

研究課題 (テーマ)		縮退バンドをもつ鉄系超伝導体における電気四極子と電気 16 極子の理論研究	
研究者	所属学科等	職	氏名
代表者	教養教育	准教授	三本 啓輔
研究結果の概要			
<p>鉄系超伝導体は母物質で正方晶から直方晶へと構造相転移し、キャリアドーピングを行うことで構造相転移が抑制されたのち、56 K もの高い転移温度をもつ超伝導状態が出現する特徴を示すことから、超伝導の発現の起源が注目されている。また超伝導転移温度 $T_{SC}=23$ K をもつ $Ba(Fe_{0.929}Co_{0.071})_2As_2$ の超音波実験より弾性定数 C_{66} は室温から T_{SC} に向かって有限の減少を示す一方、超音波吸収係数 α_{66} が発散するふるまいを示すことが観測され、超伝導では説明のできな α_{66} の発散の起源の解明も求められた。</p> <p>正方晶鉄系超伝導体は電気伝導の性質を特徴づける 2 重縮退バンドをもつ特徴があり、そのバンドを構成する電子は自由度として角運動量 L_z、2 つの電気四極子 O_{xy} と O_v、3 つのスピンをもち、群論を用いた解析により、正方晶から直方晶へと構造相転移するときは格子系では歪み ϵ_{xy} が秩序変数となり、電子系では ϵ_{xy} と結合する電気四極子 O_v が秩序変数となることが分かった。そして、超伝導転移するときは 2 重縮退バンドを構成する 2 つの電子が対になりクーパー対を形成するときに L_z と同じ既約表現に属する電気 16 極子 H_z をもつと、超伝導転移で超音波吸収係数 α_{66} が発散するふるまいを示すことを示唆した。</p> <p>そして、そのふるまいを微視的ふるまいの立場から明らかにするために、2 重縮退バンドを再現するような強束縛近似に基づく電子モデルを構築した。</p> <p>また鉄系超伝導体 $LiFeAs$ と同じ結晶構造である $CeCoSi$ を含む RTX (R: 希土類元素, T: 遷移金属, X: Si, Ge など) は元素の取り方により様々な結晶構造を示すことから、構造の不安定生が示されている。特に、$CeCoSi$ の単結晶育成が H30 年度に初めて成功し、詳細な実験により 12 K で未知の相転移を示したのち 9.5 K で反強磁性転移を示し、静水圧力下において、未知の相転移は 1.5 GPa で 40 K 程度にも増大することが明らかにされた。$LiFeAs$ は $FeAs$ の 2 次元層と Li の層が交互に重なった構造であり、$CeCoSi$ は $CoSi$ の 2 次元層と Ce の層が重なった構造である。そのため $CeCoSi$ の未知の相転移の起源を解明することは、鉄系超伝導体のみならず同様の結晶構造をもつ物質群の物性解明につながると期待される。そこで、比熱や磁化率を再現するような Ce の 4f 電子の結晶場状態を明らかにし、第一原理計算パッケージ WIEN2k から伝導電子の電子状態を求めた。本研究の成果の一部は学術論文に投稿し受理された。</p>			
今後の展開			
<p>$Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ や $CeCoSi$ の物性を解明することは、構造不安定性に関連した新たな相転移の起源の解明につながると期待されるので、鉄系超伝導体や RTX という 2 つの物質群の物性の解明を同時に進める。それにより、どのような外場 (磁場・電場・歪み・圧力など) により制御できる電子状態かを明らかにし、新機能をもつ物質創生の発見の寄与に繋げたい。</p>			