

ヒ素リン混晶1111系鉄系超伝導体におけるスピン揺らぎと超伝導の相関

Study on the correlation between spin fluctuations and superconductivity in 1111 iron based superconductors with isovalent doping

阪大理¹, 立命館大総研² °臼井 秀知¹, 鈴木 雄大², 黒木 和彦¹

Osaka Univ.¹, Ritsumeikan Univ.², °Hidetomo Usui¹, Katsuhiko Suzuki², Kazuhiko Kuroki¹

E-mail: h_usui@presto.phys.sci.osaka-u.ac.jp

2006年に発見された最初の鉄系超伝導体 LaFePO[1]は、超伝導転移温度が 4K であったが、その2年後、LaFeAsO[2]では 26K と超伝導転移温度が大きく上昇し、多くの研究者の注目を集めた。近年、この LaFeAsO を始めとする 1111 系鉄系超伝導体において、ヒ素の一部をリンで置換した $REFeAs_{1-x}P_xO_{0.9}F_{0.1}$ ($RE=La, Pr, Nd$) に関する様々な測定が行われた[3]。驚くべくことに超伝導転移温度に着目すると、LaFePO と LaFeAsO の中間のリン量において超伝導転移温度が極大となることが発見された。その後 $RE=La$ でリン量だけでなくフッ素量も変化させた $LaFeAs_{1-x}P_xO_{1-y}F_y$ ($y=0$ [4], 0.05, 0.1[5,6])の NMR による測定から、反強磁性スピン揺らぎの増大が中間領域の x で観測された。本研究ではこの等原子価ドーピングを行った 1111 系鉄系超伝導体、特に超伝導転移温度の極大を持つ $LaFeAs_{1-x}P_xO_{1-y}F_y$ に対してバンド構造、スピン揺らぎ、超伝導転移温度の相関関係を調べ、その起源を明らかにすることを目的とした[7]。

As を P 置換することで鉄-ニクトゲン-鉄結合角が変化することが知られているため、我々は LaFeAsO について結合角を仮想的に変化させた結晶構造で第一原理バンド計算[8]を行い、最局在ワニエ関数[9]を用いることで 5 軌道有効モデルを構築した。揺らぎ交換近似を用いて s_{\pm} 波超伝導のエリアシュベルグ方程式の固有値を結合角の関数として求めると、実験結果と同様に As と P の中間の結合角において極大となることがわかった。軌道別のスピン感受率を解析した結果、結合角 110 度近傍の固有値の増大は $d_{xy/yz/zx}$ 軌道が協力し増大するのに対し、中間領域の結合角近傍では $d_{yz/zx}$ 軌道のスピン揺らぎの増大が超伝導に寄与していることがわかった。発表では結果の詳細について述べる予定である。

[1] Y. Kamihara, *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **128**, 10012 (2006).

[2] Y. Kamihara, *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **130**, 3296 (2008).

[3] S. Miyasaka *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 124706 (2013).

[4] S. Kitagawa *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 023707 (2014).

[5] H. Mukuda *et al.*, Phys. Rev. B **89**, 064511 (2014).

[6] T. Shiota *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 053706 (2016).

[7] H. Usui *et al.*, Sci. Rep. **5**, 11399 (2015).

[8] G. Kresse, and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).

[9] A. A. Mosto *et al.*, <http://www.wannier.org/>.