagnetic transitions exhibit an intriguing interplay: Both transition temperatures increase with pressure as if the two orders cooperate, but the superconducting transition broadens when the antiferromagnetism coexist as if the two orders compete. The structural transition temperature is quickly suppressed by pressure and the transition line almost meets the antiferromagnetic transition line however shows no clear kink indicating the point where the two transition lines meet. This might indicate that the two orders are nearly independent.

We have also performed Shubnikov-de Haas measurements [2]. We have found that the Fermi surface at ambient pressure is surprisingly different from that predicted by band structure calculations. I will discuss those data as well.

本研究は下記文献[1],[2]の共著者の方との共同研究です。

 Taichi Terashima, Naoki Kikugawa, Shigeru Kasahara, Tatsuya Watashige, Takasada Shibauchi, Yuji Matsuda, Thomas Wolf, Anna E. Böhmer, Frédéric Hardy, Christoph Meingast, Hilbert v. Löhneysen, and Shinya Uji, arXiv:1502.03548, to appear in JPSJ.
Taichi Terashima, Naoki Kikugawa, Andhika Kiswandhi, Eun-Sang Choi, James S. Brooks, Shigeru Kasahara, Tatsuya Watashige, Hiroaki Ikeda, Takasada Shibauchi, Yuji Matsuda, Thomas Wolf, Anna E. Böhmer, Frédéric Hardy, Christoph Meingast, Hilbert v. Löhneysen, Michi-To Suzuki, Ryotaro Arita, and Shinya Uji, PRB **90**, 144517 (2014).

$FeSe_{1-x}S_x$ における電子構造と超伝導

東京大学大学院新領域創成科学研究科 芝内 孝禎¹

鉄系超伝導体の中で最も単純な2元系の結晶構造を持つFeSe(11系)は、 $T_s \approx 90$ Kにおいて正 方晶一直方晶構造相転移を示すものの反強磁性が現れないなど特異な性質を示すことから、非常 に注目を浴びている。特に、最近の純良単結晶育成技術の確立[1]により、精密物性測定が進むに つれて非常に多彩な物性を示すことが明らかになってきている。特に、その直方晶における電子構 造は単純なバンド計算の結果に比べはるかに小さな体積のフェルミ面から構成されており[2,3]、 実効的なフェルミエネルギーが非常に小さい状態で超伝導が出現している。

BaFe₂As₂を母物質とする 122 系では、As と等電荷をもつ P 置換系で純良な単結晶が系統的に 得られ、量子臨界点の物理などの理解が進んでいる [4]。同様な観点から、Se と等電荷をもつと考 えられる S 置換系において、11 系での研究の進展が期待される。最近我々は、FeSe_{1-x}S_xの純良 単結晶試料を得ることに成功し、90 テスラ級パルス磁場を用いた磁気抵抗測定において、明瞭な 量子振動の信号を観測した。特に、S 置換により $T_s \sim 40$ K にまで抑制した試料においては、非常 に低い周波数 1 成分からなる振動を観測し、高磁場において明確にランダウレベル指数のアサイ ンに成功した。その結果、有限のベリー位相の存在を示唆する結果を得た。これらの結果を踏ま えて、11 系の電子構造と超伝導について議論する。

謝辞

この成果は京都大学の笠原成,山下卓也,下山祐介,綿重達哉,松田祐司,KITのT. Wolf, C. Meingast, H. von Löhneysen, Toulouse 高磁場研のW. Knafo, M. Nardone, J. Beard, Oxford 大のA. I. Coldea, M. D. Watson の各氏をはじめ,国内外の研究者との共同研究によるものです。

- [1] A. E. Böhmer *et al.*, Phys. Rev. B **87**, 180505(R) (2013).
- [2] T. Terashima et al., Phys. Rev. B 90, 144517 (2014); M. D. Watson et al., arXiv:1502.02922.
- [3] S. Kasahara *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **111**, 16309-16313 (2014).
- [4] T. Shibauchi, A. Carrington, and Y. Matsuda, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 5, 113-135 (2014).

¹E-mail: shibauchi@k.u-tokyo.ac.jp

鉄系超伝導体 $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ と FeSeの中性子非弾性散乱

— 磁気散乱スペクトルのネマティック効果 —

原子力機構 原子力科学研究部門 社本 真一¹, 樹神 克明, 梶本 亮一, 中村 充孝 CROSS 石角 元志 京都大学 理学部 綿重 達哉, 笠原 成, 松田 祐司 東京大学 新領域 芝内 孝禎

ESS 新井 正敏

鉄系超伝導体では高温で d_{yz} および d_{zx} 軌道が縮退しているが、低温で構造相転移とともにその 軌道縮退が解ける¹⁾。中性子弾性散乱により BaFe₂As₂ 単結晶の磁気形状因子の異方性を調べた ところ、斜方晶歪がわずか 0.3% にも拘わらず、2 倍以上異方的に分極することがわかった²⁾。こ のような異方性の変化に興味を持ち、FeSe_{0.5}Te_{0.5} および FeSe 単結晶の中性子非弾性散乱スペク トルを測定した。FeSe と異なり、FeSe_{0.5}Te_{0.5} では明確には構造相転移が見つかっていない³⁾ も のの、磁気散乱スペクトルの非整合周期の温度変化が報告されている⁴⁾。そこでこの温度変化を 詳細に調べたところ、70K ほどで大きく変化することがわかった(図1)。詳細は当日報告する。



図 1: FeSe_{0.5}Te_{0.5}のE = 7meVにおける非整合周期 δ の温度依存性。

- 1) For example, Shigeru Kasahara et al., Nature 486, 382 (2012).
- 2) Katsuaki Kodama et al., Phy. Rev. B 90, 144510 (2014).
- 3) Kazumasa Horigane et al., J. Phys. Soc. Jpn. 78, 74718 (2009).
- 4) Zhijun Xu et al., Phys. Rev. Lett. 109, 227002 (2012).

¹E-mail:shamoto.shinichi@jaea.go.jp

鉄系超伝導体における軌道偏極及び輸送現象の面内異方性

岡山大学理学部 大成 誠一郎 ¹

鉄系超伝導体における物理を解明するにあたり、相図全体を統一的に理解することが不可欠であ る。低ドープ領域において、反強磁性相転移が温度 T_N で起こるが、それよりも高い温度 T_S でテト ラ相からオルソ相への構造相転移が起き、鉄の d 軌道 (xz, yz 軌道) に軌道偏極 ($E_{yz} - E_{xz} \sim 600$ K) が出現する。この構造相転移はバーテックス補正による軌道秩序機構により説明されることを以 前示した。[1, 2] また、構造相転移は超伝導相に隣接しているため、超伝導発現機構を解明する 際に重要であると考えられる。

更に近年、 T_S 以下、 T_N 以上において熱起電力の面内異方性が著しく増加することが報告された。[3] 我々がARPESの結果に対応する大きな軌道偏極下において、久保公式を用いて輸送係数を計算した結果、熱起電力の面内異方性の著しい上昇を再現することに成功した。その際 cold spot と hot spot の起源である準粒子ダンピングの軌道依存性が大きくなることが重要であることが分かった。一方で抵抗率の面内異方性は小さく実験と良く整合する。

また、軌道偏極した FeSe において自己エネルギーを計算することで、最近 ARPES[4] で観測さ れた非自明な Γ 点近傍のフェルミ面の変形効果を説明することに成功した。その他の鉄系超伝導 体の物質群との相違についても議論する予定である。

このように、バーテックス補正による軌道揺らぎ(秩序)により、鉄系超伝導体の物理を統一 的に理解することを目指す。

謝辞

本研究は名古屋大学理学部、山川洋一助教、紺谷浩教授との共同研究である。

- [1] S. Onari and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. 109 (2012) 137001.
- [2] S. Onari, Y. Yamakawa and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. **112** (2014) 187001.
- [3] S. Jiang et. al., Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 067001.
- [4] Y. Suzuki et. al., arXiv:1504.00980.

¹E-mail: onari@okayama-u.ac.jp

KFe_2Se_2 系の相分離と超伝導特性

物質・材料研究機構 高野 義彦

鉄系超伝導の中でも最もシンプルな FeSe は、常圧の超伝導転移温度は $T_c \sim 13$ K であるが、高圧力下で $T_c \sim 37$ K まで上昇する [1-3]。FeSe の層間にカリウムを挿入した KFe₂Se₂系物質は、常圧下で約 33K の T_c を示し、FeSe 系化合物に内在する高温超伝導の

可能性を示唆している。しかしこの KFe₂Se₂系物質の超伝導特性は、再 現性などの問題により統一的な理 解は得られていない。特にARPES では、他の鉄系超伝導体で見られ ているΓ点周りのホールポケット が観測されていないなど、特異な 振る舞いが見られている。そのた め、高品質な単結晶による物性評 価が求められている。

本研究では、One step method[4] により単結晶試料を合成し、クエン チ温度を変えて KFe₂Se₂ 単結晶を 育成し、磁化率・電気抵抗率測定に よって超伝導特性を評価した。

図1に示すように高い温度でク エンチするほど超伝導体積率が高 く、徐冷した試料においては低い。



図 1: K_{0.8}Fe₂Se₂単結晶の磁化率温度依存性。図中の温度は作製時のクエンチ温度。

しかし、徐冷試料には $T_c \sim 44$ K 超伝導が現れることが分かった [5]。発表当日は試料の組織と超伝導特性について、詳細に議論する予定である。

- [1] Y. Mizuguchi et al., Appl. Phys. Lett. 93, 152505 (2008).
- [2] S. Margadonna *et al.*, Phys. Rev. B **80**, 064506 (2009).
- [3] S. Masaki *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 063704 (2009).
- [4] T. Ozaki *et al.*, Euro Phys Lett., **98** 27002 (2012).
- [5] M. Tanaka *et al.*, arXiv:1504.04197.

鉄系超伝導体の電子構造の異方性

東京大学 理学系研究科 藤森 淳

122 組成鉄系超伝導体の母物質の低温相は反強磁性正方晶相(AFO 相)であるが、ネール点よ り高温側約 50 度の範囲でも電子的に4回対称性の破れた"ネマティック"相が存在する[1]。最近 の母物質 BaFe₂As₂ の ARPES 測定によれば、ネマティック相では、強的な軌道秩序から期待され る Γ-X 方向と Γ-Y 方向のバンド分散の違いが残存すること [2] に加えて、AFO 相と同じ周期のバ ンドの折り畳みも生き残っており、ネマティック相で生き残っている軌道秩序が反強成分を持つこ とが示唆された [3]。

BaFe₂As₂に対する等電子置換として Ru を微量にドープすると、Co ドープと同様に電気抵抗 の異方性が生じる。この異方性は定性的には Co ドープと同様に $\rho_b > \rho_a$ であるが、大きさは等電 子置換である P ドープと同程度であった [4]。ARPES 測定によれば、少量の Ru ドープによって バンド構造の異方性は母体と殆ど変らず、電気抵抗の異方性の原因が電子構造の異方性ではなく 不純物散乱確率の異方性であることが示された。一方、11 組成鉄系超伝導体の母物質 FeTe に Se、 Cu、過剰鉄を微量にドープした系でも電気抵抗の異方性が観測され、その大きさは等電子置換か キャリアー・ドープかによって異なっていたが、異方性の符号が 122 系と逆 ($\rho_b < \rho_a$) になった [5]。これは、122 系と 11 系の AFO 相のスピン構造の違いに起因するものと考えられる。

謝辞

本講演は、劉亮、輿石佳佑、岡崎浩三、徐健、鈴木博人、出田真一郎、吉田鉄平、下志万貴博、 石坂香子、組頭広志、小野寛太、中島正道、石田茂之、三上拓也、富岡泰秀、伊藤利充、木方邦 宏、李哲虎、伊豫彰、永崎洋、内田慎一の各氏との共同研究である。

- [1] S. Kasahara *et al.*, Nature **486**, 382 (2012).
- [2] T. Shimojima *et al.*, Phys. Rev. B **89**, 045101 (2014).
- [3] K. Koshiishi *et al.*, to be submitted.
- [4] L. Liu *et al.*, arXiv:1503.02855.
- [5] L. Liu et al., Phys. Rev. B 91, 134502 (2015).

鉄系超伝導体における核磁気共鳴による研究

— 磁性、構造、軌道の関係 —

京都大学大学院理学研究科 石田 憲二1

鉄系超伝導体の特徴として、1111系や122系の母物質や低濃度領域において磁気秩序温度 (T_N) と同じ温度か僅かに高い温度 (T_S) で正方晶から斜方晶に構造転移をすることが知られている [1, 2]。これは、これらの系において構造と磁性の強いカップリングを示唆する結果である。また BaFe₂(AsP)₂系においてはトルク測定から T_S 以上の温度から面内の四回対称性の破れが報告され、その起源についても関心が集まっている [3]。我々は BaFe₂(As_{0.96}P_{0.04})₂において ⁷⁵As 核の NMR 実験から、 T_S 以上の温度から微視的に見ても四回対称性の破れが低温に伴い大きくなることを見出した [4]。この振る舞いと磁気ゆらぎとの関係を議論する。これに対し鉄系超伝導体の一つ 11 系の FeSe では上記の関係とは異なり、90K で構造転移の後静的な磁気秩序は見られないものの低温に伴ってストライプ相関を持った反強磁性ゆらぎが発達し、9 K で超伝導転移を示す [5]。111系、122系、11系の結果を比較し、構造と磁性、軌道秩序の関係を実験結果に基づき議論したい。

BaFe₂(AsP)₂ は京都大学松田氏の研究グループと、FeSe は Karlsruhe 研究所の C. Meingast 氏の研究グループとの共同研究である。

- [1] K. Ishida, Y. Nakai, and H. Hosono, J. Phys. Soc. Jpn. 78, 062001 (2009).
- [2] D. C. Johnston, Adv. Phys. **59**, 803 (2010).
- [3] S.Kasahara, H. J. Shi, K. Hashimoto, S. Tonegawa, Y. Mizukami, T. Shibauchi, K. Sugimoto, T. Fukuda, T. Terashima, A. H. Nevidomskyy and Y. Matsuda, Nature 486 (2012).
- [4] T. Iye, M-H. Julien, H. Mayaffre, M. Horvatic, C. Berthier, K. Ishida, H. Ikeda, S. Kasahara, T. Shibauchi, and Y. Matsuda, J. Phys. Soc. Jpn. 84, 043705 (2015).
- [5] A. E. Böhmer, T. Arai, F. Hardy, T. Hattori, T. Iye, T. Wolf, H. v. Löhneysen, K. Ishida, and C. Meingast, Phys. Rev. Lett. 114, 027001 (2015).

¹E-mail: kishida@scphys.kyoto-u.ac.jp

鉄系超伝導体 FeSeにおける磁性を伴わない軌道秩序の起源

名古屋大学理学研究科 山川 洋一¹, 紺谷 浩

近年、FeSeの興味深い相図が注目を集めている [1-3]。FeSe は、 $T_S \sim 90$ K で大きな軌道分極を 伴う構造相転移を示すが [2]、磁気転移を示さない。さらに、 $T > T_S$ でのスピン揺らぎは非常に弱 く、 T_S 以下で初めて発達する [3]。この FeSe の振る舞いは、 T_S 直下で磁気転移を示す LaFeAsO や Ba122 系等とは異なっており、両者の構造相転移を統一的に説明可能な理論が求められている。

そこで本研究では8軌道 d-p 模型を構築し、自己無撞着バーテックス補正 (SC-VC) 法 [4] を用い て多体相関を取り扱い、FeSe と LaFeAsO の構造相転移について議論した。その結果、LaFeAsO ではスピンと軌道の揺らぎが共に発達するのに対し (左図)、FeSe では軌道揺らぎのみが発達する 事を明らかにした (右図)。この差は、フント結合 J とクーロン相互作用 U の比に起因する。J は スピン揺らぎを増強し軌道揺らぎを抑制する為に、LaFeAsO の J/U = 0.13 に対し、J/U = 0.09と著しく小さい FeSe では [5] 軌道揺らぎが支配的となる。さらに、 T_S 以下でのスピン揺らぎ増大 も軌道秩序により説明可能である。従って、FeSe と LaFeAsO の構造相転移は、J/U の物質依存 性を考慮する事で、SC-VC 法により統一的に説明される。



図 1: 軌道及びスピン感受率の強度を表す増強因子 $(1 - \alpha_C)^{-1}$ 及び $(1 - \alpha_S)^{-1}$ の温度依存。 (左)LaFeAsO。(右)FeSe。 $\alpha_{C(S)}$ は電荷 (スピン)の Stoner-factor であり、 $\alpha_{C(S)} = 1$ は軌道 (磁気) 転移に対応する。尚、FeSe については ARPES のバンド構造に合わせて模型を構築し計算した。

- [1] Y. Mizuguchi and Y. Takano, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 102001 (2010).
- [2] K. Nakayama, et al., Phys. Rev. Lett. 113, 237001 (2014);
 - T. Shimojima, et al., Phys. Rev. B **90**, 121111(R) (2014).
- [3] A. E. Böhmer, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **114**, 027001 (2015).
- [4] S. Onari and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. 109, 137001 (2012).
- [5] T. Miyake, K. Nakamura, R. Arita, and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 79, 044705 (2010).

¹E-mail: yamakawa@s.phys.nagoya-u.ac.jp

スピン密度波相近傍でのスピンネマチックの一般的特徴

— 鉄系超伝導体でのネマチック相の起源と高温超伝導機構の解明に向けて —

物質・材料研究機構 山瀬 博之1

マックスプランク固体物性研究所 Roland Zeyher²

銅酸化物高温超伝導体は反強磁性モット絶縁体にキャリアをドープした系である。その本質的 な物理は単バンド模型で理解出来ると考えられており、スピンの揺らぎの重要性が広く認識され ている。一方、第二の高温超伝導物質と言うべき鉄プニクタイド系は、銅酸化物と同様に磁気相 の近傍で超伝導が実現する。しかし銅酸化物と違って磁気相は金属であり、さらに幾つものバン ドがフェルミエネルギー近傍に存在している。それ故にスピンや軌道の揺らぎが超伝導性にとっ て重要である、と議論されている。ところで、磁気相の近傍に電子ネマチック相が存在しており、 超伝導相そのものは磁気相よりもむしろネマチック相により近接している。したがって、ネマチッ ク相の起源やその揺らぎの性質をよく理解することは、鉄プニクタイド系の高温超伝導機構を解 明する上で重要なステップになることが期待される。

鉄系超伝導体ではスピンまたは軌道起源による電子ネマチック相が議論されている。本研究で はスピン起源の観点から理論的考察をした結果を報告する [1]。スピンネマチックの引力相互作用 が存在すればスピンネマチック不安定性が生じ得るが、ネマチック相は磁気相関長がある臨界長 を超えた時、つまり、スピン密度波相転移が生じる前に安定化することが分かった。特に、その臨 界磁気相関長はスピンネマチック臨界温度が高くなるほど短くなる、という特徴がある。 付随し て、低エネルギーのスピンネマチック臨界温度が高くなるほど短くなる、という特徴がある。 付随し て、低エネルギーのスピンネマチック臨界点に近づくとスペクトラル関数は、波数をゼ ロに固定してエネルギーの関数としてみた時、有限温度ではセントラルピークを、絶対零度(量 子相転移)ではソフトモードを示す。以上のようなスピンネマチックの特徴は、実はスピン密度 波相近傍での一般的なものであることが判明した。すなわち、これらの特徴はスピン揺らぎのバ ブルダイアグラムの虚数を低エネルギーで展開した際にエネルギーの一次の係数が温度の二乗に 比例する、という一般的な性質に起因したものである。更にスピンネマチックのスペクトラル関 数は、波数ゼロ、エネルギーゼロ周りの散漫ピークとして現れ明瞭な分散関係を示さないことも 分かった。以上の理論結果を基にして、スピンネマチック不安定性とその近傍にあるスピン密度 波相という観点から鉄系超伝導体の相図を考察する。

[1] H. Yamase and R. Zeyher, arXiv: 1503.07646.

¹E-mail: yamase.hiroyuki@nims.go.jp

²E-mail:R.Zeyher@fkf.mpg.de

サイト間 *d*-*p* 軌道相関を用いた軌道揺らぎと超伝導の理論 -A15型超伝導体と鉄系超伝導体-

新潟大 CFIL, 新潟大理¹ 山田武見, 大野義章¹ V₃Si や Nb₃Sn といった A15 型超伝導体は、比較的高い転移温度 (最高で *T_c*=23K) を持ち、古 くから注目されてきた物質である [1]。この系は構造転移や弾性定数のソフト化といった鉄系超伝 導体と類似する性質を示すため、軌道揺らぎ機構 [2, 3] との関連で近年再び注目を集めている。

本研究では、近年鉄系で議論されてきたサイト間 d-p 軌道相関の機構 [4] を A15 型超伝導体に対しても検討し、構造転移に伴う軌道秩序や軌道揺らぎの増大やそれらが超伝導に及ぼす影響について明らかにすることを目指す。まず A15 型超伝導体に対する第一原理計算に基づいて有効模型 (36 バンド d-p 模型 [図 1])を構築し、縮退軌道に対するサイト間 d-p クーロン相互作用を平均場近似の範囲で考慮することで、第一原理計算により導出された軌道秩序を再現可能であることを示した [5]。さらにこのサイト間クーロン相互作用を RPA の範囲で考慮すると、波数 q=0 の軌道 (四極子) 揺らぎが増大する [図 2]。この揺らぎの増大は弾性定数 ($C_{11} - C_{12}$)/2 のソフト化を助けると同時に、 T_c を押し上げる効果をもたらす [6]。講演では鉄系との比較についても議論したい。





図 1: V₃Si に対するバンド計算 (WIEN2k) と 36 バンド d-p 模型のバンド構造。 図 2: サイト間 d-p 軌道相関により増強された d 軌道分極 感受率(上段) と p 軌道分極感受率(下段)。ここで $q_z = 0$ 。

- [1] L.R. Testardi, Rev. Mod. Phys. 47, 637 (1975).
- [2] H. Kontani and S. Onari, Phys. Rev. Lett **104**, 157001 (2010).
- [3] Y. Yanagi, Y. Yamakawa and Y. Ōno, J. Phys. Soc. Jpn 79, 123707 (2010).
- [4] T. Yamada, J. Ishizuka and Y. Ono, J. Phys. Soc. Jpn. 83, 043704.
- [5] 緒形桂,山田武見,石塚淳,大野義章:日本物理学会第70回年次大会24aPS-27.
- [6] 山田武見,緒形桂,大野義章:日本物理学会第70回年次大会22aBE-12.

10A-7

電子線照射した SrFe₂(As₁-ᡵPᡵ)₂における反強磁性と超伝導:P-NMR 実験

阪大院基礎工 <u>椋田秀和</u>、宮本昌士,八島光晴,北岡良雄

阪大院理^A 小林達也^A、宮坂茂樹^A、田島節子^A

The Ames Laboratory, Iowa State University, M. A. Tanatar, R. Prozorov

Ecole Polytechnique M. Konczykowski,

価数不変置換による BaFe₂(As_{1-x}P_x)₂ 系(Ba122AsP)は、純良な単結晶が得られるた め様々な測定手法により精密測定が行われ、その理解が格段に進んでいる鉄系超伝 導の一つであろう[1]。Ba を Sr で置き換えた SrFe₂(As_{1-x}P_x)₂ 系(Sr122AsP)も、反強磁 性相からノードをもつ超伝導相へ至る類似した電子相図をもつ[2]。その常伝導状態 の磁気揺らぎの特徴、量子臨界性と T_cの関係など類似する点も多いが[3]、FeAs 層 間距離が短いことから生じる、より 3 次元的な Fermi 面の特徴が現れるなど相違点 も見られる[4]。これらの電子状態の特徴を比較することで 122 系の特徴を明らかに し、さらには 1111 系、42622 系などの他の結晶系との比較から、鉄系超伝導の普遍 的な特徴を引き出すことを目指した研究を続けている。この一連の研究において単 結晶から多結晶まで幅広く測定できる NMR の長所が発揮できる。

本講演では、これまで行ってきた Sr122AsP 系の NMR 測定結果を、類似した電子 相図が報告されている Ba122AsP 系と比較し、また最近新奇な電子相図が明らかに なってきた LaFe(As_{1-x}P_x)O 系などとも比較しながら、類似した Fe(As,P)4 四面体の局 所パラメーターをもつ Fe(As,P)系の共通性や、ブロック層の厚さや結晶系の違いな どに起因する相違点を議論したい。

また、Sr122AsP の最適置換試料(x=0.35)ではアニールにより超伝導転移温度 T_cが 26K から 33K へと上昇し、Ba122AsP の 31K を上回ることが報告された[2]。さらに そのアニール試料に電子線を照射すると T_cが大きく下がることも最近報告された [6]。アニール前試料、アニール後試料、電子線照射試料の3つの NMR 測定結果を 比較する。Ba122AsP において報告されている反強磁性 QCP が低ドープ側に移動し ていると見られる振る舞い[7]と類似した振る舞いが観測されつつあり、電子線照射 による点欠陥を導入したことで、どのような変化が生じたかをミクロな視点で議論 したい。

- [1] S. Kasahara et al., Phys. Rev. B 81, 184519 (2010).
- [2] T. Kobayashi et al., Phys. Rev.B.87.174520 (2013)
- [3] T. Dulguun et al., Phys. Rev. B.85.144515 (2012).
- [4] H. Suzuki et al., Phys. Rev.B.89.184513 (2014).
- [5] Y. Nakai et al., Phys. Rev. B 81, 020503(R) (2010).
- Y. Nakai et al., Phys. Rev. Lett. 105, 107003 (2010).
- [6] C. P. Strehlow et al., Phys. Rev. B 90, 020508(R) (2014).
- [7] Y. Mizukami et al., arXiv:1405.6951.

準安定相に着目して合成した超伝導体の物性

— FeSe_{1-x}Te_x 薄膜 および Bi₂Pd —

東京大学大学院総合文化研究科 前田 京剛¹, 今井良宗, 鍋島冬樹, 岡田 達典

物性研究においては,熱平衡状態での試料合成が困難な場合にしばしば遭遇する。その場合,非 平衡での,あるいは準非平衡での試料合成が局面打開には必須である。以下では,我々が最近経 験したそのような例を2題紹介する。

(1) $FeSe_{1-x}Te_x$ 系薄膜の合成と物性

本系は、鉄系超伝導体のなかでも最も単純な構成要素・結晶構造をもつために、Te 量 x の値を変 化させることによる系統的物性研究が、鉄系超伝導体の超伝導の理解にとって大変重要である。し かるに、本系は、通常のバルクの試料合成では、相分離のために、0.1 < x < 0.4 の組成の試料合成 は不可能とされていた。我々は、同系に対して PLD 法による薄膜作製を行い、FeSe、FeSe_{0.5}Te_{0.5} 等については、良質のエピタキシャル薄膜(厚み 100nm 以下)を作製し、結果的に同じ組成のバ ルク試料よりも T_c が上昇することを見出していた。そこで、この方法をすべての Te 量 x の試料 に対して適用したところ、従来合成不能と考えられてきた Te 量も含めて、すべてのxの値で単一 相エピタキシャル薄膜の試料を作製することができた。さらに驚くべきことに、超伝導転移温度 T_c が、「相分離領域」であった x = 0.2 において、最高値をとり、これは、従来のこの物質系での 最高値の 1.5 倍になることである。 T_c の値は、x を減らすほど増大し、これは従来より鉄系超伝導 体で提唱されている経験則と合致するところであるが、x = 0.1とx = 0.2の間で急激に減少する。 この理由について、ホール効果、上部臨界磁場などを測定した結果と合わせて、考察する。

鉄カルコゲナイド超伝導体ではインターカレーション等により c 軸を伸ばすと *T_c* がさらに上昇 することが知られている。我々も、人工的に *c* 軸を制御することを念頭におき、超格子の作製を試 みてきた。これらについても、現状を報告したい。

(2) 新しい多バンド超伝導体 β-Bi₂Pd

Bi₂Se₃ をベースにした新たなトポロジカル絶縁体を合成しようという試みの途上で副産物とし て発見したのが, *T_c* =5.4 Kの β-Bi₂Pd である。(この単一相単結晶合成には,準安定相から の急冷が必須であった。)上部臨界磁場,比熱等の測定から,我々は,この物質が多バンド超伝導 体であると結論づけたが,そのすぐあとに行われたバンド計算も,この結論を支持している。最 近,超伝導状態の複素伝導度測定,ポイントコンタクトスペクトロスコピーなどを行い,定量的 にも当初の結論と整合する結果を得ている。当日はその詳細について報告する。

¹E-mail: cmaeda@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp

非磁性籠状物質 $\mathbf{PrV}_2\mathbf{Al}_{20}$ における重い電子超伝導

— 電子軌道の量子揺らぎによる新しい超伝導 —

東京大学物性研究所 松本洋介, 辻本 真規, 酒井 明人, 冨田 崇弘, 中辻 知

磁気的な量子臨界点近傍における非従来型超伝導というコンセプトは主に4f 電子系の金属間化 合物における一連の研究によって大きな成功を収めてきた。ここでは、局在したf電子の磁気モー メントが秩序化した状態と、f電子が伝導電子との混成によって遍歴する重い電子状態の間の量 子相転移の近傍で、磁気的な揺らぎを媒介とした従来のBCS超伝導とは異なる超伝導が生じてい ることを意味すると考えられる。

これに対し、f 電子の磁気的な自由度ではなくて、軌道自由度を用いた新しい超伝導は可能で あるのか、すなわち f 電子の軌道秩序の量子臨界点で何が起きるか、というのが我々の着眼点で ある。このほとんど未解明の興味深い問題を実験的に明らかにする上で、最近、希土類金属間化 合物 PrTi₂Al₂₀ と PrV₂Al₂₀ が、格好の研究対象となることが明らかになってきた¹⁻³⁾。これらの 物質は立方晶 (T_d)の対称性を持ち、その結晶場基底状態は非磁性 Γ_3 二重項である。さらに重要 な点は、Pr 原子の周りを 16 個の Al 原子が籠状に取り囲む構造を持つ為、f 電子と伝導電子が強 く混成している点である。特に PrV₂Al₂₀ は PrTi₂Al₂₀ に比べて格子定数が小さく、籠のサイズが 小さいため、より混成が大きいことが期待されるが、実際、軌道揺らぎによると考えられる異常 な電子状態を示す。このような強い軌道揺らぎを伴う状況の下、PrV₂Al₂₀ は常圧下、軌道秩序相 内の 0.05 K で準粒子有効質量が $m^*/m \sim 140$ まで増大した重い電子超伝導を示す³⁾。本講演で は、この超伝導について現在までに分かったことを、PrTi₂Al₂₀ との比較、特に PrTi₂Al₂₀ の圧力 下重い電子超伝導⁴⁾ との比較も踏まえて議論することで、ここで f 電子の軌道揺らぎを媒介とし た新たな超伝導が実現していると考えられることを示したい。

- 1) A. Sakai, and S. Nakatsuji, J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011), 063701.
- 2) A. Sakai, K. Kuga and S. Nakatsuji, J. Phys. Soc. Jpn. 81 (2012), 083702.
- M. Tsujimoto, Y. Matsumoto, T. Tomita, A. Sakai, and S. Nakatsuji, Phys. Rev. Lett. 113 (2014), 267001. *References therein.*
- 4) K. Matsubayashi et al., Phys. Rev. Lett. 109 (2012), 187004.

U系超伝導体における超伝導対称性とフェルミ面

― 現実のフェルミ面におけるノード位置は?―

東京工業大学大学院理工学研究科 井澤 公一1

ここ 30 年来,数多くの非従来型超伝導体が発見されるとともに,その新奇な超伝導の理解を目 指し精力的に研究が進められてきた。特に超伝導対称性は,発現機構に密接に関係する極めて重 要な情報であるため,実験・理論の両側面から活発に議論されてきた。

我々は、これまで熱輸送係数の磁場方向依存性の実験から、従来の手法では知ることの難しい ノードの方向を明らかにし、それをもとに超伝導対称性の候補を提案してきた[1].しかしながら、 さらに超伝導発現機構の理解を深めるには、ノード方向から得られる超伝導対称性だけでなく、現 実のフェルミ面におけるギャップ構造を具体的に知ることが重要である。実際、最近の第一原理計 算に基づく理論的研究の進展により、現実的なフェルミ面上におけるギャップ構造が議論できるよ うになってきており[2]、対応する実験結果との比較から発現機構に関する新たな知見が得られる ことが期待される。しかし現実の物質では、多くの場合、複雑なフェルミ面が複数あるため、磁 場方向依存性の実験結果のみで現実のフェルミ面上でのノード位置を決定するのはそう容易では ない、そこで我々は、新たな手法として熱ホール係数など別の側面から準粒子励起を調べ、現実 のフェルミ面におけるノード構造の議論を試みた。

本講演では、U系超伝導体 UPt₃ および UBe₁₃ の超伝導ギャップ構造について、現実のフェルミ 面との対応関係も含めて議論する。特に UPt₃ における熱ホール係数の結果により導かれるノード の位置が、これまで有力視されていた *E*_{2u} ではなく、以前から我々が主張している *E*_{1u} に属する *f* 波対 [3] を支持することも紹介する。

本研究は,伊藤淳史,宗義尚,多田勝哉,町田洋(東京工業大学),芳賀芳範,山本悦嗣(原子 カ機構),木村憲彰(東北大学),大貫惇睦(琉球大学),堤康雅(理化学研究所),町田一成(岡 山大学)各氏との共同研究によるものである.

- [1] Y. Matsuda, K. Izawa and I. Vekhter, J. Phys.: Condens. Matter 18 (206) R705.
- [2] T. Nomoto and H. Ikeda, Phys. Rev. B 90 (2014) 125147; H. Ikeda, M.-T. Suzuki, and R. Arita, Phys. Rev. Lett. 114 (2015) 147003.
- [3] Y. Machida, et al., Phys. Rev. Lett. 108 (2012) 157002; K. Izawa et al., J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 061013; 井澤公一, 町田洋, 固体物理 49 (2014) 19.

¹E-mail: izawa@ap.titech.ac.jp

第一原理計算に基づくUPt₃の超伝導対称性・発現機構の研究

京都大学大学院 理学研究科 野本 拓也¹

立命館大学理工学部 物理科学科 池田 浩章

UPt₃ は多重超伝導相図を示すことで知られる重い電子系化合物である。1984 年に発見された第一世代の重い電子系超伝導体であるが、近年ではそのトポロジカルな性質や Sr₂RuO₄ の参照物質としても大きな注目を集めている。

近年行われた回転磁場下における熱伝導度および比熱測定実験はそのギャップ構造の対称性に関して互いに相容れない結果を示し、議論を呼んでいる [1, 2]。また、5K 近傍での磁気転移の有無や超伝導相内でのナイトシフトなどに関連した従来からの課題も依然として残っており、その秩序変数を完全に同定するまでには至っていない [3]。一方、理論の立場からも、微視的な電子構造に基づいた理論はほとんどなく、UPt₃ の電子状態が内包する揺らぎの構造、およびそれに基づいた超伝導対称性・発現機構の理解はほとんど得られていない。

そこで我々は、近年重い電子系物質にも適用されている第一原理計算から有効模型を構築する手法を用いて UPt₃ の数値解析を行った。UPt₃ はバンド計算と dHvA 実験のフェルミ面が比較的一致している物質であり、第一原理計算の電子状態が電子相関効果を考慮する上で良い出発点になると考えられる [4]。実際、我々はこの模型に対する PRA 計算によって、中性子散乱実験で確認されている主要な磁気揺らぎの構造を再現できることを示した [5]。また、実際に線形化ギャップ方程式を解くことで、この揺らぎがスピン3 重項の超伝導対称性を誘起することを確認した。我々の計算では、ほとんどのパラメータ領域で軌道 *E*_{1u} と呼ばれる対称性が実現しており、特にスピン成分を含めると *E*_{2u} 表現が支配的となっている。この対称性は上で述べた熱伝導度と比熱の実験結果をコンシステントに説明できる可能性があり、UPt₃ で実現する超伝導対称性の有力な候補であると考えられる。 講演では得られたギャップ構造についてより詳しく議論し、また、従来の理論や実験事実との関連についてもコメントする。

- [1] Y. Machida *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 157002 (2012).
- [2] S. Kittaka et al., J. Phys. Soc. Jpn. 82, 024707 (2013).
- [3] R. Joynt and L. Taillefer, Rev. Mod. Phys. 74, 235 (2002).
- [4] T. M. Lippman *et al.*, New J. Phys. **10**, 043006 (2008).
- [5] G. Aeppli *et al.*, Phys. Rev. Lett. **58**, 808 (1987).

¹E-mail: nomoto.takuya@scphys.kyoto-u.ac.jp

局所磁気モーメント形成が誘起するスピン三重項超伝導

東京大学 総合文化研究科 星野 晋太郎1 Department of Physics, University of Fribourg Philipp Werner

同じスピンを持つ電子が対形成したスピン三重項超伝導は、Sr₂RuO₄やU化合物を含 む物質群においてその実現可能性が提案されている。通常、スピン三重項超伝導に対して は空間的に奇パリティ(p波)をもつ異方的な電子対が仮定される。一方で、電子の持つ軌 道自由度を考慮するならば等方的な (s 波) スピン三重項超伝導も可能であり、実際に電子 系において理論的に議論されている [1, 2]。この機構は以下のように理解することができ る。すなわち、異軌道間の電子スピンの間にはフント結合というクーロン相互作用に由来 する強磁性的な結合があり、これは同じスピン間の有効引力として働く。しかし、現実の 物質ではこのような超伝導が多く実現しているわけではないため、どのような状況下で上 記のフント結合誘起超伝導が実現するのかを明らかにする必要がある。そこで我々は多軌 道ハバードモデルを動的平均場理論によって解析し、スピン三重項超伝導が実現するパラ メータ領域を調べた [3]。その結果、この超伝導は Spin-freezing[4, 5] という、多軌道電子 系特有の物理と関係していることを明らかにした。

さらに、図1に示すように超伝導相は磁気秩序相と隣接しており、かつ転移温度はドー ム形状を持つため、相図は一般によく知られている非従来型超伝導体のそれと酷似してい る。通常、磁気的量子臨界点まわりから生じる非局所的な揺らぎ(マグノン)によるクー パー対形成が考えられているが、本研究で見出された超伝導は Spin-freezing 現象に伴う 局所的な磁気揺らぎが重要であり、量子臨界点とは直接の関係がない。講演ではこの超伝 導の機構について詳しく議論する予定である。



図 1: 磁気異方性を考慮した縮退3軌道ハバードモデルにお [5] A. Georges, L. d. Medici, and J. Mravlje: ける (a) 粒子数-温度相図と (b) 相互作用-温度相図。図中で はバンド幅をエネルギーの単位にとっている。

- [1] A. Kleinberg and J. Spalek: J. Phys.: Condens. Matter 11, 6553 (1999).
- [2] M. Zegrodnik, J. Bünemann and J. Spalek: New J. Phys. 16, 033001 (2014).
- [3] S. Ρ. Hoshino and Werner: arXiv:1503.08164 (2015).
- [4] P. Werner, E. Gull, M. Troyer, and A. J. Millis: Phys. Rev. Lett. 101, 166405 (2008).
- Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 4, 137 (2013).

¹E-mail: hoshino@vortex.c.u-tokyo.ac.jp

URu₂Si₂におけるネマティックカイラル超伝導

京都大学理学研究科 柳瀬 陽一1

強相関電子系ではしばしば内部自由度を持つエキゾチック超伝導が発現する。なかでも時間反 転対称性の自発的破れを伴うカイラル超伝導相が幾つかの物質で示唆されている。Sr₂RuO₄ はカ イラル P 波超伝導体であると考えられており、URu₂Si₂ はカイラル D 波超伝導体であると考えら れている。また、最近の実験結果は UPt₃ の B 相において時間反転対称性が破れていることを示し ている。これらの興味深い超伝導体は、あらためて興味深いことに、系の回転対称性を破るネマ ティック秩序と共存する。そのようなネマティックカイラル超伝導体の相図について議論したい。

今回は特に URu₂Si₂ を対象とし、第一原理バンド計算の結果 [1] と Shubnikov-de Haas 振動の 実験結果 [2] を用いて低エネルギーの有効モデルである Ginzburg-Landau (GL) モデルを導出す る。その GL モデルにおける温度磁場相図をランダウレベル展開法を用いた変分計算により決定 し、超伝導秩序変数および量子渦格子を示す。

C軸磁場中では時間反転対称性の破れを伴う超伝導2段転移は消失し、クロスオーバーになる。 このクロスオーバー自体は非常にブロードで観測は困難と考えられるが、我々はクロスオーバー に伴う量子渦の構造相転移が起こることを発見した [3]。この構造相転移はネマティックカイラル 超伝導に特有のものであり、超伝導秩序変数の波数依存性やフェルミ面の構造などにほとんど依存 しない。即ち、量子渦構造相転移の観測はネマティック秩序とカイラル超伝導の両者に対する決定 的な証拠になり得る。実験的には小角中性子散乱やSTMを用いることでその観測が可能である。

ネマティックカイラル超伝導に特有の現象は面内磁場中でも現れる。その代表的なものは上部臨 界磁場の角度依存性である。我々は上記のように導出した GL モデルを用いて URu₂Si₂ の面内上 部臨界磁場と温度磁場相図を計算した。それらの結果からネマティック秩序とカイラル超伝導の興 味深い関係について議論したい。

この研究は高松周平(新潟大学)が中心となって行ったものです。また、播磨尚朝(神戸大学)、 青木大(東北大学)の各氏との共同研究です。

- [1] H. Harima, private communication.
- [2] D. Aoki *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 074715 (2012).
- [3] S. Takamatsu and Y. Yanase, Phys. Rev. B. 91, 054504 (2015).

¹E-mail: yanase@scphys.kyoto-u.ac.jp

Bi2212における磁場誘起状態密度変調

理研 CEMS 町田 理¹,花栗 哲郎, 幸坂 祐生, 岩谷 克也 東京大学 工学系研究科 松岡 賢佑, 為ヶ井 強

銅酸化物高温超伝導体には様々な局所状態密度 (LDOS) 変調が存在する. そのうち、低 エネルギーの Bogoliubov 準粒子による干渉パターン [1] と擬ギャップのエネルギースケー ルで顕著なナノストライプと呼ばれる LDOS 変調 [2] はよく研究されており,両者が実空 間で共存し,波数空間ですみ分けられることが知られている [2]. 一方,磁場中の渦糸近 傍で観測されるチェッカーボード状の LDOS 変調 [3] の起源はよくわかっていない. 渦糸 近傍の LDOS 変調の周期は,いわゆる" q_1 " と呼ばれる準粒子干渉パターンのひとつと同 様約 $4a_0$ の周期を持っている. " q_1 "の強度は,コヒーレンス因子の効果により渦糸近傍で 強められる性質を持つため [4],これが渦糸近傍の LDOS 変調の起源である可能がある. 一方,ナノストライプの幅も約 $4a_0$ の長さスケールを持つため,渦糸近傍の LDOS 変調 は,渦糸芯で超伝導が抑制されたことにより擬ギャップの特徴が強く現れたものである可 能性もある. さらに,磁場によって密度波が誘起される [5] ことが報告されており,渦糸 チェッカーボードとの関係は興味深い.

今回, 我々は渦糸チェッカーボードの起源を明らかにするため, 最適ドープの Bi2212 に おいて磁場中とゼロ磁場中における走査トンネル分光を同一視野で行い, 様々な LDOS 変調の比較を行った. その結果, 渦糸近傍の LDOS 変調は, 準粒子干渉から期待される エネルギー分散をもつ成分と, 約 4a₀ 周期のあまり分散を持たない成分の, 少なくとも 2 種類から成ることが分かった. 前者は, 磁場中で強められており, コヒーレンス効果と考 えられる. 一方, あまりエネルギー分散が無い成分は, 擬ギャップよりはるかに小さな 10 meV 程度のエネルギーで顕著であり, ナノストライプが直接の原因とは考えにくい. ま た, ここでの変調構造は占有状態に比べ非占有状態においてより強く誘起される. この特 徴は, 温度上昇やキャリア濃度の低下によって出現する電荷秩序に伴う LDOS 変調 [6] と 類似しており, 超伝導を抑制すると普遍的に電荷秩序が誘起されることが示唆される.

- 1) K. McElroy *et al.*, Nature, **422**, 592, (2003)
- 2) Y. Kohsaka et al., Nature, 454, 1072, (2008)
- J. E. Hoffman *et al.*, Science **295**, 466, (2002), K. Matsuba, *etal.*, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 063704, (2007)
- 4) T. Hanaguri *et al.*, Science, **323**, 923, (2009)
- 5) B. Lake *et al.*, Science **291**, 1759 (2001), T. Wu *et al.*, Nature **477**, 191 (2011).
- 6) E. H. da Silva Neto, et al., Science, **343**, 393, (2014)

 $^{^{1}{\}rm E}\mbox{-mail:tadashi.machida@riken.jp}$

高温超伝導体固有ジョセフソン接合における協力的量子トンネル現象 — 層状構造によって分離された超伝導自由度の相関効果 —

京都大学工学研究科 掛谷 一弘 1

ビスマス系(Bi₂Sr₂Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4+ δ}, n = 1 - 3) などの高温超伝導体に内包される固有ジョ セフソン接合は、超伝導デバイスとして注目されているテラヘルツ発振現象 [1] だけでなく、高温 超伝導の基礎物性の理解を与える舞台としても重要である。固有ジョセフソン接合においてみら れる多様な物性は、n = 2である Bi2212の場合、CuO₂二重層とブロック層からなるジョセフソ ン接合が積層して、強く相互作用している事に由来する。積層する接合は、磁気的および静電的 に結合しているので、1 次元的に配列された超伝導自由度がそれぞれ長距離および短距離的に相互 作用している多自由度超伝導系と考えることができる。またごく最近の研究により、アンダードー プYBCO における CuO₂ 二重層間のジョセフソン結合が二重層内の結合とトレードオフの関係に あることが指摘されており [3]、CuO₂ 層数 n に多様性を備えるビスマス系での検証も極めて興味 深い。これまでの固有ジョセフソン接合における研究は、個々の接合の位相ダイナミクス、すな わち超伝導自由度を分離して観測することは不可能であったが、我々が見いだした協力的量子ト ンネル現象 [4] は、特定の接合の量子状態を観測でき、接合間の相互作用によって、その位相ダイ ナミクスに明白な差異を与える。

本研究では、*n* = 1-3のビスマス系超伝導物質について、少数(3-5)の固有ジョセフソン接合が積層するメサ構造を作製し、固有ジョセフソン接合が超伝導状態から電圧状態に移るスイッチング特性を測定した。その結果、*n* = 1,2の場合は、隣接接合間の強い静電的結合によると考えられる協力的量子トンネル現象が観測された [4]。一方で、*n* = 3の場合には、隣接接合は独立したスイッチング特性が観測された。このように、静電的結合が*n* = 2と3の間で消失していることは、静電的結合の相関長がCuO₂二重層の厚さである 0.3 nm であることを示している。また、*n* = 3の Bi2223 における三重層内の秩序パラメタの変調によるジョセフソン効果の存在を考慮する事もでき、多自由度の超伝導特性として新たな展開が期待できる。

- [1] U. Welp, K. Kadowaki, and R. Kleiner, Nat. Photonics 7, 702 (2013) およびその参考文献.
- [2] M. Machida and S. Sakai, Phys. Rev. B 70, 144520 (2004).
- [3] W. Hu, S. Kaiser, D. Nicoletti, C. R. Hunt, I. Gierz, M. C. Hoffmann, M. Le Tacon, T. Loew, B. Keimer, and A. Cavalleri, Nat. Mater. 13, 705 (2014).
- [4] Y. Nomura, T. Mizuno, H. Kambara, Y. Nakagawa, and I. Kakeya, J. Phys. Soc. Japan 84, 013704 (2015).

¹E-mail: kakeya@kuee.kyoto-u.ac.jp

電子ドープ系銅酸化物高温超伝導体の電荷励起

東京理科大学理学部 遠山 貴巳 1

最近、ホールドープ型のみならず典型的な電子ドープ系銅酸化物高温超伝導体 Nd_{2-x}Ce_xCuO₄ でも電荷秩序の存在が報告されている [1]。そのため電子ドープ系の電荷ダイナミクスがどのよう に見えるのか興味が持たれている。電子ドープ系では Cu L 吸収端に共鳴させた共鳴非弾性X線 散乱 (RIXS)を用いて、高エネルギー磁気励起が活発に研究されている。電子ドーピングととも に磁気励起エネルギーが増加すること [2,3]のみならず、キャリアドープの結果生じたバンド内電 荷励起と思われる構造が発見されている [2]。RIXSを用いたさらなる電荷励起の研究の進展の可 能性を探るため、RIXS によって上記、バンド内電荷励起よりも低エネルギーの電荷励起を観測で きるかどうかを理論的に調べた。具体的には、1) RIXS の中間状態を経由するプロセスが電荷励 起に及ぼす効果を調べ、電子ドープ系では電荷励起構造がホールドープ系よりも強くなること、2) 次近接ホッピングまで考慮した二次元ハバード模型 (U/t = 8, t'/t = -0.25)の動的電荷相関関数 を動的密度行列繰り込み群法 (DDMRG)を用いて計算し、電子ドープ系では強いスピン相関のた め反強磁性相互作用 J のエネルギースケールの電荷励起が存在することを明らかにした [4]。本 講演では電子ドープ系銅酸化物の最近の発展を織り交ぜながら、銅酸化物高温超伝導体の電荷励 起について議論する。

- [1] E. H. da Silva Neto *et al.*, Science **347**, 282 (2015).
- [2] K. Ishii *et al.*, Nat. Commun. **5**, 3714 (2014).
- [3] W. S. Lee *et al.*, Nat. Phys. **10**, 883 (2014).
- [4] T. Tohyama, K. Tsutsui, M. Mori, S. Sota, and S. Yunoki, arXiv:1503.04259.

¹E-mail: tohyama@rs.tus.ac.jp

汎関数繰り込み群法による銅酸化物高温超伝導体における電荷密度波の理論

名大理 土射津昌久,山川洋一, 紺谷浩

銅酸化物高温超伝導体における電荷密度波 (CDW) について、最近になって STM 及び X 線散乱によ る直接観測に成功し [1]、その精密な構造が明らかとなり、大きな注目を集めている。この CDW 状態 の特徴は、(i) 酸素サイトで CDW が実現していること、および (ii) $Q_c = (\delta_c, 0)$ となるような axial な 波数をもつ CDW が実現することである。このような特徴をもつ CDW は乱雑位相近似 (RPA) による 解析では再現できないため、Sachdev のグループは Maki-Thompson 型のバーテクス補正を取り入れた 理論解析を精力的に行っているが、波数 Q_c をもつ axial CDW の再現には至っていない [2]。

本研究では、バーテクス補正効果を系統的に取り込むことのできる汎関数繰り込み群 (RG) 法 [3] を 用いて、銅サイトのオンサイト相互作用 U_d のみを考慮した 3 軌道 d-p 模型の電荷感受率の解析を行っ た。酸素サイトの電荷感受率 $\chi^c_{x,y}(\mathbf{q})$ のみでなく、Sachdev[2] により指摘されている d 波の form factor をもつ密度演算子 $B(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} f(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) c^{\dagger}_{\mathbf{k},d,\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},d,\sigma}$ の感受率 $\chi^d(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \int d\tau \langle B(\mathbf{q},\tau)B(-\mathbf{q},0) \rangle$ の解析も行った。ここで、 $c_{\mathbf{k},d,\sigma}$ は銅サイトの電子の演算子を示し、 $f(\mathbf{k}) \equiv \cos k_x - \cos k_y$ である。秩 序変数 $\langle B(Q_c) \rangle$ は、銅サイトでのボンド電荷秩序に対応している [2]。

下左図に酸素 p_y サイトの電荷感受率 $\chi_y^c(q)$ の波数依存性を示す。RPA では感受率の U_d 依存性はほ とんど見られないが、RG による解析では、強相関領域においていくつかのピーク構造が出現し、特 に $\chi_y^c(\mathbf{Q}_c)$ が一番強く増強されることが分かった。この CDW の模式図を下右図に示す。この結果は上 記の実験結果ともコンシステントである。また、Sachdev らが主張しているボンド電荷秩序の感受率 $\chi^d(q)$ は強相関領域で発達せず、実現しないことが分かった。酸素サイトの CDW 相関の増大の起源は、 Aslamazov-Larkin 型のバーテクス補正 [4] を通じて、スピン揺らぎが電荷揺らぎを誘発するためであ ると考えられる。



左図:酸素 p_y サイトの電荷感受率 $\chi_y^c(\mathbf{q})$ 。RG と RPA の結果をあわせて示す。ホッピングパラメータ は [4] と同じ。 $U_d = 4.06$, T = 0.02, $N_p = 128$ パッチ、RG カットオフ $\Lambda_0 = 0.5$ とした場合の結果。 $Q_c = (\delta_c, 0) \approx (0.37\pi, 0)$ はホットスポット間の差し渡しの波数に対応。右図は周期 4a の CDW の模式 図。

[1] K. Fujita et al., PNAS 111, E3026 (2014); R. Comin et al., arXiv:1402.5414.

- [2] S. Sachdev and R. La Placa, Phys. Rev. Lett. 111, 027202 (2013),
- [3] M. Tsuchiizu et al., PRL 111, 057003 (2013); M. Tsuchiizu et al., PRB 91, 155103 (2015).
- [4] Y. Yamakawa and H. Kontani, arXiv:1406.7520.

引力ハバード模型のBEC領域に存在する隠れたフェルミオン励起

理化学研究所 創発物性科学研究センター 酒井 志朗

引力ハバード模型は低温において、引力が弱い領域では BCS 的な超伝導を、引力が強い領域で は BEC 的な超伝導を示す。BEC 領域では、超伝導転移温度 T_c 以上で既に電子がペアを組むこと でボソン的に振る舞い、 T_c において BEC を起こすというのが一般的な理解である。これに対し て我々は、BEC 領域の T_c 近傍においては、単に電子ペアをボソンとみなすだけでは捉えられな い、隠れたフェルミオン的励起が存在することを見出した。

まず、これまでの量子モンテカルロ法や動的平均場理論などの数値計算結果から、BEC 領域で は、T_c以上で一粒子励起スペクトルにギャップ(擬ギャップと呼ばれる)が開いていることが分 かっている。これは、電子正孔変換を通して斥力ハバード模型のモット絶縁体状態のモットギャッ プと同一視でき、低エネルギー領域に自己エネルギーの極が現れることで開いたギャップである。 我々は、動的平均場理論を用いて、引力模型のT_c近傍において自己エネルギーの実周波数依存性 を詳細に調べ、この自己エネルギーの極(より正確には虚部の鋭いピーク構造)が、T_c以下の温 度領域においてもある程度の低温まで残り続けることを見出した。ただし、更に低温ではそのピー ク構造は消失する。このT_c近傍の自己エネルギーのピークについて、正常部分と異常部分の関係 を詳細に調べた結果、それが強結合極限においても存在するある隠れたフェルミオン的励起との 混成に由来することを見出した。[1]

この結果と、2次元斥カハバード模型の*d* 波超伝導において先の研究で見出した隠れたフェル ミオン的励起 [2] との類似点及び相違点についても議論する。

- [1] S. Sakai, M. Civelli, Y. Nomura, and M. Imada, in preparation.
- [2] S. Sakai, M. Civelli, and M. Imada, arXiv:1411.4365.

擬一次元有機導体の超伝導対称性とアニオン・ポテンシャルの関係

神奈川大学 工学部 相澤 啓仁¹

大阪大学 理学部 黒木 和彦

本発表では、擬一次元有機導体 (TMTSF)₂ClO₄ の超伝導対称性とアニオン・ポテンシャ ルの関係に注目する。この有機導体は D₂A (D=ドナー分子、A=-1 価のアニオン分子) という構成をしており、ドナー分子が +0.5 価となるため、ホールがキャリアとなる。ま た、この物質ではアニオンが四面体であるため、約 24K でアニオン秩序化が起こる。こ れにより、アニオン・ポテンシャルの寄与が、ドナー分子ごとに異なる可能性が指摘され ている。超伝導は常圧下で約 1K で起こり、核磁気緩和率など種々の実験により、非従来 型超伝導の可能性が指摘されている。

注目する物質の超伝導対称性を調べるために、まず、第一原理計算(WIEN2kとPWscf を使用)によりバンド構造を導出し、フェルミ準位近傍の一電子有効模型を構築する。そ の後、同一分子内での電子間クーロン斥力相互作用を導入する。これにより生じる多体効 果を二体自己無撞着(TPSC)法により取り入れる。超伝導状態は、スピン揺らぎ媒介超伝 導発現機構を仮定して、線形化エリアシュベルグ方程式を解き、得られた超伝導ギャップ などを解析する。その後、超伝導対称性とアニオン・ポテンシャルの関係を調べる。

擬一次元有機導体 (TMTSF)₂ClO₄の結晶構造 (図1(a)) から、単位格子内に4個の TMTSF 分子があることがわかる。また、第一原理計算によるバンド構造 (図1(b)) から、フェル ミ準位 (E = 0) 近傍に4個のバンドがあることがわかる。これらから、TMTSF 分子1個 を1サイトと見なして有効模型を導出したのが、図1(b)の実線である。有効模型による バンド構造は第一原理バンドを正確に再現している。当日はこれらの詳細と超伝導対称性 の関係及び、アニオン・ポテンシャルがそれらに及ぼす影響について発表する。

図 1: (TMSF)₂ClO₄の(a)単位格子内の結晶構造.(b) 第一原理計算によるバンド構造.

¹E-mail: aizawa@kanagawa-u.ac.jp

磁場中超伝導状態への多バンド性・Pauli常磁性の効果

京都大学大学院 理学研究科 足立景亮, 池田隆介

鉄系超伝導体では, $H_{c2}(T)$ 曲線の測定などから, 多バンド性や Pauli 常磁性対破壊(PPB) が 磁場下の超伝導状態に影響を与えることが推測されている.例えば LiFeAs[1] では,測定された $H_{c2}(T)$ と 2 バンドモデル [2] に基づく考察から, ab 面に平行な高磁場下において, PPB により超 伝導秩序変数が空間変調した状態の一例である FFLO 状態が実現されている可能性があると報告 された.さらに,最近 FeSe[3] では, c 軸に平行な高磁場下において,通常の超伝導渦糸状態とは異 なった超伝導状態の存在が示唆された.この状態は,多バンド性と PPB が鍵となって引き起こさ れた,空間変調を含む超伝導状態に対応している可能性がある.このような背景から,多バンド性 と PPB が高磁場下の超伝導状態にもたらす影響を理論的に調べることが重要だと考えられる.

本研究では FeSe を念頭に置いて, H || c 軸の下で準二次元 2 バンド BCS モデルから Ginzburg-Landau 自由エネルギーを導出し, FFLO 状態を含む変調状態への転移の可能性を考慮した上で, 超伝導ゆらぎを無視した平均場近似での超伝導転移線 $H_{c2}(T)$ を調べ, 次のような 2 バンド系の特 性を結論した.まず両方のバンドで PPB が弱い場合 (図 1), 各バンドでの Fermi 速度の違いに起 因して $H_{c2}(T)$ 曲線は非単調にふるまう.次に片方のバンドで PPB が強い場合に着目すると, 1 バ ンド系で特徴的だと考えられている, PPB による変調が磁場に垂直面内で起こる渦糸格子への転 移 [4] が抑えられ, PPB による変調が磁場に沿ってのみ起こる渦格子への一次転移が起こりやすく なる.ただし, バンド間結合の大きさがバンド内引力と同程度であれば (図 2), 一次転移の領域が 消え, 高磁場領域 (赤点) では変調状態への二次転移が起こる傾向にある.この変調状態をより詳し く調べると, crisscrossing lattice[5] と呼ばれる, 半整数磁束量子が格子状に並んだ興味深い状態に 対応しうることがわかった.

- [1] K. Cho et al., Phys. Rev. B 83, 060502 (2011).
- [2] A. Gurevich, Phys. Rev. B 82, 184504 (2010).
- [3] S. Kasahara et al., Proc. Nat. Acad. Sci. USA 111, 16309 (2014).
- [4] H. Adachi and R. Ikeda, Phys. Rev. B 68, 184510 (2003).
- [5] D. F. Agterberg *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 017001 (2008).

FeSe における電子状態と超伝導

新潟大院自然, 新潟大 CFIL^A 石塚 淳^{*1}, 山田 武見^A

東理大理工 柳 有起

新潟大理 大野 義章

FeSe は低温で構造相転移と超伝導転移を示すが、この発現機構に関して活発な議論がなされている。有力な ペアリング機構としては、スピン揺らぎを媒介とする s_{\pm} 波 [1, 2] と軌道揺らぎを媒介とする s_{++} 波 [3, 4] が あるが、先行の実験はギャップ関数に符号反転がある可能性を示している。FeSe ような強相関電子状態のもと での超伝導発現機構を検証するためには、乱雑位相近似などの摂動的アプローチを超えた電子相関の定量的な 解析が重要である。相互作用項の *d-d* 軌道間クーロン相互作用についてはこれまでに解析されているが、Fe の まわりに四面体配位している Se との *d-p* 軌道間クーロン相互作用についてはまだ解明されていない。

本研究では、1 サイト動的平均場理論と線形化 Eliashberg 方程式の hybrid 法を開発し、第一原理計算に基 づく FeSe の 16 バンド *d-p* 模型 [5] に適用した. その結果、*xy* 軌道に由来する γ バンドが特に大きく繰り込 まれて押し下げられ、Fermi 面に寄与するのは *zx*, *yz* 軌道に由来するバンドのみとなり、ARPES[6] と類似の 1 粒子スペクトルが実現した. バンド繰り込みの大きな軌道依存性に起因して、FeSe の *xy* 軌道内の反強磁性 スピン揺らぎは LaFeAsO に比べて大きく抑制され、*zx*(*yz*) 軌道の反強磁性スピン揺らぎが支配的となる. こ の結果は、*zx*(*yz*) 軌道の反強磁性スピン揺らぎが超伝導発現に寄与しており、*xy* 軌道成分を有する電子面上 において、ギャップ関数に符号反転がある可能性を示唆している。

- [1] K. Kuroki, et al., Phys. Rev. Lett **101**, 087004 (2008).
- [2] I. I. Mazin, et al., Phys. Rev. Lett **101**, 057003 (2008).
- [3] H. Kontani and S. Onari, Phys. Rev. Lett 104, 157001 (2010).
- [4] Y. Yanagi, et al., J. Phys. Soc. Jpn 79, 123707 (2010).
- [5] T. Miyake, et al., J. Phys. Soc. Jpn 79, 044705 (2010).
- [6] J. Maletz, et al., Phys. Rev. B 89, 220506(R) (2014).

 $^{^{\}ast 1}$ E-mail:ishizuka@phys.sc.niigata-u.ac.jp

$URu_2Si_2の磁気的・電気的性質$

— 非磁性参照物質 ThRu₂Si₂, LaRu₂Si₂ との NMR 測定による比較 —

兵庫県立大学大学院物質理学研究科	<u>江見 直哉,</u> 濱端 良輔, 中山 大将,
	三木 俊宙, 小山 岳秀, 上田 光一,
	水戸 毅
千葉大学大学院理学研究科	小堀 洋
名古屋工業大学大学院工学研究科	松本 裕司
日本原子力研究機構先端基礎研究センター	芳賀 芳範, 山本 悦嗣, Zachary Fisk
物質・材料研究機構	辻井 直人

URu₂Si₂ が T_{HO} = 17.5 K で示す相転移(「Hidden Order(HO)」と呼ばれる)は未だに秩序パラ メタが明らかになっておらず、その機構解明のために精力的な研究がなされている。また、さらに低 温の T_c = 1.5 K以下では異方的超伝導が発現することから、HO と超伝導との関わりについても注目 を集めている。我々は、URu₂Si₂ の HO 相における磁気的性質について評価するため、5f 電子を持た

ない ThRu₂Si₂ と LaRu₂Si₂ について初めて詳細な ²⁹Si-核磁気共鳴(NMR)測定を行い、既に報告されている URu₂Si₂の ²⁹Si-NMR データ [1] との比較を行った。そ の結果、磁場を結晶 c 軸平行に印加したとき、URu₂Si₂ の HO 相におけるスピンー格子緩和率 $1/T_1$ は、磁気 揺らぎが殆ど存在しない ThRu₂Si₂の $1/T_1$ とほぼ一致 することが明らかになった [2](図 1)。 T_1 は印加磁場 に垂直な磁気的揺らぎを観測することから、上記の結 果は、HO 相では殆ど c 軸並行成分の揺らぎのみが存 在し、異方的超伝導はそうしたイジング的な磁気揺ら ぎのもとで出現していることを示唆している。こうし た特性は、同じく U 系化合物で強磁性相近傍に超伝導 が出現する UCoGe[3] 等に類似している。

その他、^{99,101}Ru-核四重極共鳴(NQR)測定によっ て URu₂Si₂ の U-価数についても情報が得られたので、 講演で詳細を報告する。

[2] N. Emi et al., J. Phys. Soc. Jpn. to be published.

[3] T. Hattori et al., Phys. Rev. Lett. 108, (2012) 066403.

図 1: URu₂Si₂ と ThRu₂Si₂ における 1/T₁の比較

f電子の遍歴・局在と量子臨界点近傍の超伝導

— *d* 波および *p* 波スピン一重項超伝導 —

東北大学大学院理学研究科 大槻 純也

目的 反強磁性秩序を示す多くの重い電子系化合物において超伝導が見つかっている。銅酸化 物高温超伝導体との類推から、スピン揺らぎを起源とした $d_{x^2-y^2}$ 波超伝導の可能性が考えられる。 しかし、バンド構造の違いはもとより、磁性のメカニズムが d 電子系と f 電子系で異なるので、 磁気揺らぎに起因する超伝導が両者の間で同じかどうかは非自明な問題である。このような問題 意識から、微視的相互作用の違いに注目するため、以下のような簡単化した状況を考える。まず、 $q = (\pi, \pi)$ のネスティングを持つ2次元正方格子上の強束縛バンドを仮定する。d 電子系(ハバー ド模型)では、よく知られたように短距離クーロン相互作用 U により反強磁性秩序が起き、その 量子臨界点近傍で $d_{x^2-y^2}$ 波超伝導が出現する。一方、f 電子系では伝導電子を媒介とした RKKY 相互作用により反強磁性秩序が起き、近藤効果との競合により量子臨界点が現れる。この臨界点 近傍において誘起される超伝導の対称性を明らかにすることにより、重い電子系超伝導の基本的 理解を目指す。

デュアルフェルミオン法 重い電子系超伝導を理論的に扱うためには、近藤効果に本質的なス ピンの時間的な揺らぎ(局所相関)と超伝導を誘起するスピンの空間的な揺らぎ(長距離相関)の 両者を考慮する必要がある。そのための方法論の確立は、重い電子系超伝導の研究における重要 課題である。本研究では、デュアルフェルミオン法と呼ばれる理論 [1] を応用し、動的平均場近似 によって記述される重い電子状態を出発点とした「準粒子展開」を行う。特に、FLEX 近似と同 様のダイアグラムを考慮し、反強磁性揺らぎを取り込む [2]。

結果 数値計算により、2次元近藤格子模型における超伝導感受率を計算した。その結果、反強 磁性量子臨界点近傍において、 $d_{x^2-y^2}$ 波超伝導とp波スピン一重項超伝導が競合し、弱結合側で d波、強結合側でp波が出現するという結果が得られた [3]。このように d 電子系と異なる揺らぎ が発達する原因は、f 電子の遍歴性・局在性の移り変わりに伴い、フェルミ面のトポロジーが変 化するためである。なお、この計算で見つかったp波スピン一重項超伝導は、過去に CeCu₂Si₂ や CeRhIn₅ と関連して議論されている [4]。

- [1] A. N. Rubtsov et al., Phys. Rev. B **79**, 045133 (2009).
- [2] J. Otsuki, H. Hafermann, A. I. Lichtenstein, Phys. Rev. B 90, 235132 (2014).
- [3] J. Otsuki, arXiv:1504.05637.
- [4] Y. Fuseya, H. Kohno, and K. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn. 72, 2914 (2003).

23 バンド d-p 模型による Bi2201 の CDW 揺らぎと超伝導

新潟大自然, 新潟大 CFIL¹, 新潟大理² 星貴也, 石塚淳, 山田武見¹, 大野義章²

Bi 系銅酸化物高温超伝導体 Bi2201 では、STM や REXS で観測された CDW と ARPES で観測 されたフェルミ面の (π ,0) 付近のネスティング構造との間に顕著な相関効果が示されている。 – 方、Bi₂Sr₂CuO₆ に対する第一原理計算では、(π ,0) 付近に主に Bi の寄与によるフェルミ面が存在 するため、ARPES で観測された (Bi, Pb)₂(Sr, La)₂CuO_{6+ δ} のフェルミ面を再現できない。そこ で、仮想結晶近似を用いて Bi の一部を Pb に置換する効果を取り入れた第一原理計算(WIEN2k) を行い、最局在 Wannier 関数に基づいて現実的な 23 バンド d-p 模型を導出した。Pb 置換の効果 により (π ,0) 付近の Bi バンドが上にシフトし、得られたフェルミ面は ARPES 実験を良く再現す る (図 a)。この模型に対して、Cu の d 軌道および O の p 軌道のオンサイト相互作用に加えてサ イト間 d-p 相互作用を RPA の範囲で考慮した結果、反強磁性とストライプ型 CDW を含む相図が 図 b のように得られた。現実的な相互作用パラメータに対して、反強磁性とストライプ型 CDW の揺らぎが共に増強され (図 c)、前者に媒介される (π , π) 付近の斥力と後者に媒介される (δ ,0) 付 近の引力のペアリング相互作用が協力して $d_{x^2-y^2}$ 波超伝導を導くことが示される (図 d)。

(a) 23 バンド *d-p* 模型のフェルミ面と ARPES 実験との比較。(b) U_d - U_{pd} 平面上の反強磁性(AFM)とストライプ型 CDW の相図。(c) 電荷感受率 $\chi_c(q)$ とスピン感受率 $\chi_s(q)$ 。(d) ペアリング相互作用 $V_{\text{pair}}(q)$ 。

銅酸化物超伝導体における転移温度の 電子-ホール非対称性に対する二体自己無撞着法による解析

大阪大学 理学研究科 小倉 大典, 黒木 和彦

銅酸化物超伝導体の転移温度のドープ量依存性は、ホールドープ型においては最適ドープ量を 持ちドーム型の構造を示すが、一方電子ドープ型においては単調に変化する.この著しい非対称 性の起源を明らかにするために、第一原理バンド計算から、銅の $3d_{x^2-y^2}$ 軌道と伝導層内の酸素 の $2p_x, p_y$ 軌道を考慮した 3 バンド模型を、最局在ワニエ基底^[1]を用いて構築し、その模型に対し て二体自己無撞着法^{[2],[3]}による解析を行った。その結果を用いて、超伝導転移温度の指標として 線形化エリアシュベルグ方程式の固有値 λ のバンドフィリング依存性を評価したところ、図1の ように、電子・ホールドープ両側における超伝導転移温度の振る舞いを定性的に再現するような 結果を得た。本発表では、このことを d 軌道と p 軌道の混成により生じる電子-ホール非対称性の 観点から議論する.

図 1: 線形化エリアシュベルグ方程式の固有値 λ のバンドフィリング依存性.

参考文献

 A. A. Mostofi, J. R. Yates, Y. -S. Lee, I. Souza, D. Vanderbilt and N. Marzani, Comput. Phys. Commun. 178 (2008), 685

- [2] Y. M. Vilk and A. -M. S. Tremblay, J. Phys. I France 7 (1997), 1309.
- [3] H. MIyahara, R. Arita, and Hiroaki Ikeda, Phys. Rev. B 87 (2013), 045113.

P08

鉄系超伝導体における反強的軌道秩序の可能性

名古屋大学理学部 山川 洋一, 紺谷 浩1

鉄系超伝導体ではスピン自由度と軌道自由度が存在し、両者の協奏が大変多彩な状態相図をも たらす。加えて状態相図の物質依存性(1111系、122系、111系、11系)が大変顕著であり、超伝 導発現機構の多様性が示唆される。このような正常状態の多彩な多体電子状態は、超伝導発現機構 の解明に先立ち理解されるべきであり、第一原理模型に基づく微視的理論の構築が待たれていた。 我々は Aslamazov-larkin型バーテックス補正を考慮した自己無撞着バーテックス補正(SC-VC) 理論を構築し[1]、第一原理ハバード模型に適用することで、LaFeAsO_{1-x}H_xの2種類の軌道秩序 状態[2]や、FeSeにおける磁性秩序を伴わない軌道秩序[3]を説明してきた。また軌道秩序臨界点 の相近傍では、軌道揺らぎを媒介とする超伝導の発現が期待される[1, 4]。

最近 BaFe₂(As,P)₂ や Ba(Fe,Co)₂As₂ において、 $T^* \gg T_S$ の高温から電子状態が 2 回対称性を 示す実験結果が、磁場中トルク測定、ARPES、X 線構造解析等により相次いで報告されている。 T^* では弾性定数等に異常が見られず、強的軌道秩序 ($n_{xz} \neq n_{yz}$)の可能性は排除される。一方、 SC-VC 理論では、強的軌道揺らぎに加えて異軌道間ネスティングに起因する反強的軌道揺らぎの 発達が予言される [1, 2]。本研究では、SC-VC 理論が予言する O_{xz} , O_{yz} 型の反強軌道 (四重極) 秩序を考慮して [5]、 T^* 以下における各種実験結果の説明を試みる。なお NaFeAs においても T_S より高温からフェルミ面が 2 回対称性示し、かつフェルミ面の折り畳みの存在が STM により示唆 されているため、反強軌道秩序による説明を本研究で行う。

- [1] S. Onari and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. 109, 137001 (2012).
- [2] S. Onari, Y. Yamakawa, and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. 112, 187001 (2014).
- [3] Y. Yamakawa, S. Onari, and H. Kontani, unpublished.
- [4] H. Kontani and S. Onari, Phys. Rev. Lett. **104**, 157001 (2010).
- [5] H. Kontani, T. Saito, and S. Onari, Phys. Rev. B 84, 024528 (2011).

¹E-mail: kon@slab.phys.nagoya-u.ac.jp

比熱測定から観測した重い電子系超伝導体 UBe₁₃ における 準粒子励起と超伝導ギャップ構造

東京大学物性研究所

清水悠晴,橘高俊一郎,榊原俊郎,芳賀芳範,山本悦嗣,

網塚浩,堤康雅,町田一成

UBe₁₃は 1983 年に初のウラン系重い電子系超伝導体として CeCu₂Si₂に次いで発見され [1],その超伝導および常伝導状態の異常性を理解するため多くの研究がなされてきた。 UBe₁₃は低温で C/T ~1 J K⁻²mol⁻¹の大きな電子比熱係数を示し,T_c~0.85 K で超伝導転移す るが,T_c直上では電気抵抗,電子比熱係数,磁化率などの様々な物理量が非フェルミ液体 的性質を示す。一般的に,強い斥力により通常金属の 100-1000 倍も大きな有効質量を持 つ遍歴 f 電子間では,デバイフォノンによってクーパー対を形成することは難しく,強い 斥力を避けるためにノードをもつ超伝導ギャップが実現すると考えられている。UBe₁₃にお いても,比熱・NMR スピン格子緩和率などが温度の冪に従うことや,NMR ナイトシフト が超伝導転移点で変化しないことから,超伝導ギャップにノードを持つ奇パリティ超伝導 の可能性が 30 年以上もの間信じられてきた[2]。

本研究では UBe₁₃の超伝導ギャップ構造の詳細を明らかにするため,角度回転磁場中 比熱を測定し,その準粒子励起を約 70 mK の極低温領域まで調べた[3]。驚くべきことに, 極低温における比熱の磁場依存性は弱磁場領域で非常に小さくかつ線形に変化し,その振 る舞いに異方性は見られなかった。この結果は超伝導ギャップにノードがある振る舞いに 強く反しており,むしろフルギャップ超伝導であることを示唆している。しかし,比熱の 温度依存性には,発見当初からポイントノード的な振る舞い*C(T) ∝ T³*が観測されている [2,3]。そこで,比熱の温度依存性をマルチバンドのフルギャップ超伝導モデルによって解 析したところ,磁場依存性の結果と矛盾なく説明できることがわかった。UBe₁₃における近 藤温度は数 K と見積もられているが,これは一般的なウラン系重い電子系物質よりもずっ と低く,さらに超伝導になる付近の約 1K 付近でもその常伝導状態の性質はフェルミ液体 からはかけ離れている。この物質において,なぜそのような重い電子がフェルミ液体を形 成することもなくフルギャップ超伝導を起こすのか,非常に興味深い。本研究で明らかに なった UBe₁₃における準粒子励起の振る舞いは、最近報告された CeCu₂Si₂における振る舞 いと類似しており[4],*f*電子系における超伝導発現機構の研究に関して新たな展開をもた らすことが期待される。

[1] H. R. Ott et al., Phys. Rev. Lett. 50, 1595 (1983).

[2] H. R. Ott et al., Phys. Rev. Lett. 52, 1915 (1984).

[3] Y. Shimizu et al., Phys. Rev. Lett. 114, 147002 (2015).

[4] S. Kittaka et al., Phys. Rev. Lett. 112, 067002 (2014).

URu₂Si₂における磁場中カイラル超伝導状態の解析

- 新潟大学大学院 自然科学研究科 高松周平¹
 - 神戸大学大学院 理学研究科 播磨尚朝
- 東北大学 金研材料研究所, CEA-Grenoble 青木大
 - 京都大学大学院 理学研究科 柳瀬陽一

重い電子系化合物 URu₂Si₂ では、転移温度 $T_{\rm h} = 17.5 {\rm K}$ で隠れた秩序相と呼ばれる謎の秩序状 態が出現する [1]。近年、磁気トルク測定 [2] 等により、隠れた秩序の正体が系の四回対称性を破る ネマティック秩序であることが指摘され、注目を集めている。しかし、その真偽は未だ定かではな い。また、この物質では、隠れた秩序と共存するカイラル D 波超伝導状態が実現すると考えられ ている [3-6]。超伝導対称性は、系の対称性の破れの影響を強く受ける。そのため、クーパー対の 相対角運動量の自由度に起因して、新奇な超伝導状態が出現する可能性がある。

本研究では、URu₂Si₂を対象として、バンド計算の結果 [7] と Shubnikovde Haas 振動実験の結 果 [8] に基づいて二成分 Ginzburg-Landau (GL) 模型を導出した。この模型を Landau 準位展開と 変分法を用いて解析し、c 軸磁場中での磁場温度相図と渦糸格子構造を決定した。その解析の結 果、超伝導転移温度付近で非カイラル状態からカイラル状態へのクロスオーバーが生じることを 発見した。さらに、このクロスオーバーは渦糸格子の構造相転移を誘起する。この構造相転移を 中性子小角散乱実験や走査型トンネル顕微鏡 (STM)を用いた実験によって観測できれば、隠れた 秩序の正体がネマティック秩序であることの重要な証拠を示すことになる。

また、ネマティック秩序は面内磁場中超伝導状態にも影響を与える。本研究では、上記の二成分 GL 模型を用いて、上部臨界磁場の面内角度依存性を計算した。当日の講演では、上記の c 軸磁場 中での相図に加えて、上部臨界磁場の面内角度依存性の計算結果も合わせて発表する。

- [1] T. T. M. Palstra *et al.*, Phys. Rev. Lett. **55**, 2727 (1985).
- [2] R. Okazaki *et al.*, Science **331**, 439 (2011).
- [3] Y. Kasahara *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 116402 (2007).
- [4] K. Yano *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 017004 (2008).
- [5] Y. Kasahara et al., New J. Phys. 11, 055061 (2009).
- [6] E. R. Schemm *et al.*, arXiv:1410.1479.
- [7] H. Harima, private communication.
- [8] D. Aoki et al., J. Phys. Soc. Jpn. 81, 074715 (2012).

¹E-mail: takamatsu@phys.sc.niigata-u.ac.jp

— 準古典理論による解析 —

京大院理 弾 雄一郎, 池田 隆介

CePt₃Si[1] などの超伝導物質では、空間反転対称性 の破れおよび電子の有効質量の増大により Rashba 効果 と Zeeman 効果が共に物性に影響を与える。このため、 特に積層面に沿った外部磁場による非従来的な渦糸格 子状態の出現が期待される。また、それらの状態は超伝 導ギャップ構造に依存すると考えられるため、Cooper 対の対称性決定への手がかりに成り得る。実際、Hiasa 等の研究 [2] では4次までのGintzburg-Landau(GL) 理 論によってそれらの事が示唆された。しかし、そこに おいては GL 汎関数の4次項の非局所性が無視された ため、より正確な解析が望まれる。

そこで、我々は Eilenberger による準古典理論を用い て自由エネルギーをより正確に評価することを通して渦 糸格子構造を解析した。Eilenberger 方程式を解く際に は、よく使われる Riccaci transformation や explosion trick ではなく、Adachi 等の Landau 準位展開による方 法 [3] を発展させて用いた。これは温度・磁場の変化に 伴う渦糸格子構造の複雑な変容に耐えうる手法である。

s波・シングレット成分のみの場合で計算した結果、 一次構造転移を繰り返す相図が得られた。さらに、広

図: 渦糸格子の温度-磁場相図および各 相における渦格子状態

い温度 · 磁場領域において磁場の増大と共に渦格子が積層面内で磁場と垂直な方向に圧縮されるこ とが分かった。また、ある物質パラメタ値の下では構造転移の間に臨界点が見られた。これらは Rashba 系特有のメカニズムによるものであると考えられる。

- [1] E. Bauer et al., Phys. Rev. Lett. 92 (2004), 027003
- [2] N. Hiasa, T. Saiki and R. Ikeda, Phys Rev. B 80 (2009), 014501
- [3] H. Adachi, P. Miranović, M. Ichioka and K. Machida, JPSJ 75 (2006), 084716

$Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ 固有ジョセフソン接合からの コヒーレントな連続テラヘルツ波発生

京都大学工学研究科 辻本 学*1, 掛谷 一弘

Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ}(Bi-2212)メサ構造からのコヒーレントなテラヘルツ波発生 [1] は、電磁波検 出という手法で固有ジョセフソン接合列の位相同期機構を調べるユニークな現象であると同時に、 小型連続テラヘルツ光源としての応用が期待されるため注目されている。メサの局所加熱応答測 定の実験 [2] と超伝導 SIS ミキサを使った線幅測定の結果 [3] は、Bi-2212メサの局所的な温度上昇 が系のコヒーレンス増大につながることを示唆している。しかし、温度分布が均一な低電流域で も強い発振が生じる [4] 理由や、理論的に指摘されている急峻な位相変化 [5] の起源は明らかでな く、現象が十分に理解されているとは言いがたい。

著者らはメサの温度分布を動的に制御しながら発振強度をモニターすることで、テラヘルツ波 強度と超伝導領域の体積に正の相関があることを見出した [6]。この結果は高出力な光源を設計す る上でも重要である。温度分布計測装置をさらに改良し、最近では高分解能の温度分布像とテラ ヘルツ発振の同時観測を試みている。講演では Bi-2212 メサ内部の電磁場および温度不均一性と テラヘルツ発振の関係について詳しく議論する。

謝辞

本研究は科学研究費助成事業 (課題番号 23681030, 13J04811, 26790032) により行われました。 日頃より共同実験させていただいている京都大学工学研究科電子工学専攻集積機能工学講座の大 学院生の皆様に感謝いたします。

- [1] U. Welp et al., Nat. Photonics 7 (2013), 702.
- [2] H. B. Wang et al., Phys. Rev. Lett. 105 (2010), 057002.
- [3] M. Li *et al.*, Phys. Rev. B **86** (2012), 060505.
- [4] H. Minami et al., Phys. Rev. B 89 (2014), 054503.
- [5] S. Lin and X. Hu, Phys. Rev. Lett. 100 (2008), 247006.
- [6] M. Tsujimoto et al., Phys. Rev. Applied 2 (2014), 044016.

^{*}日本学術振興会特別研究員 SPD

¹E-mail: tsujimoto@sk.kuee.kyoto-u.ac.jp

BaTi2Pn2Oにおける秩序状態の研究

名古屋大学 理学部 中岡 宏徳,山川 洋一, 紺谷 浩

BaTi2Pn2O(Pn=As,Sb,Bi)は2012年に発見された超伝導を示す物質である。その相図は図1の ようになる。Pn=Asのときには*Ts*=200Kで相転移が起きる。その秩序状態はCDWである。電 子線回折の実験では超格子が確認されず、ユニットセル内での秩序であることがわかっている。相 転移の際には正方晶から斜方晶への構造相転移が観測されている。その歪みは0.22%と小さく、 電子相関を起源とした CDW によるものと考えられる。Pn=Sbのときにも歪みはさらに小さく 0.05%ほどになるが*Ts*=50Kで同様の振る舞いが見られる。超伝導相はCDW 相に隣接しており、 CDWの発現機構と超伝導との関係について興味がもたれる。磁気的性質としては構造相転移温度 に向かってスピン感受率が発達することが NMR による実験からわかっている。

本研究では第一原理計算から10軌道ハバード模型を作成し、2次元において乱雑位相近似(RPA) に Aslamazov-Larkin 項(AL項)を考慮した計算を行った。その結果は反強的スピン揺らぎと強 的な電荷揺らぎが増大がするというものになった。また本研究では、模型の3次元性を考慮して 3次元における計算も行った。その結果は2次元での計算とほぼ同じ結果となった。

この結果から図2の軌道秩序が予想される。この軌道秩序は異方性を持っており構造相転移を 説明できる結果である。また軌道秩序相が超伝導相に隣接していることになり、軌道揺らぎによ る超伝導の可能性が示唆される。

図 1: BaTi2Pn2Oの相図 [3]

図 2: 本研究から予想される軌道秩序

- 1) Benjamin A. Frandsen et al arXiv:1405.3236v1(2014)
- 2) S. Kitagawa et al Phys. Rev. B 87, 060510 (2013)
- 3) T.Yajima et al J. Phys. Soc. Jpn. 82, 033705 (2013)

P14

新潟大学大学院自然 中村 康晴¹ 京都大学 理学研究科 柳瀬 陽一

2005年にグラフェンの大面積試料が絶縁性基板上に形成 [1] されて以来、グラフェンの 持つ興味深い物性が多くの関心を集めてきた。近年では、グラファイトと同様な積層構造 を持つカルコゲナイド系層状物質の単一層や数層が積層した試料が作成され、多くの研究 が行われている。

2008年にUenoらは電気二重層トランジスタを用いたキャリアードープにより完全な絶縁体であるSrTiO₃表面上に超伝導が実現することを世界で初めて示した[2]。その後の実験により、SrTiO₃以外の表面でも電場によるキャリアードープにより超伝導が実現している[3]。これらは電場誘起超伝導体と呼ばれ、不純物の少ないクリーンな超伝導が実現していることや、連続的にキャリアー密度を制御することが可能であるなどの性質から実験と理論の双方で多大な注目を集めている。

カルコゲナイド系層状物質である MoS₂ も電場誘起超伝導体の一つであり、SrTiO₃ 表面 より高いキャリアー密度領域まで超伝導が実現している [4]。MoS₂ では表面から数層程度 が超伝導となっており、上述したような数層が積層した試料と同じ状態が実現していると 考えられる。

 MoS_2 の対称性は D_{3h} であり、単一層ではグローバルに空間反転対称性が破れている。興味深いことにこの物質は c 軸方向に Non-symmorphic な構造を持ち、二層系では空間反転対称性の破れがローカルとなる。現在、空間反転対称性のない系を対象とした研究は世界中で多くの研究者の注目を集めている。しかし、これまでに Non-symmorphic な構造を持つ空間反転対称性のない系を対象とした研究は行われていない。

今回我々は MoS₂ に着目し、Non-symmorphic な構造が空間反転対称性のない系の超伝導 に与える影響を検証した。MoS₂の二層系に面内磁場を印加した場合および、結晶構造の空 間反転対称性の欠如に起因する Zeeman 型の反対称スピン軌道相互作用 (ASOC) を考慮し たモデルを用いて計算を行った。BCS ギャップ方程式を解き、自由エネルギーを比較する ことにより超伝導相の安定性を評価した。その結果、二層系の MoS₂ では空間反転対称性 の破れの効果が物性に大きな影響をあたえることが判明した。これは Non-symmmorphic な構造により層間ホッピングが面内波数依存性を持ち、K 点および K' 点付近の Fermi 面上 では層間ホッピングの大きさが有効的に小さくなることが重要となっている。当日はこれ までの結果に加え、多層系の超伝導体に面内磁場を印加した際に現れる Josephson vortex の影響を考慮した場合についても報告する予定である。

- [1] K. S. Novoselov et al.: Nature. 438, (2005) 197.
- [2] K. Ueno *et al.*: Nat. Matter. 7, (2008) 855.
- [3] K. Ueno et al.: J. Phys. Soc. Jpn. 83, (2014) 032001.
- [4] J. T. Ye *et al.*: Science. 338, (2012) 1193.

¹E-mail:yasuharu@scphys.kyoto-u.ac.jp

電気八極子秩序相の安定性に対するスピン軌道相互作用の効果

京都大学理学研究科 人見 尚典1, 柳瀬 陽一

近年、局所的な空間反転対称性の欠如した結晶に伴う量子現象に関して盛んに研究されている。 この結晶の特徴はユニットセル内に複数の原子をもち、副格子に依存するスピン軌道相互作用が 現れることである。実際、多層系人工超格子超伝導体 CeCoIn₅/YbCoIn₅を対象とした研究では、 スタッガードなラシュバ型スピン軌道相互作用によりペア密度波相や複素ストライプ相が磁場中 で安定となる [1, 2]。また磁性研究では、反強磁性体ジグザグチェーンで P 波電荷ネマチック秩序 状態が誘起される [3]。このように、局所的な空間反転対称性の欠如した結晶に伴うスピン軌道相 互作用は系の量子状態に大きく影響する。

また興味深いことに局所的な空間反転対称性の欠如した結晶では、奇パリティ高次多極子が実 現される可能性がある。反強磁性体ジグザグチェーンでの磁気四極子状態[3]、ハニカム格子での トロイダル秩序状態[4]、二層系における反強的電気四極子秩序での電気八極子状態[5]に関する研 究が行われ、電子系に伴う空間反転対称性の欠如が興味深い物性をもたらすことを明らかにした。

本研究では二層系における反強的電気四極子秩序である電気八極子状態に注目して、電気八極 子秩序相の安定性に対するスピン軌道相互作用の効果を明らかにする。各層に現れる電気四極子 をD波ポメランチュク不安定性と仮定し、ヴァン・ホープ特異点近傍での二体電子相関を表す前 方散乱モデルを用いる[6]。この前方散乱モデルにスピン軌道相互作用を考慮し、平均場近似を用 いて電気八極子秩序相の安定性を評価した。その結果、前方散乱効果の弱結合領域においてスピ ン軌道相互作用の効果が層間遷移に比べて大きい場合、電気八極子秩序相が安定となるパラメー ター領域が存在することを発見した。このことは、奇パリティ多極子相の安定性に対して局所的 な空間反転対称性の欠如した結晶が本質的な役割を担っていると考えられる。本発表では上記の ことを詳細に報告する予定である。

- [1] T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase, Phys. Rev. B 86 (2012), 134514.
- [2] T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase, J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013), 074714.
- [3] Y. Yanase, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014), 014703.
- [4] S. Hayami, H. Kusunose, and Y. Motome, Phys. Rev. B 90 (2014), 024432.
- [5] T. Hitomi, and Y. Yanase, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014), 114704.
- [6] H. Yamase, Phys. Rev. B 80 (2009), 115102.

¹E-mail: hitomi@scphys.kyoto-u.ac.jp

f電子系におけるs波超伝導

— 変分クラスタ法によるアプローチ —

早稲田大学先進理工学部 增田 啓介1

早稲田大学高等研究所 (WIAS) 山本 大輔

これまで f 電子系に属する数多くの物質で超伝導転移が観測されてきた. これらの系における 主要な電子間相互作用は, f 電子間に働く強い Coulomb 斥力である. したがって, f 電子系超伝導 体では, d 波対称性など, 超伝導ギャップがノードを持つ状態が好まれやすいと考えられてきた. 実 際, 多くの f 電子系超伝導体の核磁気緩和率の振る舞い (コヒーレンスピークの欠如とべき的温度 依存性) はノードの存在を強く示唆している. その一方で f 電子系には, ギャップにノードが存在 しない s 波対称性を持つ超伝導体も存在する. CeRu₂[1] や CeCo₂[2] はそのような超伝導体であり, 核四重極共鳴および光電子分光実験の結果はこれらの超伝導体が s 波対称性を有することを明確 に示している. 通常, このような s 波超伝導は電子格子相互作用によって生じる電子間引力を用い て説明される. しかしながら, f 電子系では先述のように Coulomb 斥力が主要であるため, 電子格 子相互作用による引力がこの斥力に勝るかという点は自明ではない.

以上のような経緯から, 我々はこれまで, 「f電子系 s 波超伝導は f 電子間 Coulomb 斥力のみか ら理解可能であるか」という点に関し研究を行ってきた [3, 4]. 本発表では, 変分クラスタ法 [5] を 周期 Anderson 模型に適用することで得た結果 [4] について議論する. このような解析の結果, s 波 超伝導は系の粒子数がハーフフィリングから少しずれた領域で, かつ f 電子間 Coulomb 斥力がさ ほど大きくない場合に発現しうることがわかった. また, このような s 波超伝導の発現には, f 電 子と伝導電子によって形成される軌道間 Cooper 対の存在が本質的であることも明らかになった. 当日はこのような s 波超伝導と反強磁性秩序との関係についても議論を行う.

- [1] K. Matsuda, Y. Kohori, and T. Kohara, J. Phys. Soc. Jpn. 64 (1995), 2750.
- [2] K. Ishida *et al.*, Physica B **237** (1997), 304.
- [3] K. Masuda and D. Yamamoto, Phys. Rev. 87 (2013), 014516.
- [4] K. Masuda and D. Yamamoto, Phys. Rev. **91** (2015), 104508.
- [5] M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken, Phys. Rev. Lett. 91 (2003), 206402.

¹E-mail:masuda@kh.phys.waseda.ac.jp

t-J模型における非局所励起のスペクトル

仙台高等専門学校 松枝 宏明,大瀧貴史,矢作裕太

電子相関の強い系にドープされたキャリアは,周囲のスピン揺らぎの衣をまとって,実効的に 非局所励起となる.その励起モードのスペクトル関数は ARPES とはまた異なった有益な情報を 持っている.本研究では,一次元及び二次元 *t-J* 模型に対して種々の非局所励起のスペクトル関 数を数値的厳密対角化(16 サイト)で求め,その物理的な意味を考察する [1].

図 1: 種々の複合励起のスペクトル: (1) 一次元ハーフフィリング, (2) 一次元 2 ホール, (3) 二次 元正方格子 2 ホール (t', t'' あり). (a) は通常の ARPES, (b)-(d) は複合励起のスペクトルであ り, 右に行くほど非局所的なスピンの衣をまとっている.フェルミ準位は $\omega/t = 0$.

図 1(1)(2) は一次元ハーフフィリングおよび 2 ホール状態のスペクトルである. 図 1(1) から明 らかなように,この分光法ではスピノン励起・ホロン励起のような性質の異なる集団励起を識別 して分光できる.図1(2)(a)のドープした系では金属的バンドが現れるが,非局所励起を見てみる と,フェルミ準位の下・直上・上で波動関数のキャラクターが変わっていることが分かる.図1(3) は二次元正方格子における 2 ホール状態のスペクトルである. 波数の対角方向は一次元系と非常 に類似している.この場合にも,波数 (π,0)の擬ギャップを境に非局所励起の強度マップは明ら かに変化している.このことが銅酸化物で擬ギャップが生じる一因となっていると考えられる.

参考文献

[1] T. Otaki, Y. Yahagi, and H. Matsueda, arXiv:1503.08291 (2015).

学習院大学 自然科学研究科 吉田 智大1

京都大学 理学研究科 柳瀬 陽一2

トポロジカルに非自明な構造を持つトポロジカル超伝導体には、マヨラナ粒子が現れ、量子計 算への応用も含め盛んに議論されている[1]。しかしながら、現在までのところ万人が認めるトポ ロジカル超伝導の実証には至っていない。この理由として、トポロジカル超伝導体の候補物質が 極めて少ないことがあげられる。

この現状を打破するため、我々は既存の物質がトポロジカル超伝導体となる可能性について調 査した。対象としたのは、強相関電子系で広く実現するd波超伝導体である。トポロジカル相を 定義するためには、バルクのエネルギーがフルギャップとなっていることが望まれるが、一般にd 波超伝導体はラインノードを持つ。しかし、パリティの破れたd波超伝導体においては、p波超 伝導とのパリティ混成及び磁場により、バルクのエネルギーがフルギャップとなることを発見し た。ゆえに、トポロジカル数を定義することが可能となり、二次元d+p波超伝導状態は広いパラ メーター領域でトポロジカルに非自明であることを明らかにした。また、三次元d+p波超伝導状 態は、トポロジカルな理由により保護されたポイントノードを持つことも分かった。このような 超伝導体はワイル超伝導体と呼ばれている。候補となる物質として、基板上の銅酸化物高温超伝 導体 [2] (二次元トポロジカル超伝導)、重い電子系超伝導体 CeRhSi₃[3], CeIrSi₃[4] (三次元ワイ ル超伝導)を理論的に提案する。

- [1] Yukio Tanaka, Masatoshi Sato, and Naoto Nagaosa, J. Phys. Soc. Jpn. 81, 011013 (2012).
- [2] T. Nojima, H. Tada, S. Nakamura, N. Kobayashi, H. Shimotani, and Y. Iwasa, Phys. Rev. B 84, 020502 (2011).
- [3] N. Kimura, K. Ito, K. Saitoh, Y. Umeda, and H. Aoki, Phys. Rev. Lett. 95, 247004 (2005).
- [4] I. Sugitani, Y. Okuda, H. Shishido, T. Yamada, A. Thamizhavel, E. Yamamoto, T. D. Matsuda, Y. Haga, T. Takeuchi, R. Settai, and Y. Onuki, J. Phys. Soc. Jpn. 75, 043703 (2006).

¹E-mail:20159018@gakushuin.ac.jp

 $^{^2} E\text{-mail:yanase} @scphys.kyoto-u.ac.jp \\$