JAEA-Review
2010-006

鉄系高温超伝導体研究の最前線
ーメカニズムおよび物性のレビューと展望ー
講演集

2009年11月28日(土):日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター　東京都台東区東上野

Proceedings of the Workshop on
Leading Edge of Iron-based High-T_c Superconductor Research
—Review and Prospect of the Mechanism and Physical Properties—
November 28, 2009, Center for Computational Science & e-Systems,
Japan Atomic Energy Agency, Higashi-Ueno, Tokyo, Japan

（編）社本 真一　樹神 克明
（Eds.）Shin-ichi SHAMOTO and Katsuaki KODAMA

量子ビーム応用研究部門
Quantum Beam Science Directorate

May 2010
Japan Atomic Energy Agency　日本原子力研究開発機構

JAEA-Review

本レポートは独立行政法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ（http://www.jaea.go.jp）
より発信されています。

独立行政法人日本原子力研究開発機構　研究技術情報部　研究技術情報課
〒319-1195　茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2010

JAEA-Review 2010-006

鉄系高温超伝導体研究の最前線
- メカニズムおよび物性のレビューと展望 -
講演集

２００９年１１月２８日（土）：日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター　東京都台東区東上野

日本原子力研究開発機構　量子ビーム応用研究部門
（編）社本　真一、樹神　克明[+]

（２０１０年２月４日受理）

２００９年１１月２８日に日本原子力研究開発機構システム計算科学センターにおいて、「鉄系高温超伝導体研究の最前線」～メカニズムおよび物性のレビューと展望～　と題して第３回三機関連携「量子複雑現象」研究会が開催されました。本研究会は、平成１８年１２月２０日に物質・材料研究機構、理化学研究所および日本原子力研究開発機構の三機関で締結された「量子ビームテクノロジーの先導的研究開発に関する研究協力協定」に基づいて、次世代機能材料開発に向けた量子複雑現象の解明を目的としたものであり、その趣旨に沿って、東工大の細野研で発見された LaFeP0 と $LaFeAs0_{1-x}F_x$ に端を発した一連の鉄系高温超伝導体の物性測定、理論、および物質合成について、三機関に加えて産総研と大学の一流の研究者の方々をお招きして、これまでの超伝導と比較して今後の方向性を含めて、講演および議論していただきました。

本報告書は本研究会の講演要旨および講演で使用された発表資料を収録したものです。

原子力科学研究所（駐在）：〒319-1195　茨城県那珂郡東海村白方白根 2-4
[+]中性子物質科学研究ユニット

JAEA- Review 2010-006

Proceedings of the Workshop on Leading Edge of Iron-based High-T_c Superconductor Research -Review and Prospect of the Mechanism and Physical Properties-

November 28, 2009, Center for Computational Science & e-Systems,
Japan Atomic Energy Agency, Higashi-Ueno, Tokyo, Japan

(Eds.) Shin-ichi SHAMOTO and Katsuaki KODAMA[+]

Quantum Beam Science Directorate, Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received February 4, 2010)

The 3rd workshop of the NIMS-RIKEN-JAEA Cooperative Research Program "Quantum Complex Phenomena", entitled "Leading Edge of Iron-based High-T_c Superconductor Research, ～Review and Prospect of the Mechanism and Physical Properties～", was held on November 28, 2009 at Center for Computational Science & e-Systems, Japan Atomic Energy Agency. This workshop is aimed to reveal the mechanism of quantum complex phenomena for the developments of next generation functional materials on the basis of "Joint Research Agreement for the Pioneering R&D with Quantum Beam Technology" concluded by NIMS, RIKEN and JAEA on December 20, 2006. In accordance with this purpose, eminent researchers in the three institutes, AIST and universities talked and discussed the physical properties, theories, and synthesis of a series of iron-based high-T_c superconductors which have been synthesized since the discovery of the superconductivity in LaFePO and $LaFeAsO_{1-x}F_x$ by Prof. Hosono's group of Tokyo Institute of Technology, including a future prospect of this research area.

This report includes abstracts and materials of the presentations in the workshop.

Keywords : Iron-based Superconductor, NIMS-RIKEN-JAEA,
Quantum Beam Technology

[+] Neutron Materials Research Center

目　　次

１．はじめに
社本　真一（原子力機構）・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 1

２．鉄系超伝導体の電子構造と超伝導発現機構・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 2
黒木　和彦（電通大）

３．鉄系高温超伝導体の光学スペクトルと電気抵抗率・・・・・・・・・・・・・・・・ 27
内田　慎一（東大理）他

４．鉄系超伝導体の NMR・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 62
石田　憲二（京大理）他

５．J-PARC で始まる新たな中性子非弾性散乱測定法・・・・・・・・・・・・・・・・ 76
梶本　亮一（J-PARC）他

６．層状ニクタイドにおけるブロック層の構造と超伝導特性・・・・・・・・・・・・ 83
荻野　拓（東大工）他

７．FeSe, FeTe 系超伝導体・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 96
高野　義彦（物材機構）

８．鉄系超伝導体の STM・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 111
花栗　哲郎（理研）他

９．鉄ヒ素系超伝導体の光電子分光・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 125
藤森　淳（東大理）

１０．鉄系高温超伝導体の中性子散乱・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 150
社本　真一（原子力機構）

１１．砒素系とリン系の違いについて・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 169
田島　節子（阪大理）他

１２．鉄系超伝導体の超伝導ギャップ対称性・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 181
芝内　孝禎（京大理）

１３．鉄系超伝導体のフォノンと磁性・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 193
町田　昌彦（原子力機構）他

ポスター発表

１４．$PrFeAsO_{1-y}$ の角度分解光電子分光・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 207
西　　一郎（東大理）他

１５．NMR Study on $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 213
中井　祐介（京大理）他

１６．電荷励起から見た鉄砒素系超伝導物質における磁気秩序状態・・・・・・・・・ 216
兼下　英司（京大基研）他

１７．±s 波超伝導体における渦糸コア中の不純物散乱率・・・・・・・・・・・・・ 219
永井　佑紀（東大理）他

１８．Resonant Inelastic X-ray Scattering in Single-Crystal $PrFeAsO_x$ (x=0.7,1) 221
石井　賢司（原子力機構）他

１９．2 次元１６バンド *d-p* 模型による鉄化合物超伝導体の超伝導の理論・・・・・ 224
柳　　有起（新潟大）他

２０．2 バンド超伝導体におけるコヒーレンス効果・・・・・・・・・・・・・・・・・ 229
増田　啓介（早大先進理工）他

付 録

研究会プログラム・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 233
研究会写真・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 234
参加者リスト・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 235

Contents

1. Preface・・・

１２．Superconducting Gap Symmetries of Iron Based High-T_c Superconductors・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 181
Takasada SHIBAUCHI (Kyoto Univ.)

１３．Phonon and Magnetism in High-T_c Pnictide Superconductors・・・・・・・・ 193
Masahiko MACHIDA (JAEA) et al.

Poster Presentations

１４．ARPES Study of $PrFeAsO_{1-y}$ ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 207
Ichiro NISHI (Univ. of Tokyo) et al.

１５．NMR Study on $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 213
Yusuke NAKAI (Kyoto Univ.) et al.

１６．Charge Excitation of Magnetic Ordered State on Iron Based Superconductors・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 216
Eiji KANESHITA (Kyoto Univ.) et al.

１７．Impurity Scattering Rate in Vortex Core of ±s-wave Superconductors 219
Yuki NAGAI (Univ. of Tokyo) et al.

１８．Resonant Inelastic X-ray Scattering in Sigle-Crystal $PrFeAsO_x$ (x=0.7,1) 221
Kenji ISHII (JAEA) et al.

１９．Theory of Superconductivity for Iron Based Superconductors Based on the Two-Dimensional 16-Band *d-p* Model・・・・・・・・・・・・・・・ 224
Yuki NAGAI (Niigata Univ.) et al.

２０．Coherence Effect in a Two-Band Superconductor・・・・・・・・・・・・・ 229
Keisuke MASUDA (Waseda Univ.) et al.

Appendix

Workshop Program・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 233
Workshop Photos・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 234
Participant List ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 235

1. はじめに

日本原子力研究開発機構　量子ビーム応用研究部門
社本　真一

東工大の細野研で発見された LaFeP0 と $LaFeAs0_{1-x}F_x$ に端を発した一連の鉄系高温超伝導体の研究は、日本だけでなく、米国、中国、ヨーロッパで激しい研究競争が今も続いている。ちなみに昨年もっとも引用された論文は、この $LaFeAs0_{1-x}F_x$ 発見の論文であり、このことからもこの超伝導体に関する世界的な関心の高さが伺える。この研究会では、このような現状の中で、これまでの鉄系高温超伝導体の物性測定、理論、および物質合成について、一流の研究者の方々にこれまでの超伝導と比較して今後の方向性を含めて講演していただいた。この研究会では、鉄系高温超伝導での超伝導ギャップ対称性のバラエティーに伴って、改めて磁性とフォノンを調べる重要性が共通の認識となった。これは取りも直さず、銅酸化物高温超伝導と同様に、この鉄系高温超伝導での量子ビームによる研究の重要性を示している。今後、益々J-PARC や JRR-3 といった中性子源や SPring-8 を始めとした放射光 X 線源での研究成果が期待されるところであろう。

本研究会は、町田昌彦（原子力機構）、北澤英明（物材機構）、高木英典（東大工、理研）、永崎洋（産総研）、梶本亮一（J-PARC）と私が実行委員となり、日本中性子科学会、物材機構、理研、産総研、原子力機構 システム計算科学センター、同先端基礎研究センター、J-PARC センターの協賛、科学技術振興機構後援のもと、原子力機構量子ビーム応用研究部門により主催され、合計で 66 名の参加があった。なおこの研究会は、物材機構・理研・原子力機構の三機関で締結された「量子ビームテクノロジーの先導的研究開発に関する研究協力協定」（通称「三機関連携協定」）に基づいた「量子複雑現象」連携研究の一環として開催された。

最後に、講演者、座長、および実行委員の方々など、お手伝いいただいた研究者の方々および事務員の方々に加えて、この研究会に協力していただいた機関、そして、参加していただいた皆様に、この場を借りて改めてお礼を申し上げたい。

2. 鉄系超伝導体の電子構造と超伝導発現機構

電気通信大学 量子・物質工学科、JST, TRIP
黒木和彦

Electronic structure and pairing mechanism of the iron based superconductors

Dept. of Applied Physics and Chemistry, Univ. of Electro-Communications, JST-TRIP

Kazuhiko Kuroki

昨年2月に細野秀雄氏らのグループにより鉄系ニクタイド、F-doped LaFeAsO が 26K の超伝導になることが発見された[1]。その後、元素置換による同族の化合物も数多く合成され、50K 超の T_c を持つ高温超伝導の起こるメカニズムに興味が持たれる。

超伝導を担うクーパー対の形成は通常、フォノンを媒介として電子間に生じる引力に起因して起こるが、鉄ニクタイドの場合、初期の段階で理論計算が行われ、高い T_c を説明しうるほど電子・フォノン相互作用が大きくないことが指摘された[2]。したがってフォノン以外の自由度がクーパー対形成を媒介している可能性が高い。電子系自身がクーパー対形成のための「のり付け」を担う可能性がある場合、電子状態をできるかぎり正確に取り込んだ有効模型を構築する必要がある。そのような試みは超伝導の発見からまもなくして行われた。文献[3]においては LaFeAsO に対して第一原理バンド計算を行い、そこからワニエ軌道を得ることで、3d バンドに対するタイト・バインディング模型を構築した。As が Fe の周りに正四面体配置をとるために単位胞内には二つの Fe が含まれ、3d バンドだけでも 10 軌道模型となる(folded Brillouin zone)。しかし、各 Fe の周りの局所的な As 配置が等価であるため、Fe 一つのみを含む単位胞に取り直すことができ、その結果、ブリルアンゾーンは unfold され、5 軌道模型を得ることができる(図1)。5 つのバンドは複雑に絡み合っており、第一原理計算のフェルミ面を正しく再現するには 5 つの軌道を全て考慮した模型が必要である。10%ドープされたときのフェルミ面は図のように波数(0,0)の周りに二つ (α1, α2)、波数(π,0)(0,π)周りにそれぞれ一つずつ(β1, β2)存在する。また、波数(π,π)近傍はバンドがフェルミ準位に極めて接近しており、有効的にフェルミ面(γ)的な役割を果たしうる。α1, α2とβ1, β2のブリルアンゾーン境界付近は 3dxz, yz 軌道、β1, β2のブリルアンゾーン境界から離れた箇所とγは dx2-y2 軌道の性格が強い。

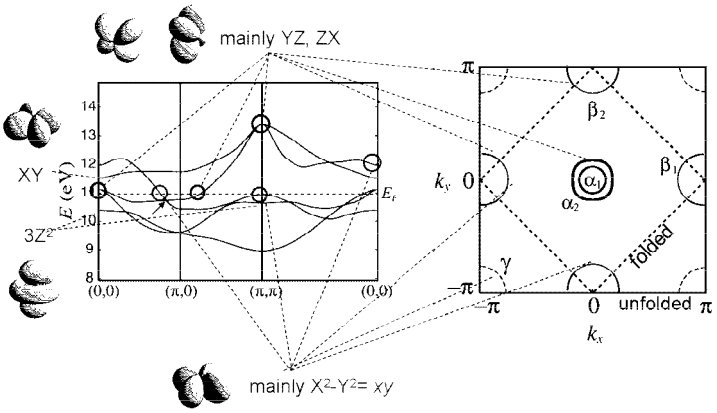


図1： 5 軌道模型のバンドとフェルミ面

このようにして得たバンド構造を取り入れ、多体電子間相互作用を考慮した有効模型を用いて超伝導の可能性を検討するわけであるが、鉄ニクタイド系超伝導体においては、結晶構造の変化が超伝導の T_c に与える影響が大きいことが実験的に指摘されている[4]。また、砒素系化合物においては超伝導ギャップがフェルミ面上で完全に開いていることを示す実験が多いのに対して、リン系化合物においてはギャップにノードがあることがいくつかの実験で指摘されている[5,6]。

そこで、文献[7]においては LaFeAsO において仮想的に結晶構造を変えた場合、及び現実の NdFeAsO や LaFePO について、第一原理バンド計算を元に構築した5軌道模型を用い、乱雑位相近似を適用して、スピンの揺らぎと超伝導に関する解析を行った。5軌道模型におけるフェルミ面は結晶構造によって変化し、特に波数(π,π)付近に現れるフェルミ面（γ面）は鉄の面から測ったニクトゲンの高さ h_{Pn} に敏感である。NdFeAsO のように h_{Pn} が高いとγ面がしっかりと表れる。この場合、主要なスピンの揺らぎはα–β, β–γフェルミ面のネスティングに起因する波数(π,0)(0,π)のモードである。スピン揺らぎによってクーパー対形成が媒介される場合、超伝導ギャップはスピン揺らぎ波数の前後で符号反転を強いられるが、今の場合、非連結なフェルミ面間で符号を反転することで、各フェルミ面上では完全にギャップの開いた超伝導が実現できる。このような状況がスピン揺らぎ媒介超伝導において有利である可能性は文献[8]において指摘されていた。それに対して、LaFePO のように h_{Pn} が低いとγ面が消え、この場合にはβ1–β2間の相互作用が重要になる。この場合、計算によると複数の異なる波数を持つスピン揺らぎの競合効果により、超伝導ギャップのノードがフェルミ面を通過するようになり、ノードのある s 波と d 波超伝導がほぼ拮抗する。すなわち、ニクトゲンの高低によって、ノードの有無の切替が起こる。

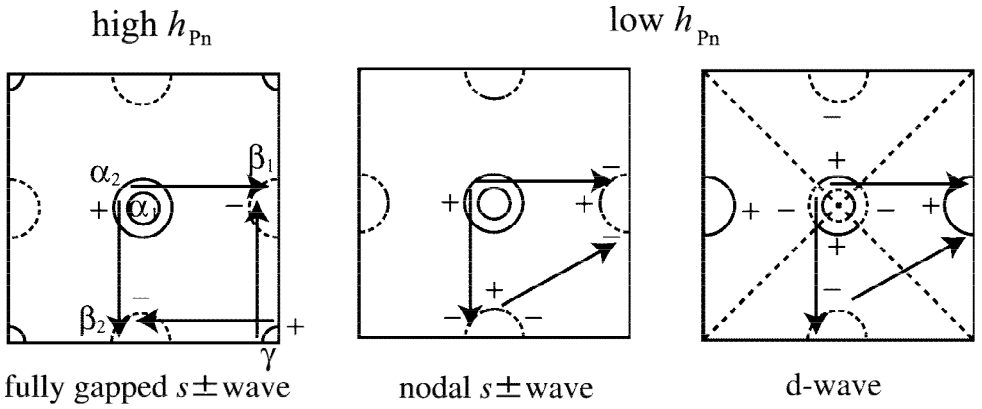


図２：フェルミ面と超伝導ギャップ、矢印は支配的なスピン揺らぎの波数ベクトル。左端図はニクトゲンが高い場合、中央と右端は低い場合。

また、ニクトゲンの高さの他に格子定数も超伝導に影響を及ぼす。高さを固定して、格子定数を人工的に変化させて得られる模型に基づく計算によれば、格子定数が小さいと超伝導に不利となる。これらの効果を総合して、ニクトゲンの高さと格子定数の空間で相図（図3）を得ることができる[7]。この結果は、定性的には実験結果と整合している。

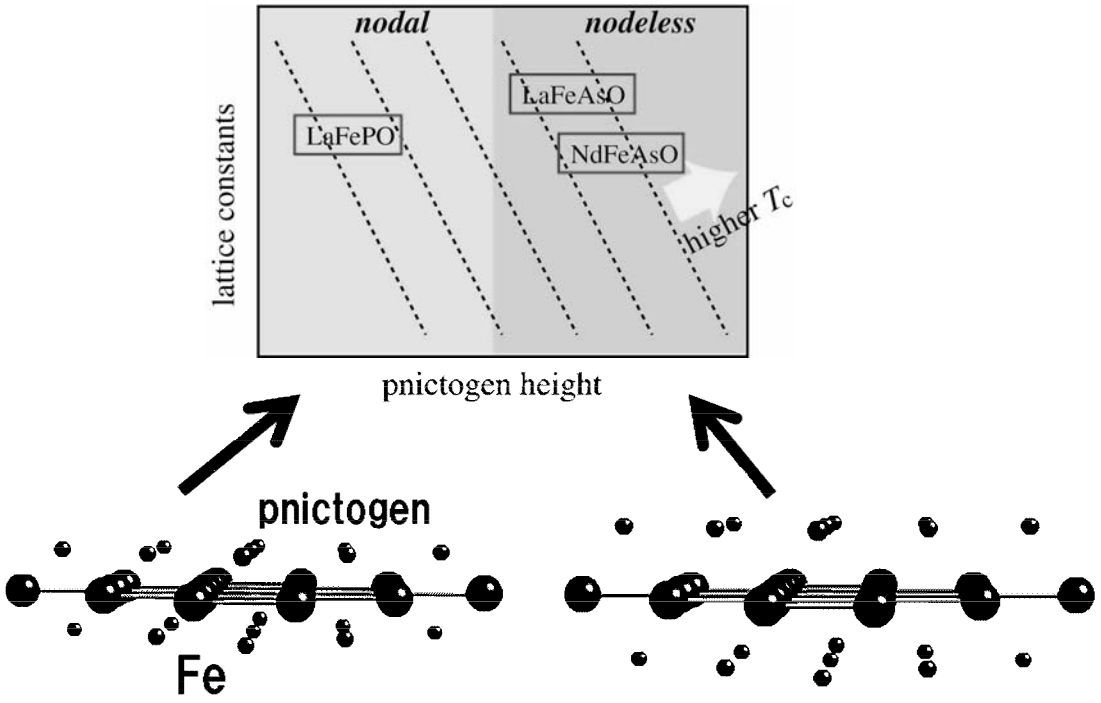


図３：ニクトゲンの高さと格子定数に対する定性的な相図

参考文献

[1] Y. Kamihara et al., J.Am.Chem.Soc. **130** (2008) 3296.
[2] L. Boeri et al., Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 026403.
[3] K. Kuroki et al., Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 087004, erratum: Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 109902(E).
[4] C.-H. Lee et al., J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 083704.
[5] J. D. Fletcher et al., Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 147001.
[6] M. Yamashita et al., arXiv:0906.0622.
[7] K. Kuroki et al., Phys. Rev. B **79** (2009) 224511.
[8] K.Kuroki and R.Arita, Phys. Rev. B **64** (2001) 024501.

TRiP

IRiSes 2009

鉄系超伝導体の電子状態とペアリング機構

電気通信大学, JST, TRIP
黒木和彦

共同研究者:
臼井秀知 (電通大.)
鈴木雄大 (電通大. JST, TRIP)
大成誠一郎 (名大工., JST, TRIP)
有田亮太郎(東大工, JST, TRIP)
田仲由喜夫 (名大工., JST, TRIP)
紺谷浩 (名大理., JST, TRIP)
青木秀夫 (東大理, JST, TRIP)

Outline

- Effective model
- Spin fluctuation mediated pairing
- Comparison with experiments
- Lattice structure dependence
  in 1111 / 22426 / 122 / 11

Discovery of SC in LaFeAsO

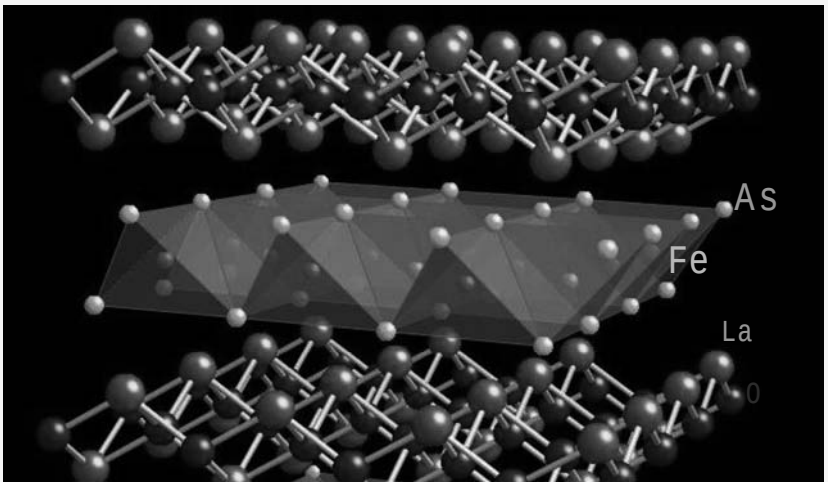
Published on Web 02/23/2008

Iron-Based Layered Superconductor La[$O_{1-x}F_x$]FeAs (x = 0.05−0.12) with T_c = 26 K

Yoichi Kamihara,*,† Takumi Watanabe,‡ Masahiro Hirano,†,§ and Hideo Hosono†,‡,§

ERATO-SORST, JST, Frontier Research Center, Tokyo Institute of Technology, Mail Box S2-13, Materials and Structures Laboratory, Tokyo Institute of Technology, Mail Box R3-1, and Frontier Research Center, Tokyo Institute of Technology, Mail Box S2-13, 4259 Nagatsuta, Midori-ku, Yokohama 226-8503, Japan

Received January 9, 2008; E-mail: hosono@msl.titech.ac.jp



High Tc up to 55 K by La->Sm,Nd

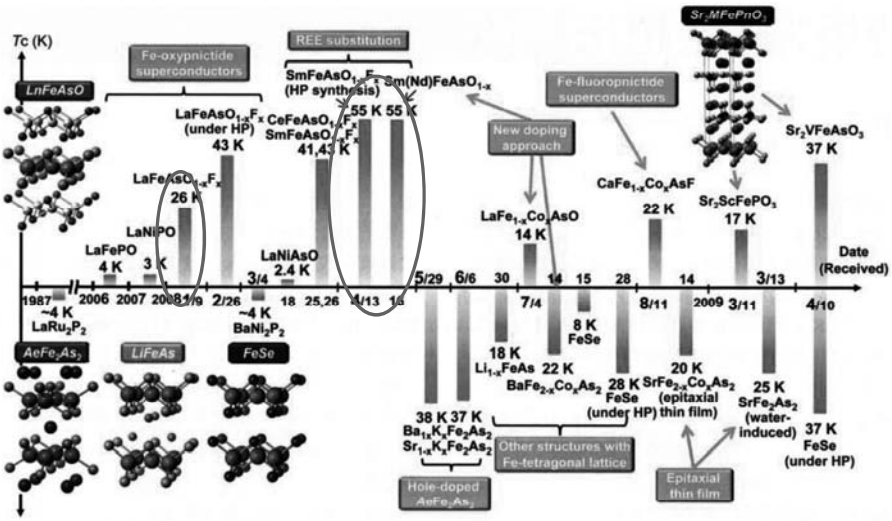
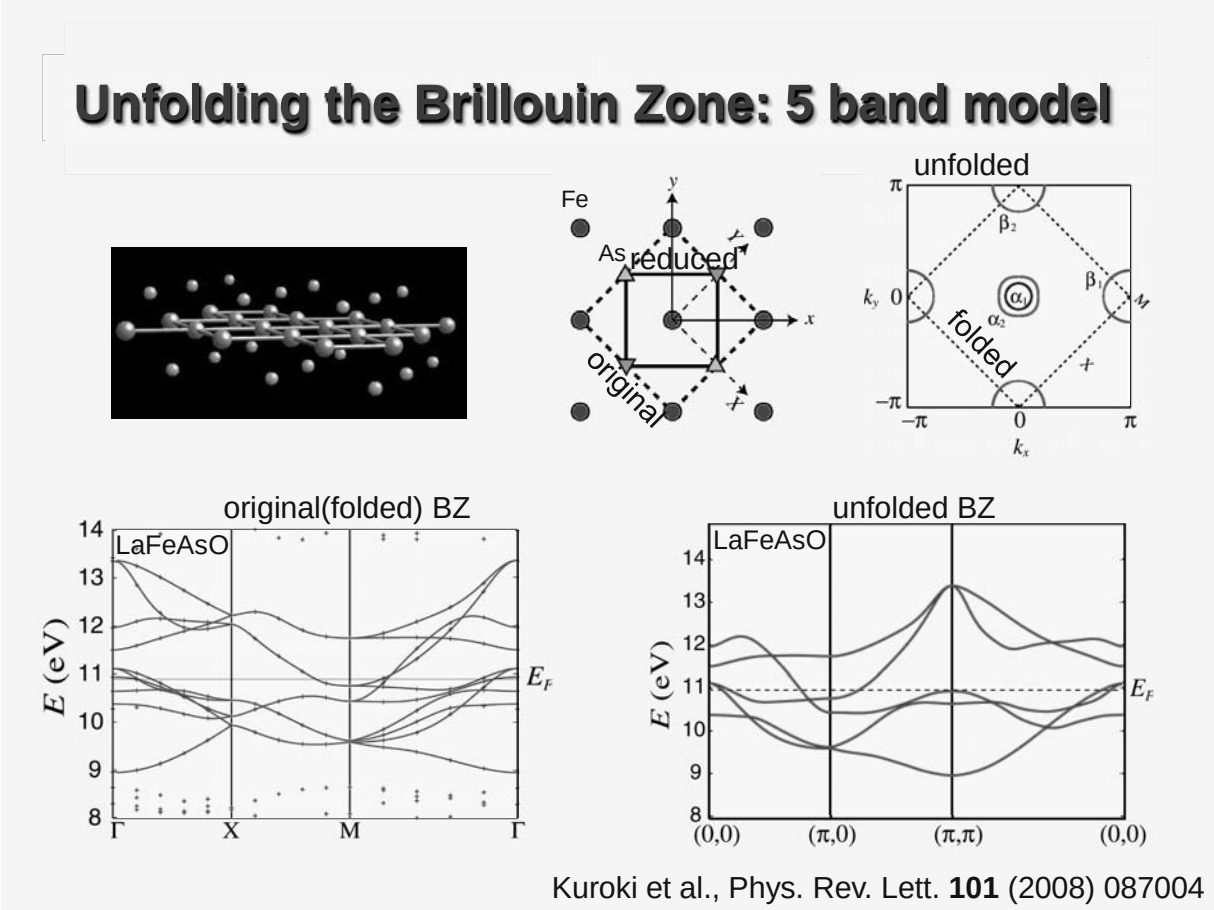
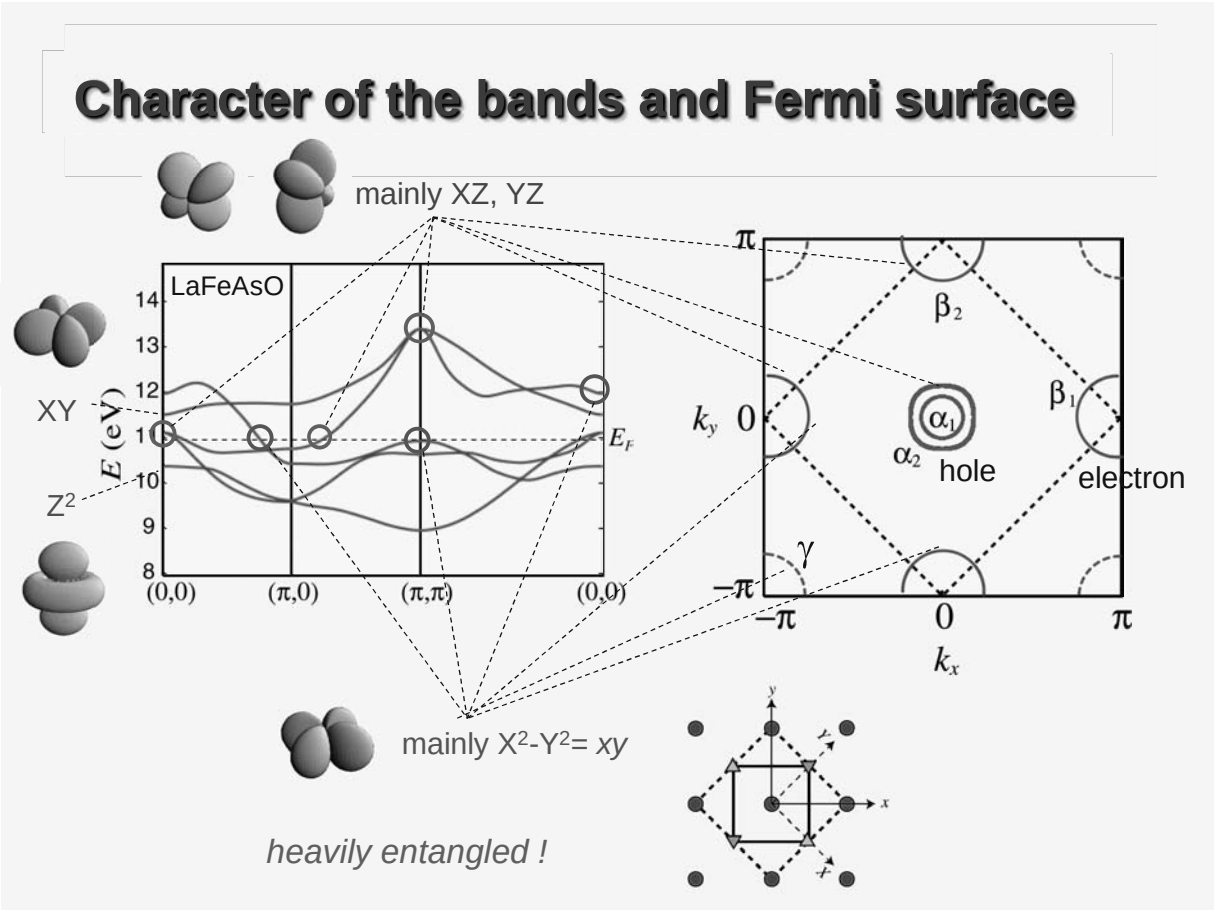


図1 遷移金属ニクタイド系超伝導体の進展．縦軸は T_c，横軸は論文の受理日または Cond-mat 上に貼られた日付．上は酸素（フッ素）イオンをブロック層に含む物質系 (1111)，下はそれ以外の系の結果．

細野秀雄ら、日本物理学会誌 **64** (2009) 807


Unfolding the Brillouin Zone: 5 band model
Fe
As
reduced
original
unfolded
folded
original(folded) BZ
unfolded BZ
LaFeAsO
E (eV)
E_F
Γ X M Γ
(0,0) (π,0) (π,π) (0,0)
Kuroki et al., Phys. Rev. Lett. 101 (2008) 087004


Character of the bands and Fermi surface
mainly XZ, YZ
LaFeAsO
XY
Z2
E (eV)
E_F
(0,0) (π,0) (π,π) (0,0)
k_y
k_x
hole
electron
mainly X2-Y2= xy
heavily entangled !

Effective Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{ij}\sum_{\mu\nu}\sum_{\sigma} t_{ij}^{\mu\nu} c_{i\mu\sigma}^{\dagger} c_{j\nu\sigma} + \sum_{i\mu\sigma} \epsilon_\mu n_{i\mu\sigma}$$

i, j: site、μ, ν: orbitals

$$\mathcal{H}_1 = \sum_i \left[U \sum_\mu n_{i\mu\uparrow} n_{i\mu\downarrow} + U' \sum_{\mu>\nu} n_{i\mu} n_{i\nu} + J \sum_{\mu\neq\nu} \boldsymbol{S}_{i\mu} \cdot \boldsymbol{S}_{i\nu} + J' \sum_{\mu\neq\nu} c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{i\mu\downarrow}^{\dagger} c_{i\nu\downarrow} c_{i\nu\uparrow} \right]$$

intraorbital U, interorbital U', Hunds coupling J, pair hopping J' as parameters

assume U, U', J, J' independent of the orbitals, $U=U'+J+J'$

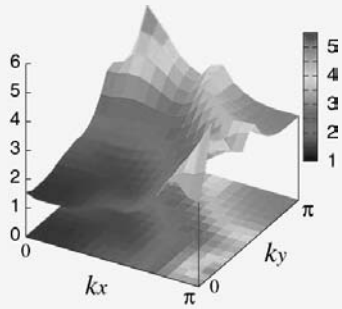
evaluation from first principles: K.Nakamura et al, JPSJ **77** (2008) 093711
V. Anisimov et al, 0810.2629
T.Miyake et al, JPSJ **77** (2008) Suppl. C 99

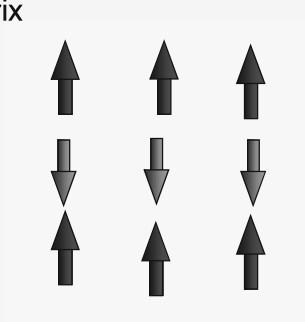
non-doped system d^6 → band filling n (number of eletron /site)= 6,
doped system $n=6+x$ (x: F content), mainly 10% doping, n=6.1

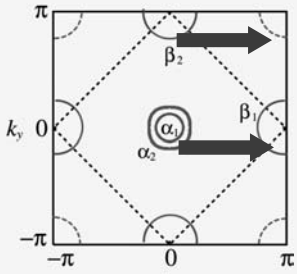
RPA spin susceptibility

n=6.1 (10% dope), N_x=32, N_y=32, N_ω=1024, T=0.02, U=1.2, U'=0.9, J=J'=0.15(eV)

eigenvalue of the spin suceptibility matrix







neutron scattering
C.de la Cruz Nature 453, 899 (2008)

also from first principles calculations:
I.I. Mazin et al Phys. Rev. Lett. **101**, 057003 (2008)
J. Dong et al., Europhys. Lett. 83 27006 (2008)
S. Ishibashi et al J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) 053709
T. Yildirim, Phys. Rev. Lett. 101 (2008) 057010

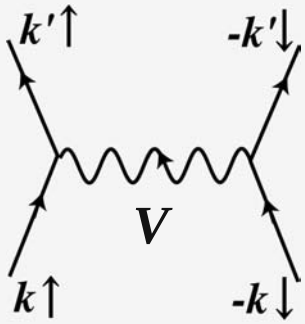
Superconductivity and pairing interaction

superconductivity occurs due to pair scattering

$V(k\text{-}k')$: pairing interaction → pair scattering

gap equation

$$\Delta(\boldsymbol{k}) = -\sum_{\boldsymbol{k}'} \frac{\tanh[E(\boldsymbol{k}')/k_B T]}{2E(\boldsymbol{k}')} V\ (\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\Delta(\boldsymbol{k}')$$

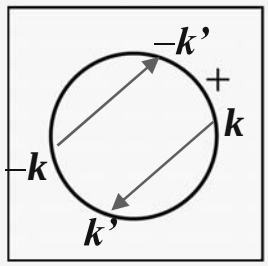


phonon mediated pairing: $V(q)<0$

gap: no sign change, s-wave

for a finite Δ

$$V\ (\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\Delta(\boldsymbol{k})\Delta(\boldsymbol{k}') < 0$$



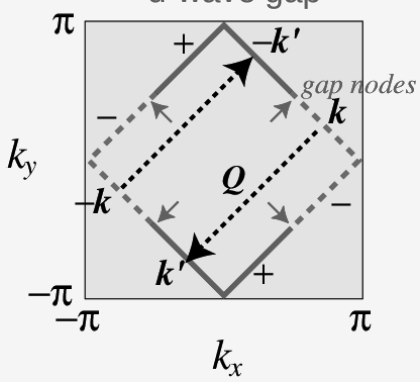
d-wave superconductivity due to AF spin fluctuations

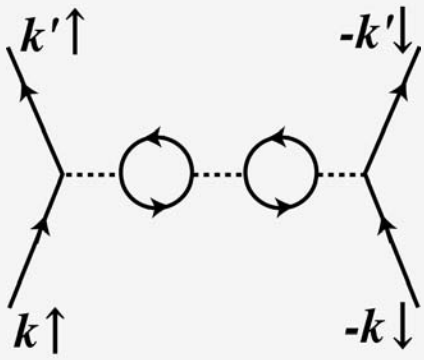
$$V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\Delta(\boldsymbol{k})\Delta(\boldsymbol{k}') < 0$$

$$at\ \boldsymbol{q}\sim\boldsymbol{Q} \quad V_{\text{singlet}}(q) > 0$$

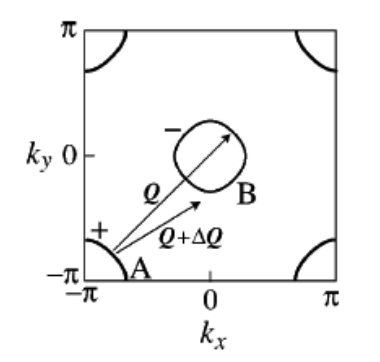
$$\Delta(\boldsymbol{k}) = \Delta(-\boldsymbol{k})$$

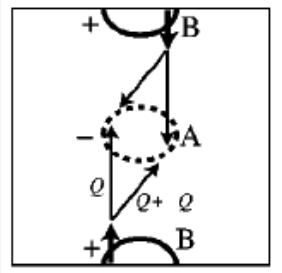
d-wave gap





Disconnected Fermi surface



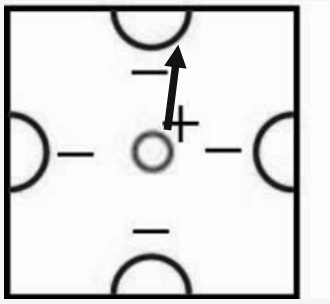


Kuroki&Arita, 2001,2002

spin fluctuation (repulsive interaction)→ sign change of the gap necessary
→disconnected Fermi surface:
sign change without nodes of the gap intersecting the Fermi surface

SC gap function

A simple expectation



“sign reversing s-wave”, “s+- wave”

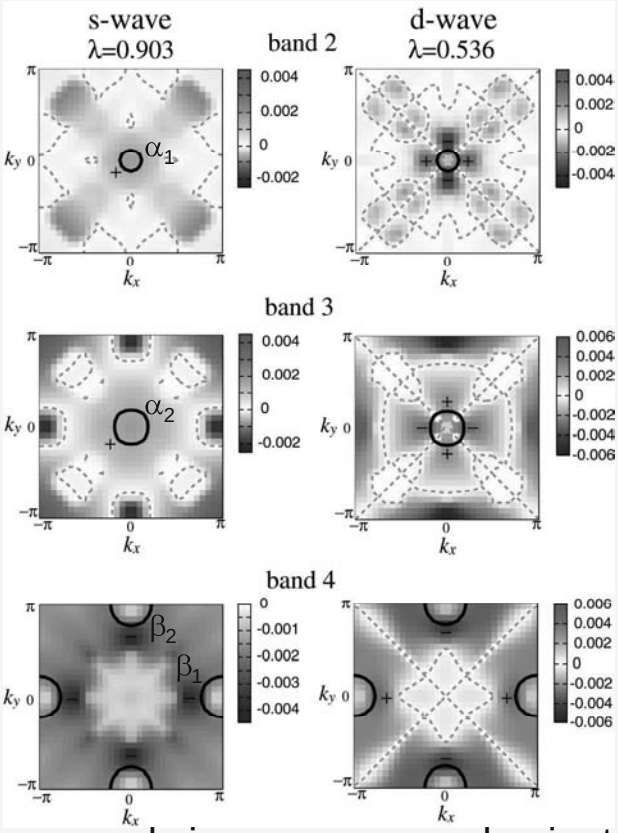
Mazin et al PRL **101**, 057003 (2008)

For LaFeAsO
(with experimentally determined lattice structure)

U=1.2, U'=0.9,
J=J'=0.15
n=6.1 (10% dope)
T=0.02 (eV)

gap in the
band representation

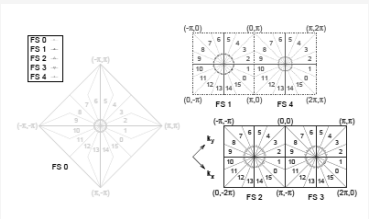
Erratum : PRL **102**, 109902 (2009)

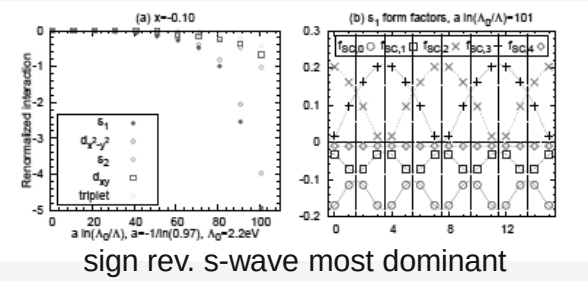


fully gapped sign rev. s-wave dominates

Also with five band model

F. Wang et al, functional RG

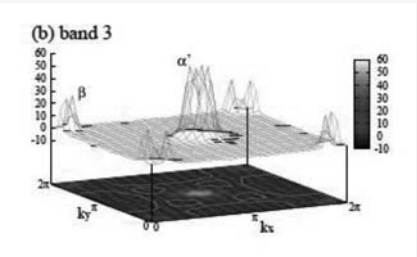


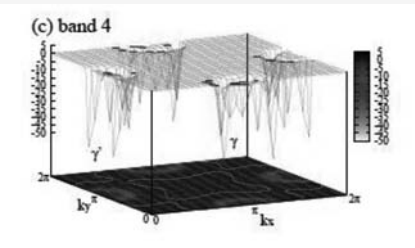


sign rev. s-wave most dominant

T. Nomura, 3rd order perturbation

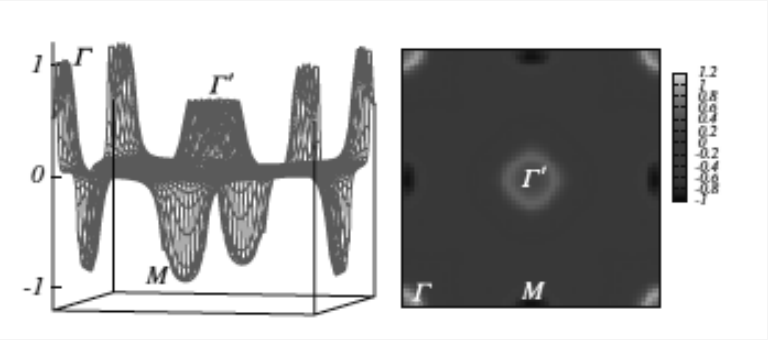
proc. JST-meeting in JPSJ supplement; 0811.2462





Anomalous Green's functions : sign rev. s-wave

H.Ikeda, FLEX
JPSJ **77** (2008) 123707

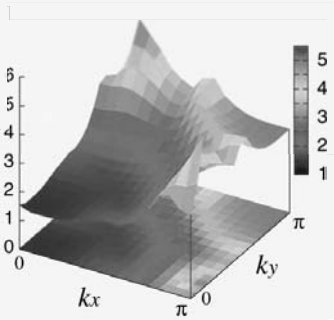


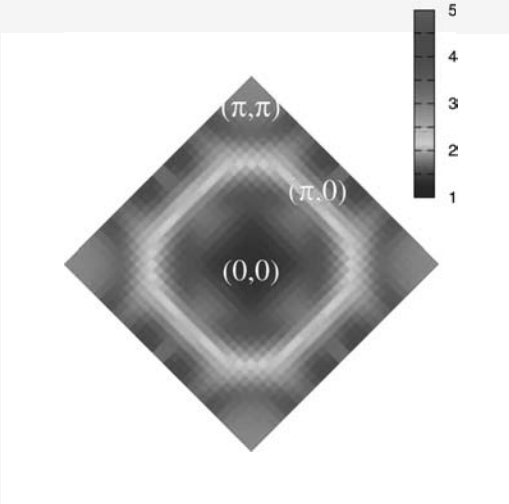
sign rev. s-wave

bare energy dispersion “tuned by hand”
so that the renormalized band dispersion
gives the “correct” $(\pi,0)$ spin fluctuations

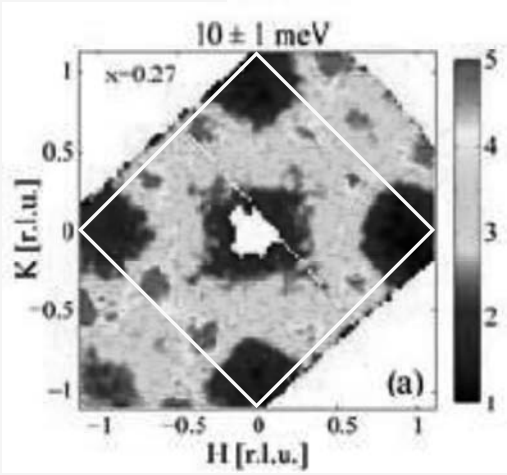
スピン揺らぎシナリオによる理論と実験との対応

スピン揺らぎ



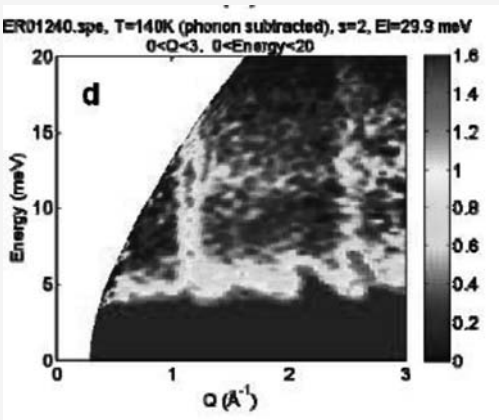


5 orbital RPA calculation in the *unfolded BZ*

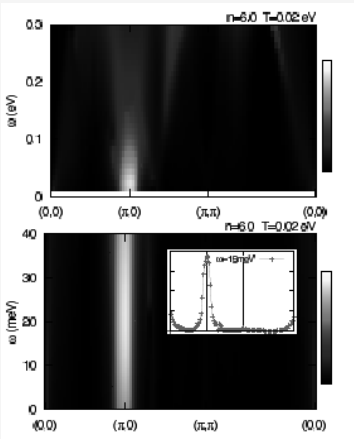


$FeSe_{1-x}Te_x$, neutron
Lumsden et al

スピン揺らぎ

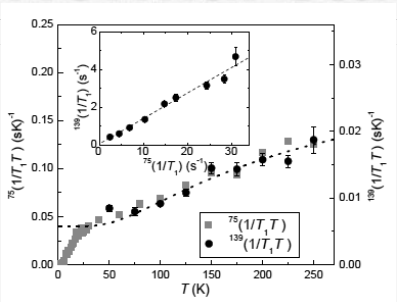


Ishikado et al
JPSJ **78** 043705 (2009)



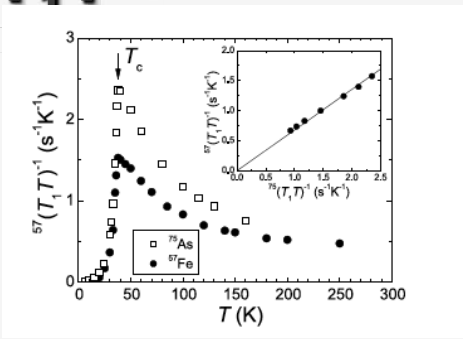
5 orbital RPA
Kariyado&Ogata,
JPSJ **78** 043708 (2009)

Normal state $1/T_1T$



La1111 : (nearly) without γ Fermi surface

Nakai et al, JPSJ **77** (2008) 073701

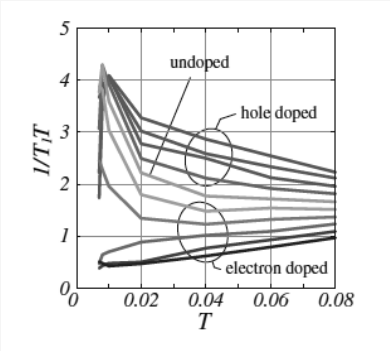


BaK122 : with γ Fermi surface

Yashima et al, Phys. Rev. B 80, 184503 (2009)

H.Ikeda, 5 orbital, FLEX

JPSJ **77** (2008) 123707



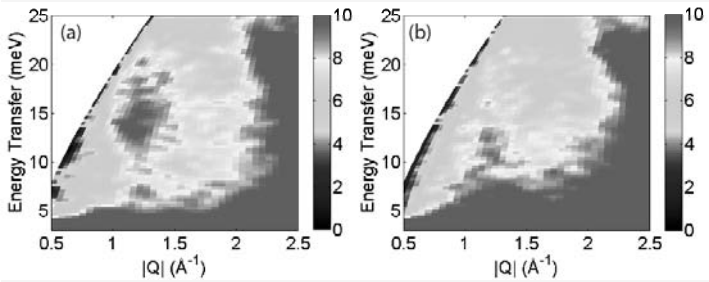
中性子散乱実験:レゾナンスピーク

Maier&Scalapino

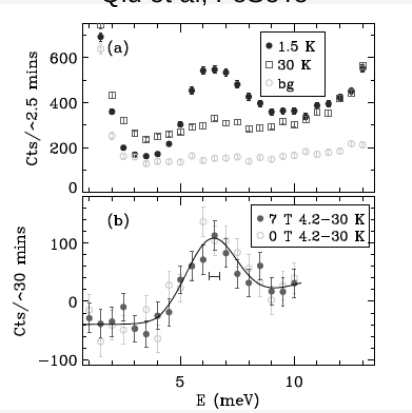
For the sign reversing s-wave, resonance peak in Im χ (q,ω) at q=(π,0)

A. D. Christianson et al, 122

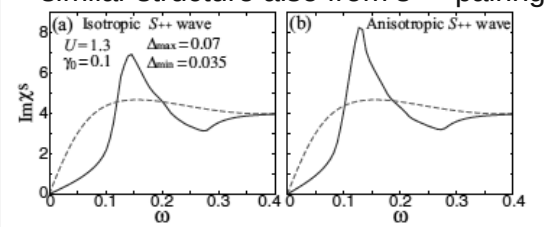
7K(Tc 以下）　　50K(Tc 以上）



Qiu et al, FeSeTe

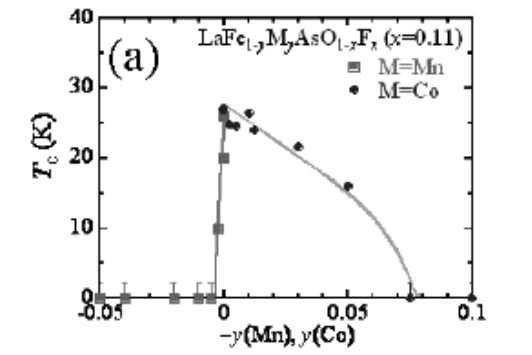


similar structure also from s++ pairing

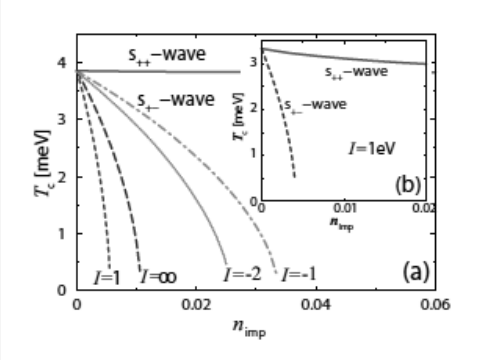


Onari.Kontani.Sato arXiv:0910.3472

不純物効果

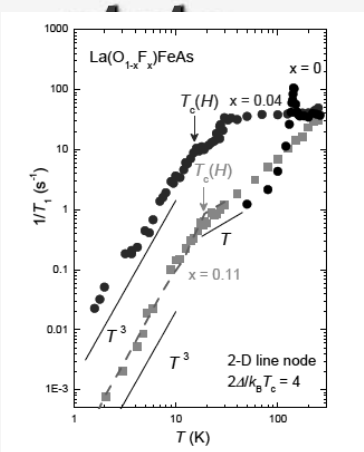


Sato et al, arXiv: 0907.3007

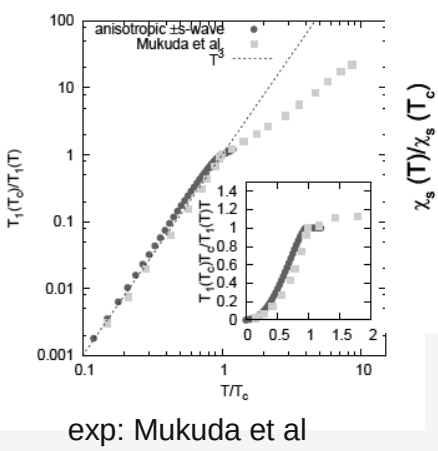


Onari&Kontani, PRL 2009

NMR relaxation rate in SC

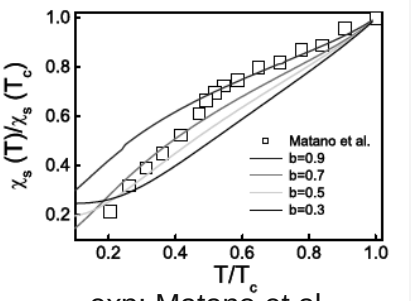


Nakai et al
JPSJ **77** (2008) 073701



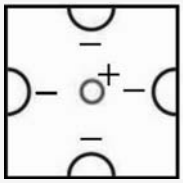
exp: Mukuda et al
JPSJ **77** (2008) 093704

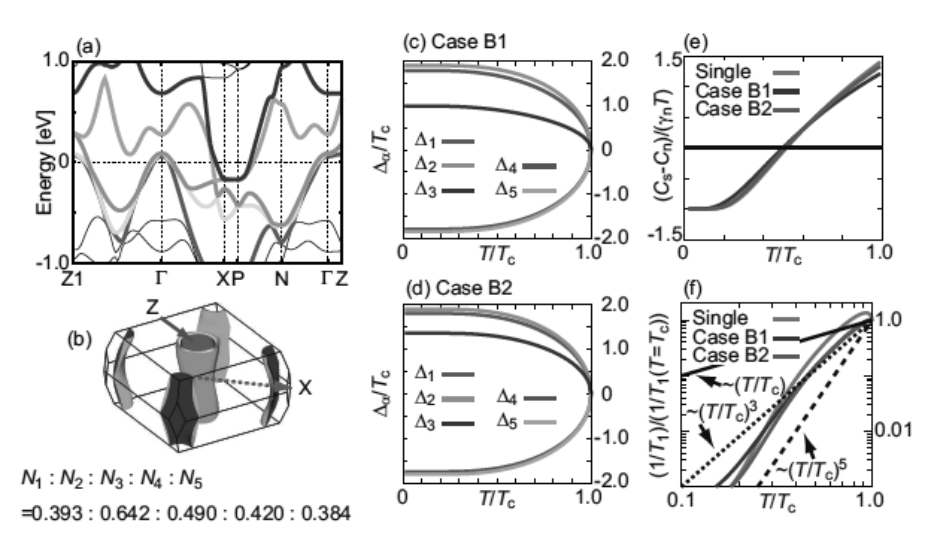
theory : Nagai et al
New J. Phys. **10** 103026
power law like behavior due to
max. and min in the gap;
also Mukuda et al,



exp: Matano et al
EPL **83** (2008) 57001

Theory: Chubukov
PRB **78**, 134512 (2008)
effect of impurity

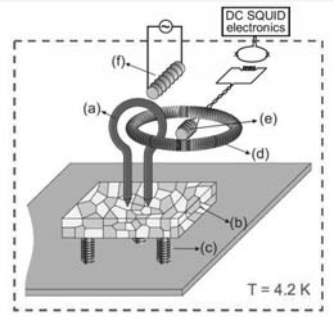




Nakai et al 0909.1195

Evidences for sign changing gap

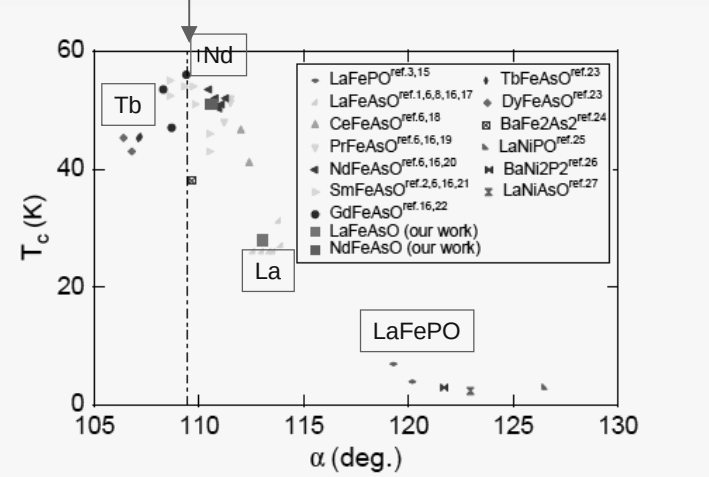
C.T. Chen et al
phase sensitive experiment using polycrystaline samples;
detection of half-flux quantization



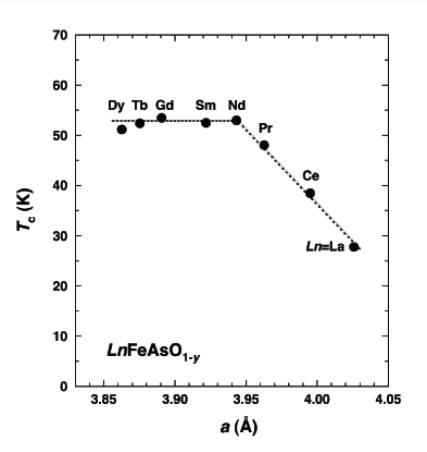
Hanaguri et al, STS Fourier transformation in magnetic field

Lattice structure dependence of Tc

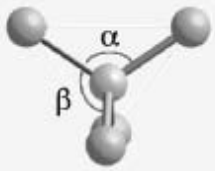
regular tetrahedron



C.-H. Lee et al, JPSJ **77** (2008) 083704



K. Miyazawa et al, 2009

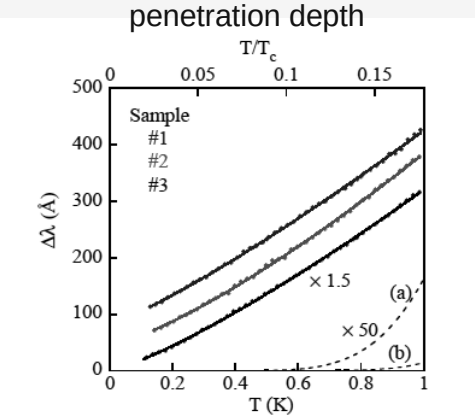


also by J. Zhao, Nat. Mat. 7, 953 (2008)

Lattice structure dependence of SC gap

for LaFePO, experiments
show presence of line nodes in the SC gap

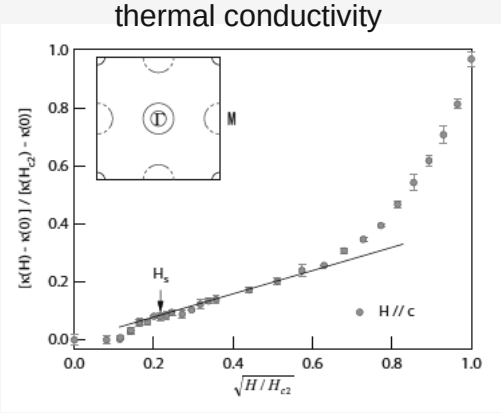
penetration depth



Fletcher et al, PRL **102**, 147001 (2009)

also Hicks et al., PRL 2009

thermal conductivity

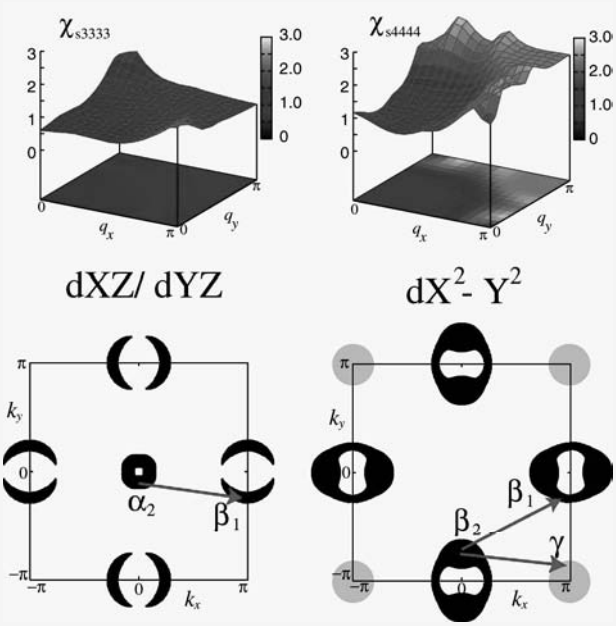


M. Yamashita et al., arXiv: 0906.0622

"Orbital dependent" nesting

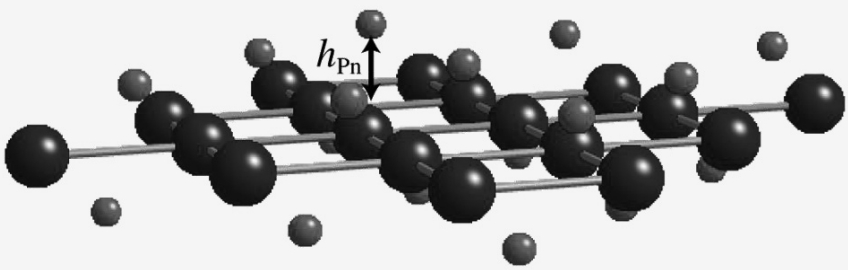
LaFeAsO

intra-orbital interaction



arrows : intra-orbital nesting

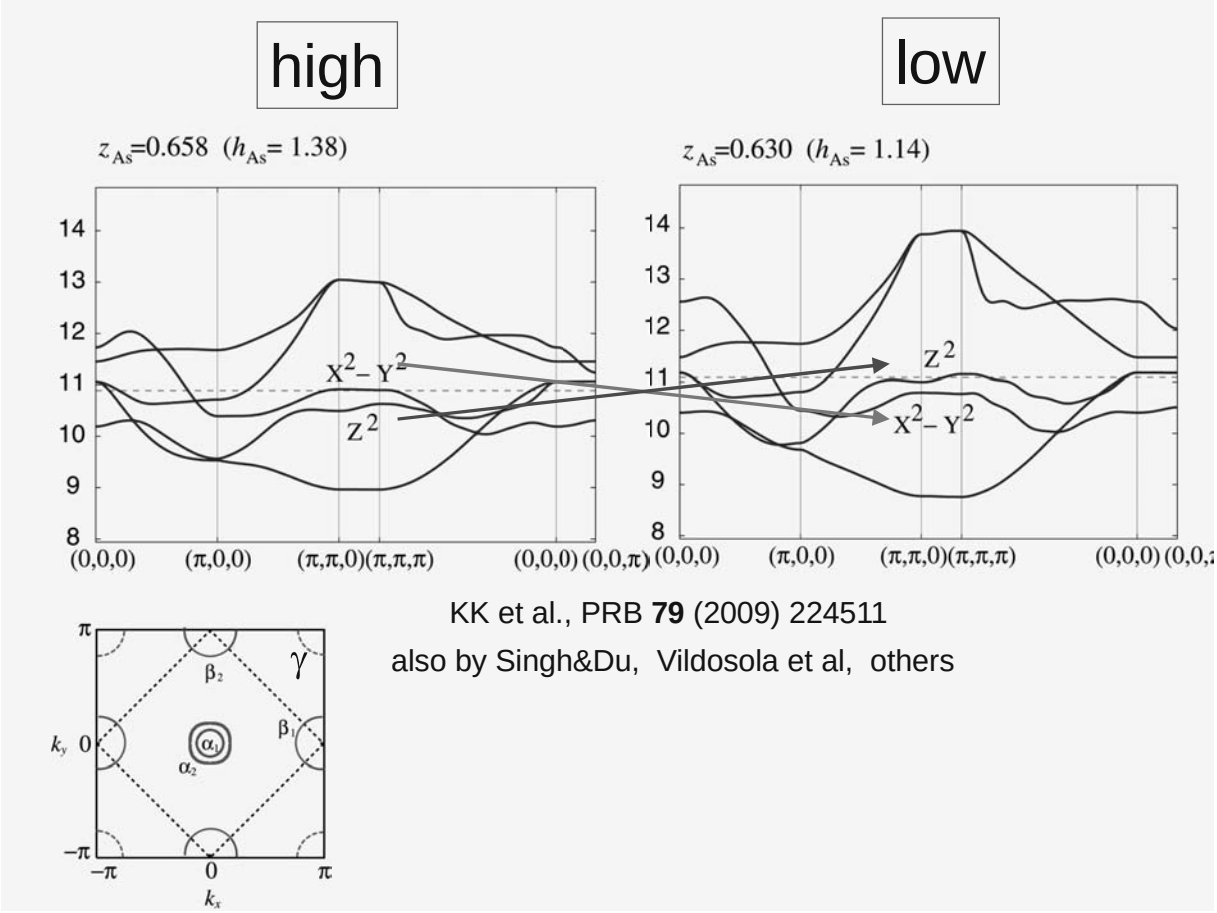
Pnictogen "height"

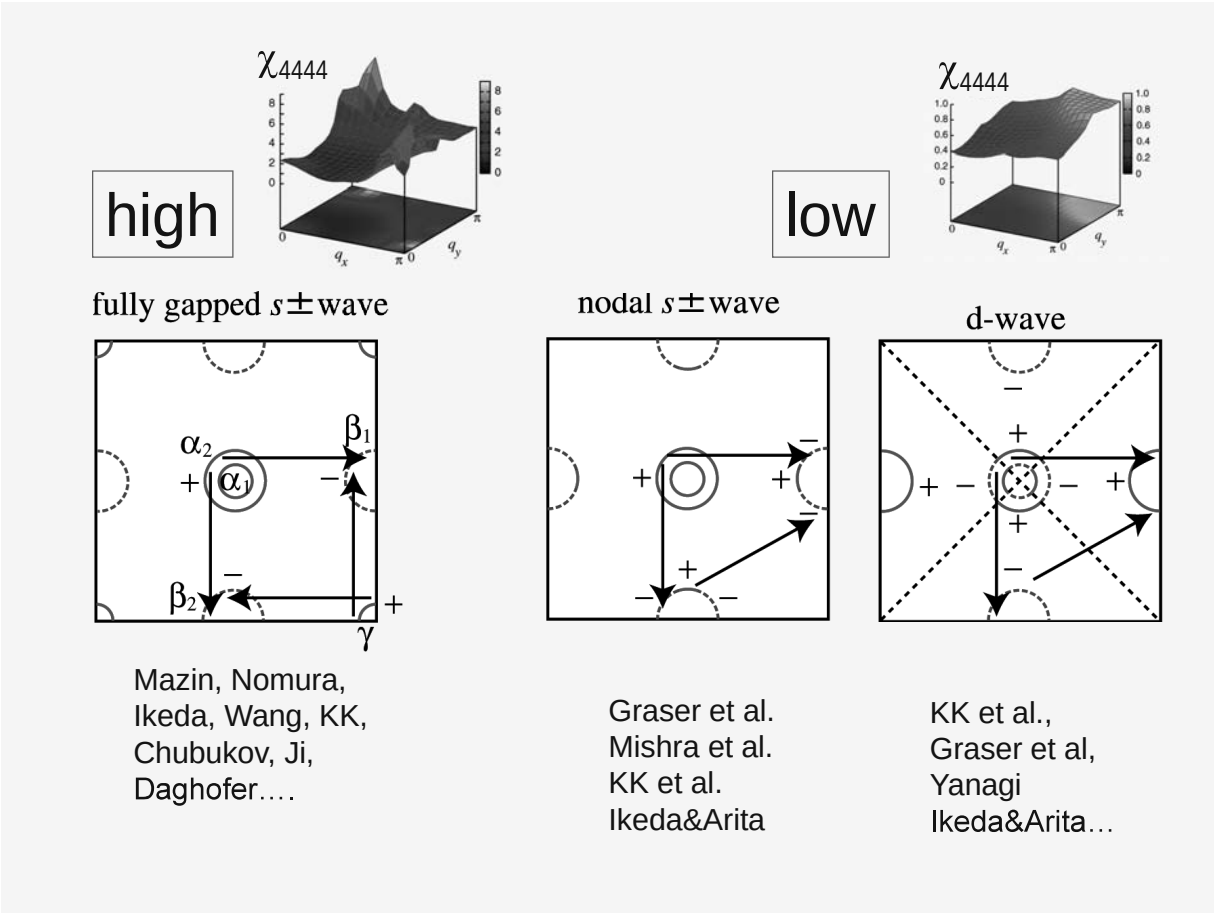


LaFePO h_P = 1.14 Å

LaFeAsO h_{As} = 1.32 Å

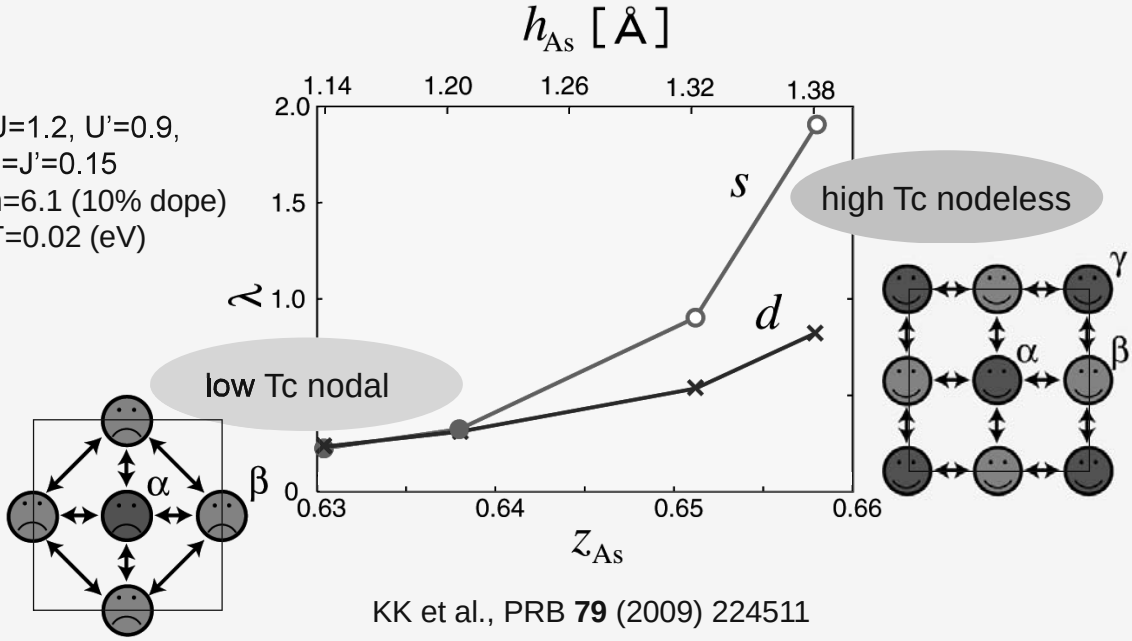
NdFeAsO h_{As} = 1.38 Å


high
low
z_{As}=0.658 (h_{As}= 1.38)
z_{As}=0.630 (h_{As}= 1.14)
X^2-Y^2
Z^2
(0,0,0) (π,0,0) (π,π,0)(π,π,π) (0,0,0) (0,0,π)
KK et al., PRB **79** (2009) 224511
also by Singh&Du, Vildosola et al, others
k_y
k_x
α_1
α_2
β_1
β_2
γ


χ_{4444}
high
low
fully gapped $s\pm$wave
nodal $s\pm$wave
d-wave
α_1
α_2
β_1
β_2
γ
Mazin, Nomura, Ikeda, Wang, KK, Chubukov, Ji, Daghofer….
Graser et al. Mishra et al. KK et al. Ikeda&Arita
KK et al., Graser et al, Yanagi Ikeda&Arita…

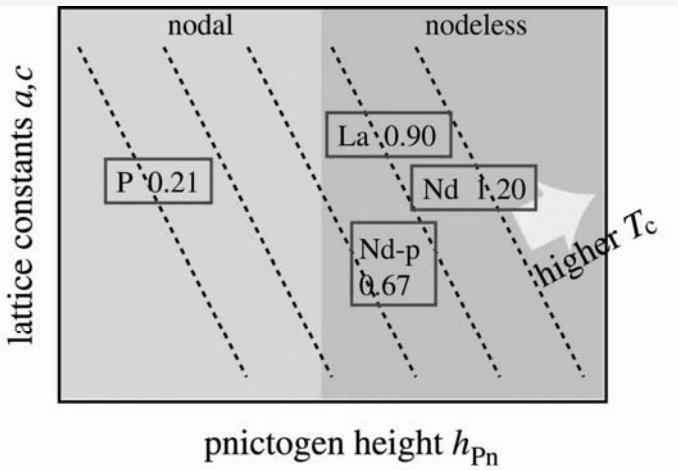
"Height" as a switch between high Tc nodeless and low Tc nodal pairings

U=1.2, U'=0.9,
J=J'=0.15
n=6.1 (10% dope)
T=0.02 (eV)



KK et al., PRB **79** (2009) 224511

Schematic "Phase diagram"



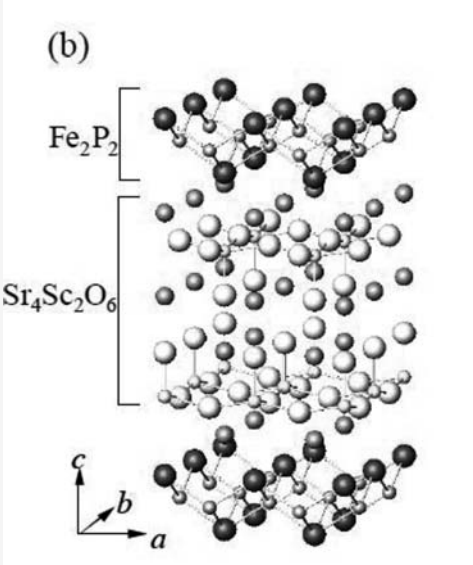
the numbers are the eigenvalue of the Eliashberg equation for T=0.02eV, n=6.1

Structure dependences other than in 1111

Sc-22426P

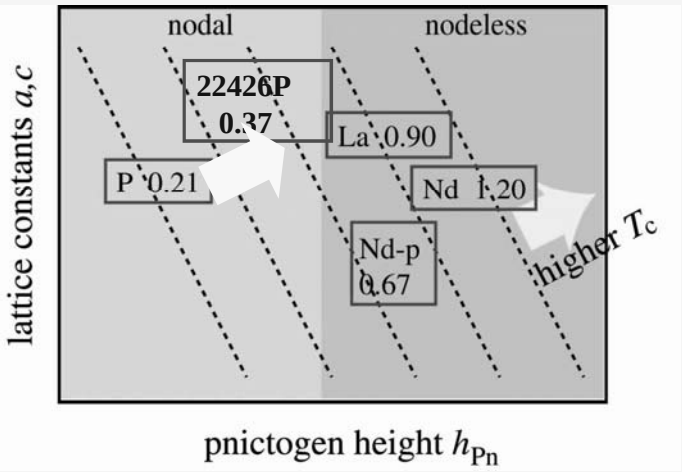
謝辞：荻野拓、下山淳一

J. Shimoyama et al, Supercond. Sci. Technol. 22 (2009) 075008



22426P	LaFePO
Tc=17K	> 5～7K
h_P=1.20 Å	> 1.14 Å
c=15.54 Å	> 8.5 Å
a=4.016 Å	> 3.95 Å

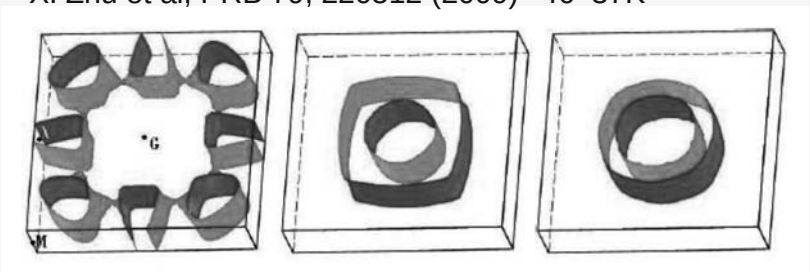
Schematic "Phase diagram"

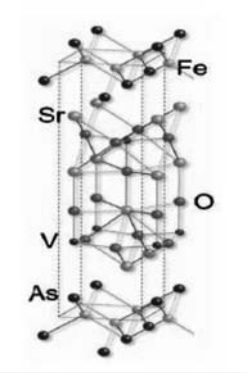


the numbers are the eigenvalue of the Eliashberg equation for T=0.02eV, n=6.1

V-22426As

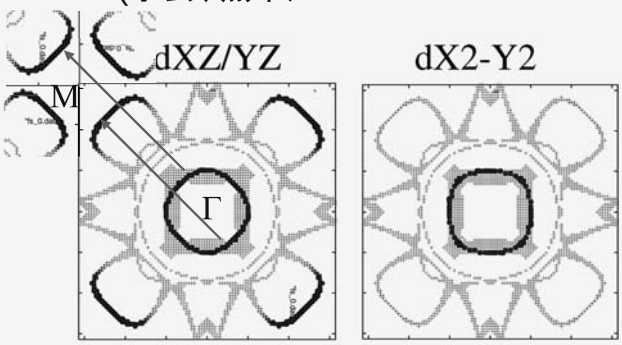
X. Zhu et al, PRB 79, 220512 (2009) Tc=37K

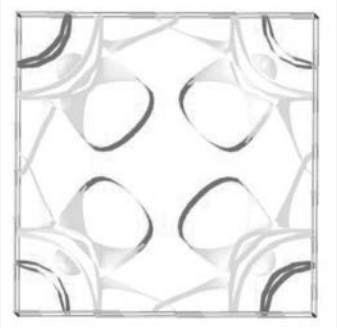




Lee&Pickett, 0908.2698, Fermi surface "without nesting"

H.Usui&KK (学会、熊本)

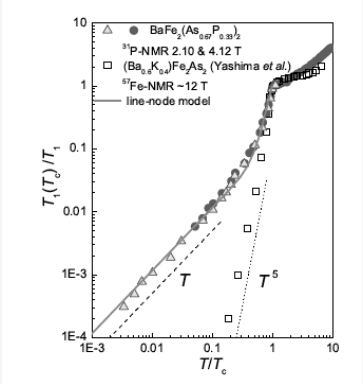


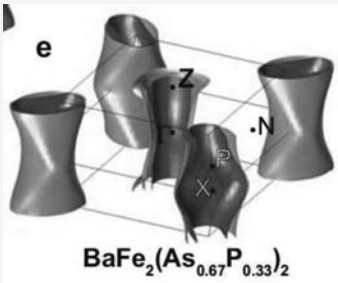


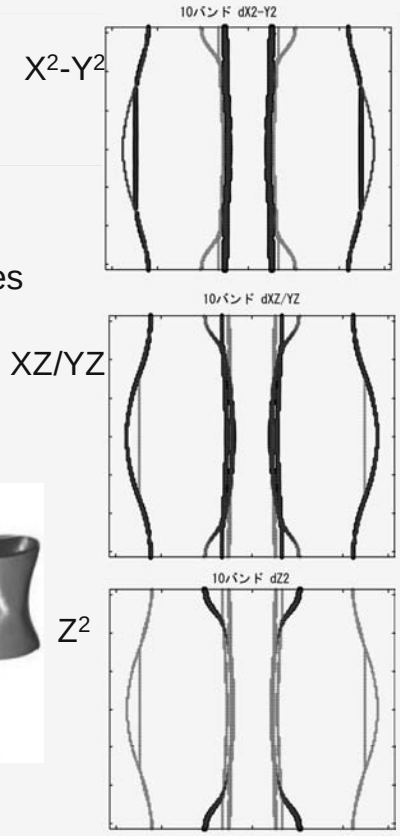
also Mazin, condmat 0909.5174

$BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$

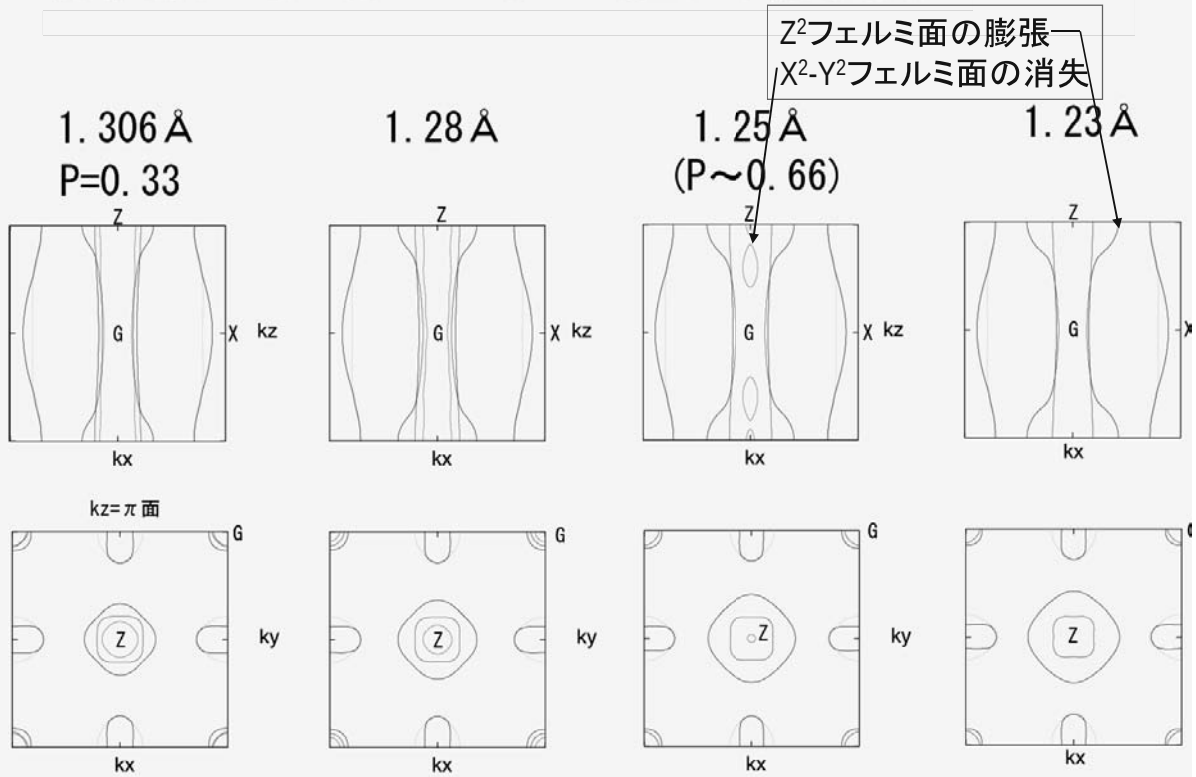
Kasahara et al, 0905.4427
Hashimoto et al, preprint, presence of nodes
Nakai et al, 0908.0625



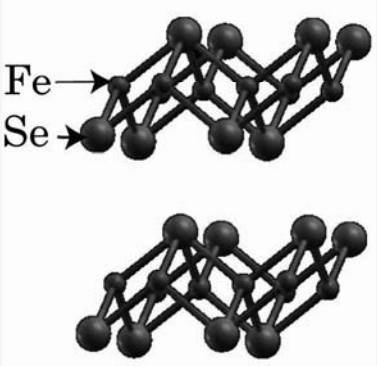




高さによるフェルミ面の変化

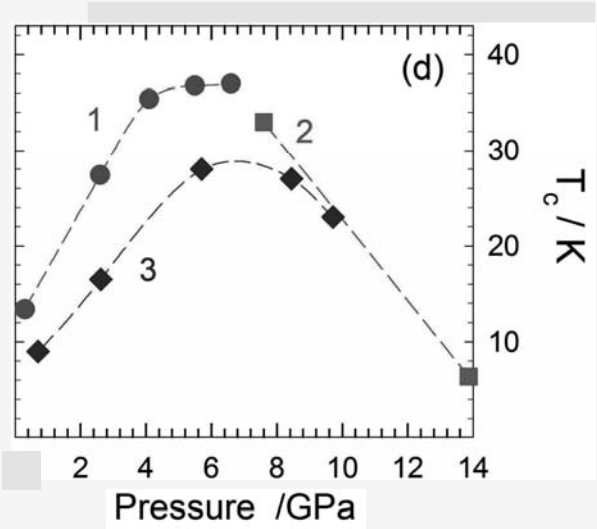


11 FeSe



Fe-chalcogenide
[11] material

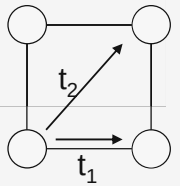
Experimental result : Pressure vs. Tc

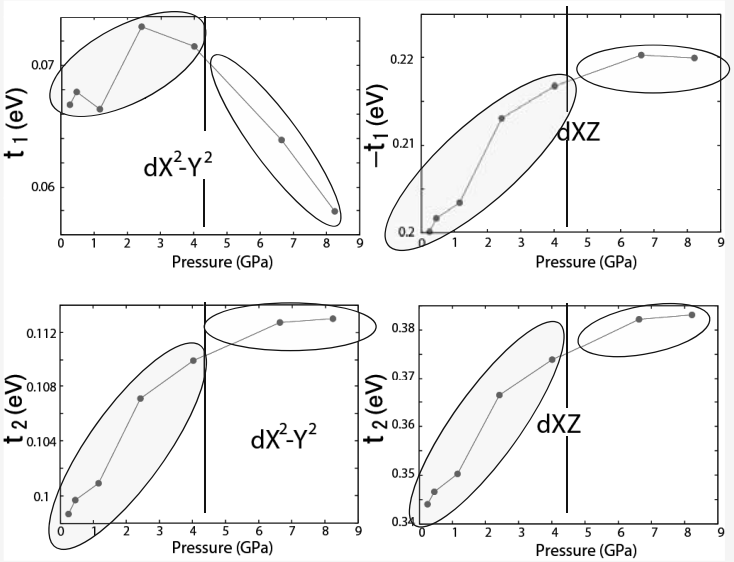


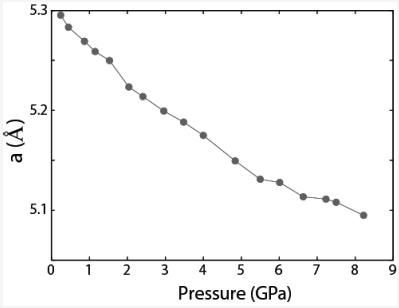
[S. Margadona et al., arXiv:0903.2204]

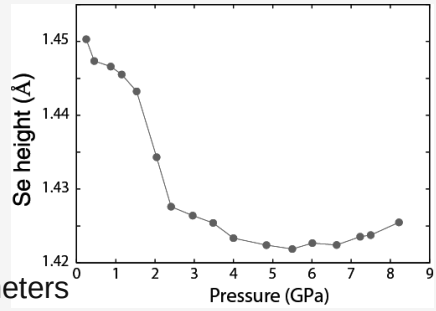
Pressure dependence of hopping parameters

謝辞：高野義彦、Prassides







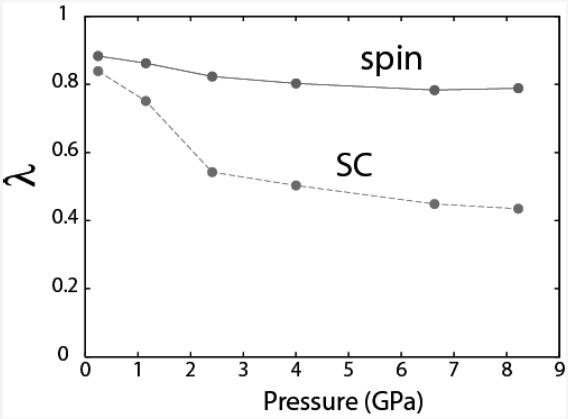


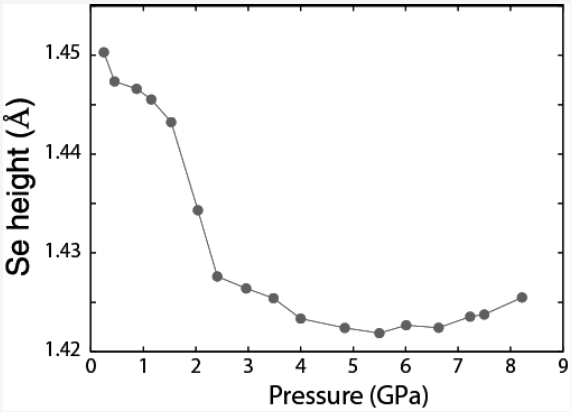
effect of Se height

effect of lattice constant

Hopping parameters correlate with the lattice parameters

Pressure vs. T_c





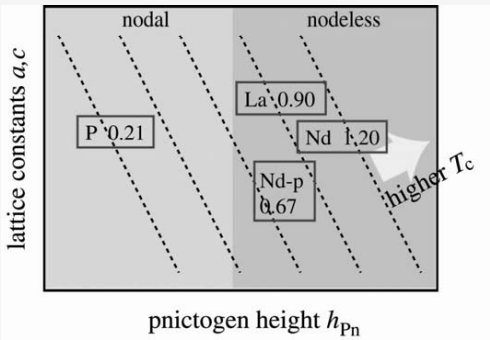
both magnetism and SC is degraded with pressure in RPA

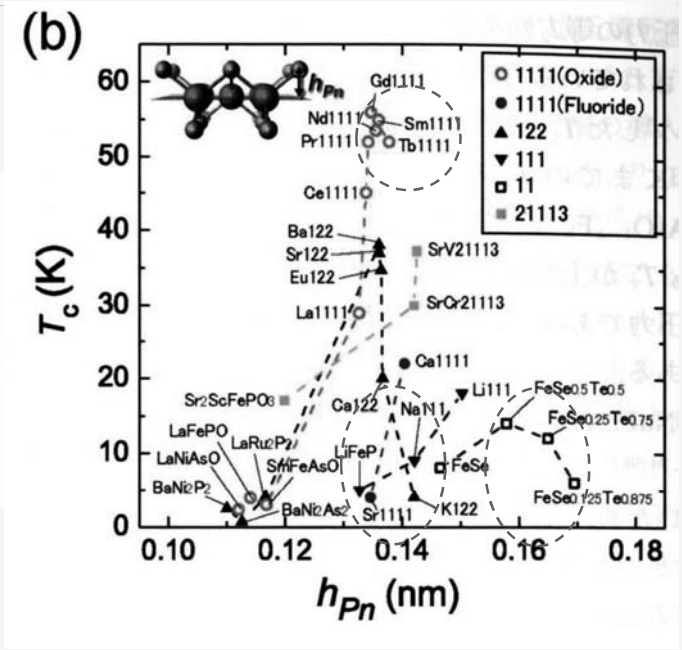
H. Usui, KK, M^2S

correlation effects that are not taken into RPA may be important

Miyake et al arXiv:0911.3705, *U*_11 > *U*_1111

構造とTcの相関：まとめ





細野秀雄ら、日本物理学会誌 **64** (2009) 807

Summary

- Spin fluctuation originating from disconnected Fermi surfaces as a possible glue for the pairing
- Electronic structure very sensitive to the pnictogen height, affects pairing symmetry and Tc
- All five Fermi surfaces are fully gapped in the high Tc state despite the sign change due to the disconnectivity of the Fermi surface
- Strong possibility of gapless pairing (either nodal s-wave or d-wave, horizontal nodes?) in P systems

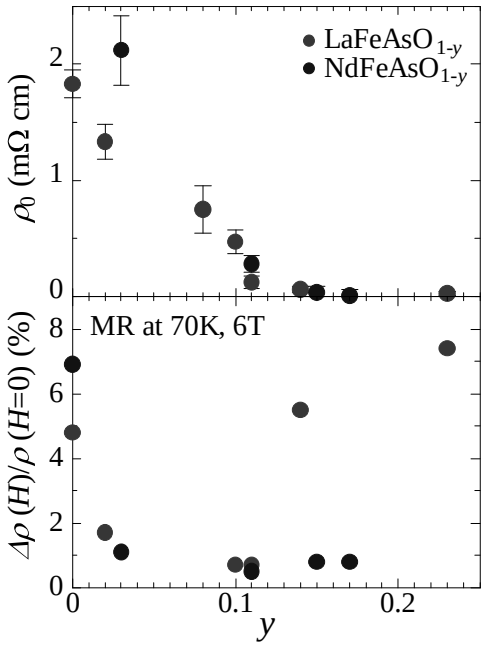
3. 鉄系高温超伝導体の光学スペクトルと電気抵抗率

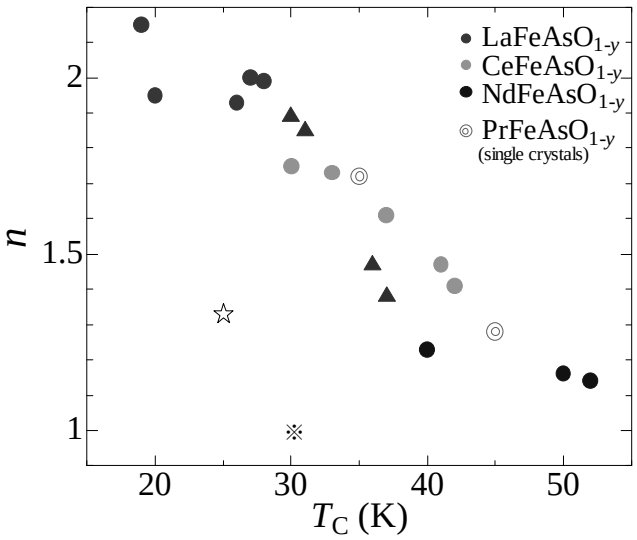
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 [A]、JST−TRIP[B], G−COE[C]
石田茂之 [A,C]、中島正道 [A,B]、内田慎一 [A]

Optical Spectra and Resistivity of Iron-Based High-Tc Superconductors

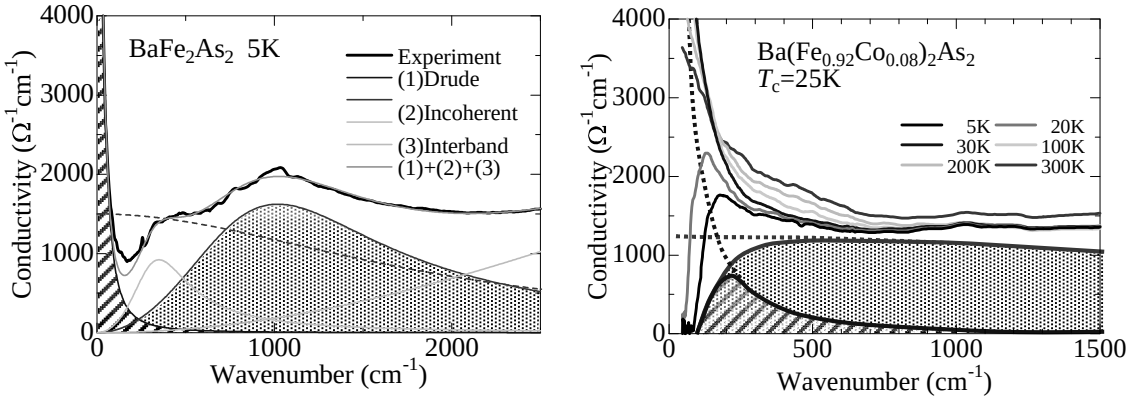
Dept. of Physics, Univ. of Tokyo[A], JST-TRIP[B], G-COE[C]
S. Ishida[A,C], M. Nakajima[A,B], and S. Uchida[A]

銅酸化物高温超伝導体の研究は、よく制御された単結晶試料ができるようになり、ARPES,STS や中性子散乱のような先進スペクトロスコピーが現在中心的役割を果たしている。鉄系超伝導体は未だそこまで進んでいないため、光学スペクトルや電気抵抗率測定のような基本的な物性測定有用な情報を提供するとともに、将来の先進スペクトロスコピーへの指針と制約を与えるであろう。下に示すのは $LnFeAsO_{1-y}$ (Ln: La & Nd)に対する電気抵抗率の温度とドーピング(y)依存性の測定から得られた結果である。ドーピングに対して敏感に変化するのは残留抵抗率ρ_0（弾性散乱）である。一方、電気抵抗率の温度依存性（非弾性散乱）は、その冪 n ($\rho \sim T^n$)が T_c と相関していることがわかる。弾性散乱と非弾性散乱のメカニズム、そして両者の関係を産総研との共同研究で行われた[1] 輸送現象、光学測定の結果から議論する。

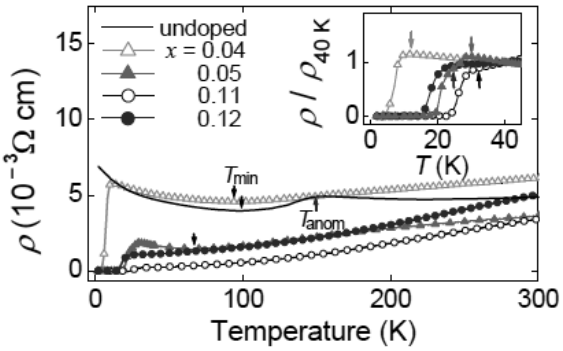




光学スペクトルは、主として、$Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ 系の磁気・構造相転移と超伝導転移に伴うエネルギーギャップを調べる手段として用いた。正常状態の低エネルギー光学伝導度スペクトルは，大雑把には、①幅の狭い Drude と②幅の広い Drude の 2 つの成分からなる。x=0 の磁気秩序状態(T_N=140K)では②に 0.1eV の大きなギャップが開き、①は幅を更に狭くしてそのまま残る。巨大な磁気的ギャップ($2\Delta_m/k_BT_N$~10)は、スピンの遍歴よりも局在描像を支持するように見える。x=0.11 の超伝導状態(T_c=25K)では両者に同じ大きさのギャップが開く。超伝導ギャップの特徴は、(1) s 波的;ギャップ端以下のエネルギー領域の重みがほぼ失われている。失われた重みに対応する磁場侵入長は他の手法による測定値と良い一致を示す。(2) ギャップの大きさは T_c にスケールしている。従って、超伝導光学応答はまともである。

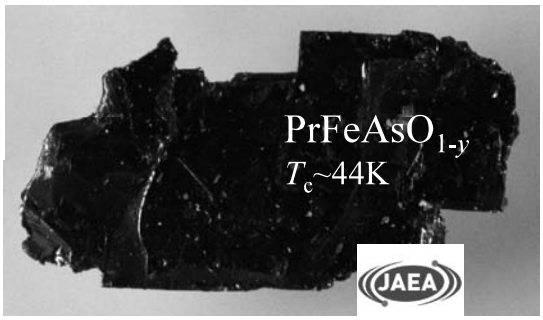


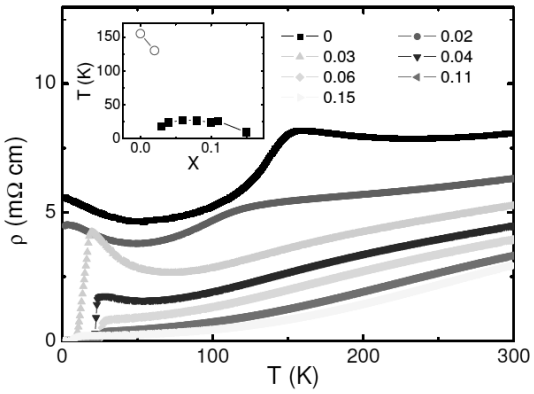
[1] in collaboration with H. Eisaki, K. Miyazawa, P.M. Shirage, Y. Yoshida, K. Kihou, C.H. Lee, H. Kito, T. Ito, Y. Tomioka, and A. Iyo



Y. Kamihara

H. Hosono



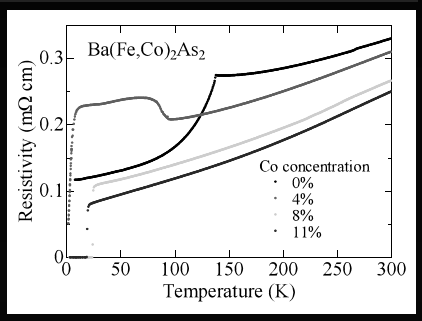


M. Ishikado

S. Shamoto

Charge Dynamics in Iron-Pnictides

Studied by Optical Spectroscopy on $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$



SCHOOL OF SCIENCE THE UNIVERSITY OF TOKYO

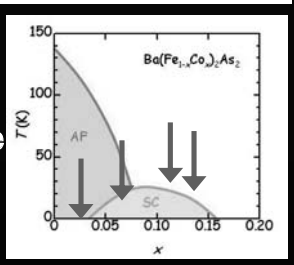
M. Nakajima,

S. Ishida, K. M. Kojima, S. Uchida

AIST

Y. Tomioka, T. Ito, K. Kihou, C. H. Lee

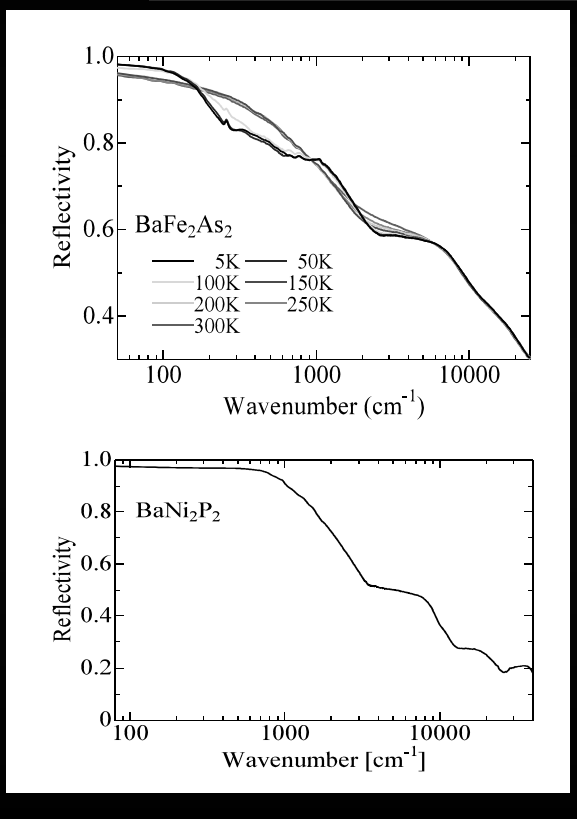
H. Kito, A. Iyo, H. Eisaki

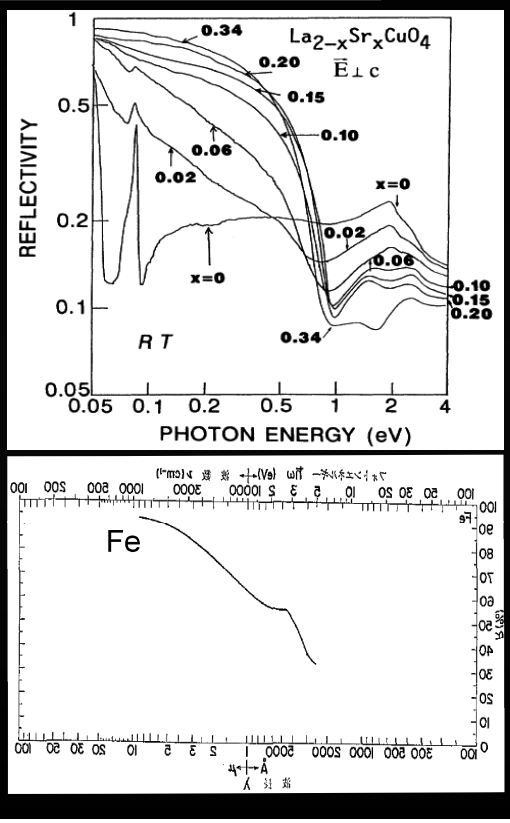


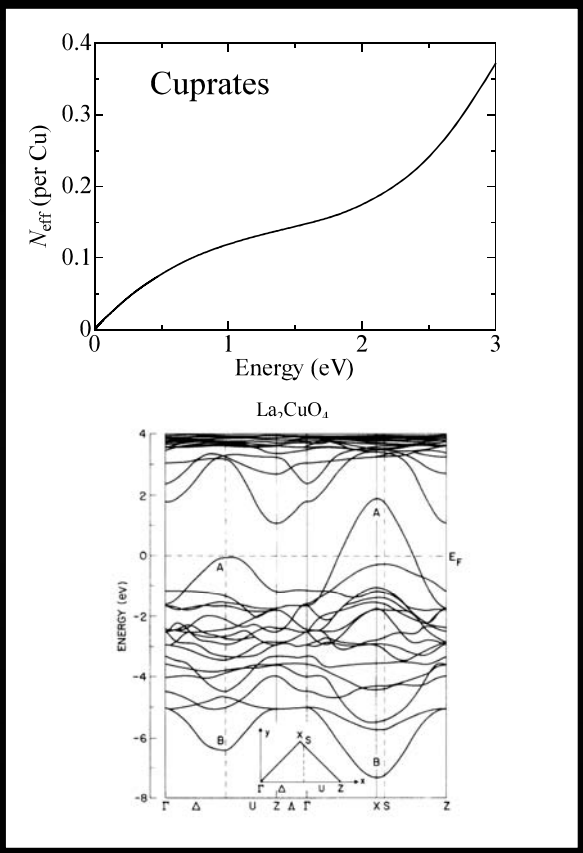
supported by

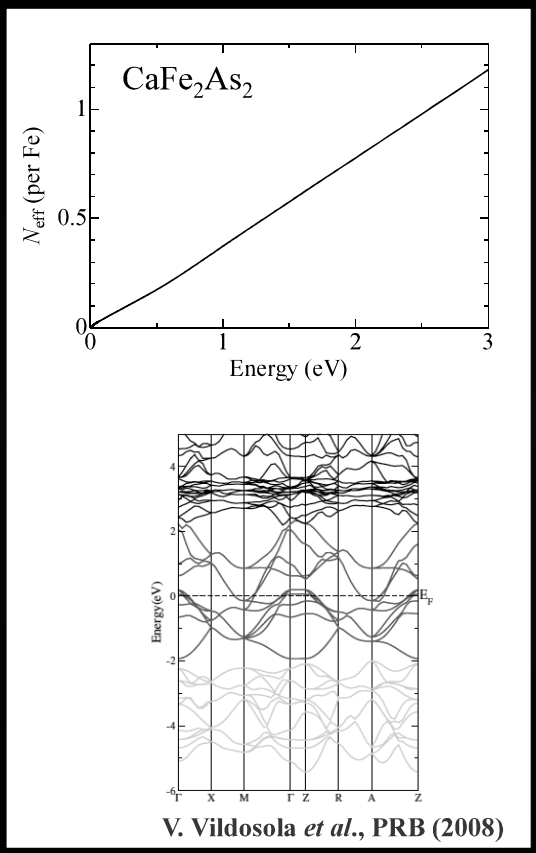
ITRHP

Reflectivity spectrum of iron-pnictides



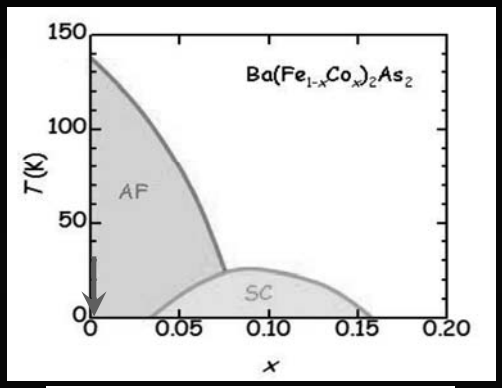


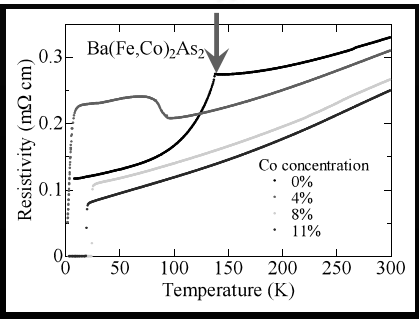




V. Vildosola *et al.*, PRB (2008)

Charge Dynamics in Iron-Pnictides
Studied by Optical Spectroscopy on $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$





SCHOOL OF SCIENCE THE UNIVERSITY OF TOKYO

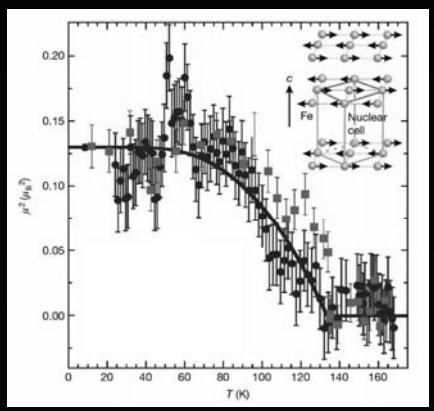
AIST

supported by

TRIP

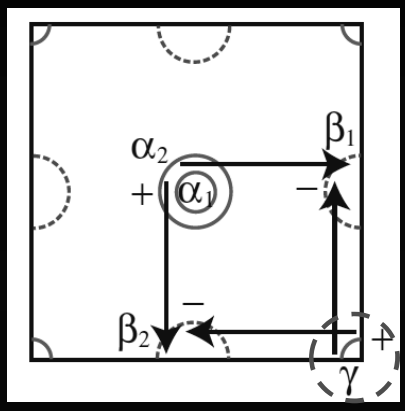
Localized vs Itinerant Spins

Collinear AF

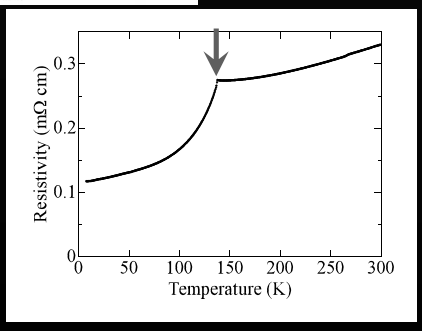


C. de la Cruz *et al.*, Nature 453, 899 (2008).

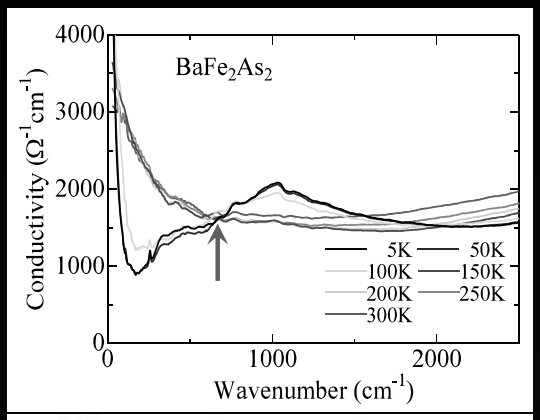
Nesting : multiple spin fluctuation modes

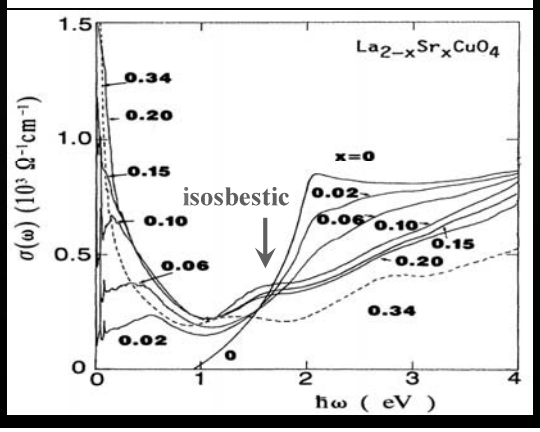


Kuroki, PRB 79, 224511 (2009)



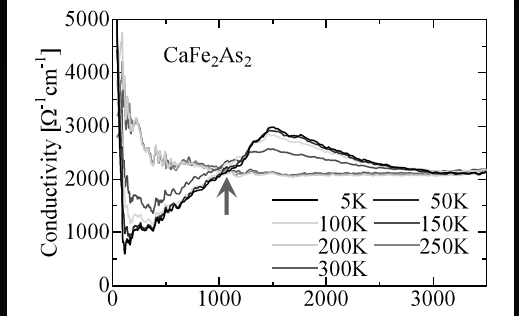
Temperature evolution of the optical conductivity spectrum

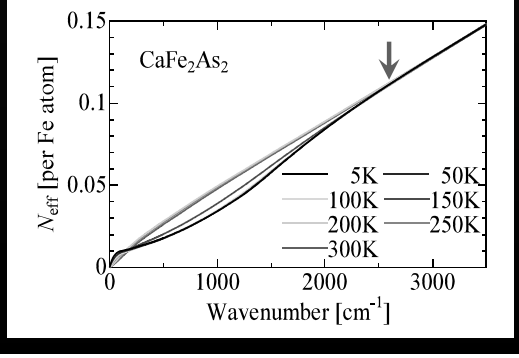




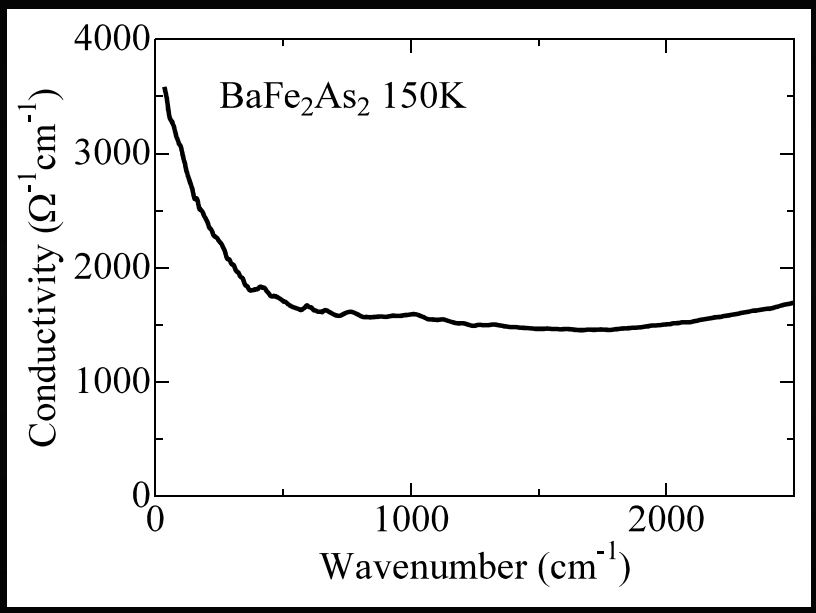
Large gap energy scale

$2E_0 / k_B T_N > 10$

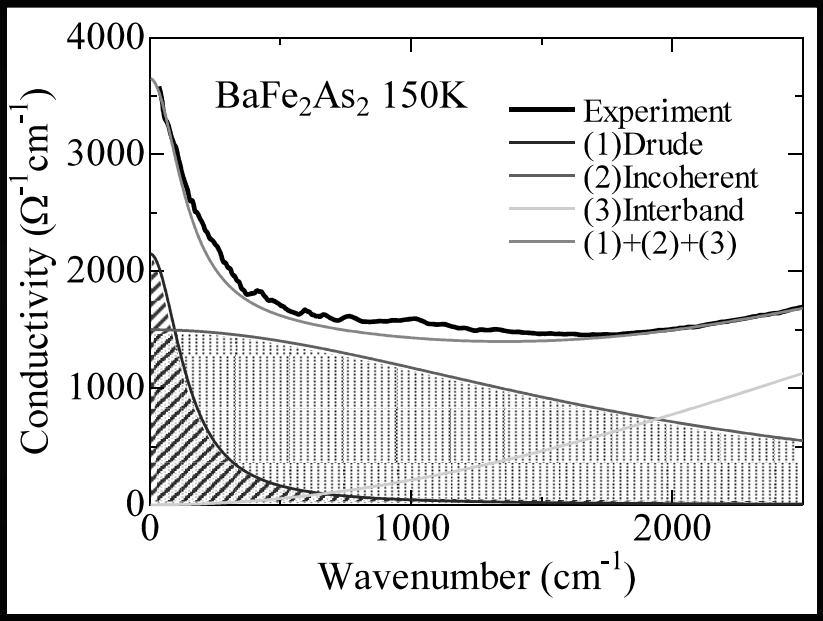




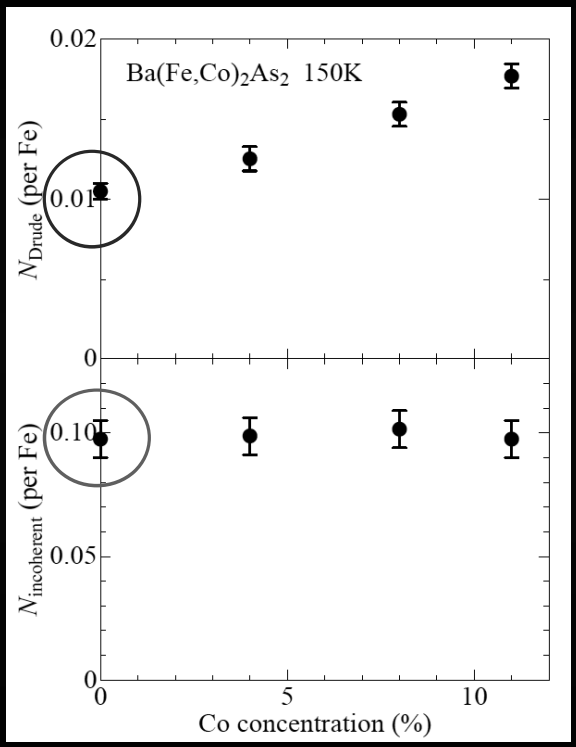
Low-energy optical conductivity spectrum of a parent compound



Low-energy optical conductivity spectrum is decomposed into 'two' components

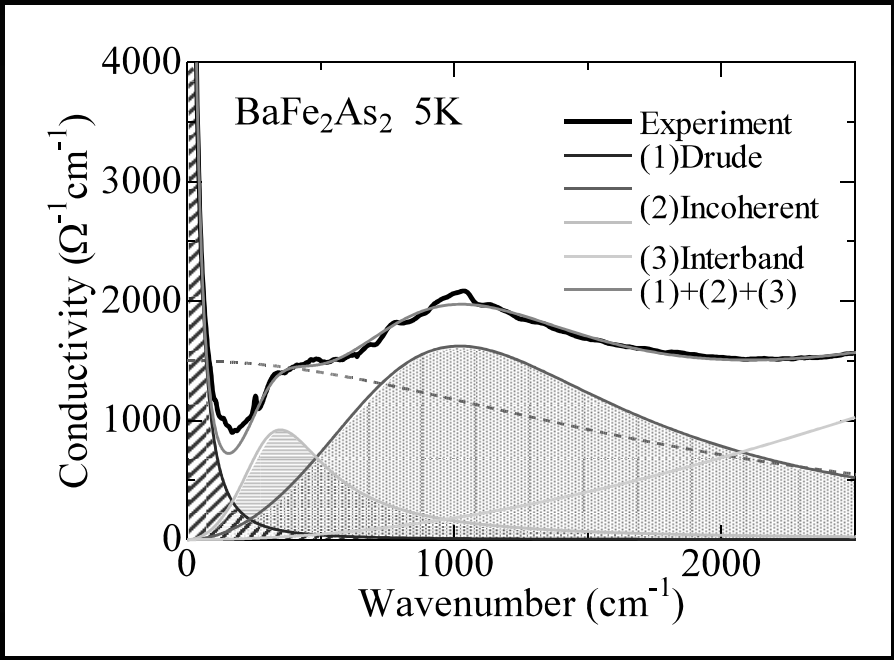


Coherent (Drude) vs Incoherent Weight



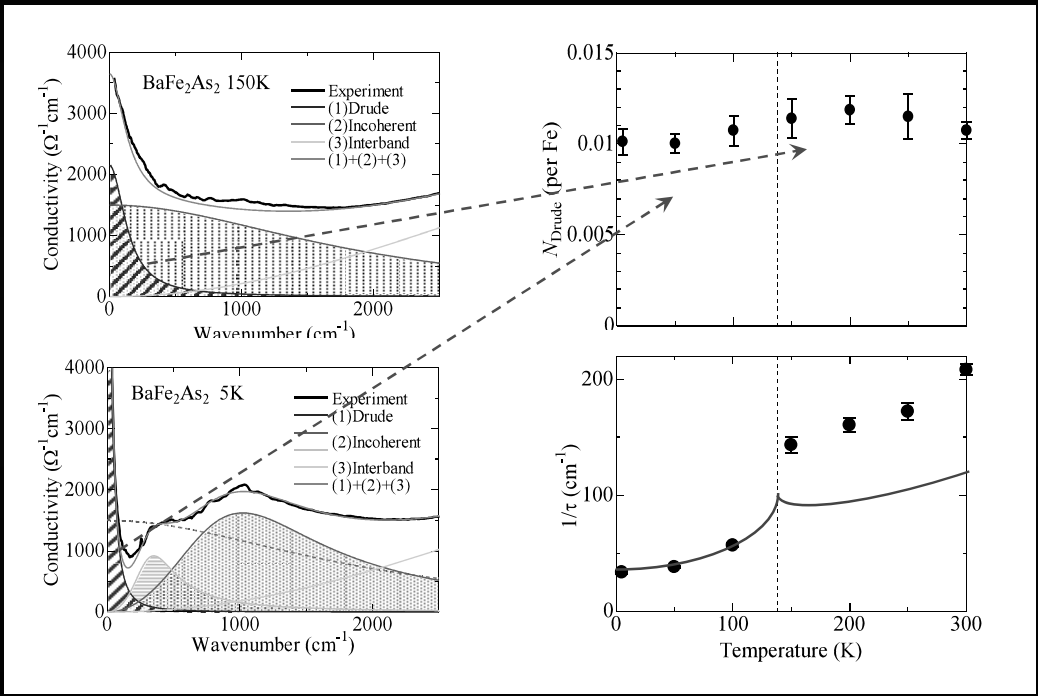
Decomposition of the spectrum below T_N

A gap opens in the incoherent component



T dependence of the spectral weight: Drude weight

The weight of the Drude term is unchanged with temperature.

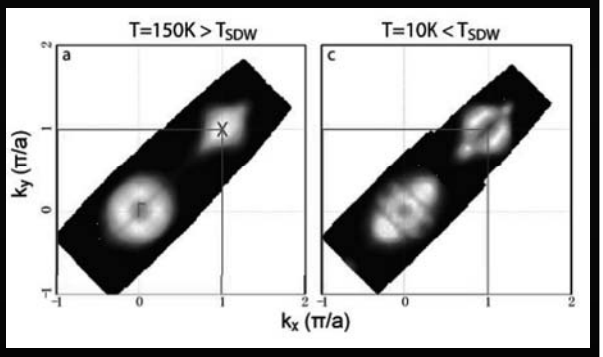


Reconstruction of Fermi surfaces below T_N

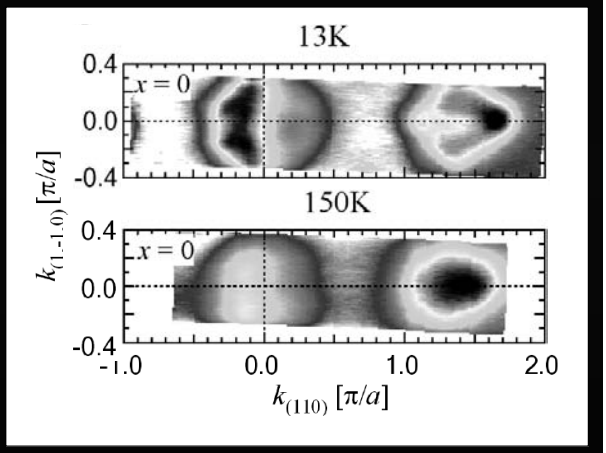
Optical spectrum near E_F :

- Drude weight (~10%) is unchanged.
- A gap opens in the Incoherent component (~90%).

cf. ARPES



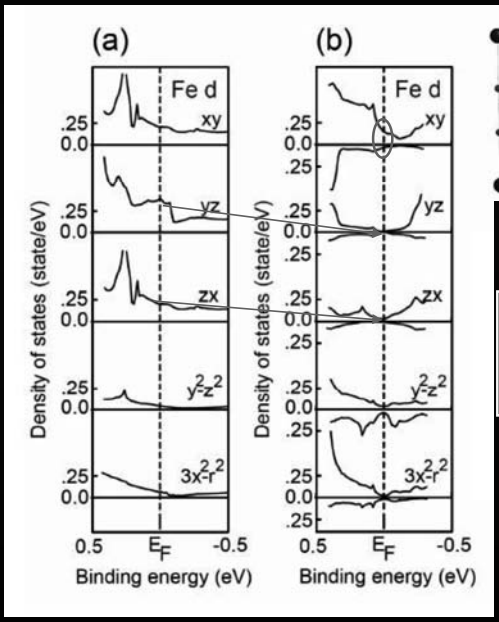
M. Yi *et al.*, arXiv:0909.0831

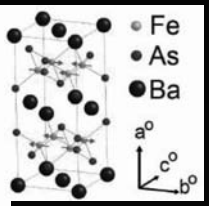


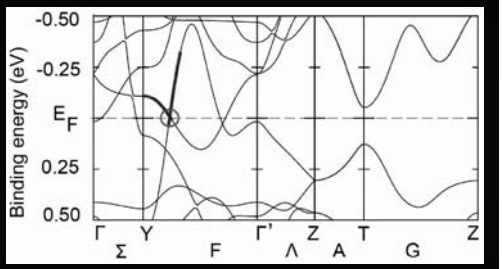
C. Liu, T. Kondo, P. Canfield, A. Kaminski *et al.*, arXiv:0910.1799

Reconstruction of Fermi surfaces below T_N

Laser-ARPES

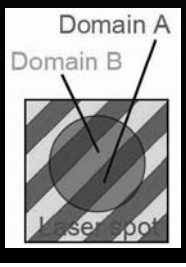






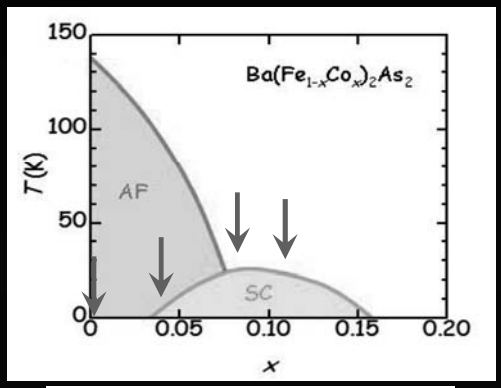
FS is composed of a single Fe orbital: Orbital selective FS

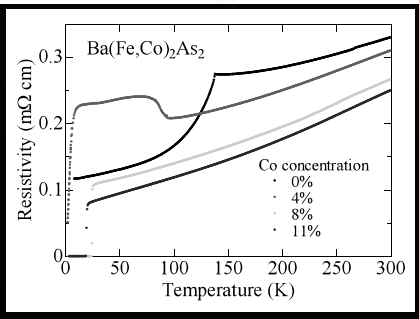
T. Shimojima *et al*, arXiv:0904.1632



Twinned domains in the orthorhombic structure; typical domain size ~ 1μm

Charge Dynamics in Iron-Pnictides
Studied by Optical Spectroscopy on $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$





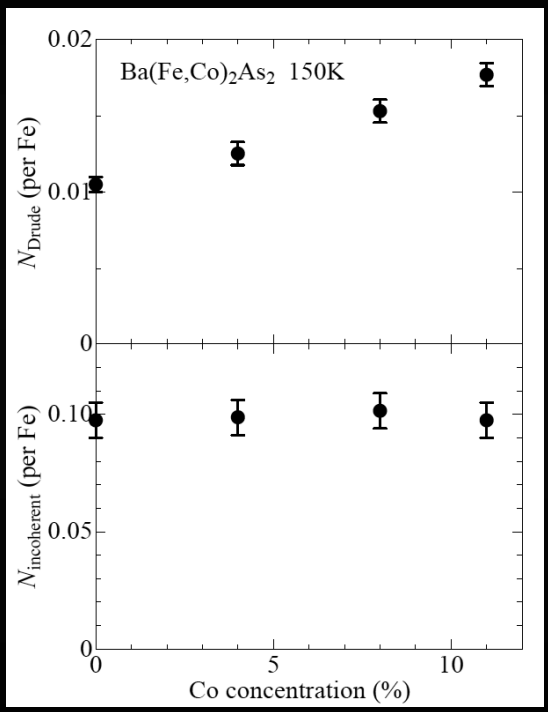
SCHOOL OF SCIENCE THE UNIVERSITY OF TOKYO

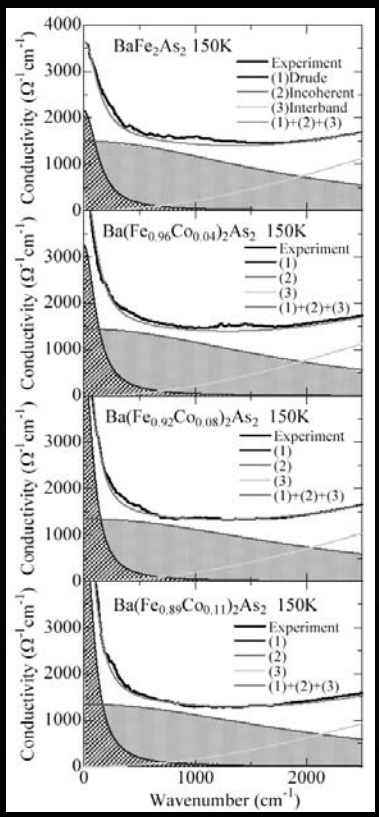
AIST

supported by

TRIP

'Doping' dependence of the Drude and incoherent spectral weight





Charge transport in oxygen-deficiency controlled iron-pnictide superconductor $LnFeAsO_{1-y}$

S. Ishida, M. Nakajima, K. M. Kojima, S. Uchida

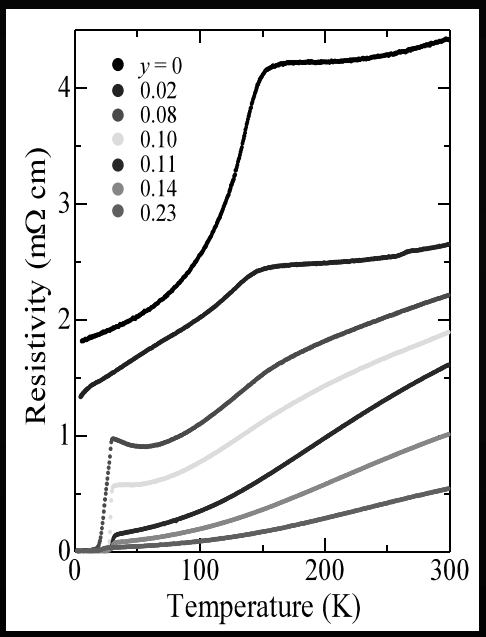
T. Ito, Y. Tomioka, H. Eisaki, A. Iyo,
K. Miyazawa, H. Kito, H. Kihou, C. H. Lee

M. Ishikado, S. Shamoto

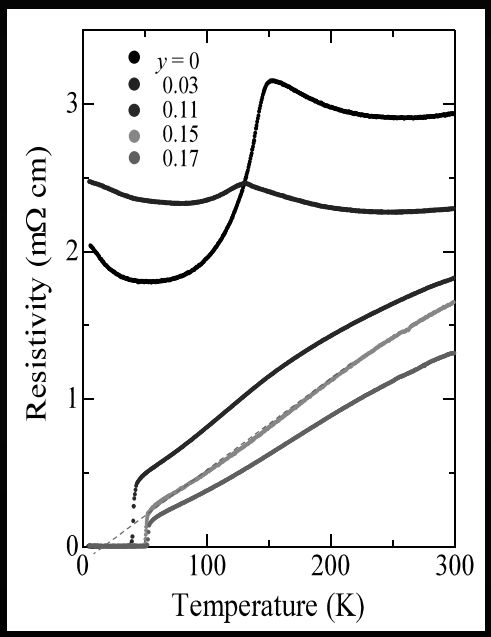
supported by

"Doping" dependence of ρ_0 in $LnFeAsO_{1-y}$ (Ln = La, Nd)

$LaFeAsO_{1-y}$



$NdFeAsO_{1-y}$



Evolution of the (in-plane) resistivity with T and x (doping) in the cuprates and Fe-pnictides

S. Uchida (Univ. of Tokyo)

Carrier Scattering:

$$\rho(T, x) = \rho_0 + \rho_\varepsilon(T)$$

x ↑ doping; ρ_0: residual resistivity

$$1/\tau(T, x) = 1/\tau_0(x) + 1/\tau_\varepsilon(T, x)$$

$1/\tau_0(x)$: elastic scattering → Scattering centers: impurities, defects, and their lattice-sites

$1/\tau_\varepsilon(T, x)$: inelastic scattering → El-el coupling, el-boson couping: $1/\tau_\varepsilon \sim 2\pi\lambda(k_B T)^\alpha$

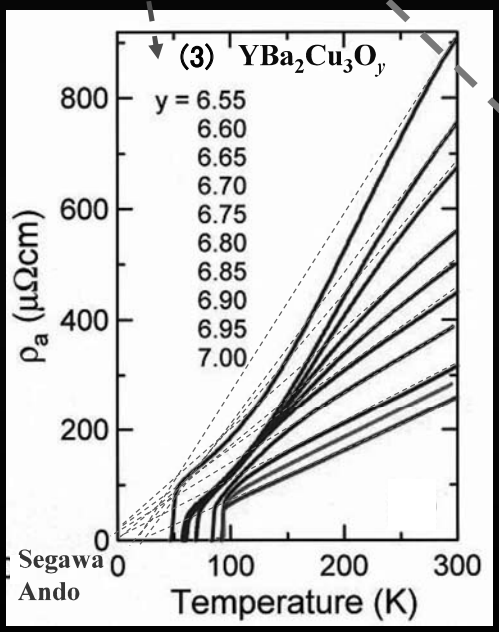
$$\rho(T, x) = \rho_0(x) + \rho_\varepsilon(T)$$

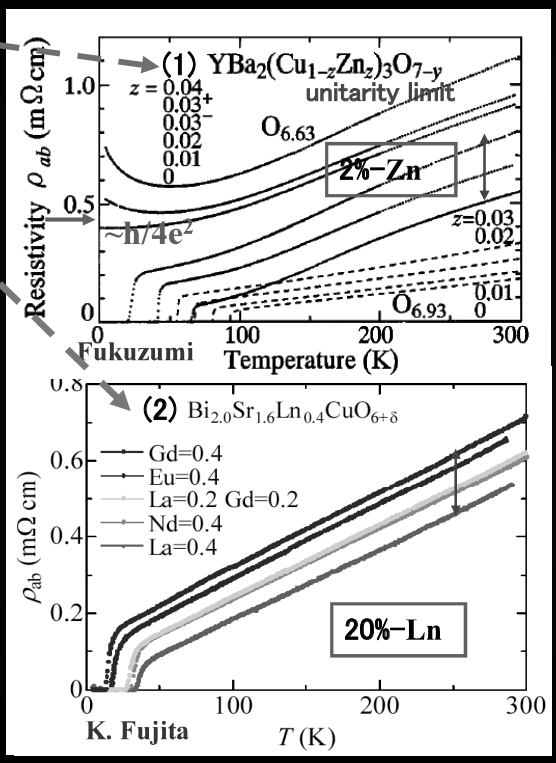
(1) in-plane disorder (Zn)

(2) apical-O block

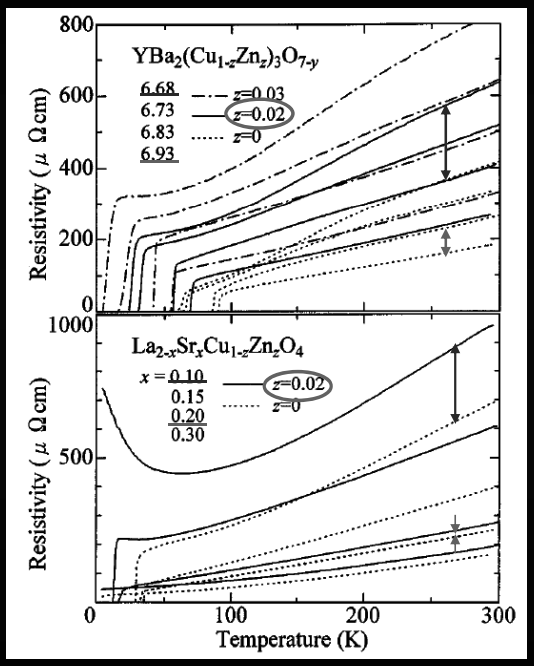
(3) charge reservoir block

In the case of the cuprates



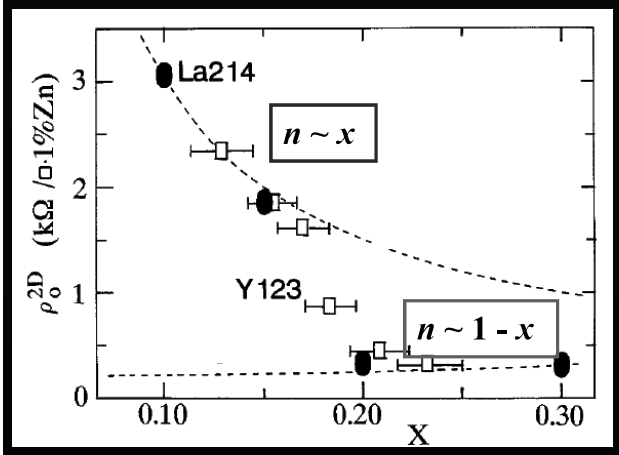


$\rho(T,x) = \rho_0 + \rho_\varepsilon(T)$: ρ_0 in Zn-doped cuprates

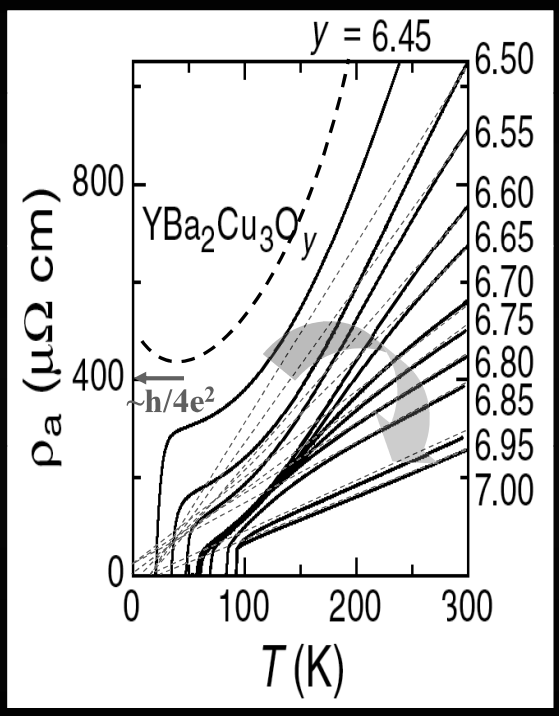


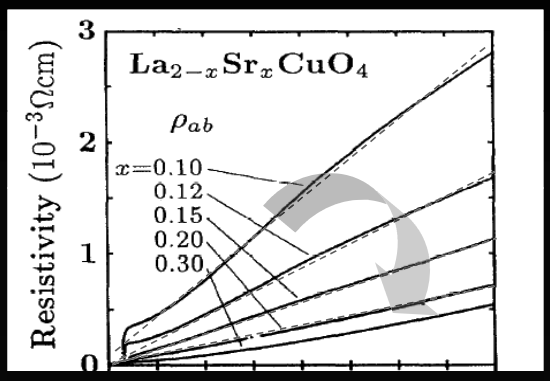
$$\rho_0 = 4(\hbar/e^2)(n_i/n)\sin^2\delta_0$$

$\delta_0 = \pi/2$: unitarity limit



$\rho(T,x) = \rho_0(x) + \rho_\varepsilon(T)$

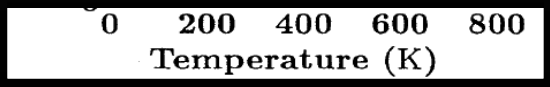




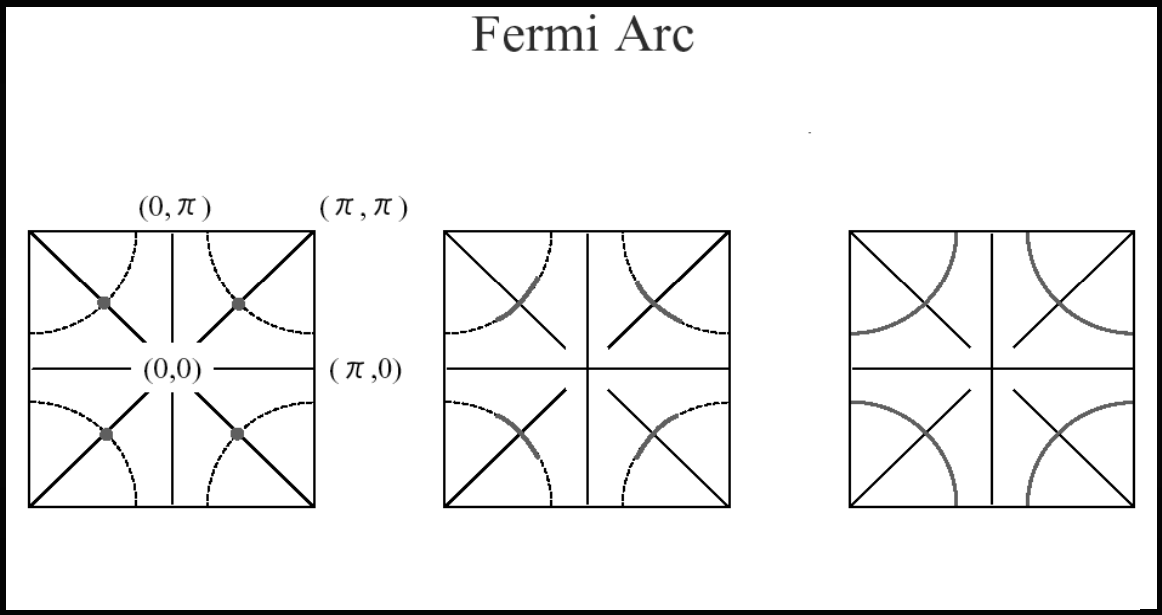
$$\rho(T,x) = \rho_0(x) + \Lambda(x)\, T^{\alpha}/\, n(x)$$

$\alpha \sim 1$

T-linear coefficient: $[\Lambda(x)/n(x)]$



Evolution of Fermi Surface with Doping in the Cuprates



Charge transport in oxygen-deficiency controlled iron-pnictide superconductor $LnFeAsO_{1-y}$

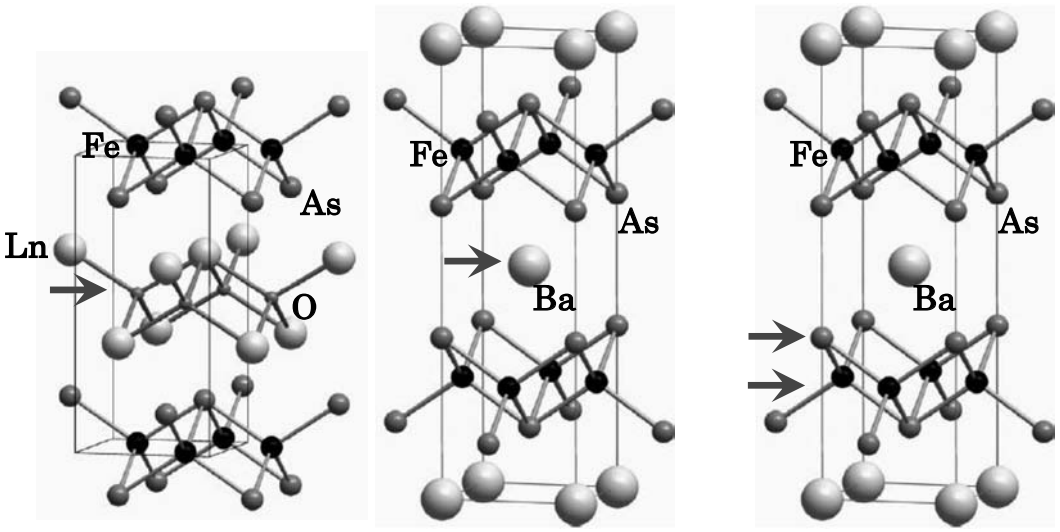
S. Ishida, M. Nakajima, K. M. Kojima, S. Uchida

T. Ito, Y. Tomioka, H. Eisaki, A. Iyo,
K. Miyazawa, H. Kito, H. Kihou, C. H. Lee

M. Ishikado, S. Shamoto

supported by

FeAs superconductors



(1) LnFeAsO(F) T_c^{MAX}=56K

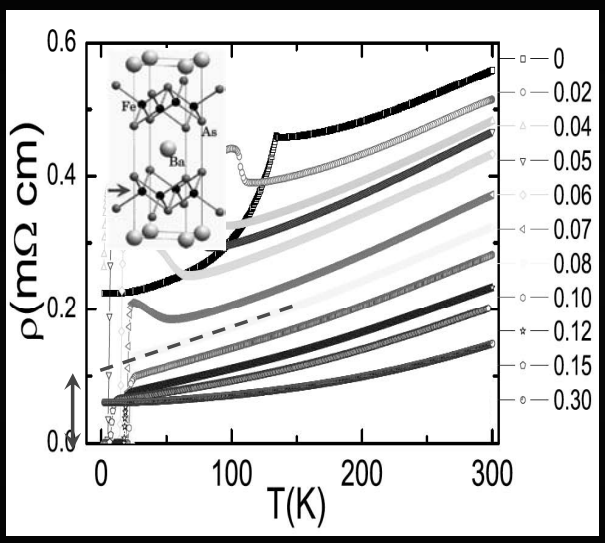
(2) Ba(K)Fe_2As_2 T_c^{MAX}=37K

(3)$BaFe_2(As,P)_2$, T_c^{MAX}=30K

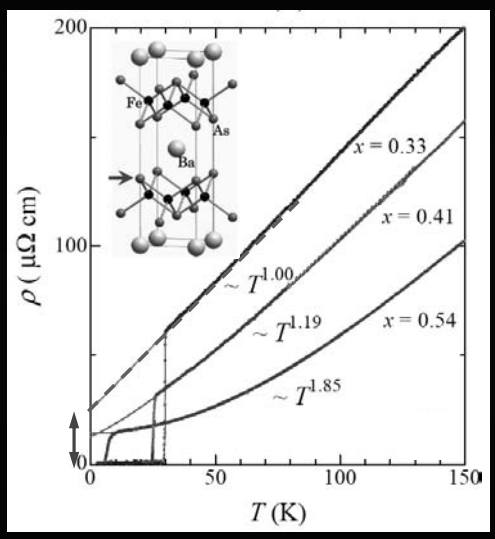
(4)$Ba(Fe,Co)_2As_2$, T_c^{MAX}=25K

ρ_0 in "doped" pnictides with various dopant sites

$Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$



$BaFe_2As_{2-x}P_x$



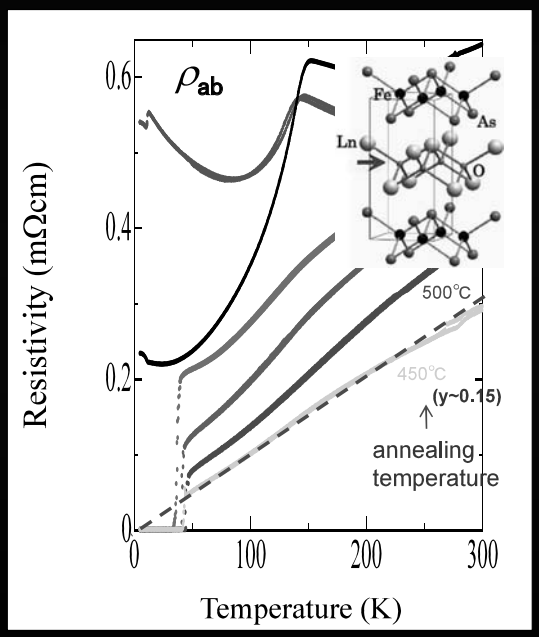
F. Rullier-Albenque, *et al.*, PRL (2009)

L. Feng, *et al.*, Phys. Rev. B 80, 140508R (2009)

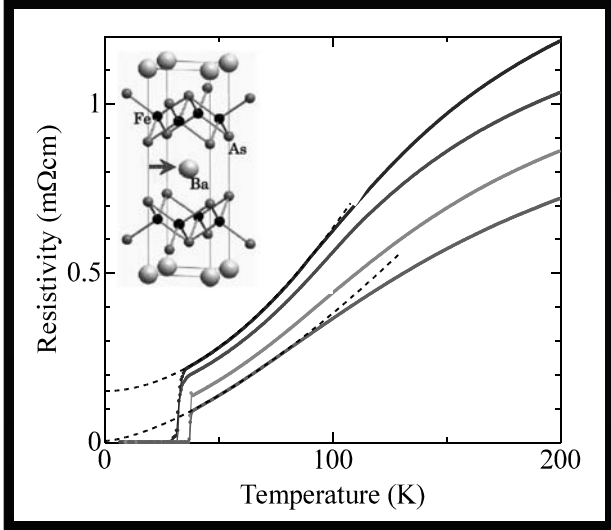
S. Kasahara, arXiv:0905.4427

ρ_0 in "doped" pnictides with various dopant sites

$PrFeAsO_{1-y}$
single crystals



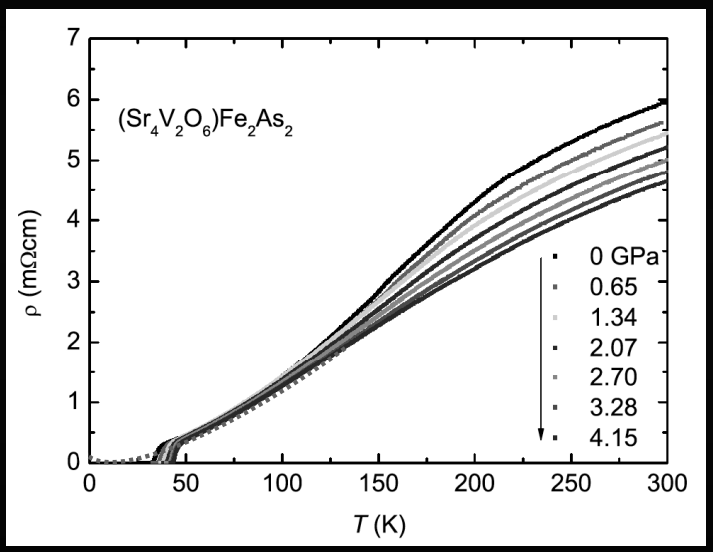
$Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$



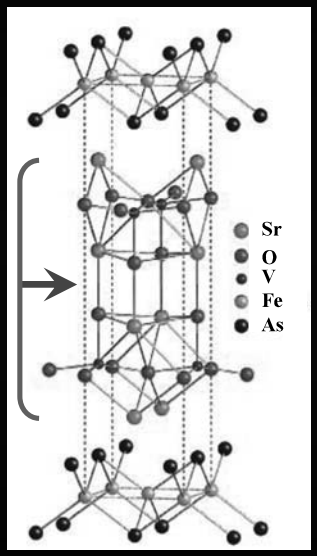
M. Ishikado *et al.*, unpublished

ρ_0 in "42622" system

$Sr_4V_2O_6Fe_2As_2$ T_c ~ **33-43K**



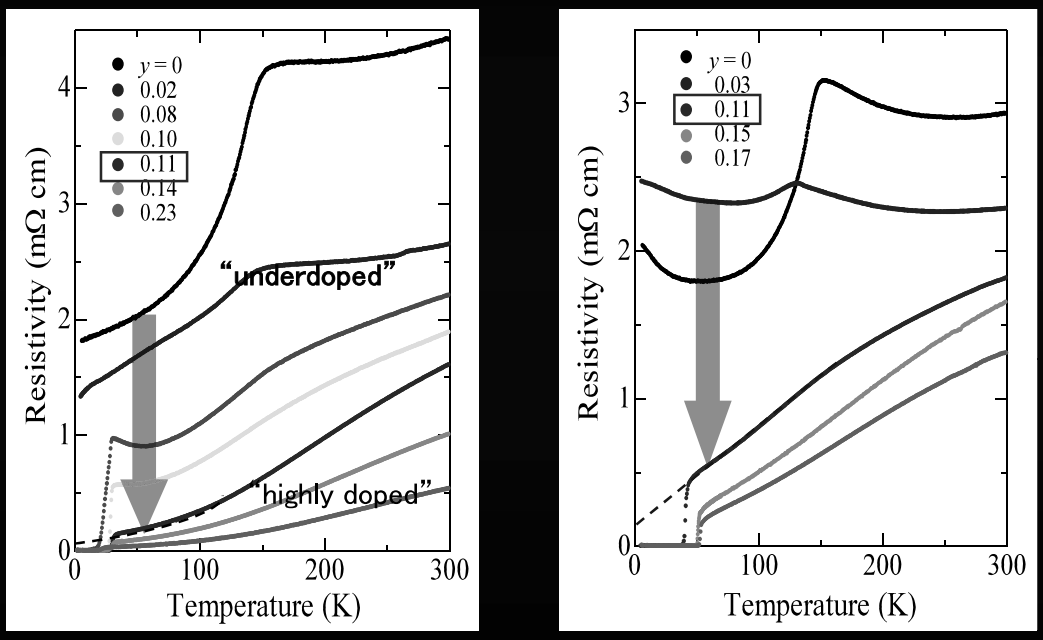
H. Kotegawa, arXiv:0908.1469



"42622"

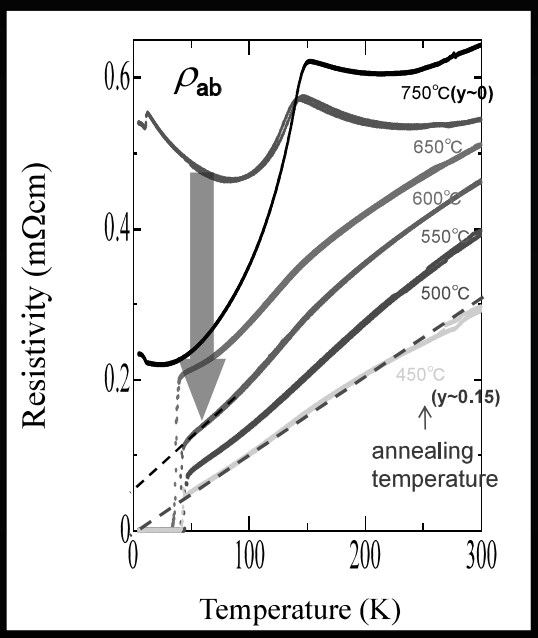
"Doping" dependence of ρ_0 in Ln $FeAsO_{1-y}$ (Ln = La, Nd)

$LaFeAsO_{1-y}$ **$NdFeAsO_{1-y}$**



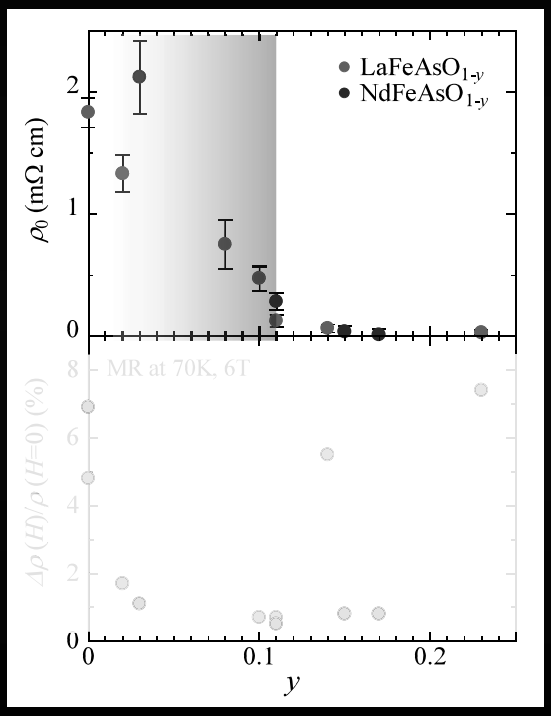
"Doping" dependence of ρ_0

$PrFeAsO_{1-y}$ **single crystals**



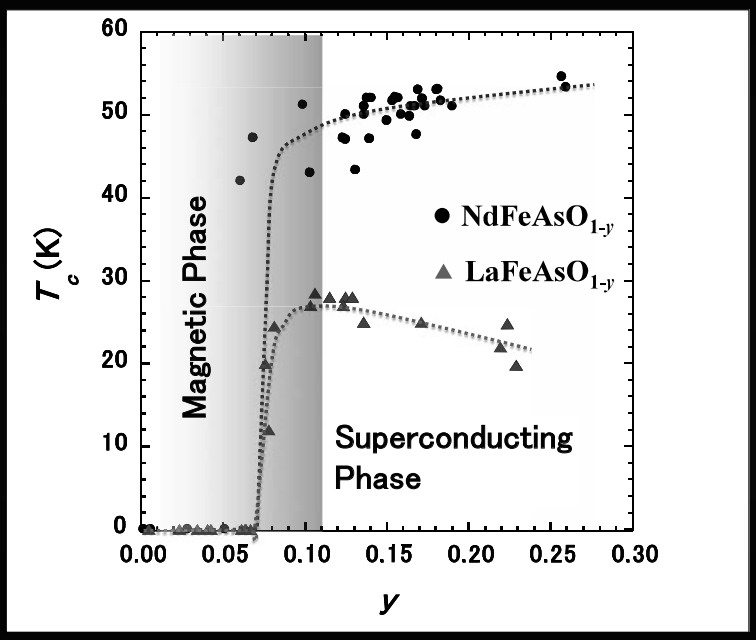
M. Ishikado *et al.*, unpublished

Residual resistivity ρ_0



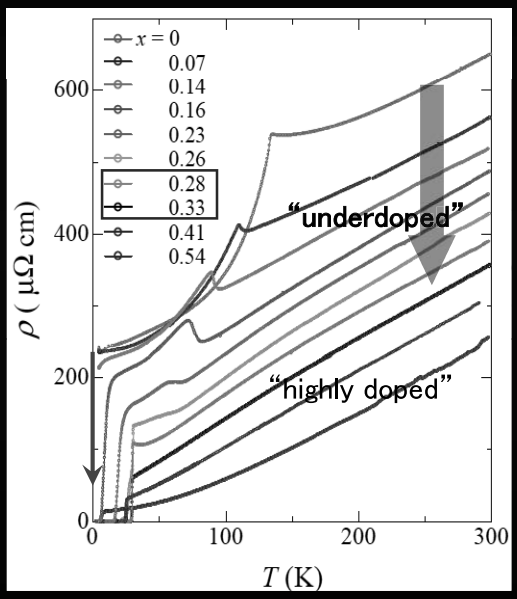
ρ_0 rapidly decreases in the "underdoped" regime.

T_c vs y diagram of $LnFeAsO_{1-y}$ (Ln = La, Nd)



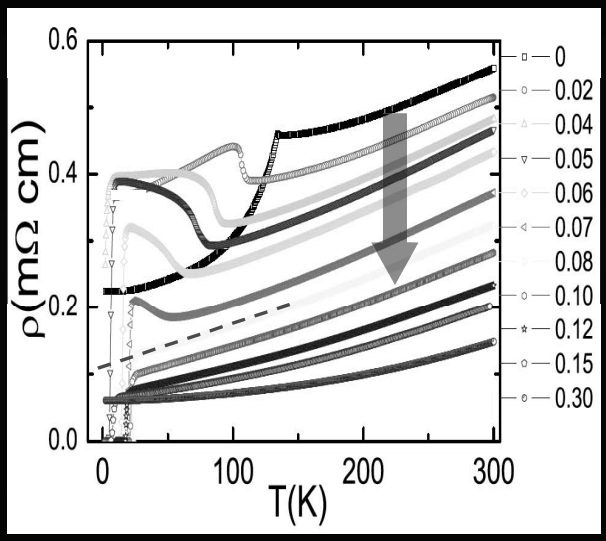
"Doping" dependence of ρ_0

$BaFe_2As_{2-x}P_x$



S. Kasahara, arXiv:0905.4427

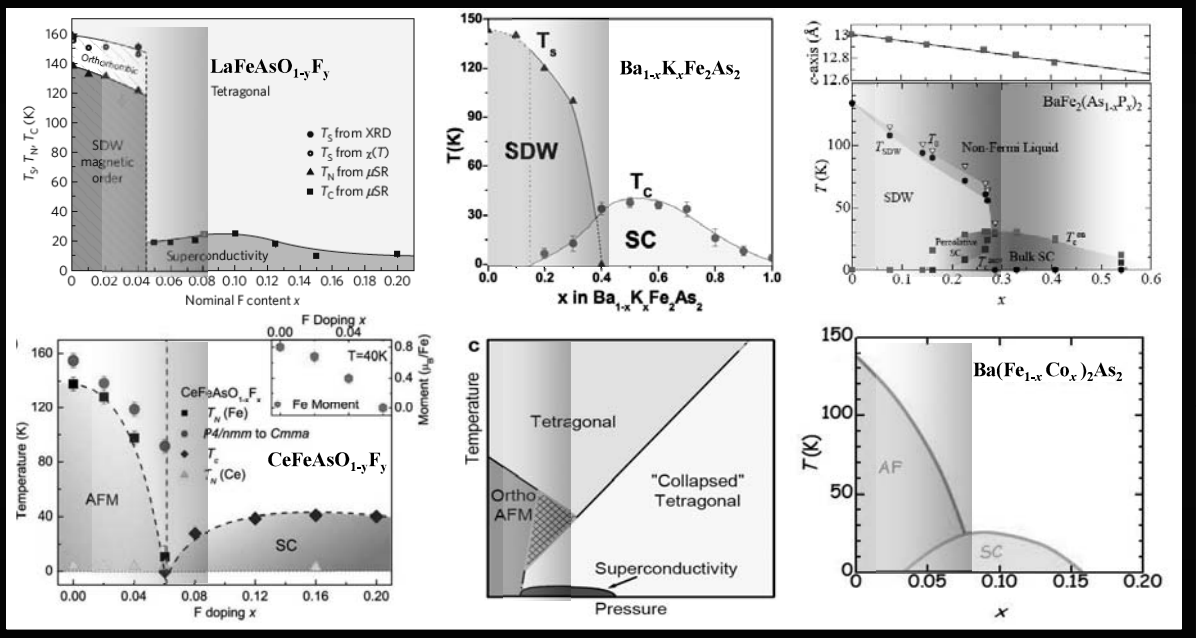
$Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$



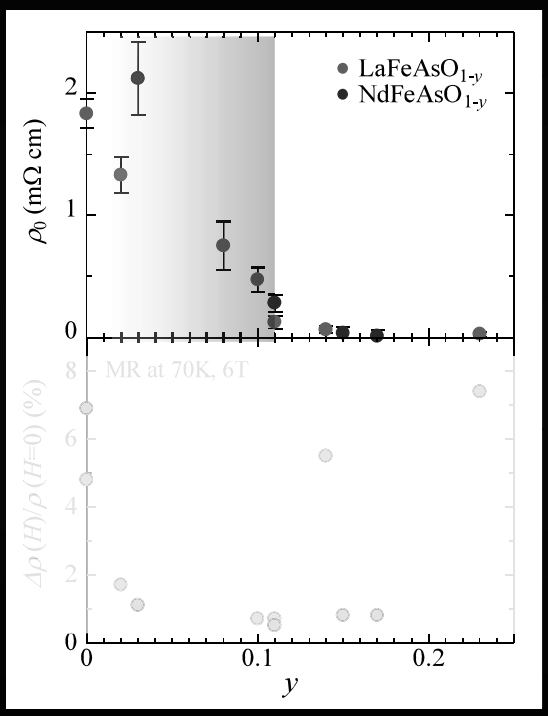
F. Rullier-Albenque, *et al.*, PRL (2009)

L. Feng, *et al.*, Phys. Rev. B 80, 140508R (2009)

Phase diagrams of various Fe-Arsenides



"Doping" dependence of residual resistivity ρ_0



ρ_0 rapidly decreases in the "underdoped" regime.

Lattice disorder (y) increases.

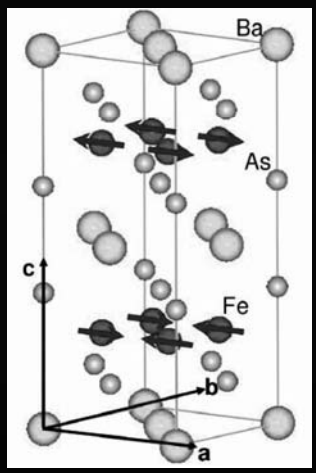
No evidence for a change of FS size / topology

Suppression of long – /short – range magnetic order at y～0.11.

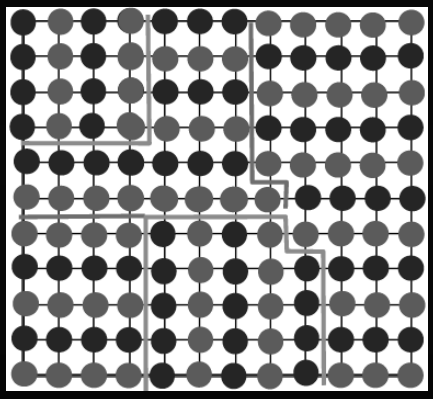
"static magnetic structure"

A possible source of ρ_0

"stripe" magnetic order (orthorhombic)



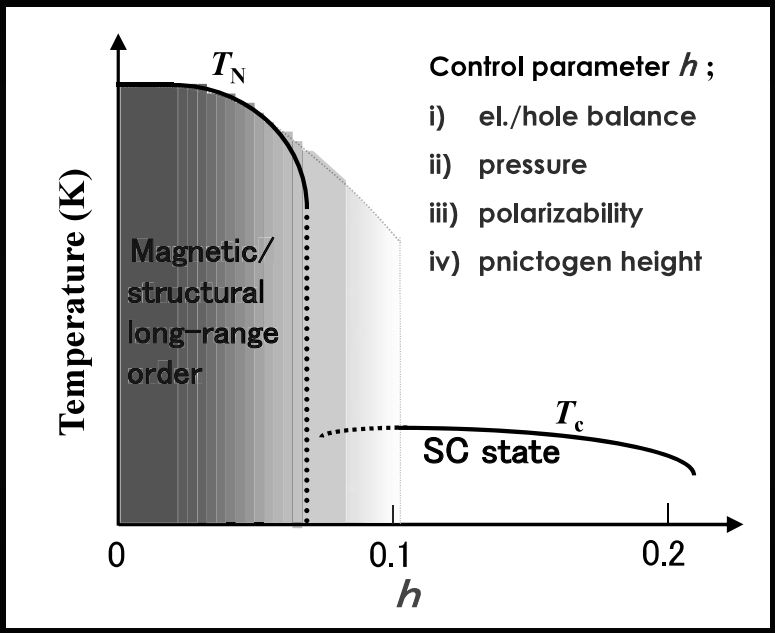
magnetic antiphase and/or twin boundaries



I.I. Mazin & M.D. Johannes, Nature Phys. 5, 141 (2009).

"Underdoped" regime of FeAs compounds

Tuning SC by suppressing AF



Charge transport in oxygen-deficiency controlled iron-pnictide superconductor $LnFeAsO_{1-y}$

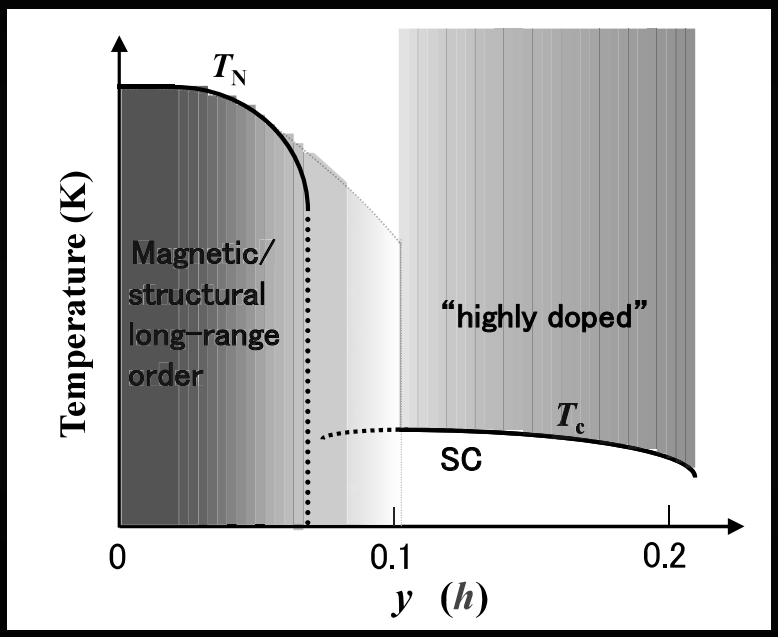
S. Ishida, M. Nakajima, K. M. Kojima, S. Uchida

T. Ito, Y. Tomioka, H. Eisaki, A. Iyo,
K. Miyazawa, H. Kito, H. Kihou, C. H. Lee

M. Ishikado, S. Shamoto

supported by

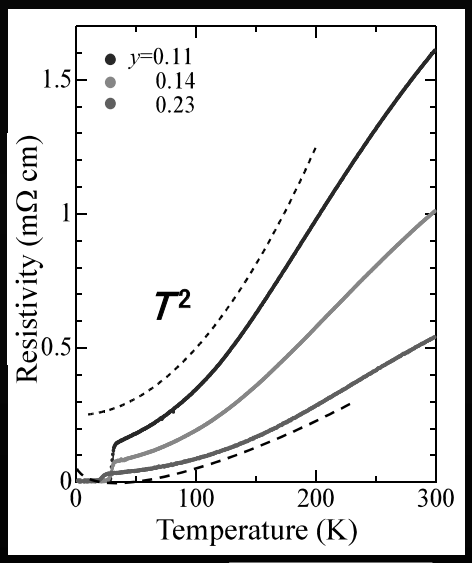
Charge transport in the 'highly doped' regime



$\rho(T, x) = \rho_0 + \rho_\varepsilon(T)$ in the optimally/highly "doped" regime

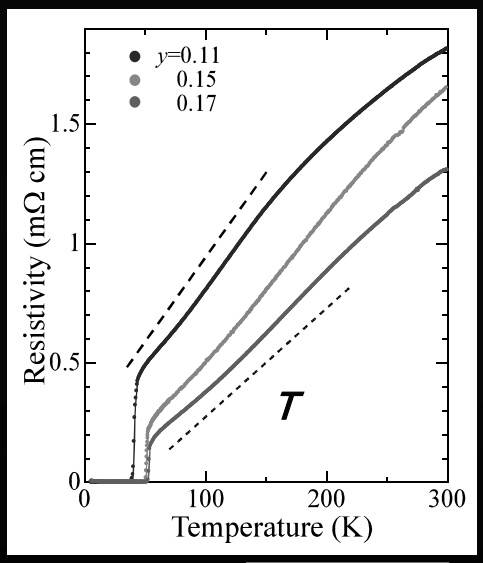
$\rho_0 \sim 0$, $\rho_\varepsilon(T) = \Lambda(x)\, T^{\alpha} / n(x)$; $n(x)$ dominates (?)

$LaFeAsO_{1-y}$



$T_c^{max} \sim$ 28K, $\rho(T) \sim T^2$

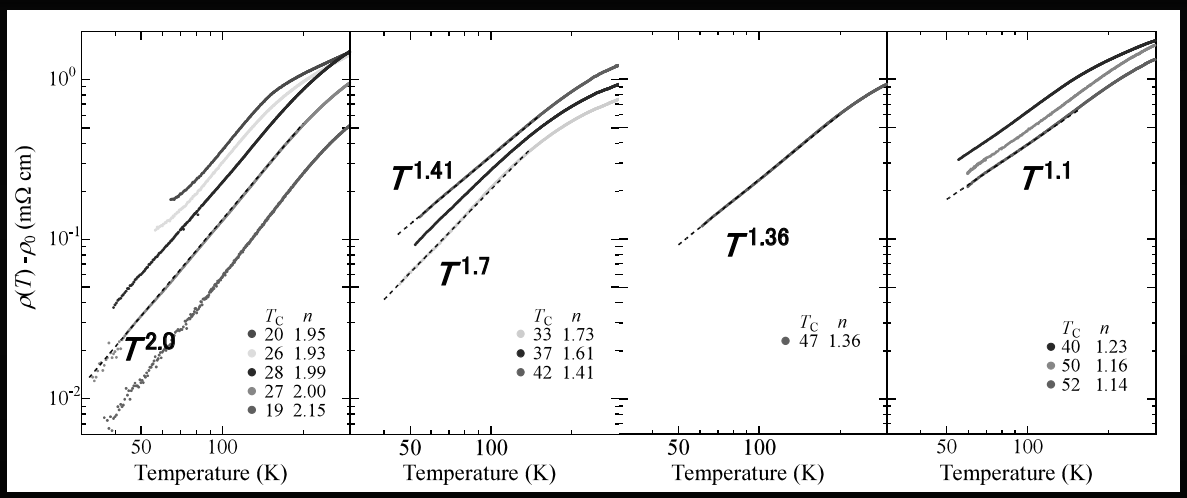
$NdFeAsO_{1-y}$



$T_c^{max} \sim$ 52K, $\rho(T) \sim T$

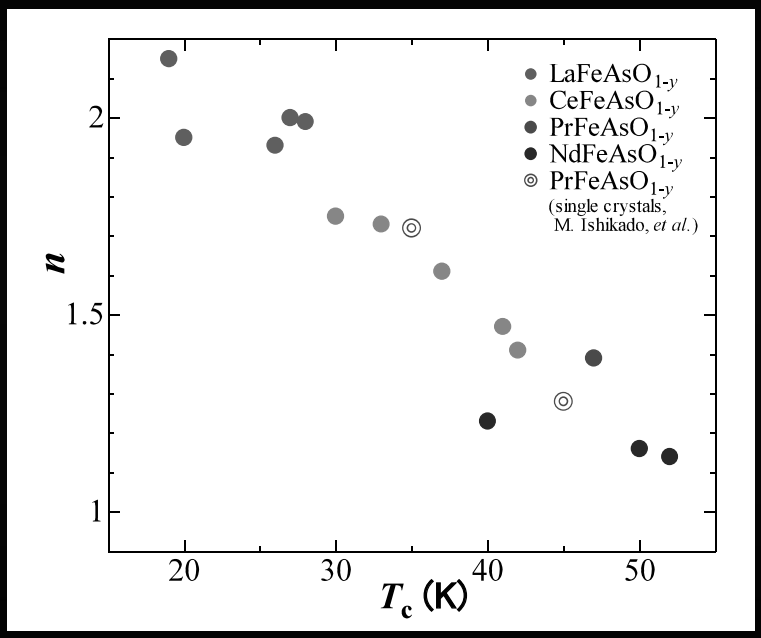
$\rho(T) \sim T^n$ in LnFeAsO$_{1-y}$

LaFeAsO$_{1-y}$ **CeFeAsO$_{1-y}$** **PrFeAsO$_{1-y}$** **NdFeAsO$_{1-y}$**



$n \sim 2$	$n \sim 1.7$–1.4	$n \sim 1.4$	$n \sim 1.1$
T_c =20–28K	T_c =33–42K	T_c^{max} =47K	T_c^{max} =52K

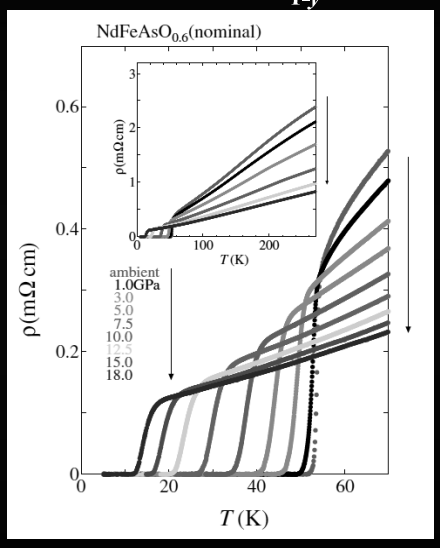
T_C vs n plot for LnFeAsO$_{1-y}$: A correlation between T_C & exponent n of $\rho(T) \sim T^n$



$\rho(T)$ crosses over from T^2 to T as T_c increases.

Test for other classes; applying pressure on Nd 1111

$NdFeAsO_{1-y}$

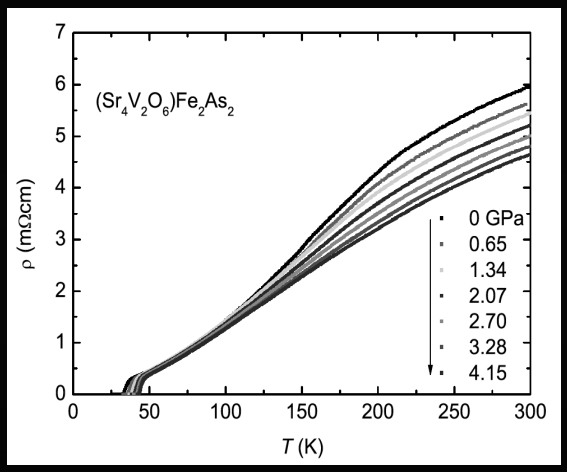


T_c = 52−13K → n = 1.1−1.5

N. Takeshita, JPSJ 77, 075003(2008)

Test for other classes; "42622" system under pressure

$Sr_4V_2O_6Fe_2As_2$

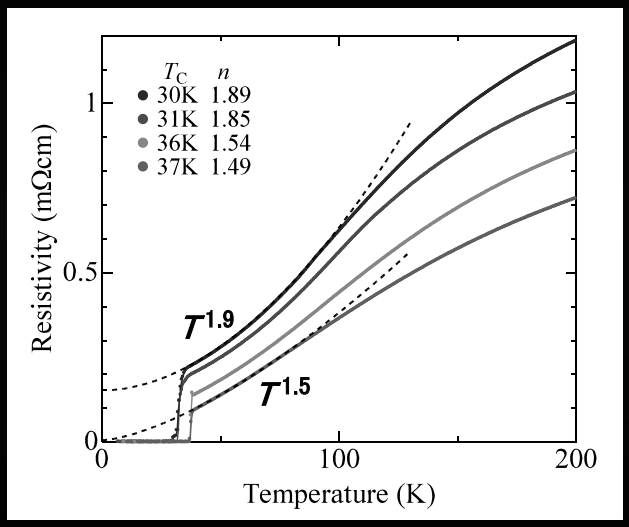


T_c = 33−43K → n = 1.8−1.4

H. Kotegawa, arXiv:0908.1469

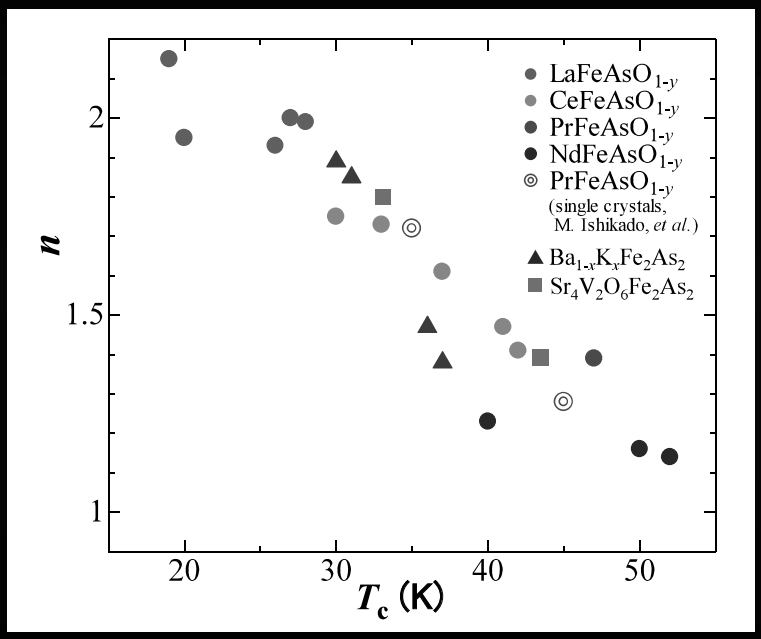
Test for other classes; in the case of "122" system

$Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$



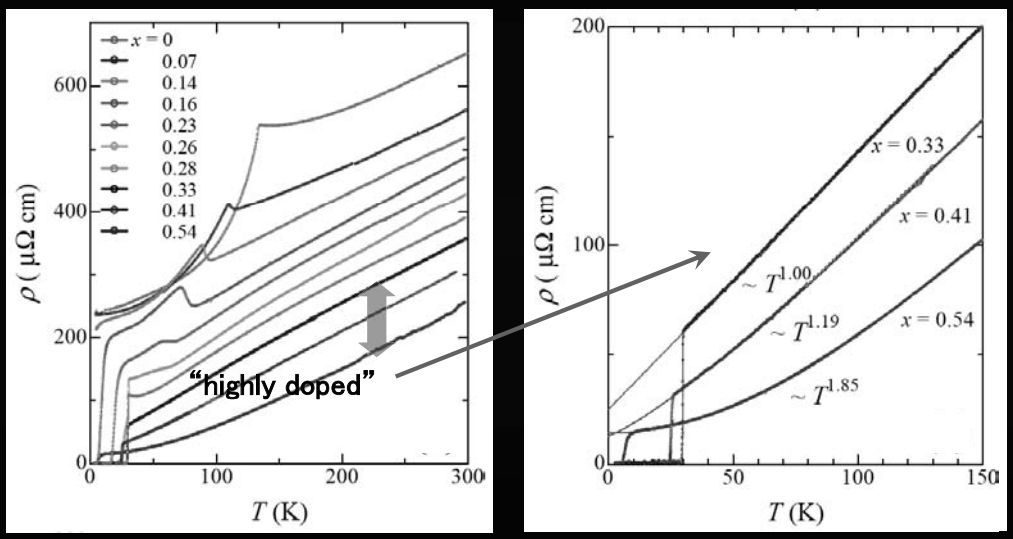
T_C = 30−37K → n =1.9−1.5

T_C vs n plot for LnFeAsO$_{1-y}$, Ba$_{1-x}$K$_x$Fe$_2$As$_2$ & "42622"



Test for other classes; in the case of "122" system

BaFe$_2$As$_{2-x}$P$_x$

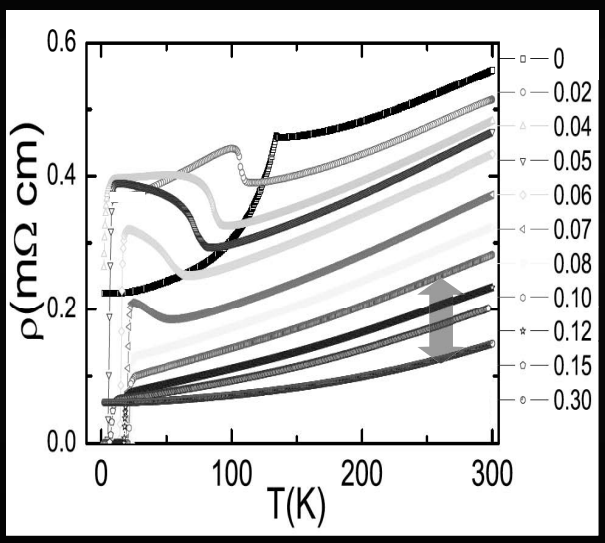


S. Kasahara, arXiv:0905.4427

T_C = 30–5K → n = 1.0–1.9

Test for other classes; in the case of "122" system

$Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$

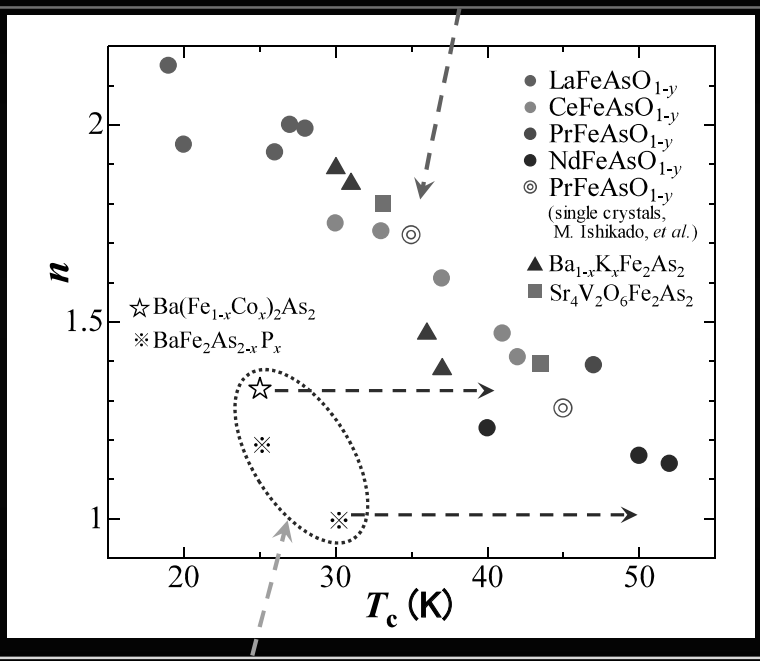


L. Feng, *et al.*, Phys. Rev. B 80, 140508R (2009)

T_c = 25–4K → n = 1.3–1.6

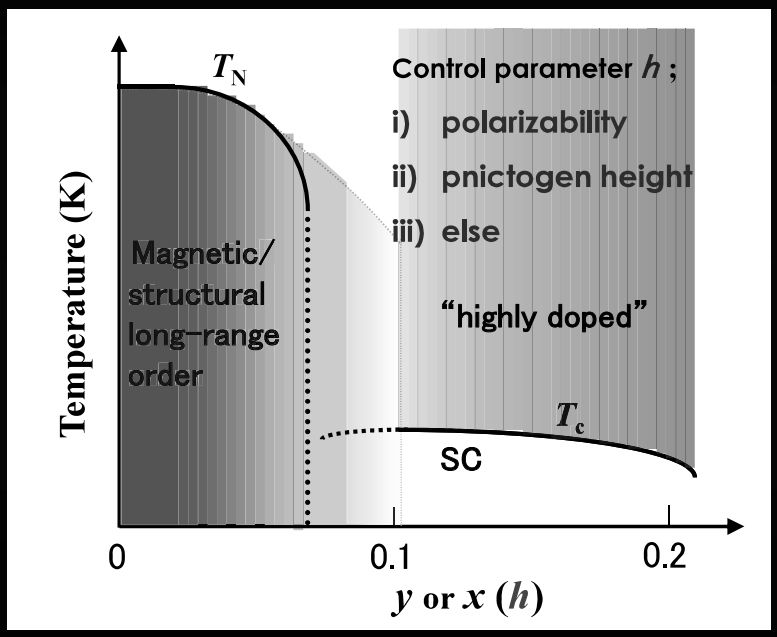
T_c vs n plot

Dopant sites located outside the $FeAs_4$ blocks --- "universal"



$FeAs_4$ tetrahedra are modulated by "doping" → reduction of T_c

Charge transport in the 'highly doped' regime



$\rho_\varepsilon(T) = \Lambda(x)\, T^{\alpha} / n(x)$

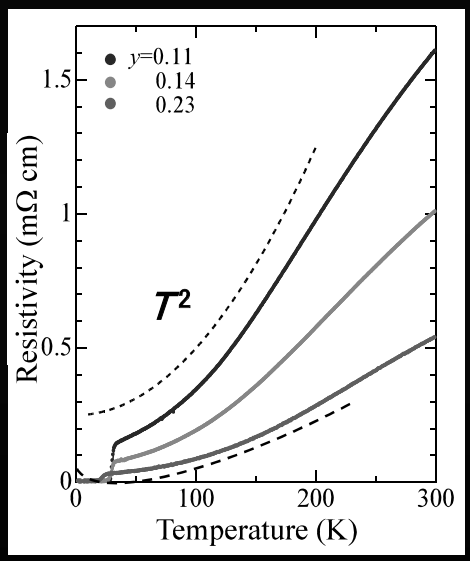
→ $T^{\alpha(h)} / n(x)$

$1/\tau_\varepsilon \sim T^{\alpha(h)}$

$\rho(T, x) = \rho_0 + \rho_\varepsilon(T)$ in the optimally/highly "doped" regime

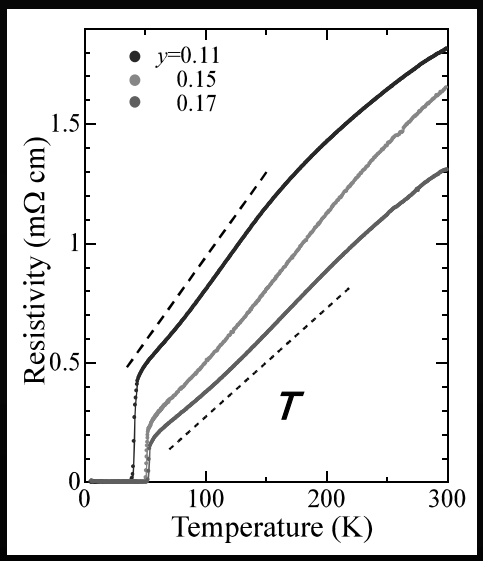
$\rho_0 \sim 0$, $\rho_\varepsilon(T) = \Lambda(x)\, T^{\alpha} / n(x)$; $n(x)$ dominates (?)

$LaFeAsO_{1-y}$



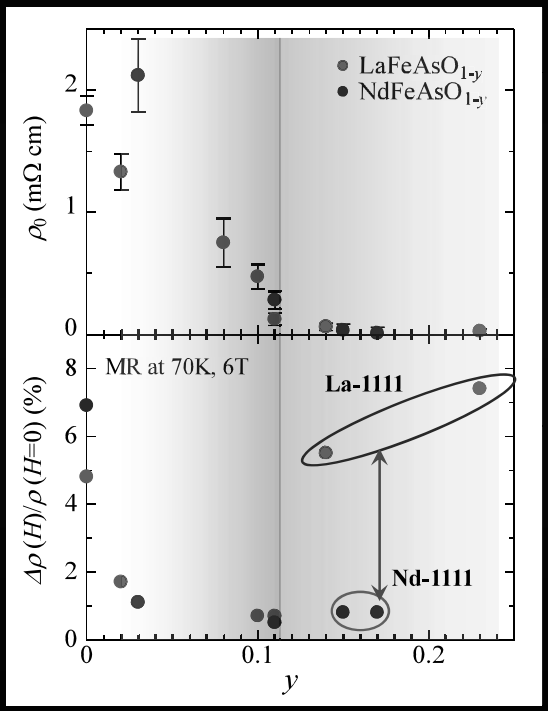
T_c^{max} ~ 28K, $\rho(T) \sim T^2$

$NdFeAsO_{1-y}$



T_c^{max} ~ 52K, $\rho(T) \sim T$

Magnetoresistance $\Delta\rho(H)/\rho(H=0)$ in the "highly doped" regime



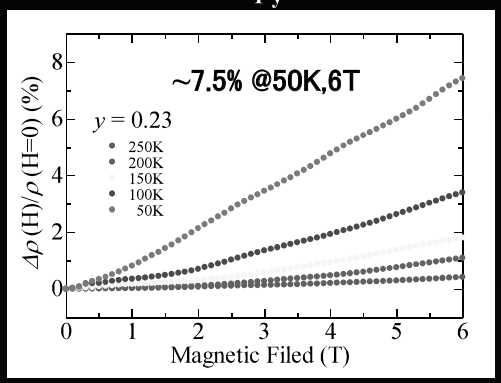
τ_0 rapidly decreases in the "underdoped" regime.

Suppression of long – /short – range magnetic order

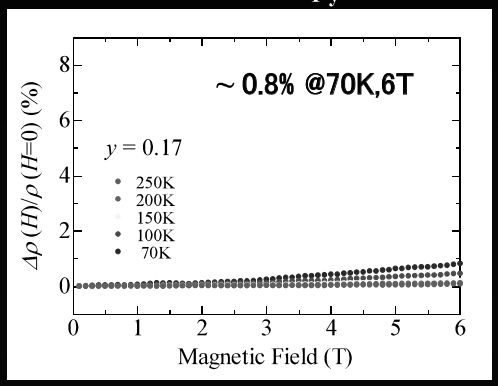
The magnitude of MR is remarkably different between La- and Nd-1111 in the 'highly doped' regime.

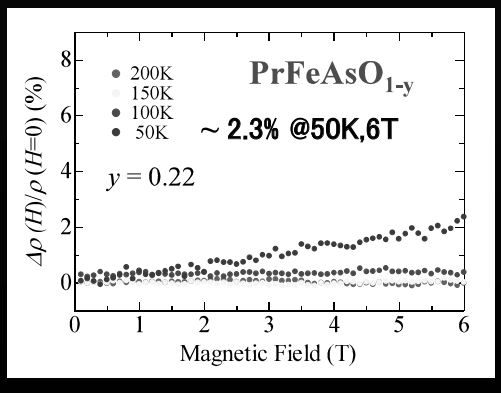
Magnetoresistance $\Delta\rho(H)/\rho(H=0)$

$LaFeAsO_{1-y}$



$NdFeAsO_{1-y}$





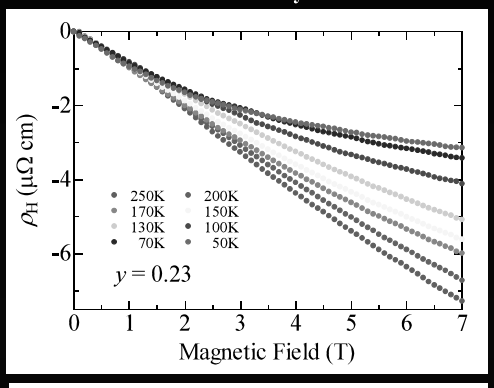
Magnitude of MR~$(\mu H)^2$
[$\mu \sim \tau_\varepsilon$]

[Nd-] < [Pr-] < [La-]

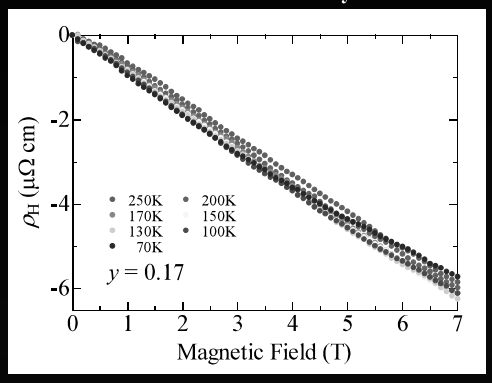
"τ_ε is smaller for higher T_c."

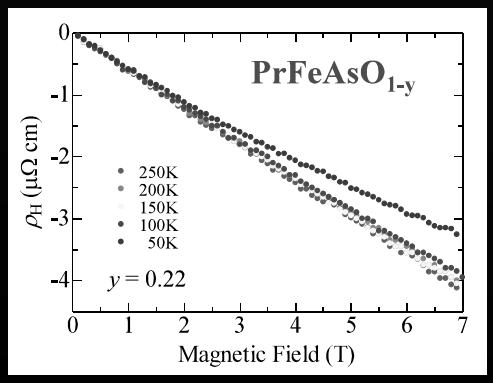
Hall resistivity $\rho_H(H)$

$LaFeAsO_{1-y}$



$NdFeAsO_{1-y}$



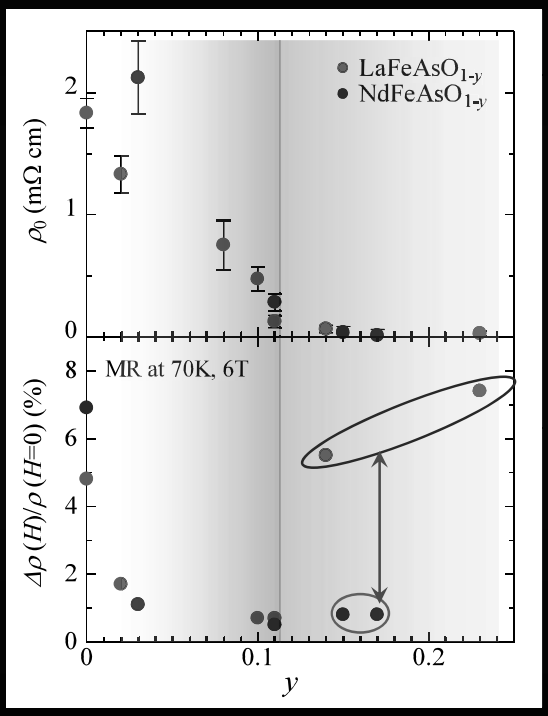


$R_H(T)$ at low H is T independent.

Non-linearity in $\rho_H(H)$

[Nd-] < [Pr-] < [La-]

Magnetoresistance $\Delta\rho(H)/\rho(H=0)$ in the "highly doped" regime

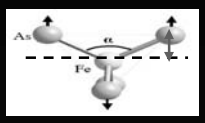
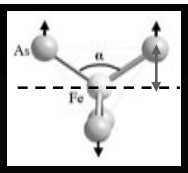
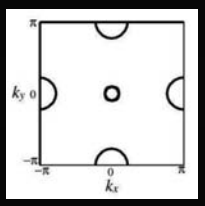
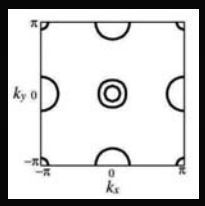


τ_0 rapidly decreases in the "underdoped" regime.

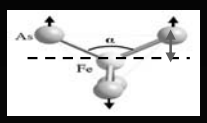
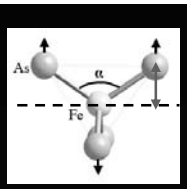
Suppression of long – /short – range magnetic order

$\tau_\varepsilon(T)$ depends strongly on material (h) and weakly on 'doping' (x) in the "highly doped" regime.

Difference between La1111 and Nd1111

$FeAs_4$ As-height		crystal structure	
Fermi surfaces		FS configuration	
"Nesting"	worse	K. Kuroki et al, PRB79, 224511 (2009).	better
Resistivity	T^2	Normal-state charge transport	T-linear

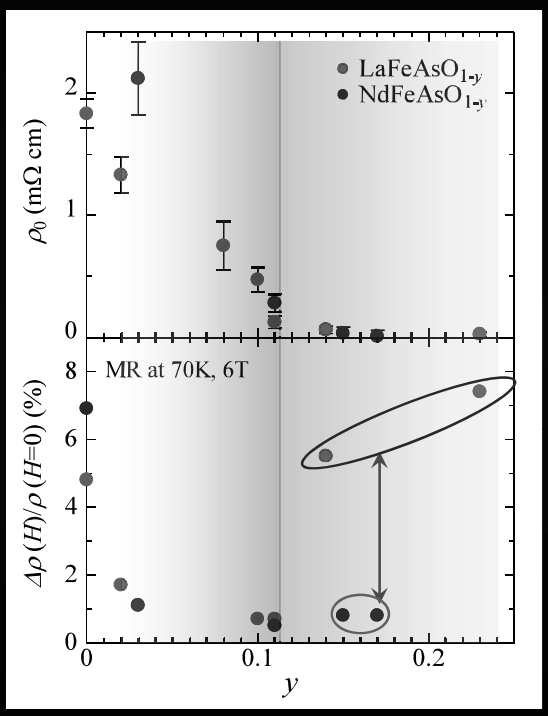
$\rho \sim T^2$- class vs $\rho \sim T$- class

$FeAs_4$ *e.g.* As-height: h		crystal structure	
Carrier inelastic scattering	weak	Normal-state charge transport	strong
T_c	low	Superconductivity	high

cf. Cuprates

"Carrier scattering in the normal state has some relevance to T_c."
cf. Cuprates

Charge transport in the "underdoped" and "highly doped" regimes



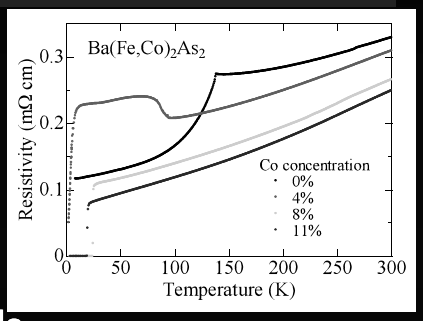
τ_0 rapidly decreases in the "underdoped" regime.

Suppression of long – /short – range magnetic order

$\tau_\varepsilon(T)$ depends strongly on material (h) and weakly on 'doping' (x) in the "highly doped" regime.

Inelastic scattering likely from spin fluctuations, not from phonons

Charge Dynamics in Iron-Pnictides Studied by Optical Spectroscopy on $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$



SCHOOL OF SCIENCE THE UNIVERSITY OF TOKYO

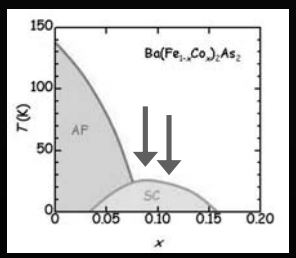
M. Nakajima,

S. Ishida, K. M. Kojima, S. Uchida

AIST

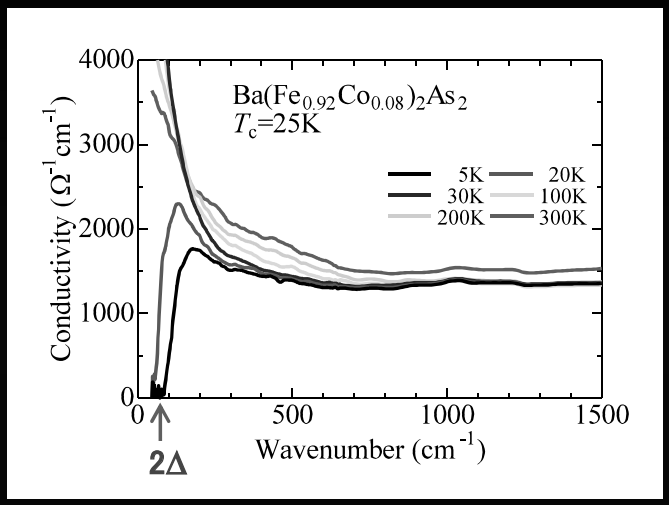
Y. Tomioka, T. Ito, K. Kihou, C. H. Lee,

H. Kito, A. Iyo, H. Eisaki



supported by

Superconducting gap magnitude



s-wave gap:

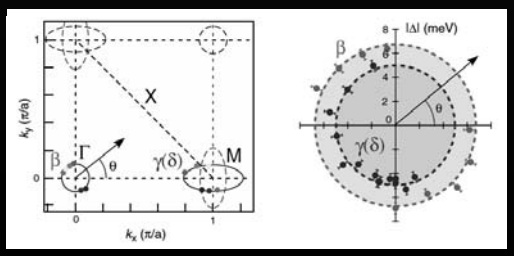
$2\Delta \sim 80\ cm^{-1}$ (10 meV) at $T = 5K$

ARPES: $\Delta \sim 5.0–6.6$ meV

K. Terashima *et al.*, PNAS (2009)

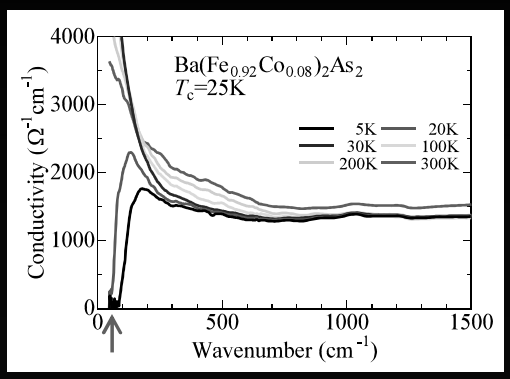
Point contact: $\Delta \sim 5–6$ meV

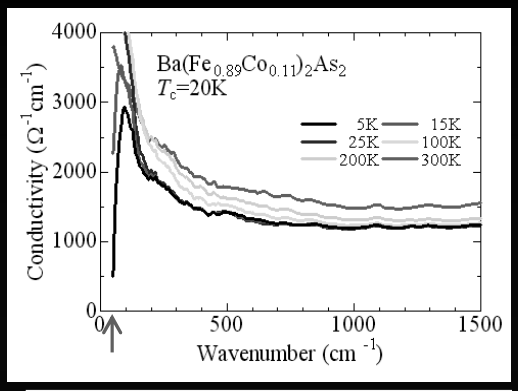
P. Samuely *et al.*, cond-mat (2009)

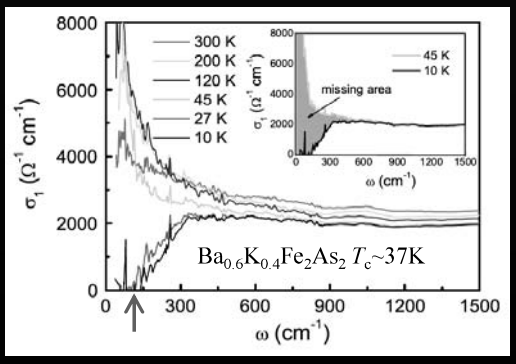


K. Terashima *et al.*, PNAS (2009)

Gap magnitude roughly scales with T_c







$Ba(Fe_{0.89}Co_{0.11})_2As_2$ ($T_c \sim 20$ K)

$2\Delta < 50\ cm^{-1}$

$Ba(Fe_{0.92}Co_{0.08})_2As_2$ ($T_c \sim 25$ K)

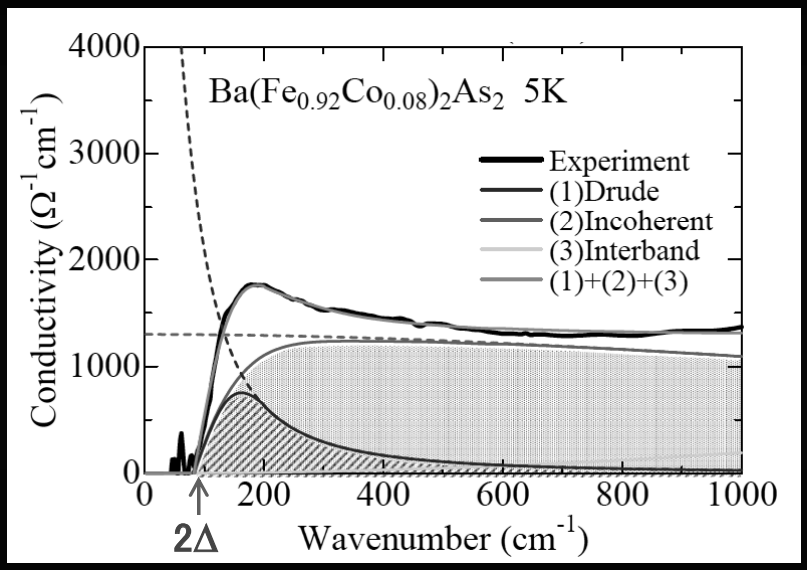
$2\Delta \sim 80\ cm^{-1}$

$Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ ($T_c \sim 37$ K)

$2\Delta \sim 130\ cm^{-1}$

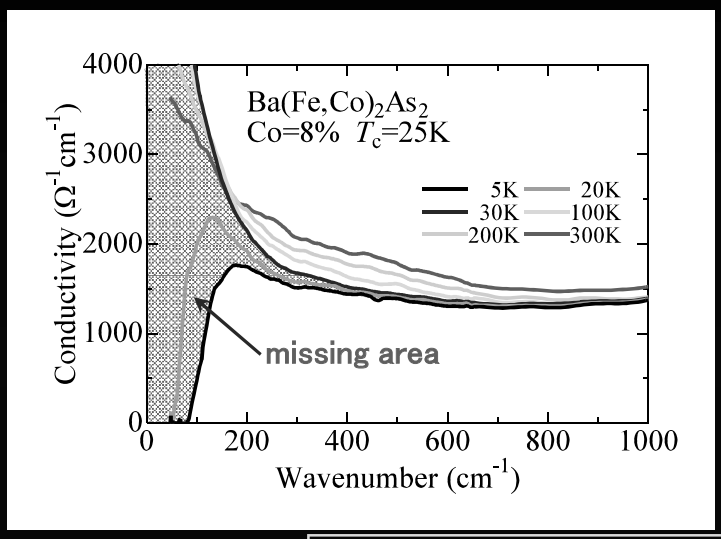
G. Li *et al.*, PRL (2008)

How does the opening of a superconducting gap affect each component?



A superconducting gap opens in both components.

Missing area: London penetration depth



μSR : λ ~ 2250 Å

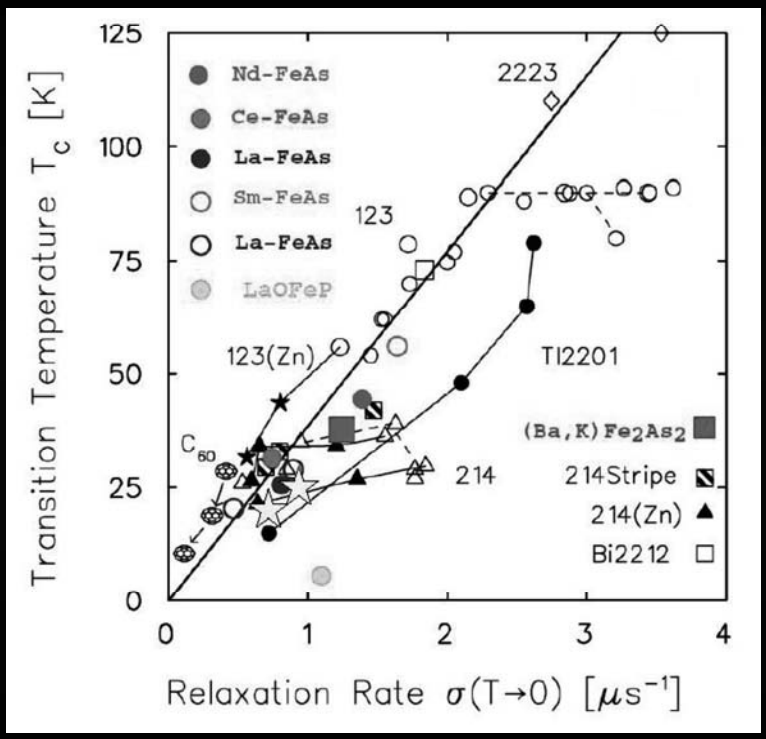
T. J. Williams *et al.*, PRB (2009)

London penetration depth λ_L ~ 2500 Å

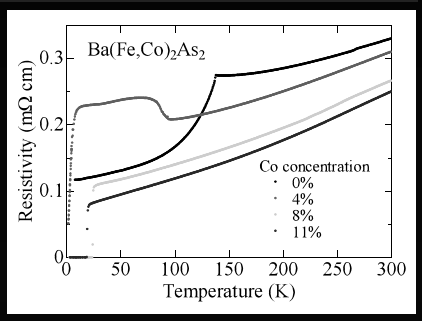
$$\rho_s = 8\int_{0+}^{\omega_c} d\omega[\sigma_1(\omega, T \simeq T_c) - \sigma_1(\omega, T \ll T_c)]$$

$$\rho_s = c^2/\lambda^2$$

On the 'Uemura' plot



Charge Dynamics in Iron-Pnictides Studied by Optical Spectroscopy on $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$



SCHOOL OF SCIENCE THE UNIVERSITY OF TOKYO

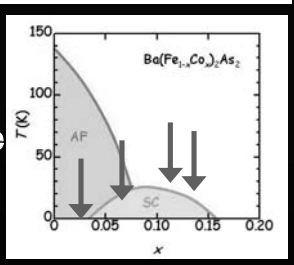
M. Nakajima,

S. Ishida, K. M. Kojima, S. Uchida

AIST

Y. Tomioka, T. Ito, K. Kihou, C. H. Lee

H. Kito, A. Iyo, H. Eisaki



supported by

ITRHP

Charge transport in oxygen-deficiency controlled iron-pnictide superconductor $LnFeAsO_{1-y}$

S. Ishida, M. Nakajima, K. M. Kojima, S. Uchida

T. Ito, Y. Tomioka, H. Eisaki, A. Iyo,
K. Miyazawa, H. Kito, H. Kihou, C. H. Lee

M. Ishikado, S. Shamoto

supported by

4. 鉄系超伝導体の NMR

京大院理 [A]、JST-TRIP [B]
石田憲二 [A,B], 中井祐介 [A,B], 北川俊作 [A,B], 家哲也 [A,B]

NMR study on Iron-based Superconductors

Kyoto University [A], JST-TRIP [B],
K. Ishida [A,B], Y. Nakai [A,B], S. Kitagawa [A,B], and T. Iye [A,B]

核磁気共鳴(NMR)、核四重極共鳴(NQR)の測定では、物質の磁気的性質や超伝導特性を微視的な観点から調べることができるという特徴から、特に磁性や磁気励起と超伝導の関係を調べるには有益な実験手法である。現在までに、銅酸化物超伝導体や重い電子系超伝導体において NMR/NQR 実験は精力的に行われ、常伝導状態の磁気励起や超伝導対の対称性の同定に重要な役割を果たしてきた。

今回の鉄系超伝導体についても発見当初より、我が国を中心に活発に NMR/NQR が行われ、As や P のニクトゲンサイトから、超伝導に最も重要な Fe サイトの ^{57}Fe-NMR の実験まで報告されている。本講演では、図 1 に示す鉄系超伝導体の 1111 構造、122 構造、11 構造に分け、現在までに報告されている NMR/NQR の結果を紹介する。主に常伝導状態の磁気励起の性質やその濃度依存性、磁気励起と超伝導との関係や、超伝導ギャップ構造について NMR の実験からどのように見えるかを議論する。

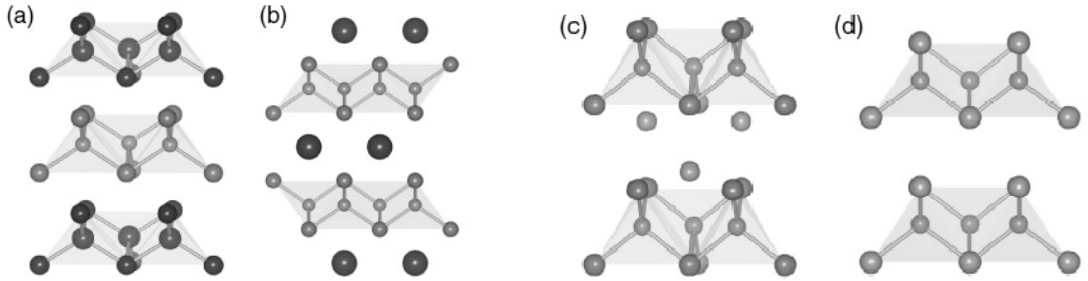


図 1 ：4 種類の鉄系超伝導体の結晶構造。(a)1111 構造、(b)122 構造、(c)111 構造、(d)11 構造。4 つの図に共通して、鉄原子はピンク色、ニクトゲン原子はオレンジ色で示されている。[1]

122 構造の $BaFe_2As_2$ は、135K で構造相転移を伴いストライプ型の反強磁性状態に秩序する。この物質の Ba サイトを K に置換すること(ホールドープ)や、Fe サイトを Co に置換すること(電子ドープ)、As サイトを P に置換することで反強磁性は抑制され、超伝導が出現する。我々のグループでは、$BaFe_2(As1\text{-}xPx)2$ の系に注目し常伝導状態の磁気励起や超伝導ギャップの性質を P と As 核の NMR 実験から調べて

いる。この系では As と P が同じ価数のため、電子数を変化させることなく、磁気的性質を変化させ超伝導が現れるという特徴がある。

図 2 に、それぞれの系における最高の T_c の濃度の試料での $1/T_1T$ を示す。どのドープ系においても最高の T_c の試料では、$1/T_1T$ は T_c に向かって増大を続け、常伝導状態では顕著な反強磁性ゆらぎの発達が見られている。また低温に向かっての反強磁性相関の発達が大きな試料ほど T_c が高い傾向にあることもわかる (T_c[(BaK)Fe_2As_2]=38K > T_c[$BaFe_2(AsP)_2$]=30K > T_c[$Ba(FeCo)_2As_2$]=22K)。この傾向は、最近の $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ における $1/T_1T$ の濃度依存性からも示される。$BaFe_2As_2$ の系では、反強磁性ゆらぎと超伝導出現には正の相関が見られている。これに対し $LaFeAs(O_{1-x}F_x)$ の $1/T_1T$ の濃度依存性からは、反強磁性ゆらぎと超伝導には、一見相関は見られなかった。このように低エネルギー反強磁性ゆらぎと超伝導の関係は、鉄系超伝導体の中でも構造によっては異なっているようである。これらの系における超伝導状態における $1/T_1$ の温度依存も示し、考えられる超伝導ギャップ構造について議論する。

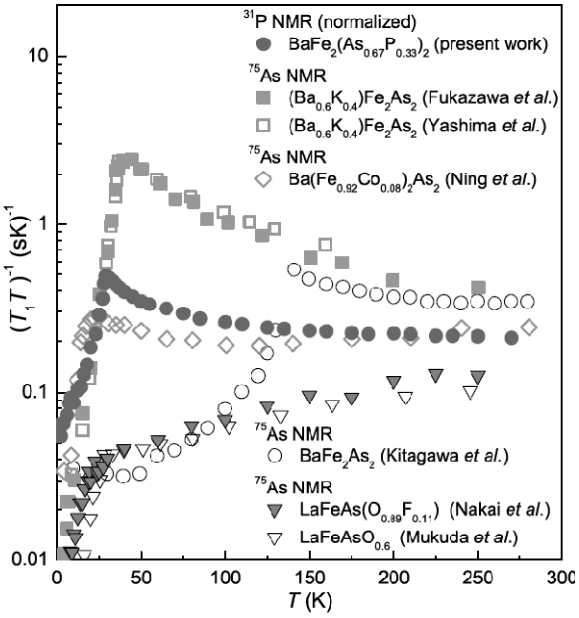


図 2:様々な FeAs 物質の As サイトの $1/T_1T$ の振る舞い [2].
$BaFe_2As_2$ (T_N=135K)[3], $(Ba_{0.6}K_{0.4})Fe_2As_2$ (T_c=38K)[4,5], $BaFe_2(As_{0.67}P_{0.33})_2$ (T_c=30K)[2] [P サイト値を As サイトの $1/T_1T$ に規格化], $Ba(Fe_{0.92}Co_{0.08})_2As_2$ (T_c=22K)[6], $LaFeAsO_{0.6}$(T_c=28K)[7], $LaFeAs(O_{0.89}F_{0.11})$(T_c=22.5K)[8]

また今回の鉄系超伝導体の結果を、今までによく知られている銅酸化物超伝導体や重い電子系超伝導体の結果と比較し、共通点や相違点を議論したい。

我々の NMR の研究は、東工大細野、神原グループ($LaFeAs(O_{1-x}F_x)$系)、京大松田・芝内、寺嶋グループ($BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ 系)、徳島大菅原(現神戸大)グループ(LaFePO)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] Y. Nakai *et al.*: arXiv:0908.0625 (2009). [3] K. Kitagawa *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008)114709.
[4] H. Fukazawa *et al.*:J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009)033704. [5] H. Mukuda *et al.*: Physca C **469** (2009) 559.
[6] F. L. Ning *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 013711.
[7] Y. Nakai *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 073701.
[8]H. Mukuda *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn.**77** (2008) 093704.

NMR Studies on Iron-based Superconductors

Kenji Ishida　石田憲二

Collaborators (NMR)

Yusuke Nakai, Shunsaku Kitagawa and Tetsuya Iye

Department of Physics, Kyoto University

JST - TRIP

Content

Introduction

What can we know from NMR experiments?

NMR results on Cuprates （Ruthenate Sr_2RuO_4)

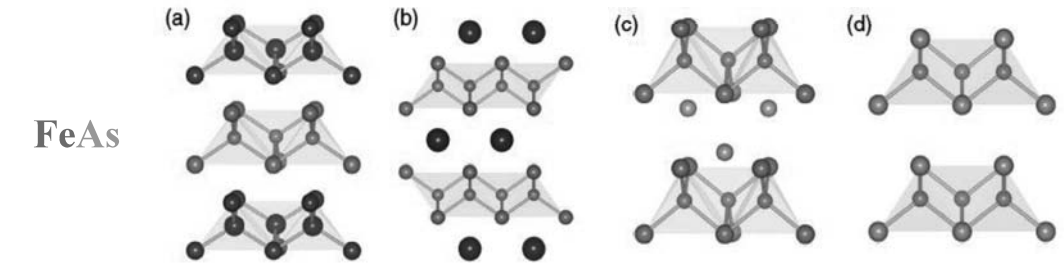
NMR results on Iron-Based superconductors

Normal-state spin dynamics

$LaFeAs(O_{1-x}F_x)$ (1111), $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ (122)

Superconducting-gap structure

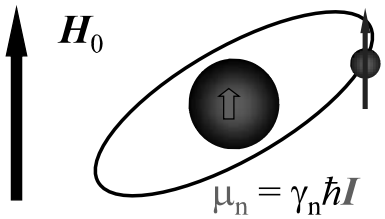
Summary



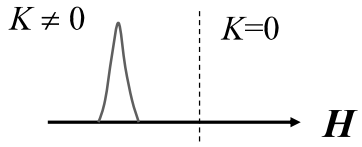
Structure: 1111 122 111 11

Interaction between nucleus spin and electronic spins
(Hyperfine Interaction)

Nuclear spins ($\boldsymbol{I}$) are coupled with electronic spins ($\boldsymbol{S}$) in the external magnetic field ($\boldsymbol{H_0}$).



$\mu_e = \gamma_e \hbar \boldsymbol{S}$



Hamiltonian of the nuclear spins

$$H_Z = -\gamma_n \hbar\, \boldsymbol{I}\, \boldsymbol{H}_0 + \mathbf{A}\, \boldsymbol{I}\, \boldsymbol{S} = -\gamma_n \hbar\, \boldsymbol{I}\, \boldsymbol{H}_{\mathbf{Loc}}$$

A: Hyperfine coupling constant

$$\boldsymbol{H}_{\mathbf{Loc}} = \boldsymbol{H}_0 - \frac{\mathbf{A}}{\gamma_n \hbar} \boldsymbol{S} = \boldsymbol{H}_0 - \frac{\mathbf{A}}{\gamma_n \hbar} \{ \underbrace{\langle \boldsymbol{S} \rangle}_{\text{av. static}} + \underbrace{\delta \boldsymbol{S}}_{\text{dynamics}} \}$$

Shift of the spectrum (Static properties)

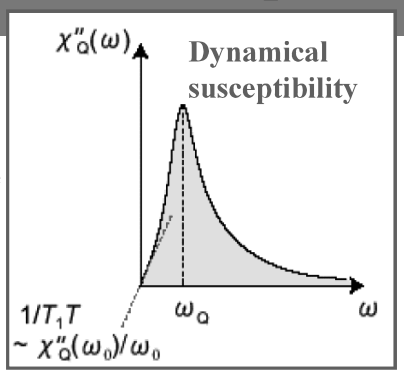
$$\boxed{\boldsymbol{K} = \frac{\boldsymbol{H}_0 - \langle \boldsymbol{H}_{\mathrm{Loc}} \rangle}{\boldsymbol{H}_0} = \frac{\mathrm{A}}{\gamma_n \hbar} \cdot \frac{\langle \boldsymbol{S} \rangle}{\boldsymbol{H}_0} = \frac{\mathrm{A}}{N_A \gamma_e \gamma_n \hbar^2} \chi} \qquad \left(\chi = \frac{\boldsymbol{M}}{\boldsymbol{H}_0} = \frac{N_A \gamma_e \hbar \langle \boldsymbol{S} \rangle}{\boldsymbol{H}_0} \right)$$

Nuclear spin-lattice relaxation rate: $1/T_1$
Dynamical component of hyperfine coupling

$$\mathrm{H} = -\gamma_n \hbar \vec{I} \cdot \underline{\delta \vec{S}} = -\gamma \hbar \left\{ I_z \delta S_z + \frac{1}{2} \underbrace{\left(I_+ \delta S_- + I_- \delta S_+ \right)}_{\text{nuclear spins relaxe}} \right\}$$

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle i | \mathrm{H} | f \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_j)$$

$$\frac{1}{T_1} = \frac{\gamma_n^{\,2} k_B T}{(\gamma_e \hbar)^2} \sum_q A_q A_{-q} \frac{\chi''_{\perp}(q, \omega_0)}{\omega_0}$$



$$= \frac{\pi}{\hbar} A^2 \int_0^\infty N(\varepsilon) N(\varepsilon') f(\varepsilon)(1 - f(\varepsilon)) \delta(\varepsilon - \varepsilon') d\varepsilon d\varepsilon' \longleftarrow \textbf{Metallic state}$$

$$= \frac{\pi}{\hbar} A^2 \underline{[N(E_F)]^2} k_B T \propto T$$

$T_1 T$ = **const.** Korringa relation

Magnetic fluctuations

$$\frac{1}{T_1} = \frac{T}{(T - T_M)^n} \quad \begin{cases} \textbf{2D FM n=3/2, AFM n=1} \\ \textbf{3D FM n= 1, AFM n=1/2} \end{cases}$$

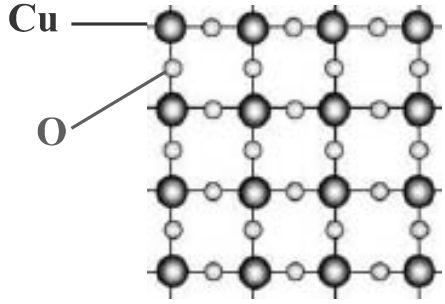
Moriya *et al.*

SC state

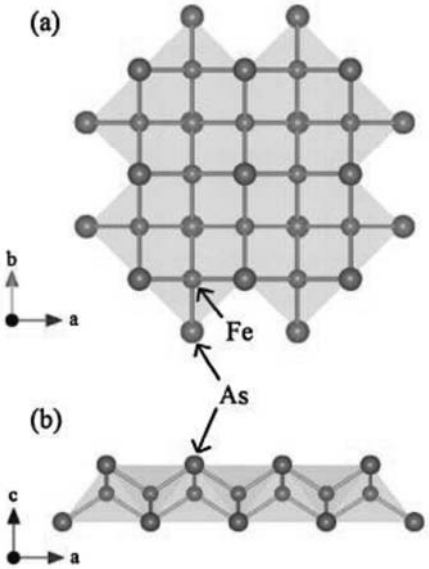
$$\frac{1}{T_1} = \begin{cases} \mathrm{Exp}(-\Delta/T) & \textbf{isotropic gap (s-wave)} \\ T^3 & \textbf{line-node gap} \end{cases}$$

CuO_2 plane vs. FeAs layer

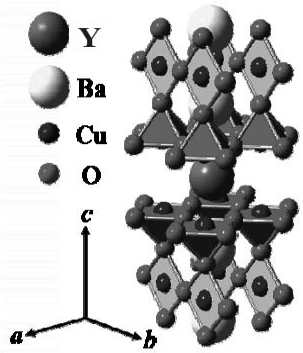
CuO_2 plane

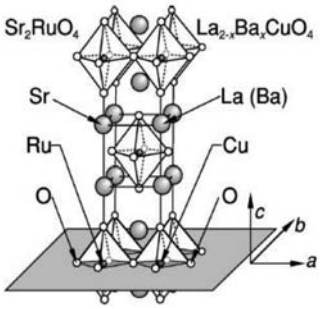


FeAs layer



$YBa_2Cu_3O_7$ (YBCO)



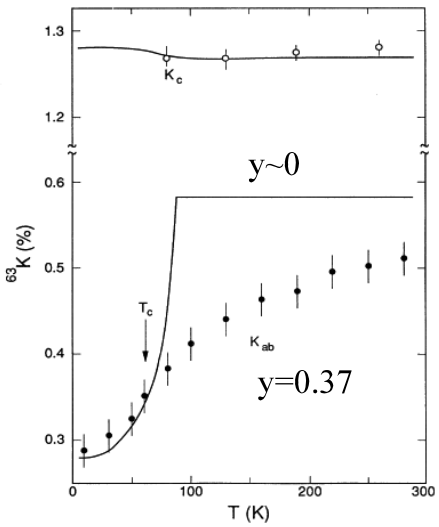


NMR Results on $YBa_2Cu_3O_{7-y}$:

Takigawa *et al.*
PRB **43**, 247 (91)

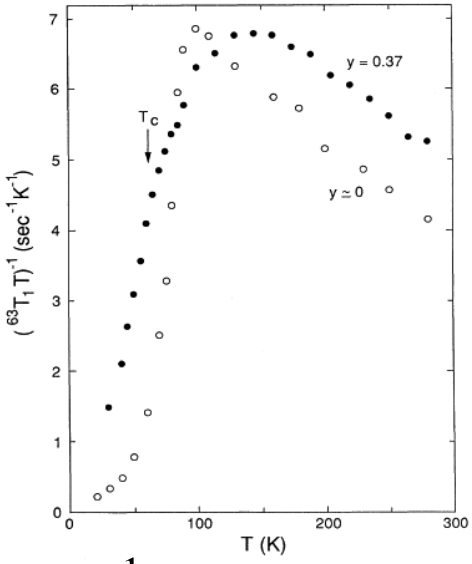
Cu-NMR

Knight shift



$K \propto \chi\ (q=0,\ \omega=0)$

$1/T_1T$



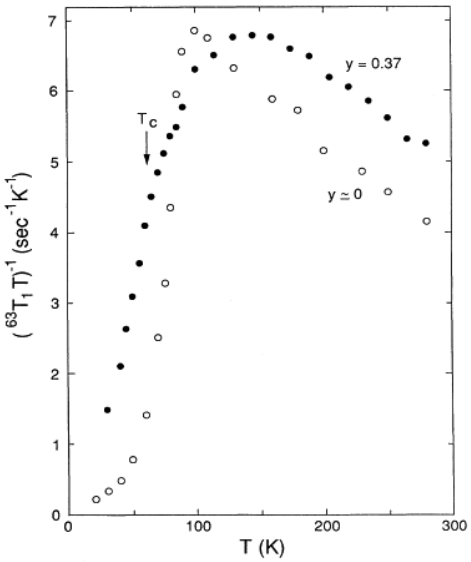
$$\frac{1}{T_1T} \propto \sum_q \chi(q, \omega \sim 0)$$

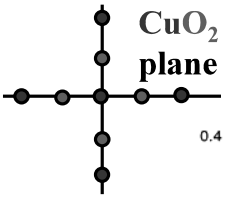
NMR Results on $YBa_2Cu_3O_{7-y}$:

Takigawa *et al.*
PRB **43**, 247 (91)

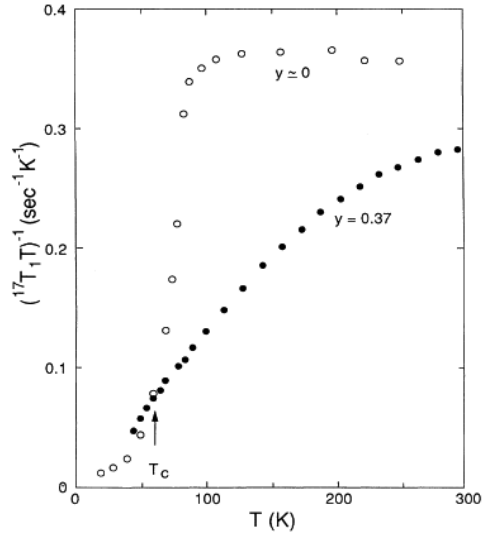
$1/T_1T$ at Cu and O sites

Cu site





O site



$$^{Cu}A(\mathbf{q}) = \mathbf{A} + 4\mathbf{B}\cos(\mathbf{q}a)$$

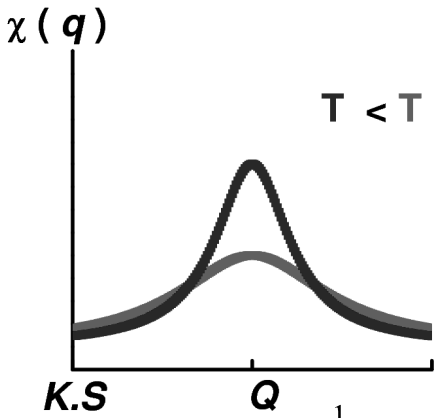
$$^{O}A(\mathbf{q}) = \sum_i \mathbf{C}_i \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_i) = 2\mathbf{C}\cos\left(\mathbf{q}\frac{a}{2}\right)$$

Implication of NMR results

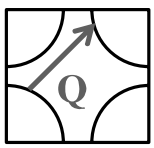
AF fluctuations with the (π/a, π/a) correlation develop in the normal state.

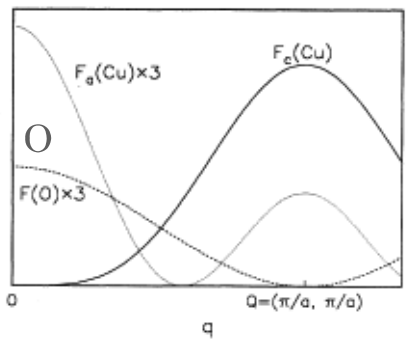
In underdoped *y*~0.37 with stronger AF fluctuations, spin gap opens far above T_c.

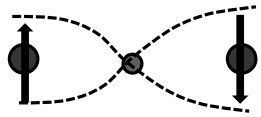
*** Spin gap Yasuoka ('89)**



$A(\mathbf{q})$

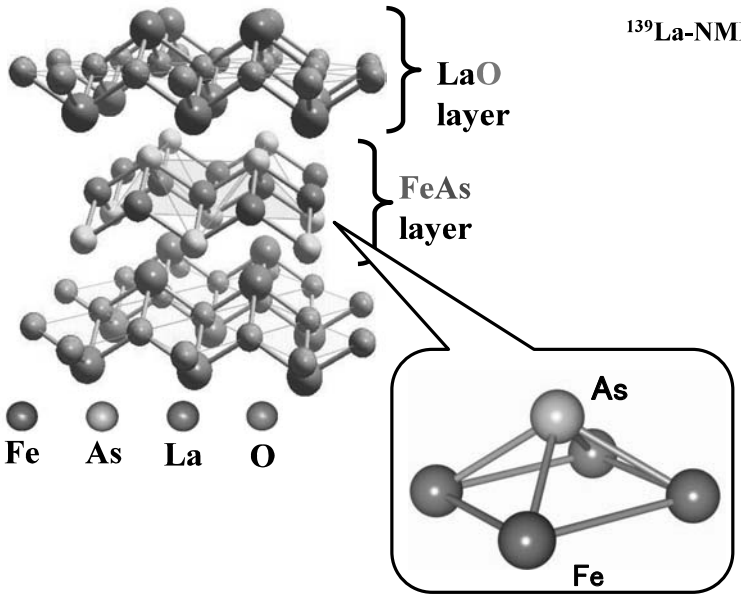




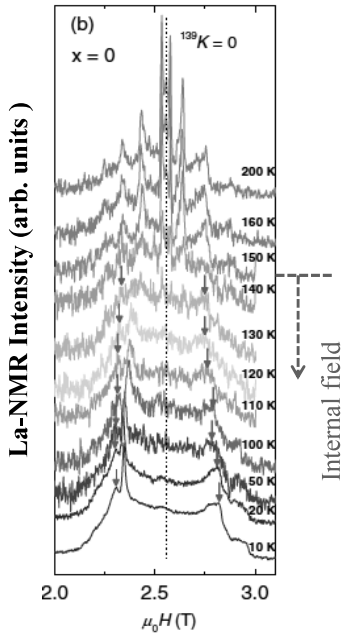


$$\frac{1}{T_1T} \propto \sum_q \chi(q, \omega \sim 0)$$

^{75}As, ^{139}La-NMR measurements



^{139}La-NMR spectrum in LaFeAsO

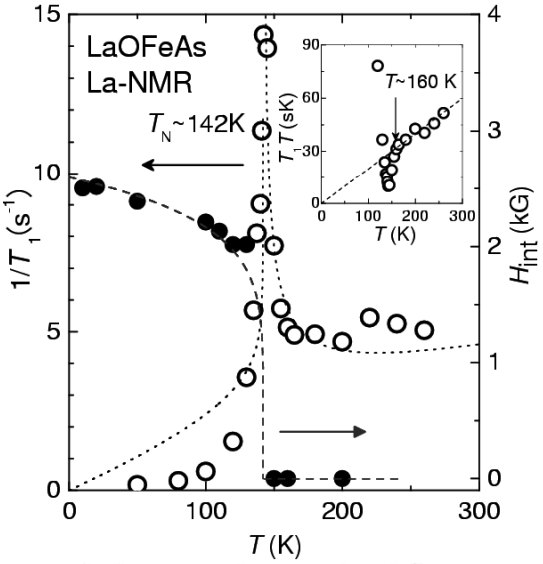


^{75}As(I=3/2)NMR
- Powder samples
- Fixed frequency 72.1 MHz(~9.89 T)

Antiferromagnetic Order in LaFeAsO

Y. Nakai *et al.*
JPSJ **77**, 073701 (2008).

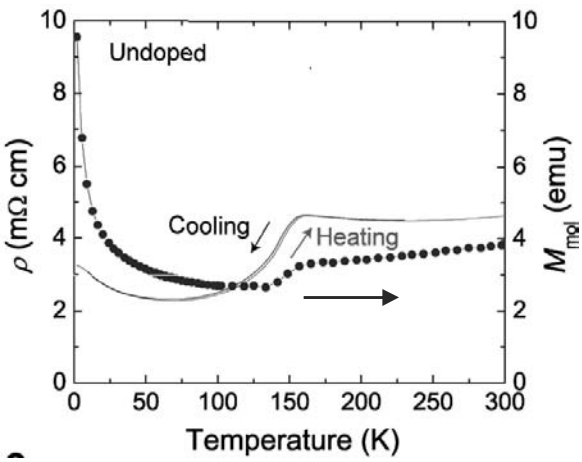
◆ $1/T_1$ shows a distinct peak at T_N~142 K



$$M(T) = M_0(1 - T/T_N)^{\beta}$$

T_N = 142 K, β =0.15

◆ ρ(T) and M(T)



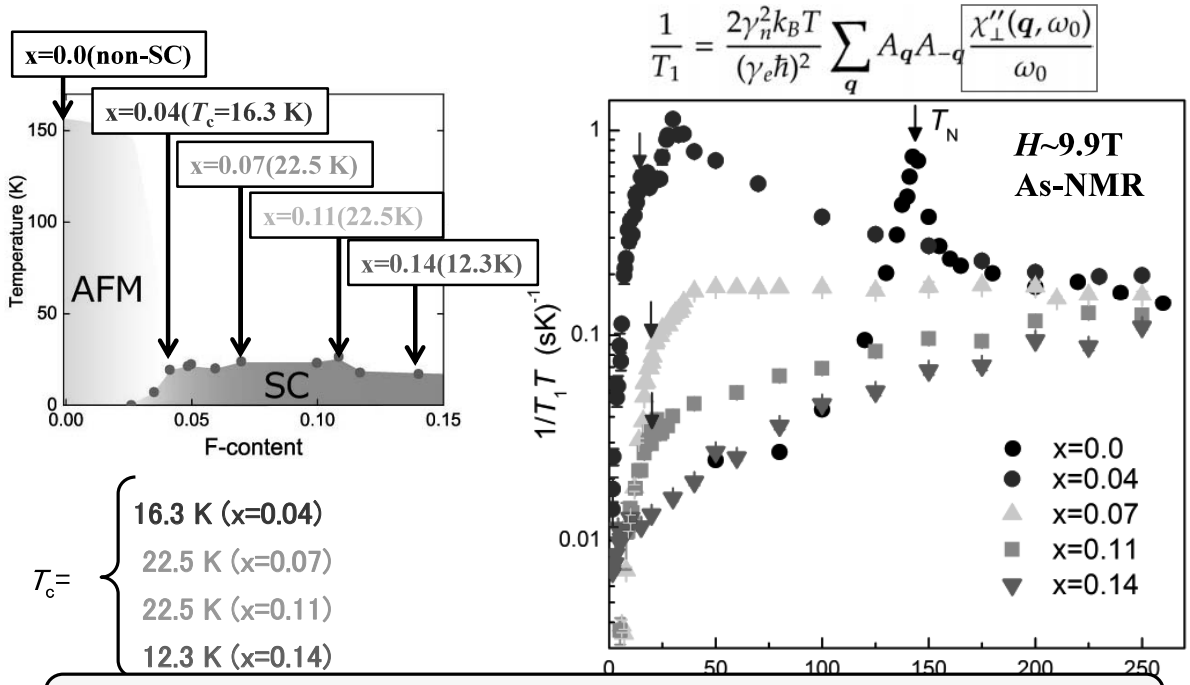
T. Nomura *et al.*, arXiv:0804.3569.

Structural order occurs at T_S~160 K.
AF correlations with finite Q develops below T_S.

Evolution of magnetic fluctuations upon F-doping

Y. Nakai *et al.*
JPSJ **77**, 073701 (2008).

$$\frac{1}{T_1} = \frac{2\gamma_n^2 k_B T}{(\gamma_e \hbar)^2} \sum_q A_q A_{-q} \frac{\chi''_\perp(q,\omega_0)}{\omega_0}$$



$1/T_1T$ depends strongly on F-doping (2 orders difference!!) ⇔ **T_c changes only by a factor 2**

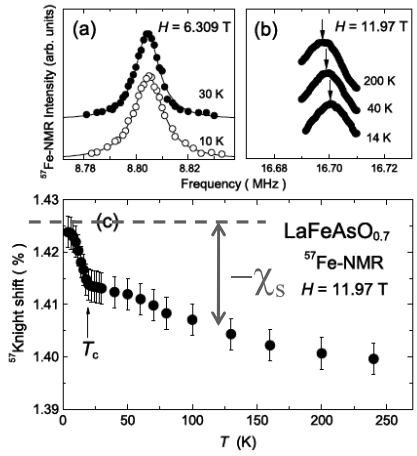
^{57}Fe NMR in $LaFeAsO_{0.7}$

Terasaki *et al.*
JPSJ **78**, 013701(09)

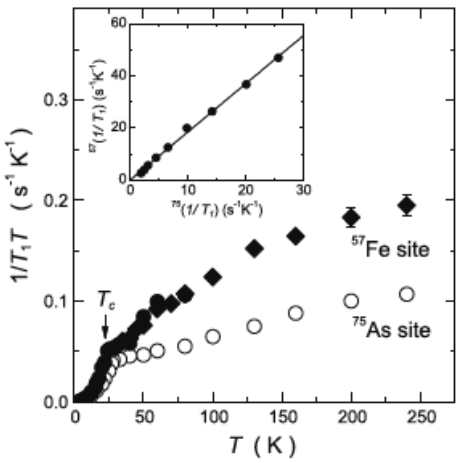
Spin Fluctuations and Unconventional Superconductivity in the Fe-based Oxypnictide Superconductor $LaFeAsO_{0.7}$ probed by ^{57}Fe-NMR

Nobuyuki Terasaki[1], Hidekazu Mukuda[1]*, Mitsuharu Yashima[1], Yoshio Kitaoka[1], Kiichi Miyazawa[2], Parasharam Shirage[2], Hijiri Kito[2], Hiroshi Eisaki[2], Akira Iyo[2]

[1] *Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-8531*
[2] *National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Umezono, Tsukuba 305-8568*

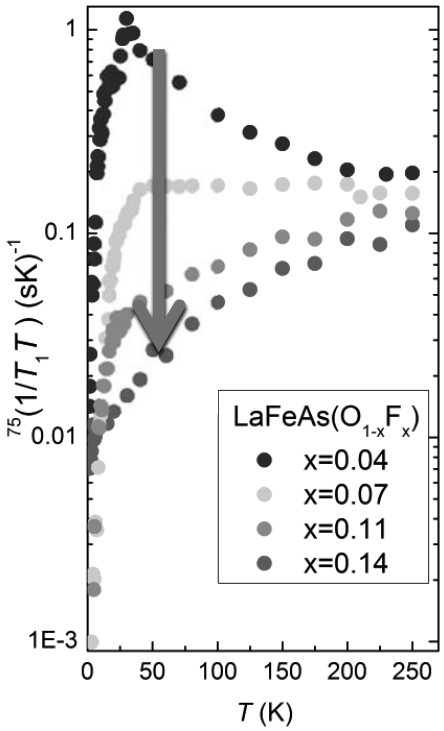


$A_{hf} < 0$



Fe can detect whole q fluctuations.

Relationship between SC and low-energy magnetic fluctuation



$1/T_1$ results suggests that AFM fluctuations are strongly suppressed upon F-doping.

However…

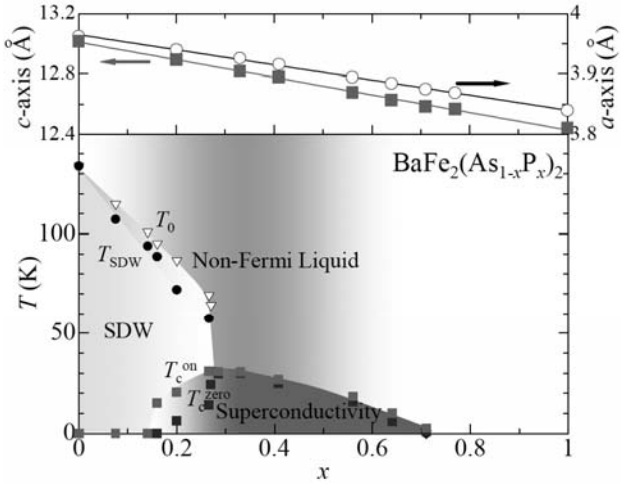
T_c is relatively insensitive to F-concentration, compared to $1/T_1$.

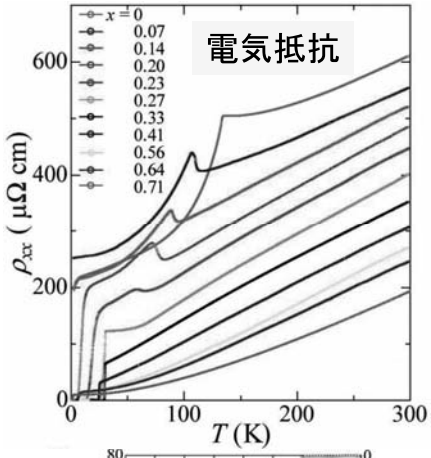
$T_c(\rho=0)=$
- 16.3 K (x=0.04)
- 22.5 K (x=0.07)
- 22.5 K (x=0.11)
- 12.3 K (x=0.14)

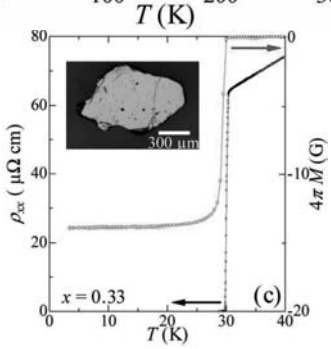
Suggesting that low-energy AFM fluctuations probed by NMR may NOT be important for superconductivity.

P-substituted superconductors $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ (122)

S. Kasahara *et al.*, arXiv:0905.4427.

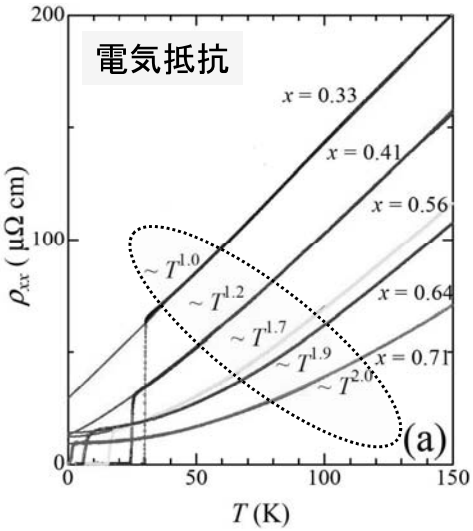






- ◆**Superconductivity with T_c =30 K is realized by isovalent P doping.**
- ◆**High-quality single crystal (dHvA measurements are possible)**

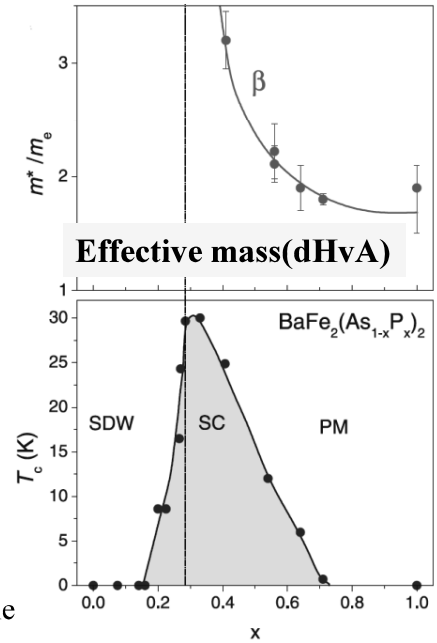
Non-Fermi liquid behavior near optimum substitution (x~0.33)



Kasahara *et al.*, arXiv:0905.4427.

◆$\rho \propto T$ (Anomalous FL behavior) in the x~0.33 sample is changed to $\rho \propto T^2$ (FL behavior) with P-substitution.

Similar to cuprate, heavy fermion

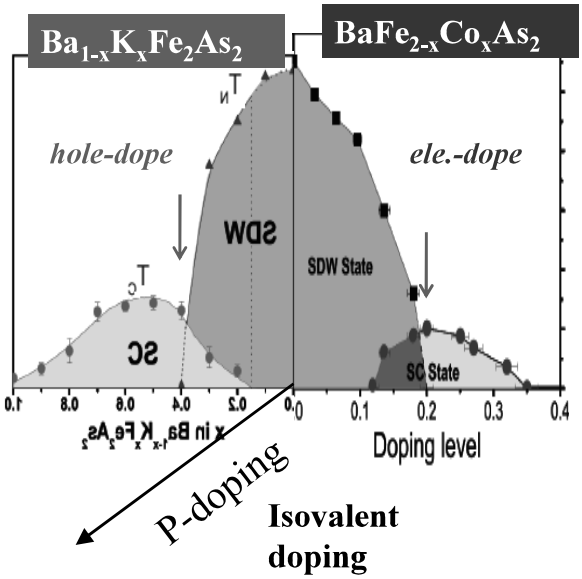


Shishido *et al.*, arXiv:0910.3634.

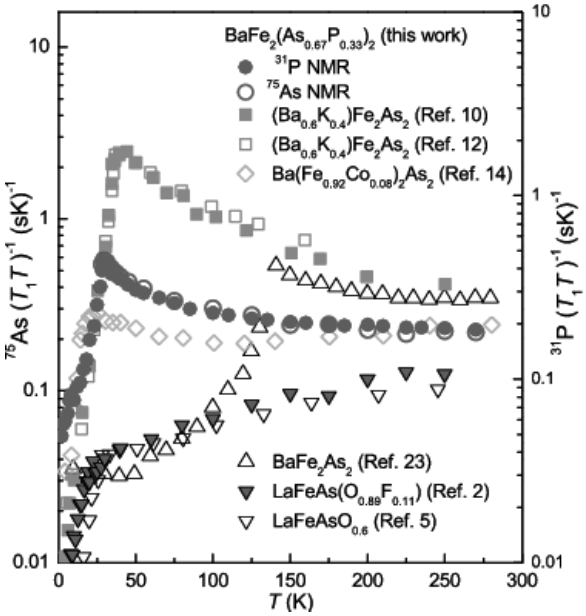
◆Effective mass diverges towards the x~0.33 sample with highest T_c.

^{75}As NMR on (BaK)Fe_2As_2 & Ba(FeCo)$_2As_2$

Phase diagram in $BaFe_2As_2$

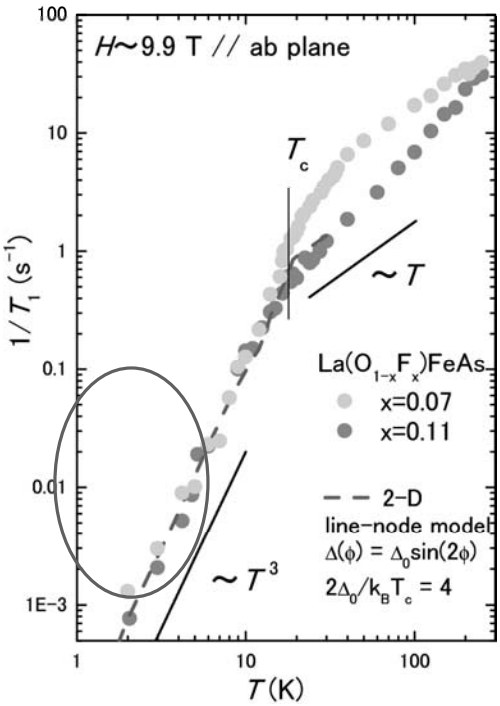


H.Chen *et al.* EPL**85**, 17006 (09)
X.F.Wang *et al.* arXiv. 0811.2920



NMR results in the SC state

SC State in $LaFeAs(O_{1-x}F_x)$ (x=0.07, 0.11)

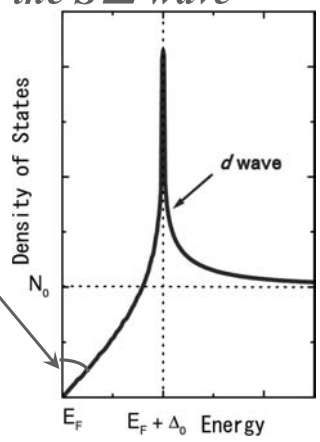


Residual DOS was not observed in LaFeAs(OF) .

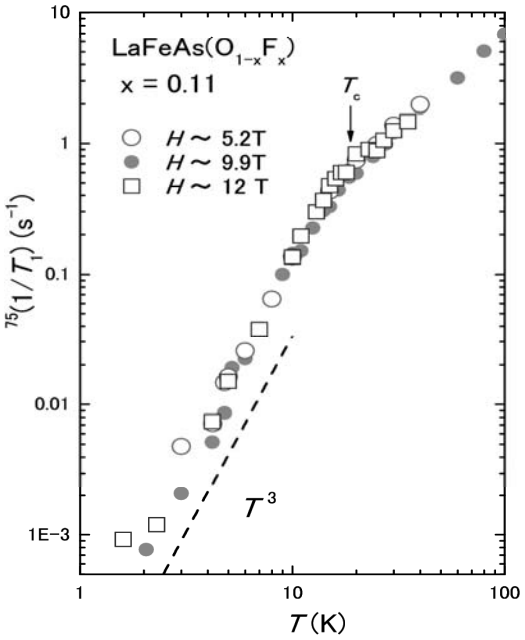
Different from d-wave superconductors

⇒ temperature dependence is interpreted with the S± wave model

Residual DOS is easily induced by impurities and/or imperfection in a sample.

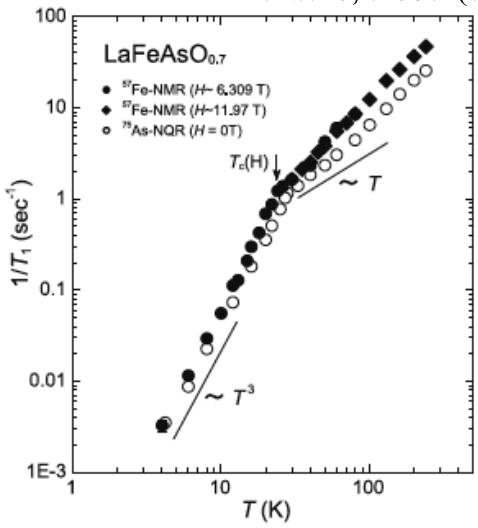


Absence of H-dependence of $1/T_1$ in the SC state



$1/T_1$ in the SC is independent of H in the field region of 5 ~ 12 T.

Terasaki *et al.*
JPSJ**78,** 013701(09)



$1/T_1$ by NQR is the same behavior as $1/T_1$ by NMR

^{31}P-NMR in the SC state of $BaFe_2(As_{0.67}P_{0.33})_2$ (T_c =30 K)

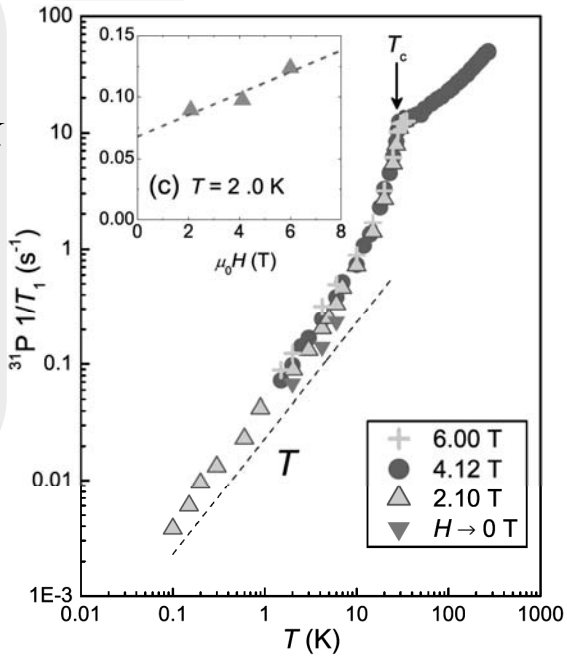
◆*Coherent peak is absent just below T_c*
→ *conventional s-wave is excluded*

◆$1/T_1 \propto T$ *is observed below 4K down to 0.1K*
→ Presence of residual DOS

◆Field dependence of $1/T_1$ is observed even in low-field (H/H_{c2} ≦~0.1).
→consistent with nodes in the SC gap
contribution of the delocalized quasi particle

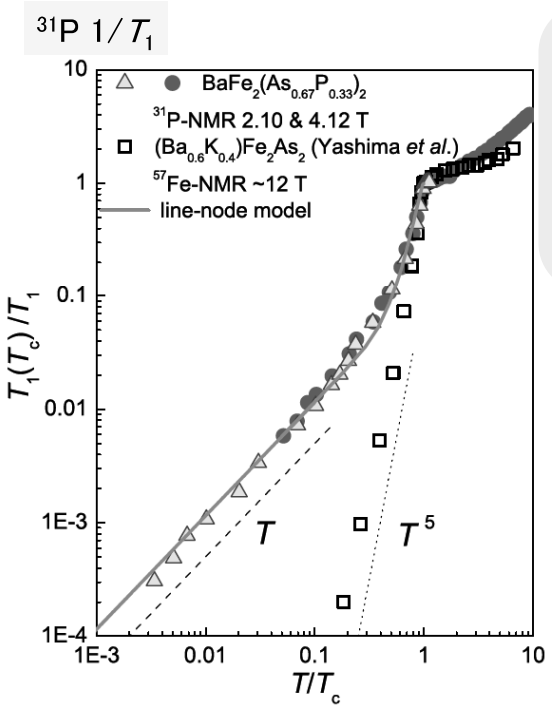
※These behaviors have not been reported in $(Ba_{1-x}K_x)Fe_2As_2$ and $LaFeAs(O_{1-x}F_x)$

^{31}P $1/T_1$



Nakai *et al.*, arXiv:0908.0625.

Possible line-nodes in the SC gap in $BaFe_2(As_{0.67}P_{0.33})_2$

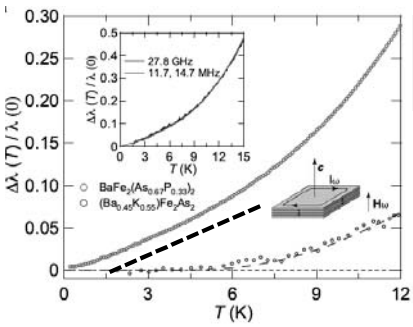


Nakai *et al.*, arXiv:0908.0625.

◆Temperature dependence of $1/T_1$ are different between $(Ba,K)Fe_2As_2$ and $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$

◆Temperature dependence of $1/T_1$ in $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ is similar to that in $YBa_2Cu_3O_7$ and $CeCoIn_5$.

Consistent with line-node gap



Penetration depth λ ∝T

Hashimoto *et al.*, arXiv:0907.4399.

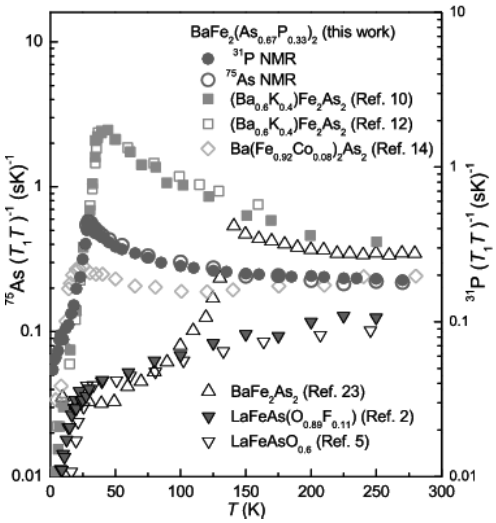
Summary : Comparison between Ba122 & La1111

Low-energy spin-dynamics revealed by $1/T_1T$

◆ Development of AFM fluctuations is observed in optimal-concentration $BaFe_2(As,P)_2$,as well as optimal doping in $(Ba,K)Fe_2As_2$ and $Ba(Fe,Co)_2As_2$.

◆ Development of AFM fluctuation seems to be important for superconductivity, and T_c is related to the strength of AFM fluctuations in the Ba122 systems.

◆ In contrast, enhancement of AFM fluctuations is not observed in the optimal-doping LaFeAs(O,F).

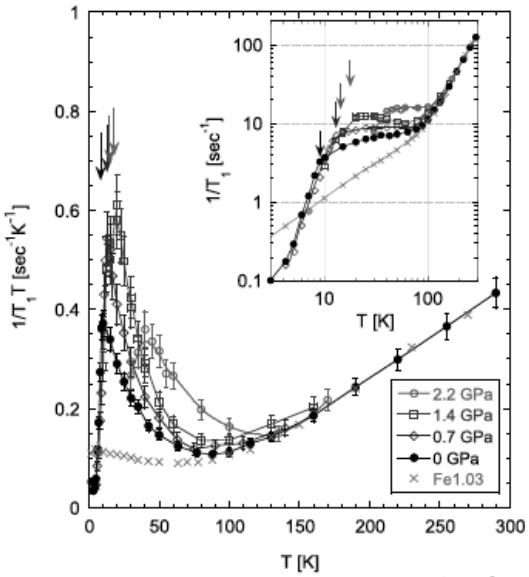


Nakai *et al.*, arXiv:0908.0625.

Relationship between AFM fluctuations and superconductivity is different between in Ba122 system and LaFeAs(O,F).
Different characteristic energy of AFM fluctuations?

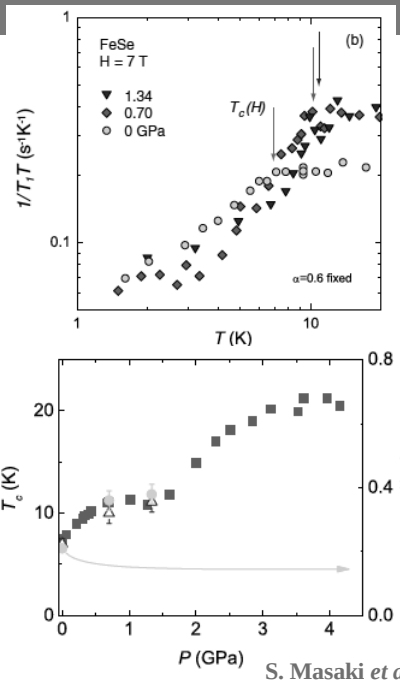
``11''系における反強磁性ゆらぎと超伝導の関係

高圧下FeSeのNMR



T. Imai *et al*. PRL 102, (09) 177005

加圧により超伝導転移温度が上昇、それに伴いT_c直上の$1/T_1T$の値も大きくなる。



S. Masaki *et al*. JPSJ , 78 (09) 063704

加圧によりTcも上昇、それに伴いTcでの$1/T_1T$も大きくなる。

Collaborators

NMR: Kyoto Univ.

Y. Nakai (PD)

S. Kitagawa (M2)

T. Iye (M1)

Sample: **$LaFeAs(O_{1-x}F_x)$**

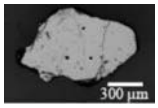
Tokyo Inst. of Technology

Y. Kamihara

H. Hosono

Sample: **$BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$**

Kyoto Univ. Matsuda Gr.



S. Kasahara

T. Shibauchi

5. J-PARC で始まる新たな中性子非弾性散乱測定法

J-PARC センター[A], 東北大理 [B], 東北大金研 [C], JST-TRIP [D]
梶本亮一 [A,D], 中村充孝 [A], 稲村泰弘 [A], 水野文夫 [A,B], 藤田全基 [C],
横尾哲也 [A], 新井正敏 [A,D]

New Method for Inelastic Neutron Scattering Demonstrated at J-PARC

J-PARC Center [A], Dept. of Phys., Tohoku Univ. [B], IMR, Tohoku Univ. [C], JST-TRIP [D]
Ryoichi Kajimoto[A,D], Mitsutaka Nakamura[A], Yasuhiro Inamura[A], Mizuno Fumio[A,B],
Masaki Fujita[C], Yokoo Tetsuya[A], Masatoshi Arai [A,D]

格子やスピンの空間的・時間的相関を直接観測できる中性子非弾性散乱は高温超伝導研究において大きな役割を果たしてきており，それはまた鉄系高温超伝導の研究においても同様である．高温超伝導研究においては，特に広い運動量−エネルギー（*Q*-*E*）空間を一挙に測定可能なパルス中性子源の非弾性散乱装置が活躍してきた．ところが，一般に非弾性散乱シグナルは極めて弱いため，それを観測するには他の実験手法と比べて格別に大きな試料や長い測定時間が必要であり，それらが研究の進展にとって障害となっていた．

しかしながら，最近米国のSNS（陽子ビーム出力1.4MW）や我が国のJ-PARC（1MW）のような従来のパルス中性子源（例えば英国のISISは160kW）に比べて一桁近くビーム出力の高い新世代のパルス中性子源の建設が進んでいる．それに合わせ，我々はこれまでの中性子非弾性散乱実験が抱える問題を解決すべく，J-PARCに大強度・高測定効率の非弾性散乱実験装置「四季」の建設を進めてきた[1]．2005年に設計の始まった「四季」は昨年度半ばより中性子ビームによる装置調整を開始し，いよいよ今年度より非弾性散乱実験を開始した．

「四季」はフェルミチョッパーと呼ばれる装置によって試料に入射する中性子ビームを単色化するフェルミチョッパー型分光器の一種であるが，従来の同種の装置に比べ二桁程度の測定効率向上を達成するために，装置設計，測定法に様々な工夫がこらしてある．その一つが，本発表にて紹介する「複数入射エネルギー同時測定法（Multi-E_i法）」である．フェルミチョッパーは中性子用のスリットを高速回転させ，その回転のタイミングに速度（エネルギー）の合った中性子のみを透過させることでビームの単色化を行う．フェルミチョッパーの回転周波数（通常数100Hz）はパルス中性子源の繰り返し周波数（J-PARCでは25Hz）に比べて非常に大きいため，1測定周期（J-PARCでは1/25Hz = 40ms）の間に異なるエネルギーの中性子がタイミングを違えていくつも透過することが可能である[2]．しかしながら，従来のフェルミチョッパーは広いエネルギー範囲の中性子を効率良く透過させるには不向きであったことと，仮に複数の入射エネルギーが利用できたとしてもデータ収集・解析系がそれに対応できなかったことなどから，これまでは単独の入射エネルギーしか実験に利用されていなかった．これはパルス中性子装置の1測定周期のうち，ほとんどの時間を測定

に利用していなかったことを意味する．それに対し，「四季」では広いエネルギー領域に対して透過率の高いフェルミチョッパーを開発し（SNSとの共同開発），さらにJ-PARCで新たに開発された柔軟なデータ収集・解析システムを活用することにより，フェルミチョッパー型分光器としては初めてMulti-E_i測定に成功した[3].

図1にMulti-E_i法によって測定した一次元反強磁性体$CuGeO_3$のスピン励起のデータを示す．一次元鎖（c軸）方向に伝搬する励起を測定したもので，入射エネルギー（E_i）の異なる4つのデータが示されているが，これらはすべて1度の測定で同時に得られたものである．E_iの大きいデータでは広いQ-E領域を見渡すことができ，それに対してE_iの小さいデータでは限られた領域を高分解能で詳細に観測できており，一連のデータはお互いに測定領域をズームイン・アウトされた関係になっている．

Multi-E_i法はまだ始まったばかりの新しい測定法であり，この測定法が様々なQ-E空間の測定に有効であることを示したのはおそらくJ-PARCの「四季」が初めてであろう．さらに付け加えれば，測定当時のJ-PARCのビーム出力はまだ20kW弱とISISの1/8弱であったが，図1のデータはわずか5時間半程度の測定時間で得られており，今後ビーム出力が増大すればさらに大量のデータを短時間に得ることが可能になる．それにより，例えばこれまでチョッパー型分光器が苦手としていた三次元系の測定も大きく進展するだろう．今後Multi-E_i法は中性子非弾性散乱測定において広く活用されていくと思われるが，そこからどんな成果が生まれてくるか楽しみである．

本研究および「四季」の建設は科研費特別推進研究「4次元空間中性子探査装置の開発と酸化物高温超伝導機構の解明」（No.17001001，研究代表者：新井正敏）によるものである．また，「四季」の建設は本研究発表者のほか，以下の各氏によって行われた：J-PARCセンター・中島健次，高橋伸明，河村聖子，丸山龍治，曽山和彦，柴田薫，鈴谷賢太郎，中谷健，佐藤節夫，伊藤幸弘，岩橋孝明，神原理，田中浩道，吉田登，相澤一也；原子力機構・脇本秀一，社本真一；東北大・平賀晴弘，大山研司，山田和芳．

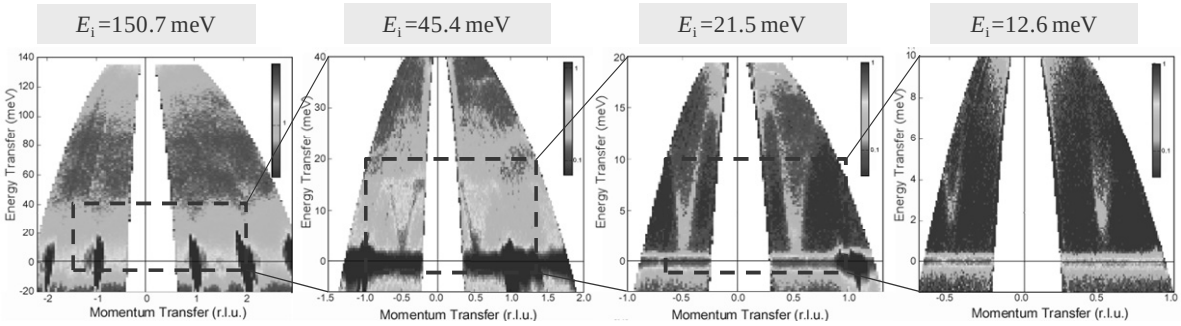


図 1．Multi-E_i 法により同時に測定された $CuGeO_3$ の励起スペクトル．

参考文献

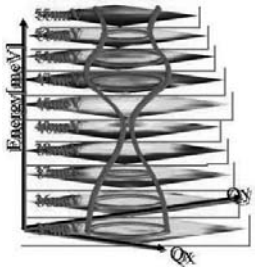
[1] R. Kajimoto *et al.*, J. Neutron Res. **15**, 5 (2007).
[2] F. Mezei, J. Neutron Res. **6**, 3 (1997); F. Mezei *et al.*, Physica B **276–278**, 128 (2000).
[3] M. Nakamura *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 093002 (2009).

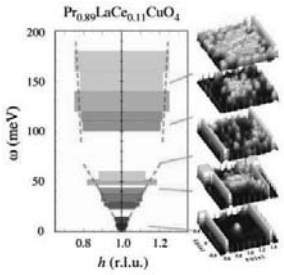
鉄系高温超伝導体研究の最前線　　2009年11月28日

高温超伝導研究と中性子散乱

■磁気励起

砂時計型磁気励起
(YBCO)

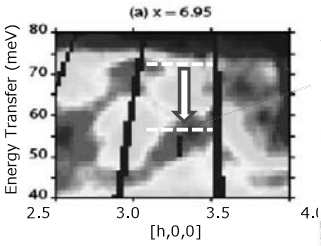




鉛筆型磁気励起
(PLCCO)

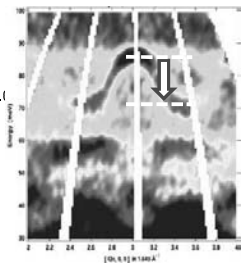
特徴的な磁気励起

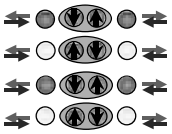
■フォノン



YBCO

LSCO





中性子散乱により発見された酸化物高温超伝導体特有の現象

特徴的なソフト化

様々な高温超伝導体について系統的な測定を行い、高温超伝導体にとって本質的な現象を抽出・特定する必要

これまでの研究施設・実験装置では
ビーム強度が不足し、困難

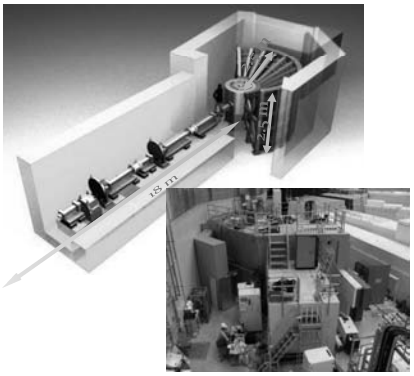
J-PARC　＋　四季　で実現

J-PARC中性子源と「四季」

- 大強度陽子加速器施設（J-PARC）
  物質・生命科学研究施設（MLF）の中性子源
  - 加速器によるパルス中性子源、
    目標陽子ビーム出力1MW
  - 運転状況
    - 2008.5.30：初中性子ビーム
    - 2009.5下旬～：20kW
    - 2009.11～：100kW

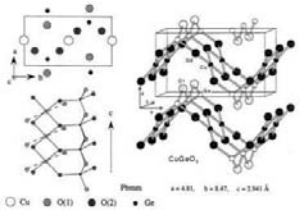
cf. ISIS：160kW
SNS：660kW(1MW?)(目標1.4MW)

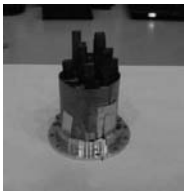
- **「四季」**
  - 科研費特別推進「4次元空間中性子探査装置（四季）の開発と酸化物高温超伝導機構の解明」（研究代表者：新井正敏）
  - 熱中性子領域（数10～数100meV）で大強度・<u>高測定効率</u>を実現するフェルミチョッパー型中性子分光器
  - 整備状況
    - 2005年：設計開始
      - 2005.11.1~2：研究会「量子ビームによる高温超伝導機構の解明」(茨城県五浦)にて概念設計報告
    - 2008.9：初中性子ビーム受入。試験調整開始
    - 2009.6：初非弾性散乱測定

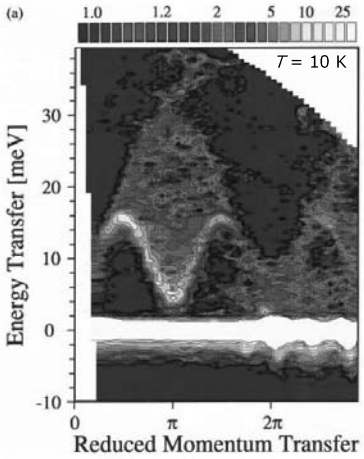


四季の最初の非弾性散乱実験

$CuGeO_3$の磁気励起測定

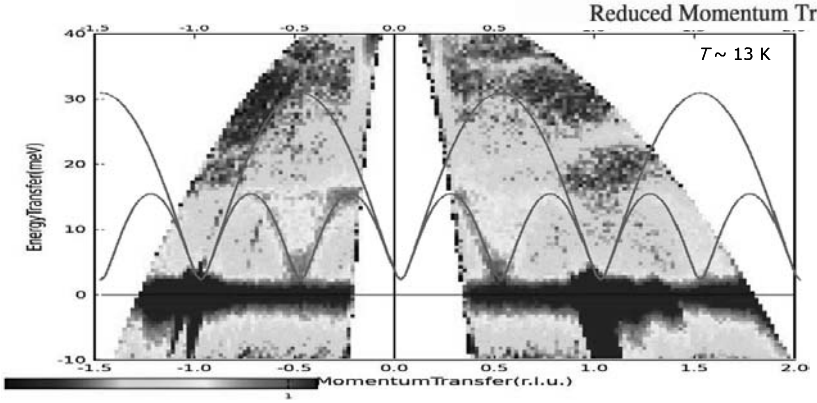






ISIS, MARI
ビーム出力: 160 kW
E_i = 45meV
試料: 15 g
測定時間：半日～1日

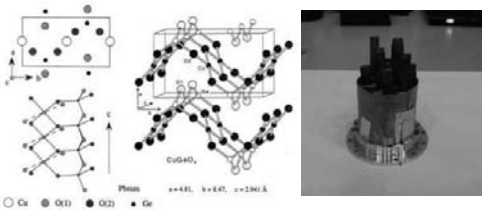
M. Arai *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**(1996) 3649

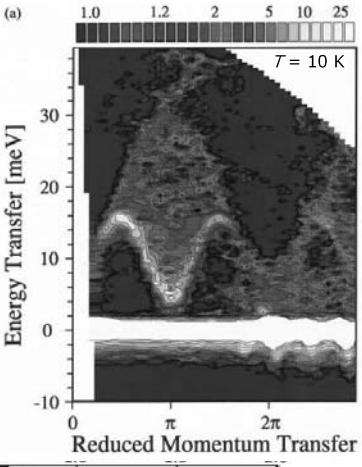


J-PARC, 四季
ビーム出力: ~18 kW
試料: 25 g
T ~ 13 K
測定時間: 5.5hrs

四季の100kW時の非弾性散乱実験

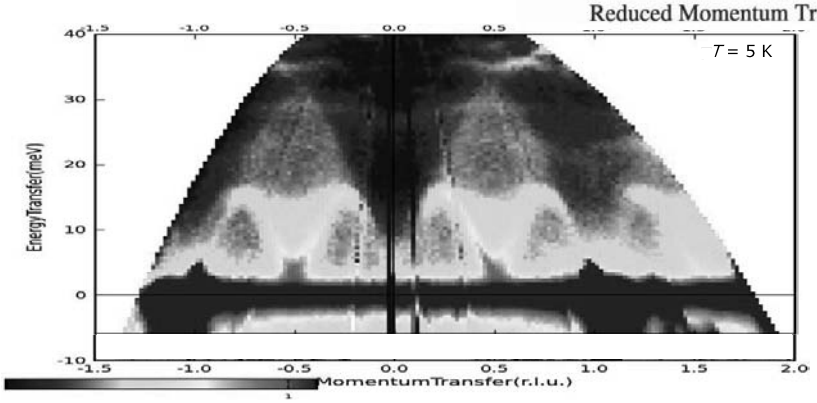
$CuGeO_3$の磁気励起測定





ISIS, MARI
ビーム出力: 160 kW
E_i = 45meV
試料: 15 g
測定時間：半日～1日

M. Arai *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**(1996) 3649



J-PARC, 四季
ビーム出力: ~18 kW
試料: 25 g
T ~ 13 K
測定時間: 5.5hrs

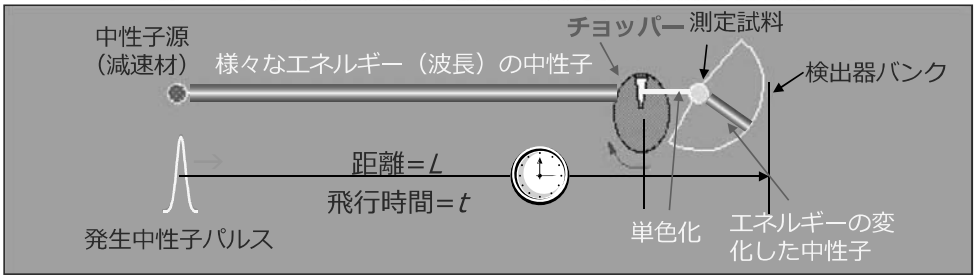
↓

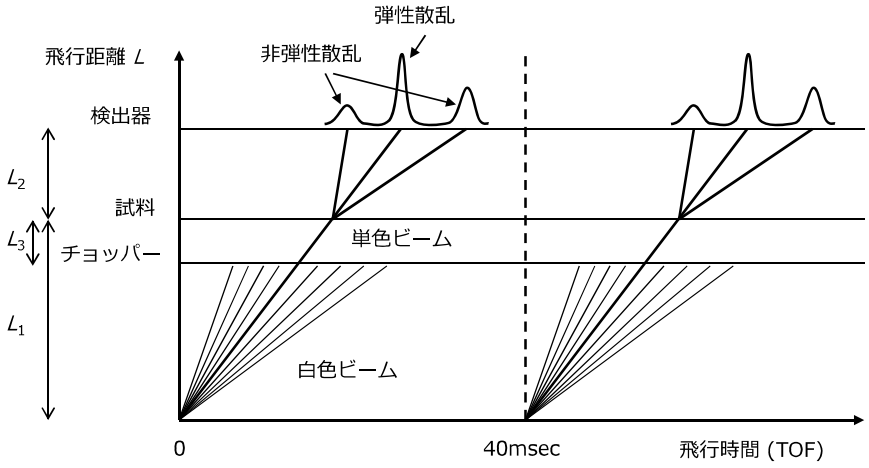
ビーム出力：~100kW
T = 5 K
測定時間：13.7hrs

↓

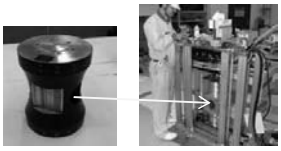
さらに高測定効率を・・・

チョッパー型中性子分光器の原理

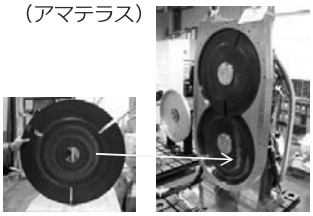




フェルミチョッパー（四季）

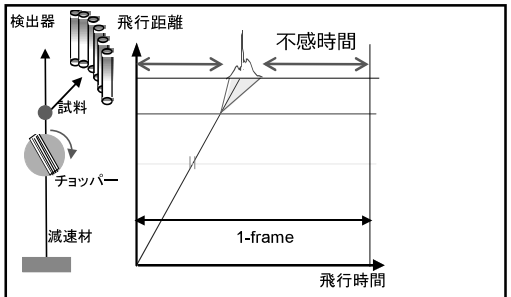


ディスクチョッパー
（アマテラス）



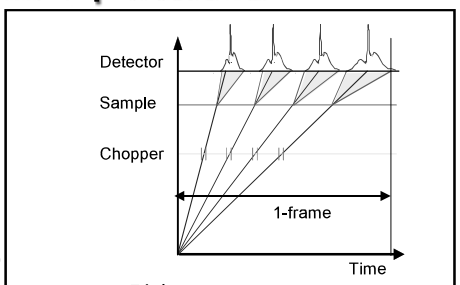
チョッパーによるmulti-E_i 測定法

incident energy



通常のパルス中性子非弾性散乱測定
チョッパーにより単一の入射エネルギーを選択する。

測定効率の大幅な向上 5~6倍



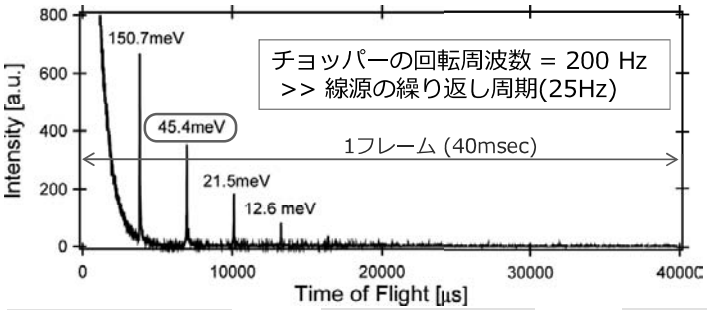
multi-E_i測定
チョッパーが1フレーム内に何回も開条件となることを利用し、異なった入射エネルギーを持つ複数の中性子ビームを同時に利用する。

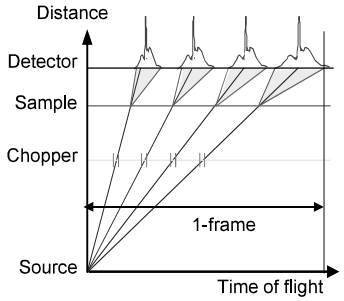
F. Mezei, J. Neutron Research **6** (1997) 3
F. Mezei *et al.*, Physica B **276–278** (2000) 128

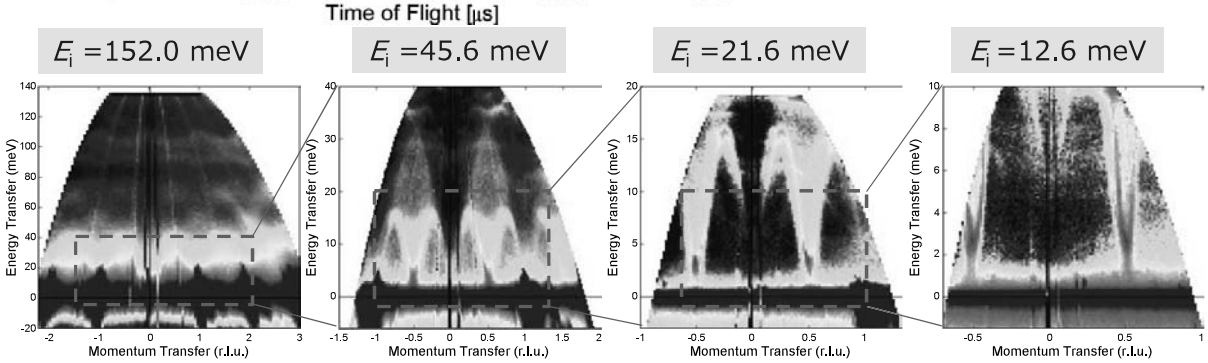
- ディスクチョッパーでは比較的容易　M. Russina and F. Mezei, Nucl. Instr. Meth. A **604** (2009) 624
  - ただし、正しい結果を得るためには様々なチョッパーの組み合わせ等が必要
  - J-PARCでは低エネルギー用分光器「アマテラス」でもmulti-E_i測定に成功
- フェルミチョッパーでは困難
  - 広いエネルギーの中性子を透過できない
  - 四季では広いエネルギーの中性子を透過できる設計にし、multi-E_i測定に対応
- データ解析上の困難

四季におけるmulti-E_i 測定法の実証

詳しくは、M. Nakamura *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 093002







- 一度の測定から測定範囲・分解能の異なる複数のデータ!
  Q-E 空間におけるzoom-out ←→ zoom-in
- J-PARC新開発のデータ収集・解析系による柔軟なデータ解析

まとめ と 今後の課題

- まとめ
  - J-PARCのチョッパー型中性子分光器「四季」の整備が進み、非弾性散乱測定を開始。
  - J-PARCの陽子ビーム出力も100kWに達し、ISIS（160kW）に匹敵するデータが出つつある。
  - 「四季」において、multi-E_i測定の実証に成功（ Fermiチョッパーとしてはおそらく初）。これにより測定効率がさらに向上。
  - 今後の鉄系高温超伝導研究にも期待
  - multi-E_i測定は中性子非弾性散乱測定の効率を飛躍的に高める手法として、今後チョッパー型中性子分光器の測定法として一般的になると思われる。

- 課題
  - 装置自体の整備：
    - S/Nの向上等
  - multi-E_i法の発展：
    - multi-E_i測定の効率をより向上させる新型フェルミチョッパーの開発
    - 実験条件設定補助ツール、データ解析ソフトの高度化
    - データ処理能力の向上

- 本格利用に向けて鋭意装置整備中
- J-PARC/MLF 2010A期課題まもなく募集開始（12/1～1/7）

謝　辞

- $CuGeO_3$測定

  中村充孝[1,2]、稲村泰弘[1,2]、水野文夫[1,2,4]、藤田全基[4]、横尾哲也[1,3]、新井正敏[1,2]

- $La_{1.86}Sr_{0.14}Cu_{0.98}Fe_{0.02}O_4$測定

  藤田全基[4]、山田和芳[4]、中村充孝[1,2]、稲村泰弘[1,2]、新井正敏[1,2]

- 「四季」建設

  中村充孝[1,2]、横尾哲也[1,3]、稲村泰弘[1,2]、水野文夫[1,2,4]、中島健次[1,2]、高橋伸明[1,2]、河村聖子[1,2]、丸山龍治[1,2]、曽山和彦[1,2]、柴田薫[1,2]、鈴谷賢太郎[1,2]、中谷健[1,2]、佐藤節夫[1,3]、伊藤幸弘[1,2]、岩橋孝明[1,2]、神原理[1,2]、田中浩道[1,2]、吉田登[1,2]、相澤一也[1,2]、新井正敏[1,2]、脇本秀一[2,1]、社本真一[2]、藤田全基[4]、平賀晴弘[4]、大山研司[4]、山田和芳[4]

1) J-PARCセンター、2) JAEA、3) KEK、4) 東北大

6. 層状ニクタイドにおけるブロック層の構造と超伝導特性

東京大工学系研究科 [A]、JST-TRIP [B]
荻野拓 [A,B], 下山淳一 [A,B], 岸尾光二 [A,B]

Relationship between structure of blocking layers and superconducting properties in layered pnictides

School of Engineering, University of Tokyo [A], JST-TRIP [B]
Hiraku Ogino[A,B], Jun-ichi Shimoyama[A,B], Kohji Kishio[A,B]

昨年 LaFeAsO において 26 K の超伝導転移[1]が報告され、Fe^{2+}の正方格子を有する鉄系超伝導体が銅酸化物に次ぐ高温超伝導体群として注目を集めている。鉄系超伝導体の T_c は現在までのところ SmFeAs(O,F)などで 55 K 程度に達しているが、この 1 年余り T_c の最高記録は更新されていない。鉄系超伝導体の更なる高 T_c 化の条件としては、経験的な面からは結晶構造の二次元性が高いこと、$FeAs_4$ 四面体の対称性が高いことが、理論的な面からは Fe 面からの As 原子の高さ(Pnictogen height)が高いこと[2]が挙げられている。これまでにこの系に属する結晶構造としては、*RE*Fe*Pn*O, *AE*FeAsF（以下 1111 系、*RE*:希土類金属、*AE*:アルカリ土類金属、*Pn*:ニクタイド）・$AEFe_2As_2$・*A*FeAs（*A*:アルカリ金属）・Fe*Ch*（*Ch*:カルコゲン）などが発見されているが、1111 系より複雑な構造は発見されていなかった。以上の背景のもと本講演では、T_c 化の可能性を秘めた新物質群として、鉄ニクタイド層間へのペロブスカイト酸化物層の導入を試みた我々の研究経過を報告する。

厚いブロック層を有する層状ニクタイドの設計に当たって、我々はペロブスカイト酸化物層を有する銅硫化物に着目した。この系は、図 1 のようにペロブスカイト酸化物層が様々な構造を取りうること、ペロブスカイト層の B サイト金属として Mn・Sc・Cu など複数の金属元素が入りうること[3]が知られている。鉄ニクタイドにおいても、このような化合物の例として昨年 11 月に $(Fe_2As_2)(Sr_3Sc_2O_5)$が報告されている[4]。我々は過去の酸硫化物の物質探索の経験から、この系の相生成においては構成元素のイオン半径・安定価数・イオン化傾向などが重要であることを見出しており、これらの条件を満たす元素の組み合わせを用いて更なる新物質を探索した結果、新超伝導体群として$(M_2Pn_2)(Sr_4M'_2O_6)$を見出し、*M* = Fe,Ni、*M'* = Sc,Cr 等の新物質を発見した[5]。これらペロブスカイト層を有する Fe ニク

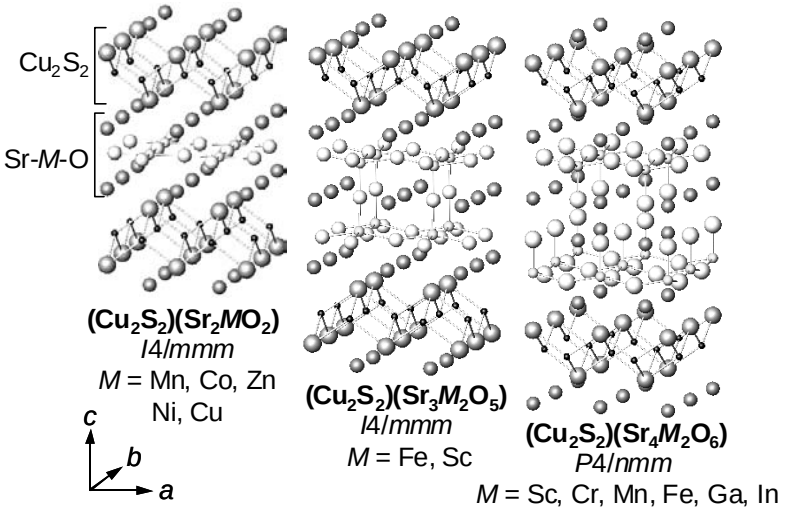


図1 ペロブスカイト酸化物層を有する銅硫化物

タイドの新物質は、厚いブロック層を反映して *c* 軸長は 15 ~ 16Å 程度と 1111 系の 2 倍近い値で、非常に二次元性の強い結晶構造を有している。また図 2 のようにペロブスカイト層を有する系は、ニクタイド層の *Pn*-Fe-*Pn* 角が小さく、同時に Pnictogen height が高いことが分かった。この理由としては、ニクタイド層の最近接原子が *RE* より電気陰性度の低い *AE* であること、構造的にアニオン間の反発が弱いことが挙げられる。

これら新物質のうち$(Fe_2P_2)(Sr_4Sc_2O_6)$は超伝導転移温度が 17 ~ 19 K と、FeP 層を有する物質としては最も高い値であり、従来 LaFePO の T_c が 7 ~ 9 K と報告されているのと比較すると 2 倍以上の値である。また、$(Fe_2As_2)(Sr_4V_2O_6)$・$(Fe_2As_2)(Sr_4(Mg,Ti)_2O_6)$は常圧下で 40 K 弱の T_c を示し、更に高圧下では 40 K 以上まで上昇する。この T_c は鉄系超伝導体としては *RE*FeAsO 系に次ぐものである。ただし$(Fe_2As_2)(Sr_4V_2O_6)$は仕込み上は定比で、$(Fe_2As_2)(Sr_4(Mg,Ti)_2O_6)$は Ti 過剰組成で超伝導を発現しており、超伝導化のガイドラインははっきりしていない。また$(Cu_2S_2)(Sr_3Sc_2O_5)$・$(Fe_2As_2)(Sr_4Sc_2O_6)$・$(Fe_2As_2)(Sr_4Cr_2O_6)$などについては、今のところ信頼性のある超伝導化の報告はなされていない。なお、これらの Ni 置換体である$(Ni_2Pn_2)(Sr_4Sc_2O_6)$なども LaNi*Pn*O と同様に 2~3 K で超伝導を示す。

このようにペロブスカイト酸化物層を有する金属ニクタイドは、結晶構造の二次元性が高く Pnictogen height が高いなど、構造的な面で鉄系超伝導体の高 T_c のガイドラインを満たしており、実際に$(Fe_2P_2)(Sr_4Sc_2O_6)$・$(Fe_2As_2)(Sr_4V_2O_6)$などが比較的高い T_c を有している。ただし超伝導を発現する化学組成のガイドラインははっきりしておらず、磁気秩序が見られないなど従来の鉄系超伝導体とは異なる点も多い。しかしながらブロック層に 3d 遷移金属が導入可能でブロック層自体の物性も制御できること、多元系で新物質開発やキャリアドープの手段が多岐に渡ることなどから、本系において更なる新物質を探索すること、画期的なキャリアドープ手法を確立することによって、従来の鉄系超伝導体を超える高い T_c が実現できると考えている。

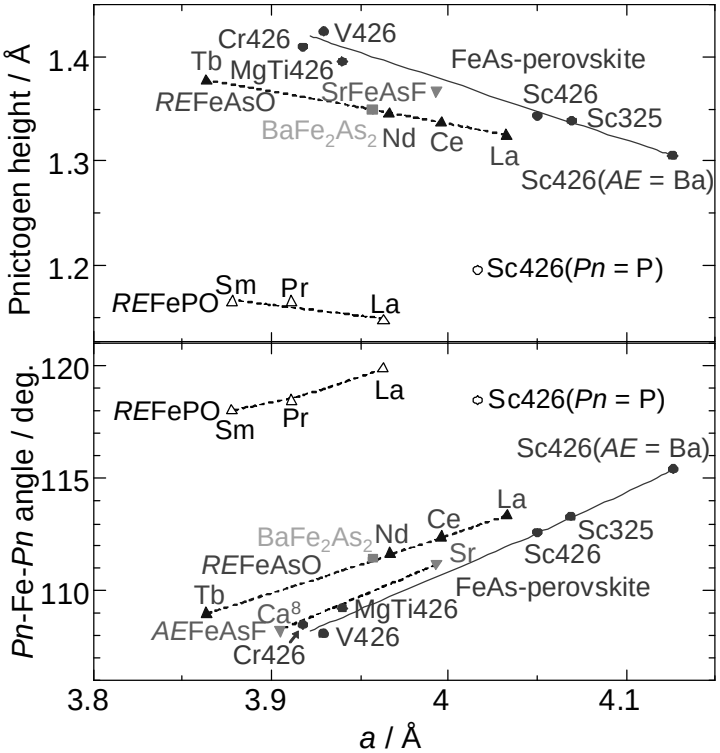


図2　様々なFeニクタイドのPnictogen height及び *Pn*-Fe-*Pn*角と*a*軸長（ $(Fe_2As_2)(Sr_4M_2O_6)$等を*M*426などと略）

参考文献

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

[2] C.H. Lee et al., J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) 083704, K. Kuroki et al., Phys. Rev. B 79 (2009) 224511 等

[3] W.J. Zhu and P.H. Hor, J. Solid State Chem. 130 (1997) 319, K. Otzschi et al., J. low Temp. Physics, 117 (1999) 729 等

[4] X. Zhu et al, Phys. Rev. B 79 (2009) 024516.

[5] H. Ogino et al.,: Supercond. Sci. Technol. 22 (2009) 075008., S. Sato et al., arXiv: 0909.2945 等

Sat. Nov. 28, 2009 Ueno, Japan 鉄系高温超伝導体研究の最前線

ペロブスカイト酸化物層を持つ層状ニクタイドの合成と超伝導特性

東京大学大学院工学系研究科
荻野 拓

下山淳一・岸尾光二
松村友多佳・牛山晃一・佐藤伸也・川口直登

高知工科大学 堀井滋

産総研 永崎洋・伊豫彰

神戸大 小手川恒・藤秀樹

理研 岡本(桂)ゆかり

東京大学 THE UNIVERSITY OF TOKYO

発表のアウトライン

- イントロダクション
- ペロブスカイト酸化物層を持つ鉄ニクタイドの設計と合成
  - 銅硫化物系での物質探索
  - 本系の設計指針
- ペロブスカイト酸化物層を持つ鉄ニクタイドの新物質と物性
  - ペロブスカイト酸化物層を持つ鉄ニクタイドの新物質
  - 新物質の構造
  - 新物質の物性
  - Ni*Pn*層を持つ新物質の物性
- まとめ

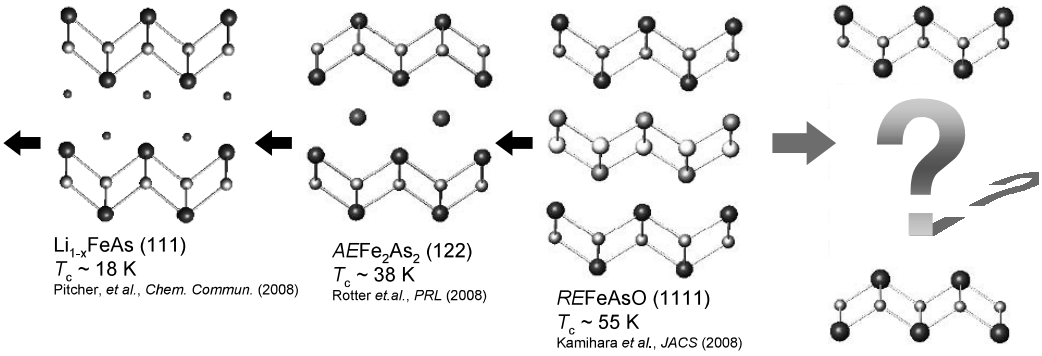
- **化合物の名称について**

	$(M'_2Pn_2)(AE_2MO_2)$ (212)	$(M'_2Pn_2)(AE_3M_2O_5)$ (325)	$(M'_2Pn_2)(AE_4M_2O_6)$ (426)
	I4/mmm	*I4/mmm*	*P4/nmm*
IUPAC	$AE_2MM'_2Pn_2O_2$	$AE_3M_2M'_2Pn_2O_5$	$AE_2MM'PnO_3$

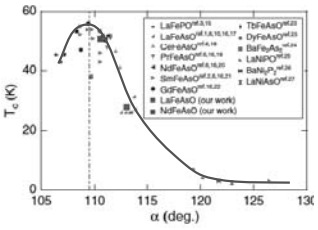
他に $AE_4M_2O_6M'_2Pn_2$ 、$AE_2MO_3M'Pn$、$AE_4M_2M'_2Pn_2O_6$ など

2

鉄ニクタイド系超伝導体の構造とT_cの決定因子

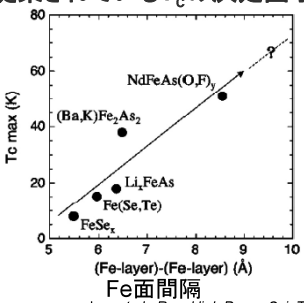


提案されているT_cの決定因子



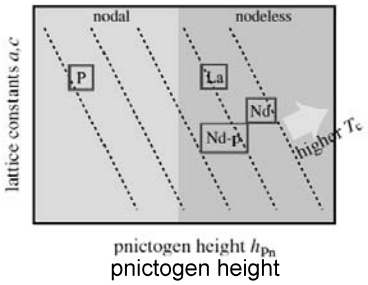
Pn-Fe-*Pn* 角

Lee *et al.*, *JPSJ* (2008)



Fe面間隔

Lee *et al.*, *Rev. High Press. Sci. Tech.* (2009)

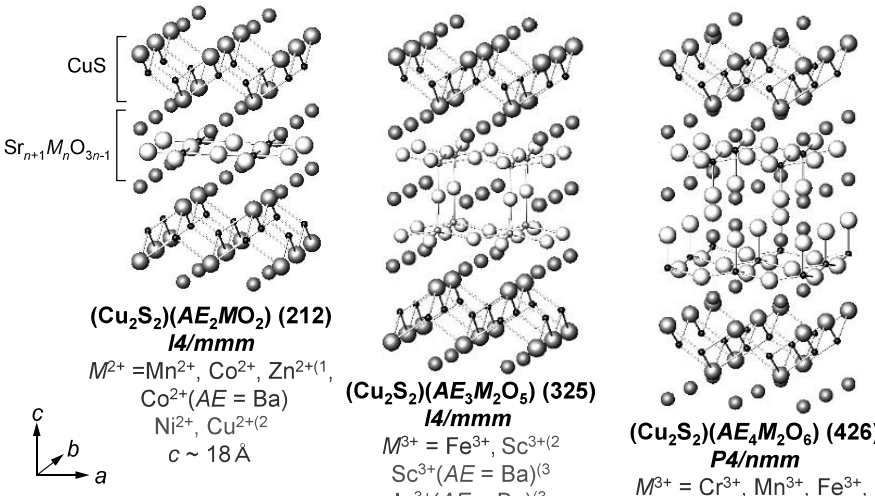


pnictogen height

Kuroki *et al.*, *Phys. Rev. B* (2009)

3

ペロブスカイト酸化物層を持つ層状銅硫化物



$(Cu_2S_2)(AE_2MO_2)$ (212)
I4/mmm
M^{2+} =Mn^{2+}, Co^{2+}, Zn^{2+}(1, Co^{2+}(*AE* = Ba) Ni^{2+}, Cu^{2+}(2
c ~ 18 Å

$(Cu_2S_2)(AE_3M_2O_5)$ (325)
I4/mmm
M^{3+} = Fe^{3+}, Sc^{3+}(2 Sc^{3+}(*AE* = Ba)(3 In^{3+}(*AE* = Ba)(3
c ~ 25 Å

$(Cu_2S_2)(AE_4M_2O_6)$ (426)
P4/nmm
M^{3+} = Cr^{3+}, Mn^{3+}, Fe^{3+}, Ga^{3+}, In^{3+}, Sc^{3+}(3
c ~ 16 Å

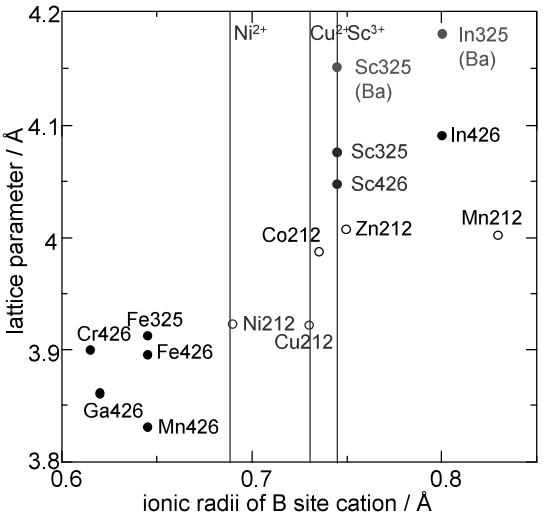
IUPAC命名法	$AE_2MCu_2S_2O_2$	$AE_3M_2Cu_2S_2O_5$	AE_2MCuSO_3

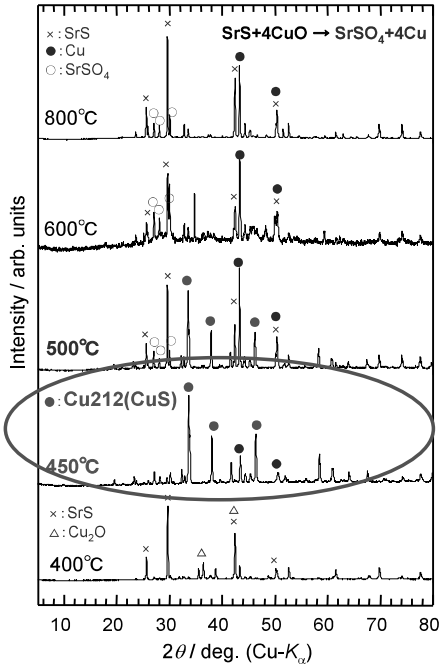
- 鉄系超伝導体のFeAs層と同様のCuS層とペロブスカイト型酸化物層との積層
- 構成元素とペロブスカイト層の積層形態に多様性

1) Zhu *et al.*, *J. Sol. Stat.. Chem.* **130** (1997) 319. etc. 2) Otzschi, Ogino *et al.*, *J. Low Temp. Phys.* **117** (1999) 729 3) Ogino *et al.*, APS March meeting 2009

4

ペロブスカイト酸化物層を持つ銅硫化物の探索

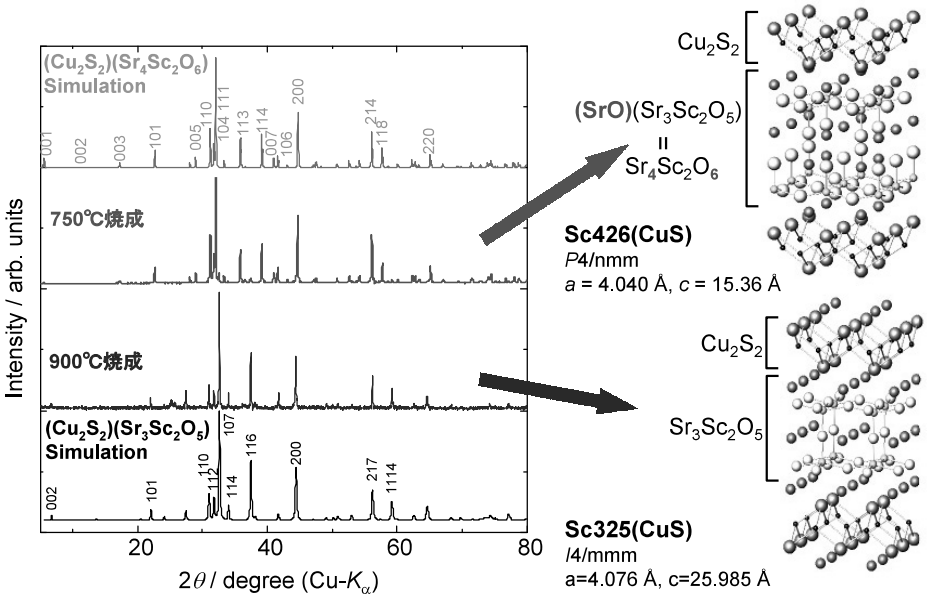




- ペロブスカイトBサイトカチオンのイオン半径が適切
- 合成温度域でカチオンの価数（212: +2, 325, 426: +3, Cu: +1）が安定

Cu212(CuS){$(Cu_2S_2)(Sr_2CuO_2)$}の合成結果

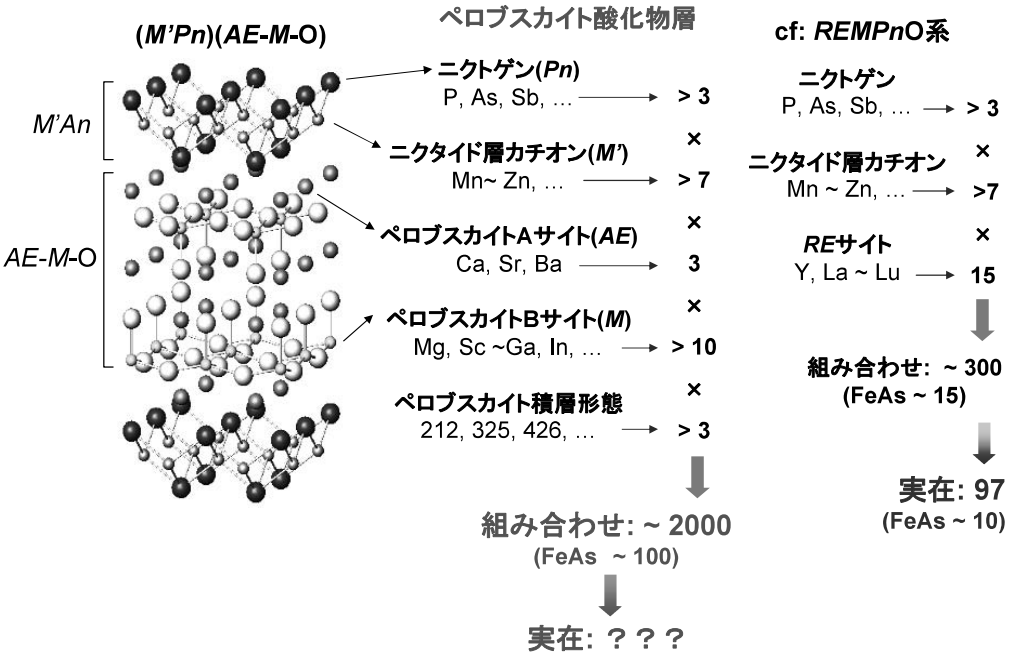
Sc325(CuS)とSc426(CuS)



- 合成温度により生成相が異なり、低温域（~750℃）ではSc325(CuS)と別構造のSc426(CuS)が生成

6

ペロブスカイト層を持つ層状ニクタイドのバリエーション



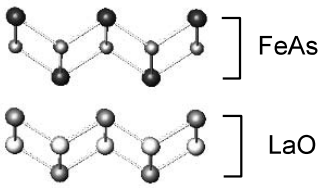
7

ペロブスカイト酸化物層を持つ鉄系超伝導体の設計指針

(*FePn*)(*AE-M*-O)

- イオン半径　*AE*サイト: 1.44(Sr^{2+} 12配位) ~ 1.61Å(Ba^{2+}) 程度
  *M*サイト: 0.62(Cr^{3+} 6配位) ~ 0.82Å(Mn^{2+}) 程度

- カチオンの価数　Fe:+2; 酸素との共存下としては低価数 ⇒ 高温の還元雰囲気が必要
  *M*サイトカチオンも同じ条件で目的価数を取る必要



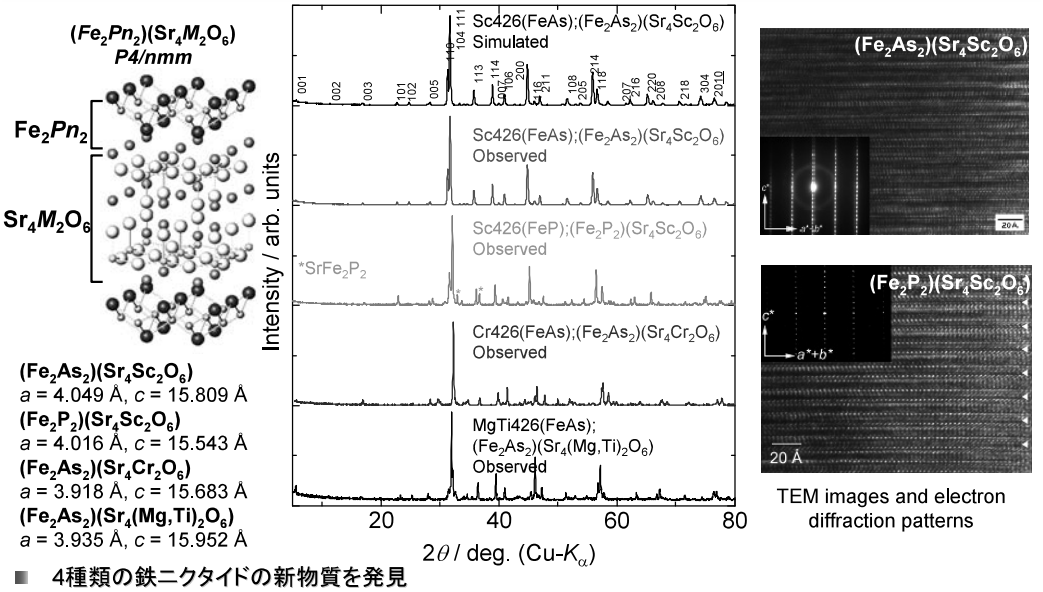
- LaFeAsO: (La-O) + (Fe-As)
- (*M'-An*)(*AE-M*-O): (*M'-An*) + (*AE-M*-O)
  の組み合わせでなければ相は生成しない
  (*M'*-O, *M-Pn*では生成しない)

⇩

イオン化傾向

8

鉄ニクタイド層を持つ新物質 Sc426(FeAs,FeP), Cr426(FeAs), (MgTi)426(FeAs)



- 4種類の鉄ニクタイドの新物質を発見
- 酸化物層の金属元素に多様性
- *c*軸長は15.5 ~ 16 Å程度⇒他の鉄系超伝導体の2 ~ 3倍

9

ペロブスカイト酸化物層を持つ層状ニクタイドの報告例

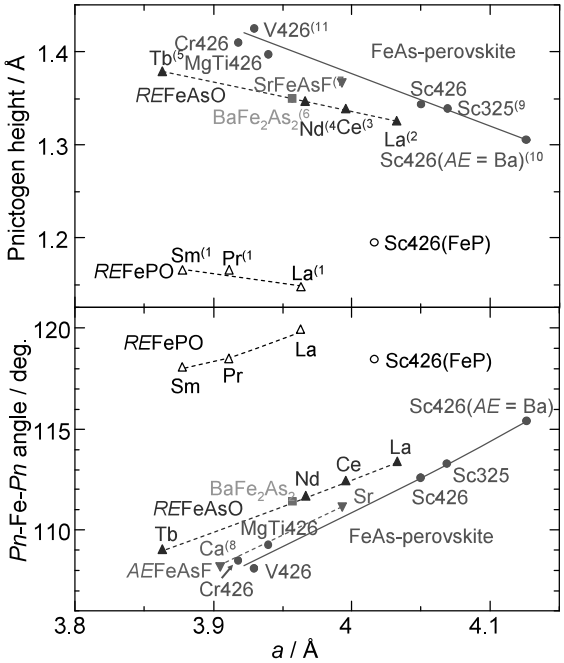
- arXivに投稿された関連論文（新物質、T_cに関するもののみ）

2008. Nov. 13	Zhu *et al.*	Sc-325(FeAs)	非超伝導
2009. Mar. 19	**Ogino *et al.***	**Sc426(FeP)**	**超伝導、T_c = 17 K**
2009. Mar. 30	**Ogino *et al.***	**Sc426, Cr-426(FeAs)**	非超伝導、Sc以外のカチオン
2009. Mar. 30	Chen *et al.*	Sc426(FeAs), Ti-doped	超伝導の兆候？
2009. Mar. 31	Xie *et al.*	Sc426(FeAs, CoAs)	非超伝導
2009. Apr. 2	Tegel *et al.*	Sc426(FeAs; *AE* = Ba)	非超伝導
2009. Apr. 3	**Matsumura *et al.***	**Sc426(NiP, NiAs)**	超伝導、T_c = 2.7, 3.6 K
2009. Apr. 6	Zhu *et al.*	Cr426(FeAs), Ti doped	超伝導の兆候？
2009. Apr. 10	Zhu *et al.*	V426(FeAs)	**超伝導、T_c = 37.2 K**
2009. Aug. 11	**Kotegawa *et al.***	V426(FeAs)	**圧力下でT_c = 46 K**
2009. Sep. 16	**Sato *et al.***	**MgTi426(FeAs)**	**T_c = 39 K**
2009. Oct. 8	Han *et al.*	V426(FeAs)	**T_c = 40 K**, 酸素欠損でT_c減少？

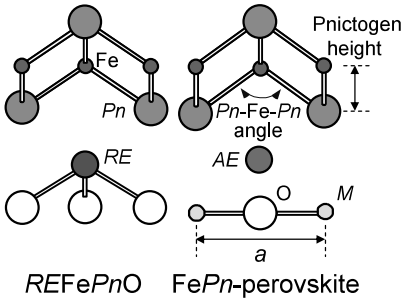
青字：新物質

10

ペロブスカイト酸化物層を持つ鉄ニクタイドの構造的特徴



Ogino *et al.*, *Physica C, in press*



- *AE*の電気陰性度 < *RE*の電気陰性度
- O^{2-}とPn^{3-}間の反発が弱い

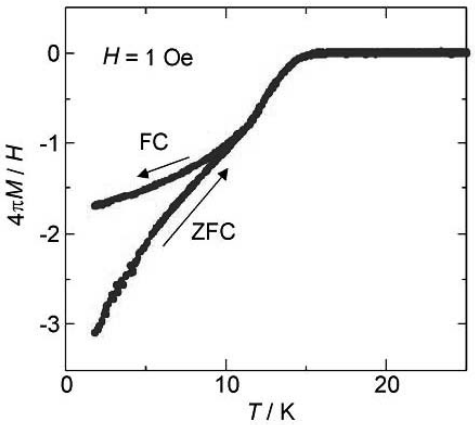
⬇

- **高いpnictogen height**
- **小さい*Pn*-Fe-*Pn*角**

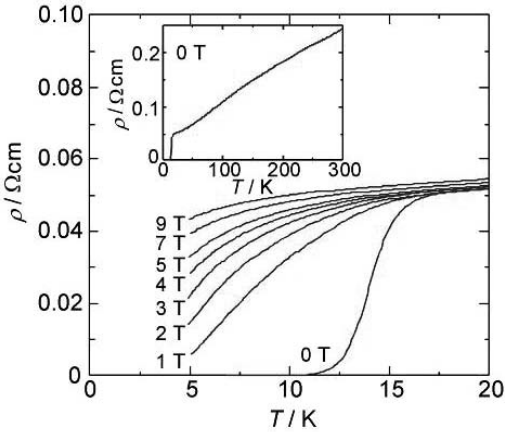
1) Zimmer *et al.*, *J. Alloys Compd.* 1995.
2) Nomura *et al.*, *SuST* 2008.
3) Zhao *et al. Nature Mat.* 2008.
4) Lee *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* 2008.
5) Bos *et al. Chem. Commun.* 2008.
6) Huang *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 2008.
7) Tegel *et al.*, *EPL*, 2008.
8) Nomura *et al. arXiv*:0811.4614v1
9) Zhu *et al.*, *Phys. Rev. B* 2009
10) Tegel *et al.*, Z. Anorg. Allg. Chem. (2009)
11) Zhu *et al.*, *Phys. Rev. B* (2009)

11

新鉄系超伝導体Sc426(FeP)



$(Fe_2P_2)(Sr_4Sc_2O_6)$ の磁化率の温度依存性

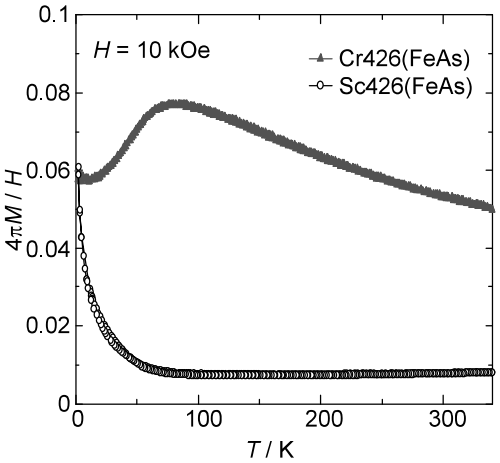


$(Fe_2P_2)(Sr_4Sc_2O_6)$ の抵抗率の温度依存性

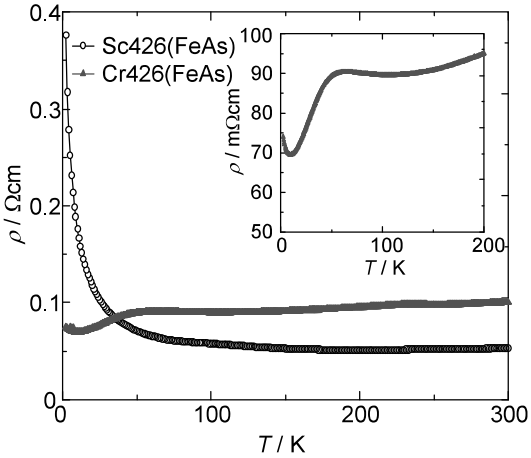
- キャリアドープなしで超伝導を発現（LaFePOと同様）
- T_c = 12 ~ 17 K (合成条件に依存)でバルクの反磁性
- FeP層を持つ物質で最も高いT_c（ヒ素フリーでも常圧では最高）

12

Sc426(FeAs), Cr426(FeAs)の物性



$(Fe_2As_2)(Sr_4M_2O_6)$ (M = Sc, Cr) の
磁化率の温度依存性

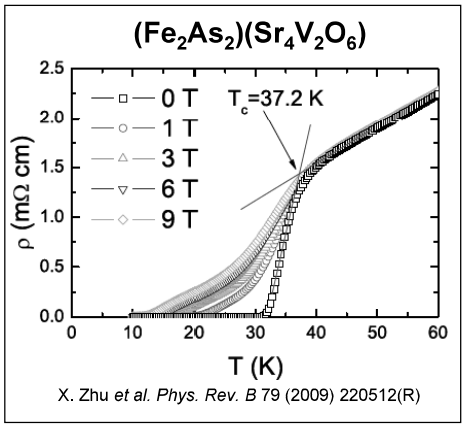


$(Fe_2As_2)(Sr_4M_2O_6)$ (M = Sc, Cr) の
抵抗率の温度依存性

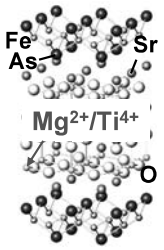
- アンドープの*RE*FeAsOと同様に超伝導を示さない
- Sc426は磁化率・抵抗率の異常を持たない
- 今のところCo, F等のドーピングによっても超伝導が発現していない

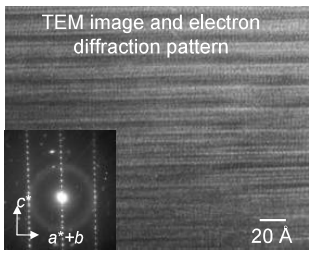
13

超伝導を示す鉄ニクタイド V426, MgTi426(FeAs)

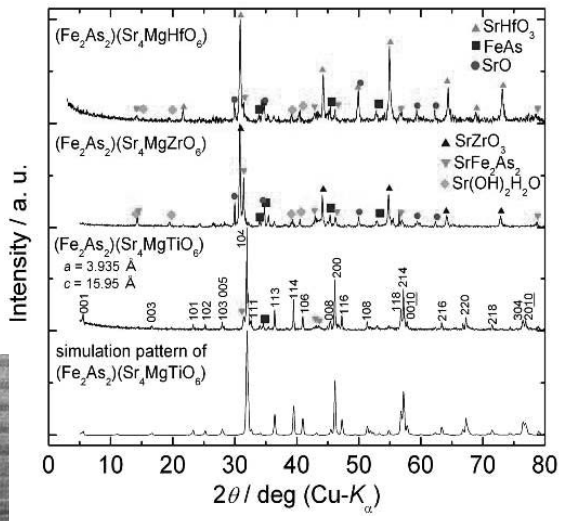


X. Zhu *et al. Phys. Rev. B* 79 (2009) 220512(R)



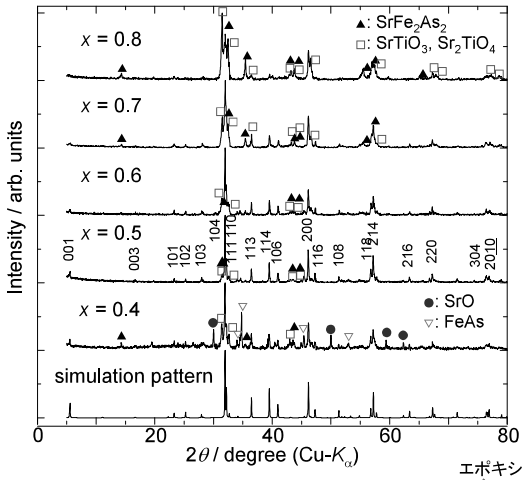


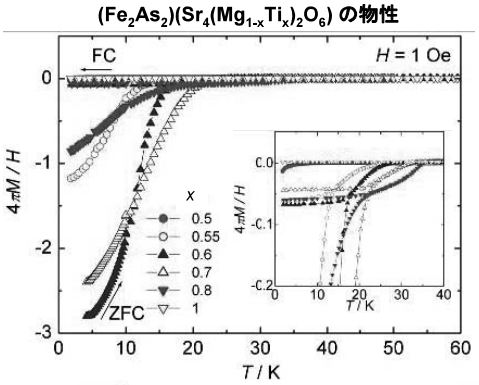
ダブルペロブスカイト酸化物層を持つ新物質
MgTi426(FeAs)

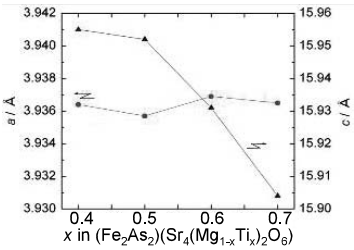


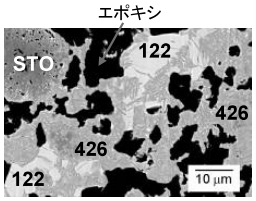
14

MgTi426(FeAs)のTi rich組成での超伝導の発現

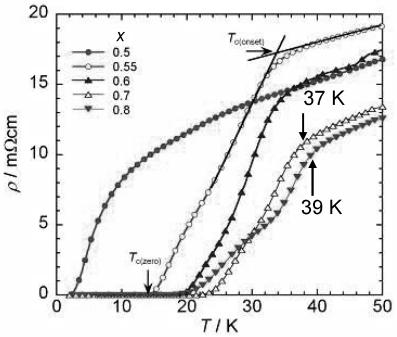






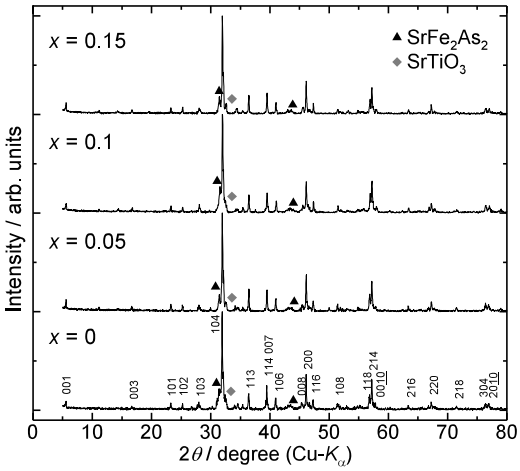


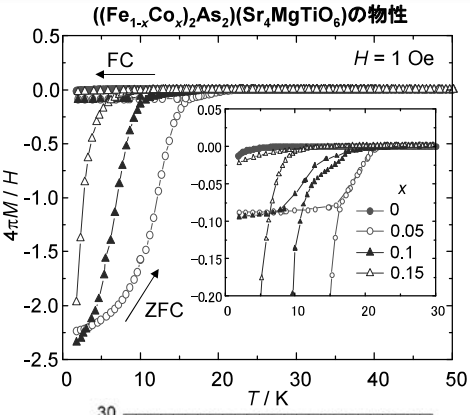
SEM像

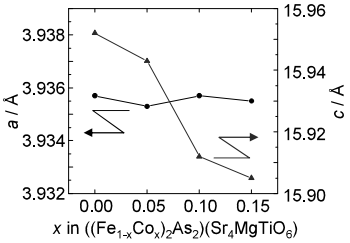


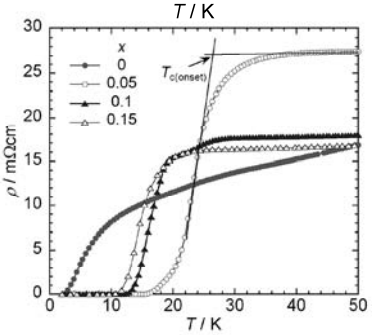
5

MgTi426(FeAs)のCoドープでの超伝導の発現



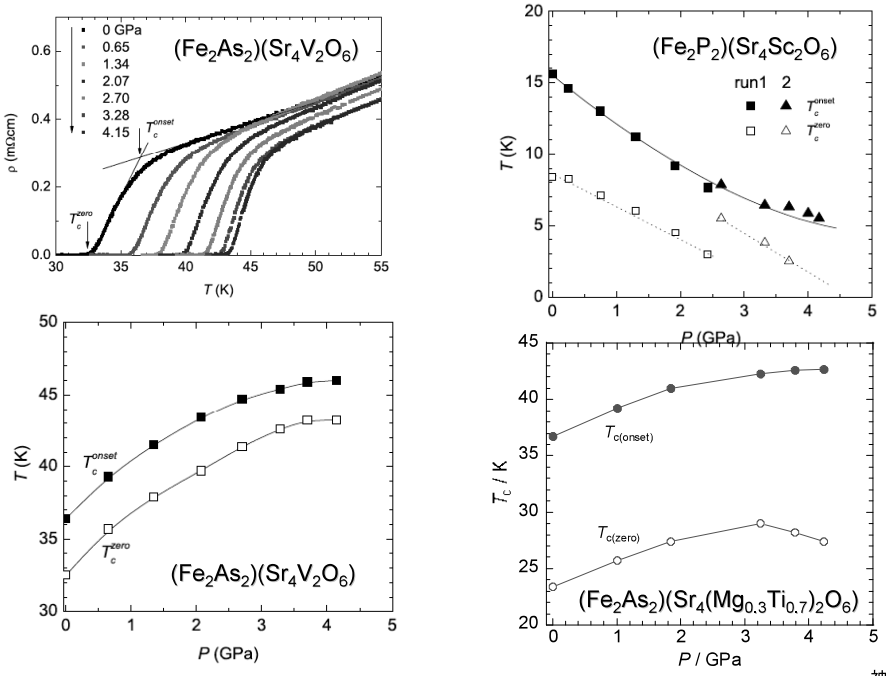






16

ペロブスカイト酸化物層を持つ鉄系超伝導体の高圧下物性

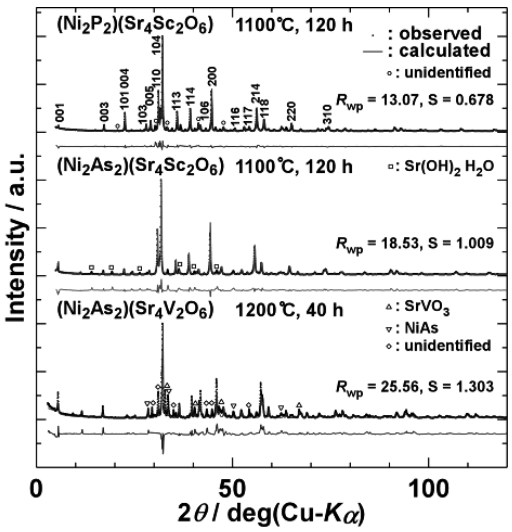


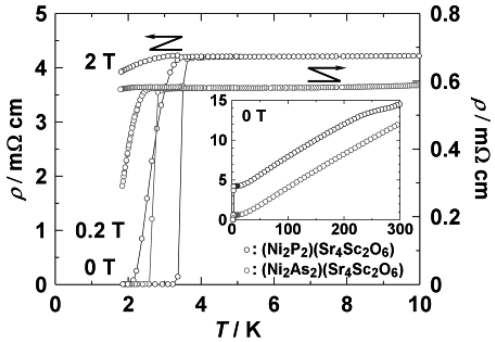
神戸大にて測定

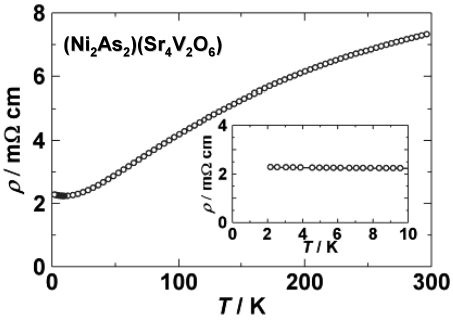
- $(Fe_2As_2)(Sr_4V_2O_6)$ ・$(Fe_2As_2)(Sr_4(Mg,Ti)_2O_6)$ で圧力下で40 Kを超えるT_c

17

Sc426(NiP, NiAs), V426(NiAs)の特性



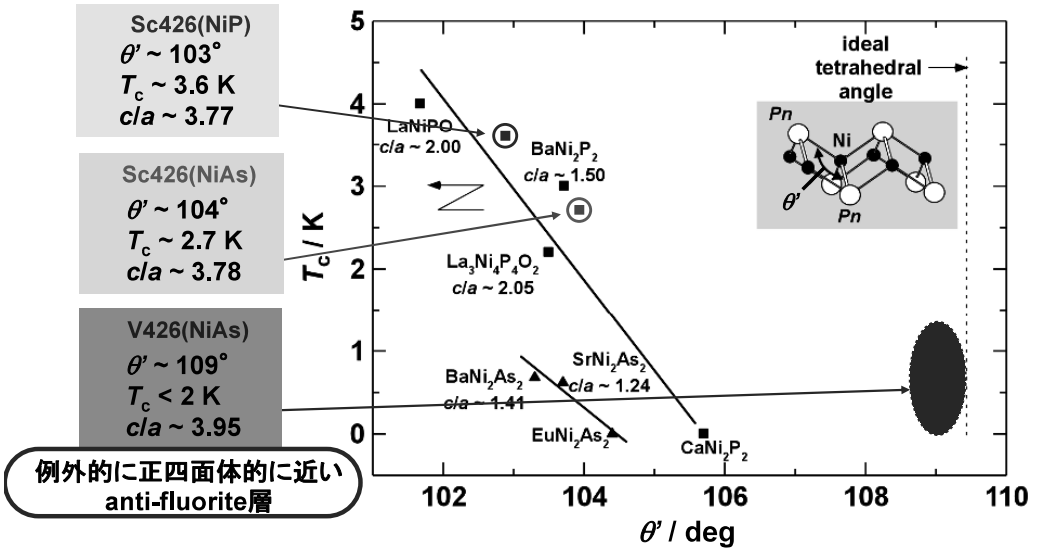




- Ni*Pn*層を持つ三種の超伝導体を発見
- Sc426(NiP, NiAs)は3.6 K, 2.7 Kで超伝導を示す

18

Niニクタイドの構造とT_c の関係



Y. Matsumura *et al.*, *J. Phys. Conf. Ser., accepted*
Re-plotted from
T. M. McQueen *et al.*, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 172502.

- 結晶構造の二次元性よりも*Pn*-Ni-*Pn*結合角がT_cに影響

19

ペロブスカイト酸化物層を持つニクタイドの超伝導特性

	*REM'Pn*O		(*M'*-*Pn*)(Sr-*M*-O)			
M' / *Pn*	Fe	Ni	Fe		Ni	
P	4 K (undoped) 7 K (F-doped)	4 K	Sc426	~ 17 K (undoped)	Sc426	3.6 K
As	non super (undoped) ~ 55 K(F-doped, O deficiency)	2.7 K	Sc325 Sc426 Cr426 V426 MgTi426	non super (undoped) non super (undoped) non super (undoped) super (nominal) ~40 K(amb.), ~46 K(h.p.) super (Ti rich, Co, Ni) ~39 K(amb.), ~42 K(h.p.)	Sc426 V426	2.7 K -

- (FeAs)で最も多くの物質が存在
- (FeAs)以外でundopedで超伝導が発現すること、Ni系のT_cが低いことは共通
- Sc426(FeP) は*RE*FePOより高い(FeAsより低い)T_c
- (FeAs)は酸化物層の種類によって挙動が異なる
  - Sc325, Sc426, Cr426(FeAs) – 非超伝導（Tiドープ等での超伝導化の報告[1,2]あり）
  - V426(FeAs) – nominalで超伝導、酸素欠損でT_c減少？
  - MgTi426(FeAs) – 電子ドープで超伝導

1) Chen *et al.*, *arXiv*:0903.5273, 2) Zhu *et al.*, *arXiv*:0904.0972

20

まとめ

- **ペロブスカイト酸化物層を持つ層状ニクタイドの設計**
  - 多元系で大きな材料探索の余地がある一方、物質設計には価数・イオン半径のほか、イオン化傾向など化学的性質を考慮する必要がある

- **ペロブスカイト酸化物層を持つ層状ニクタイドの新物質と物性**
  - FeP層を持つ物質1種、FeAs層を持つ物質6種が存在
  - 二次元性が高く、ブロック層の金属元素に多様性
  - 高いPnictogen height、小さい*Pn*-Fe-*Pn*角
  - Sc426(FeP)はFeP層を持つ物質中最も高いT_c
  - Sc325, Sc426, Cr426(FeAs)は超伝導を示さず、V426, MgTi426(FeAs)は常圧下で~40 K、高圧下で ~ 45 Kと1111系に次ぐT_cを示すが、超伝導化の条件が確立していない
  - Ni*Pn*層を持つ物質のT_cは局所構造に依存し、~ 4 Kで超伝導を示す

- **今後の展開**
  - FeP, FeAs層を持つ新物質の探索（ペロブスカイト層の置換）
  - キャリアドープ法の開発、構造の最適化

21

7. FeSe, FeTe 系超伝導体

物質材料研究機構[A]、筑波大[B]、JST-TRIP [C]
高野義彦[A,B,C]

Superconductivity in FeSe and FeTe system

NIMS [A], Tsukuba Univ.[B], JST-TRIP [C]
Yoshihiko Takano[A,B]

鉄系超伝導体の興味深い点の一つは、超伝導面に様々なバラエティーがあることである。Tc が高く代表的な FeAs 面を持つ系について研究が進んでいるが、最初の発見は FeP 面であったことを忘れてはならない。そして、最もシンプルな結晶構造を持つ鉄系超伝導体が FeSe である。この物質は、鉄面間にブロック層が無く、鉄系超伝導体の中で最もシンプルな結晶といえよう。この FeSe に類似する FeTe に S をドープしたものも超伝導に成る。そう考えると、鉄を基本とする超伝導面には、FeP, FeAs, FeSe, FeTe の4つがあることになる。このように超伝導面にバラエティーがたくさんあることは、類似物質にも沢山のバラエティーがあることを暗示しており、今後、様々な関連物質に超伝導が発見される可能性を示唆しているものと考えられる。銅系の高温超伝導体と比較して考えると、銅酸化物高温超伝導体の場合、頂点酸素の有無の違いはあるものの、基本的に超伝導面は CuO2 面に限定されていた。対称的に、鉄系超伝導体は、超伝導面に多彩なバラエティーがあることが特徴の一つとして挙げられよう。

最もシンプルな鉄系超伝導体である FeSe は、物質そのものは 70 年以上も前の 1930 年代に発見されている既知物質であるが、この鉄系超伝導フィーバーがきっかけで、超伝導体であることが明らかになるという珍しい発見の経緯である。まさに MgB2 を彷彿させるような出来事といえよう。二度あることは三度ある･･･かもしれない。FeSe は、超伝導発見当初、Tc~8K と、あまり高くなかったため、大きな注目を集めなかった。しかし、圧力セルで約 4-6GPa 程度の圧力を印加したところ、Tc は約 37K へ急上昇することが明らかになった。二元系超伝導としては、MgB2 や CsC60 に次ぐ高い Tc である。

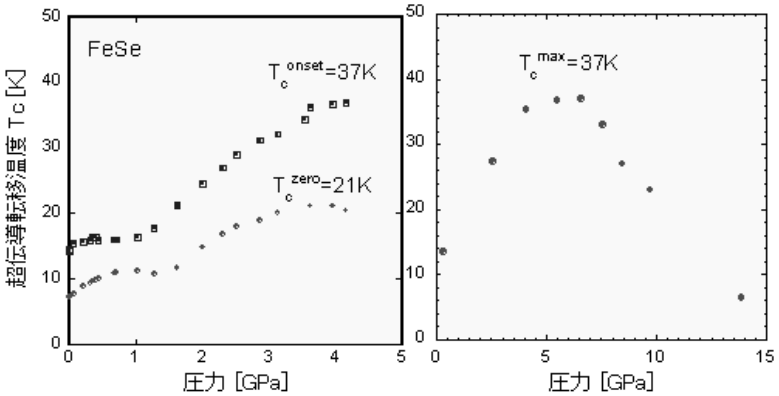


図1. FeSe の超伝導転移温度の圧力効果

次に、FeSe と FeTe およびその間に位置する物質が、どのような相図を描くのか図2にまとめた。Se と Te の比を変化させた試料 Fe(Se1-x,Tex)を作成し、その特性を評価した。まず、FeSe は、高温では tetragonal であり、約 70K で構造相転移を示し orthorhombic になる。この際、磁気転移を伴わない。よって、超伝導は orthorhombic 相に起こっていることになる。FeSe0.57Te0.43 も同様に、tetragonal から orthorhombic に構造相転移するが、転移温度は約 30K とかなり低温側にシフトしている。さらに Te をたくさん置換した FeSe0.29Te0.71 は、最低温まで tetragonal 構造のままであり構造相転移は消失した。この tetragonal の領域付近で Tc は最高値を示しているように見える。さらに、Te を置換していくと、FeSe0.20Te0.80 で、超伝導と短距離磁気秩序の共存が観測され、そして、FeSe0.13Te0.87 に至ると、長距離磁気秩序が形成され超伝導は消滅する。このように、FeTe へ近づくにつれ磁性が現れてきて FeSe0.20Te0.80 と FeSe0.13Te0.87 の間に超伝導体と磁性体の境界がある。このように、FeSeTe 系では、構造相転移＆磁気転移と超伝導の競合があるものと考えられる。

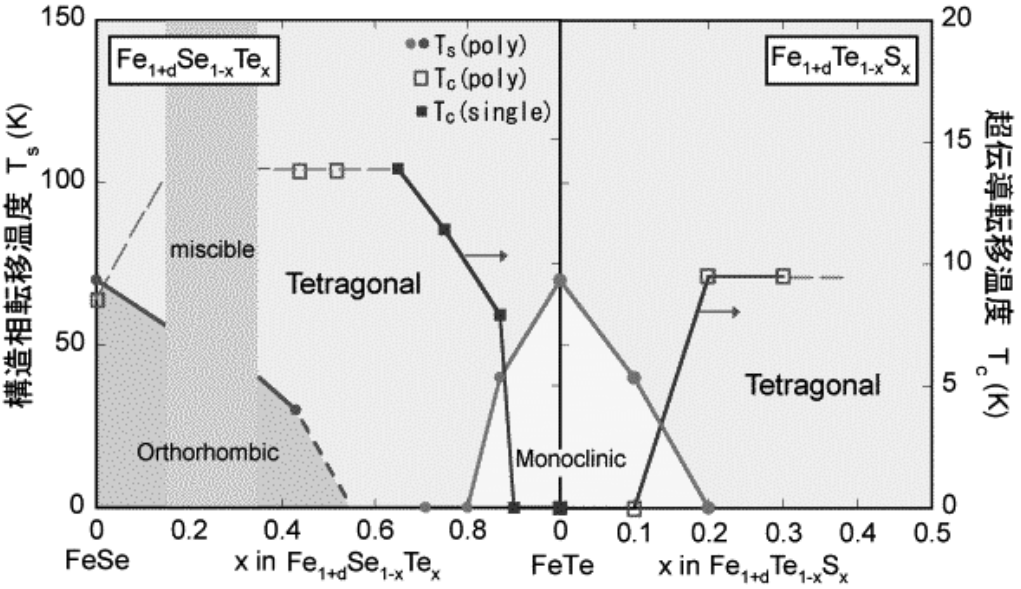


図２． FeSe-FeTe 系の相図

参考文献：

[1] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano and H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 3296 (2008).

[2] F. C. Hsu, J. Y. Luo, K. W. The, T. K. Chen, T. W. Huang, P. M. Wu, Y. C. Lee, Y. L. Huang, Y. Y. Chu, D. C. Yan and M. K. Wu, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **105,** 14262 (2008).

[3] Y. Mizuguchi, F. Tomioka, S. Tsuda, T. Yamaguchi and Y. Takano, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 152505 (2008)

[4] S. Masaki, H. Kotegawa, Y. Hara, H. Tou, K. Murata, Y. Mizuguchi and Y. Takano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 063704 (2009).

[5] Y. Mizuguchi, F. Tomioka, S. Tsuda, T. Yamaguchi and Y. Takano, Appl. Phys. Lett. 94, 012503 (2009).

FeSe, FeTe系超伝導体

National Institute for Materials Science (NIMS), Tsukuba, Japan
Tsukuba-Univ. Tsukuba, Japan
JST-TRiP, Japan
高野 義彦

Collaborators:
NMR: Tou Group in Kobe Univ.
ARPES: Yokoya Group in Okayama Univ.
Crystal analysis: Prassides Group in UK.
High Pressure: Takahashi Group & Kagayama Group
STS: Sakata, Kato Group TUS

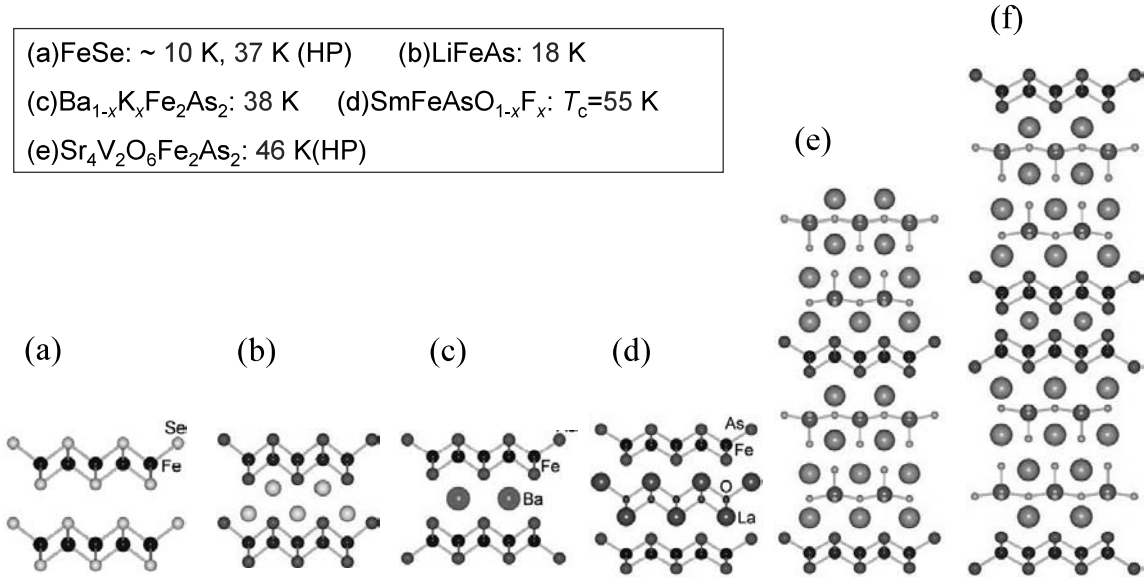
Takano Group Members:

山口　尚秀	Staff
津田　俊介	Staff-MANA
長尾　雅則	客員
久保　結丸	卒業生
水口　佳一	Ｄ２
小河原昭吾	Ｍ２
渡邊　　徹	Ｍ２
出口　啓太	Ｍ１
濱垣　佳子	技官
佐藤　隆博	技官
黒川みどり	秘書

物質材料研究機構と筑波大連係専攻

Crystal structures of Fe-based superconductors

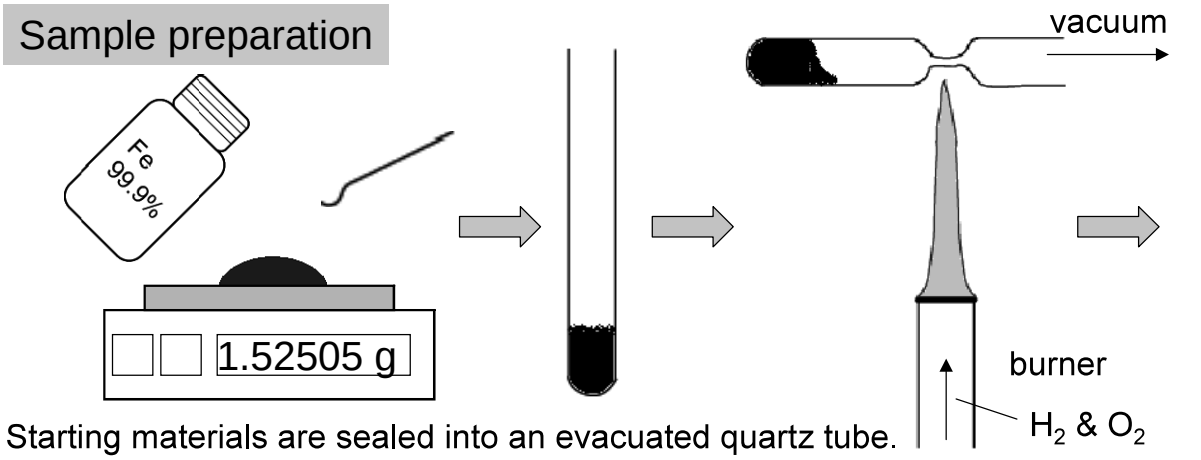
(a)FeSe: ~ 10 K, 37 K (HP) (b)LiFeAs: 18 K
(c)$Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$: 38 K (d)$SmFeAsO_{1-x}F_x$: T_c=55 K
(e)$Sr_4V_2O_6Fe_2As_2$: 46 K(HP)



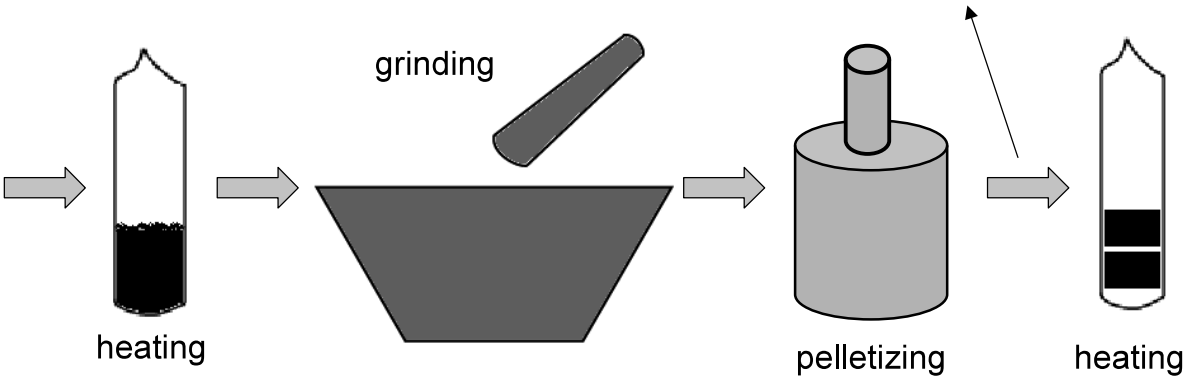
FeSe (FeTe)	LiFeAs (LiFeP)	$BaFe_2As_2$ ($SrFe_2As_2$)	LaFeAsO (LaFePO)	$Sr_4V_2O_6$ Fe_2As_2	$Sr_4V_2O_6$ Fe_2As_2+ $BaFe_2As_2$

詳しくは応用物理学会誌2010年1月号参照

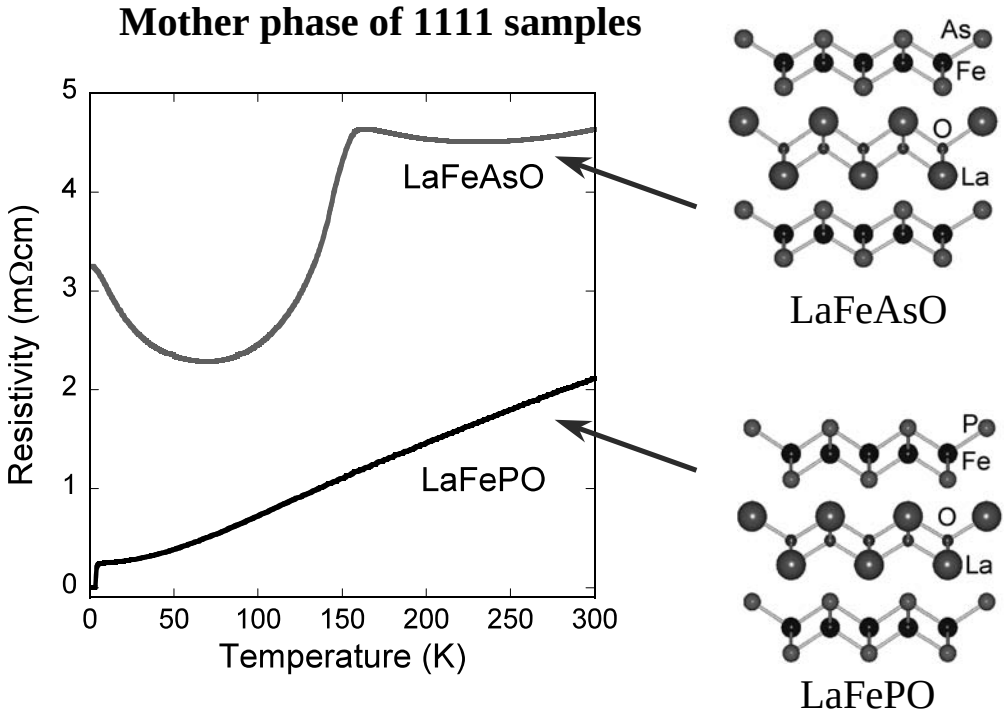
Sample preparation



Starting materials are sealed into an evacuated quartz tube.

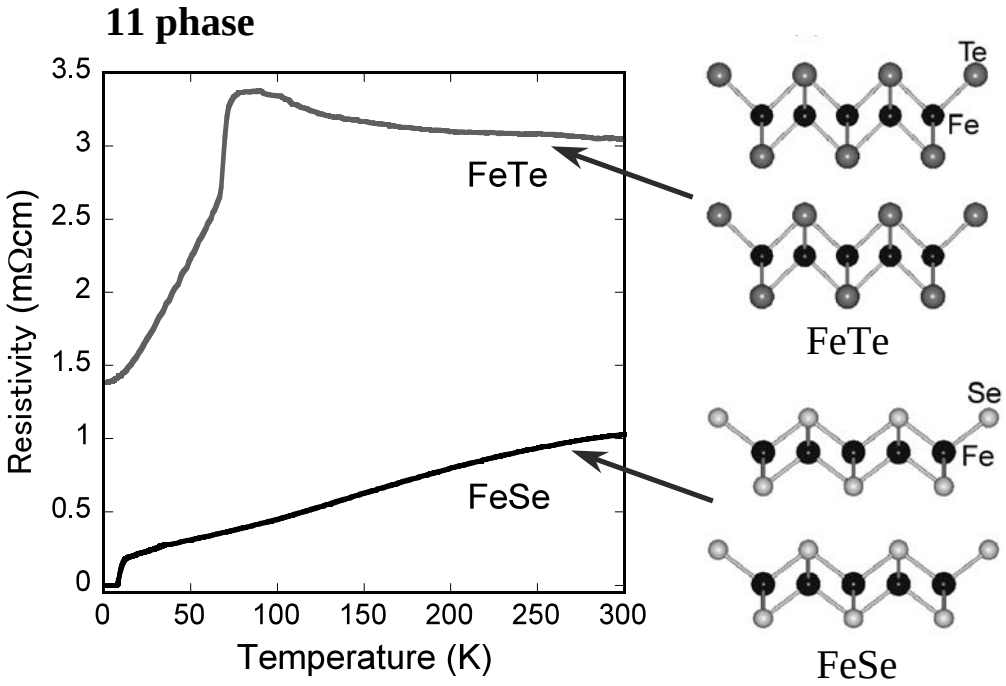


Transport properties of LaFeAsO and LaFePO



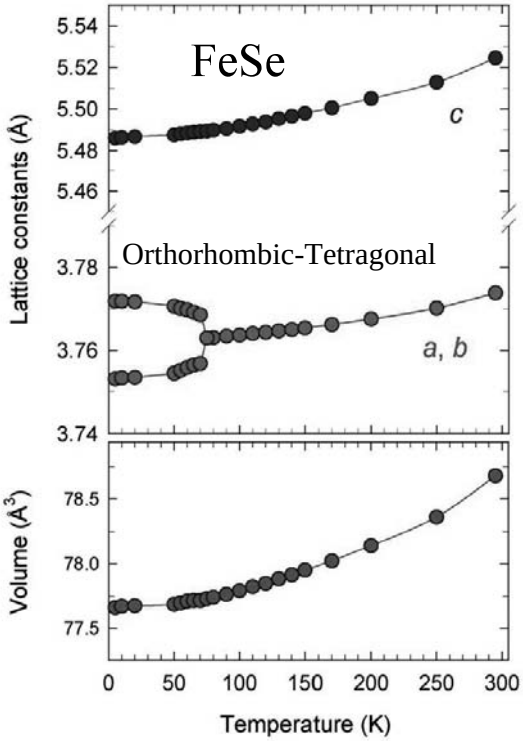
Kamihara et al.

Transport properties of FeTe and FeSe

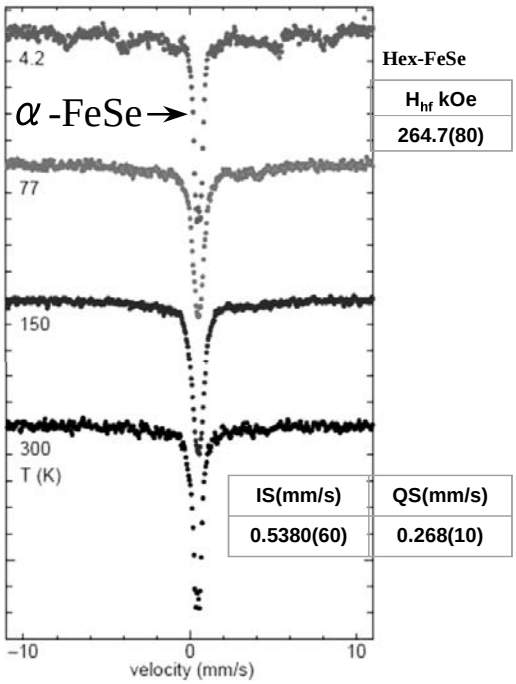


Mizuguchi et al. 金属Vol79,No4,331,2009

FeSe: Crystal structural transition around 70K

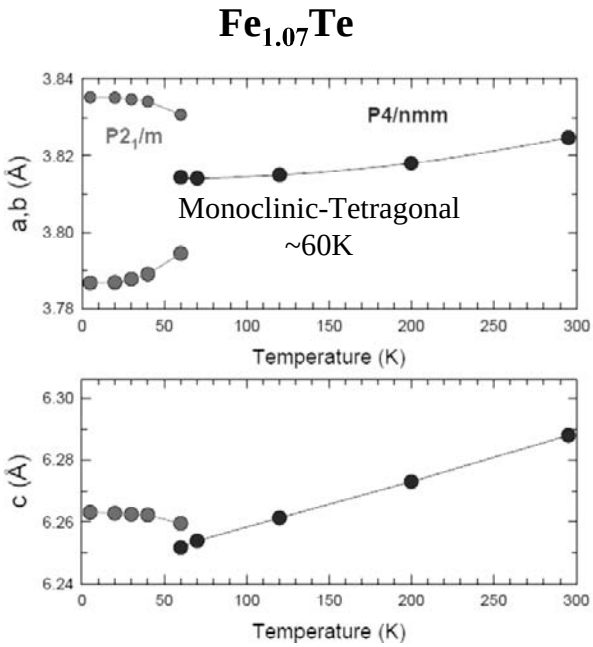


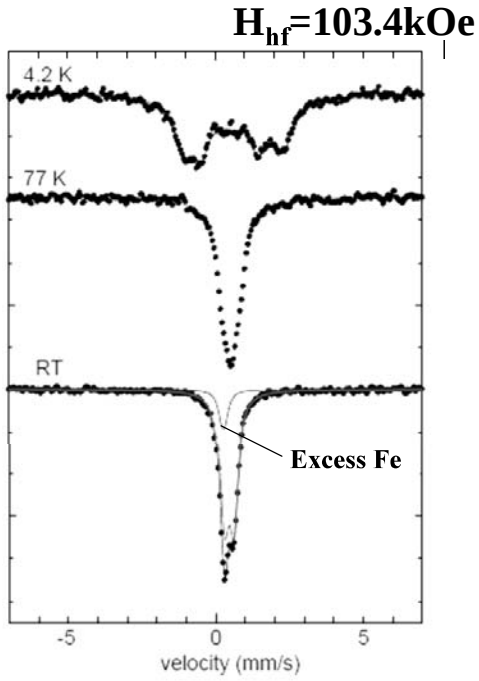
S. Margadonna *et al*.,Chem.Commn.5607(2008)



Mizuguchi et al. Pysica C

Magnetic and Structural Transition of FeTe





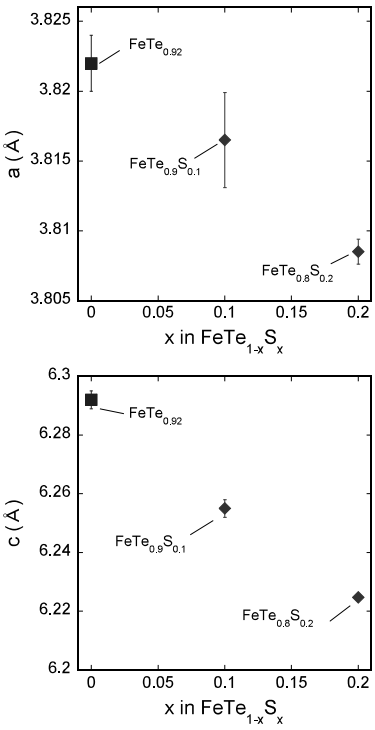
Prassides *et al.*

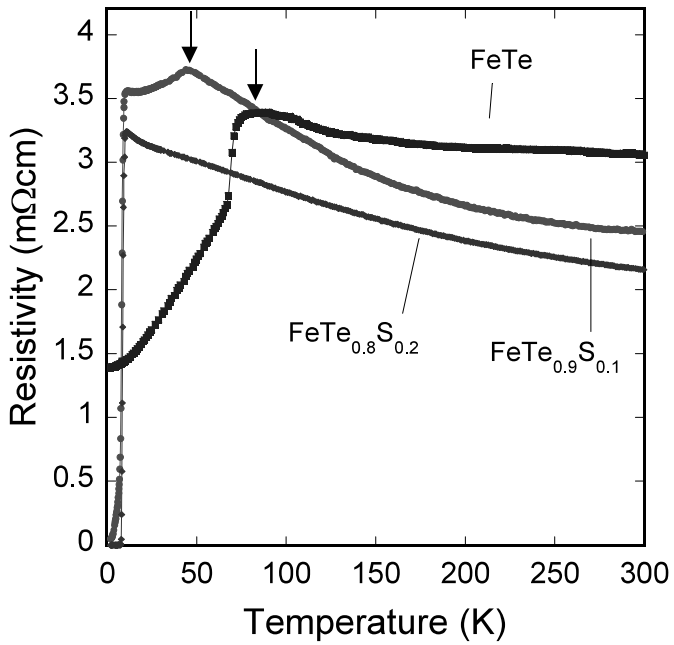
Mizuguchi *et al., Physica C*

S doped FeTe

S substituted FeTe

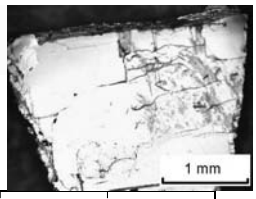
Composed of less toxic elements

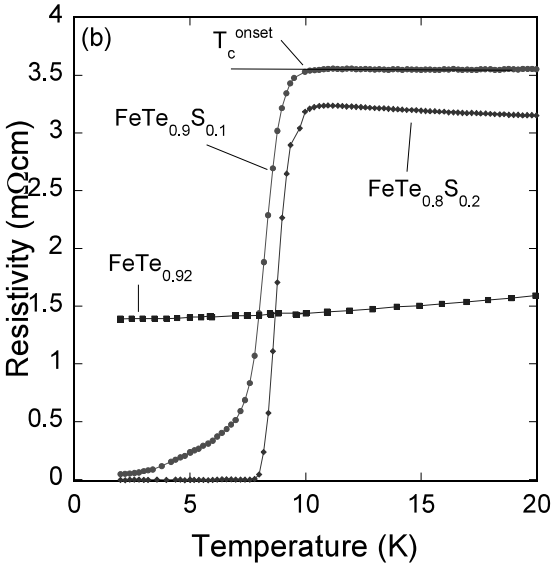


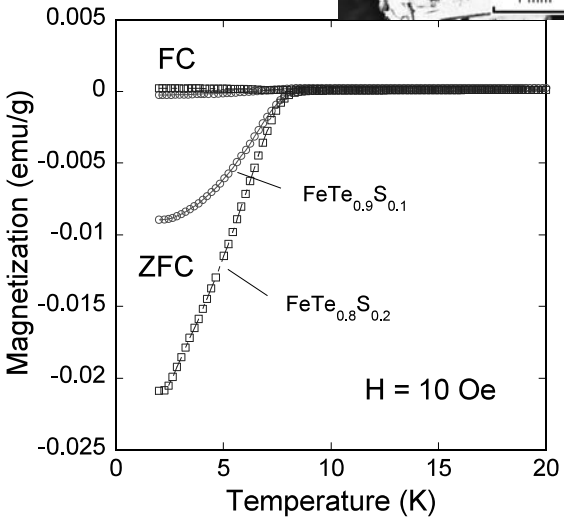


Y. Mizuguchi *et al.*, APL 94, 012503 (2009).

Superconductivity in $FeTe_{1-x}S_x$





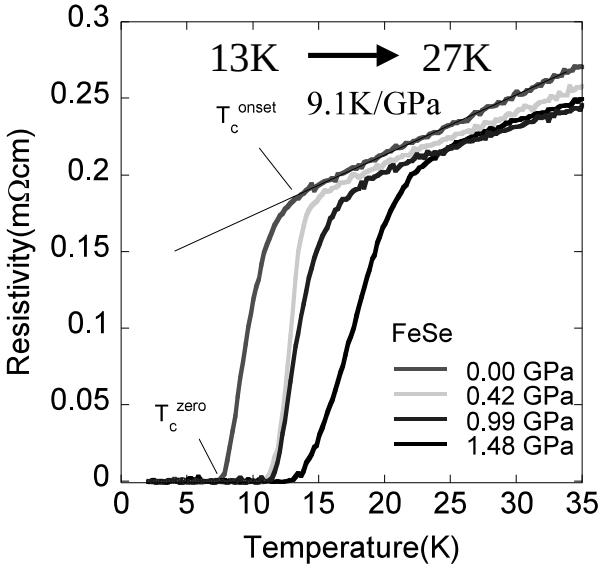


Superconductivity was found in S doped FeTe using less toxic elements.

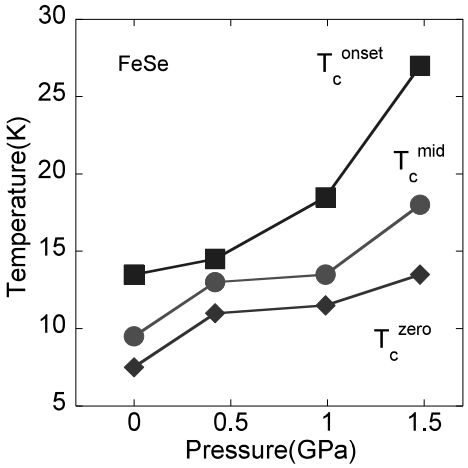
Y. Mizuguchi *et al.*, APL 94, 012503 (2009).

Pressure effects of FeSe

Transport properties of FeSe under pressure



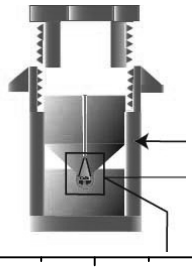
Piston cylinder cell

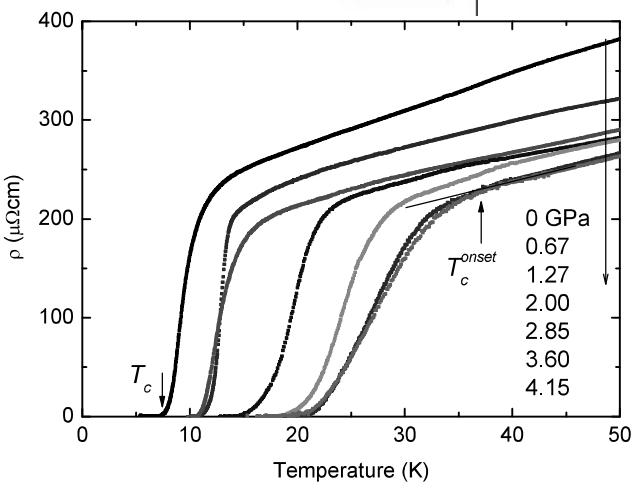


Y. Mizuguchi *et al.*, APL 93, 152505 (2008).

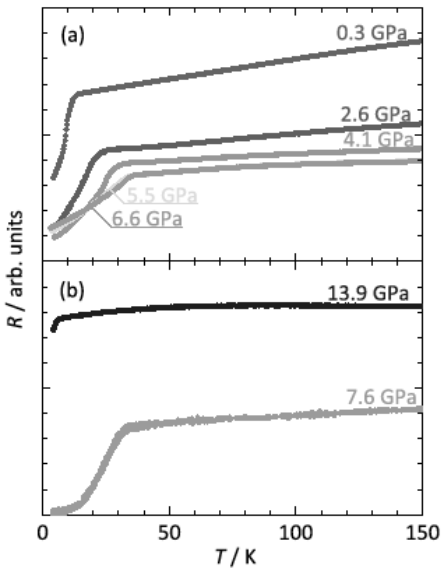
Temperature dependence of resistivity under pressure

Indenter cell





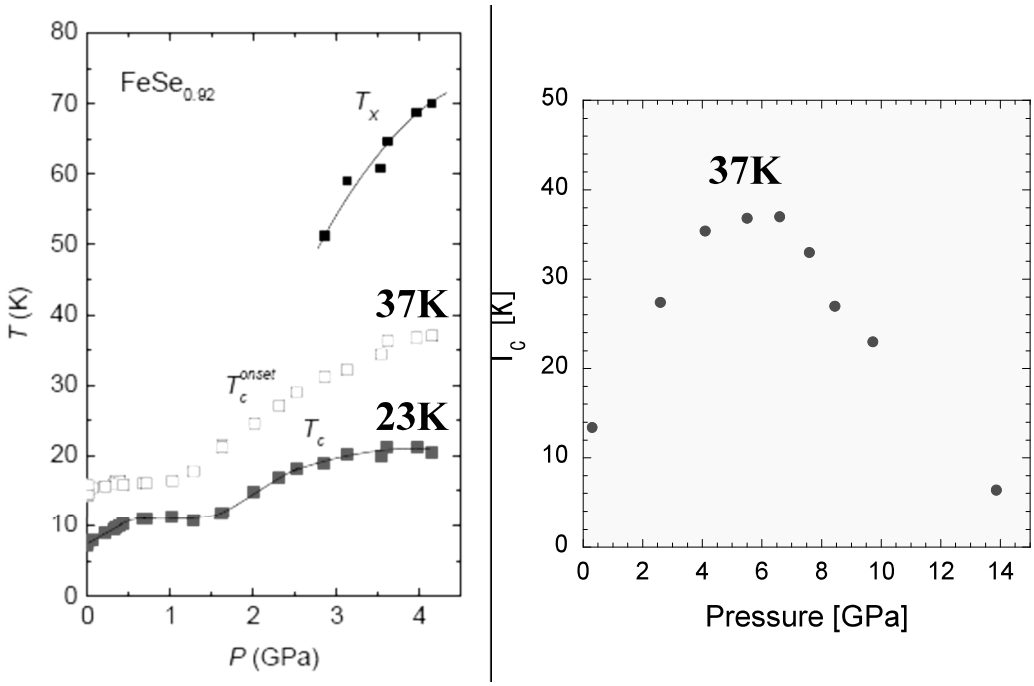
DAC



S. Masaki et al., JPSJ 78, 063704 (2009).

S. Margadonna *et al.*, PRB 80, 64506(2009)

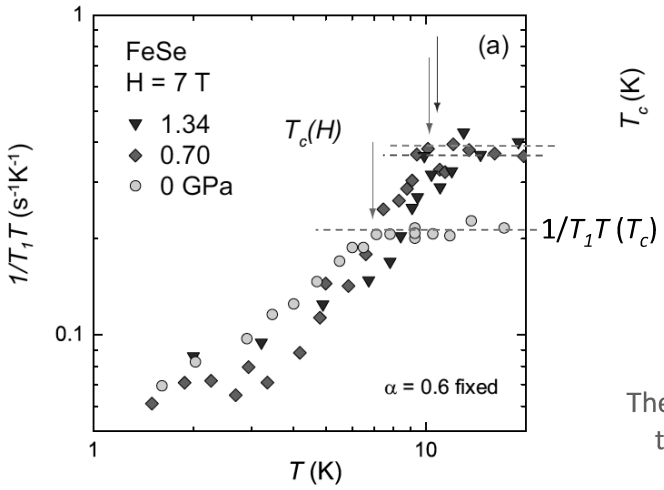
Tc as a function of pressure in FeSe

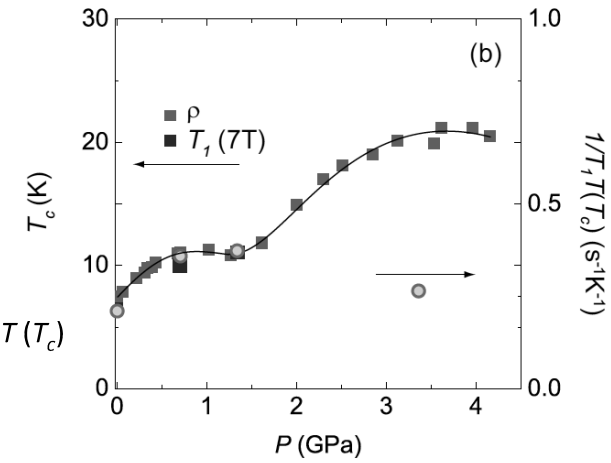


S. Masaki *et al*., JPSJ **78**, 063704 (2009). S. Margadonna *et al*., PRB **80**, 64506(2009)

$1/T_1$ under Pressure

S. Masaki *et al*., JPSJ **78**, 063704 (2009).





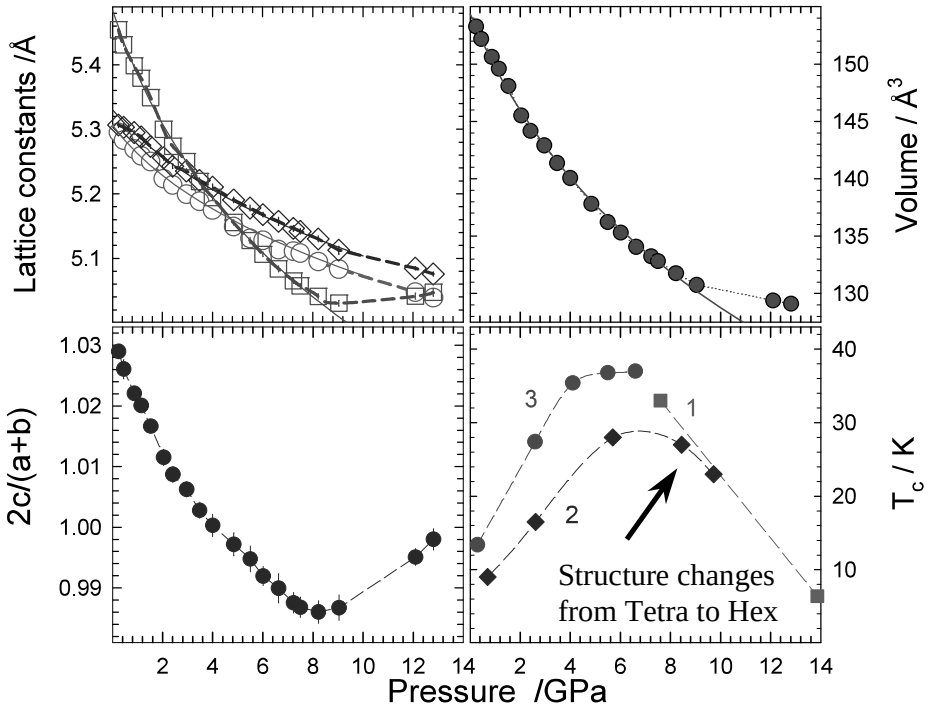
The $1/T_1T$ reproduces the plateau of P dependence of T_c.

$1/T_1T$ shows close relation to T_c under pressure

$1/T_1T$ increases → Enhancement of spin fluctuations

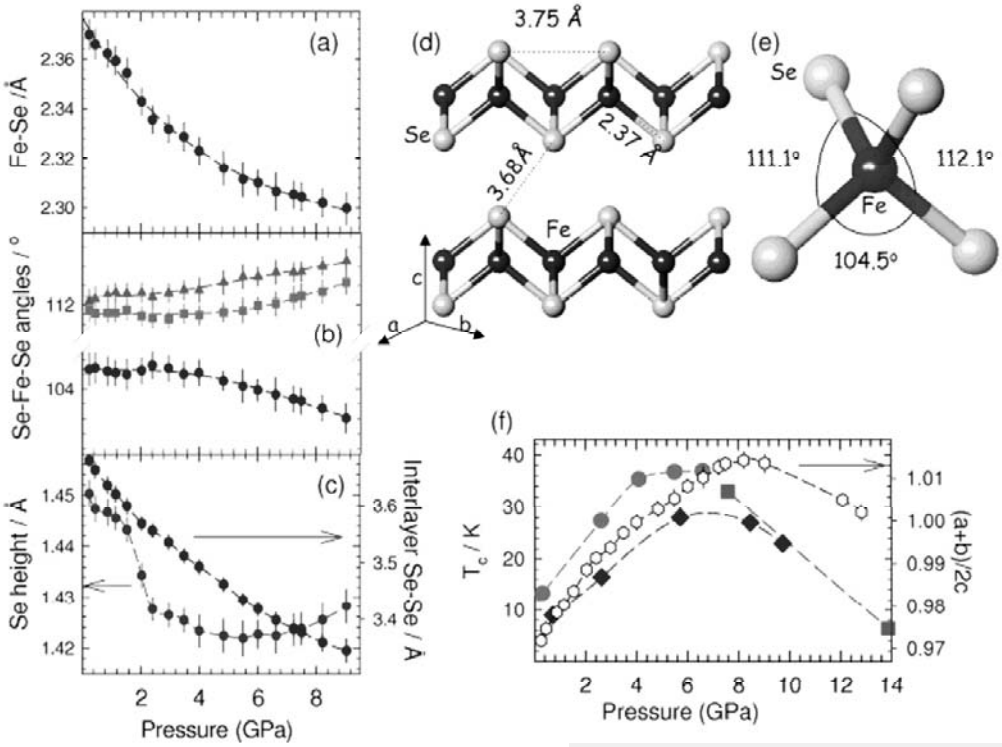
Spin fluctuation is one of the main player of superconductivity.

Lattice parameters of FeSe under pressure



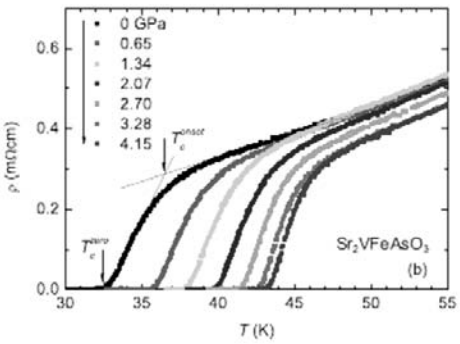
S. Margadonna *et al*., PRB 80, 64506(2009)

Structural parameters of FeSe under pressure



S. Margadonna *et al*., PRB 80, 64506(2009)

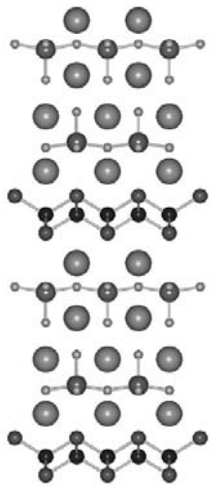
Se/As height from Fe layer



Kotegawa et al., JPSJ2009

22426相

	T_c(K)	h_{Pn}(Å)	h_{Pn} under pressure (Å)	T_c under P
LiFeAs	18	1.50[20]	1.55 → 1.56 (~ 4 GPa)[21]	down[21,22]
FeSe	8	1.46[23]	1.45 → 1.42 (~ 5 GPa)[4]	up, 37 K[3-5,7]
$Sr_2VFeAsO_3$	36	1.42[10]		up, 46 K
$NdFeAsO_{1-y}$	54	1.38[1]	1.34 → 1.33 (7.5 GPa)[19]	down[18]
$LaFeAs(O_{1-x}F_x)$	26	1.32[24]		up, 43 K[25]
$Sr_2ScFePO_3$	16	1.20[9]		down
LaFePO	7	1.12[8]		up, 10 K[26,27]
$K_{0.2}Sr_{0.8}Fe_2As_2$	13			up, 16 K[28]
$K_{0.4}Sr_{0.6}Fe_2As_2$	37			constant[28]
$K_{0.7}Sr_{0.3}Fe_2As_2$	8			down[28]



$Sr_4V_2O_6Fe_2As_2$

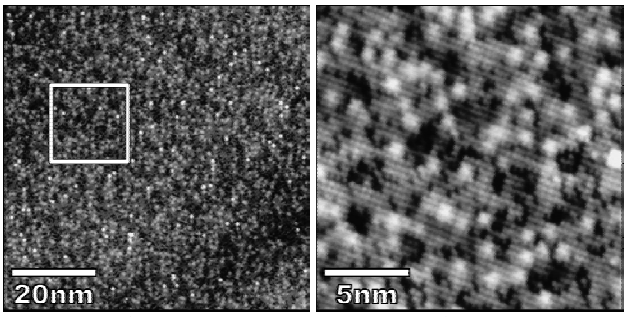
STS of Fe(Se,Te)

STM/STS on $Fe_{1+d}Se_{0.25}Te_{0.75}$

T. Kato, et al., Phys. Rev. B **80**, 180507(R) (2009) [Editors' Suggestions]

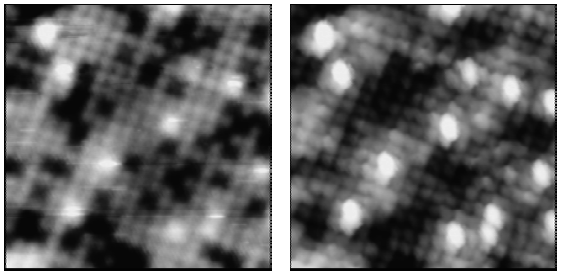
Surface Topography

4.2 K



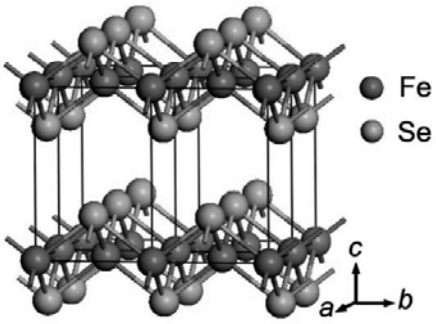
(72 nm)^2, 1.0 V/34 pA (18 nm)^2, 1.0 V/40 pA

18 K, (6.8 nm)^2



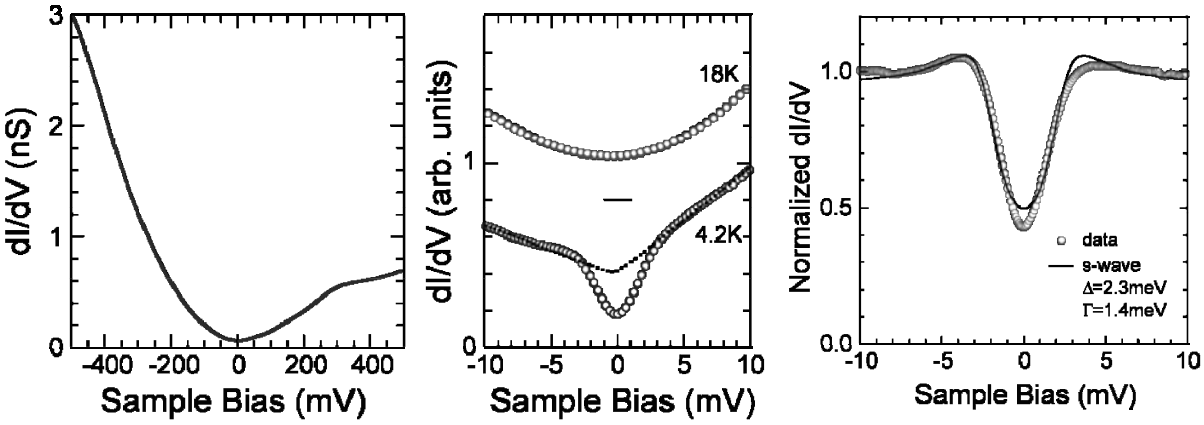
500 mV/0.5 nA 50 mV/0.5 nA

- Atomic resolution; square lattice with a_0~3.8Å
- No surface reconstruction
- Bright spots: ~ 4.5% -> excess iron atoms
- Dark sites do not correspond to vacancies



STM/STS on $Fe_{1+d}Se_{1-x}Te_x$

Tunneling Spectra & Superconducting Gap



- High-energy DOS:
  > asymmetric V-shape
  > kink around +300 meV

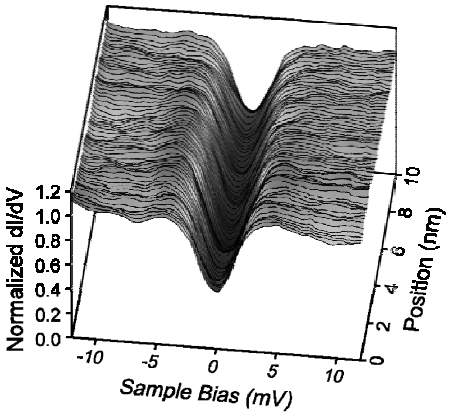
- Superconducting gap:
  > Δ ~ 2.3 meV (s-wave fit)
  > disappears at 18 K (T_c^{onset} ~ 14 K)

T. Kato, et al., Phys. Rev. B 80, 180507(R) (2009) [Editors' Suggestions]

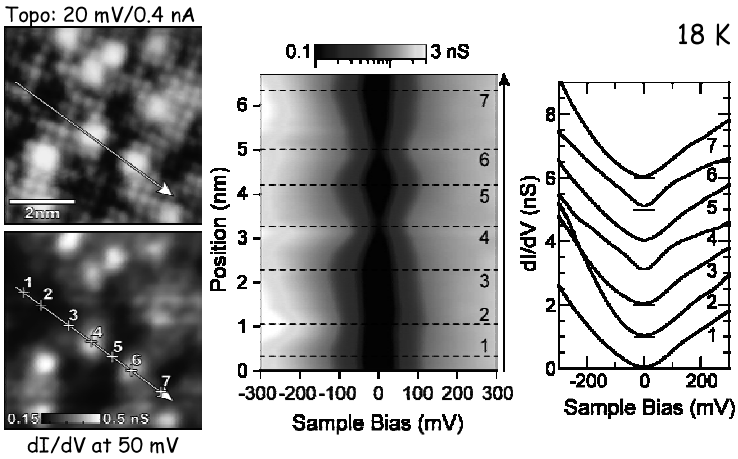
STM/STS on $Fe_{1+d}Se_{1-x}Te_x$

T. Kato, et al., Phys. Rev. B **80**, 180507(R) (2009) [Editors' Suggestions]

Spatial homogeneity of Superconducting Gap, and inhomogeneity of Normal-State LDOS



Superconducting gap:
spatially uniform



Normal-state LDOS:
- > spatially changes in accord with topo.
- > the change remains up to 1 eV
- > LDOS ~ 100 meV enhances at bright spots
- > the LDOS inhomo. is caused by the excess iron

Summary

1. High pressure enhanced the Tc of FeSe up to 37K.

2. Superconductivity was discovered in S doped FeTe around 10K.

3. SLO is observed in superconducting $FeSe_{0.2}Te_{0.8}$ samples.

4. STS measurement was performed in Fe(Se,Te).

Y. Mizuguchi *et al*., APL **93**, 152505 (2008). APL **94**, 12503 (2009).

S. Margadonna *et al*.,Chem.Commn.5607(2008), PRB **80**, 64506(2009).

S. Masaki *et al*., JPSJ **78**, 063704 (2009).

H. Kotegawa., JPSJ **77**, 113703(2008).

Y. Mizuguchi *et al*., APEX 2, 83004 (2009).

Thank you…

Thank You

8. 鉄系超伝導体の STM

理研 [A]、JST-TRIP [B]、東大新領域 [C]
花栗哲郎 [A,B], 新高誠司 [A,B], 髙木英典 [A,B,C]

STM on an Iron Based High-T_c Superconductor

RIKEN [A], JST-TRIP [B], Univ. of Tokyo [C],
Tetsuo Hanaguri[A,B], Seiji Niitaka[A,B], Hidenori Takagi[A,B,C]

鉄系超伝導体の Fermi 面は, Γ点周りのホール面と, M 点周りの電子面で構成されている. これらの非連結 Fermi 面上に開く超伝導ギャップは, フルギャップでありながら, ホール面と電子面でギャップの符号が反転する $s_{\pm}$波の対称性を有することが理論的に指摘されている [1,2]. $s_{\pm}$波対称性を検証するためには, 波数弁別性と位相敏感性の両者を有する手法が不可欠である. 分光イメージング STM による準粒子干渉 (QPI)効果の観測は, この条件を満たしている. すなわち, 磁束による準粒子散乱に伴うコヒーレンス因子の効果によって, QPI の散乱ベクトルの両端で超伝導ギャップが同符号の場合（符号保存散乱）, QPI の振幅は磁場によって増大し, 逆符号の場合（符号反転散乱）, 振幅は磁場によって減少する. したがって, QPI パターンを Fourier 解析し, 散乱ベクトル毎の磁場効果を調べれば, 波数空間における位相構造の情報を抽出することができる [3].

実験は, 最も単純な鉄系超伝導体である Fe(Se,Te)に対して行った. 劈開面の STM 像は, 図 1 に示すように, カルコゲン原子間隔に相当する約 3.8Å 間隔の格子構造を示し, トンネルスペクトルには Fermi エネルギー近傍に明瞭なギャップ構造が観測された. このギャップは, 磁化測定で決定した T_c（約 14.5 K）よりやや低い, 11 K 程度で消失するが, その温度変化は, BCS 理論から期待される振る舞いと一致し, 超伝導ギャップを観測していると考えられる. これらの結果はこれまでの報告 [4]と定性的に一致している. 0.4 K で測定したトンネルコンダクタンスは, Fermi エネルギーでほぼ完全に零であり, かつギャップ構造の底は平坦なことから, この
系の超伝導ギャップはノードを持たないことが強く示唆される.

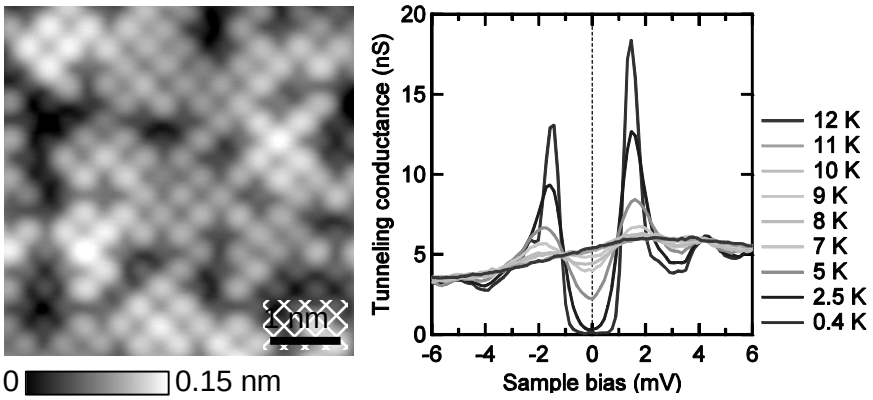


図 1. Fe(Se,Te)の STM 像とトンネルスペクトルの温度変化.

次に QPI パターンの検出を試みた．鉄系超伝導体では，大きく分けて，Γ点と M 点周りに Fermi 面が存在するので，図 2 に模式的に示すように $\mathbf{q}_1$~$\mathbf{q}_3$ の散乱が考えられる．Bogoliubov 準粒子の QPI を解像するために，占有状態と非占有状態の dI/dV の比 $Z \equiv dI/dV(+E)/dI/dV(-E)$をマップし[5]，Fourier 解析を行った．その結果，符号反転散乱である $\mathbf{q}_2$と符号保存散乱である $\mathbf{q}_3$の両者が観測され，前者の強度は磁場で減少し，後者は増大することが分かった．この結果は $s_{\pm}$波を強く示唆する．

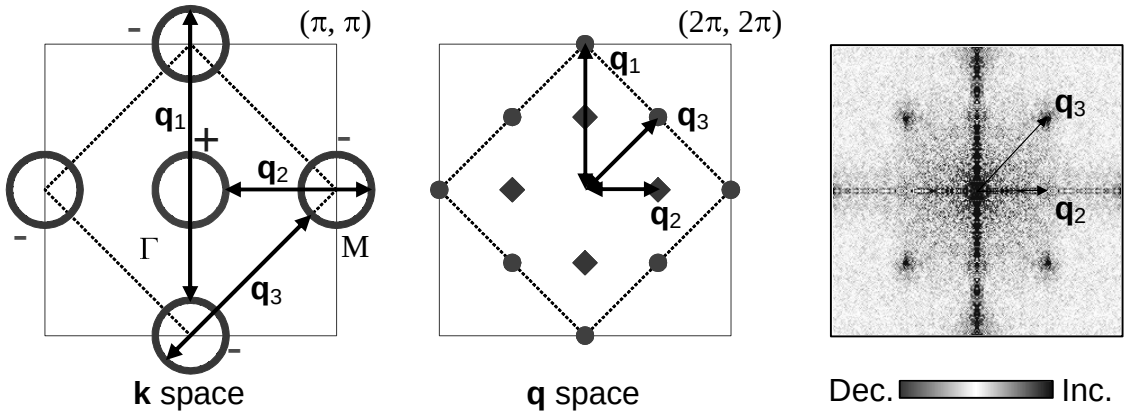


図 2．**k** 空間，**q** 空間における散乱ベクトルの模式図と磁場による QPI 強度変化．

参考文献

[1] I. I. Mazin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 057003 (2008).
[2] K. Kuroki *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 087004 (2008).
[3] T. Hanaguri *et al.*, Science, **323**, 923 (2009).
[4] T. Kato *et al.*, arXiv:0910.1485.
[5] T. Hanaguri *et al.*, Nature Phys., **3**, 865 (2007).

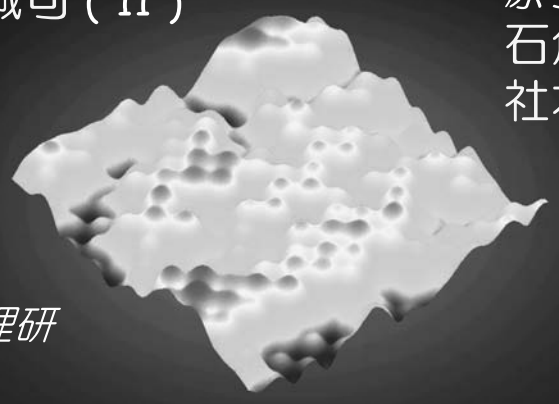
鉄系超伝導体のSTM

理研
花栗哲郎
新髙誠司 ("11")

原子力機構
石角元志 ("1111")
社本真一

東大新領域／理研
髙木英典

産総研
永崎洋
伊豫彰
鬼頭聖



special thanks to 電通大 黒木和彦

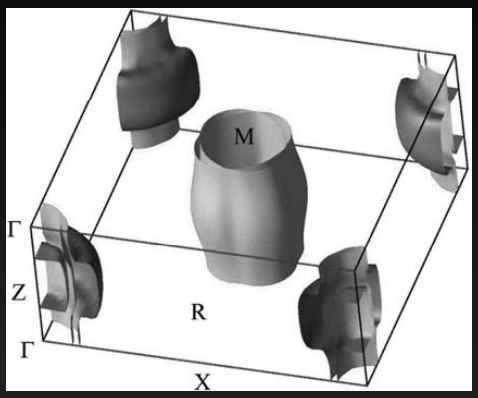
Outline

- **Motivation**
  - SC gap symmetry?
- **Why STM?**
  - Tunneling spectrum → **nodal gap or full gap**
  - Quasi-particle interference → **k space**
  - Coherence factors → **phase of the SC gap**
- **Results on iron-based superconductors**
  - Magnetic-field dependent QPI in $Fe(Se_{0.4}Te_{0.6})$
  - (- Preliminary STM/STS on $PrFeAsO_{0.7}$)
- **Summary**

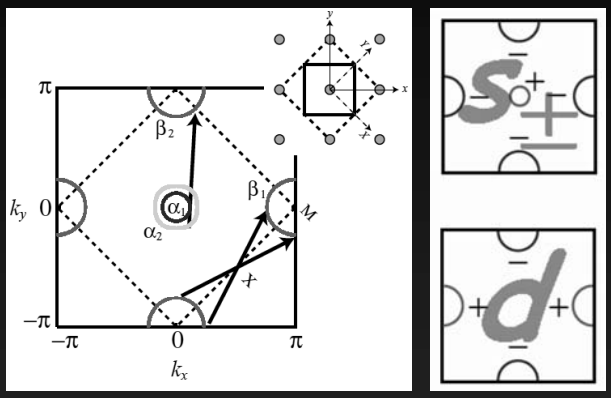
Gap symmetry of iron-based superconductors

Disconnected Fermi surface pockets

cf. K. Kuroki and R. Arita, PRB **64**, 024501 (2001).



D. J. Singh and M.-H. Du, PRL **100**, 237003 (2008).



K. Kuroki *et al.*, PRL **101**, 087004 (2008).
I. I. Mazin *et al.*, PRL **101**, 057003 (2008).

Nodal gap or full gap?

Sign reversal?

Full gap or nodal gap?

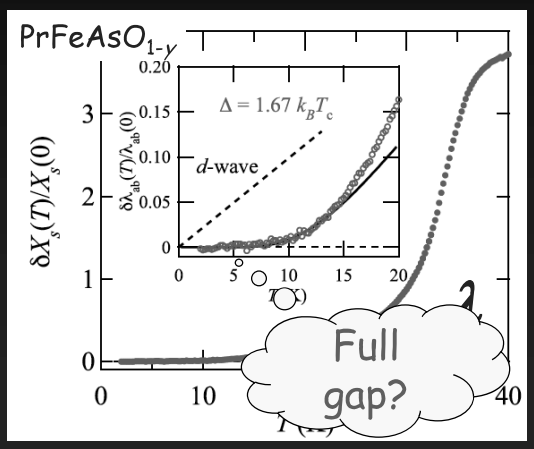
T dependence of λ, C, α, T_1^{-1}, $\sigma(\omega)$...

Quasi-particle population

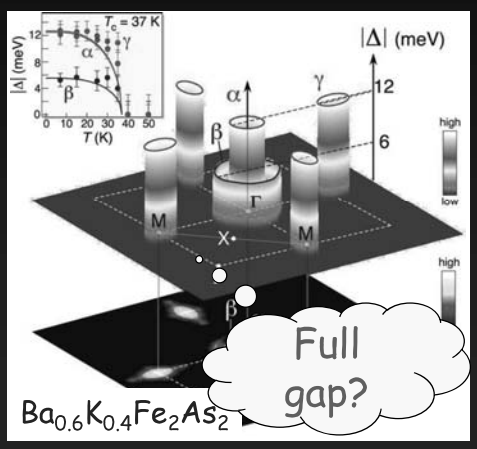
Full gap : $\sim \exp(\Delta/T)$

Node : Power of T

Direct gap map by ARPES

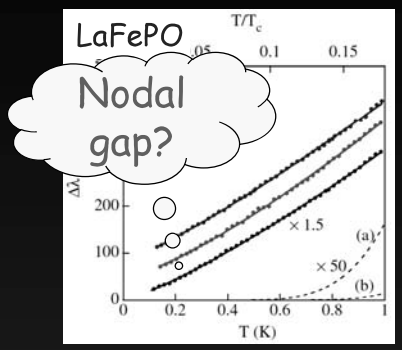


K. Hashimoto *et al.*, PRL **102**, 017002 (2008).

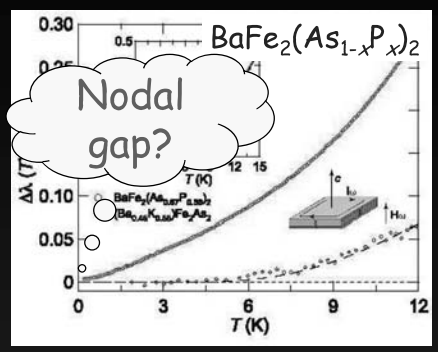


H. Ding *et al.*, EPL **83**, 47001 (2008)

Full gap or nodal gap?

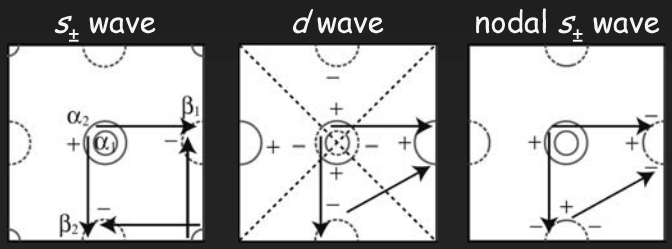


J. D. Fletcher *et al.*, PRL **102**, 147001 (2009).



K. Hashimoto *et al.*, arXiv:0907.4399v1.

Various symmetries possible depending on detailed band structures

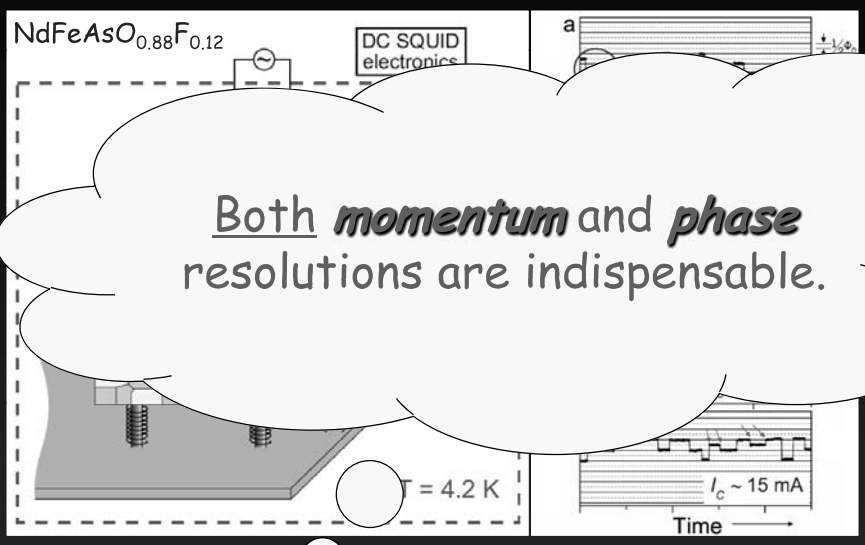


K. Kuroki *et al.*,
PRB **79**, 224511 (2009).

S Graser *et al.*,
New J. Phys. **11**, 025016 (2009).

Sign reversal?

Flux jump in the composite superconducting loop



Both ***momentum*** and ***phase*** resolutions are indispensable.

Half flux
jump
shift

C.-T. Chen *et al.*, arXiv:0905.3571.

Sign-reversal likely…

But what is the relationship between the Fermi pockets?

How STM can contribute to the issues?

- Nodal gap or full gap

  ➡ **Tunneling spectrum**

- Distinguish different FS pockets (**k** resolurion)

  ➡ **Quasi-particle interference patterns**

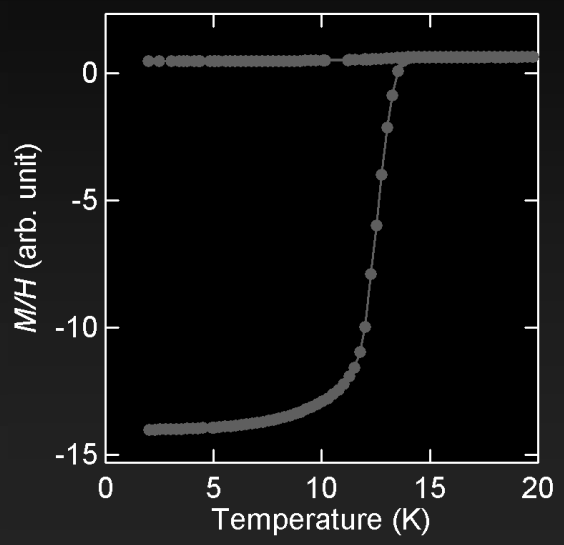
- Phase of the SC gap on each pocket

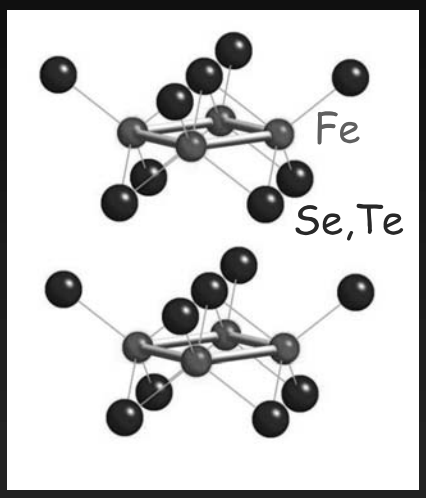
  ➡ **Coherence factors**

Iron chalcogenide superconductor

X'tals grown by Dr. Niitaka (RIKEN)

Fe (Se,Te) T_c ~ 13 K





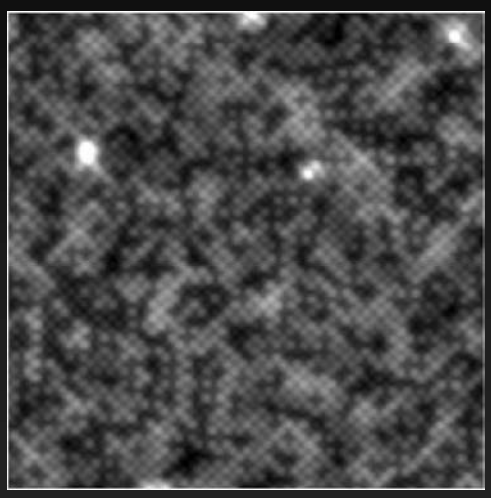
Nodal gap or full gap

STM on an iron chalcogenide

X'tals grown by Dr. Niitaka (RIKEN)

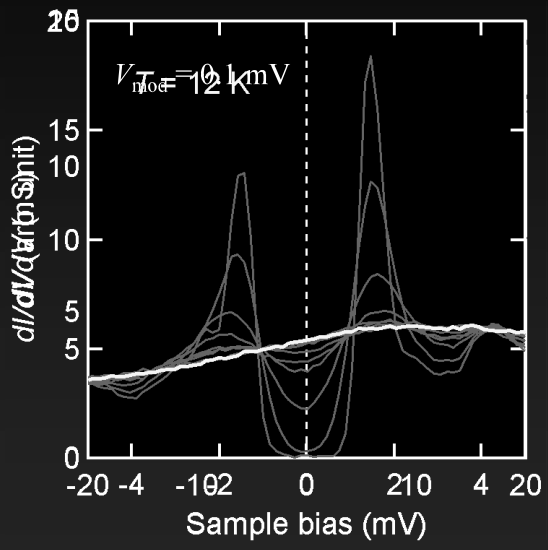
Fe (Se,Te) T_c ~ 13 K

T ~ 1.5 K



19 nm × 19 nm, -20 mV/0.1 nA

$2\Delta / T_c$ ~ 3.5



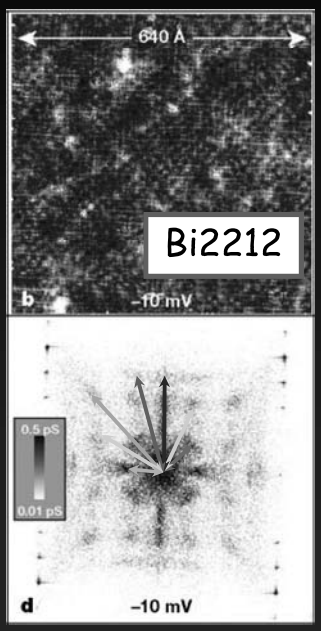
SC gap FULLY opens all over the FS pockets

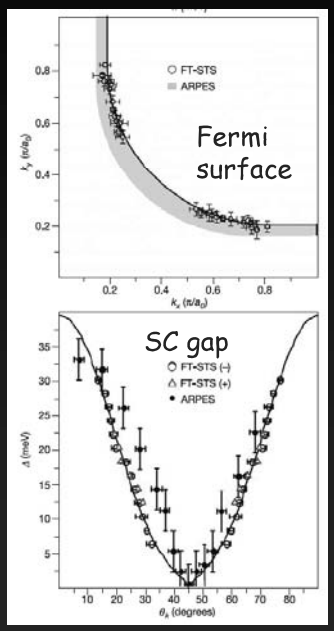
cf. P. Massee *et al.*, PRB 80, 140507(R) (2009), T. Kato *et al.*, PRB 80, 180507(R) (2009).

Distinguish different FS pockets

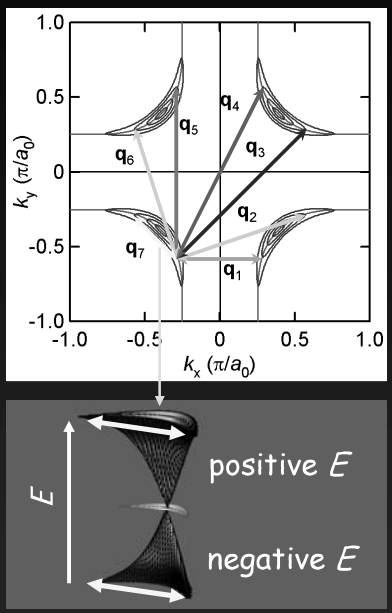
Quasi-particle interference ~ k-sensitive STM

J. Hoffman *et al.*, Science **297**, 1148 (2002).
K. McElroy, *et al.*, Nature **422**, 592 (2003).





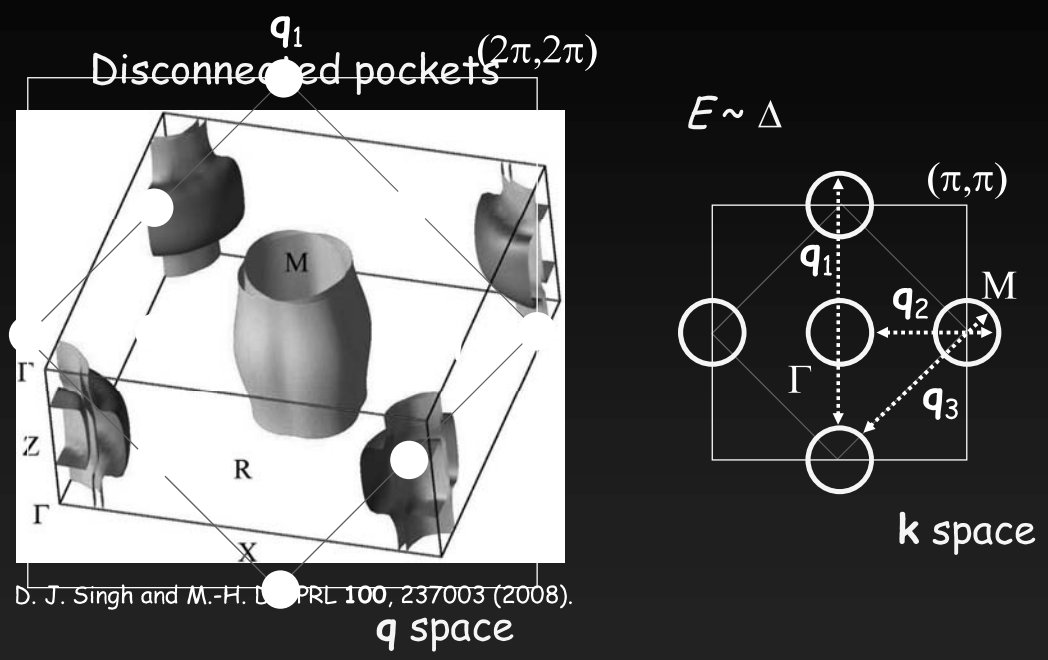
"Octet model"



FS geometry & SC gap dispersion can be obtained through QPI.

$$JDOS \propto 1/\nabla E(\mathbf{k})$$

How will it work in iron-based SC?

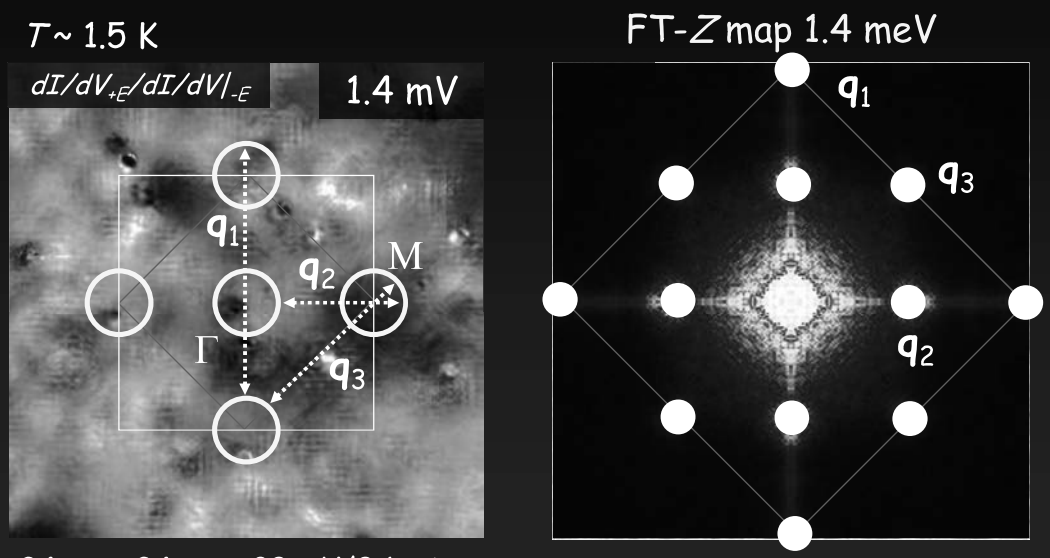


D. J. Singh and M.-H. D PRL **100**, 237003 (2008).

Inter-pocket scattering ⟷ Relationship between the pockets

QPI in an iron chalcogenide

Fe(Se,Te) T_c ~ 13 K



34 nm × 34 nm, -20 mV/0.1 nA

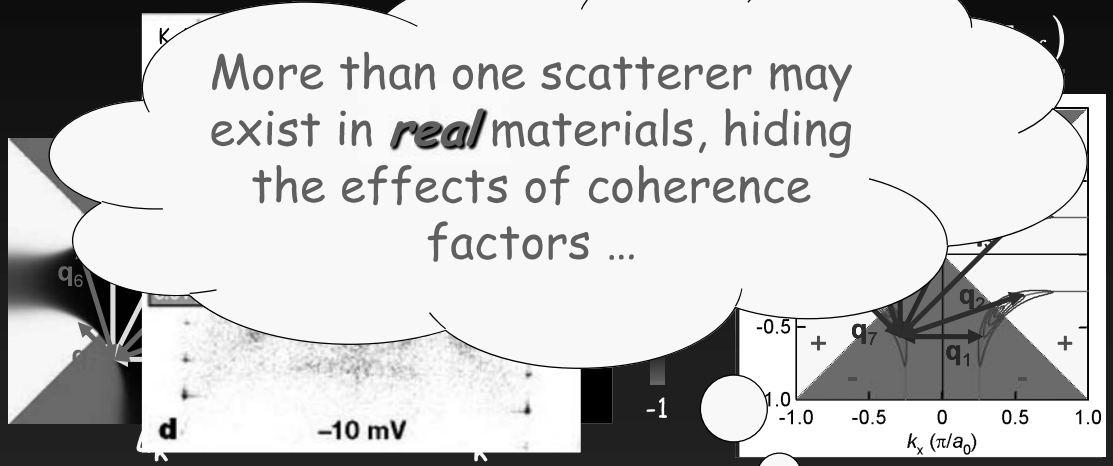
All the inter-pocket scatterings are detected.

Phase of the SC gap on each pocket

Coherence factors in QPI ~ "extinction" rule

J. E. Hoffman, *Thesis*, http://physics.harvard.edu/~jhoffman/thesis/HoffmanThesis.pdf.
Q. -H. Wang and D. -H. Lee, PRB **67**, 020511(R) (2003).
T. Pereg-Barnea and M. Franz, PRB **68**, 180506(R) (2003).
R. S. Markiewicz, PRB **69**, 214517 (2004).
T. Nunner *et al.*, PRB **73**, 104511 (2006).

More than one scatterer may exist in ***real*** materials, hiding the effects of coherence factors …

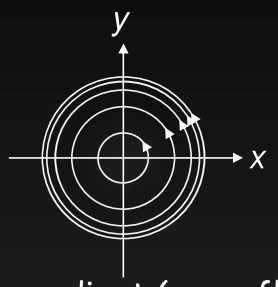


Scalar potential $(uu'-vv')^2$: sign-reversing scattering (q_2, q_3, q_6, q_7)
Magnetic impurity $(uu'+vv')^2$: sign-preserving scattering (q_1, q_4, q_5)
Δ inhomogeneity $(\Delta+\Delta')^2$: sign-preserving scattering (q_1, q_4, q_5)

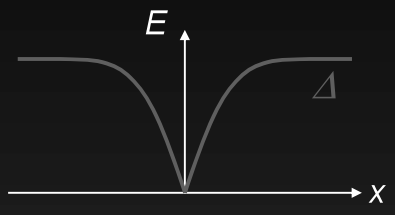
sign-preserving scattering (q_1, q_4, q_5) : for sign-preserving gap

How to highlight the hidden coherence factors?

Introduce controllable QP scatterers
which activate only one of the two scatterings. → ***Vortices***



Phase gradient (superflow)



Δ inhomogeneity

Phase gradient $(uu'+vv')^2$: sign-preserving scattering (q_1, q_4, q_5)

Δ inhomogeneity $(\Delta+\Delta')^2$: sign-preserving scattering (q_1, q_4, q_5)

Vortices will selectively enhance sign-preserving scatterings
and highlight the ***coherence-factor effect***.

Phase-sensitive QPI in $Ca_{2-x}Na_xCuO_2Cl_2$

x ~ 0.14 (T_c ~ 28 K)
V_{sample} = -0.1 V, I_t = 0.1 nA, 45nm × 45nm

T. Hanaguri *et al.*, Science, **323**, 923 (2009).

FT[Δ(r)] FT[n(r)]

STM is
phase sensitive !!

sign-preserving scattering (+,+) , (-,-) : Enhanced by B

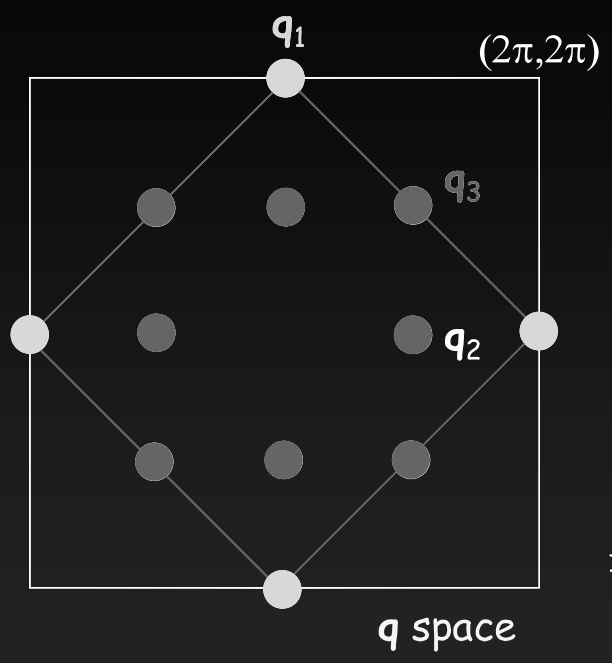
QPI shows up in the coherence factor!

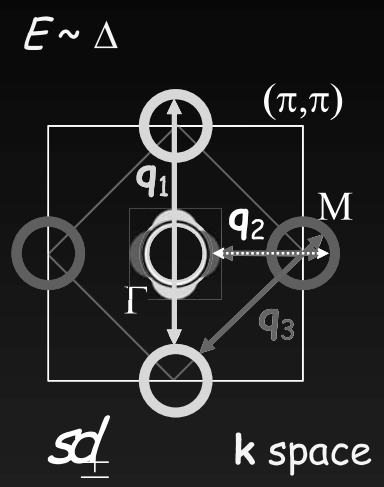
sing-reversing scattering (+,-) , (-,+) : Suppressed by B

T. Hanaguri *et al.*, Nature Phys., **3**, 865 (2007), K. Fujita *et al.*, PRB **78**, 054510 (2008).
cf. Y. Kohsaka *et al.*, Science **315**, 1380 (2007).

Hidden ***coherence effect*** has been uncovered!!

How will it work in iron-based SC?





I. I. Mazin *et al.*, PRL **101**, 057003 (2008).
K. Kuroki *et al.*, PRL **101**, 087004 (2008).

cf.
Yan-Yang Zhang *et al.*,
PRB 80, 094528 (2009).
F. Wang, H. Zhai and D. -H. Lee,
EPL **85**, 37005 (2009).

- Sign-preserving scattering
- Sign-reversing scattering

Phase-sensitive STM on an iron chalcogenide

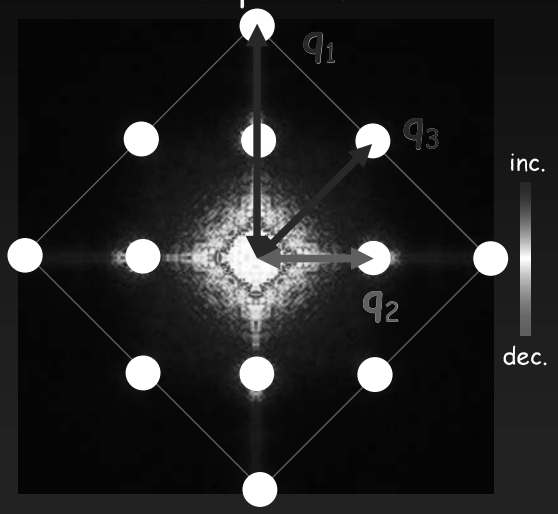
$Fe_{1+x}(Se,Te)$ T_c ~ 13 K

BB =10 T

T ~ 1.5 K

34 nm × 34 nm, -20 mV/0.1 nA

FT-Z map 1.4 meV



All the Fermi pockets are sign-reversing scattering!

Summary

Spectroscopic-imaging STM on Fe(Se, Te)

- Tunneling spectrum suggests that the **superconducting gap fully opens** over the Fermi surface.
- All the inter-Fermi-pocket scatterings are identified in quasi-particle interference pattern, providing **momentum-resolved information** of the superconducting.
- Magnetic-field dependence of the quasi-particle interference pattern contains information on the phase of the superconducting gap function. The result on Fe(Se,Te) suggests **$s_{\pm}$-wave superconductivity** where the gap changes its sign between hole and electron pockets.

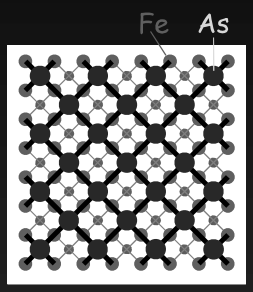
Prospects

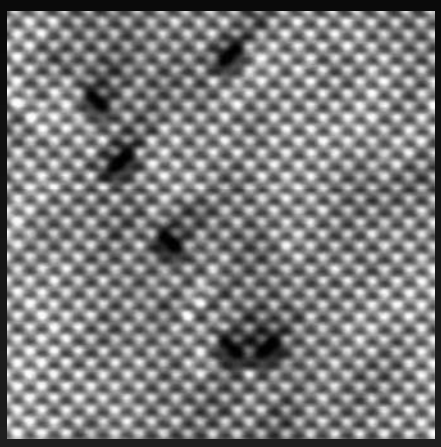
- Universality
- Role of vortices

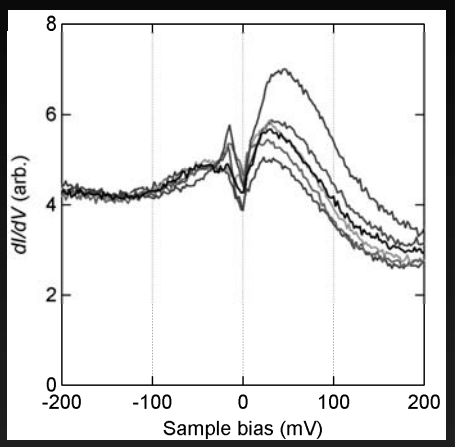
STM/STS on $PrFeAsO_{0.7}$ (T_c ~ 44 K)

X'tals grown by Dr. Ishikado (JAEA)

T = 1.5 K,
V_s = -0.2 V
I_t = 0.1 nA,
10 nm × 10 nm





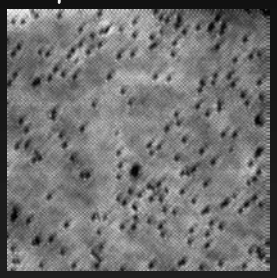


- Square lattice (a ~ 4 Å) with few % defects in between
  ➡ Top-most As atoms are imaged.
- No clear SC gap… ➡ Surface state may be important.

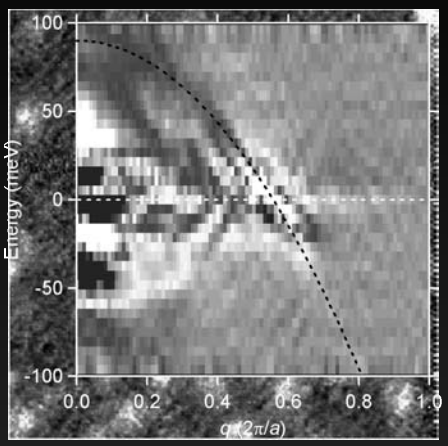
(Normal state) QPI on $PrFeAsO_{0.7}$ surface

T = 1.5 K,
V_s = -50 mV
I_t = 0.1 nA,
38 nm × 38 nm

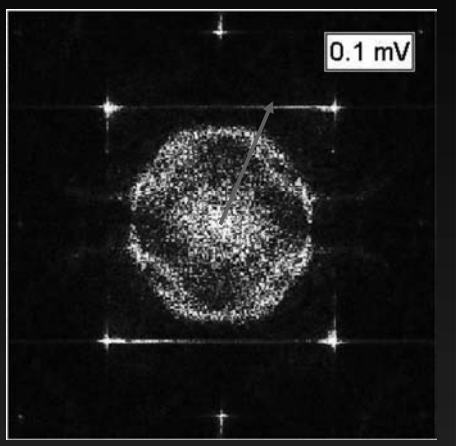
Topo.



d^3I/dV^3



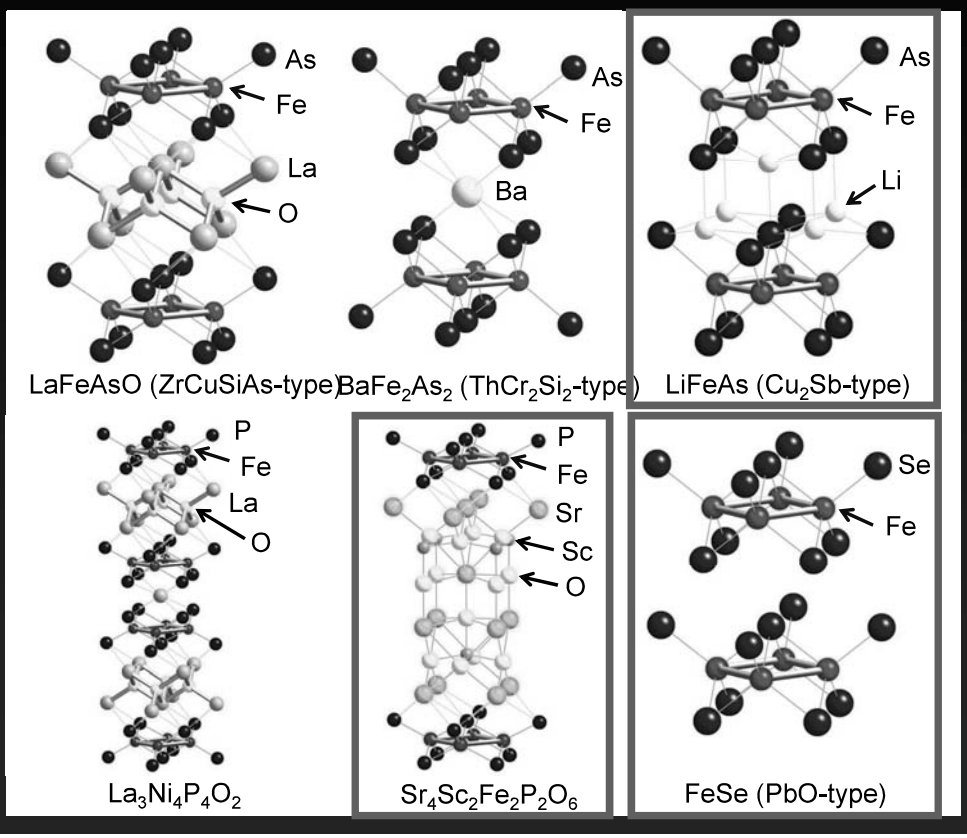
FT-dI/dV



- Well-defined surface (normal) quasi-particles
- Apparently heavy quasi-particle mass (~ $8m_0$)

Surface effect can not be ignored …

Possible candidates



9. 鉄ヒ素系超伝導体の光電子分光

東京大学理学系研究科
藤森 淳

Photoemission Spectroscopy of Iron Arsenide Based Superconductors

Department of Physics, University of Tokyo
Atsushi Fujimori

光電子分光法による鉄ヒ素系超伝導体の研究について，これまで明らかにされたことと現状をレビューし，今後の方向を探る．特に，次の問題を取り上げる．

（1） 電子相関の強さ: 基本的にLDAバンド計算とARPES実験の一致は良い．ただし，～2程度の質量繰り込みがある [1,2].

（2） 高エネルギースピン揺らぎ: Fe 内殻スペクトルの交換分裂から，超伝導状態でも瞬間的に～1μ_B のスピン・モーメントを持つことが示されている [3].

（3） フェルミ面: 122 系の ARPES より，2次元的フェルミ面 [4]，3次元的フェルミ面 [5]（図1），および反強磁性状態の畳み込まれたフェルミ面 [6] が報告されている．

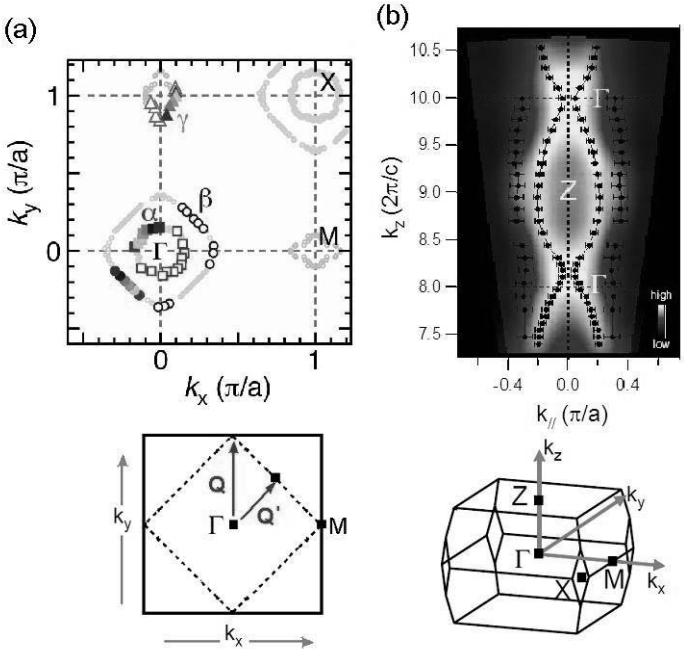


図1. (a) $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ のフェルミ面の k_x-k_y 面への射影 [4]. 下は対応する 2 次元ブリルアン域. (b) $BaFe_2As_2$ の２次元ブリルアン域中央のフェルミ面の $k_{||}$-k_z 面断面 [5]. 下は対応する 3 次元ブリルアン域. ここで，３次元ブリルアン域の k_x,k_y は２次元ブリルアン域の k_x,k_y に比べて 45 度傾いて定義されている．

（4） 超伝導ギャップ： ARPES の結果から，ギャップの対称性は$s_{\pm}$である可能性が高い [4,7].

（5） ボゾン励起の結合： キンクが観測され [8]，エネルギー的に超伝導ギャップ＋磁気励起あるいはフォノン励起で説明される.

（6） 電子状態の構造敏感性：バンド構造が As の位置に敏感であることが，ARPES 実験より確認されつつある [9].

フェルミ面のネスティングと反強磁性，超伝導との関係についても，現状をまとめ見解を述べる.

以下の共同研究者の方々に感謝する．吉田鉄平，Walid Malaeb，西一郎，有田亮太郎，青木秀夫，仲島康行，為ヶ井強，黒木和彦，臼井秀知，小谷佳範，久保田正人，小野寛太，D.H. Lu, M. Yi, Z.-X. Shen，神原陽一，平野正浩，細野秀雄，木方邦宏, P. M. Shirage，鬼頭聖，伊豫彰，永崎洋，石角元志，社本真一（敬称略）.

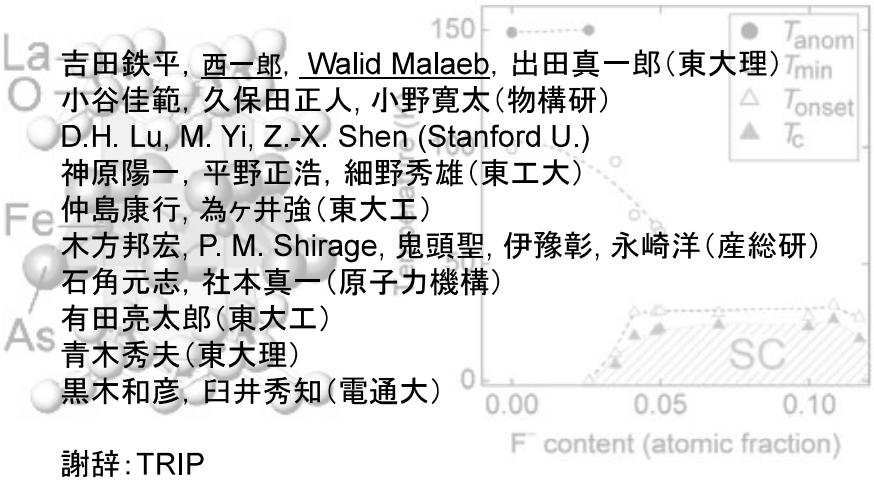
参考文献

[1] W. Malaeb *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 093714 (2008).
[2] D.H. Lu *et al.*: Nature **455**, 81 (2008).
[3] F. Bondino *et al.*: Phys. Rev. Lett. **101**, 267001 (2008).
[4] H. Ding *et al.*, Europhys. Lett. **83,** 47001 (2008).
[5] W. Malaeb *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn., in press.
[6] T. Shimojima et al.: arXiv:0904.1632.
[7] K. Terashima *et al*.: PNAS **106**, 7330 (2009).
[8] P. Richard *et al*.: Phys. Rev. Lett. **102**, 047003 (2009).
[9] I. Nishi *et al.*, unpublished.

鉄系高温超伝導体研究の最前線～「メカニズムおよび物性のレビューと展望」～
原子力機構システム計算科学センター　2009年11月28日（土）

鉄ヒ素系超伝導体の光電子分光

藤森　淳
東京大学理学系研究科



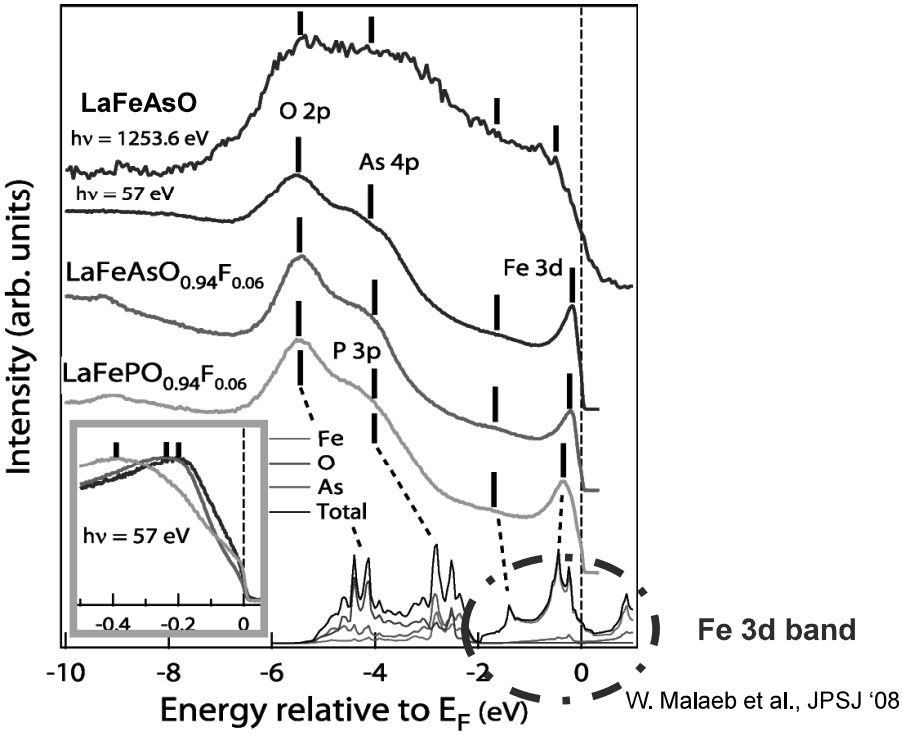
吉田鉄平，西一郎，Walid Malaeb，出田真一郎（東大理）
小谷佳範，久保田正人，小野寛太（物構研）
D.H. Lu, M. Yi, Z.-X. Shen (Stanford U.)
神原陽一，平野正浩，細野秀雄（東工大）
仲島康行，為ヶ井強（東大工）
木方邦宏，P. M. Shirage，鬼頭聖，伊豫彰，永崎洋（産総研）
石角元志，社本真一（原子力機構）
有田亮太郎（東大工）
青木秀夫（東大理）
黒木和彦，臼井秀知（電通大）

謝辞：TRIP

概要

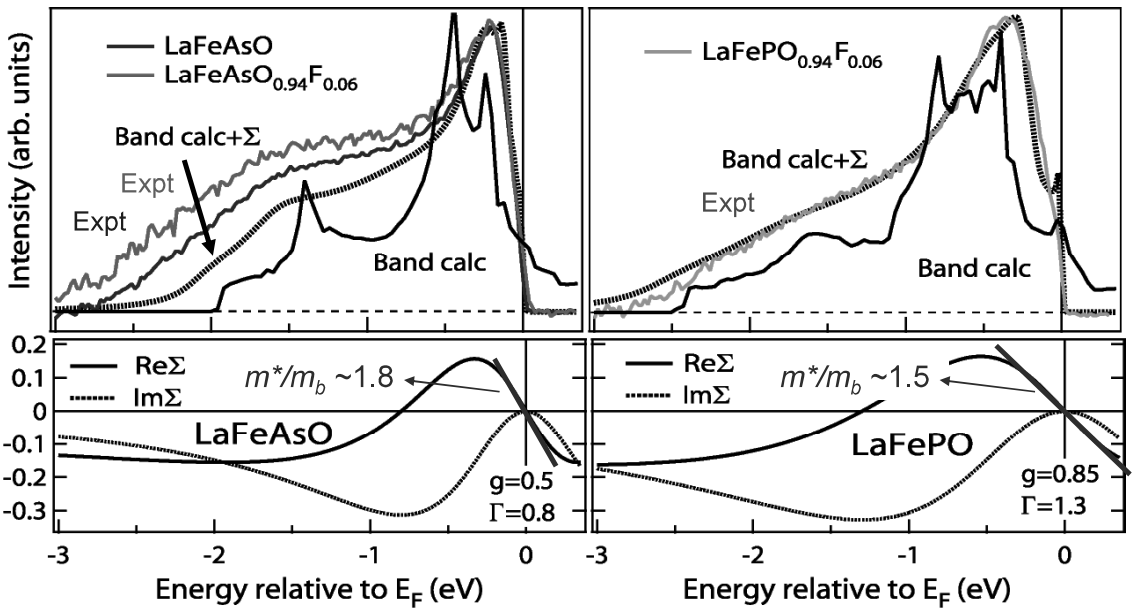
- ➡ バンド幅の繰り込み
- 高エネルギースピン揺らぎ
- フェルミ面
- 超伝導ギャップ
- ボゾンとの結合
- 電子構造の結晶構造敏感性

Valence-band photoemission spectra



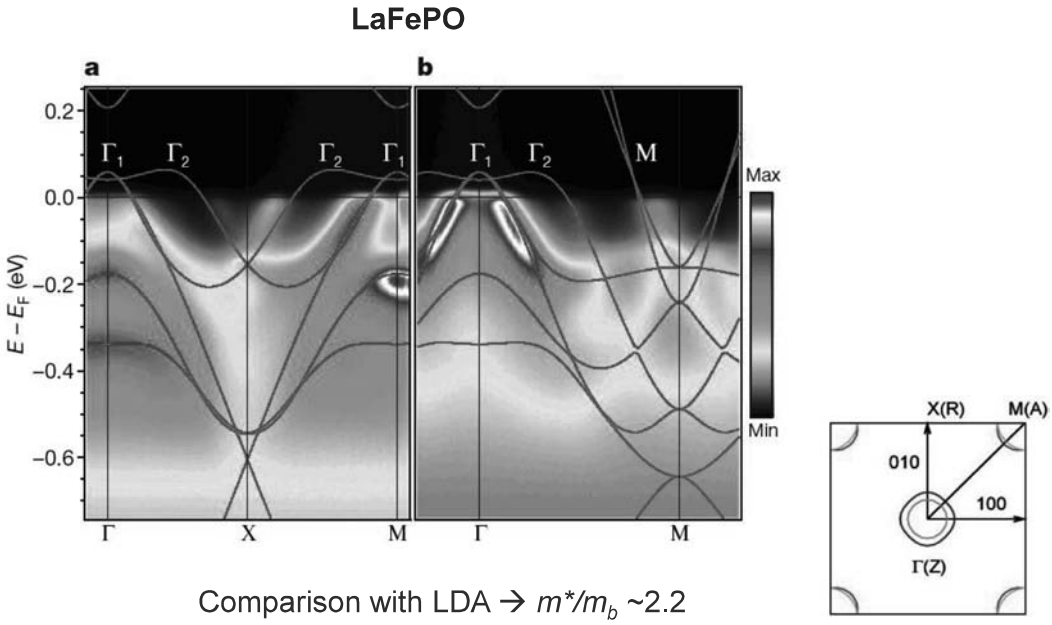
W. Malaeb et al., JPSJ '08

Correlation strength from photoemission data



W. Malaeb et al., JPSJ '08

Correlation strength from ARPES spectra



Comparison with LDA → m^*/m_b ~2.2

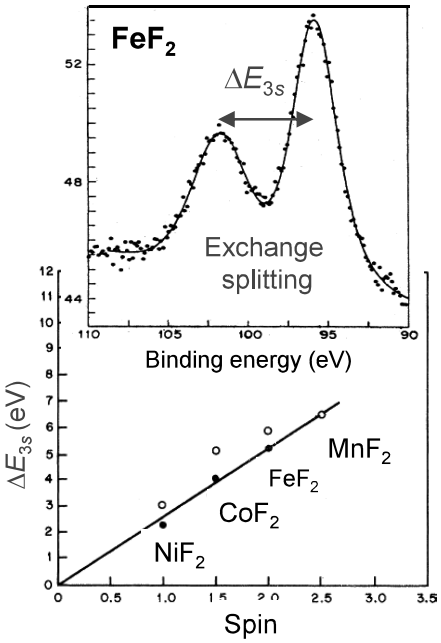
D. H. Lu et al., Nature `08

概要

- バンド幅の繰り込み
- ➡ 高エネルギースピン揺らぎ
- フェルミ面
- 超伝導ギャップ
- ボゾンとの結合
- 電子構造の結晶構造敏感性

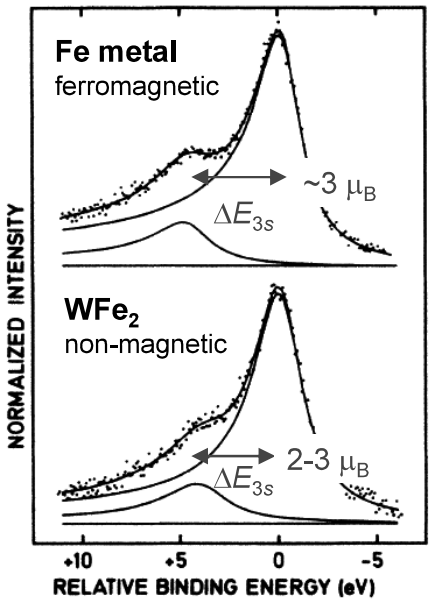
Fe 3*s* core-level photoemission spectra
- Spin polarization of Fe 3*d* electrons -

Localized Fe 3*d* electrons



G.K. Wertheim et al. PRB '73

Itinerant Fe 3*d* electrons

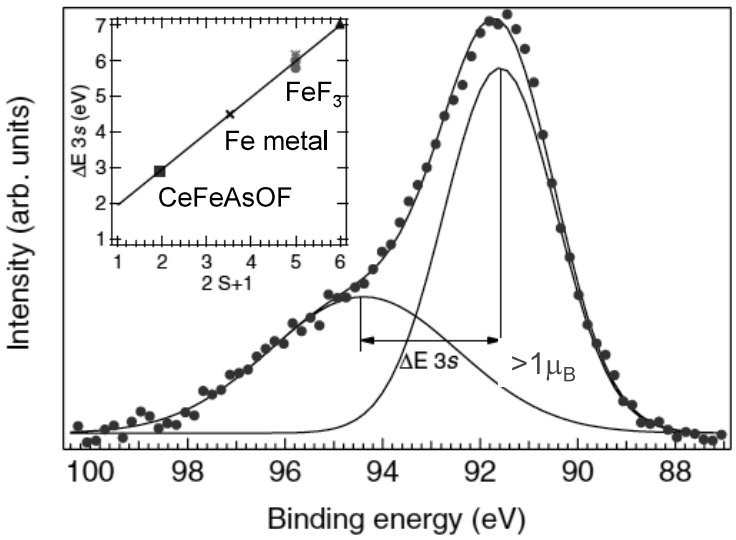


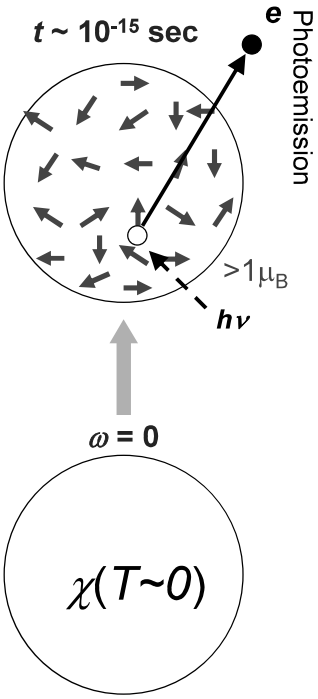
Probably FeSi, too

J.F. van Acker et al. PRB '88

Fe 3*s* core-level photoemission spectra
- Spin polarization of Fe 3*d* electrons -

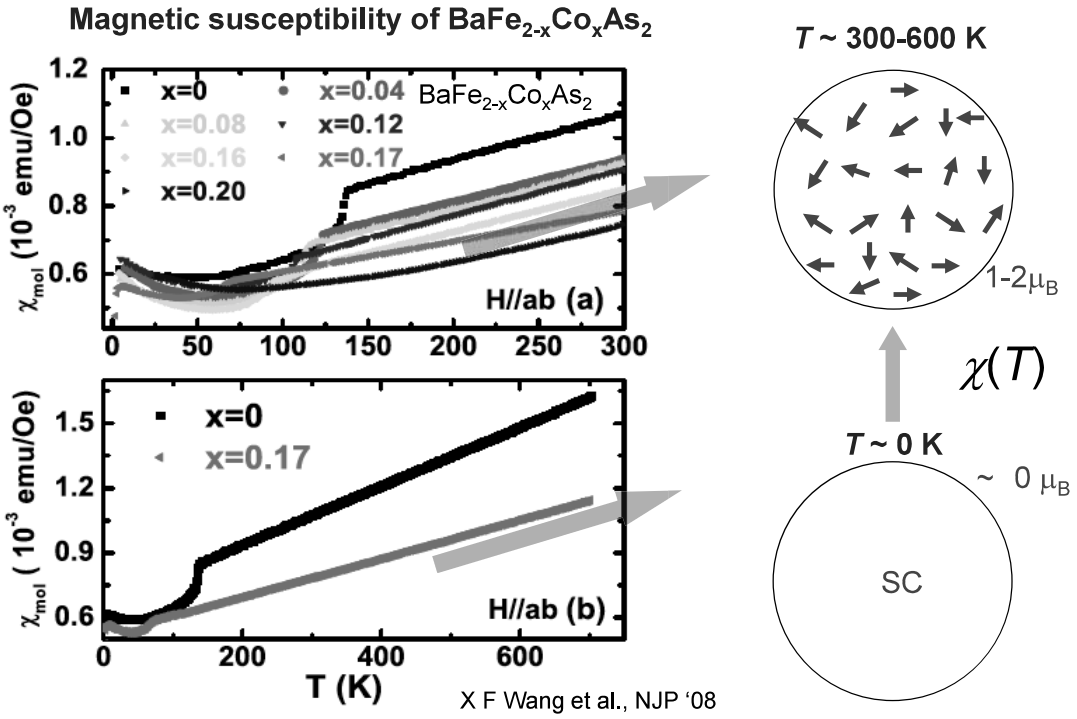
Superconducting $CeFeAsO_{0.89}F_{0.11}$





F. Bondino et al., PRL '08

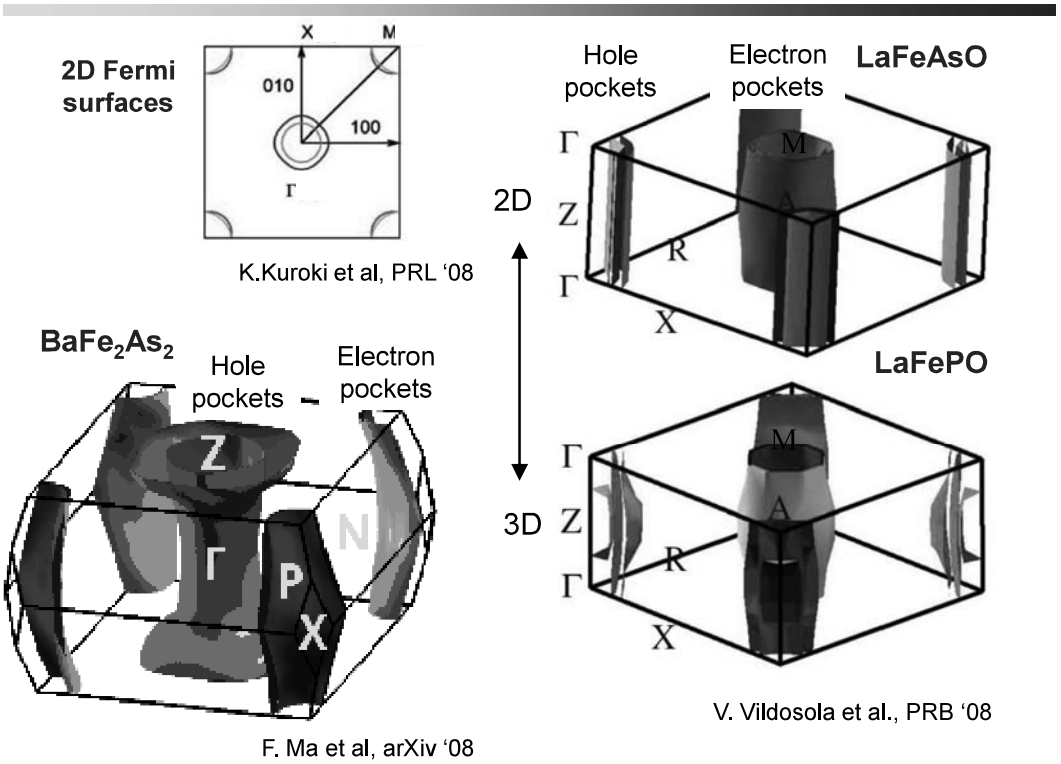
Unusual temperature dependence of magnetic susceptibility in Fe pnictides



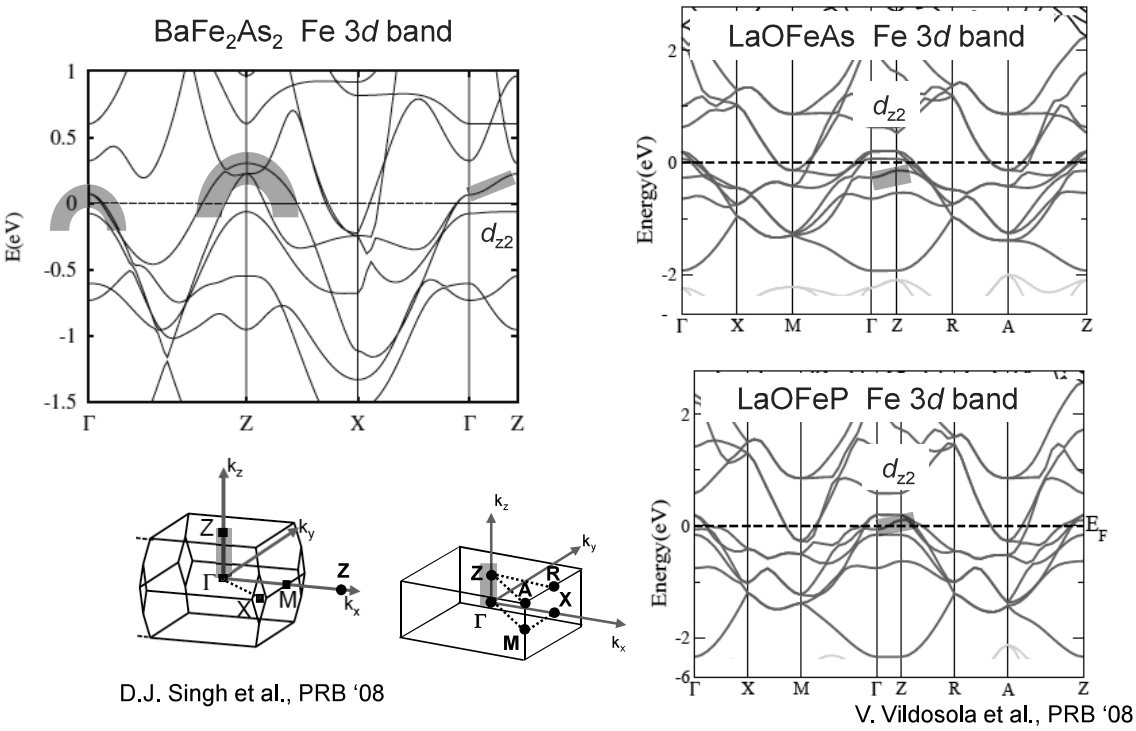
概要

- バンド幅の繰り込み
- 高エネルギースピン揺らぎ
- ➡ フェルミ面
- 超伝導ギャップ
- ボゾンとの結合
- 電子構造の結晶構造敏感性

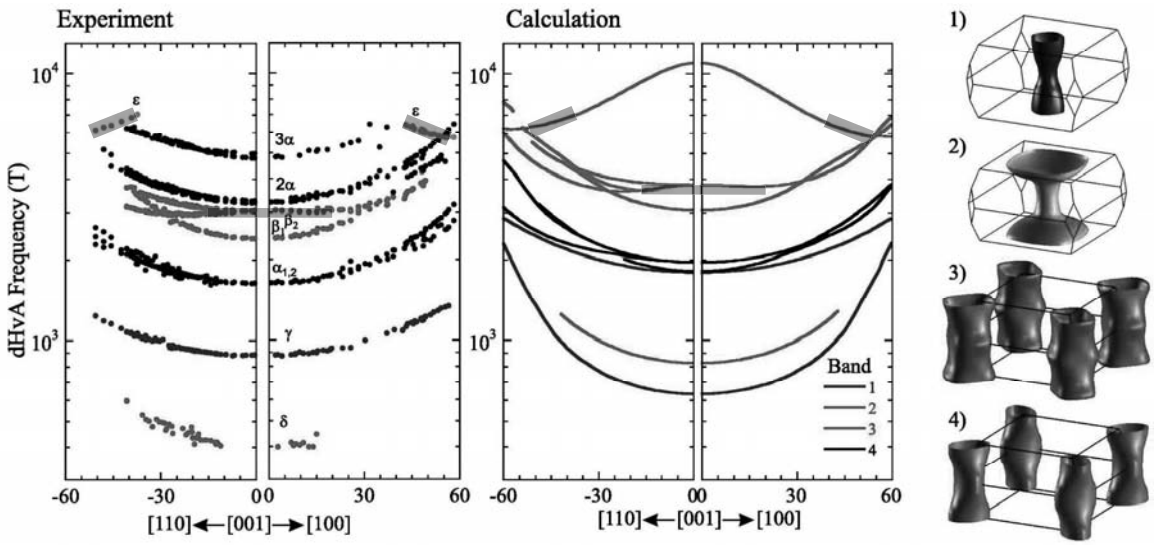
Three-dimensional Fermi surfaces: LDA calculation



Three-dimensional band dispersions: LDA calculation



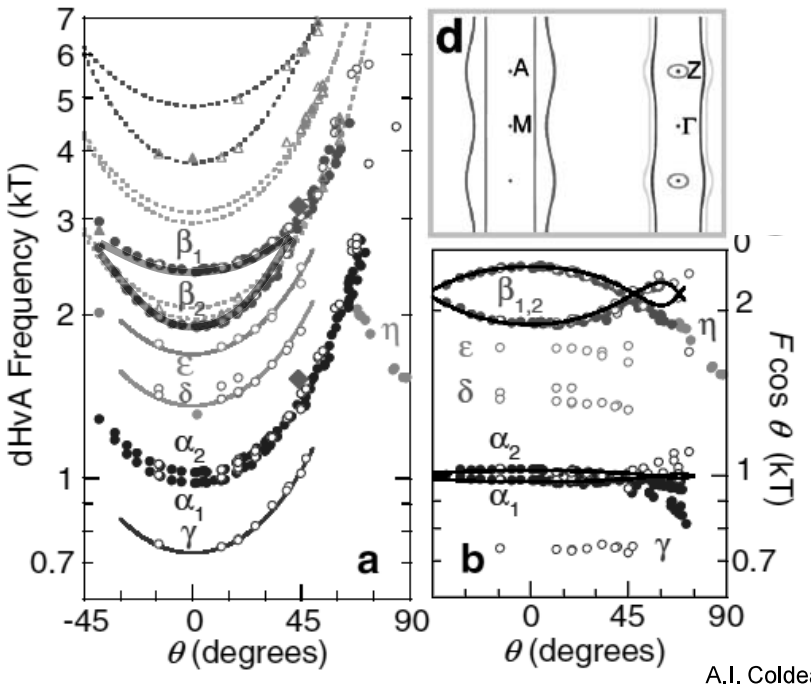
de Haas-van Alphen effect in $SrFe_2P_2$



2D cylinder →
Frequency ∝ 1/cosθ

J.G. Analytis et al., arXiv:09

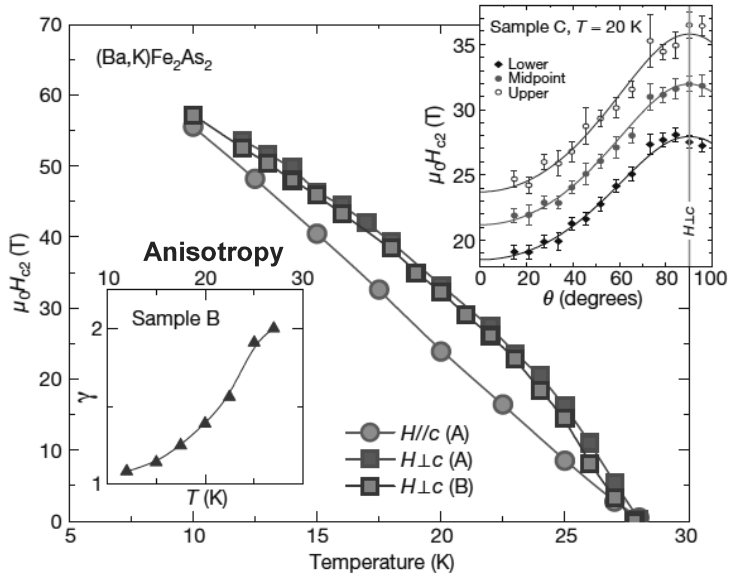
de Haas-van Alphen effect in LaFePO



A.I. Coldea et al., PRL '08

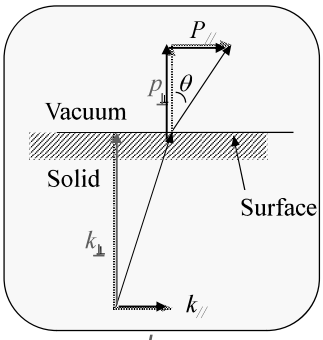
Nearly isotropic superconductivity in $(Ba,K)Fe_2As_2$

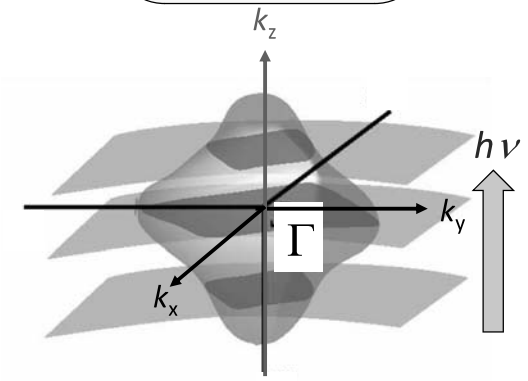
Upper critical field H_{c2}



H. Q. Yuan et al., Nature '09

ARPES of three-dimensional electronic structure





Energy conservation

$$E_{kin} = -E_B + h\nu - \Phi$$

Momentum conservation (parallel to surface)

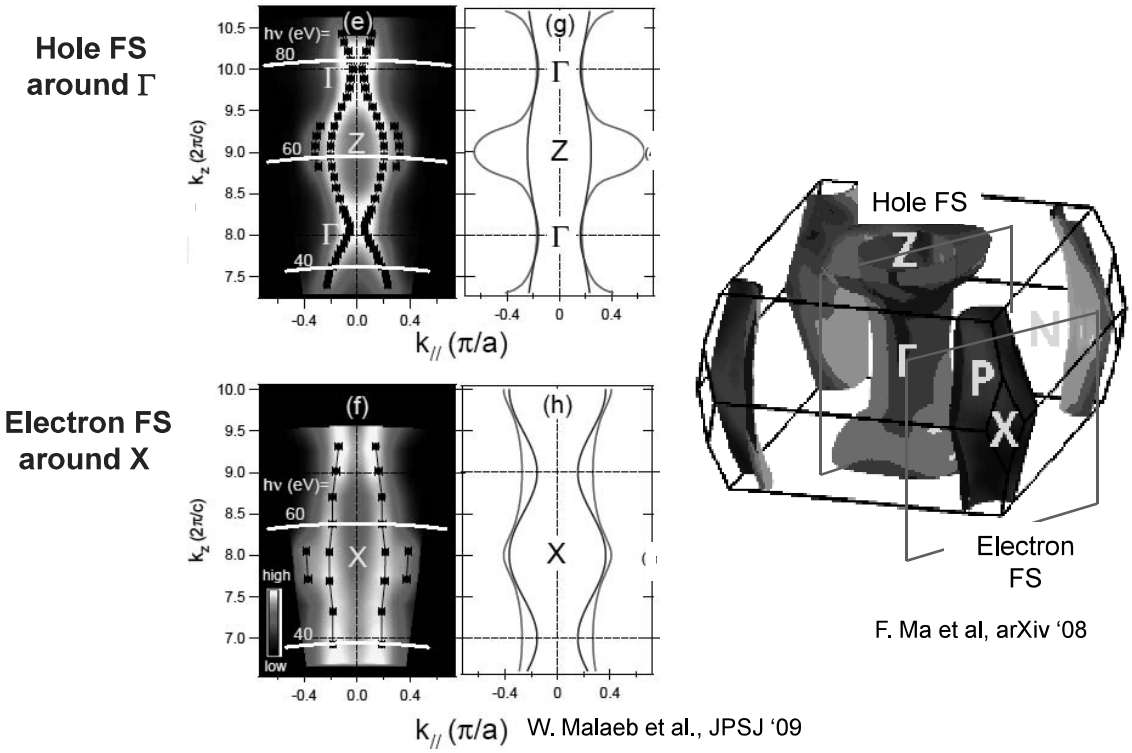
$$p_{//} = \hbar k_{//}$$
$$p_{//} = \sqrt{2mE_{kin}}\sin\theta$$

$$\hbar k_{//} = \sqrt{2mE_{kin}}\sin\theta = \sqrt{2m(-E_B + h\nu - \Phi)}\sin\theta$$

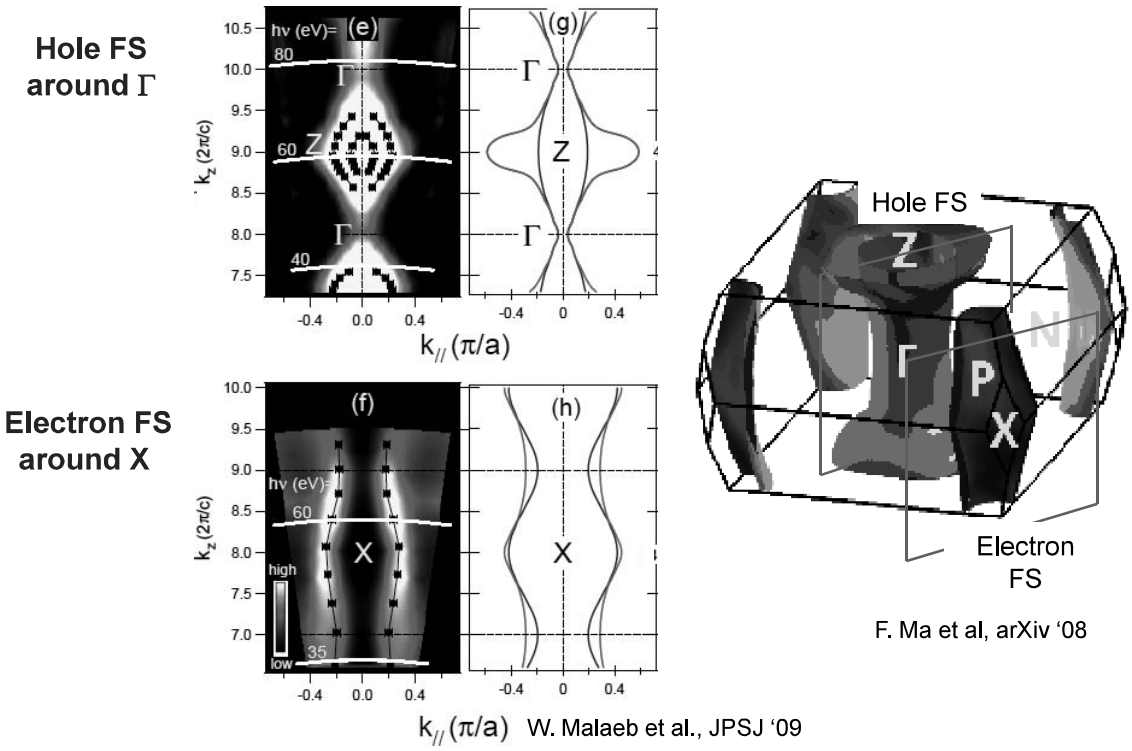
$$\boxed{\hbar k_{\perp} = \sqrt{2m(E_{kin}\cos^2\theta + V)}}$$

V: Inner potential

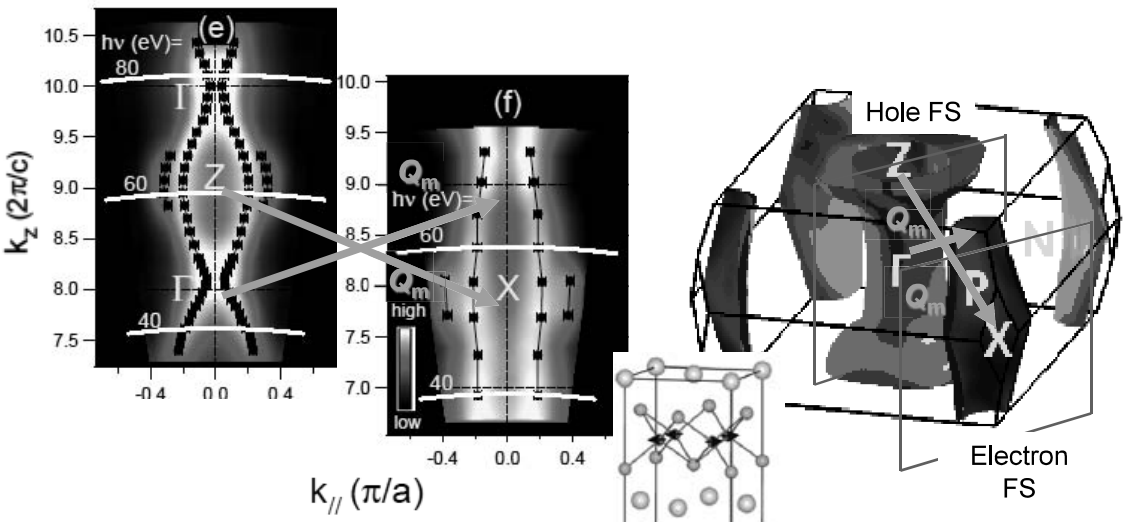
Modulation of Fermi surfaces along the k_z direction in $BaFe_2As_2$



Modulation of Fermi surfaces along the k_z direction in $BaFe_{1.8}Co_{0.2}As_2$



Nesting of Fermi surfaces in antiferromagnetic $BaFe_2As_2$?



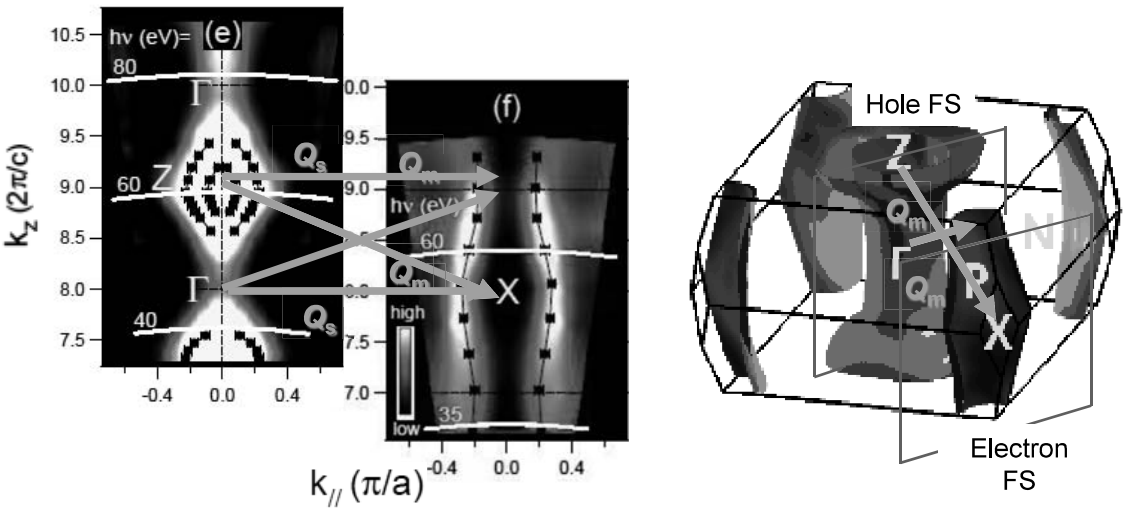
Weak and subtle nesting compared to 2D

→ Non-nesting origin of AFM ordering

Note: different AFM ordering in FeTe

F. Ma et al, arXiv '08

Nesting of Fermi surfaces in superconducting $BaFe_{1.8}Co_{0.2}As_2$?

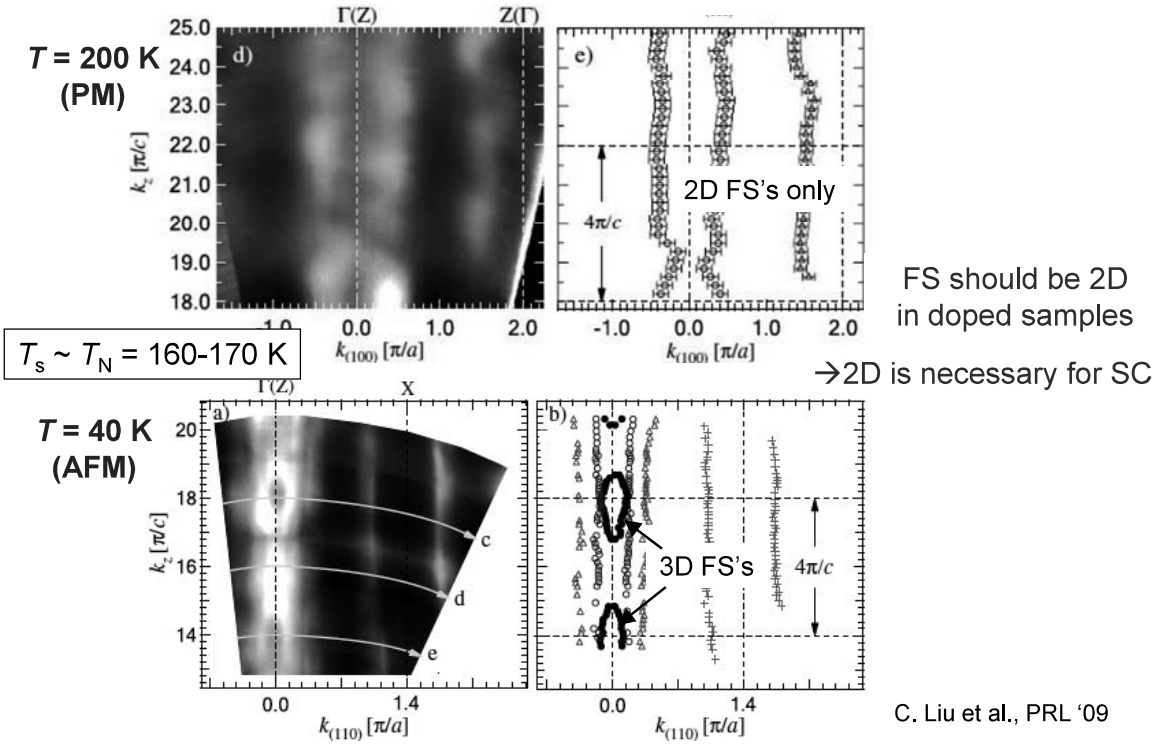


Nesting origin of superconductivity?

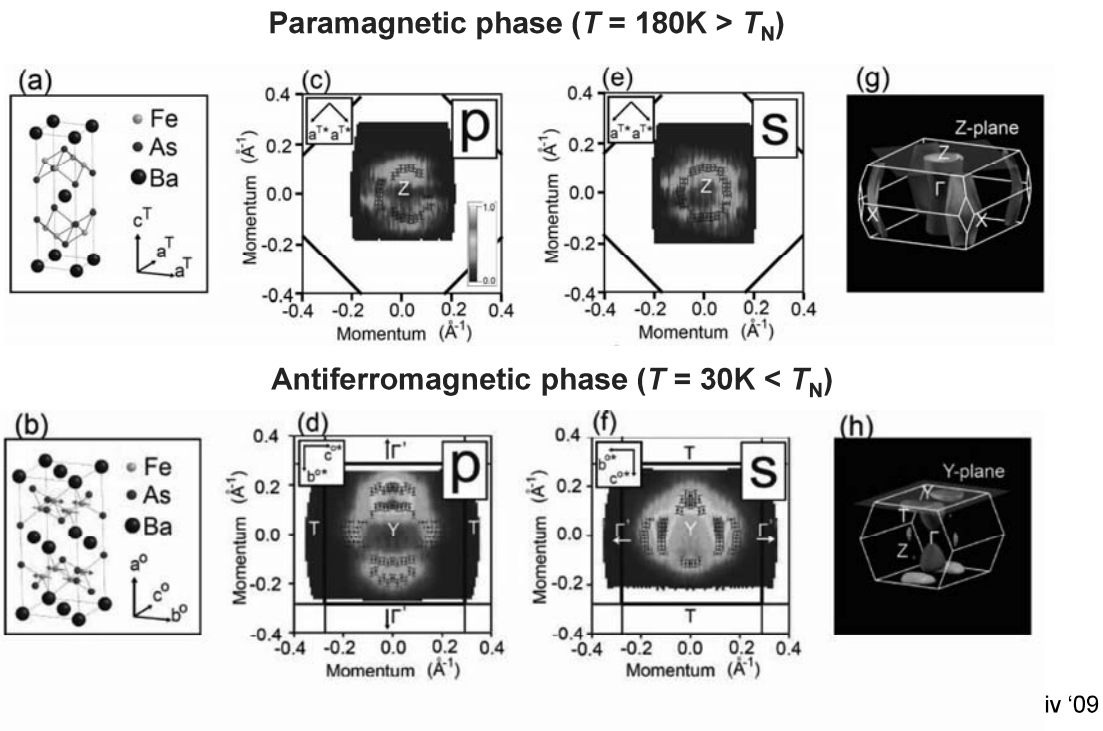
F. Ma et al, arXiv '08

W. Malaeb et al., JPSJ '09

3D Fermi surfaces in $CaFe_2As_2$



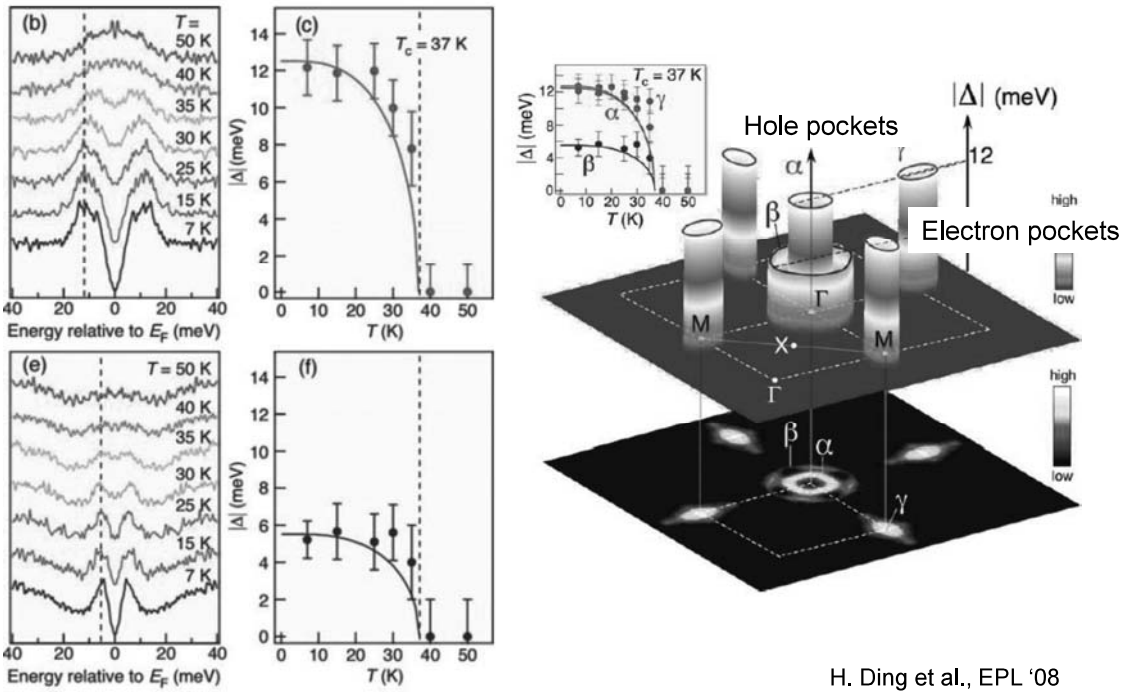
Fermi surfaces in antiferromagnetic $BaFe_2As_2$



概要

- バンド幅の繰り込み
- 高エネルギースピン揺らぎ
- フェルミ面
- ➡ 超伝導ギャップ
- ボゾンとの結合
- 電子構造の結晶構造敏感性

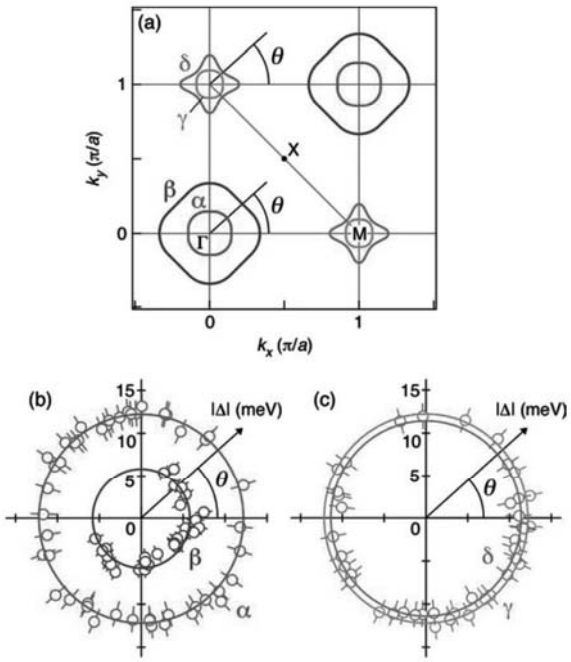
Superconducting gap of $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$



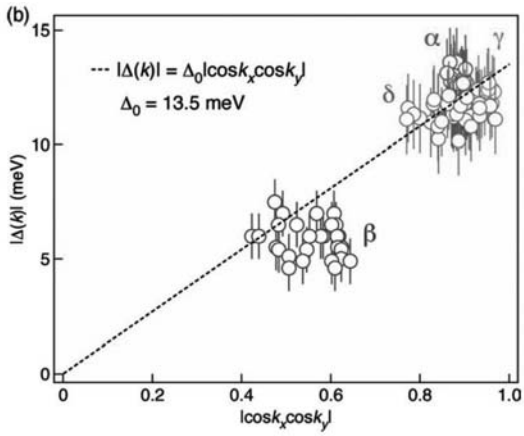
H. Ding et al., EPL '08

Superconducting gap of $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$

Gap anisotropy



Test for $s_{\pm}$ wave

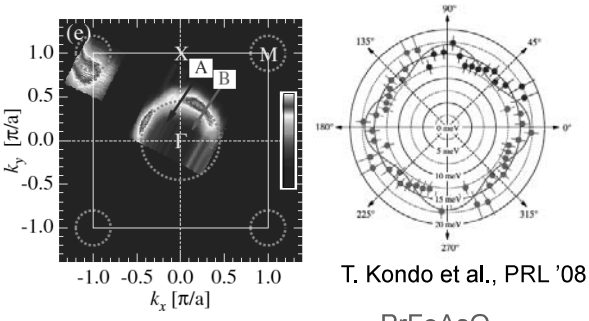


$2\Delta_0/k_BT_c \sim 8$

K. Nakayama et al., EPL '09

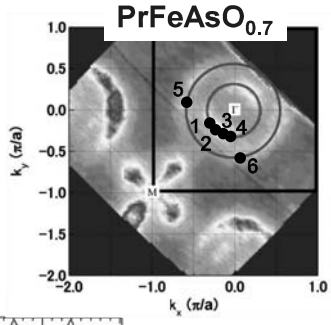
"Superconducting" gap of 1111 systems

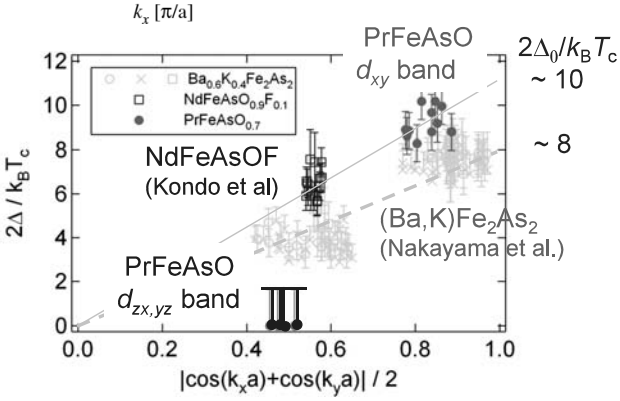
$NdFeAsO_{0.9}F_{0.1}$



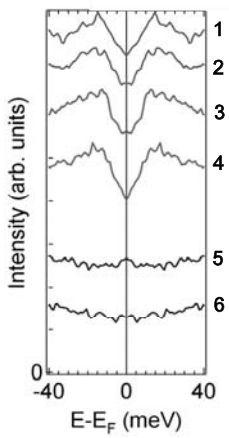
T. Kondo et al., PRL '08

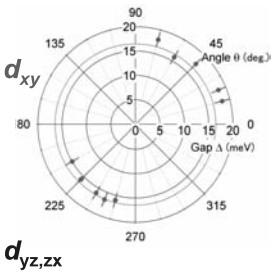
$PrFeAsO_{0.7}$





$2\Delta_0/k_BT_c$
~ 10
~ 8



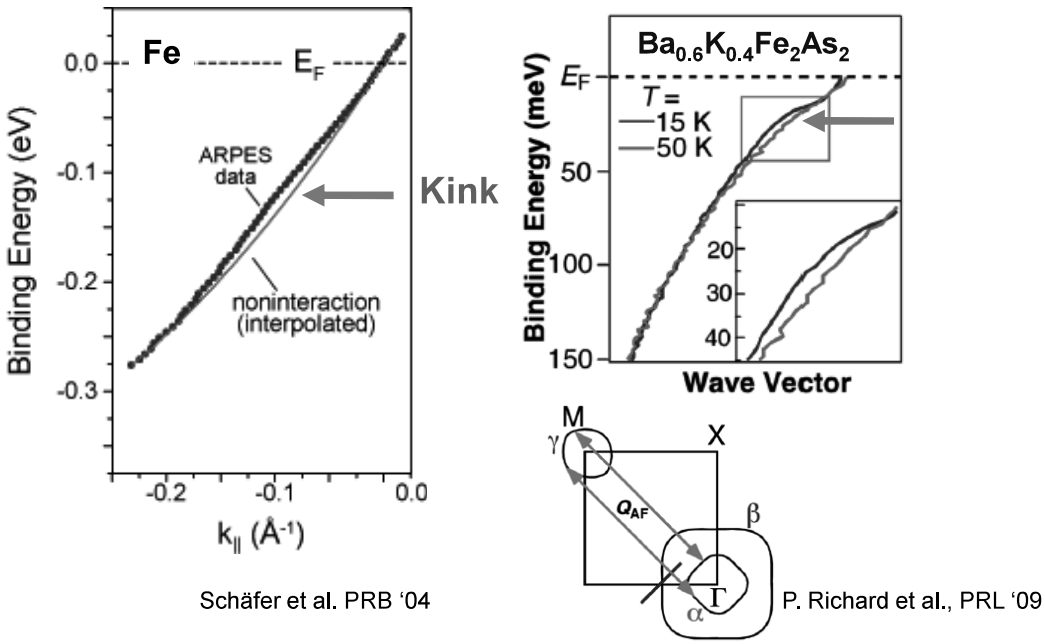


I. Nishi et al.

概要

- バンド幅の繰り込み
- 高エネルギースピン揺らぎ
- フェルミ面
- 超伝導ギャップ
- ➡ ボゾンとの結合
- 電子構造の結晶構造敏感性

Mass renormalization on low energy scale in Fe and Fe pnictides



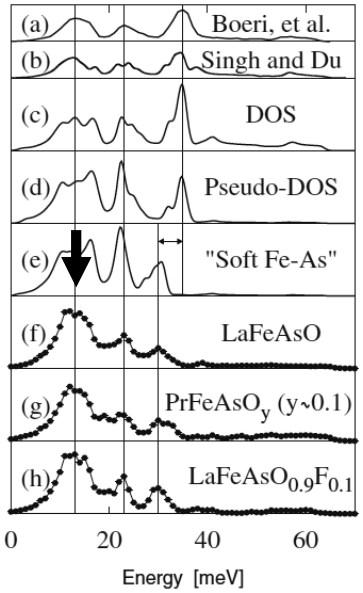
Schäfer et al. PRB '04

P. Richard et al., PRL '09

Coupling to excitation of magnons/spin fluctuation + phonon

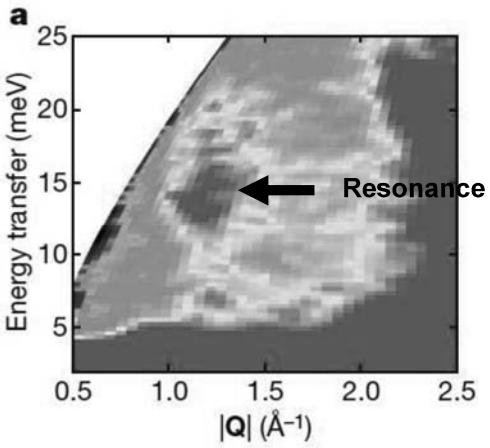
Boson excitations in Fe pnictides

Phonon DOS compared with LDA calculations



T. Fukuda et al. JPSJ '08

Magnetic neutron scattering Of $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$



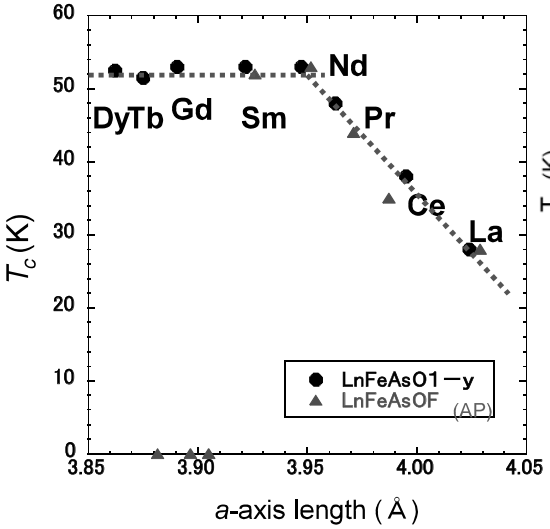
A. D. Christianson et al., Nature '08

概要

- バンド幅の繰り込み
- 高エネルギースピン揺らぎ
- フェルミ面
- 超伝導ギャップ
- ボゾンとの結合
- ➡ 電子構造の結晶構造敏感性

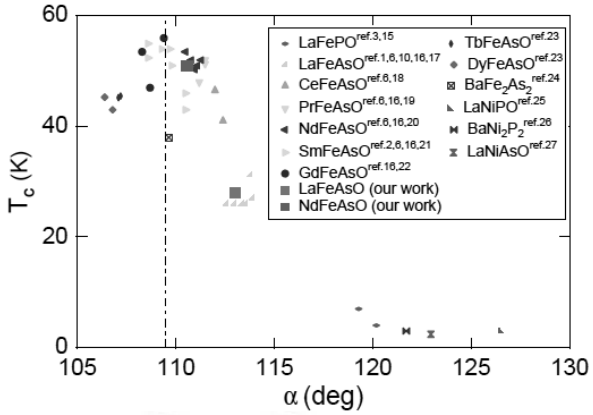
Strong structure dependence of T_c in Fe pnictides

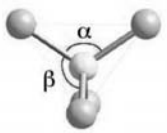
Lattice constant *vs* T_c



T. Ito

Bond angle *vs* T_c

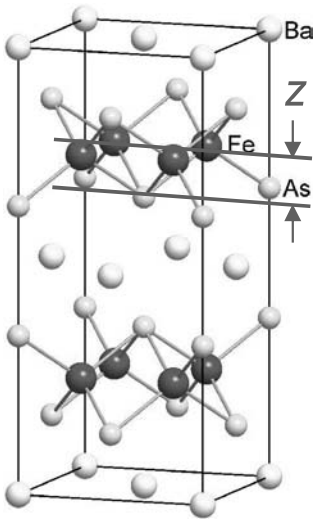




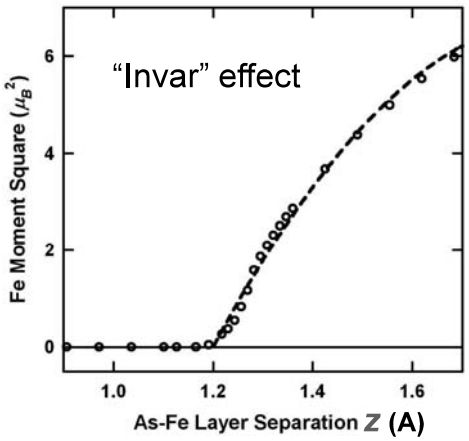
$FeAs_4$-tetrahedron

C.H.. Lee et al.

Strong pnictogen-position dependence of magnetic moment in Fe pnictides



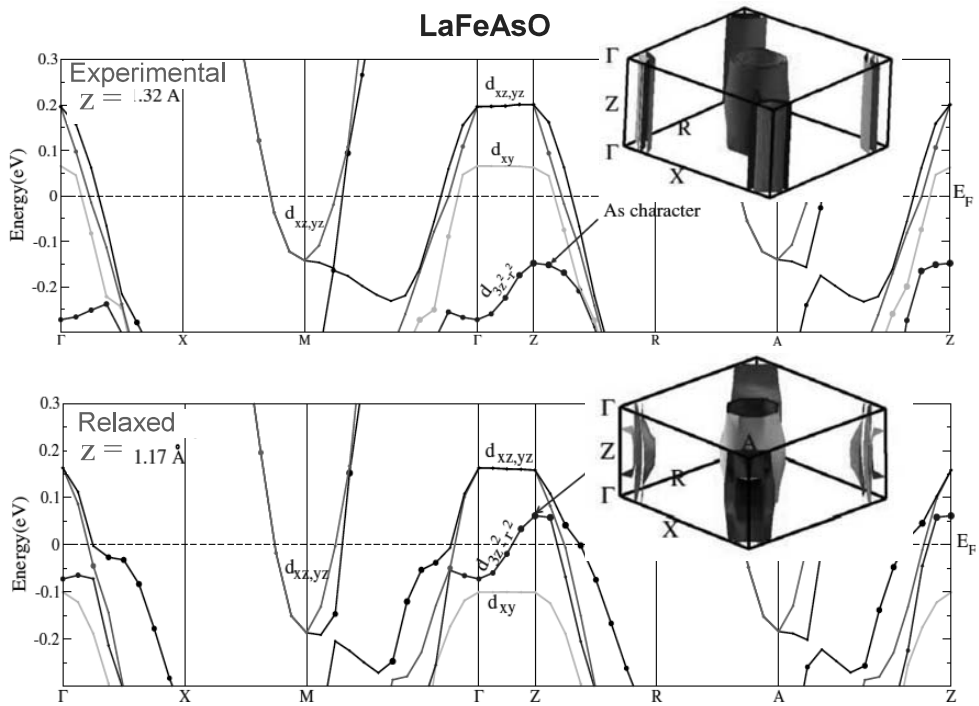
Calculated *z*-dependence of spin moment in $Ba(Fe_{0.92}Co_{0.08})_2As_2$



$$F_{mv} = [\alpha(z - z_c)+\beta(z - z_c)^2]\, M(Q)^2$$ z: As/P position

T. Egami et al., arXiv09

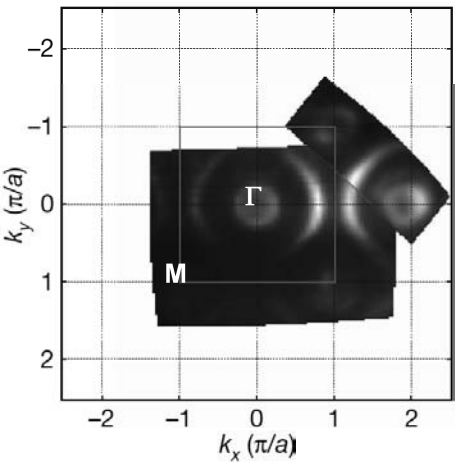
Strong pnictogen-position dependence of band structure in Fe-based superconductors



V. Vildsora et al., PRB '08

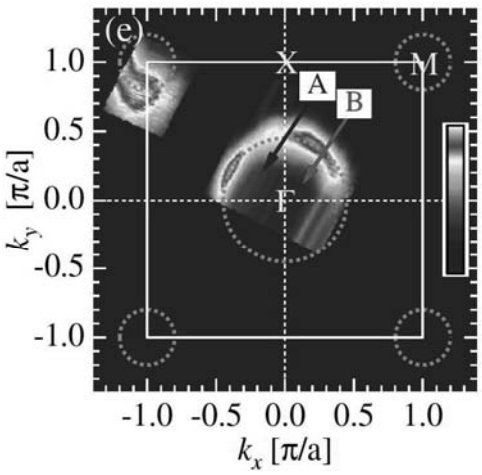
Previous ARPES studies on 1111

LaFePO



D. H. Lu et al., Nature '08.

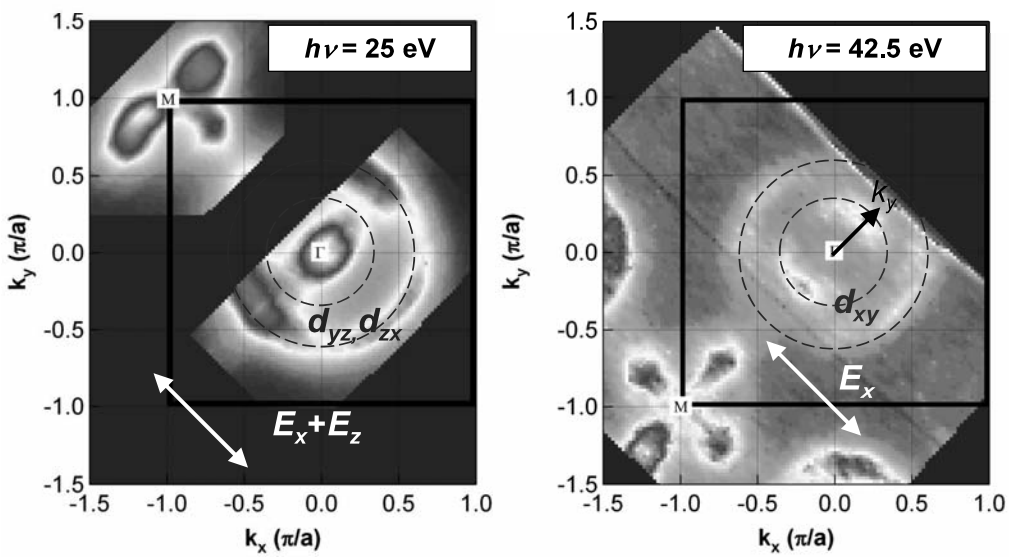
$NdFeAsO_{0.9}F_{0.1}$



T. Kondo et al., PRL '08

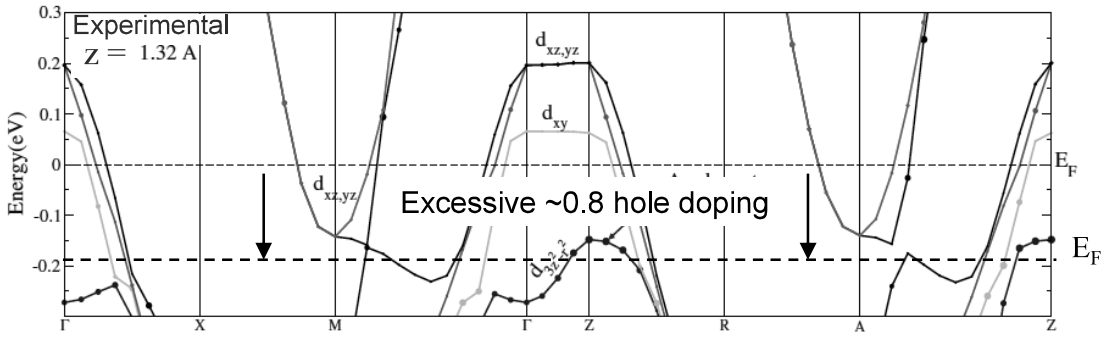
Large hole-like Fermi surface: Excess (~1) hole doping

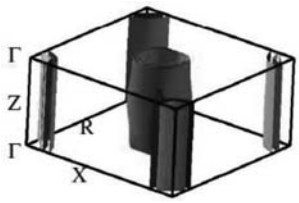
Fermi surfaces in $PrFeAsO_{0.7}$



I. Nishi et al.

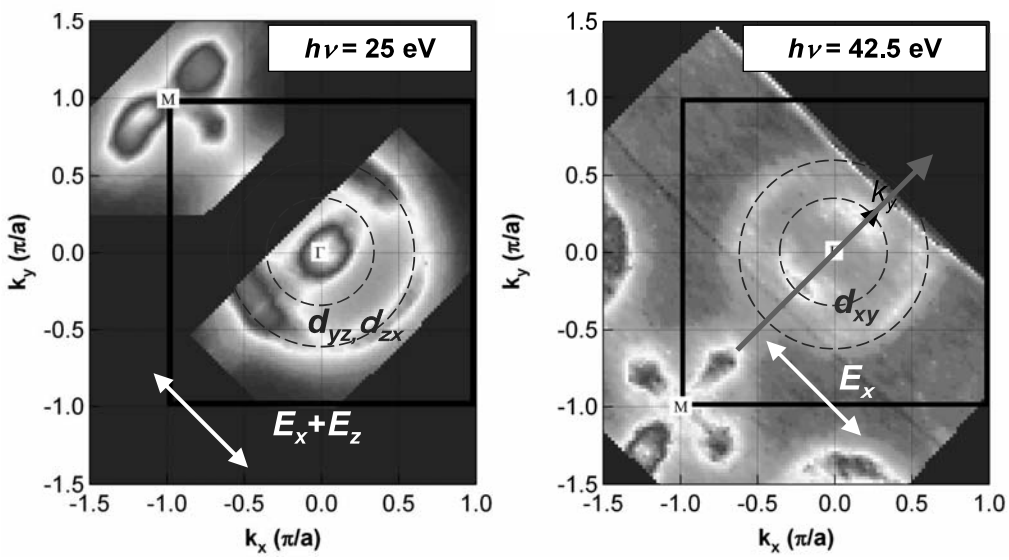
Band structure calculation for LaFeAsO





V. Vildsora et al., PRB '08

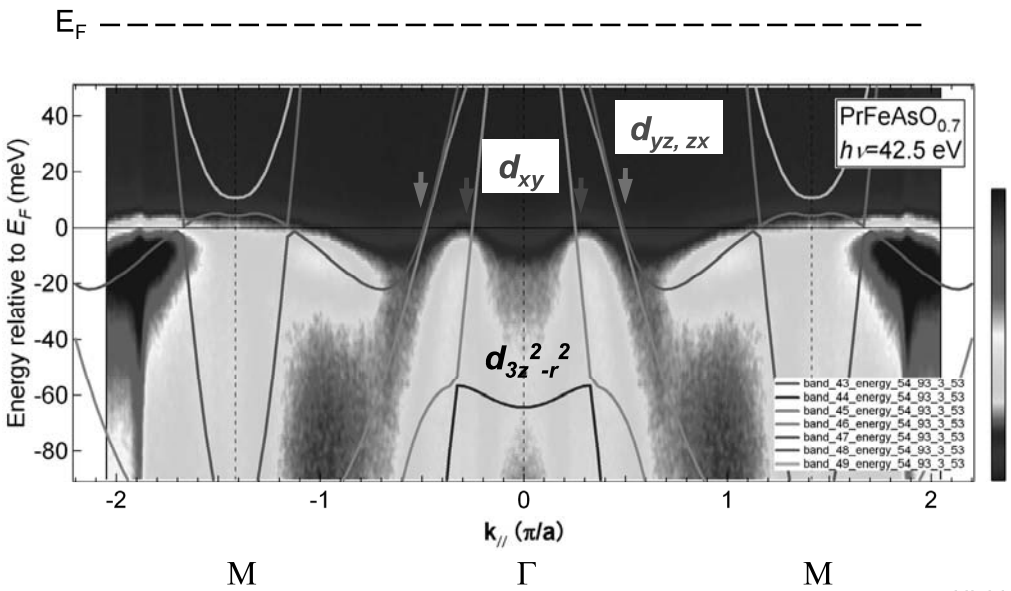
Fermi surfaces in $PrFeAsO_{0.7}$



I. Nishi et al.

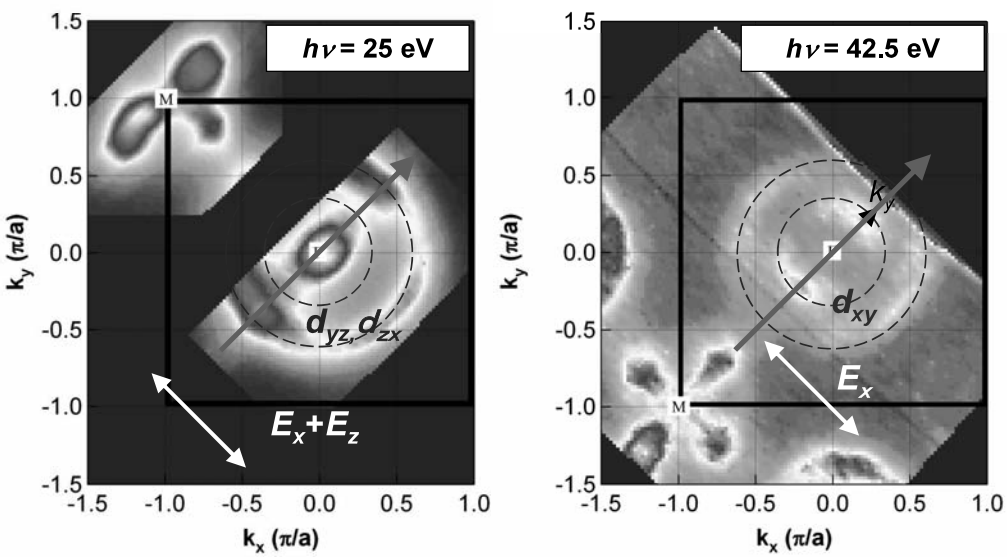
Bands near E_F in $PrFeAsO_{0.7}$

LDA bands renormalized by m^*/m_b~3



I. Nishi et al.

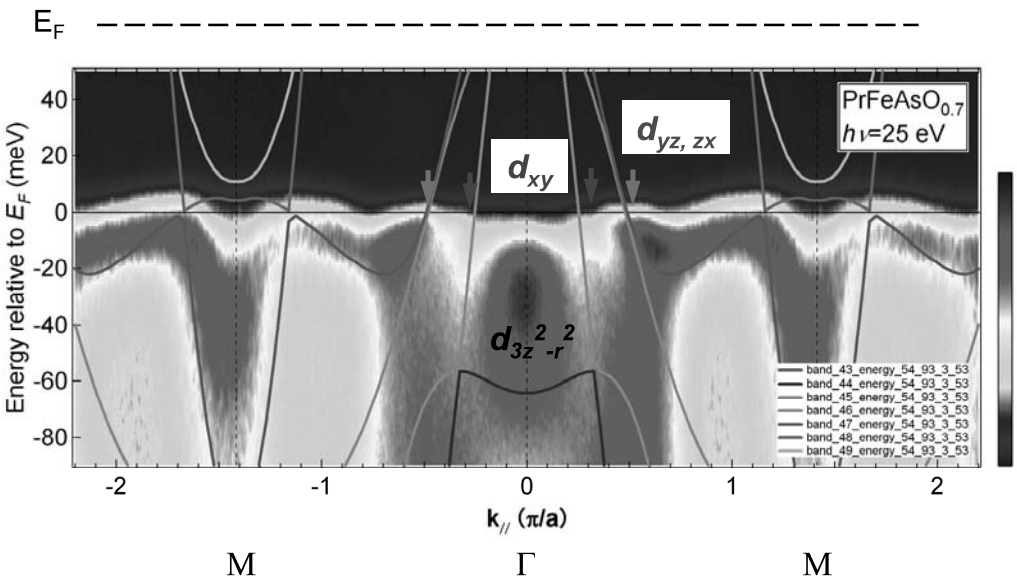
Fermi surfaces in $PrFeAsO_{0.7}$



I. Nishi et al.

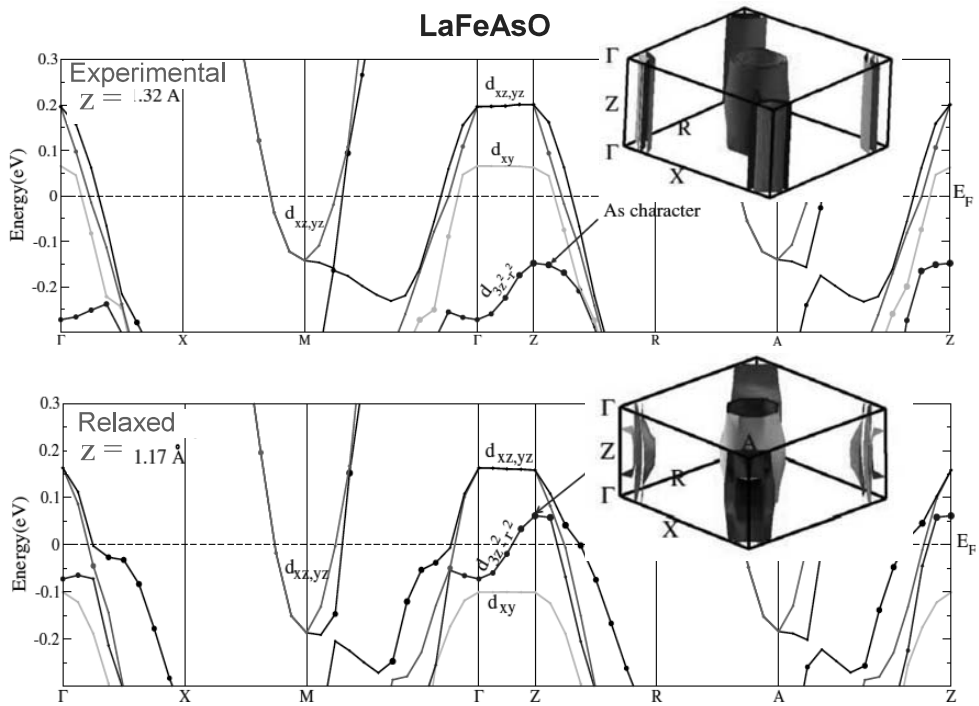
Bands near E_F in $PrFeAsO_{0.7}$

LDA bands renormalized by m^*/m_b~3



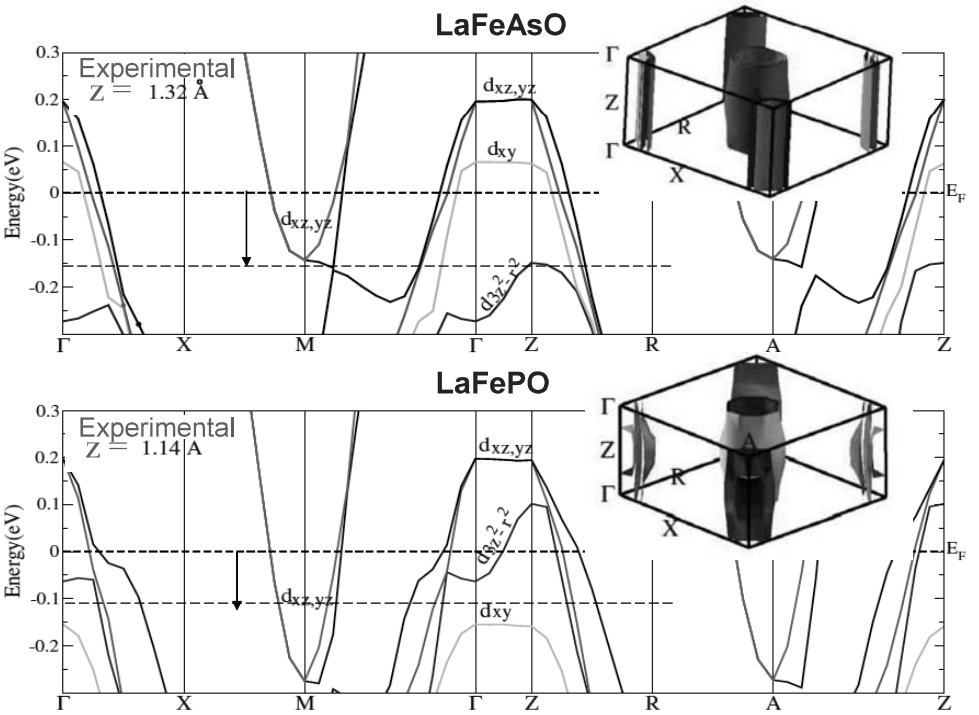
I. Nishi et al.

Strong pnictogen-position dependence of band structure in Fe-based superconductors



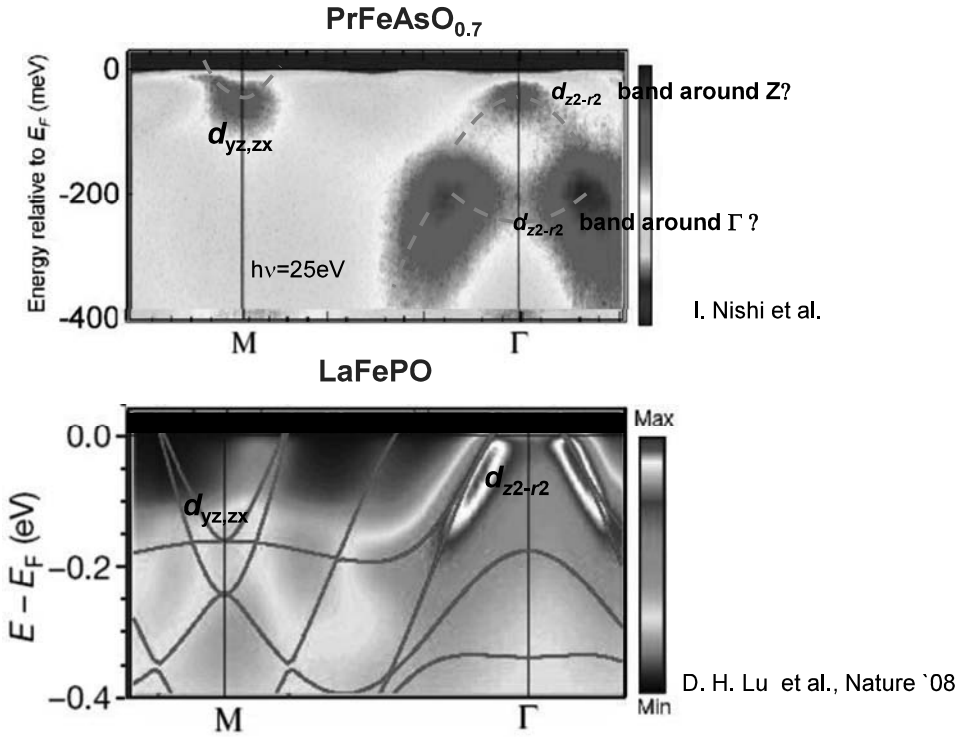
V. Vildsora et al., PRB '08

Strong pnictogen-position dependence of band structure in Fe-based superconductors



V. Vildsora et al., PRB '08

Comparison between AREPS spectra of Fe-As and Fe-P superconductors

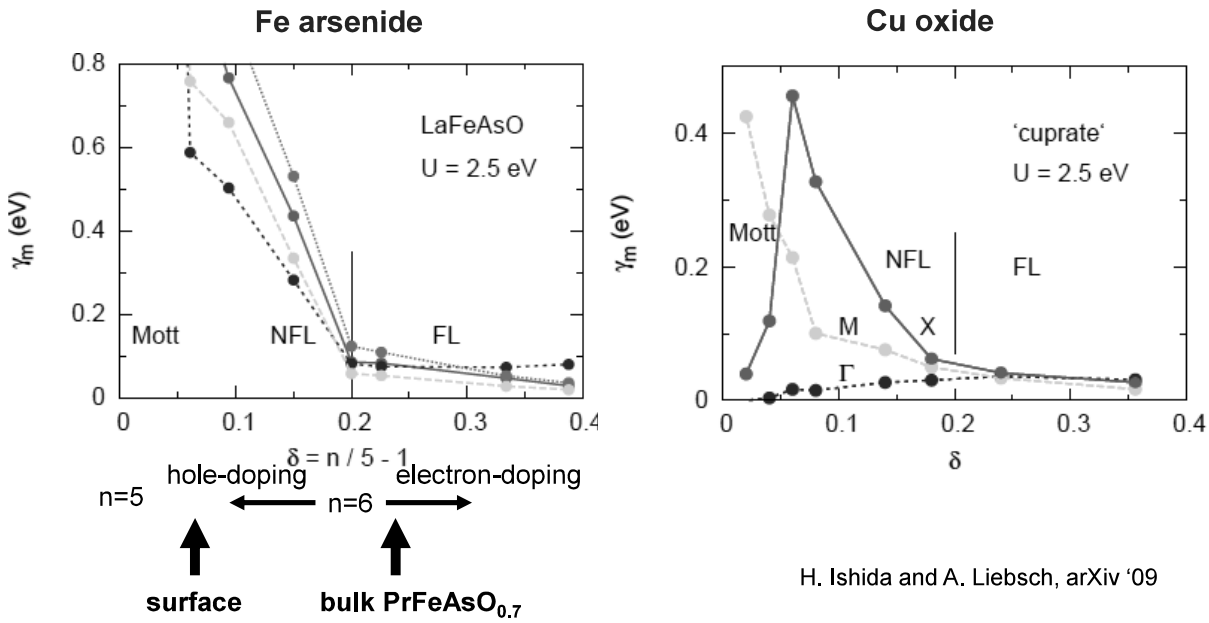


I. Nishi et al.

D. H. Lu et al., Nature `08

Heavily hole-doped surface as a model of strong correlation limit

(C)DMFT calculation of QP scattering rate (pseudogap)



H. Ishida and A. Liebsch, arXiv '09

結論

- LDA + (適度の)電子相関で，鉄砒素化物の電子構造が理解できる.
- Fe $3d_{z2}$ 軌道からなるバンドは強い3次元性を示し，他のバンドは2次元的.
- 122系のネスティングはドーピングに強く拠らない.
  - 反強磁性の起源はネスティングではない.
  - 超伝導とネスティングの関係は？
- E_F付近の電子構造はAs原子位置に強く依存する.

課題

- 超伝導ギャップの内部構造，フェルミ面依存性，温度依存性は？
- 準粒子と結合するボゾンは？
- Asの分極（Sawatzky）？
- 相関の強い11系，$s_{\pm}$波→d波(As-P系)，……

10. 鉄系高温超伝導体の中性子散乱

原子力機構　量子ビーム[A]、JST-TRIP[B]
社本真一[A,B]

Neutron Scattering Study on Iron Based Superconductors

QuBS JAEA[A], JST-TRIP[B]
Shin-ichi Shamoto[A,B]

鉄系超伝導と磁性とのかかわりは、その電子状態を含めて、鉄系超伝導の本質を知る上で重要な因子になっている。中性子散乱を用いると波数とエネルギー空間での動的スピン磁化率がわかり、そのかかわりについて重要な情報が得られることから、鉄系超伝導の研究には重要なプローブのひとつとなっている。これまでの中性子散乱の実験結果を振り返ってみると、$Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$[1,2]と $LaFeAsO_{1-x}F_x$[3,4]の粉末試料で、また $CaFe_2As_2$[5]、$Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$[6,7,8]と $FeTe_{1-x}Se_x$[9]の単結晶試料で非弾性散乱実験が行われている。それらの結果から、母相の磁気励起スペクトルはおおよそ 200 meV までの高いエネルギー範囲まで広がっており、超伝導相では共通して、Γ点と M 点のフェルミ面間のネスティングベクトルに相当する $Q=(\pi, 0)$（unfolded Brillouin zone）で磁気散乱ロッドが観測されている。さらに超伝導転移温度以下では、その磁気散乱スペクトルの低エネルギー部分にギャップが生じるとともにレゾナンスピークが現れ、動的構造因子 $S(Q,\omega)$ 全体の重みは保存されている。図 1 に示すように、これまで測定されたレゾナンスピークのエネルギーE_{res} はおおよそ $4.7k_BT_c$ となっており、超伝導ギャップとの強い相関を示唆し、$s_{\pm}$波の超伝導ギャップ対称性とよく対応している[10,11]。

次に鉄系超伝導と磁性とのかかわりを知る上で、このような磁気励起が鉄系超伝導体相図中にどのように広がっているのかを調べる必要がある。すでに $LaFeAsO_{1-x}F_x$ 系で NMR の $1/T_1T$ が系統的に測定され、フッ素濃度の増加に伴い、超伝導相内では、T_c 直上で２ケタも減少するが、室温ではほとんど変化しないことがわかっている[12]。一方、我々が $LaFeAsO_{1-x}F_x$ 系粉末試料、x=0, 0.057, 0.082, 0.158 で中性子非弾性散乱実験を行ったところ、T_c の高い超伝導相 x=0.057（T_c~25 K）および 0.082（T_c~29 K）では、11 meV 付近の磁気散乱ロッドは x=0 の母相とほとんど変わらずに残っており、さらにフッ素濃度の高い x=0.158 のオーバードープ試料（T_c~7 K）では、その磁気散乱がなくなっていることがわかった[4]。

このスピン揺らぎとして観測された磁気散乱ロッドはネスティングの効いた遍歴電子系としても、また交換相互作用による局在スピン系としても説明可能である[13]。$CaFe_2As_2$ の磁気励起スペクトルは局在スピン系として説明できるけれども[5]、FeTe で見つかった２重ストライプ型の磁気構造は同じ局在スピンモデルでは説明できない[13]。そこで、母相から超伝導相への相転移に関して、体積変化を調べた

ところ、ホールドープと電子ドープに関わらず、すべての系で体積が減少していることがわかった[14]。つまり SDW 相の消失は遍歴電子系の磁気体積効果で説明できる[15]。そして体積減少を伴う相転移の原因は、キャリア数変化によるネスティング条件の緩和であり、それに伴って運動エネルギーが増大し、磁気モーメントが減少したと考えられる[16]。ちなみに同じ電子ドープ系として知られる $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ 系では、T_c がほぼ消失した x=0.15 のオーバードープの試料で、Γ点のフェルミ面が消失することが光電子分光 ARPES により見つかっている[17]。今回の $LaFeAsO_{1-x}F_x$ 系の x=0.158 でも、キャリア数が近いことから同様にフェルミ面のネスティングがなくなったと思われる。すなわち、ネスティング条件のない組成では、スピン揺らぎもないことになり、そのような領域でも超伝導は消えないものの、T_c は十分に抑制されたことになる。このことは鉄系超伝導においてスピン揺らぎが非常に重要なことを示唆しており、また同時に $s_{\pm}$ 波の超伝導ギャップ対称性を支持している。しかし一方でオーバードープ領域ではその対称性が変わることも示唆しており、今後のさらなる研究が期待される。

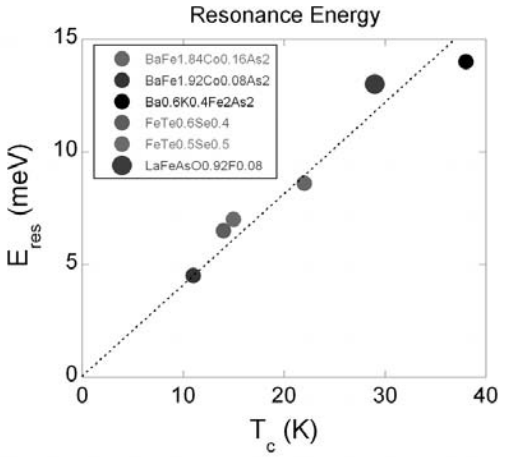


図1．鉄系超伝導体で観測されている超伝導転移温度 T_c とレゾナンスエネルギーとの関係。

参考文献

[1] A. D. Christianson, *et al*. Nature **456**, 930 (2008).
[2] R. A. Ewings, *et al.* Phys. Rev. B **78**, 220501(R) (2008).
[3] M. Ishikado, *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **78**-4, (2009) 043705.
[4] S. Wakimoto, K. Kodama, M. Ishikado, *et al.*, arXiv:0906.2453.
[5] Jun Zhao, *et al.*, Nature Phy. **5**, 555-560 (2009).
[6] K. Matan, R. Morinaga, K. Iida, and T. J. Sato, Phys. Rev. B **79**, 054526 (2009).
[7] A. D. Christianson, *et al.* Phys. Rev. Lett. **103**, 087002 (2009).
[8] M. D. Lumsden, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 107005 (2009).
[9] M. D. Lumsden, *et al.*, arXiv: 0907.2417.
[10] I. I. Mazin *et al*, Phys. Rev. Lett. **101**, 057003 (2008).
[11] K. Kuroki, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 087004 (2008).
[12] Y. Nakai, *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 073701 (2008).
[13] M.D. Johannes, I.I. Mazin, arXiv:0904.3857.
[14] 社本真一、日本物理学会2009年秋季大会領域３シンポジウム 27aRE7.
[15] T. Egami, *et al.*, arXiv:0908.4361.
[16] David J. Singh, Oral presentation at IRiSes2009.
[17] Y. Sekiba, T. Sato, K. Nakayama, *et al.*, New J. Phys. **11**, 025020 (2009).

鉄系高温超伝導体研究の最前線 ～「メカニズムおよび物性のレビューと展望」～
(15:40-16:10, 2009年11月28日システム計算科学センター（東京、上野))

鉄系高温超伝導体の中性子散乱

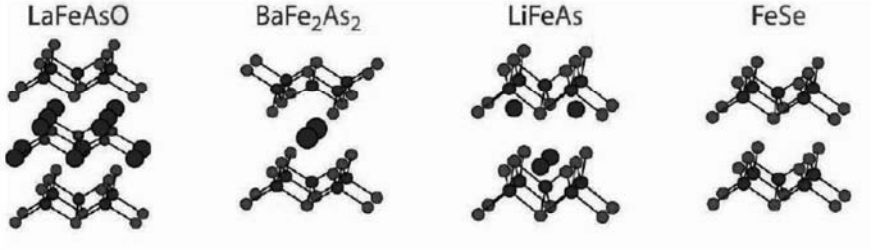
原子力機構　量子ビーム、JST-TRIP
社本 真一

共同研究者：
石角元志、脇本秀一、樹神克明、梶本亮一、新井正敏、江坂文孝、
松田雅昌、加倉井和久（原子力機構、JST−TRIP）
Mark D. Lumsden, Andrew D. Christianson (ORNL)
伊豫彰、宮沢喜一、P.M. Shirage、鬼頭聖、永崎洋（産総研）
S.-W. Kim、細野秀雄、（東工大）
T. Guidi、R. Bewley, S.M. Bennington（ISIS, UK）

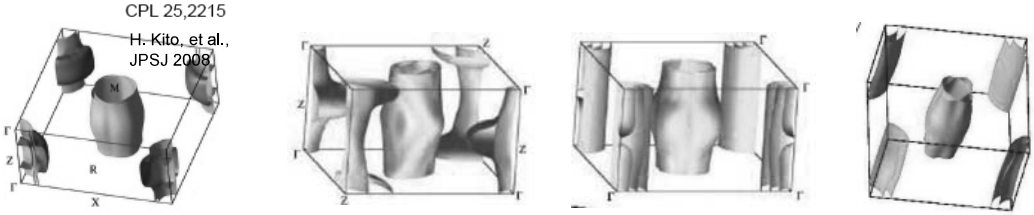
発表内容

序論
母相
　As/Se(Te)の高さと磁気モーメント
　磁気構造と磁気励起
母相から超伝導相へ
　SDWから超伝導へ（磁気体積効果）
超伝導相
　レゾナンスモード
　ギャップモード
　スピン揺らぎ
まとめ

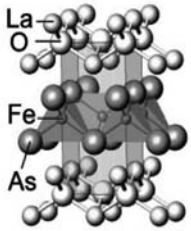
序論 Fe-based Superconducting Families



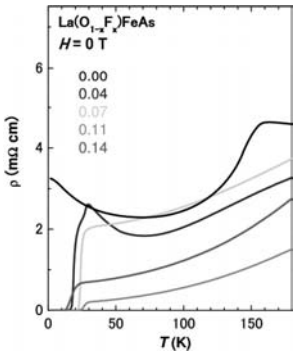
ZrSiCuAs	$ThCr_2Si_2$	LiMnAs	PbO
P4/nmm	*I4/mmm*	*P4/nmm*	*P4/nmm*
~55K	~40K	~20K	~25K
Y.Kamihara *et al.* JACS 130,3296	M.Rotter *et al.* PRL 101,107006	X.C.Wang *et al.* SSC 148,538	F.-C.Hsu *et al.* PNAS 105,14262
Z-A.Ren *et al.* CPL 25,2215			
H. Kito, et al., JPSJ 2008			



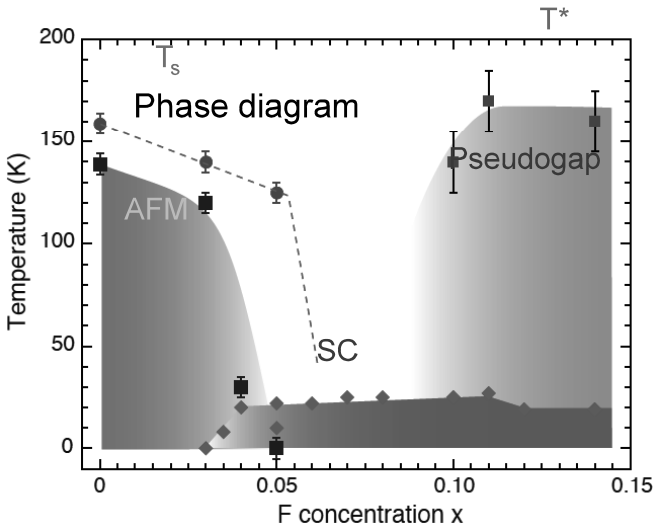
$LaFeAsO_{1-x}F_x$ system



Y. Kamihara et al., (2008).



Hosono Group

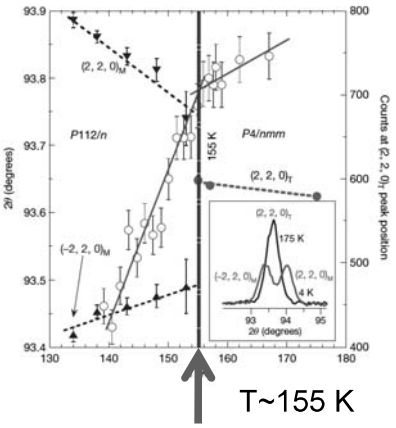


Kamihara et al., Huang et al., Nakai et al.

3/15

母相 LaFeAsO

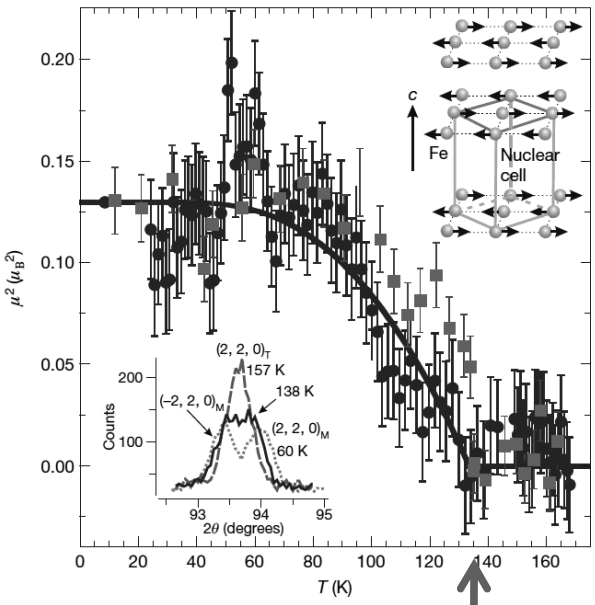
Neutron diffraction



T~155 K

Structural phase transition from tetragonal to orthorhombic structure

0.36(5)μ_B per Fe atom



T~140 K

Spin Density Wave transition

Clarina de la Cruz, et al., Nature 453, 899 (2008).

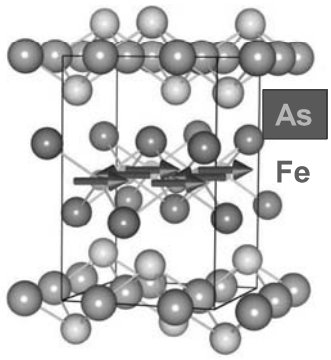
Magnetic moment vs. Crystal structure

Table I: Calculated and experimental As positions and Fe moments

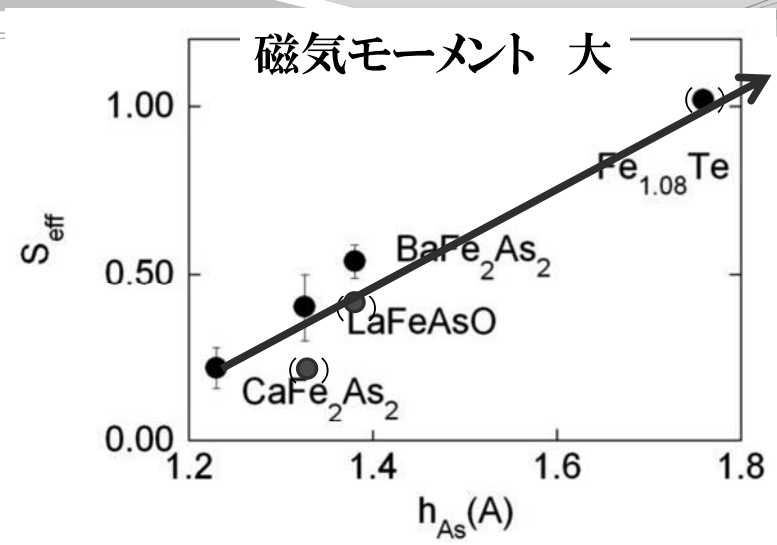
	Exp	GGA-NM		GGA-AF		GGA
	z_{As}	z_{As}	error	z_{As}	error	• (calc)
LaFeAsO	0.65133	0.6375	0.12 Å	0.6478	0.03 Å	2.06 μ_B/Fe
$BaFe_2As_2$	0.3545	0.3448	0.13 Å	0.3520	0.03 Å	1.97 μ_B/Fe
LaFePO	0.6339	0.6225	0.05 Å	0.6254	0.03 Å	0.60 μ_B/Fe

C. Cruz et al., 0.36(5)μ_B

Q. Huang et al., 0.87(3)μ_B



I.I. Mazin and M.D. Johannes, Nature Physics (2008).
S. Ishibashi, K. Terakura and H. Hosono, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 053709 (2008),



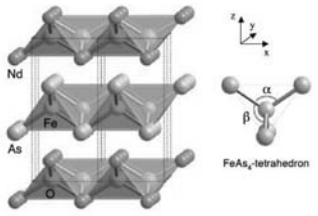
FeTe: Wei Bao, et al., arXiv: 0809.2058v1

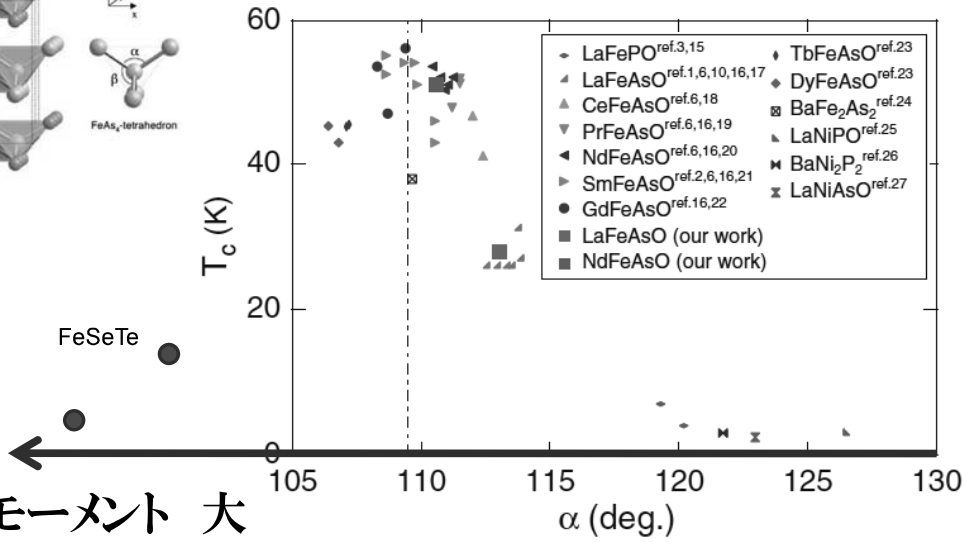
BaFe2As2: M. Rotter, et al., PRL101, 107006 (2008) , R. A. Ewings, PRB 78, 220501R (2008)

LaFeAsO: S. Wakimoto, et al., arXiv:0906.2453., T. Nomura, et al., Supercond. Sci. Technol. 21 (2008) 125028

CaFe2As2. Jun Zhao, et al., Nature Phy. 5 555 (2009) , A. Kreyssig, et al.,PRB78, 184517 (2008).

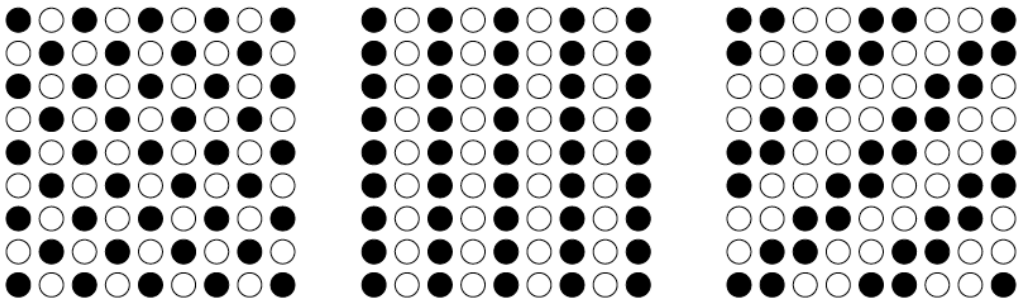
超伝導転移温度





Chul-Ho Lee, et al., J. Phys. Soc. Jpn., 77-8 (2008) 083704.
Kazumasa Horigane, J. Phys. Soc. Jpn., 78-6 (2009) 063705.

磁気構造



Li *et al.*, Phys. Rev. B **79**, 054503 (2009).

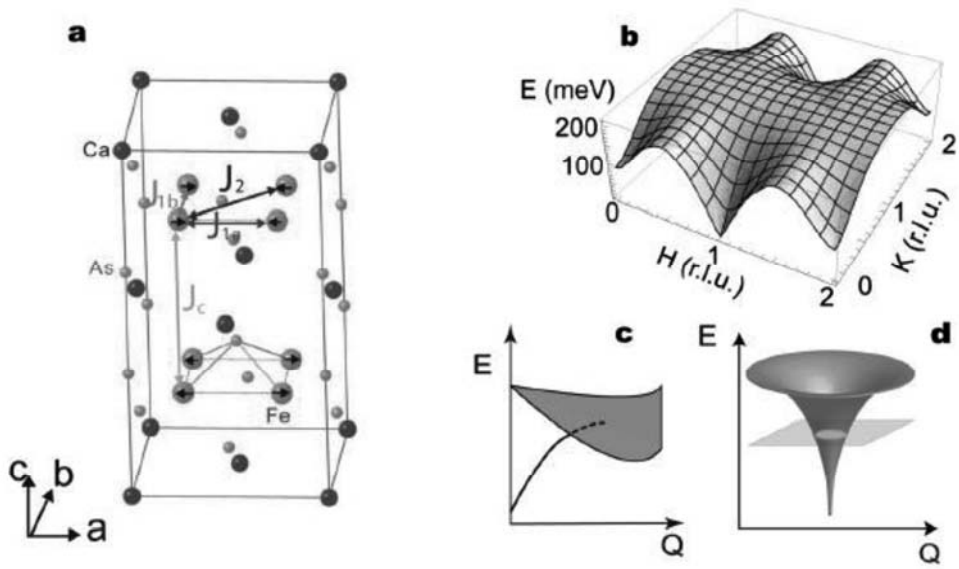
Stabilization energies

	checkerboard	stripe	double stripe
$BaFe_2As_2$	16 meV	94 meV	0.6 meV
FeTe	–	207 meV	230 meV

M.D. Johannes, I.I. Mazin, arXiv: 0904.3857v1.

, full-potential LAPW

母相の磁気励起

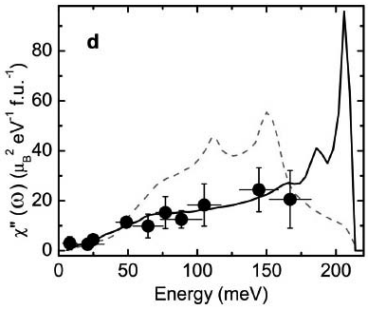


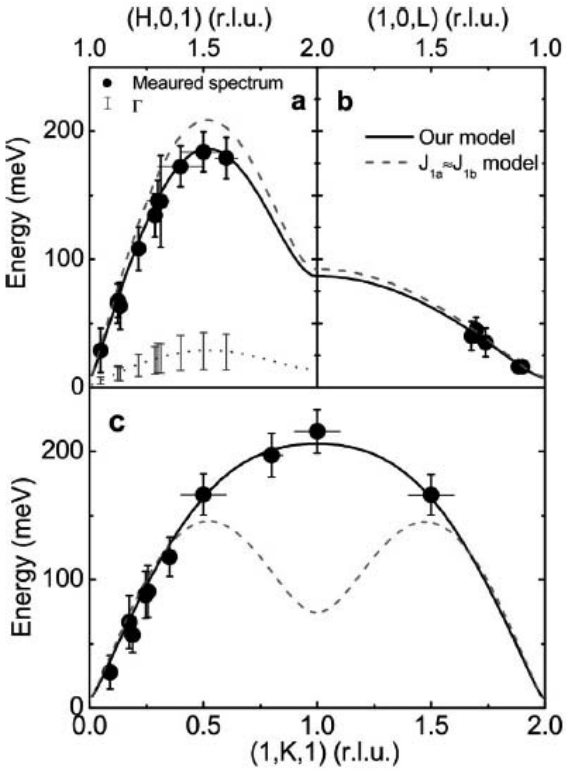
Jun Zhao, et al., Nature Phy. 5 555 (2009)

$CaFe_2As_2$

S_{eff}=0.22±0.06

SJ_{1a} = 49.9± 9.9,
SJ_{1b} =-5.7± 4.5,
SJ_2 = 18.9± 3.4
SJ_c =5.3±1.3
meV





Maximum spin-wave energy ~200 meV

Jun Zhao, et al., Nature Phy. 5 555-560 (2009)

First-principles density functional theory calculation

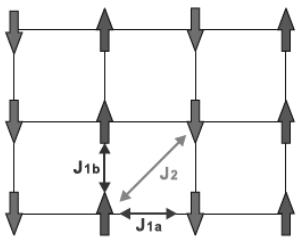
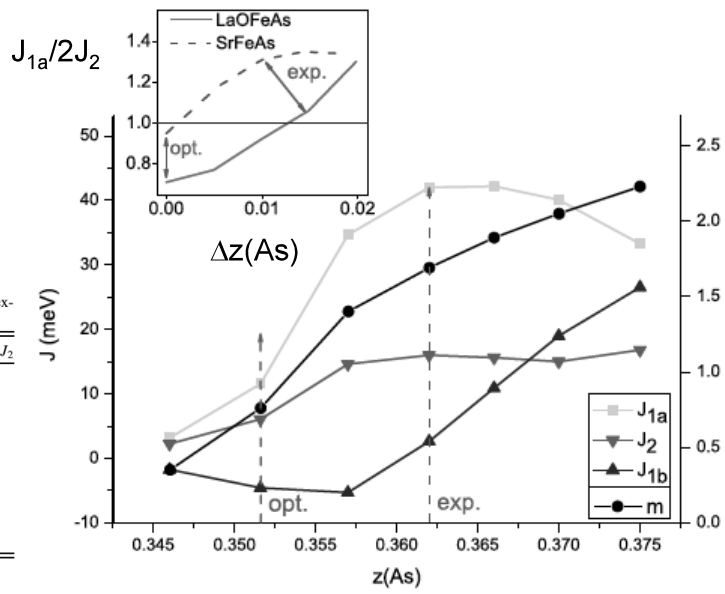


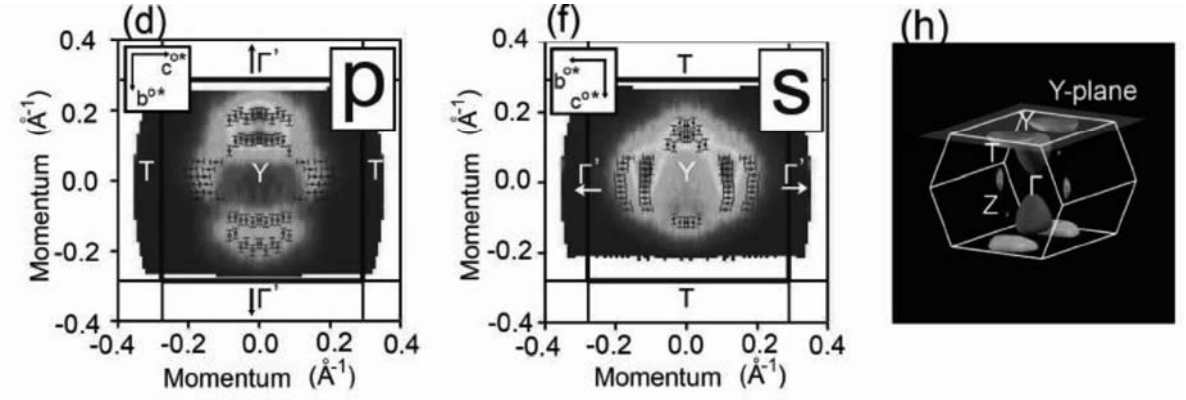
TABLE I. Calculated Fe moments (in μ_B) and in-plane exchange interactions (in meV), using experimental z(As).

System	Moment	J_{1a}	J_2	J_{1b}	$J_{1a}/2J_2$	$J_{1a}+2J_2$
LaFeAsO	1.69	47.4	22.4	−6.9	1.06	92.2
CeFeAsO	1.79	31.6	15.4	2.0	1.03	62.4
PrFeAsO	1.76	57.2	18.2	3.4	1.57	93.6
NdFeAsO	1.49	42.1	15.2	−1.7	1.38	72.5
$CaFe_2As_2$	1.51	36.6	19.4	−2.8	0.95	75.4
$SrFe_2As_2$	1.69	42.0	16.0	2.6	1.31	74.0
$BaFe_2As_2$	1.68	43.0	14.3	−3.1	1.51	71.5
KFe_2As_2	1.58	42.5	15.0	−2.9	1.42	72.5
LiFeAs	1.69	43.4	22.9	−2.5	0.95	89.2



Myung Joon Han, Quan Yin, Warren E. Pickett, and Sergey Y. Savrasov, Phys. Rev. Lett. 102, 107003 (2009).

Orbital-polarized Fermi surface in antiferromagnetic state of $BaFe_2As_2$



T. Shimojima, et al., arXiv: 0904.1632.

母相から超伝導相へ

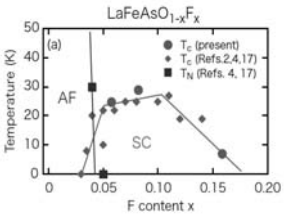
体積とAsの高さ

$LaFeAsO_{1-x}F_x$ 電子ドープ

x=0, h_{As} = 1.326 A

x=0.14, h_{As} = 1.332 A

V=142.1524(8)- 140.8405(12) A^3



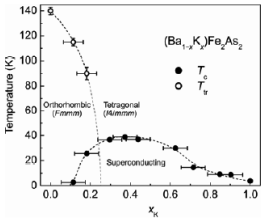
T. Nomura, et al., (2008)

$(Ba_{1-x}K_x)Fe_2As_2$ ホールドープ

x=0.0-1.0

h_{As}=1.361-1.431 A

V=203.86- 203.64 A^3



M. Rotter, et al., (2008)

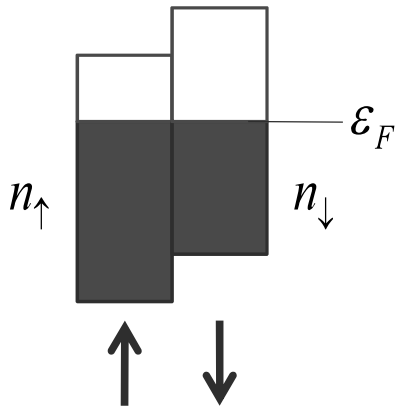
ドーピングにより体積減少（磁気体積効果）

Stoner theory

$$E = \int_0^{\varepsilon_{F\uparrow}} \varepsilon N_\uparrow(\varepsilon_\uparrow) d\varepsilon_\uparrow + \int_0^{\varepsilon_{F\downarrow}} \varepsilon N_\downarrow(\varepsilon_\downarrow) d\varepsilon_\downarrow + I n_\uparrow n_\downarrow$$

$$M = n_\uparrow - n_\downarrow$$

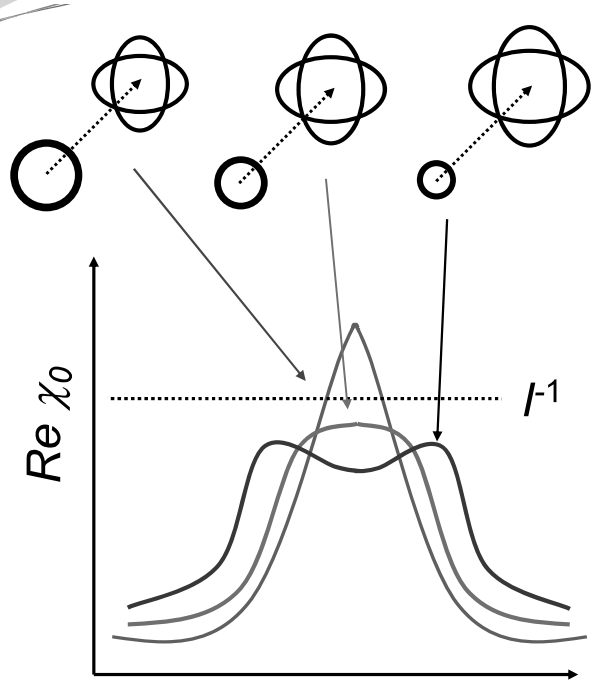
$$\Delta E = \frac{1 - IN(\varepsilon_F)}{2N(\varepsilon_F)} M^2$$



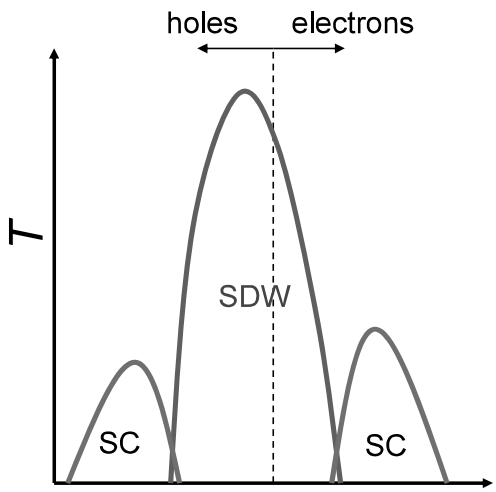
$$IN(\varepsilon_F) = 1$$ Stoner criterion

E. C. Stoner, Rept. Progr. Phys. 11, 43 (1948).

Nesting, Doping and the Lindhard Function



David J. Singh
Oak Ridge National Laboratory
at IRiSes2009

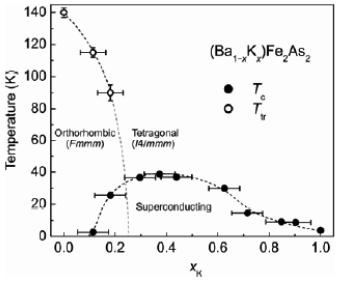


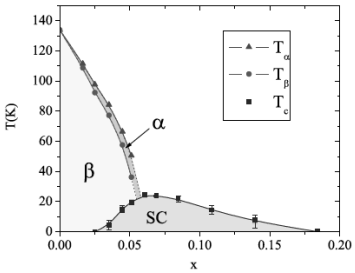
$$\chi(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 - I(q)\chi_0(q)}$$

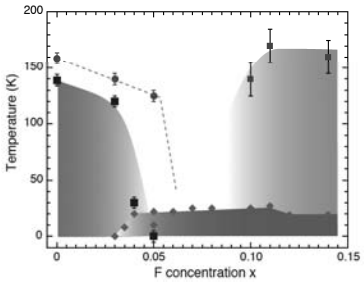
4/15

超伝導相

Hole doping | Electron doping | Electron doping





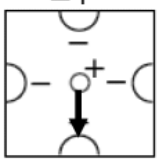


$Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ | $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ | $LaFeAsO_{1-x}F_x$

Resonance mode

Spin fluctuation

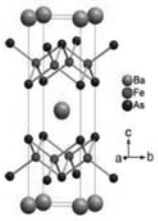
s± pair

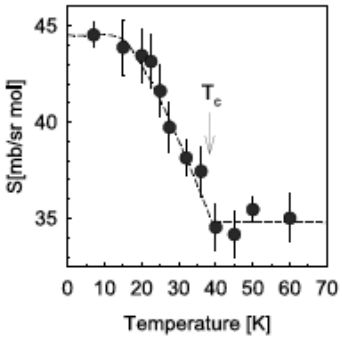


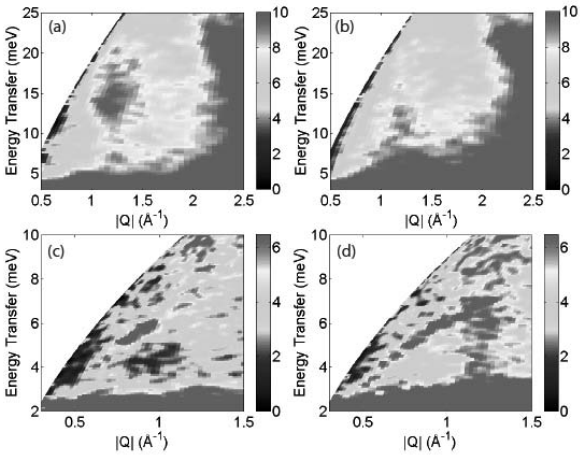
$\Delta_{k+Q} = -\Delta_{-k}$

超伝導相

Hole system | $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$



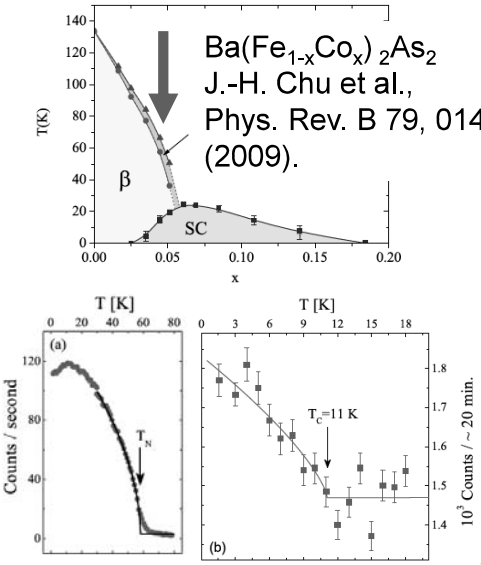


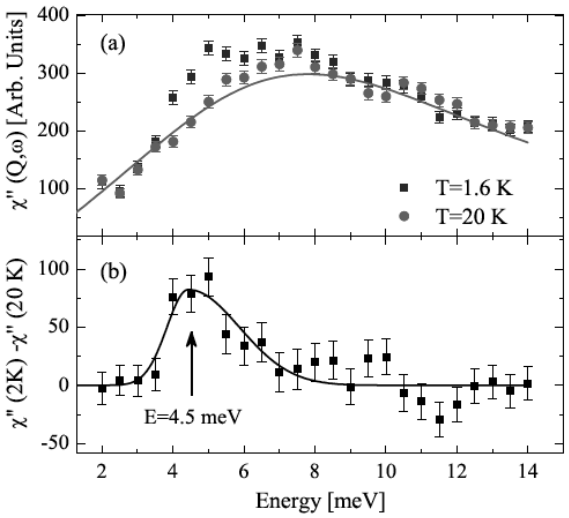


Resonant Spin Excitation in the High Temperature Superconductor $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$
A. D. Christianson, et al. Nature 456, 930 (2008).

E=14 meV= 4.3 k_BT_c (38K)

共存相 Electron system $Ba(Fe_{0.96}Co_{0.04})_2As_2$

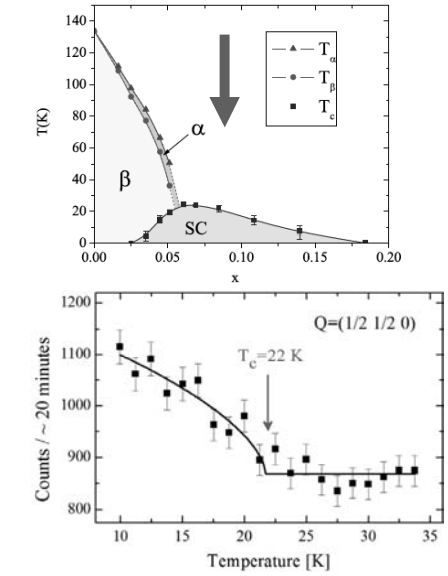


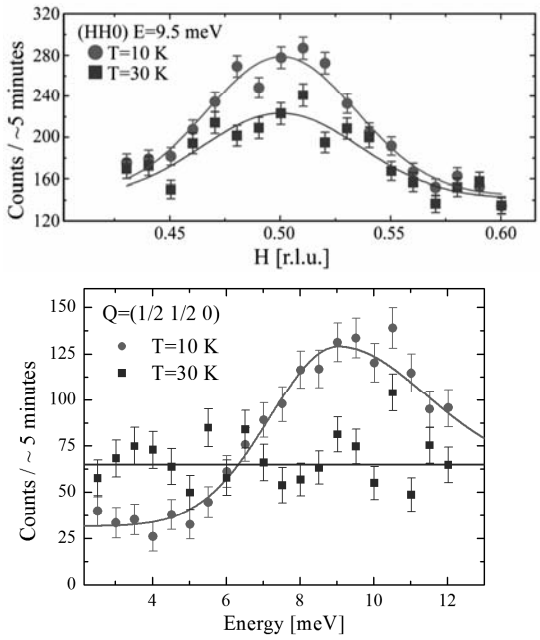


Static and Dynamic Magnetism in Underdoped Superconductor $BaFe_{1.92}Co_{0.08}As_2$
A. D. Christianson, et al. arXiv: 0904.0767

E=4.5(0.5) meV= 4.7 k_BT_c (11K)

超伝導相 Electron system $Ba(Fe_{0.92}Co_{0.08})_2As_2$



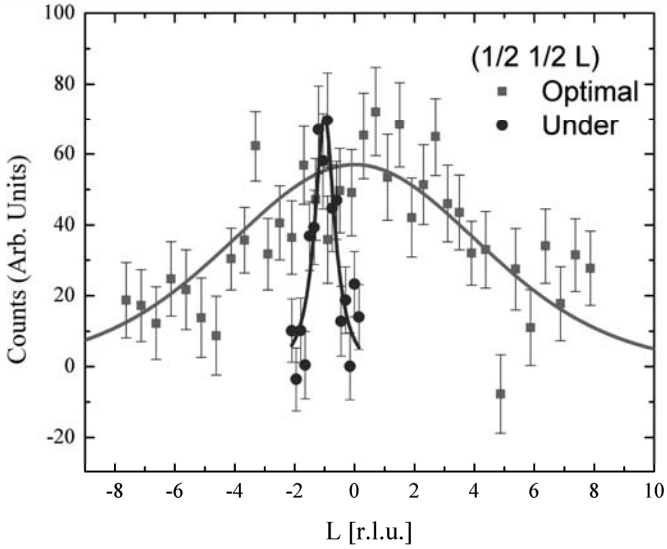


Spectrum peaked at (1/2 1/2 L). Gap develops below T_C with enhancement of intensity at resonance energy of ~9 meV.

M. D. Lumsden, et al., Phys. Rev. Lett. 102, 107005 (2009)

Similar work on Ni-doped Ba122 by Chi *et al.*, PRL **102**, 107006 (2009).

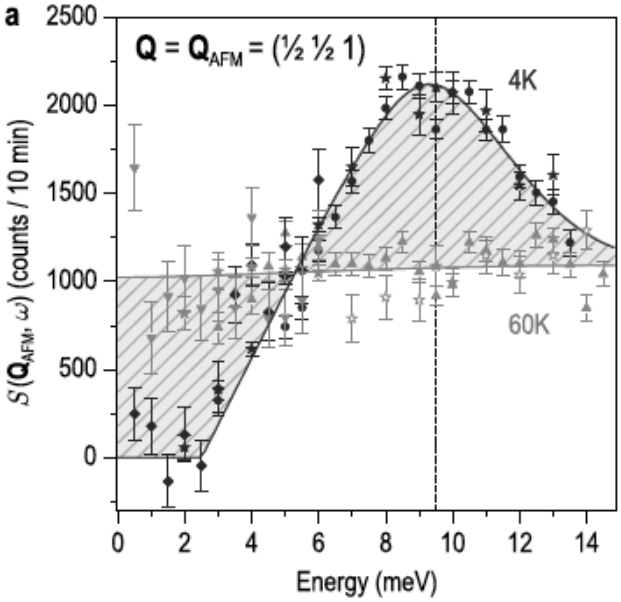
L dependence



Fe^{2+} magnetic form factor

By courtesy of Andrew D. Christianson (ORNL)

超伝導相 Electron system $Ba(Fe_{0.925}Co_{0.075})_2As_2$



T_c=25 K

D. S. Inosov, et al., arXiv:0907.3632v1

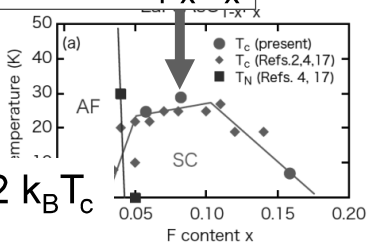
超伝導相

HB-3@HFIR

Electron system

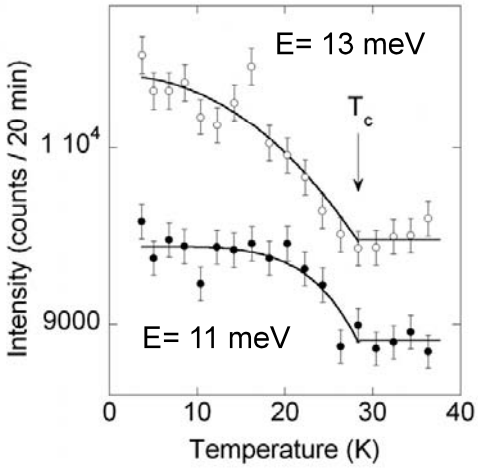
$LaFeAsO_{1-x}F_x$

$x = 0.082$ (T_c= 29 K) at Q = 1.15 Å^{-1}

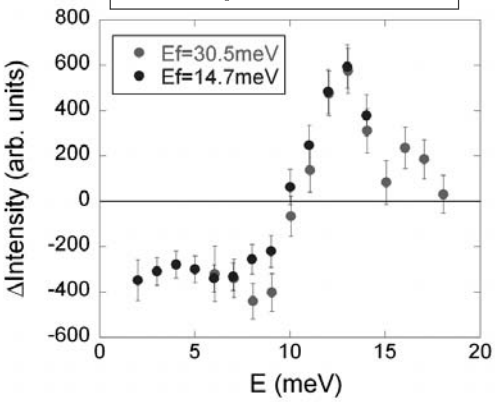


T-dependence

E=13 meV = 5.2 $k_B T_c$



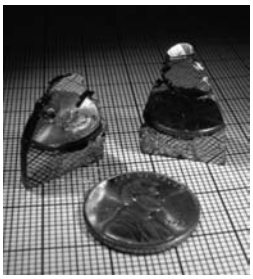
E-dependence

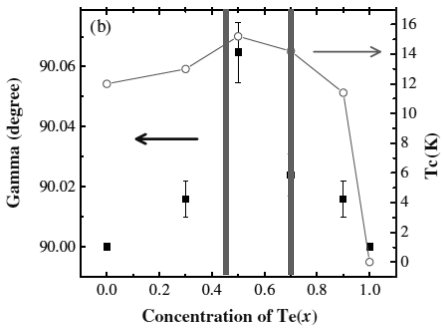


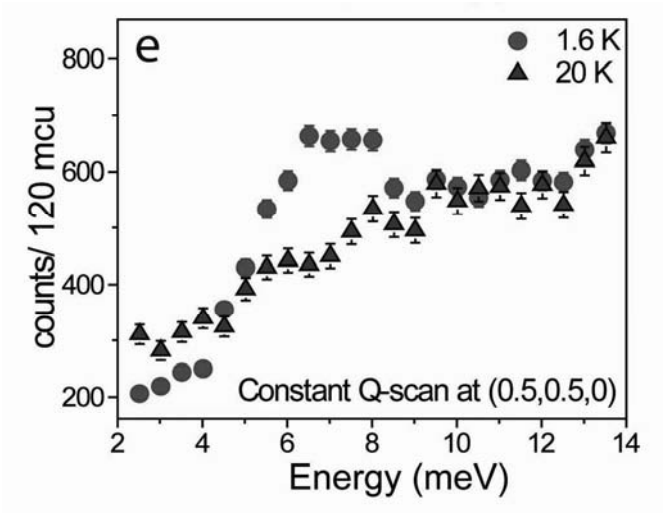
M. Ishikado, et al., in preparation.

超伝導相

$FeTe_{0.51}Se_{0.49}$







Qui *et al.*

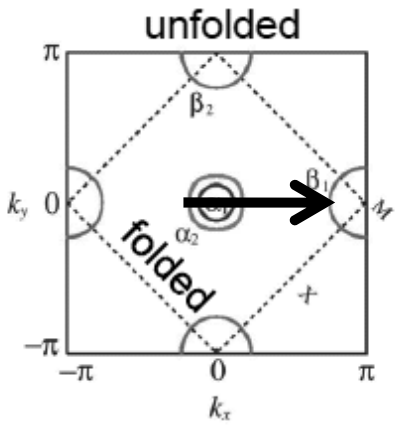
Phase diagram with Te doping
Yeh *et al.*, Europhys Lett. **84** (2008) 37002

By courtesy of Andrew D. Christianson (ORNL)

Resonance mode

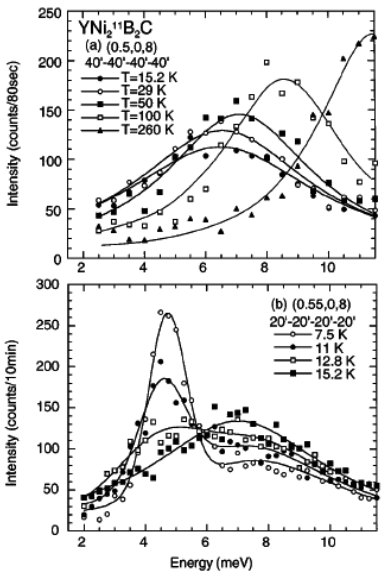
$$\mathrm{Im}\,\chi_0(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{4}\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k\left(1-\frac{\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\xi_{\mathbf{k}}+\Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}E_{\mathbf{k}}}\right)\delta\left(\omega-E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-E_{\mathbf{k}}\right)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\Delta_{\mathbf{k}}$$



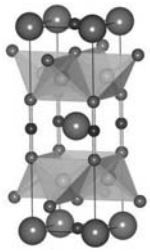
K. Kuroki et al., Phys. Rev. Lett. 101, 087004 (2008).
I.I. Mazin et al., Phys. Rev. Lett. 101, 057003 (2008).

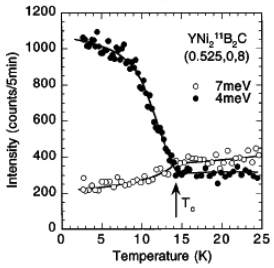
Resonance and Gap modes



H. Kawano, et al., PRL 77, 4628 (1996).

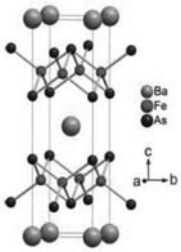
$LuNi_2B_2C$

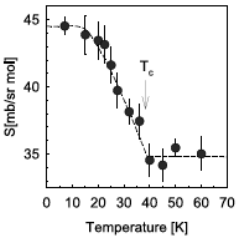




Phonon

$Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$



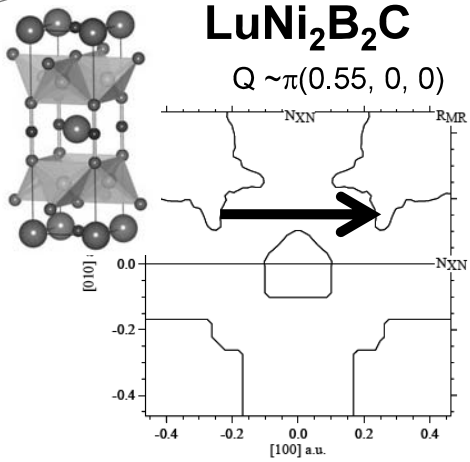


Spin Fluctuation

A. D. Christianson, et al. Nature 456, 930 (2008).

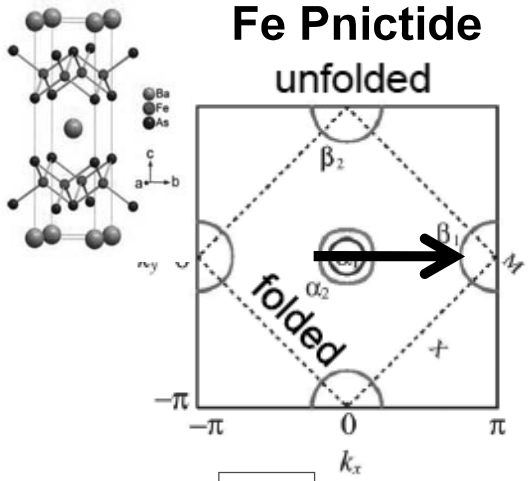
21/23

Nesting Properties



CDW or Kohn anomaly

S. B. Dugdale, et al., Phys. Rev. Lett. 89, 4824 (1999).



SDW

K. Kuroki et al., Phys. Rev. Lett. 101, 087004 (2008).
I.I. Mazin et al., Phys. Rev. Lett. 101, 057003 (2008).

Gap mode

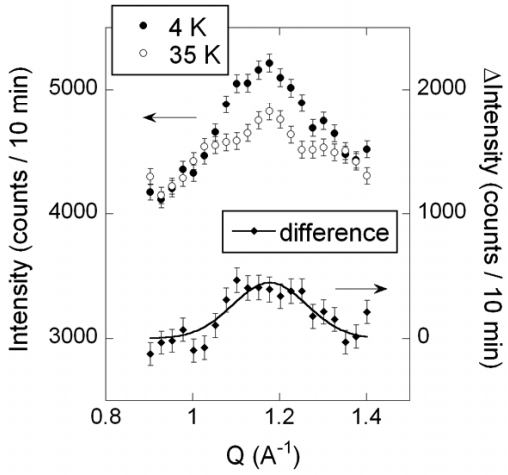
C. A. Balseiro et al., PRL 45 662 (1980), P. B. Littlewood et al., PRL 47 811 (1981), P. B. Allen, et al., PRB 56, 5552 (1997), M. Ichioka, et al., JPSJ 72, 2064 (2003).

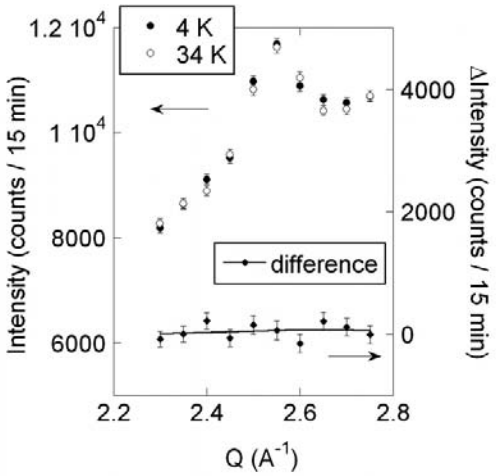
22/23

No phonon contribution on resonance mode!

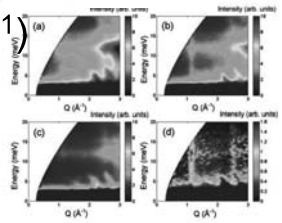
Q-dependence

ΔE=13 meV

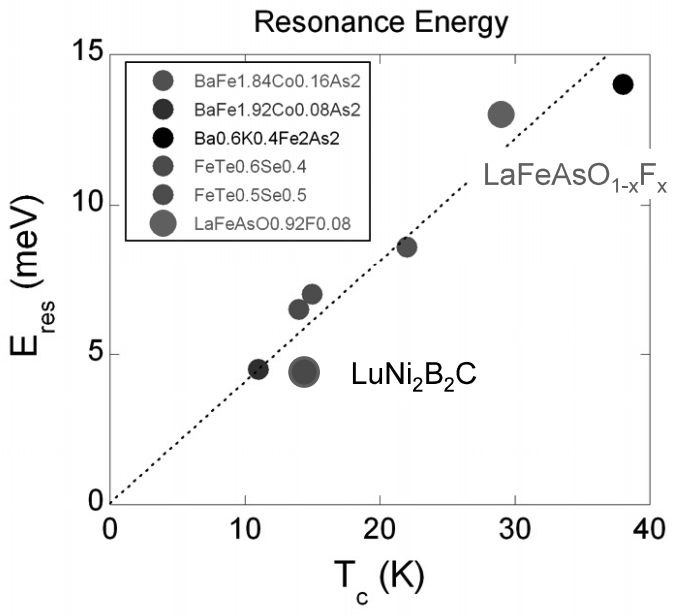




ΔI_{max} 1 (Q=1.2 Å^{-1}) : 0.5 (Q=2.5 Å^{-1})



M. Ishikado, et al., in preparation.



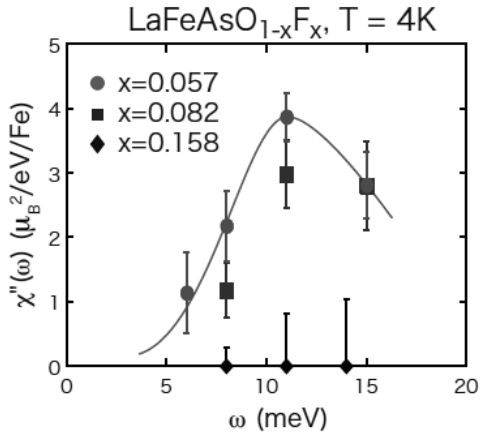
鉄系超伝導体で観測されている超伝導転移
温度T_cとレゾナンスエネルギーとの関係

M. Ishikado, et al., in preparation.

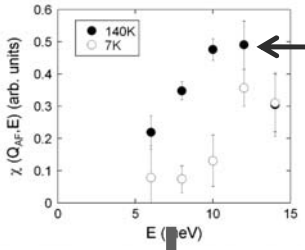
Fluorine doping dependence

TAS-1@JRR-3

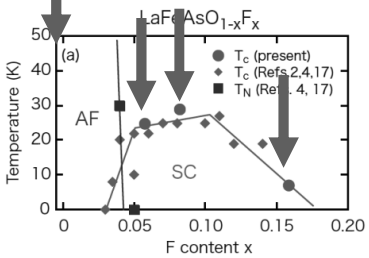
JRR-3 (JAPAN)



x=0



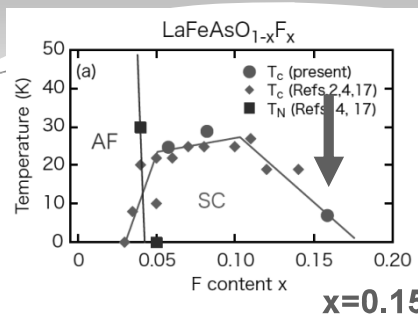
χ"(ω)=3

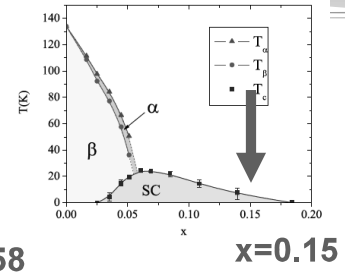


$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega}\right)_{mag} = \frac{k_f}{k_i}\frac{(\gamma r_0)^2}{4} f^2(Q) e^{-2W} \frac{(n(\omega)+1)}{\pi \mu_B^{\ 2}} \chi''(q,\omega)$$

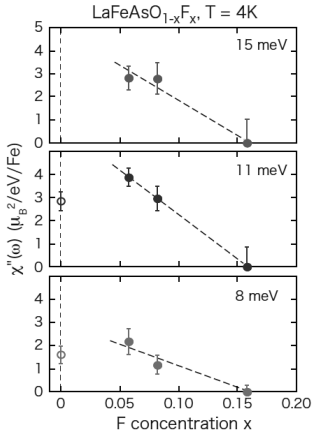
S_{eff}~0.4 (E_{max}=200 meV) E=11 meV ~ 5 $k_B T_c$

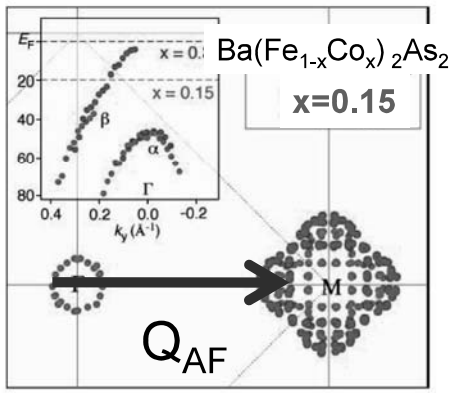
S. Wakimoto, et al., arXiv:0906.2453.

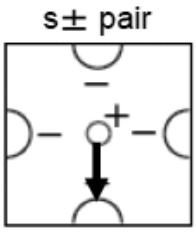




$Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$
J.-H. Chu et al., Phys. Rev. B 79, 014506 (2009)



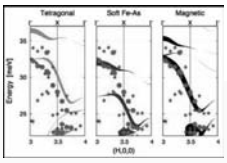


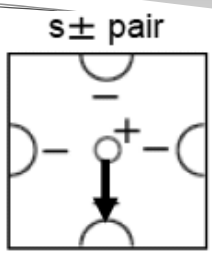


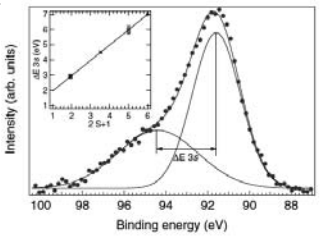
S. Wakimoto, et al., arXiv:0906.2453.

Y. Sekiba, T. Sato, K. Nakayama, et al., New J. Phys. **11**, 025020 (2009).

Fe 3s core-level spectrum

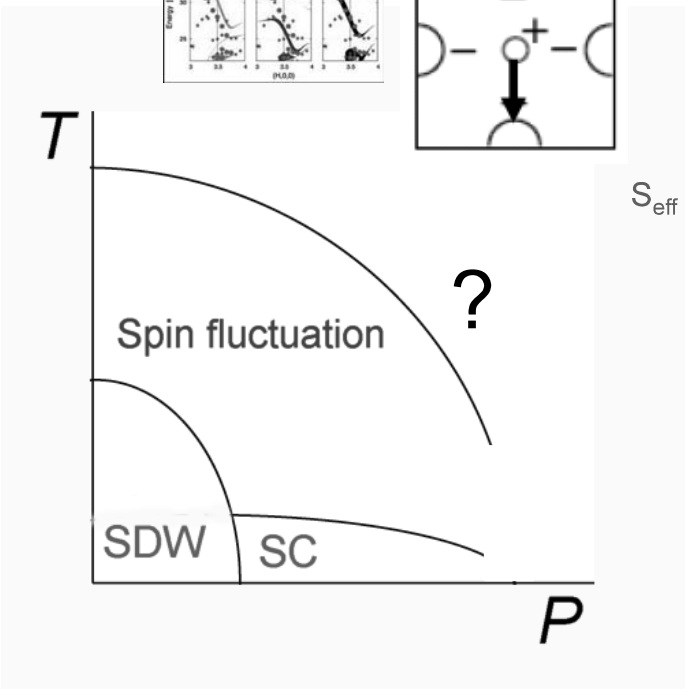






S_{eff} ~ 0.50 for $CeFeAsO_{0.89}F_{0.11}$

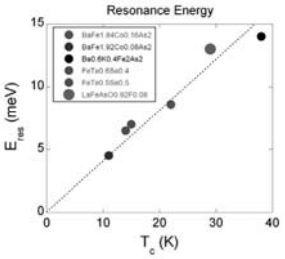
F. Bondino, et al., PRL, 101, 267001 (2008)



まとめ

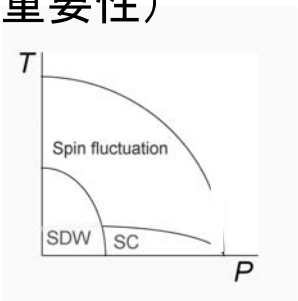
◆磁気モーメント：As/Se(Te)の高さ

◆SDWから超伝導へ（磁気体積効果）



◆レゾナンスモードの普遍性

◆スピン揺らぎ
（Q_{AF}だけ離れた2つのフェルミ面の重要性）



11. 砒素系とリン系の違いについて

大阪大学理学研究科物理学専攻
宮坂茂樹，鈴木真之介，西城理志、田島節子

Difference between the As- and P-based Iron Pnictide Superconductors

Department of Physics, Osaka University
S. Miyasaka, S. Suzuki, S. Saijo, S. Tajima

新しい超伝導体が発見されたとき，超伝導機構に関わる重要な物理パラメータを抽出する方法として，最初に取り組まれるのが「元素置換」による研究である．鉄化合物超伝導体の場合、置換可能なサイトがたくさんあるが，伝導の中心を担う鉄元素に最も近い砒素サイトの置換は，超伝導転移温度 T_c に大きな影響を与え興味深い．とりわけ LaFePO（T_c ≈7K）は一連の鉄系超伝導体の中で最初（2006 年）に発見された物質であるが[1]，その後発見された LaFeAsO (T_c≈28K)と比べると[2]，T_c の違いが顕著である．この原因を知ること，即ち価数が等しい As と P の置換によって，どのような電子構造の変化が引き起こされているのかを知ることは，“何が T_c を決めているのか”を知る重要なヒントとなるはずである．

ここでは 1111 系と呼ばれる構造の物質に注目し，不純物置換による超伝導ギャップの対称性の比較，P/As 置換による電子状態の比較， O/F 置換効果の比較などを行い，超伝導転移温度を決定しているキーパラメータについて議論する．

超伝導ギャップの対称性については，s±波という見方が固まりつつあるが，LaFePO についてはギャップノードの存在を示唆する実験[3]やd波の理論予言[4]などがあり，それがこの物質の T_c が低い原因であるという主張もある．我々が $LaFePO_{0.95}F_{0.05}$ の Fe サイトに Co, Mn, Ni などの不純物置換を行ったところ，磁性不純物である Mn, Ni の場合は激しい T_c の低下が見られたが，Co 置換では T_c 低下は緩やかであった[5]．これらの不純物置換効果は、As 系での結果とほとんど同じである．伝導の中心である Fe サイトへの不純物添加は，残留電気抵抗率の増加に見られるとおり，強いキャリア散乱を引き起こすと考えられ，ギャップノードのある超伝導体の場合，著しい対破壊が起きるはずである．従って，今回観測されたような緩やかな対破壊の事実から，LaFePO にギャップノードがある可能性は排除できると考えられる．

P/As 置換については，多結晶試料ではあるが $LaFe(P_{1-x}As_x)O_{0.9}F_{0.1}$ の全固溶系 ($0 \le x \le 1$)が作製でき，格子定数が x に対して線形に増加する様子が観測された．結晶構造の単調な変化に対して，T_c は 6K(x=0)から 27K(x=0.6)まで急激に増加した後，緩やかに減少するという非単調な振る舞いを示した[6]．同時に，電気抵抗率の温度依存性を $\rho(T) = \rho_0 + AT^n$ で近似したとき，温度のベキは n≈2.2 から x の増加と共に減少し，x=0.6 で1に近い値になった後，緩やかに増加に転じるという振る舞いが見られた．T_c が最大値をとる組成付近で抵抗率が T-linear となることは，$BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ でも見られており[7] ，反強磁性揺らぎの強さが T_c を決定する大きな因子であることを強く示唆している．

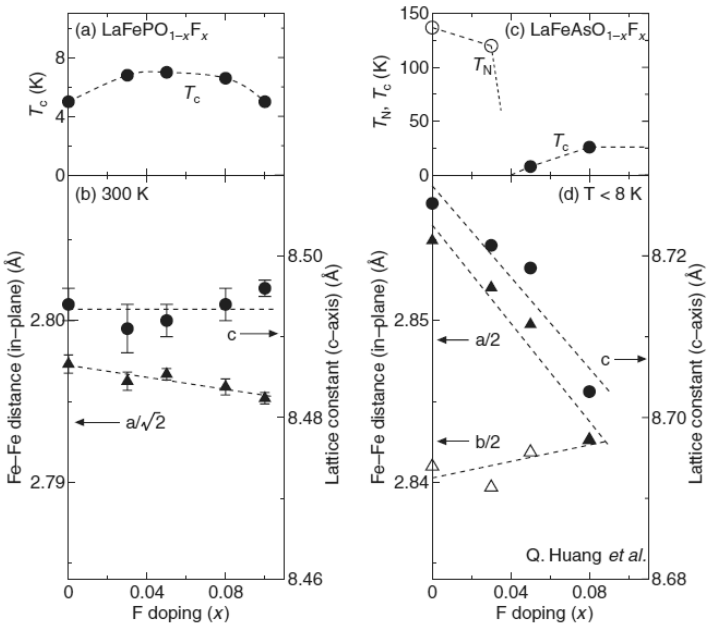


図１． LaFePO と LaFeAsO における格子定数と T_c の F 濃度依存性[8].

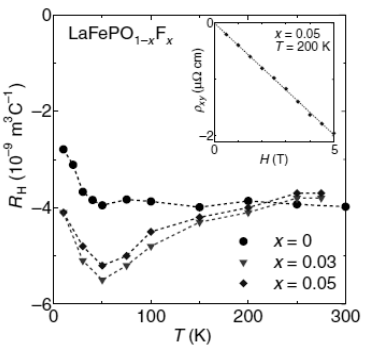


図2.
LaFeP(O,F)のホール係数の温度依存性

それでは，何が反強磁性揺らぎの強さを決めているのだろうか．LaFeAsO では，O サイトへの F 置換によって SDW の消失から高温超伝導出現が起きるため、銅酸化物超伝導体とのアナロジーで，キャリア数を変数として電子相図が描かれることが多い．しかし，電子（正孔）ドープが電子状態変化を起こす主要因かどうか，疑問である．図1は、F 置換による格子定数と T_c の変化を P 系・As 系で比較したものである[8]．F 置換によって格子定数が大きく変化する As 系と比べて，P 系では変化が小さい．同時に，P 系では T_c をはじめ電気抵抗率やホール係数（図2）などすべてにおいて，F 置換効果が極めて小さい．化学的には電子注入がなされているはずなので，もともと良い金属に僅かな電子を注入しているから変化が少ない，と解釈するのが自然である．つまり，本来この系に電子を注入しても，電子状態の変化は小さいと考えられる．すなわち、As 系で見られる劇的な変化は，電子ドープの効果というより，格子定数の変化が引き起こしたものである，という推察が成り立つ．

結晶構造と反強磁性揺らぎの大きさの関係を明らかにすることが、機構解明の鍵と思われる。

参考文献

[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] D. Fletcher *et al*., Phys.Rev.Lett. **102**, 147001 (2009).
[4] K. Kuroki *et al*., Phys. Rev. B**79**, 224511 (2009).
[5] S. Suzuki, S. Miyasaka and S. Tajima, Physica C (in press).
[6] S. Saijo, S. Suzuki, S. Miyasaka and S. Tajima, Physica C (in press).
[7] Shuai Jiang *et al*., J. Phys.: Condens. Mattter **21**(2009) 382203.
[8] S. Suzuki *et al*., J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) (in press).

鉄系高温超伝導体研究の最前線
（2009/11/28　東京）

砒素系とリン系の違いについて

大阪大学大学院理学研究科
田島節子
宮坂茂樹、鈴木真之介、西城理志

共同研究：阪大極限センター　萩原政幸、木田孝則

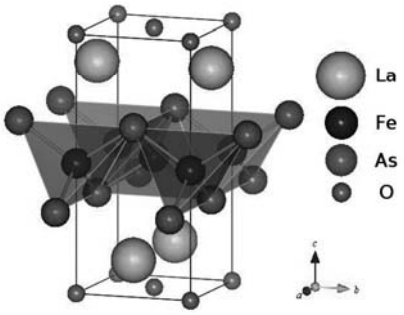
Motivation

何が超伝導転移温度を決めているのか？

新超伝導体の研究の常套手段：元素置換

LaFePO　…いろいろ置換可能なサイトがある。

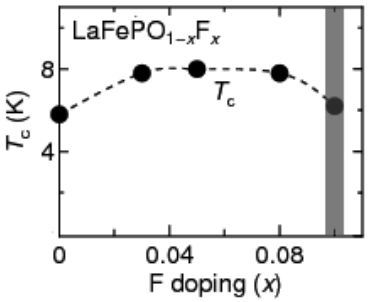
- P ←→ As
- O ←→ F
- Fe ←→ M (Co, Ni, Mn…)



As/P 置換効果

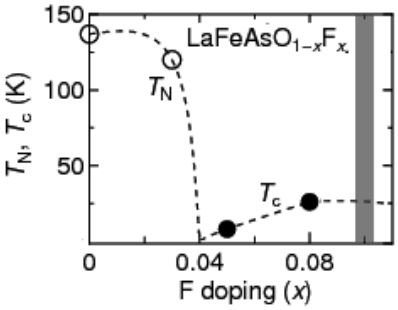
$LaFePO_{0.9}F_{0.1} \Leftrightarrow LaFeAsO_{0.9}F_{0.1}$

T_c=6 K　　T_c=27 K



超伝導転移温度の違いの原因を調べるためにフッ素が少し入った組成を選んで、As/P置換実験を行った。

$LaFeP_{1-x}As_xO_{0.9}F_{0.1}$



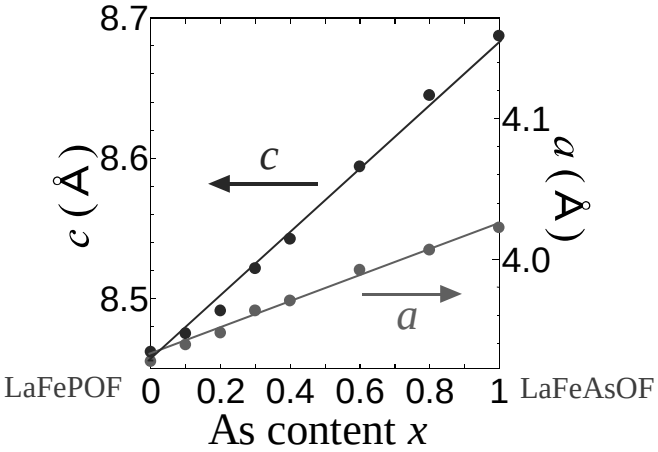
多結晶試料合成:

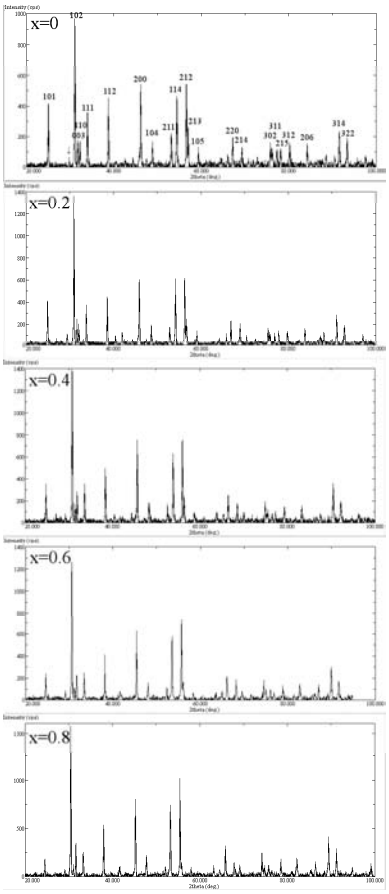
第1ステップ　La, P(As)よりLaP(As)を合成

第2ステップ　Fe_2O_3, LaF_3, Fe, P(As), LaP(As)を混合、焼成 1100ºC 40hr

As/P 置換効果

- 格子定数は組成に対してlinearに変化。
- Asの増加と共に、c軸長が増大。

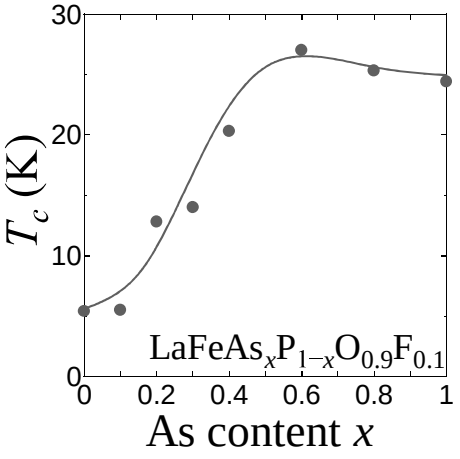




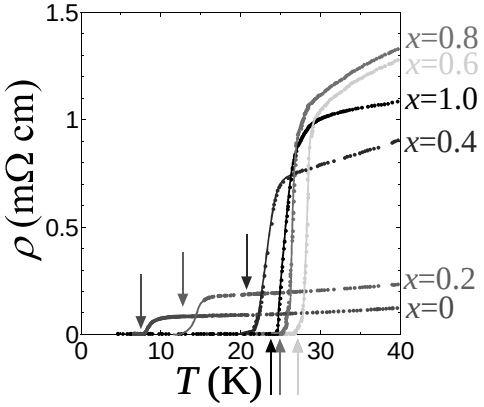
As/P置換効果

- x=0.2〜0.5付近でT_Cは急峻に増加
- T_Cの増加はx=0.6付近で飽和。

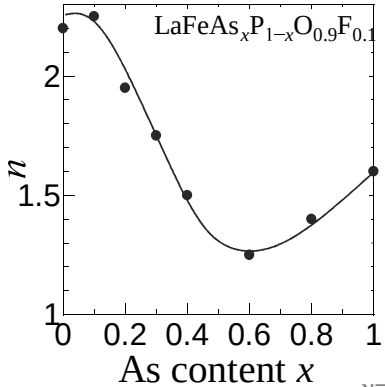
→格子定数の連続的な増加とは対応しない。

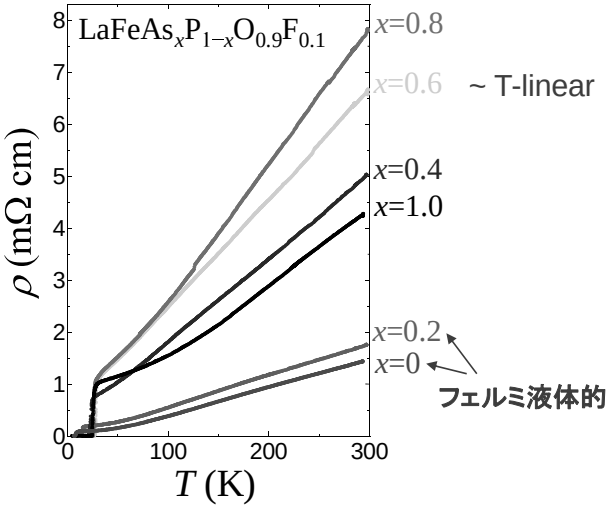


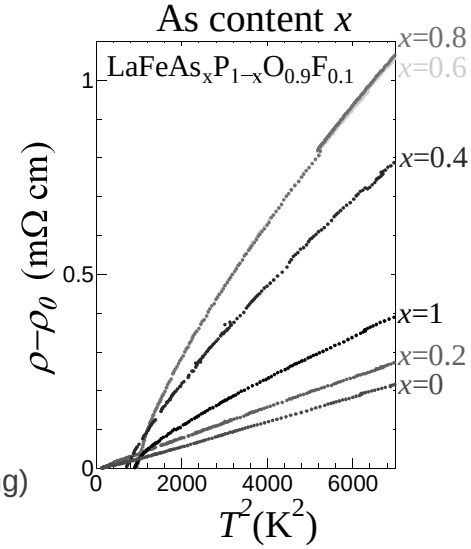
S. Saijo et al., Physica C (in press).



As/P置換効果







$$\rho = \rho_0 + AT^n$$ (T=0 ~ 80Kでfitting)

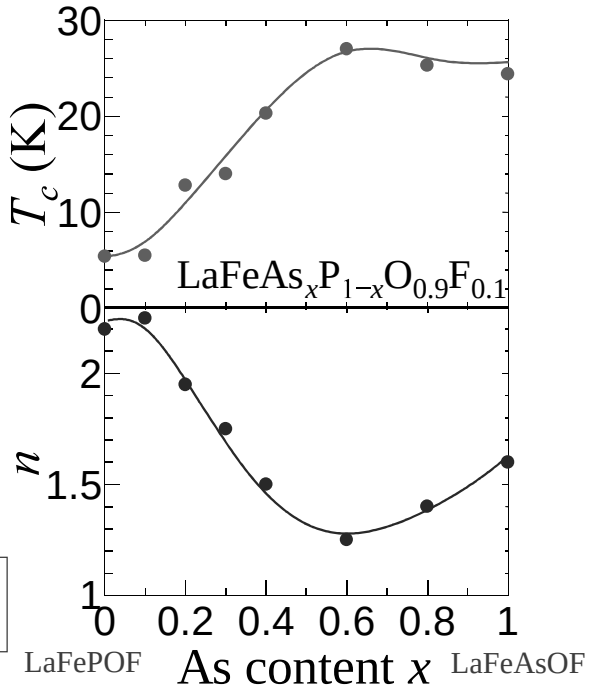
抵抗の温度依存性とTcとの相関

- 抵抗の温度依存性（温度のベキ指数）とTcとに相関がある。

→反強磁性揺らぎの強さとTcとの相関

- x>0.6では、組成依存性が小さい。必ずしもn=1が高いTcに必須ではない。

1111系のAs系においてT_Cが高いのは、反強磁性ゆらぎの増大が大きな要素

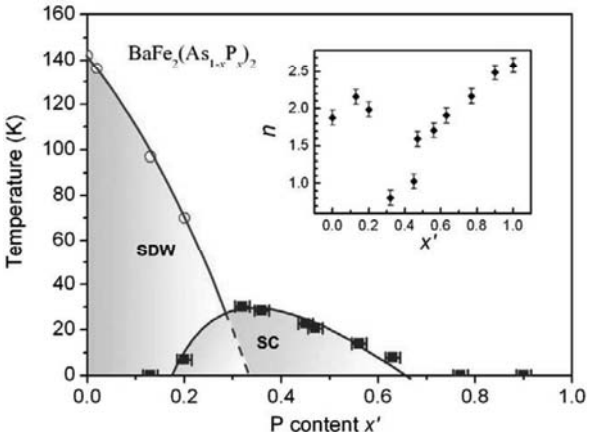


As/P 置換効果

似たような傾向が122系でも見られる。

n ~ 1となる組成でTcが最高値をとる。
QCP?

しかし、
n~1.5 でもTcはそれほど低くない。



Shuai Jiang et al., J. Phys.: Condens. Mattter 21(2009) 382203

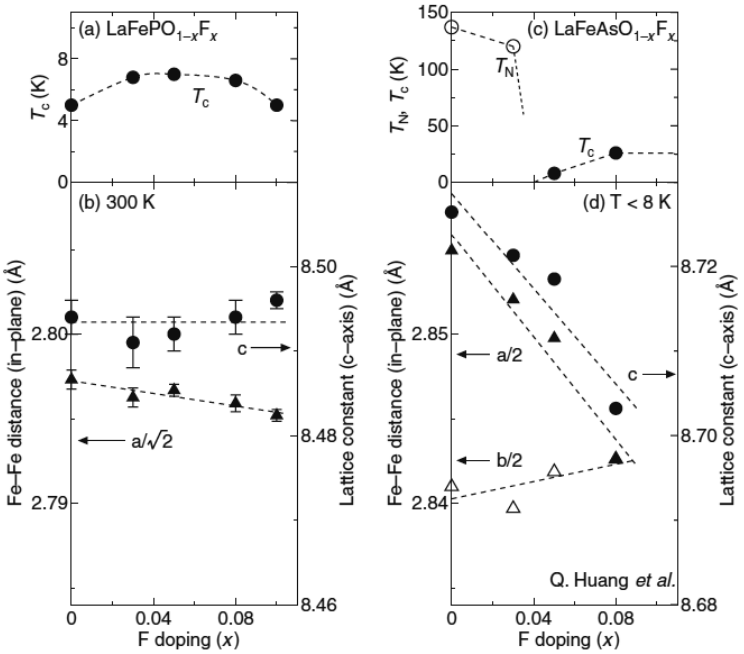
O/F置換効果

LaFePOへのF置換

- T_cの変化小さい。
- 格子定数の変化小さい。
- 母物質は超伝導体

LaFeAsOへのF置換

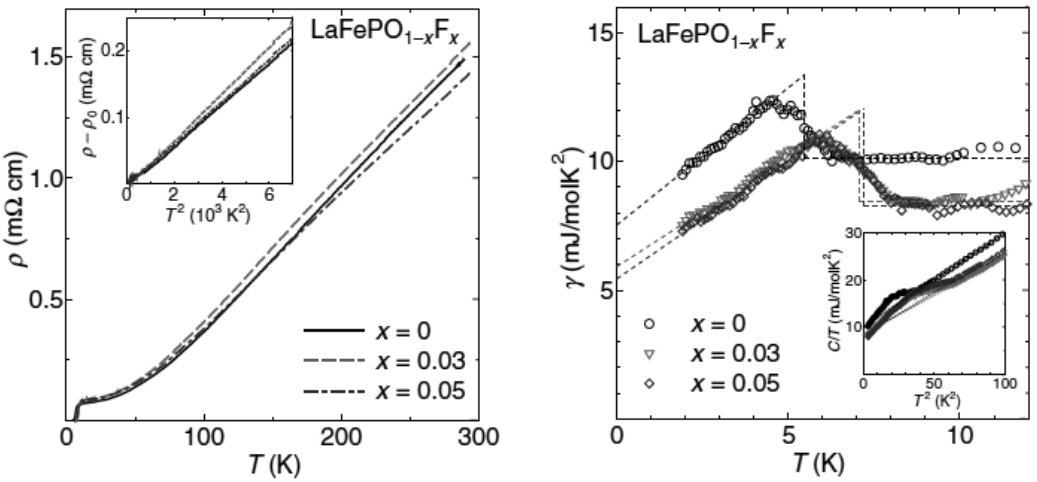
- T_cの変化大きい。
- 格子定数の変化大きい。
- 母物質は磁気秩序のある金属



S. Suzuki et al., J.Phys.Soc.Jpn. ***78****, 114712 (2009).*

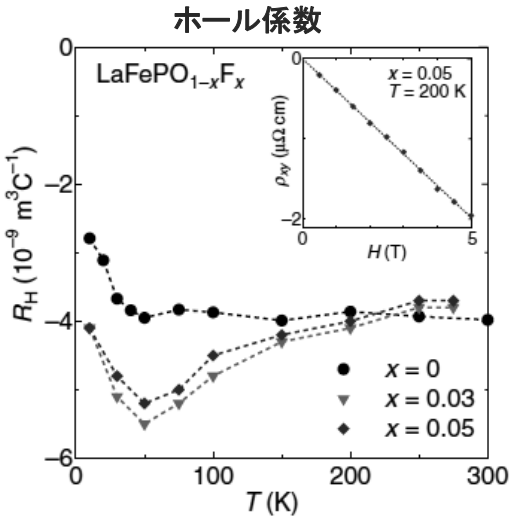
O/F置換効果

電子比熱係数



S. Suzuki et al., J.Phys.Soc.Jpn. ***78****, 114712 (2009).*

O/F置換効果

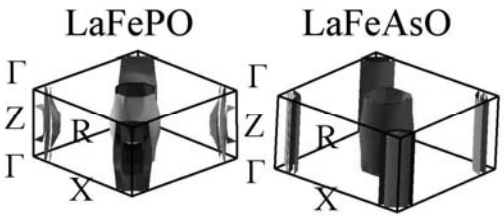


S. Suzuki et al.,
J.Phys.Soc.Jpn. **78**, 114712 (2009).

フッ素置換による電子状態の変化は、僅か。
電子ドープの効果は小さい。

もともと良い金属であり、キャリアは十分いる。

➡ As系で見られる大きなF置換効果は、電子ドープというより格子定数の変化に原因があるのでは。



Fe/M置換（不純物添加）効果

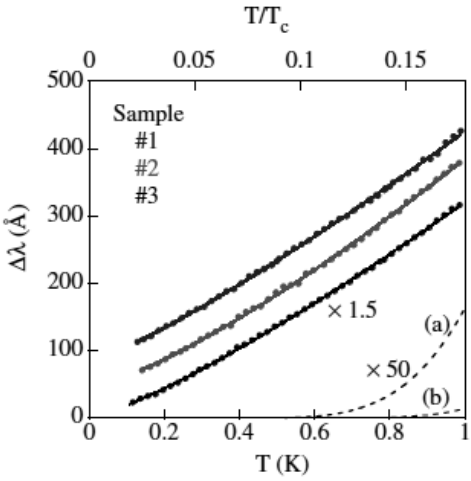
超伝導ギャップ

LaFeAs(O,F)では、s±波が有力

LaFePOでは、ノードのあるギャップが示唆されている。

ex. 磁場侵入長の温度依存性
by Fletcher *et al.*

理論計算　by Kuroki *et al.*

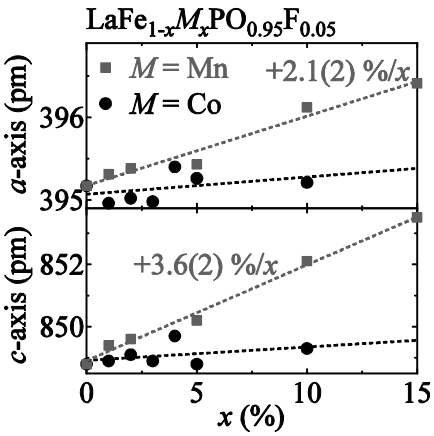


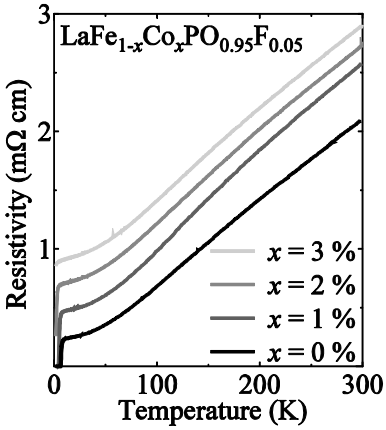
J. D. Fletcher et al., PRL 102, 147001 (2009)

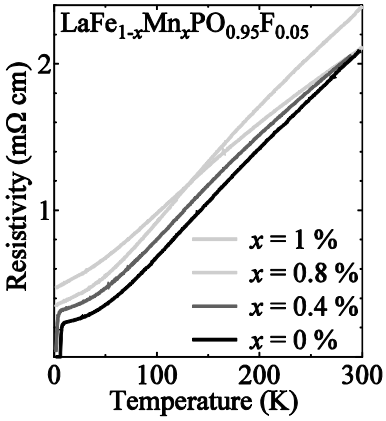
d波のようなギャップノードがある超伝導体の場合、不純物置換による対破壊が劇的に現れるはず。
→ As系とは違う不純物効果が見られるか？

Fe/M置換効果

M=Co, Mn, Ni を置換した多結晶試料作製



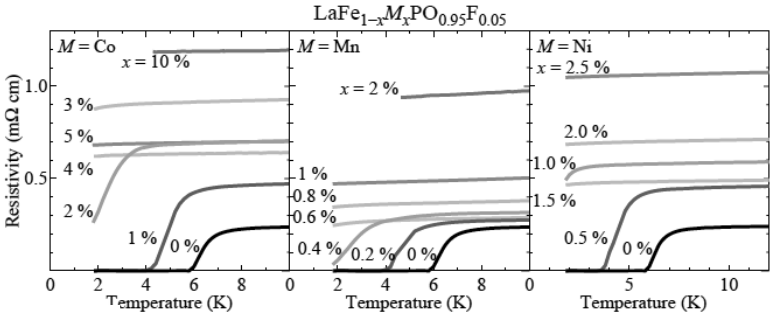




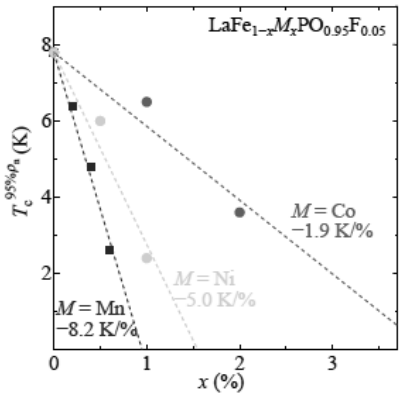
系統的に残留抵抗率は増加

Fe/M置換効果

M=Co, Mn, Ni



S. Suzuki et al, Physica C (in press).



1）Co置換によるTcの低下は小さい。
→ ノードのあるギャップではない。

2）Co置換とMn, Ni置換とで違いがある。
磁性不純物か否かの違い？
格子定数の変化の違い？
ホールドープか電子ドープかの違い？

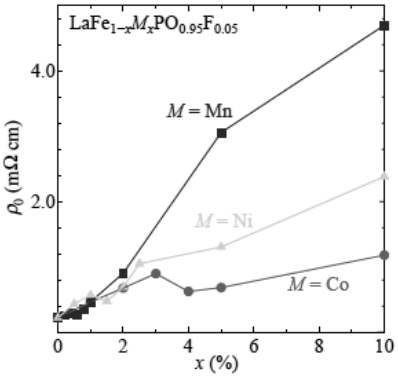
cf. $BaFe_{1.8}Co_{0.2}As_2$においてはCoが非磁性

F. Ning et al., JPSJ 2008

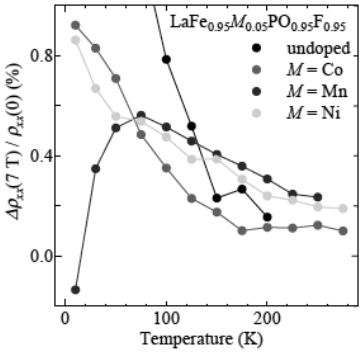
磁性不純物か否か

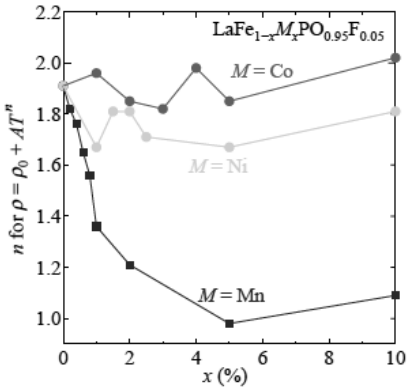
電気抵抗率を$\rho = \rho_0 + AT^n$
でフィッティング（ $T \leq 70$K ）

Mn：磁性不純物として作用
Tcの著しい低下
磁気抵抗の変化



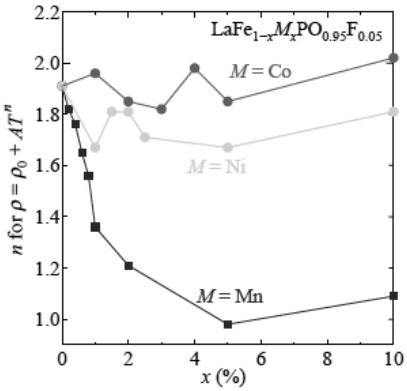
磁気抵抗率

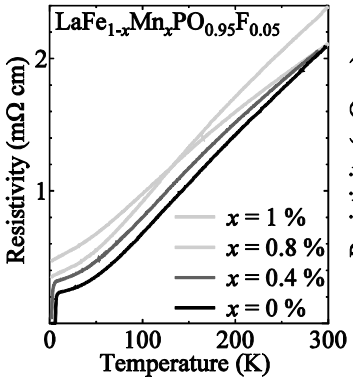


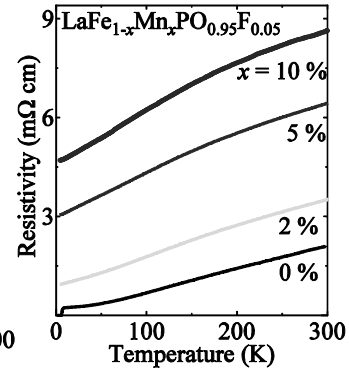


Mn置換による電子状態の変化？

抵抗の温度依存性（べき依存性）の変化



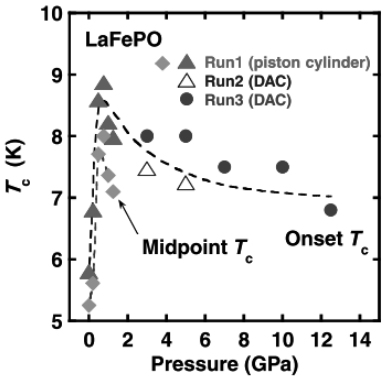


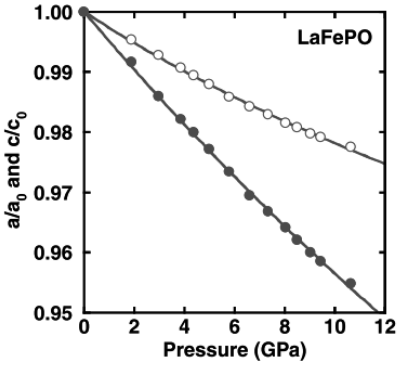


格子定数変化の効果の検討

格子定数の変化によるTc低下の可能性検討
0~0.8GPaの領域でa、c軸長の減少とともにT_cが増加
軸長増加によるTc減少率は ~0.37 K/Mn1%

→Mn置換による格子定数変化で、観測されているTc低下は説明できない。





K. Igawa *et al*., JPSJ 2009

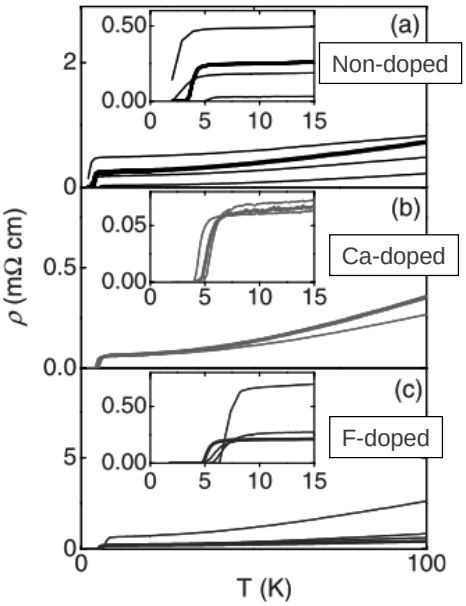
キャリアの種類

- 不純物置換によってドープされるキャリアの種類の違いの影響は？
  - Mn置換による急激なT_cの減少はホールのドープによるものか。
  - Ca（ホール）ドープでT_cは減少しない。

by Kamihara et al.

⇒ 電子ドープ（Co）とホールドープ（Mn)の違いによるとは考えにくい。

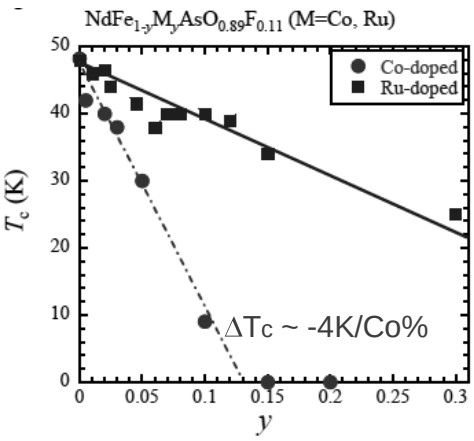
→Mn置換による激しいTcの低下は磁性元素であることが原因と思われる。



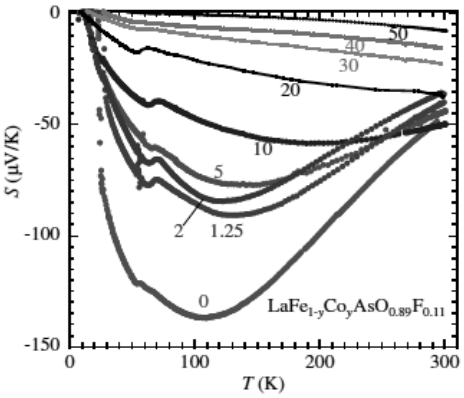
Y. Kamihara et al., Phys. Rev. B 2008

As系の不純物置換

Co置換による、電子ドープ効果



S.C.Lee et al., cond-mat/09114584



S.C.Lee et al., JPSJ 78, 034703 (20009)

対破壊効果が弱いという点でP系と共通。

結論

LaFePO系とLaFeAsO系との比較から、以下のことがわかった。

1）O/F置換の主な効果は、電子ドープではなく格子定数の変化。
→ *電子相図の横軸にとるべき物理量は何か。*
スピン揺らぎの強さを制御しているパラメータは何か。

2）P/As置換で、反強磁性揺らぎの強さが変化し、揺らぎが強くなるとTcが高くなる。
格子定数の単調な変化に対して、電子状態は非単調な変化をする。
→ *criticalな組成がある。フェルミ面のわずかな違い？*

3）非磁性不純物置換による超伝導対破壊効果が弱い。(As系とP系の違いはない。)
→ *As系もP系も、不純物置換の振舞いは、d波（やs±波）ギャップを支持しない。*

超伝導転移温度を制御しているのは、反強磁性揺らぎの強さ
何が反強磁性揺らぎの強さを決めているか、の詳細は不明
（構造パラメータをどうすればフェルミ面をチューンできるか）

12. 鉄系超伝導体の超伝導ギャップ対称性

京都大学 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻
芝内孝禎

Superconducting Gap Symmetries of Iron Based High-T_c Superconductors

Department of Physics, Kyoto University
Takasada Shibauchi

鉄砒素系高温超伝導の発現機構を議論する上で，その超伝導秩序パラメータであるエネルギーギャップ構造を決定することは非常に重要である．格子振動を媒介とした従来型のＢＣＳ超伝導体では，ギャップは等方的に開くのに対して，電子相関が重要となる非従来型の超伝導では、引力相互作用が異方的になり，フェルミ面の一部で超伝導ギャップの符号が反転する場合がある。銅酸化物高温超伝導体のようにフェルミ面が単一バンドで記述される場合は，符号反転があると必ずギャップがゼロになるノード（節）とよばれる点がフェルミ面上に現れ，これにより低温での準粒子励起が可能になる．これに対して，鉄系超伝導体では，フェルミ面が電子面とホール面で離れており，例えばホール面で正、電子面で負というように符号反転はあるものの，フェルミ面上のギャップの大きさはどこでもゼロにならずノードを持たない(full gap)ということが可能となる．実際に，ホール面と電子面をつなぐベクトル$Q=(\pi,\pi)$の方向（鉄の正方格子を単位とした拡張形式では$(\pi,0)$の方向）での反強磁性ゆらぎを媒介とした超伝導では，s±状態とよばれる符号反転を伴いながらノードのない新しいタイプの非従来型超伝導状態が提案されている．

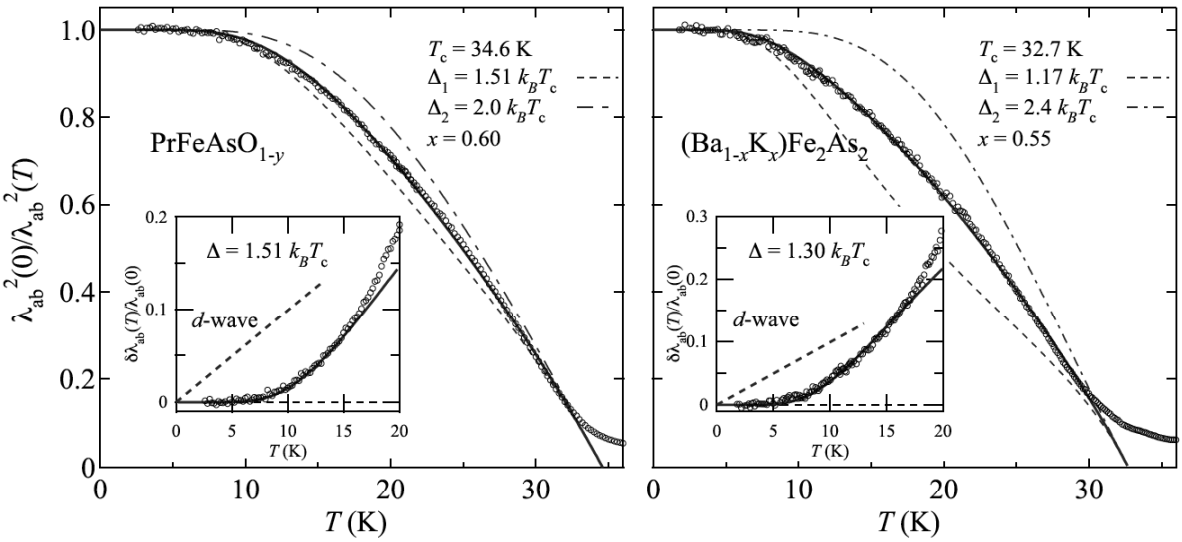


図１．磁場侵入長（挿入図）と超伝導電子密度の温度依存性．左が$PrFeAsO_{1-y}$単結晶，右が$(Ba_{1-x}K_x)Fe_2As_2$単結晶の結果

我々は磁場侵入長，下部臨界磁場，熱伝導度などの準粒子低エネルギー励起に敏感な物理量の低温精密測定により，様々な鉄系超伝導体のエネルギーギャップ構造を明らかにしてきた。電子ドープの$PrFeAsO_{1-y}$およびホールドープの$(Ba_{1-x}K_x)Fe_2As_2$では，ともに磁場侵入長が低温でフラットな温度依存性を示し（図1），ノードのないギャップ構造とコンシステントである[1,2]．下部臨界磁場の温度依存性からも同様な結論が得られている[3]．さらに，より散乱の強いと思われる試料では，磁場侵入長の低温の温度変化がT^2に比例した結果が得られており，これらの結果はs±状態と矛盾しないことが示されている[2]．

ごく最近，BaFe2As2 の As サイトを一部等価数の P で置換した系で，量子振動が観測できるほど非常に純良な単結晶試料が得られ[4,5]，この系の最適ドープの試料についてギャップ構造を調べたところ，非常に異なる結果が得られた[6]．磁場侵入長の温度依存性は広い温度範囲で温度に比例する振る舞いを示し，熱伝導度は低温極限で残留Ｔリニア項が観測された．これらの結果は，この系では他の系と異なりギャップにラインノードを持つことを強く示唆している．さらに熱伝導の磁場依存性は上凸の振る舞いを見せ，ラインノードの存在により期待される低磁場での状態密度の急激な上昇に対応した変化を示している[6]．また，ＮＭＲによる緩和率の温度依存性からもラインノードを持つ超伝導ギャップとコンシステントな結果が報告されている[7]．ラインノードを持つことから，秩序パラメータに符号反転を伴う非従来型超伝導であることが結論できる．

これら同じ鉄系超伝導体でもノード構造の異なる超伝導状態が実現していることは，他の非従来型超伝導体には見られない非常に興味深い特徴であると考えられる．この結果が鉄系超伝導体発現機構解明の一助となれば幸いである．

これらの結果は，京都大学の橋本顕一郎，山下穣，笠原成，岡崎竜二，宍戸寛明，井加田洸輔，利根川翔，加藤智成，中田宣人，千秋義紀，池田浩章，寺嶋孝仁，松田祐司，原子力機構の石角元志，社本真一，産総研の鬼頭聖，伊豫彰，永崎洋，Ecole Polytechnique の M. Konczykowski, C. J. van der Beek, Bristol 大の A. Serafin, A. Carrington の各氏との共同研究の成果である。

参考文献

[1] K. Hashimoto *et al*., Phys. Rev. Lett. **102**, 017002 (2009).
[2] K. Hashimoto *et al*., Phys. Rev. Lett. **102**, 207001 (2009).
[3] R. Okazaki *et al*., Phys. Rev. B **79**, 064520 (2009).
[4] S. Kasahara *et al*., arXiv:0905.4427.
[5] H. Shishido *et al*., arXiv:0910.3634.
[6] K. Hashimoto *et al*., arXiv:0907.4399.
[7] Y. Nakai *et al*., arXiv:0908.0625.

Non-universal gap structure in Fe-pnictide high-temperature superconductors

T. Shibauchi
K. Hashimoto λ(T)
M. Yamashita κ(T)
S. Kasahara xtals, ρ(T)
R. Okazaki H_{c1}(T)
H. Shishido dHvA
S. Tonegawa σ(T)
H. Ikeda Band calc.
T. Terashima
Y. Matsuda
Kyoto University, Japan

A.Serafin λ(T)
A. I. Coldea dHvA
A. F. Bangura
A. Carrington
Univ. of Bristol, UK

M. Konczykowski H_{c1}(T)
C. J. van der Beek
Ecole Polytechnique, France

R. Settai dHvA
Y. Onuki
Osaka Univ., Japan

H. Sugawara LaFePO xtals
Tokushima, Japan

H. Takeya 122 xtals
K. Hirata
NIMS, Japan

M. Ishikado Pr-1111 xtals
S. Shamoto
JAEA, Japan

H. Kito Pr-1111 xtals
A Iyo
H. Eisaki
AIST, Japan

Outline

1. Introduction
   Fe-pnictide superconductors

2. Superconducting gap structure
   Magnetic penetration depth & thermal conductivity

   $PrFeAsO_{1-y}$ electron-doped, high-T_c (35 K)
   K. Hashimoto *et al.*, PRL **102**, 017002 (2009).
   R. Okazaki *et al.*, PRB **79**, 064520 (2009).

   $(Ba,K)Fe_2As_2$ hole-doped, high-T_c (32 K)
   K. Hashimoto *et al.*, PRL **102**, 207001 (2009).

   $BaFe_2(As,P)_2$ undoped, high-T_c (30 K)
   K. Hashimoto *et al.*, arXiv:0907.4399.
   S. Kasahara *et al.*, arXiv:0905.4427.
   H. Shishido *et al.*, arXiv:0910.3634.

   LaFePO undoped, low-T_c (7 K)
   M. Yamashita *et al.*, arXiv:0906.0622.

3. Summary

Pairing mechanism ←→ nodes in the gap

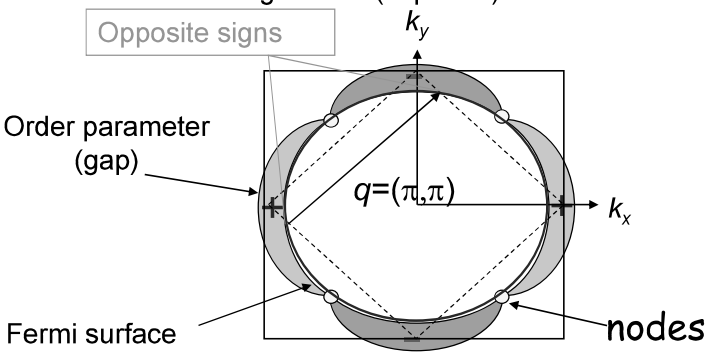
$H_{int} = V_{k,k'} c^{+}_{-k'\downarrow} c^{+}_{k'\uparrow} c_{k'\uparrow} c_{-k'\downarrow}$ $V_{k,k'}$ may be anisotropic in unconventional SCs

ex) Superconductivity mediated by **antiferromagnetic fluctuaions**

$$V(\mathbf{q}) = - I^2(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{q}) / [1- I^2(\mathbf{q})\chi_0^2(\mathbf{q})]$$

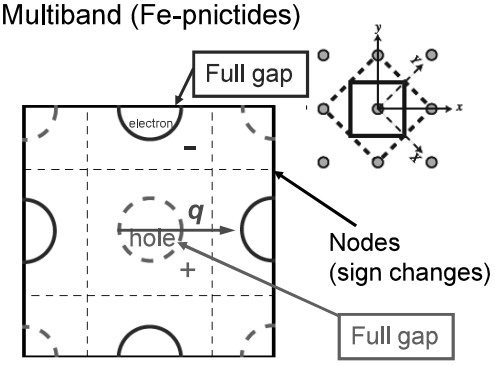
Large $\chi_0(q)$ → opposite sign in the order parameter $\Delta(\mathbf{k+q})\Delta(\mathbf{q}) < 0$

Single band (cuprates)



$d_{x^2-y^2}$ $(k_x^2-k_y^2)$
zeros at $k_x=+k_y, -k_y$

Multiband (Fe-pnictides)

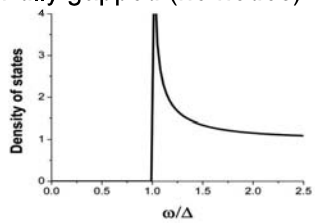


$s_{\pm}$
No zeros at Fermi surface

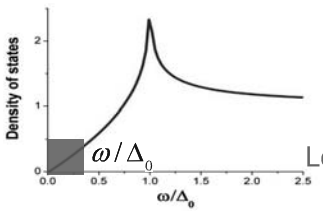
I. Mazin
K. Kuroki
(2008)

Probing low-energy quasiparticle excitations

Fully gapped (no nodes)

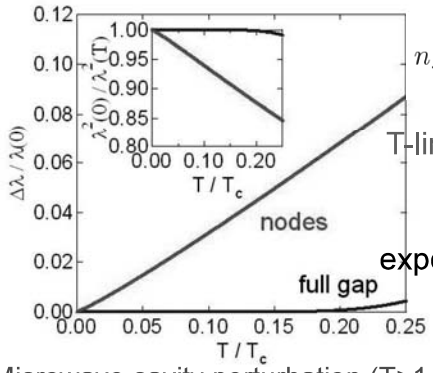


with (line) nodes



Low-lying excitations

Magnetic penetration depth λ
a direct probe for superfluid density

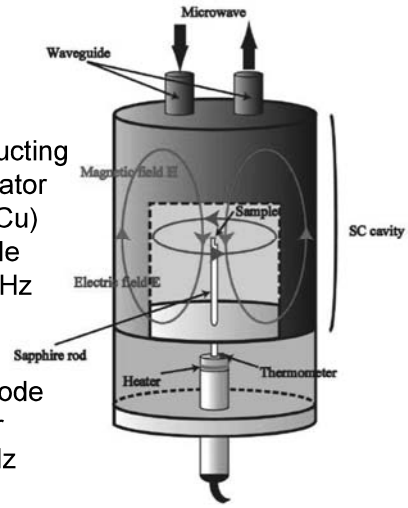


$$n_s = \frac{\lambda^2(0)}{\lambda^2(T)}$$

Microwave cavity perturbation (T>1.7 K) and
rf tunnel diode oscillator (T>100 mK) techniques

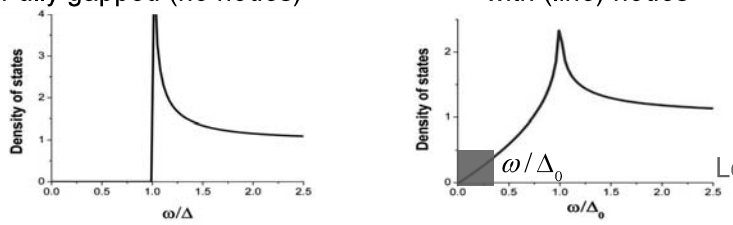
1. Superconducting cavity resonator (Pb plated Cu) TE_{011} mode f_0=27.75 GHz Q_0~10^6

2. Tunnel diode oscillator f ~ 14 MHz

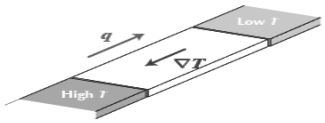


Probing low-energy quasiparticle excitations

Fully gapped (no nodes) with (line) nodes

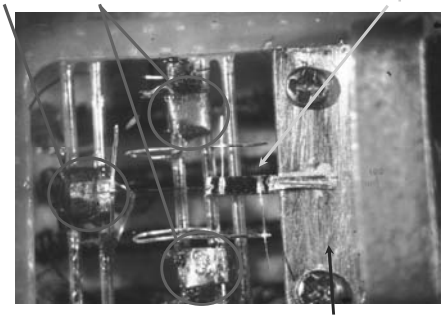


$q = -\kappa \nabla T$

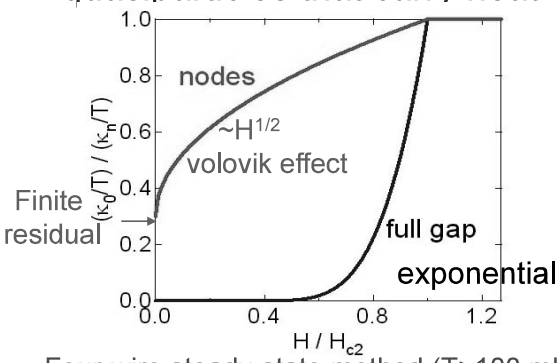


Thermal conductivity κ
a bulk probe for delocalized quasiparticles that carry heat

heater RuO_2 thermometer sample



Cu thermal bath



Four-wire steady-state method (T>100 mK)

Outline

1. Introduction
   Fe-pnictide superconductors

2. Superconducting gap structure
   Magnetic penetration depth & thermal conductivity

   $PrFeAsO_{1-y}$ electron-doped, high-T_c (35 K)
   K. Hashimoto *et al.*, PRL **102**, 017002 (2009).
   R. Okazaki *et al.*, PRB **79**, 064520 (2009).

   $(Ba,K)Fe_2As_2$ hole-doped, high-T_c (32 K)
   K. Hashimoto *et al.*, PRL **102**, 207001 (2009).

   $BaFe_2(As,P)_2$ undoped, high-T_c (30 K)
   K. Hashimoto *et al.*, arXiv:0907.4399.
   S. Kasahara *et al.*, arXiv:0905.4427.
   H. Shishido *et al.*, arXiv:0910.3634.

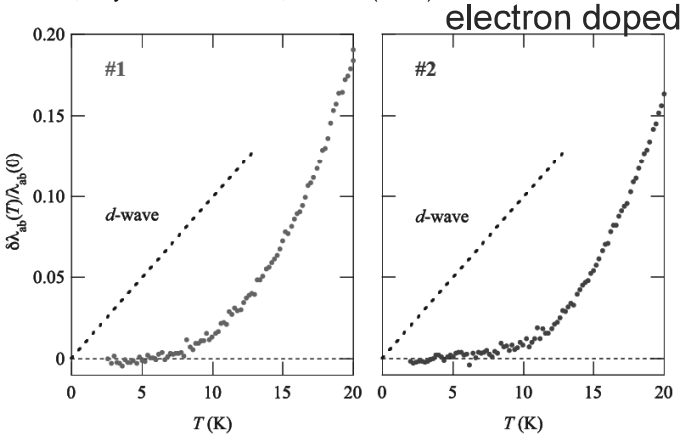
   LaFePO undoped, low-T_c (7 K)
   M. Yamashita *et al.*, arXiv:0906.0622.

3. Summary

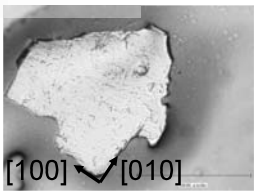
$LnFeAsO_{1-y}$ (Ln=Pr)

K. Hashimoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 017002 (2009).

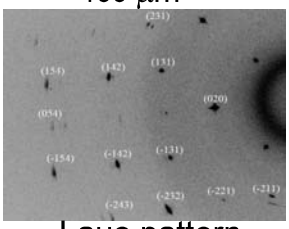
$PrFeAsO_{1-y}$ $T_c \sim 35$ K
electron doped



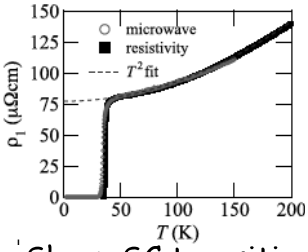
M. Ishikado *et al.*



100 μm



Laue pattern



Sharp SC transition

- line node

$$\frac{\delta\lambda_{ab}(T)}{\lambda_{ab}(T)} \approx \frac{\ln 2}{\Delta} k_B T$$

$$(2\Delta/k_B T_c = 4)$$

Inconsistent with the data

- full gap

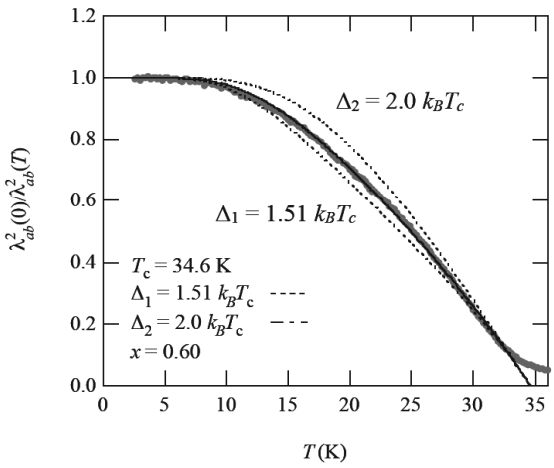
$$\frac{\delta\lambda_{ab}(T)}{\lambda_{ab}(0)} \approx \sqrt{\frac{\pi\Delta}{2k_B T}} \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right)$$

$\Delta_{min}/k_B T_c \sim 1.5 \pm 0.2$

$LnFeAsO_{1-y}$ (Ln=Pr) and $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$

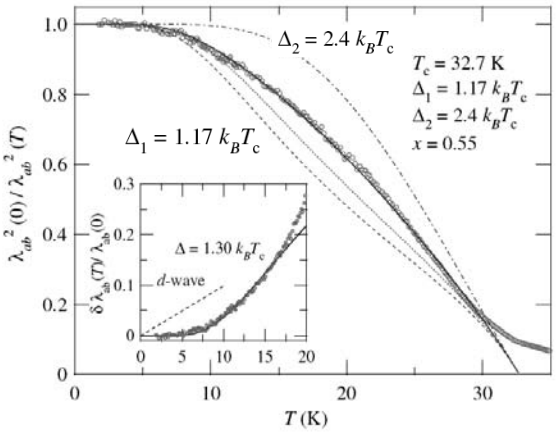
$$n_s = \frac{\lambda^2(0)}{\lambda^2(T)}$$

$PrFeAsO_{1-y}$
electron doped



K. Hashimoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 017002 (2009).

$Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ (x~0.55)
hole doped



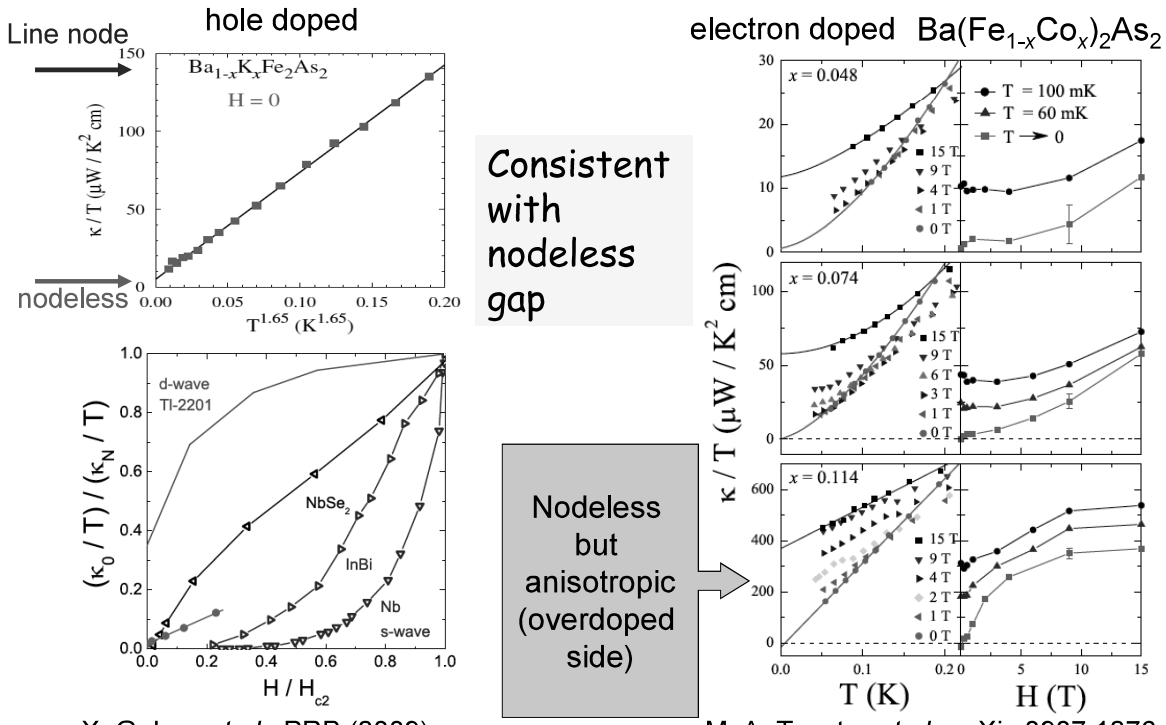
K. Hashimoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 027001 (2009).

Two-gap model

$$n_s(T) = x n_{s1}(T) + (1-x) n_{s2}(T)$$

Full-gap superconductivity
nodeless order parameter

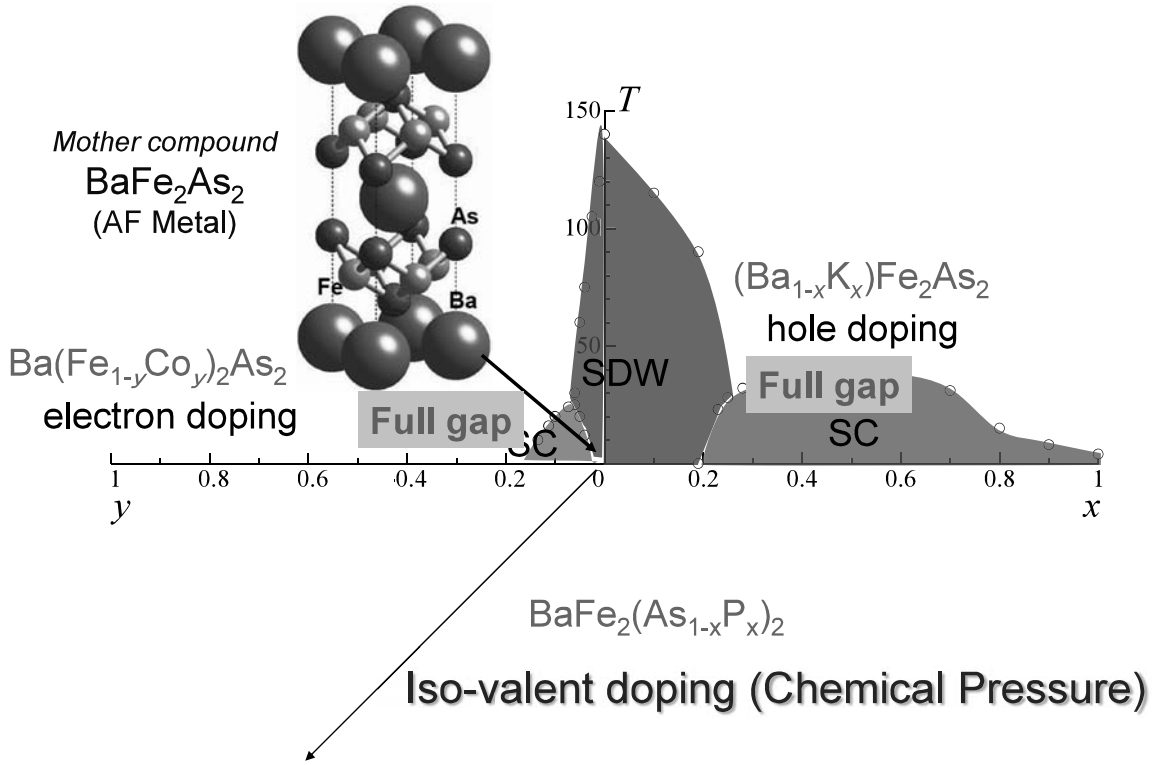
Thermal conductivity



X. G. Luo *et al.*, PRB (2009).

M. A. Tanatar *et al.*, arXiv:0907.1276.

Superconductivity in $BaFe_2As_2$ systems



Outline

1. Introduction
   Fe-pnictide superconductors

2. Superconducting gap structure
   Magnetic penetration depth & thermal conductivity

   $PrFeAsO_{1-y}$ electron-doped, high-T_c (35 K)
   K. Hashimoto *et al.*, PRL **102**, 017002 (2009).
   R. Okazaki *et al.*, PRB **79**, 064520 (2009).

   $(Ba,K)Fe_2As_2$ hole-doped, high-T_c (32 K)
   K. Hashimoto *et al.*, PRL **102**, 207001 (2009).

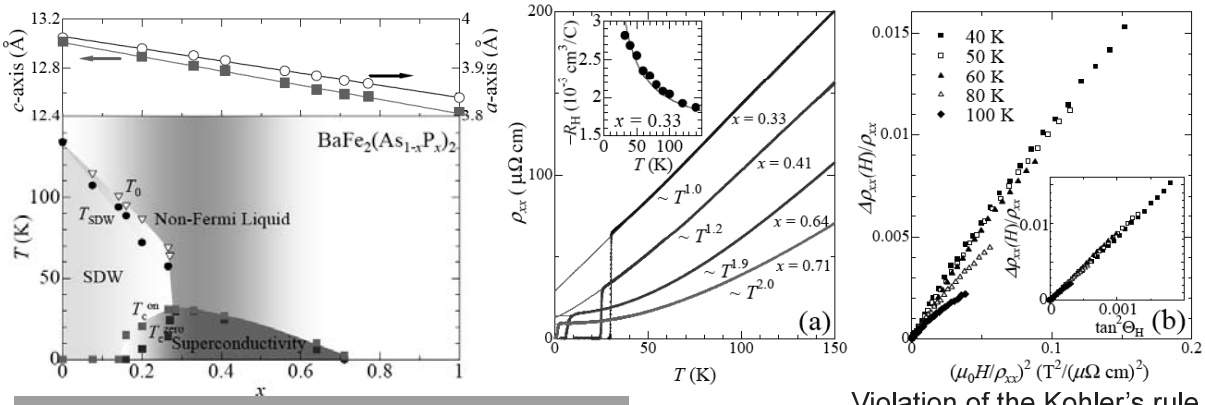
   $BaFe_2(As,P)_2$ undoped, high-T_c (30 K)
   K. Hashimoto *et al.*, arXiv:0907.4399.
   S. Kasahara *et al.*, arXiv:0905.4427.
   H. Shishido *et al.*, arXiv:0910.3634.

   LaFePO undoped, low-T_c (7 K)
   M. Yamashita *et al.*, arXiv:0906.0622.

3. Summary

"Isovalent doping" $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$

S. Kasahara *et al.*, arXiv:0905.4427

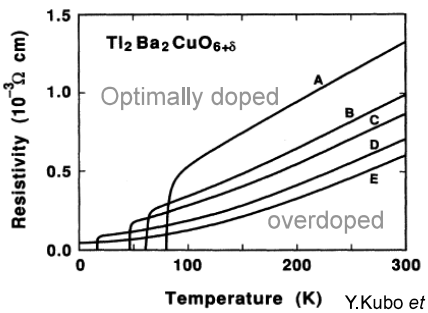


Compensation condition (n_e=n_h) holds for any x.

Violation of the Kohler's rule

$$\sigma = \sigma_h + \sigma_e,$$

$$R_H = \frac{1}{ne} \times \frac{\sigma_h - \sigma_e}{\sigma_h + \sigma_e} \leqq \frac{1}{ne}$$



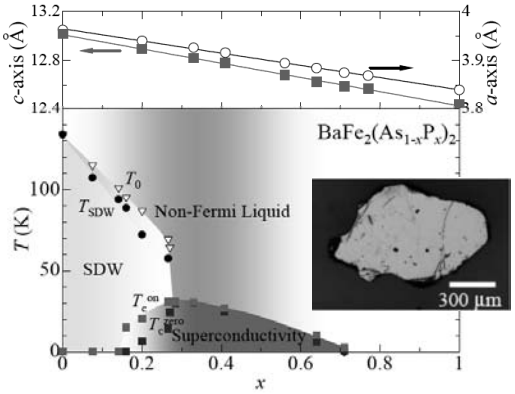
Y.Kubo *et al*, PRB (1991).

Distinct deviations from the conventional Fermi-liquid theory of metals

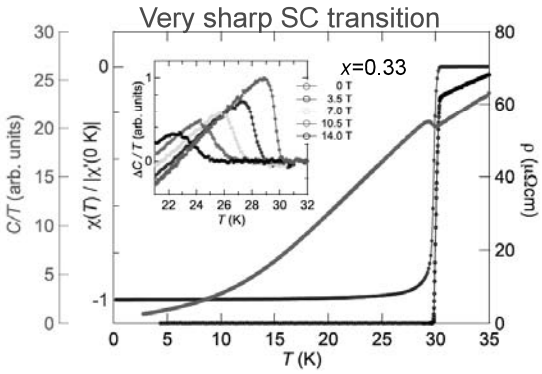
Universal features in correlated electron systems in the presence of antiferromagnetic fluctuations

"Isovalent doping" $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$

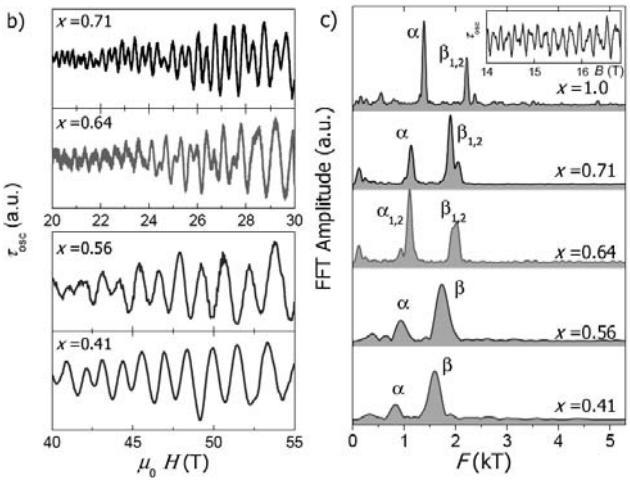
S. Kasahara *et al.*, arXiv:0905.4427



Very sharp SC transition



Quantum oscillations in doped system (x≧0.41)

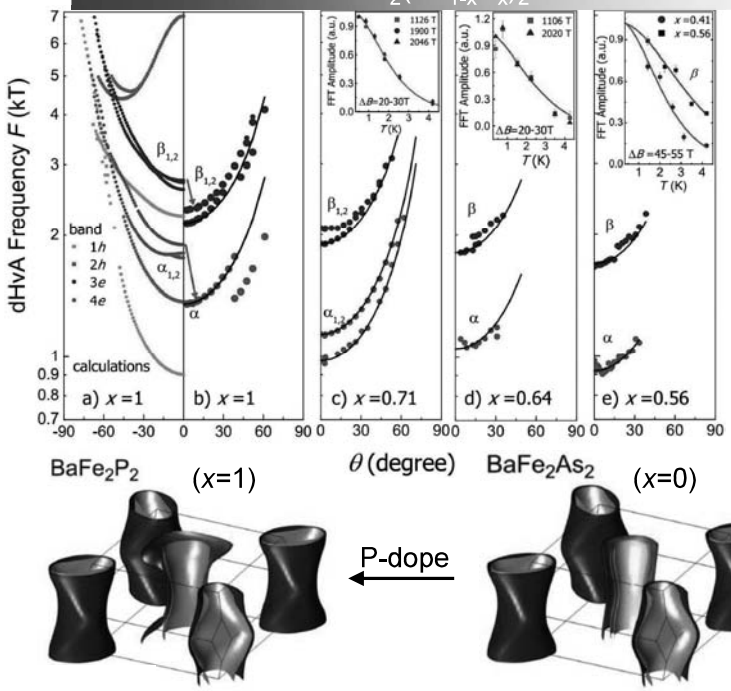


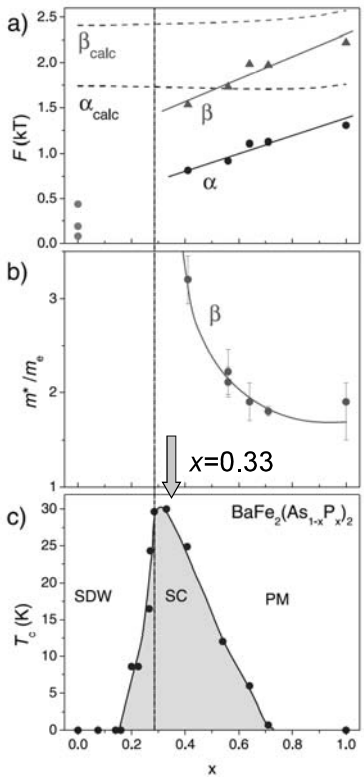
H. Shishido *et al.*, arXiv:0910.3634

Very clean single crystals

Fermi surface of $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$

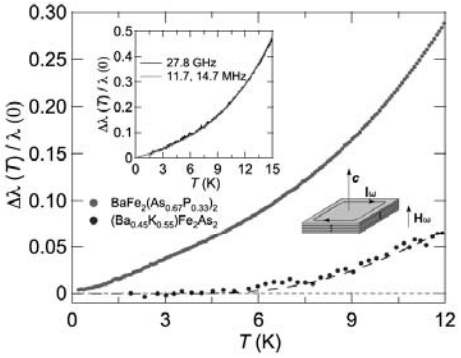
H. Shishido *et al.*, arXiv:0910.3634

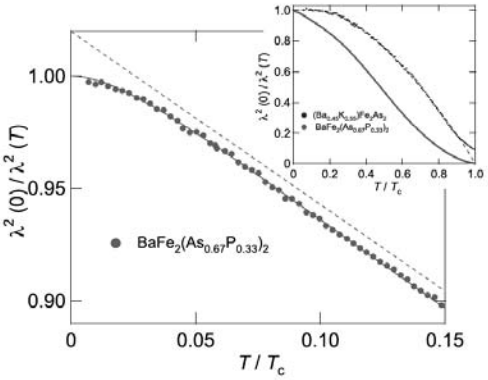




Shrinkage of FS and mass enhancement caused by the many-body interaction play a key role for superconductivity.

$BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ (T_c ~ 30 K, x=0.33) magnetic penetration depth





K. Hashimoto, M. Yamashita *et al.*, arXiv:0907.4399.

- *T*-linear penetration depth in $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ (T_c ~ 30 K) clearly indicates the line nodes in the gap.

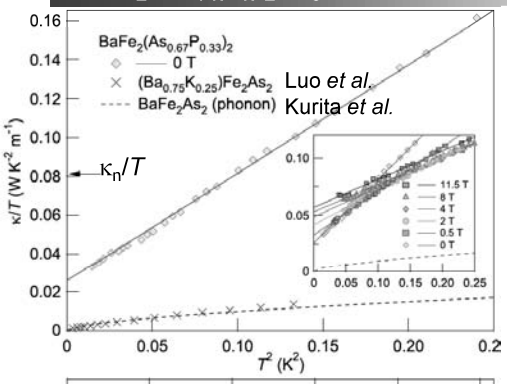
$$\frac{\delta\lambda_{ab}(T)}{\lambda_{ab}(T)} \approx \frac{\ln 2}{\Delta} k_B T$$

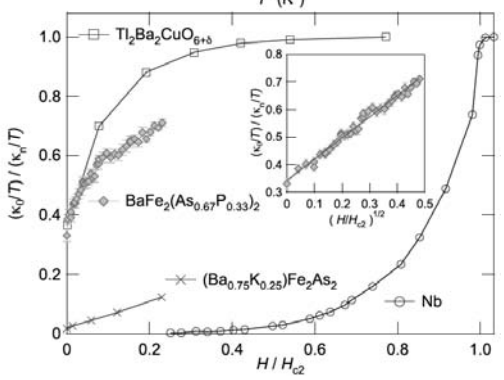
$2\Delta/k_B T_c$ ~ 3.2

clear evidence for unconventional nodal high-T_c superconductivity (with sign change) in Fe-pnictides

$\Delta\lambda(T) \sim T^2/(T+T^*)$ T^*=1.3 K
cf. clean YBCO T^*~1 K

$BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ (T_c ~ 30 K, x=0.33) thermal conductivity and NMR

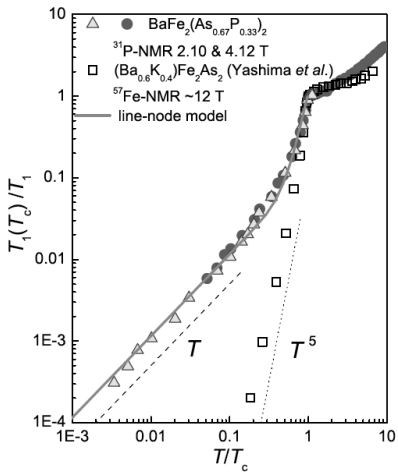




K. Hashimoto, M. Yamashita *et al.*, arXiv:0907.4399.

- Finite κ_0/T in the $T \rightarrow 0$ K limit
- $H^{1/2}$ dependence of κ_0/T

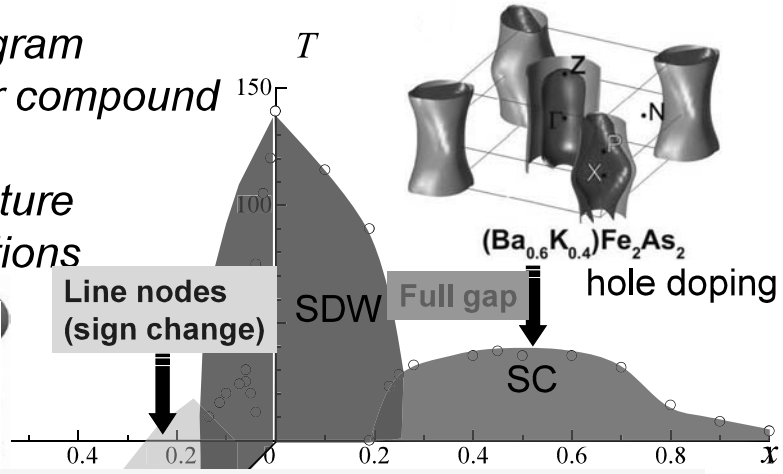
further evidence for unconventional nodal high-T_c superconductivity in Fe-pnictides



Y. Nakai *et al.*, arXiv:0908.0625.

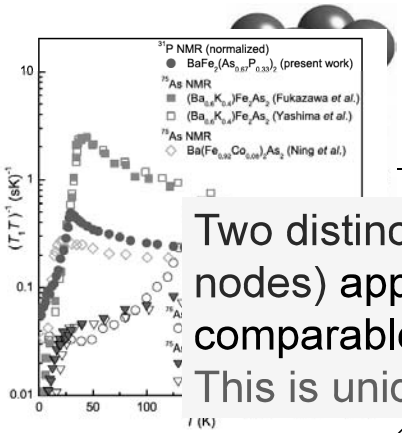
$(Ba_{0.6}K_{0.4})Fe_2As_2$ and $BaFe_2(As_{0.7}P_{0.3})_2$

Similar phase diagram
The same mother compound
Similar T_c (~30 K)
Similar band structure
Similar AF fluctuations



$(Ba_{0.6}K_{0.4})Fe_2As_2$

hole doping



Two distinct pairing states (with and without nodes) appear in similar systems which have comparable T_c.
This is unique among superconductors.

Y.Nakai *et al*. arXiv:0908.0625

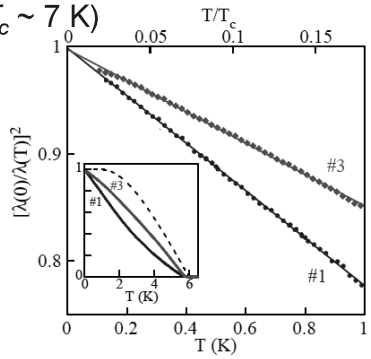
x 1

$BaFe_2(As_{0.67}P_{0.33})_2$

Discussion

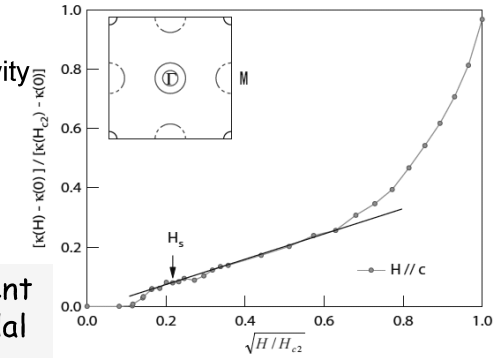
LaFePO (T_c ~ 7 K)

T-linear penetration depth



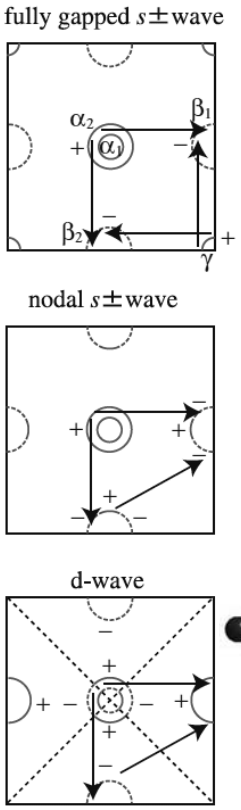
J. D. Fletcher *et al*., PRL (2009); C. W. Hicks *et al*., PRL (2009).

Thermal conductivity



M. Yamashita *et al*., arXiv:0906.0622

Consistent with nodal $s_\pm$ wave



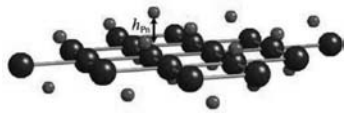
For `1111' systems

High-T_c full-gap SC

NdFeAs(O,F)
h_{Pn} = 1.38 A

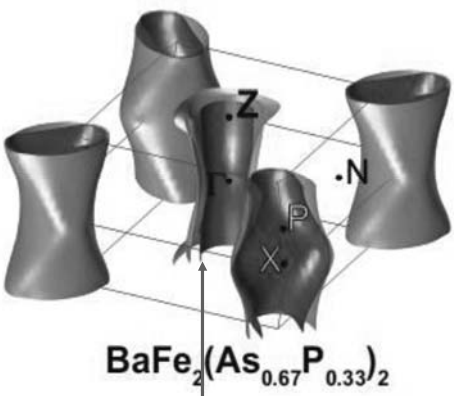
Pnictogen height h_{Pn} switches

LaFePO
h_{Pn} = 1.14 A
Low-T_c nodal SC



K. Kuroki *et al*., PRB (2009).

Discussion



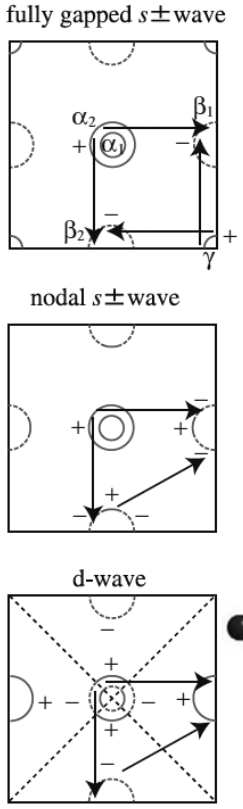
✓γ band exists
✓High T_c ~30 K

Horizontal node?

Further studies are necessary for general understanding

(Ba,K)Fe_2As_2
h_{Pn} = 1.38 A

$BaFe_2(As,P)_2$
h_{Pn} = 1.31 A



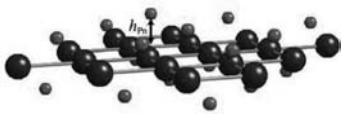
For `1111' systems

High-T_c full-gap SC

NdFeAs(O,F)
h_{Pn} = 1.38 A

Pnictogen height h_{Pn} switches

LaFePO
h_{Pn} = 1.14 A
Low-T_c nodal SC



K. Kuroki *et al.*, PRB (2009).

Summary

Non-universal superconducting gap structure

$PrFeAsO_{1-y}$	Full-gap high-T_c	K. Hashimoto *et al.*, PRL **102**, 017002 (2009). R. Okazaki *et al.*, PRB **79**, 064520 (2009).
(Ba,K)Fe_2As_2	Full-gap high-T_c	K. Hashimoto *et al.*, PRL **102**, 207001 (2009).
$BaFe_2(As,P)_2$	Nodal high-T_c	K. Hashimoto *et al.*, arXiv:0907.4399. S. Kasahara *et al.*, arXiv:0905.4427. H. Shishido *et al.*, arXiv:0910.3634.
LaFePO	Nodal low-T_c	M. Yamashita *et al.*, arXiv:0906.0622.

Two pairing channels with and without nodes appear in similar systems with comparable T_c.

Unique unconventional superconductivity

13. 鉄系超伝導体のフォノンと磁性

原子力機構[A]、JST-CREST[B]　JST-TRIP[C]、理研[D]、JASRI[E]
町田昌彦[A,B,C], 中村博樹[A,B,C], 福田竜生[A,C,E], A.F.Baron[C,D,E], 社本真一[A,C]

Phonon and Magnetism in High-Tc pnictide Superconductors

JAEA[A], JST-CREST[B], JST-TRIP[C], RIKEN[D], JASRI[E]
Masahiko Machida[A,B,C], Hiroki Nakamura[A,B,C], Tatsuo Fukdua[A,C,E], Alfred.F.Baron[C,D,E], Shin-ichi Shamoto[A,C]

神原らによる鉄系超伝導体[1]の発見当初、その臨界温度の高さから、フォノン由来の超伝導という可能性に、疑問が投げかけられ、様々な新奇超伝導機構が提案された。その後、その最高の臨界温度が50K を超えると、いよいよフォノン由来による説明の困難さがより鮮明に主張されるようになった。その主張を決定づけた計算として、Boeri らによる第一原理計算による電子・フォノン相互作用の見積もり[2]があるが、この計算によると可能な Tc は5K にも満たないことからフォノン機構は早々に超伝導機構の対象外と多くの人に見放されている。しかしながら、その後の福田らの実験[3]により、1111 系においては第一原理計算により得られるフォノンスペクトル中、鉄が関与する光学モードに由来する第3ピーク（エネルギーの低いところからピークを数えた場合）が実際の実験より5meV 程高く見誤っていることが分かるなど、最も重要な鉄が関与するフォノンはソフト化しており、現在では最初の第一原理計算に対する結論[2]に対して強い疑問が投げかけられている（122 系も同様である）。

その一方、磁性に関しては、神原らによる発見[1]以後、早々に第一原理計算は母物質の磁気転移後の構造をストライプ型の反強磁性と看破した。実際、石橋らはその磁気構造のエネルギーが他の可能な磁気構造と比べて最も低いことを確かめ[4]、Cruz らによる中性子散乱[5]等によりその磁気構造がストライプ型反強磁性であることが確かめられている。しかし、この計算と実験の構造上の一致にもかかわらず、計算の磁気モーメ

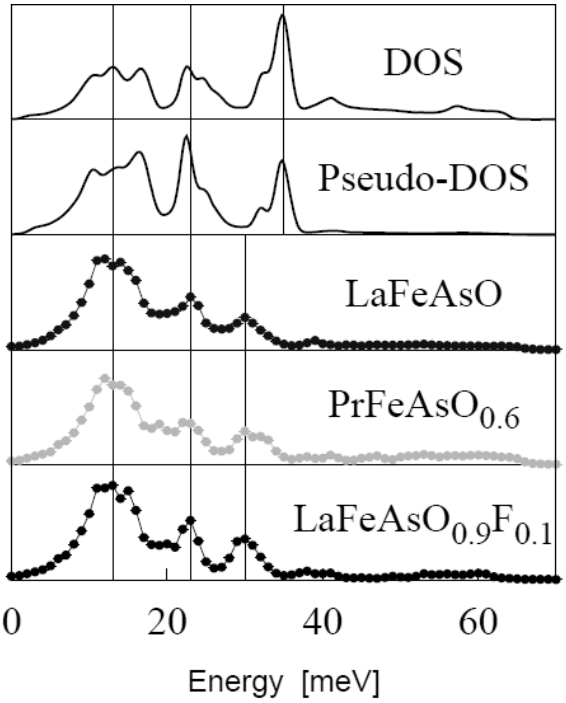


図１　フォノン状態密度。上の２つが第一原理計算、下の３つが実験結果。

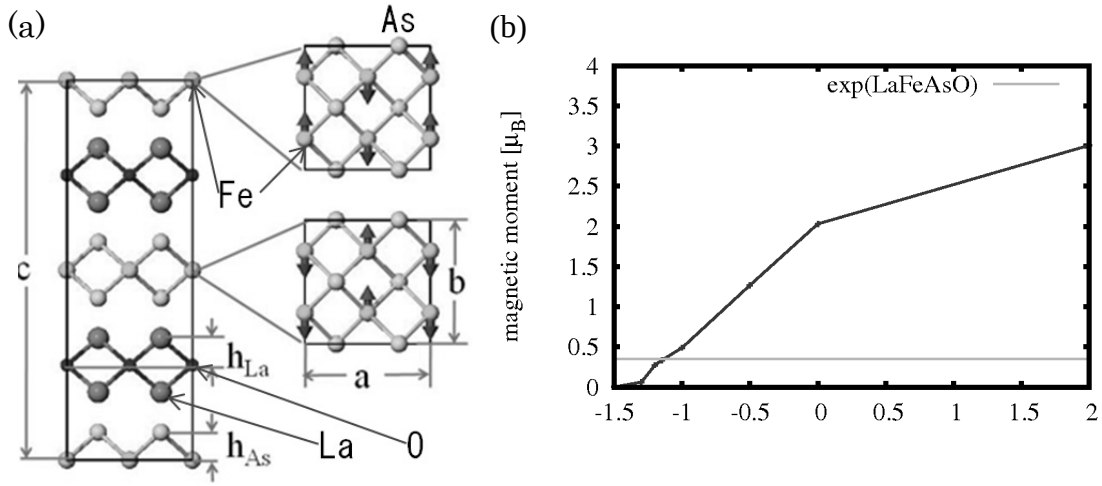


図２(a) 石橋らが提案した磁気構造、(b) 筆者ら（町田、中村）による LSDA+U の第一原理計算において得られた磁気モーメントの U 依存性（U<0 が実験結果を良く再現しており、電子状態の異常性が浮き彫りにされた[7]）

ントは 2.0μ_B と実験と比較して3～5倍程度大きく、鉄系超伝導体の電子状態を理解する上での大きな謎として残されている[6]。第一原理計算においては磁性を大きく見積もるという例は極めて稀であり、この謎を説明することが鉄系超伝導体の電子状態の異常性を理解する上での一つの鍵であると考えられる[7]。

このように、磁性とフォノン構造においては、まさに鉄が関与する電子状態に関係して第一原理計算と実験の不一致が鮮明であり、その謎の解明こそが電子状態の異常の起源に到達する道であると考えられる。現在、この二つの謎は密接にリンクしており、強い磁性

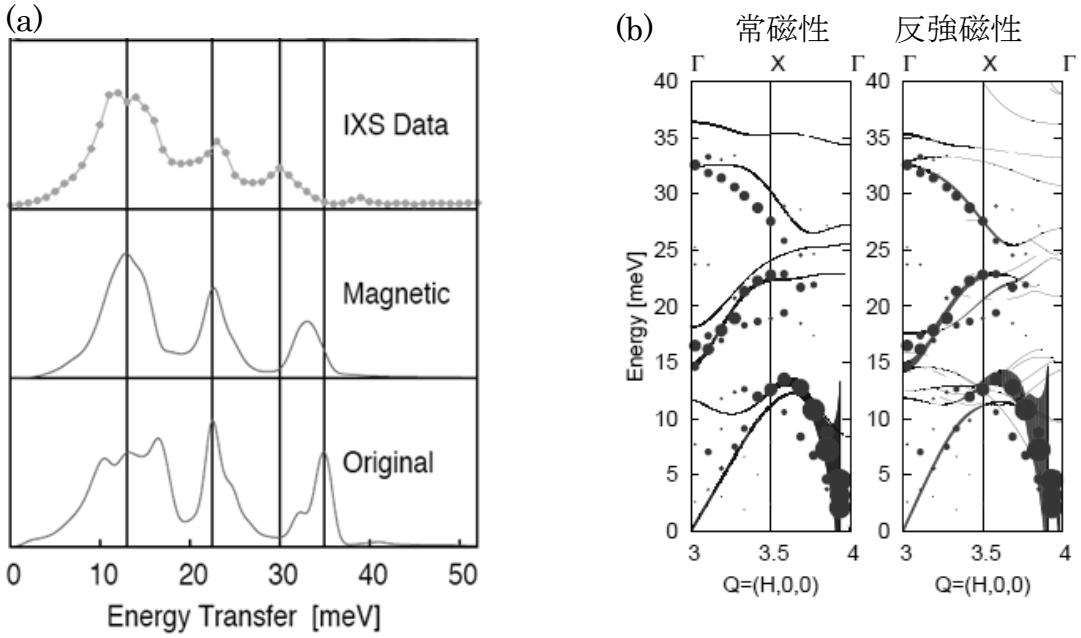


図３　磁性（反強磁性：磁気モーメント=2.0μ_B）ありとして計算した場合のフォノン状態密度、常磁性としての計算と、実験の比較。(a) フォノン状態密度、(b)分散関係の一部

を考慮した場合にフォノン構造を計算するとフォノンはソフト化し、実験と良い一致を示すことが著者らにより示されている[8]。これらの結果から、磁性とフォノンの結合は極めて強く、相互に密接に関与しあうものとして捉えられており、この関係の更なる理解が切望されている[9]。

講演では、上記のような研究の流れを詳しくレビューし、そこにある電子状態の異常性を明らかにすると同時に、それらの解明を目指す今後の研究の方向性について議論し、解明に向けて必要な実験及び理論の進展等を予想し、また、どんな謎が隠されているのか、その一端に迫りたい。

参考文献

[1] Y. Kamihara et al., J. Am. Chem. Soc. 130, 3296 (2008).
[2] L. Boeri, O. Dolgov, A. Golubov, Phys. Rev. Lett. 101, 026403 (2008).
[3] T. Fukuda et al., J. Phys. Soc. Jpn 77, 103715 (2008).
[4] S. Ishibashi et al., J. Phys. Soc. Jpn. 77, 053709 (2008).
[5] C. de la Cruz et al., Nature 453, 899 (2008).
[6] I. I. Mazin et al., Phys. Rev. B 78, 085104 (2008).
[7] H.Nakamura et al., J. Phys. Soc. Jpn. 77, Suppl. C, 153 (2008); H.Nakamura et al., Physica C 469, 908 (2009).
[8] T. Fukuda et al., in preparation.
[9] T. Egami et al., arXiv:0907.2734

鉄系超伝導体のフォノンと磁性

日本原子力研究開発機構
町田昌彦　中村博樹

謝辞:　福田竜生、A.F.Baron，社本真一

OUTLINE

- 鉄系超伝導体の超伝導機構解明への挑戦
- フォノン機構は可能か？

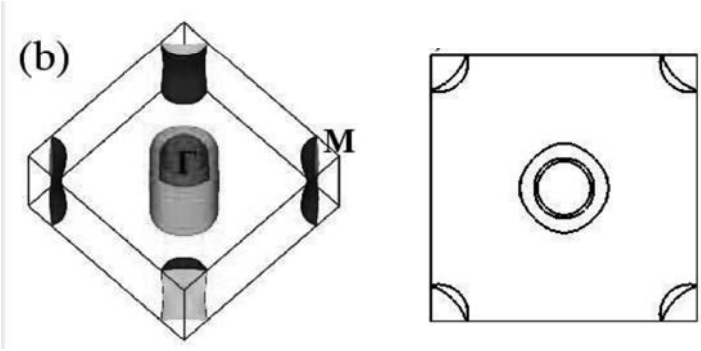
  フォノンの理論的解析結果
  フォノンの測定結果
  電子・フォノン結合は強いか？
  磁気(スピン）・フォノン結合は？

- 今後の機構解明に向けて

鉄系超伝導体の超伝導機構解明への挑戦

- 理論的アプローチ

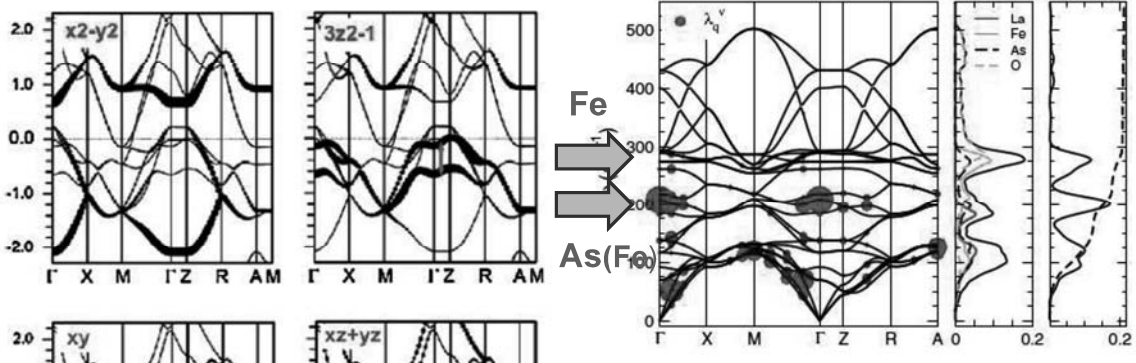
1）スピン揺らぎ（FS-Nesting ）
2） 軌道及び電荷揺らぎ
3） フォノン ？ (無視できない議論あり）
4） その他



フォノン機構は可能か？

- フォノンの第一原理計算 Boeri et al. PRL(2008）

LaOFeAs



•Bond-stretching Mode ⇒ 弱いe-p結合

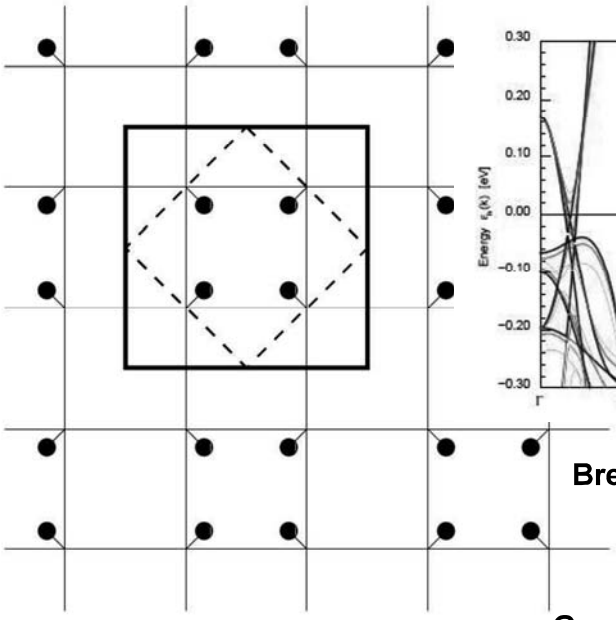
•強い顕著なModeなし ⇒ MgB2と異なる（鉄d電子delocalized)

•小さいλ~0.21 ;Tc~0.5K
cf. Al (λ~0.44 ;Tc~1.3K)

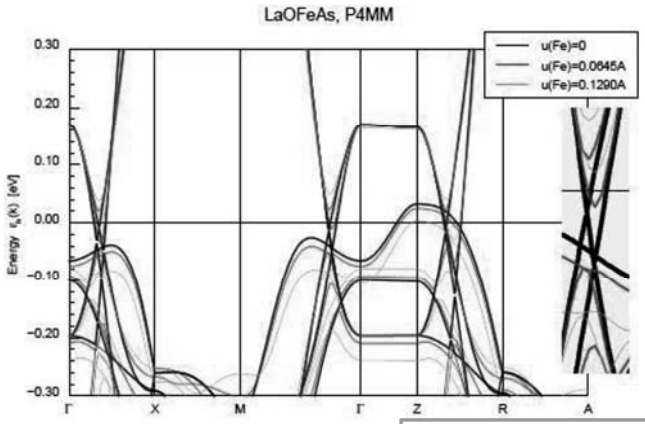
フォノン機構は可能か？

- フォノンの重要さを指摘

Eschrig arXiv:0804.0186



++S -wave



Breathing Mode (Fe)

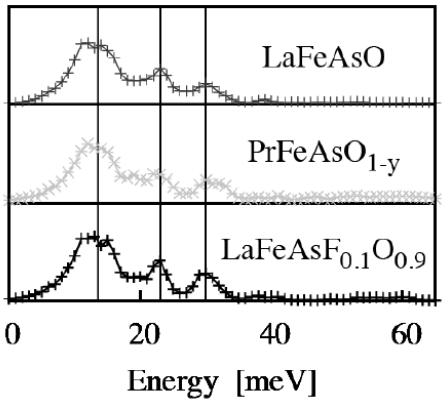
Period Doubling + Nesting

Gap Emergence ➡ Strong e-p Coupling

フォノン機構は可能か？

- フォノンの測定結果は

X-ray　Fukuda et al, JPSJ(2008)

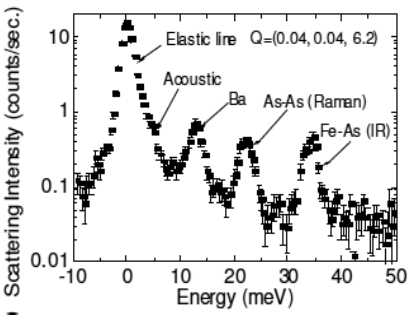


３つのピーク構造

1, Fe が主
2, As(Fe)が主
3, Lnが主

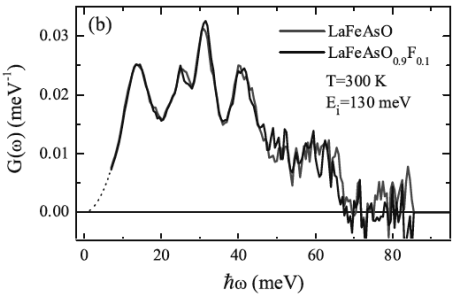
$BaFe_2As_2$: X-ray

Reznik et al, arxiv:0810.4941



LaFeAsO Neutron

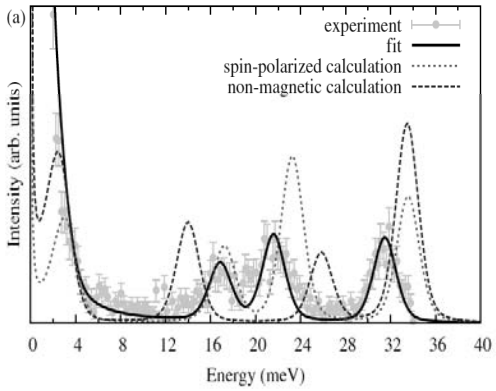
Christianson et al, PRL(2008)



フォノン機構は可能か？

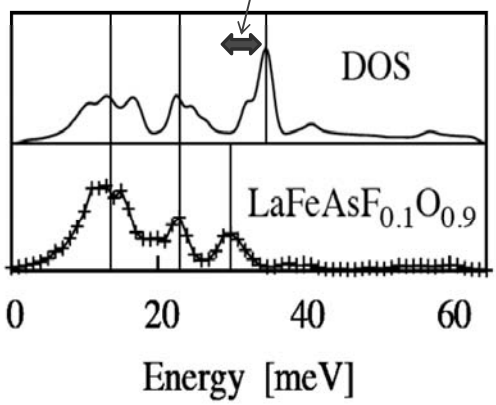
- 計算結果との違い

$CaFe_2As_2$: Hahn et al, PRB79(2009)
Q=(0,0,5.75)



~5meV

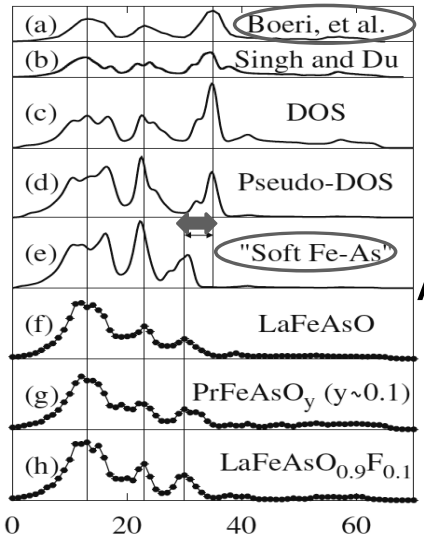
Fukuda et al, JPSJ(2008)



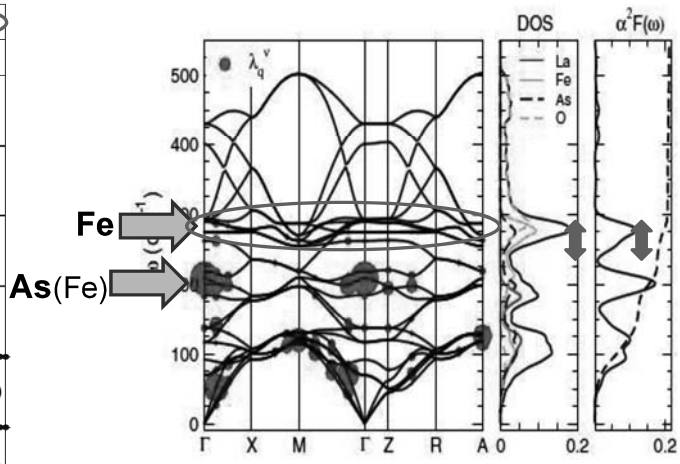
計算結果よりFe, Fe-Asに関連する振動がソフト化
※Bonding (C.Screening, Orbitals, Spins)状態の再現に失敗

フォノン機構は可能か？

- 計算結果との違い



Fukuda et al, JPSJ(2008)

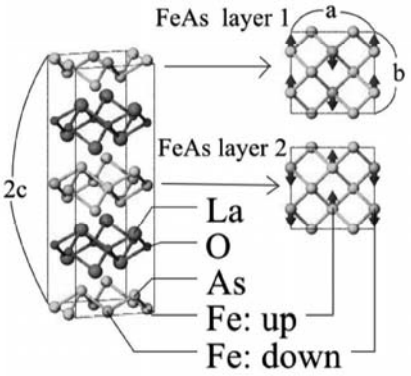


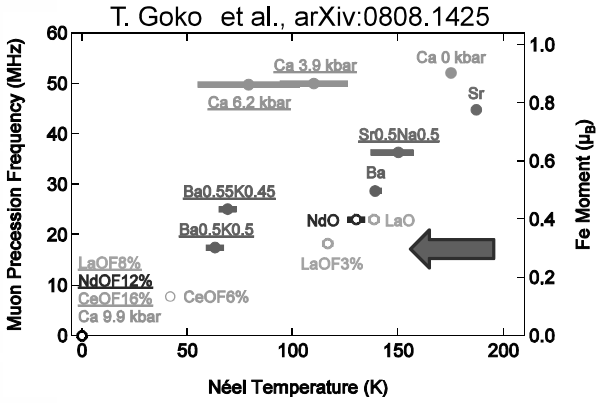
Boeri et al, PRL(2008)

Boeri et al, PRL(2008) ⇒ Weak e-p Coupling ?
※<u>強いe-p Coupling の可能性が否定できない！</u>

フォノン機構は可能か？

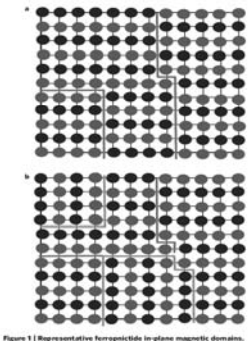
- 何が問題か？（スピン自由度の考慮）





実験で観測されたAFMを再現
（但し、モーメントは大きい）

Mazin et al.	exp	LDA	1.8
Ishibashi et al.	opt	GGA	2.00
	exp	GGA	2.12
Our result	opt	GGA	1.99

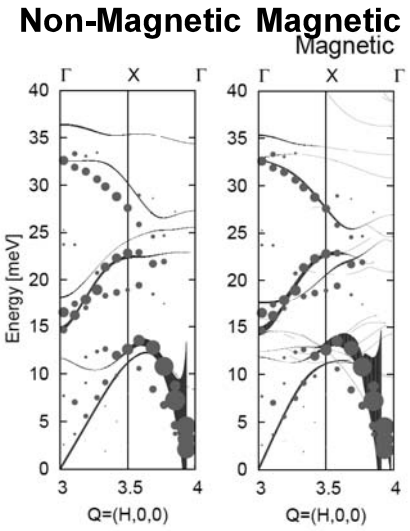


＊ドメインの揺らぎ
Mazin et al. Nature Phys(2008)

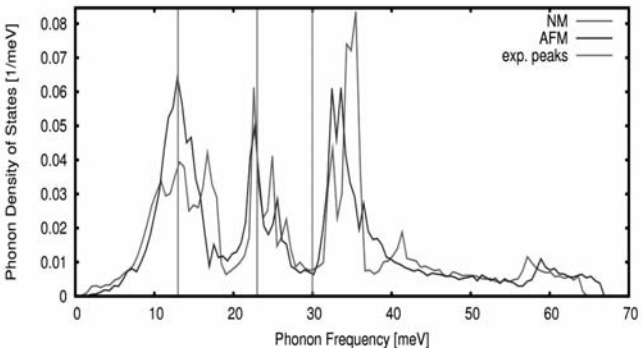
＊格子の揺らぎ
↓
スピンの揺らぎ
Machida et al.
JPS meeting (2008)

フォノン機構は可能か？

- スピン自由度の考慮　⇒　実験を良く再現



1111系



磁気モーメントを持つ基底状態の格子励起
⇒　実験の格子励起構造を良く再現する。

フォノン機構は可能か？

- スピン自由度を考慮したe-p Couplingの見積もり
  - ・困難な計算（収束が困難）

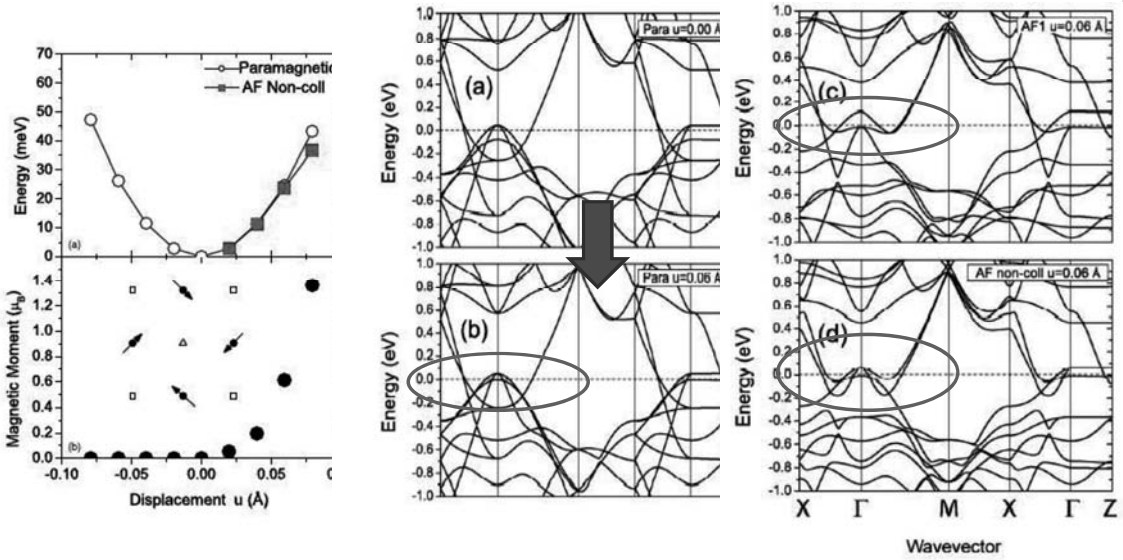
    低対称性→計算量大

  - ・Boeri et al. (from Mazin) e-p Coupling 60% Up

    Mazin's talk in ISS09

フォノン機構は可能か？

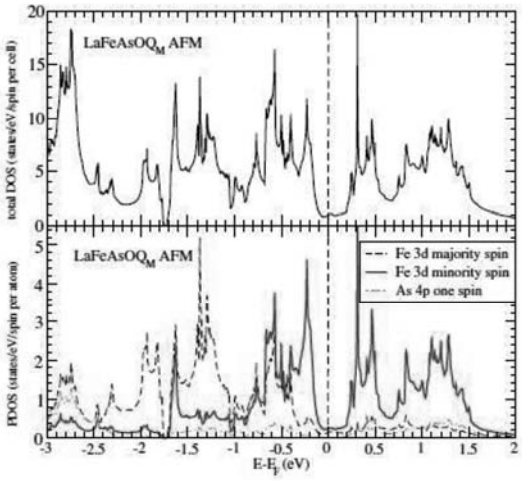
- フォノン機構の可能性を指摘する理論 F.Yndurain et al., PRB(2009)



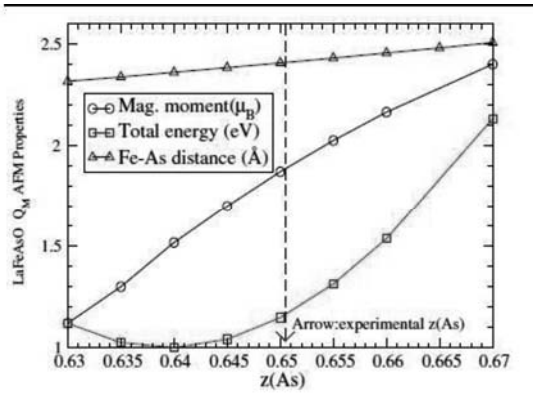
As（Out-of-Plane) 位置変動 ➡ 電子状態の大きな変化

フォノン機構は可能か？

- フォノン機構の可能性を指摘する理論



Z.P.Yin et al. PRL(2008)



Majority Spin ➡ バンドの深い場所にヒ素との結合

Minority Spin ➡ Fermi 面周辺

As位置の磁気モーメント変化

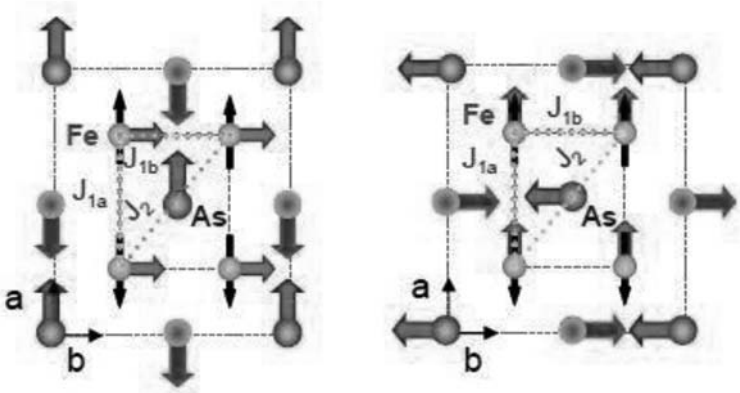
6.8μB/ Å

0.68μB/ 0.1 Å

フォノン機構は可能か？

- フォノン機構の可能性を指摘する理論

Chauviere et al. arXiv 0906.4569



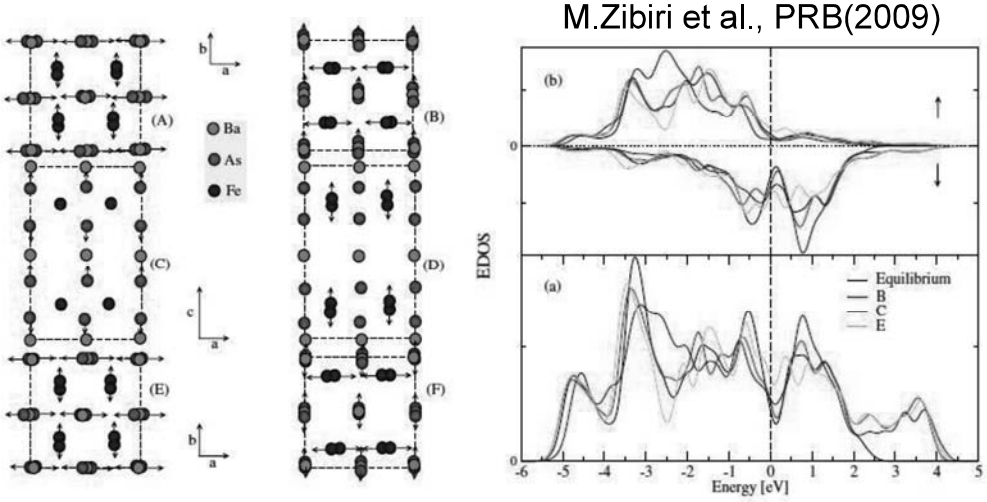
As
- J_{1a} 反強磁性
- J_{1b} （強磁性）
- J_2 反強磁性

As（In-Plane) 位置変動 ➡ 超交換相互作用 フラストレーション

フォノン機構は可能か？

- フォノン機構の可能性を指摘する理論

M.Zibiri et al., PRB(2009)

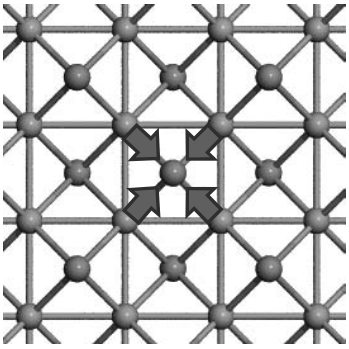


0.05Åシフト ⇒ 1フォノン励起　　Type E : 1.94μB ⇒ 1.58μB

凍結フォノン ➡ スピンモーメントの大きな変化
フェルミ面状態密度の大きな変化

フォノン機構は可能か？

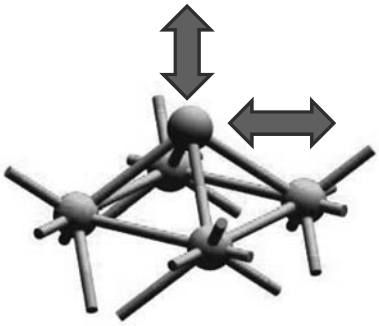
Breathing Mode (Fe)



Q=(π,π)　　++S-wave

強い電子・格子相互作用

Out-of-Plane
In-Plane **(As)**



強い磁気・格子相互作用

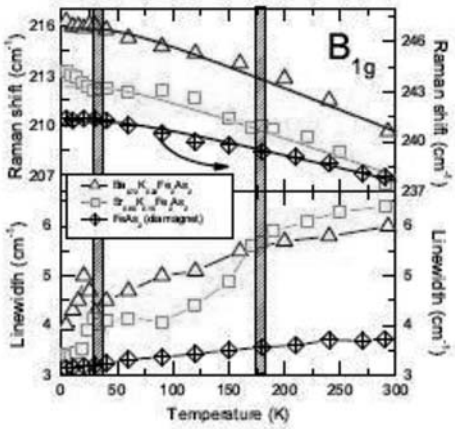
※常磁性状態の計算では出てこない

フォノン機構は可能か？

- 電子フォノン結合の強さを明示する実験

K.Y.Choi et al., arXiv0908.4364

SrFe2As2



B1g – Phonon (Eschrig)

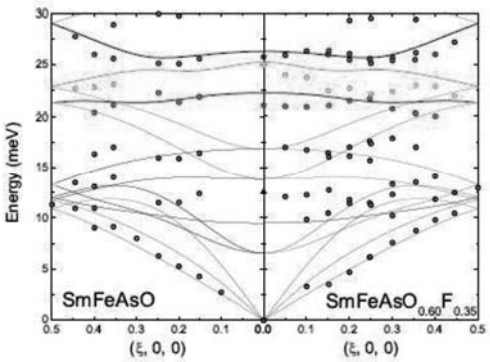
弱い電子フォノン結合を示唆

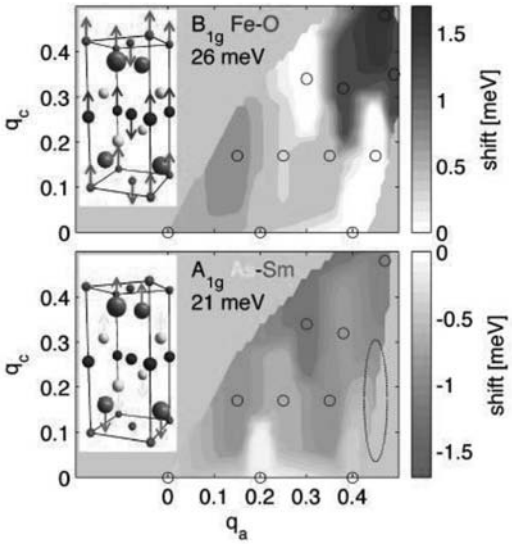
超伝導転移によるソフト化

フォノン機構は可能か？

- 電子フォノン結合の強さを指摘する実験

M.Le Tacon et al., arXiv0909.0913





ドーピングによるRenormalization

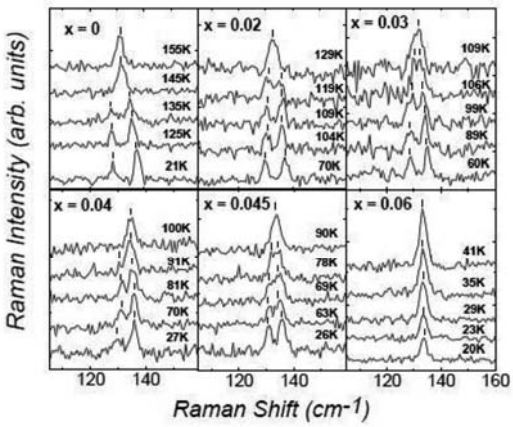
In-Phase A1g
Magnetic Sub-lattice → 強い結合

強いスピン・フォノン相互作用

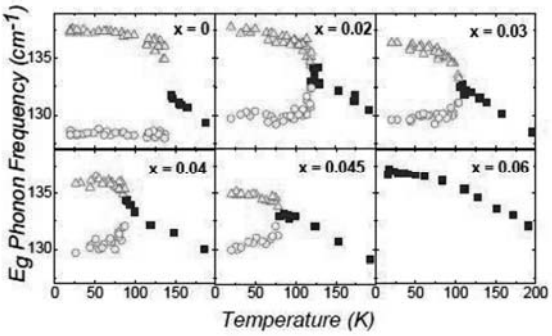
フォノン機構は可能か？

- 電子フォノン結合の強さを指摘する実験

Ba(Fe1-xCox)2As2



L.Chauviere et al., arXiv0906.4569



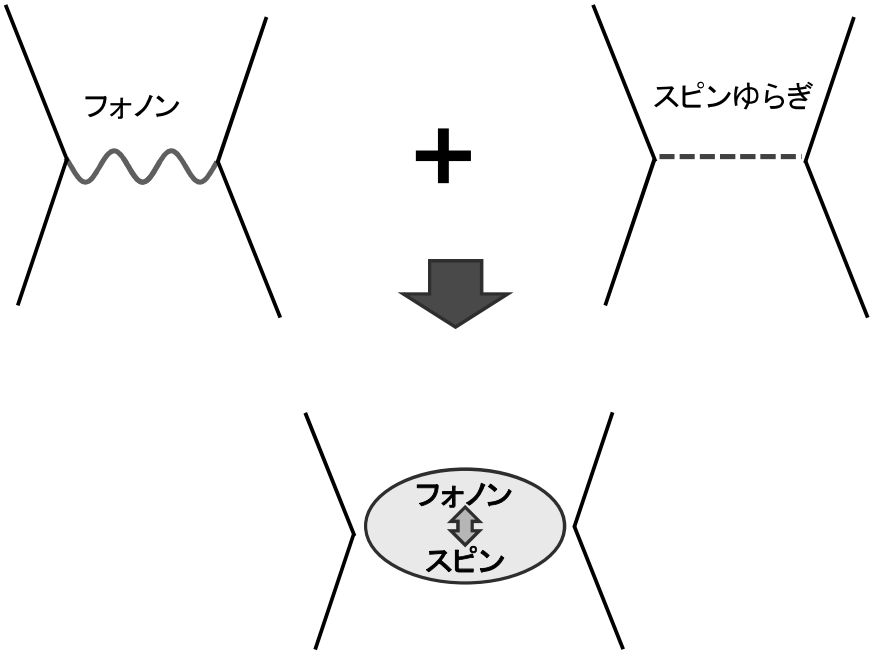
構造相転移に伴う異常なフォノン・ダイナミクス変化

↓

強いスピン・フォノン相互作用

今後の機構解明について

- 強いスピン・フォノン結合



強いスピン・フォノン相互作用

This is a blank page.

14. $PrFeAsO_{1-y}$の角度分解光電子分光

東大理 [A], 東大新領域 [B], JST-TRIP[C], 高エネ研 PF[D], スタンフォード大 [E], 原子力機構 [F], 産総研 [G]

西一郎[A], W. Malaeb[B], 吉田鉄平 [A,C], 藤森淳 [A], 小谷佳範 [D], 久保田正人 [D], 小野寛太 [D],
M. Yi[E], D. H. Lu[E], R. Moore[E], Z.-X. Shen[E],
石角元志 [C,F,G], 伊豫彰 [C,G], 木方邦宏 [C,G], 鬼頭聖 [C,G], 永崎洋 [C,G], 社本真一 [C,F]

$LaFeAsO_{1-x}F_x$における超伝導が発見 [1] されて以来、鉄を含む様々な化合物の超伝導機構について研究が加速している。フェルミ面のトポロジーやフェルミ準位近傍のバンド分散を決定する上で角度分解光電子分光（ARPES）は強力な手法であるが、結晶構造 122 系の鉄砒素超伝導体については精力的に ARPES の結果が報告されている一方で、1111 系の報告は少ない。1111 系は 122 系よりも比較的高い超伝導転移温度（T_c）を有することが知られており、鉄砒素超伝導体における高い T_c の起源を解明する上で、122 系のみならず、1111 系化合物に対しても ARPES を適用することが重要である。

1111 系鉄砒素超伝導体 $PrFeAsO_{1-y}$ は y = 0.15 において T_c = 43K を示す [2]。本研究では $PrFeAsO_{1-y}$ の y = 0.3 および y = 0 について ARPES を行い、図 1 に示すフェルミ面を得た。いずれも $k_F \sim 0.6\ (\pi/a)$ の大きなホール型フェルミ面が観測されており、これらはホールが過剰にドープされた電子状態を反映している。この特徴は過去の 1111 系 ARPES [3, 4] においても見られ、表面状態の可能性がある。本発表では、エネルギーギャップの有無、バンド分散の比較、およびフェルミ面の 3 次元性について報告する予定である。

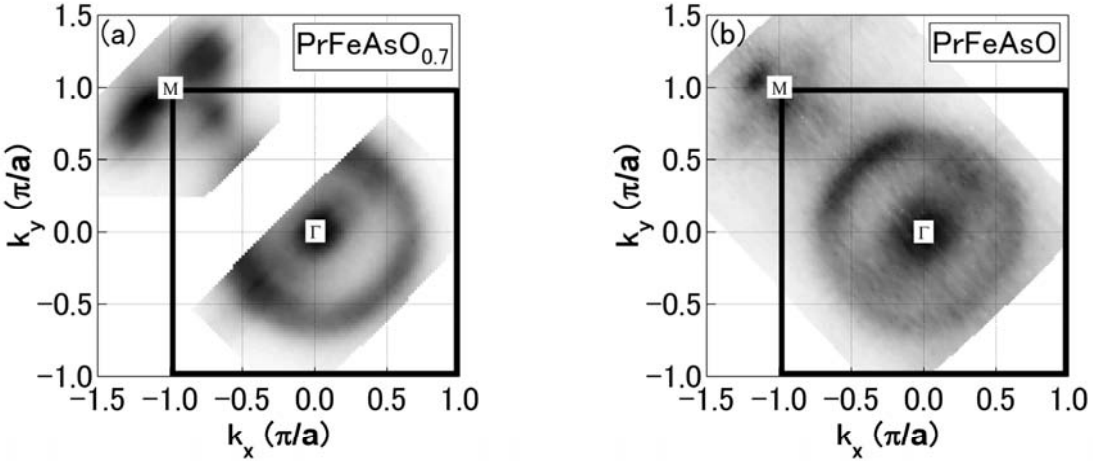


図 1: $PrFeAsO_{1-y}$ のフェルミ面。(a) y = 0.3 (b) y = 0

参考文献

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

[2] Z.-A. Ren *et al.*, Europhys. Lett. 83, 17002 (2008).

[3] D. H. Lu *et al.*, Nature 455, 81 (2008).

[4] T. Kondo *et al.*, Phys. Rev. Lett. 101, 147003 (2008).

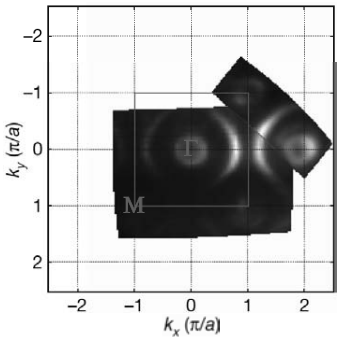
$PrFeAsO_{1-y}$の角度分解光電子分光

西一郎, W. Malaeb, 吉田鉄平*, 藤森淳 — *東大理, 東大新領域*
小谷佳範, 久保田正人, 小野寛太 — *高エネ研 PF*
M. Yi, D. H. Lu, R. Moore, Z.-X. Shen — *スタンフォード大学*
伊豫彰*, 木方邦宏*, 鬼頭聖*, 永崎洋* — *産総研*
石角元志* — *原子力機構, 産総研*
社本真一* — *原子力機構*
有田亮太郎* — *東大工, JST-CREST*
**JST-TRIP*

2009年11月28日
鉄系高温超伝導体研究の最前線
ポスタープレビュー

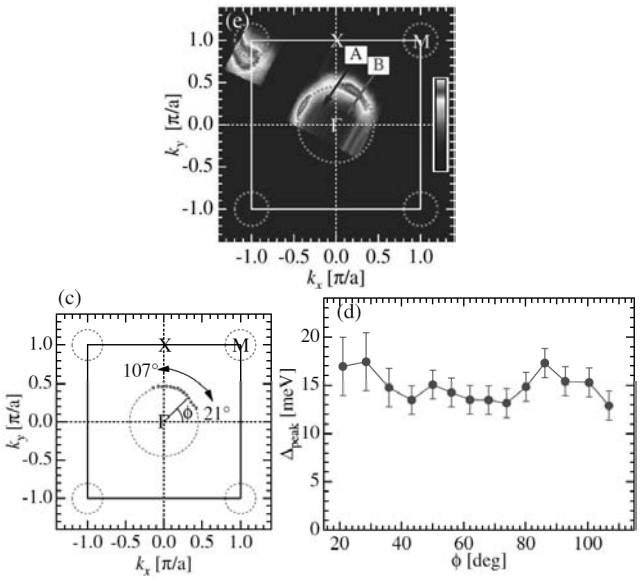
Previous ARPES studies of 1111 system

LaFePO



D. H. Lu *et al.*, Nature **455**, 81 (2008).

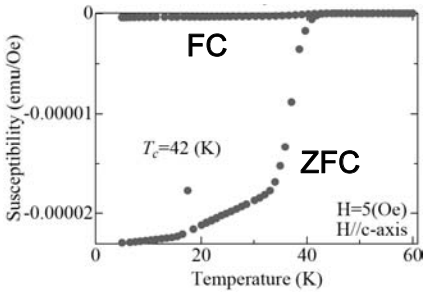
$NdFeAsO_{0.9}F_{0.1}$

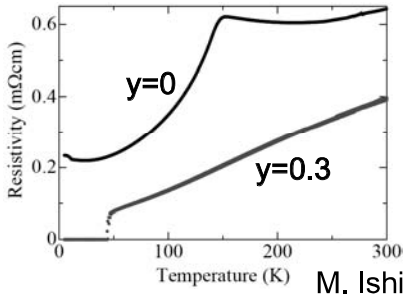


T. Kondo *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 147003 (2008).

Samples and experimental conditions

Single crystals of $PrFeAsO_{1-y}$ (y=0.3, 0)
High-pressure synthesis method
T_c = 42 K for y=0.3

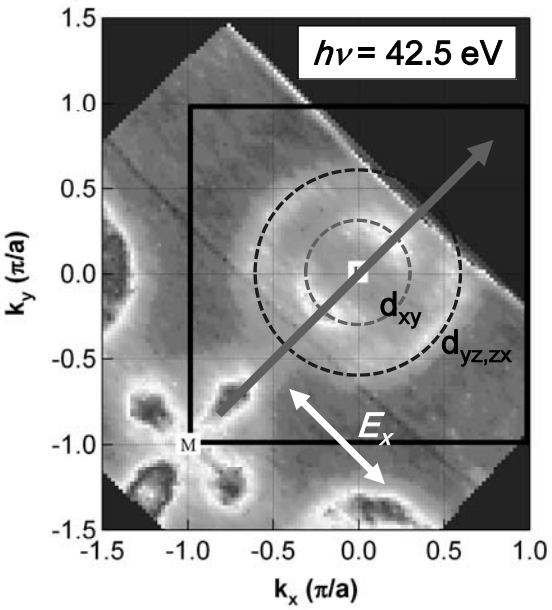


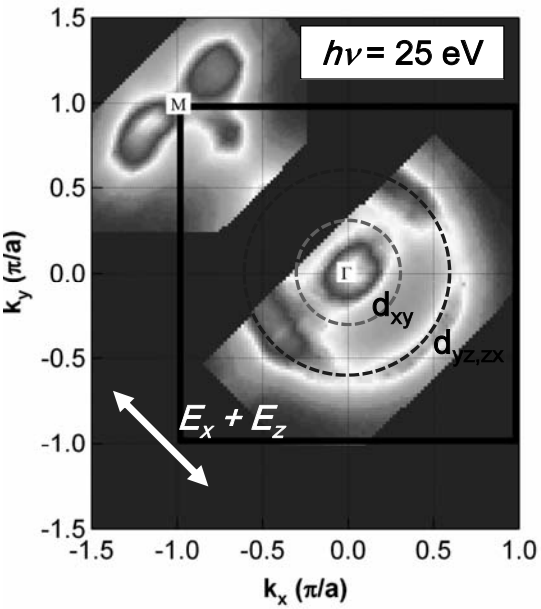


M. Ishikado

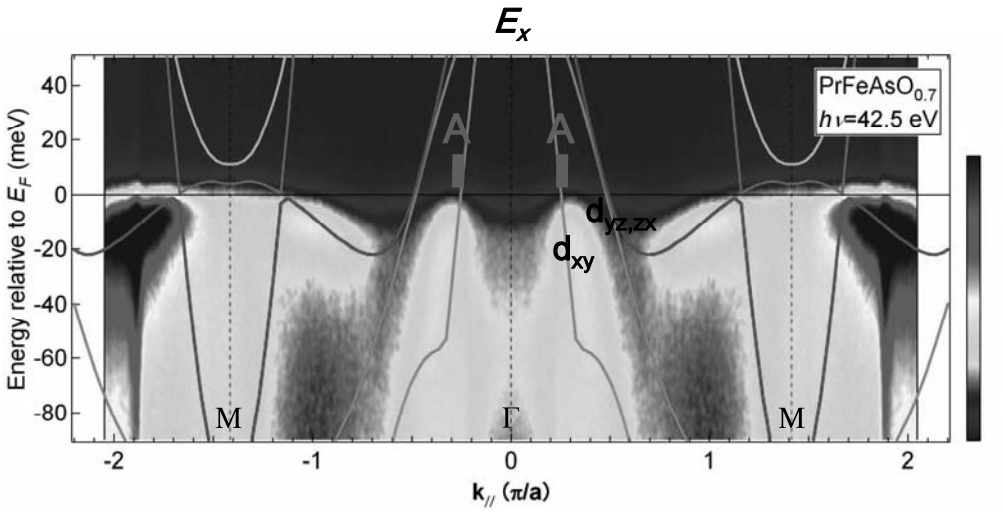
- •Light source Photon Factory, SSRL, ALS
- •Photon energy $h\nu$= 25~80 eV
  Linearly-polarized beam, circularly-polarized beam
- •Measuring temperature T= 10 K
- •Scienta analyzer SES-R4000 or SES-2002
- •Energy resolution 10~15 meV
- •Angular resolution ~0.2°

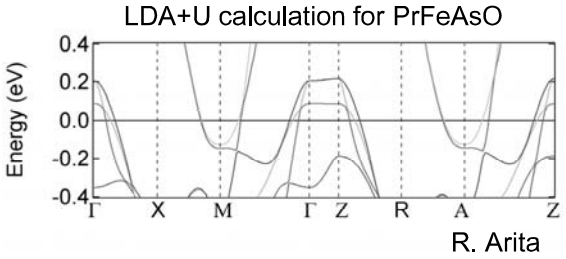
Fermi surfaces of $PrFeAsO_{0.7}$





Bands near E_F in $PrFeAsO_{0.7}$



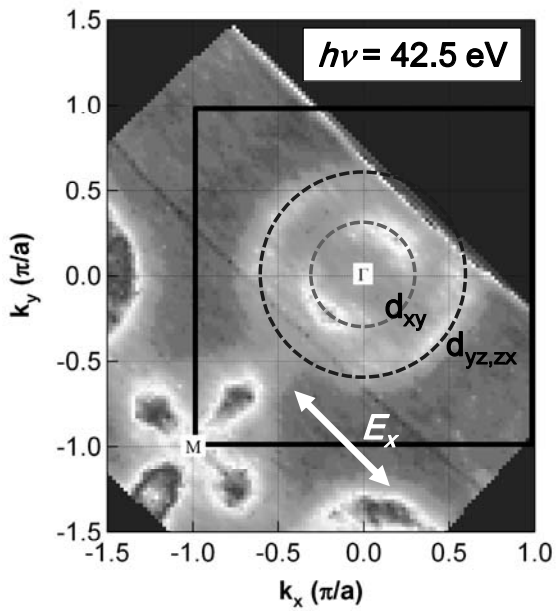


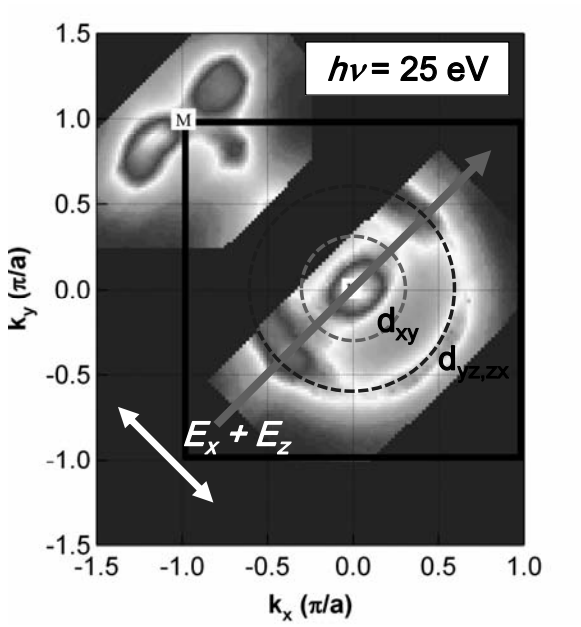
R. Arita

A : k_F of d_{xy} band ~ 0.3 (π/a)

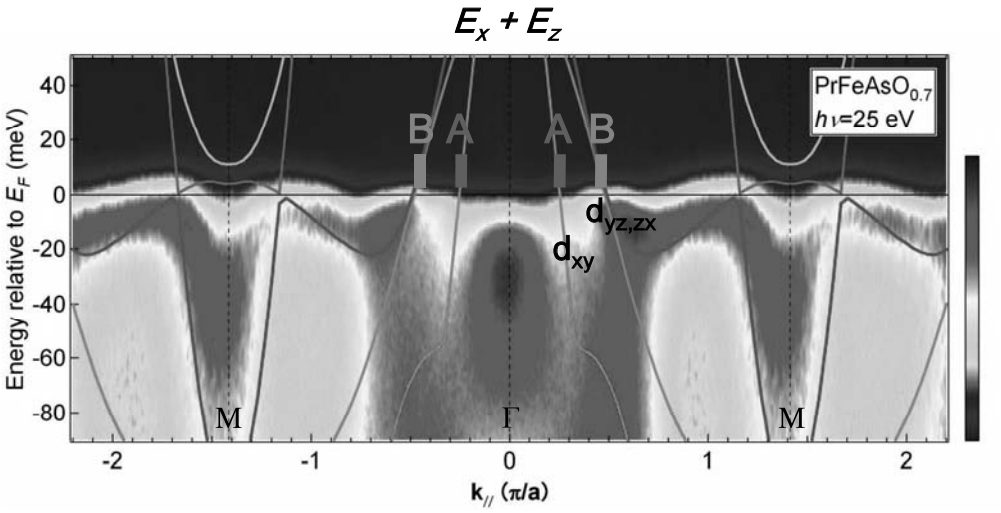
m^*/m_b ~ 3.0
Energy shift ~ 50 meV

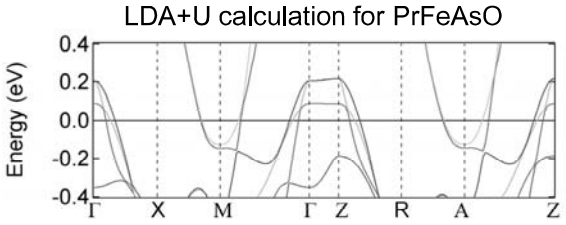
Fermi surfaces of $PrFeAsO_{0.7}$





Bands near E_F in $PrFeAsO_{0.7}$





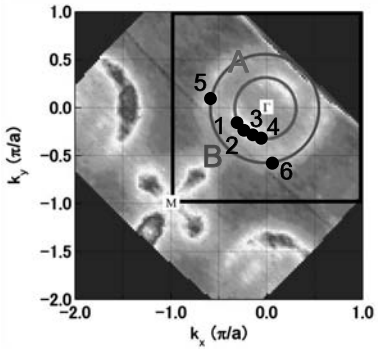
R. Arita

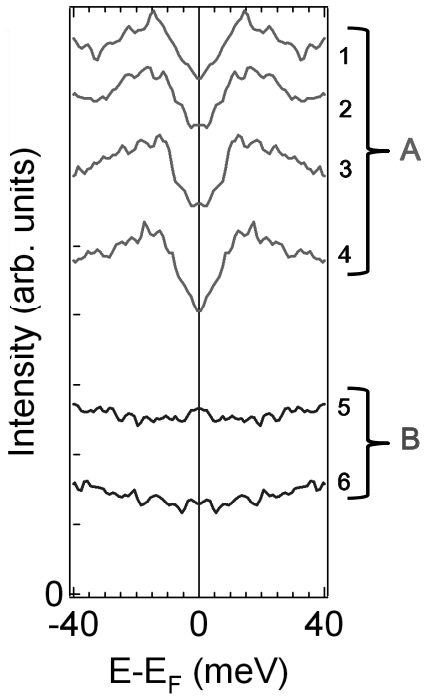
A : k_F of d_{xy} band ~ 0.3 (π/a)
B : k_F of $d_{yz, zx}$ band ~ 0.6 (π/a)

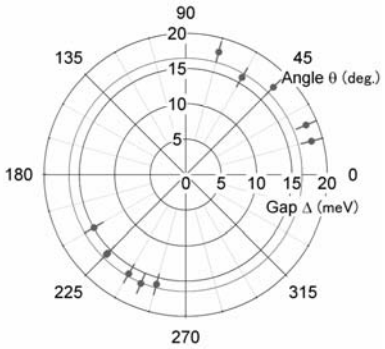
m^*/m_b ~ 3.0
Energy shift ~ 50 meV

Gap size and symmetry of $PrFeAsO_{0.7}$

$h\nu$ = 42.5 eV T = 10 K







A : k_F of d_{xy} band
B : k_F of $d_{yz, zx}$ band

Δ=16.5 meV
$2\Delta / k_B T_c$= 9.1

Peak and gap are observed on Fermi surface A (d_{xy}) while they are not observed on B (d_{yz} , d_{zx}).

Summary

We have performed a high-resolution ARPES study of $PrFeAsO_{1-y}$ (y=0.3, 0) to investigate Fermi surface and energy gap.

• Large hole-like Fermi surface around Γ (~ 0.6 π/a) and small one (~ 0.3 π/a) are assigned to $d_{yz, zx}$ and d_{xy}, respectively.

• Peaks and gaps have been observed on the small hole-like Fermi surface around Γ (~ 0.3 π/a). The gap is nearly isotropic and has magnitude of $2\Delta / k_B T_c$ ~ 9.

• No gap has been observed on the large hole-like Fermi surface around Γ (~ 0.6 π/a).

15. NMR Study on $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$

京大院理 [A]、JST-TRIP [B]、京大低温物質科学研究センター[C]
中井祐介 [A,B], 家哲也 [A,B], 北川俊作 [A,B], 石田憲二 [A,B],
笠原成 [C], 芝内孝禎 [A], 松田祐司 [A], 寺嶋孝仁 [C]

NMR study on $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$

Kyoto University [A], JST-TRIP [B],
Research Center for Low Temperature and Materials Sciences [C]
Y. Nakai [A,B], T. Iye [A,B], S. Kitagawa [A,B], K. Ishida [A,B],
S. Kasahara [C], T. Shibauchi [A], Y. Matsuda[A], T. Terashima [C]

122 系の $BaFe_2As_2$ において、As を P に置換した $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ で超伝導が報告され、注目を集めている。この系では、P 置換によって電子数を変化させることなく、反強磁性および構造相転移を抑制し、最高で T_c = 31K の超伝導が現れる [1, 2]。興味深い性質の一つとして、T_c が最大となる領域での非 Fermi 液体的振る舞いが挙げられる。例として、電気抵抗ρは、反強磁性相境界の T_c が最大付近の試料において、200K 以下 T_c までの広い温度域にわたり $\rho \propto T$を示し、P を高濃度にするにしたがって、$\rho \propto T^2$ の振る舞いに移り変わっていくことが報告されている [1]。我々は、T_c が最大付近の x = 0.33 における試料で、核スピン格子緩和率 $(T_1T)^{-1}$を測定した。その結果、$(T_1T)^{-1}$ が T_c に向かって増大し続け、低励起の反強磁性ゆらぎの存在を示していることを明らかにした (図 1) [3]。この反強磁性ゆらぎの増大は、電気抵抗に見られる非 Fermi 液体的振る舞いや、dHvA 実験で見られる、反強磁性相境界に近づくにつれ、有効質量が発散的に増大する振る舞いとも関連していると考えられる [4]。発表では、x = 0.33 における NMR 実験の詳細と他の P 濃度における結果、および 1111 系との比較についても議論したい。

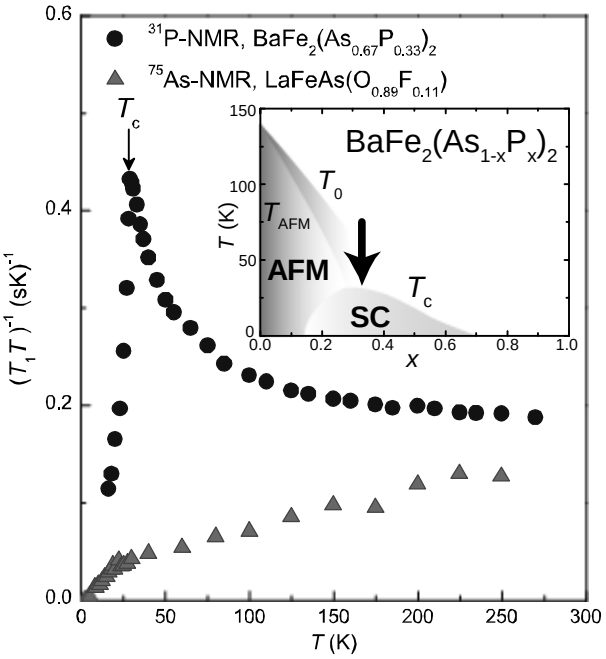


図 1. $BaFe_2(As_{0.67}P_{0.33})_2$ における P 核の $(T_1T)^{-1}$ の温度依存性。比較のために $LaFeAs(O_{0.89}F_{0.11})$の結果も合わせて示している。Inset: $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ の相図。矢印は $BaFe_2(As_{0.67}P_{0.33})_2$ を示す。

[1] S. Kasahara *et al.*, arXiv:0905.4427.
[2] K.Hashimoto *et al.*, arXiv:0907.4399.
[3] Y. Nakai *et al.*, arXiv:0908.0625.
[4] H. Shishido *et al.*, arXiv:0910.3634.

鉄系高温超伝導体研究の最前線
「メカニズムおよび物性のレビューと展望」

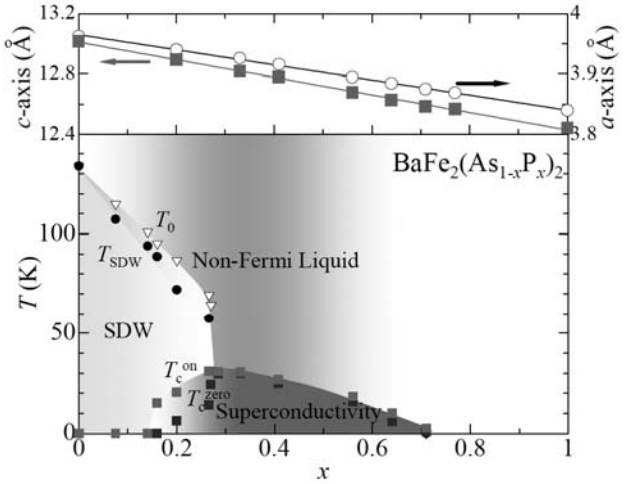
NMR study on $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$

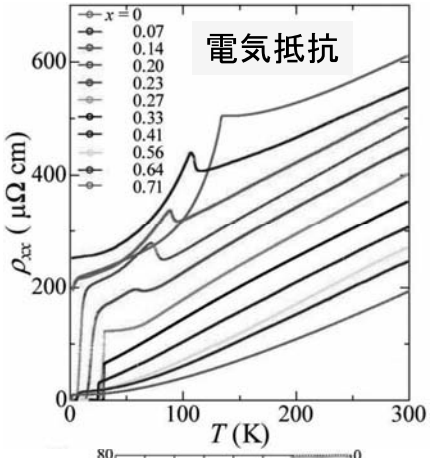
中井祐介[1,2], 家哲也[1,2], 北川俊作[1,2], 石田憲二[1,2],
笠原成[3], 芝内孝禎[1], 松田祐司[1], 寺嶋孝仁[3]

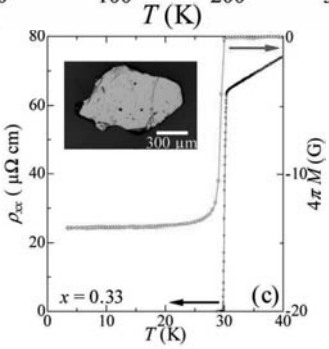
[1]京都大学大学院理学研究科,
[2]JST – TRIP,
[3]京都大学低温物質科学研究センター

P-substituted superconductors $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$

S. Kasahara *et al.*, arXiv:0905.4427.



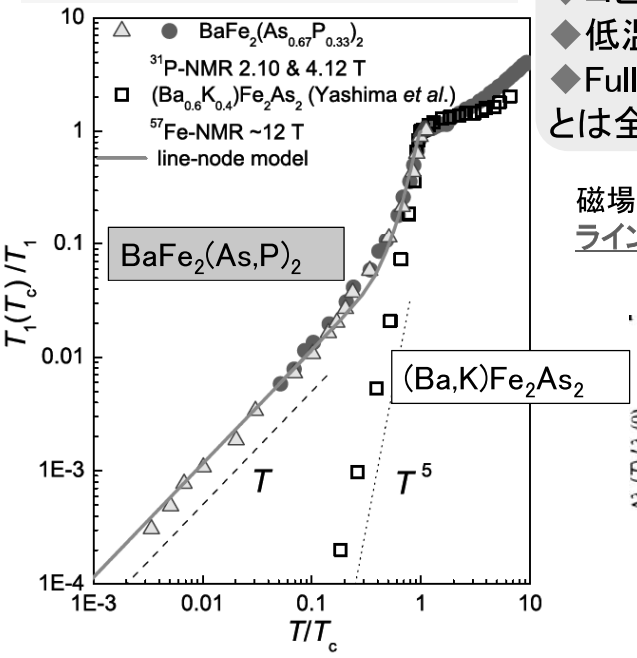




◆等価数置換であるP置換によって高いT_Cを実現: T_c =30 K
◆良質な単結晶 (dHvA測定が可能)

Possible line-nodes in the SC gap in $BaFe_2(As_{0.67}P_{0.33})_2$

^{31}P 核スピン格子緩和利率1/T_1

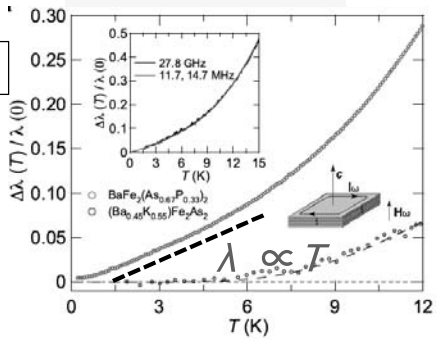


Nakai *et al.*, arXiv:0908.0625.

◆コヒーレンスピークが見られない
◆低温で1/T_1∝ T→残留状態密度の存在
◆Full-gapが示唆される(Ba,K)Fe_2As_2とは全く異なる1/T_1の温度依存性

磁場侵入長、熱伝導率の結果と合わせると
ラインノードの存在とコンシステント

磁場侵入長 λ ∝T



Hashimoto *et al.*, arXiv:0907.4399.

16. 電荷励起から見た鉄砒素系超伝導物質における磁気秩序状態

京大基研 [A]、JST-TRIP [B]
兼下英司 [A], 森成隆夫 [A], 遠山貴己 [A,B]

Abstract Title of Front Line on Iron Based High-T_c Superconductor Research

Kyoto Univ. YITP [A], JST-TRIP [B]
Eiji Kaneshita[A], Takao Morinari[A], Takami Tohyama[A,B]

鉄系超伝導物質における磁気秩序状態に関して，数値計算によって得られた光学伝導度を基に議論する．この物質系では，磁気励起についてはよく調べられているが, 電荷励起に関してはまだよく理解されていない. このような事情を考慮して，本研究を行った.

一般に，光学伝導度には電子のバンド間遷移を反映した励起構造が現れる．したがって，鉄系超伝導物質の光学伝導度を調べることで，電子構造と励起に関する重要な情報を得ることができる．例えば，磁気秩序状態と非磁性状態とのバンド構造の違いが明確に現れるので，それを基に秩序化による電子状態の変化などについて詳しく調べた.

計算では，5 バンドのタイトバインディングモデルハミルトニアン [1] にオンサイトの電子間相互作用を導入した以下のモデルハミルトニアンから出発し，平均場近似によって SDW の秩序パラメータを決定した.

$$
\begin{aligned}
H \;=\; & H_0 + U \sum_i \sum_\mu c^\dagger_{i\mu\uparrow} c_{i\mu\uparrow} c^\dagger_{i\mu\downarrow} c_{i\mu\downarrow} + \frac{1}{2}\left[(U-2J) - \frac{J}{2}\right] \sum_i \sum_{\mu\neq\nu} \sum_{\sigma,\sigma'} c^\dagger_{i\mu\sigma} c_{i\mu\sigma} c^\dagger_{i\nu\sigma'} c_{i\nu\sigma'} \\
& - J \sum_{\mu\neq\nu} \mathbf{S}_\mu \cdot \mathbf{S}_\nu + J' \sum_i \sum_{\mu\neq\nu} c^\dagger_{i\mu\uparrow} c_{i\nu\uparrow} c^\dagger_{i\mu\downarrow} c_{i\nu\downarrow}
\end{aligned}
$$

非磁性状態と磁気秩序状態の 2 つの状態を計算し，光学伝導度を求めた．それぞれの状態においてバンド間遷移から来る励起が見られ，特に，磁気秩序状態では実験 [2] で観測されているような低エネルギー領域での励起ピークが現れることを確認した．これらの結果を基に，磁気秩序転移に伴う電子状態，及び励起構造の変化について実験と比較し，弱い磁気秩序を示す状態が実験とよく合うことを発見した．さらに，このモデルに対して面間磁気抵抗の計算を行い，その磁場依存性に特徴的な振る舞いを見出した.

参考文献

[1] K. Kuroki et al., Phys. Rev. Lett. 101 (2008) 087004.
[2] W. Z. Hu et al., Phys. Rev. Lett. 101 (2008) 257005.

Poster Preview

電荷励起から見た
鉄砒素系超伝導物質における磁気秩序状態

E. Kaneshita (YITP at Kyoto Univ.)

Collaborators: T. Morinari (YITP at Kyoto Univ.)
T. Tohyama (YITP at Kyoto Univ.)

To be published in PRL (Preprint: arXiv:0909.1081)

Poster Preview

Research Topic

鉄砒素超伝導体母物質における Striped AF state

磁気秩序状態はどのような状態か？
これを記述する妥当なモデルは？

interband transition による電荷励起の観点から考察
平均場計算と光学伝導度実験との比較から

Poster Preview

Discrepancy in magnetic moment

Magnetic moment in the iron pnictides

$M \sim 2\mu_B$ First-principles calculations
(strong order)

$M < 1\mu_B$ Experiments (neutron scattering, etc.)
(weak order?)

Models

- weak order model vs. strong order model.
- 平均場計算によってこれらの状態を考察する.

What to investigate

- weak order model によって記述される状態の性質.
- 実験との対応.

Poster Preview

Conclusion from optical conductivity calculation

The weak order model → Good agreement with experiments. ⇨ Valid model

The strong order model (=band calculations) → No good agreement.

Prediction in interlayer magnetoresistance

Field dependence → Down & Up behavior

Angle dependence → Double-peak structure at 8T

17. ± s 波超伝導体における渦糸コア中の不純物散乱率

東大理 [A]、JST-TRIP [B]、東大総合文化 [C]
永井佑紀 [A,B], 加藤雄介 [A,B]

Impurity Scattering Rate in Vortex Core of ±s-wave Superconductors

University of Tokyo [A], JST-TRIP [B],
Yuki Nagai[A,B], Yusuke Kato[A],

鉄系超伝導体で実現されている超伝導対称性の候補のひとつに、異なるフェルミ面間で超伝導ギャップの符号が異なる s 波超伝導（±s波超伝導）がある。実験的に±s波超伝導を確認するためには、超伝導秩序変数の位相に敏感な測定手段を用いる必要がある。その測定手段の一つに、STM/STS による準粒子干渉効果の測定がある。この実験では、不純物散乱によるコヒーレンス因子を検出できると言われている[1]。そこで我々は、さまざまな超伝導対称性を仮定して、複数のフェルミ面を持つ超伝導体の渦糸コア中でのAndreev 束縛状態間の不純物散乱率を準古典近似で計算した。その結果、複数のフェルミ面を持つマルチバンド系においては、渦糸コア中でシングルバンド系では起きない不純物散乱プロセスがあることを見出した。この不純物散乱プロセスは、似たような形状の複数のフェルミ面を持ちそれらの間で超伝導ギャップの符号が異なる場合に、より顕著に現れることがわかった。したがって、磁場を印加して渦糸コア中にAndreev束縛状態が見える系において準粒子干渉効果の測定を行うことができれば、実現している超伝導対称性が±s波かどうかを検証することができる。

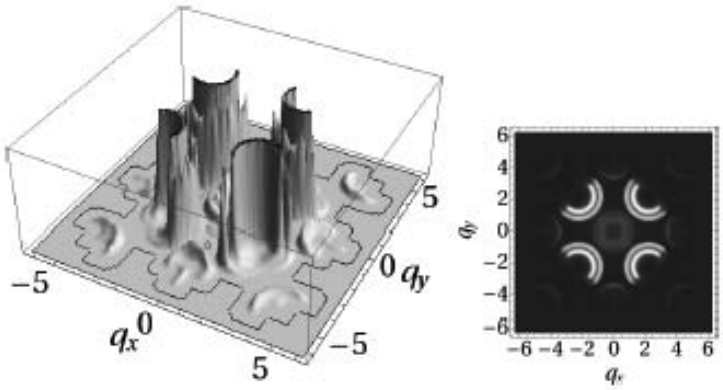


図１． ± s 波超伝導体の渦糸コア中の不純物散乱率の q 依存性[2].

参考文献

[1] T. Hanaguri, Y. Kohsaka, M. Ono, M. Maltseva, P. Coleman, I. Yamada, M. Azuma, M. Takano, K. Ohishi, and H. Takagi, Science **323** 923 (2009).
[2] YN, and YK, arXiv:0908.4451

±s波超伝導体における渦糸コア中での不純物散乱率

YN and Y. Kato, arXiv:0908.4451

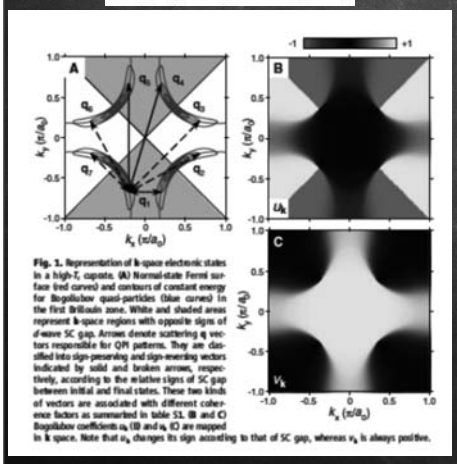
イントロダクション

STM/STSによる準粒子干渉効果（QPI）の観測により超伝導秩序変数の位相の情報が得られる

銅酸化物超伝導体でのd波超伝導のコヒーレンス因子の観測に成功

T. Hanaguri et al., Science **323** 923 (2009)

$Ca_{2-x}Na_xCuO_2Cl_2$



d波超伝導の場合

低エネルギー励起が存在するので、準粒子が不純物等に散乱されQPIが生じる

±s波超伝導の場合は？

ギャップが空いているので、単純に考えると低エネルギーでのQPIの起源が不明

磁束を導入しその周りにできる束縛状態ならわかりやすい

±s波超伝導体における渦糸コア中での不純物散乱率

YN and Y. Kato, arXiv:0908.4451

結果

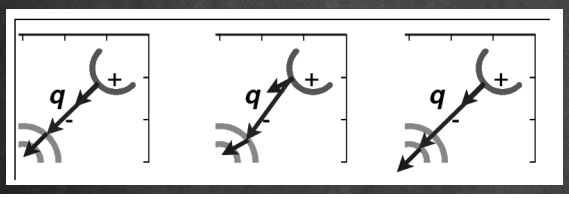
渦糸近傍のAndreev束縛状態の不純物散乱率を計算した

準古典近似を使用

Kramer-Pesch近似を使用

Kramer and Pesch, Kopnin, Kato and Hayashi.

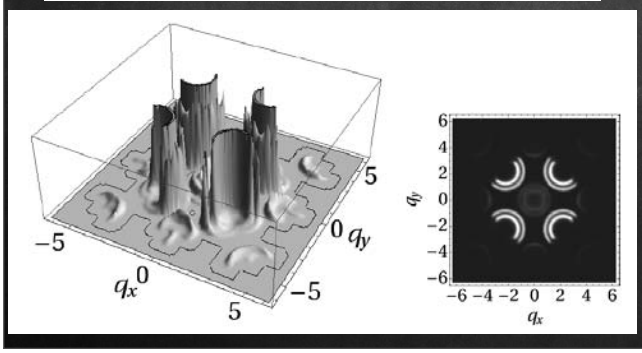
符号反転"前方"散乱が重要



不純物散乱率

符号保存散乱 $\Gamma_{k,k'} \propto \frac{1-\cos(\theta_v-\theta_{v'})}{|\sin(\theta_v-\theta_{v'})|}.$

符号反転散乱 $\Gamma_{k,k'} \propto \frac{1+\cos(\theta_v-\theta_{v'})}{|\sin(\theta_v-\theta_{v'})|}.$



クリーンな±s波超伝導体では、q空間の非常に広い範囲にわたって散乱強度が強い領域が存在することを示した

クリーンな系で観測できる可能性がある

18. Resonant Inelastic X-ray Scattering in Single-Crystal $PrFeAsO_x$ (x=0.7, 1)

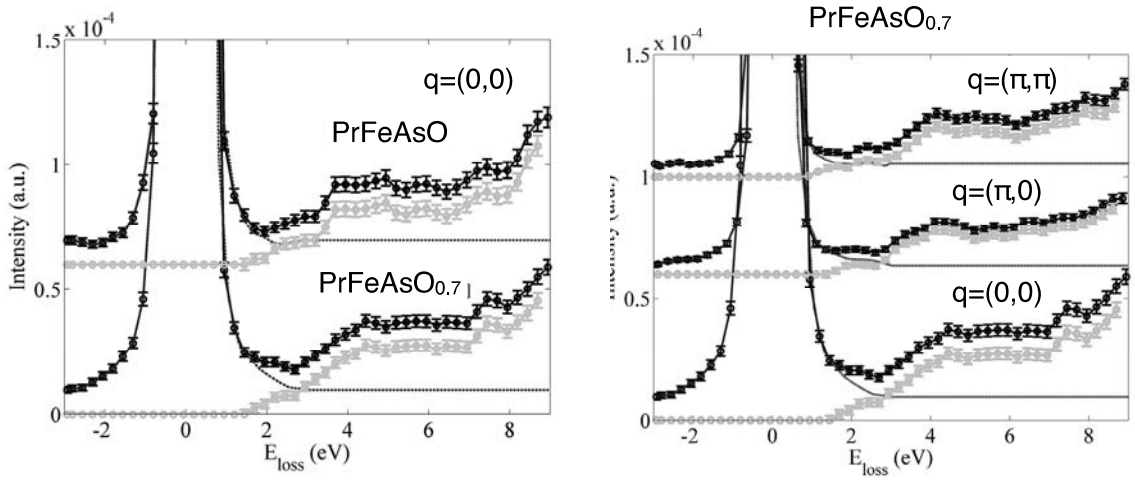
Synchrotron radiation research center, JAEA[A], JST-TRIP [B], RIKEN[C], Quantum beam science directorate, JAEA[D], NSRRC[E], NeRI, AIST[F]
Ignace Jarrige[A,B], Kenji Ishii[A,B], Takuji Nomura[A,B], Masahiro Yoshida[A], Tatsuo Fukuda[A,B,C], Motoyuki Ishikado[B,D], Nozomu Hiraoka[E], Ku-Ding Tsuei[E], Hijiri Kito[B,F], Akira Iyo[B,F], Hiroshi Eisaki[B,F], Shinichi Shamoto[B,F]

A resonant inelastic x-ray scattering (RIXS) measurement was performed at the Fe *K* edge in single crystals of both the underdoped superconductor $PrFeAsO_{0.7}$ (T_c=42 K) and the parent compound PrFeAsO. The dependence of the RIXS spectra upon the incident energy E_1 is observed to be nearly featureless. This is at stark contrast with the usual RIXS signal obtained on the Cu high-temperature superconductors, and may stem from the itinerant nature of the Fe *3d* electrons in the FeAs materials. In the E_1=7124 and 7125 eV spectra, we discern two features centered respectively around 2 and 4 eV which undergo a slight resonant enhancement. Based on a comparison with calculated density of states, we ascribe the 2-eV feature to intersite Fe *dd* excitation and the 4-eV one to the charge-transfer excitation between Fe *3d* and As *4p*. The spectra measured at (0,0), (π,0) and (π,π) suggest that both these excitations are non dispersive.

Resonant inelastic x-ray scattering in single-crystal $PrFeAsO_x$ (x=0.7,1)

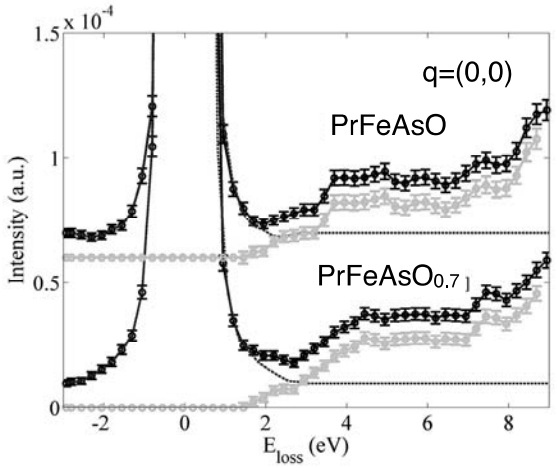
K. Ishii, I Jarrige, T. Nomura, M. Yoshida,
T. Fukuda, M. Ishikado, N. Hiraoka, K.D. Tsuei,
H. Kito, A. Iyo, H. Eisaki, S. Shamoto

RIXS of $PrFeAsO_x$ at Fe K-edge

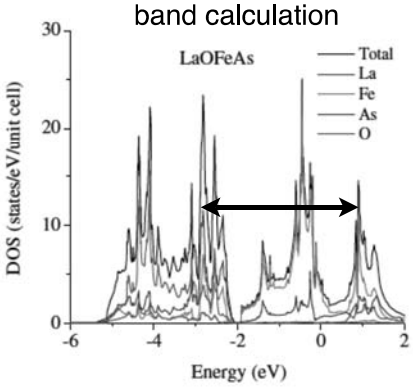


- Excitation at ~ 4 eV
- Doping and momentum dependence is small

Assignment of 4 eV excitation

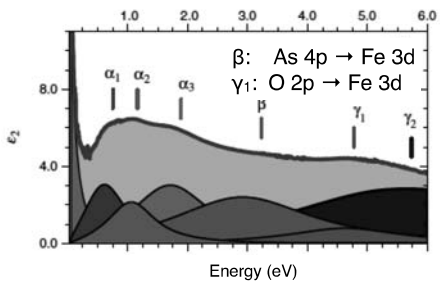


band calculation



S. Ishibashi et al., JPSJ 77, 053709 ('08)

optical conductivity



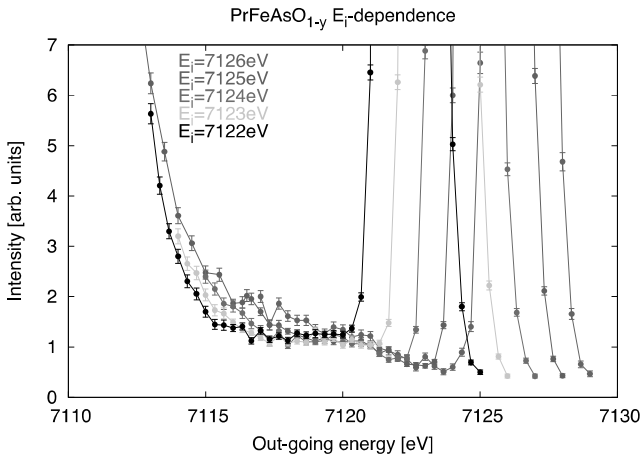
A.V. Boris et al., PRL 102, 027001 ('09)

Excitation at 4 eV

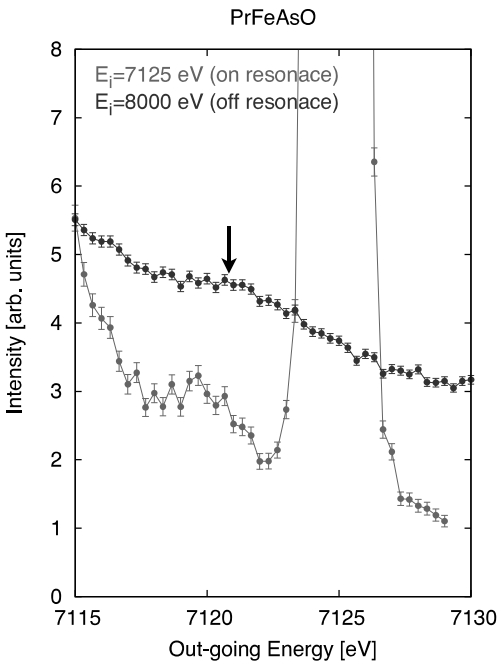
→ • charge transfer excitation from As 4p (O 2p) to Fe 3d

• excitation across the Mott gap (U)

excitation or fluorescence ?



Fluorescence at 7120 eV



19. 2 次元 16 バンド *d-p* 模型による鉄化合物超伝導体の超伝導の理論

新潟大院自然、新潟大理 [A]
柳有起, 山川洋一, 安立奈緒子, 大野義章 [A]

Theory of superconductivity for iron based superconductors
based on the two-dimensional 16-band *d-p* model

Niigata Univ.,
Yuki Yanagi, Youichi Yamakawa, N. Adachi, Y. Ono

2008 年に鉄化合物高温超伝導体が発見されて以来[1]、理論・実験の両面から精力的に調べられているが、超伝導の対称性や発現機構に関しては未だ論争が続いている。そこで、本研究では鉄化合物超伝導体の電子状態を記述する上で現実的な模型である、ユニットセル内にそれぞれ 2 個ずつ存在する Fe の 3*d* 軌道 5×2 個と As の 4*p* 軌道 3×2 個を考慮した 2 次元 16 バンド *d-p* 模型に対して、乱雑位相近似（RPA）を適用することにより、電子状態、及び超伝導について調べた[2]。相互作用としては Fe サイト内における 3*d* 電子間クーロン相互作用（*U*, *U'*, *J*, *J'*）を考慮した。

その結果、*U*>*U'*の領域では $\boldsymbol{q}\sim(\pi,\ \pi)$ の incommensurate なスピン密度波（ISDW）が現れ、その近傍で、ギャップ関数がホール面と電子面で符号を変える *s* 波超伝導、いわゆる $s_{\pm}$波超伝導が現れることが分かった。一方、*U'*>*U* の領域では、強的な軌道秩序（Ferro OO）が現れ、その近傍で、軌道揺らぎを媒介とした *s* 波超伝導が現れることが分かった。この *s* 波超伝導はギャップ関数が波数空間上で符号を変えておらず、前述の $s_{\pm}$波超伝導とは大きく異なったものであるといえる。

上記のように、電子系のみを考慮した計算では、強的な軌道秩序及びその近傍での *s* 波超伝導は *U'*>*U* の領域でしか実現しなかったが、電子格子相互作用により、現実的なパラメータ領域で実現する可能性が考えられる。よって、当日は電子-格子相互作用の効果についても議論する予定である。

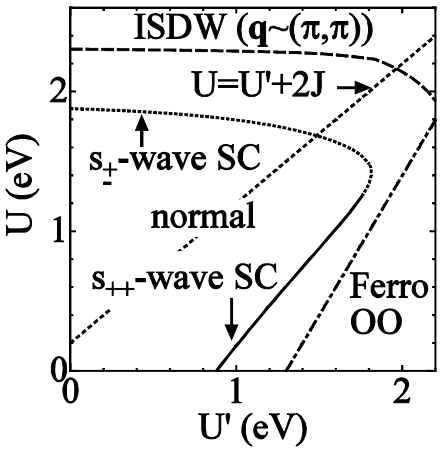


図 1 . *x*=0.1, *T*=0.02eV, *J*=*J'*=0.1eV のときの*U'*-*U* 平面における相図。

参考文献

[1] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano and H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. **130** (2008) 3297.

[2] Y. Yanagi Y. Yamakawa and Y. Ono, J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 123701.

IRON2009

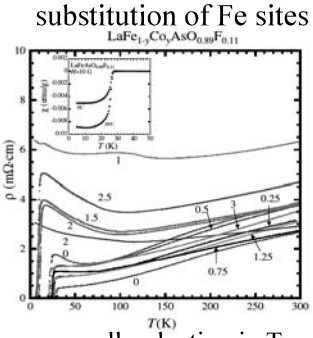
2次元16バンド*d-p*模型による 鉄化合物超伝導体の超伝導の理論

柳 有起，山川 洋一，安立 奈緒子，大野 義章[A]
新潟大院自然，新潟大理[A]

Impurity effect on T_c

Experiment

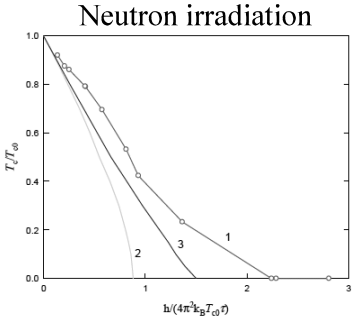
substitution of Fe sites



A. Kawabata *et al.*, JPSJ. **77** (2008) 103704
A. S. Sefat *et al.*, PRL **101** (2008) 117004

small reduction in T_c

Neutron irradiation

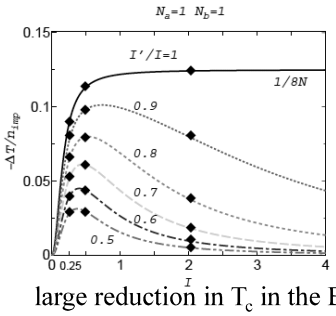


A. E. Karkin *et al.*, arXiv:0904.1634

small reduction in T_c

Theory (for $s_{\pm}$-wave)

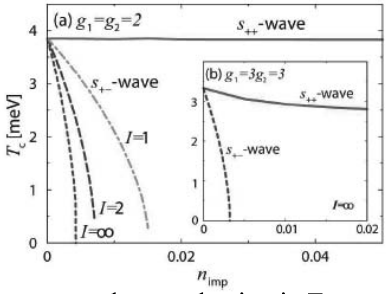
2-band model



Y. Senga and H. Kontani, NJP **11** (2009) 035005
Y. Bang *et al.*, PRB **79** (2009) 054529

large reduction in T_c in the Born regime
small reduction in T_c in the unitary regime

5-band model

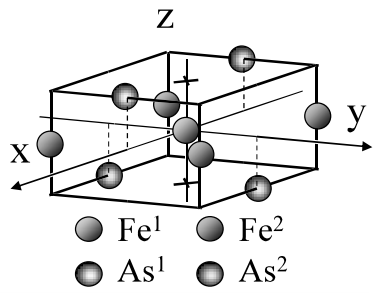


S. Onari and H. Kontani, arxiv:0906.2269

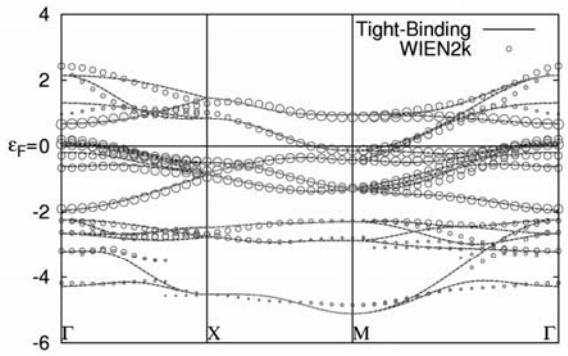
large reduction in T_c

Two-dimensional 16-band *d-p* model

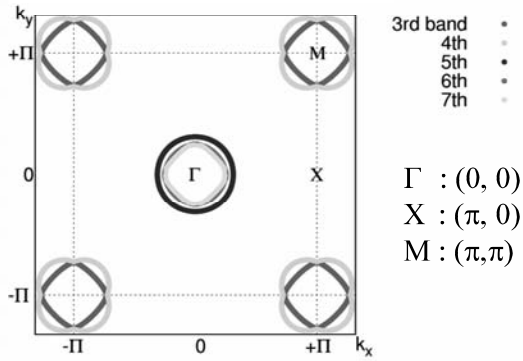
$$H_0 = \sum_{i,\ell,\sigma} \varepsilon_\ell^d d_{i\ell\sigma}^\dagger d_{i\ell\sigma} + \sum_{i,m,\sigma} \varepsilon_m^p p_{im\sigma}^\dagger p_{im\sigma}$$
$$+ \sum_{i,j,\ell,\ell',\sigma} t_{i,j,\ell,\ell'}^{dd} d_{i\ell\sigma}^\dagger d_{j\ell'\sigma} + \sum_{i,j,\ell,m',\sigma} t_{i,j,\ell,m'}^{dp} d_{i\ell\sigma}^\dagger p_{jm'\sigma}$$
$$+ \sum_{i,j,m,m',\sigma} t_{i,j,m,m'}^{pp} p_{im\sigma}^\dagger p_{jm'\sigma} + h.c.$$



LaFeAsO band structure



LaFeAsO Fermi surface (TB)



Interacting part of Hamiltonian

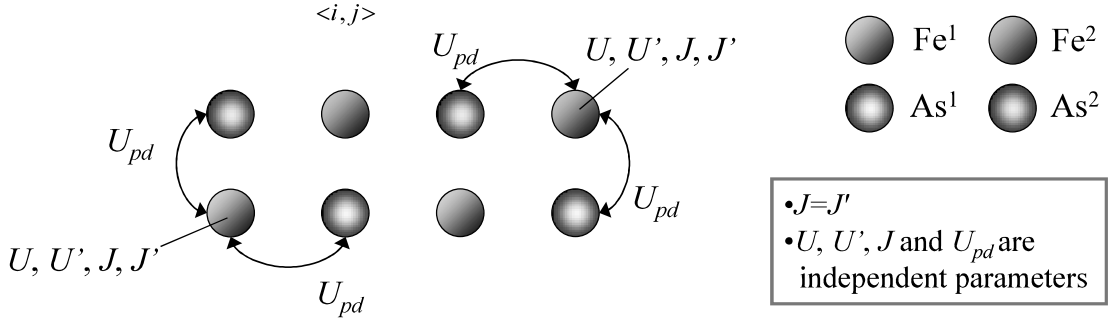
$$H_{\text{int}} = H_{\text{int}}^{dd} + H_{\text{int}}^{pd}$$

On-site Coulomb interaction between Fe-3d electrons

$$H_{\text{int}}^{dd} = U \sum_i \sum_\ell n_{i\ell\uparrow}^d n_{i\ell\downarrow}^d + U' \sum_i \sum_{\ell > \bar{\ell}} n_{i\ell}^d n_{i\bar{\ell}}^d$$
$$+ J \sum_i \sum_{\ell \neq \bar{\ell}} \vec{S}_{i\ell}^d \cdot \vec{S}_{i\bar{\ell}}^d + J' \sum_i \sum_{\ell \neq \bar{\ell}} d_{i\ell\uparrow}^\dagger d_{i\ell\downarrow}^\dagger d_{i\bar{\ell}\downarrow} d_{i\bar{\ell}\uparrow}$$

Off-site Coulomb interaction between Fe-3d electrons and As-4p electrons

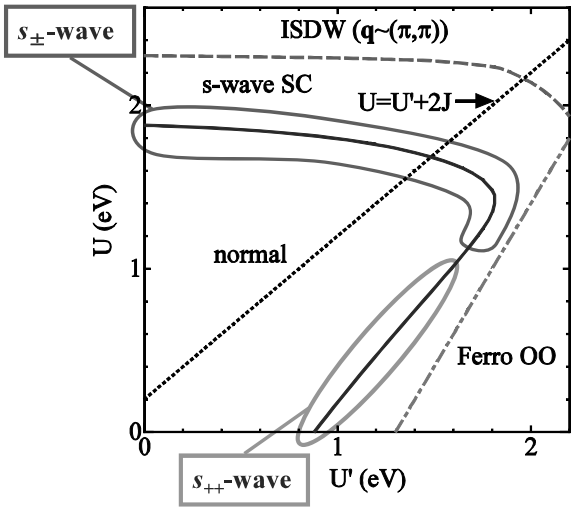
$$H_{\text{int}}^{pd} = U_{pd} \sum_{<i,j>} n_i^p n_j^d$$



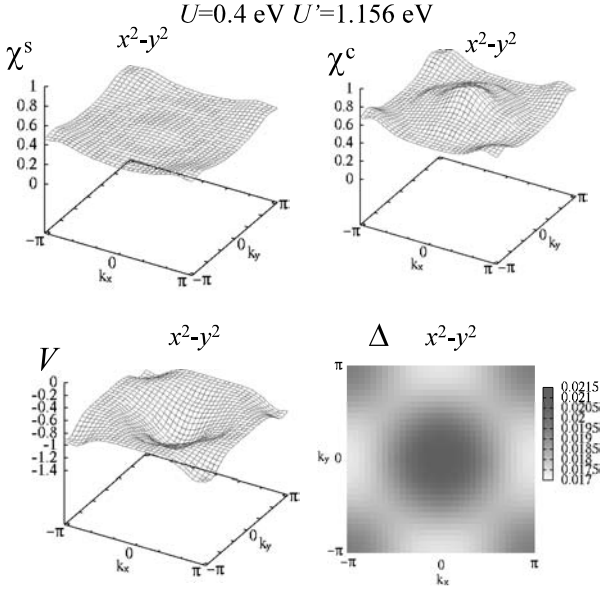
Phase diagram on U'-U plane (U_{pd}=0, J=J'=0.1 eV)

x=0.1 T=0.02eV

J=J'=0.1 eV, U_{pd}=0



U=0.4 eV U'=1.156 eV



s_{++}-wave state

s-wave state which has no sign reversal between the hole and electron pockets

spin fluc. (q~(π,π)) → $s_{\pm}$-wave SC

charge-orbital fluc. (q=(0,0)) → s_{++}-wave SC

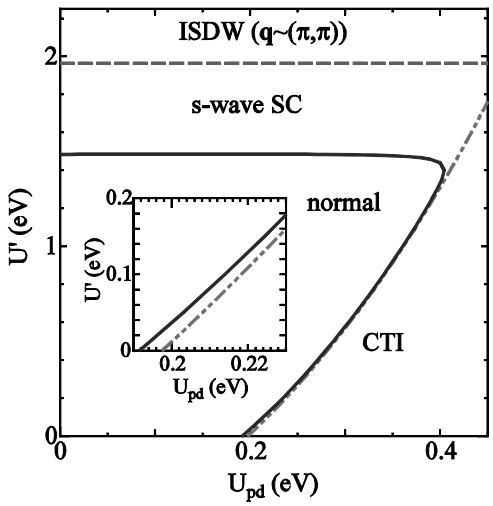
Phase diagram on U_{pd}-U' plane (U=U'+2J)

x=0.1, T=0.02 eV

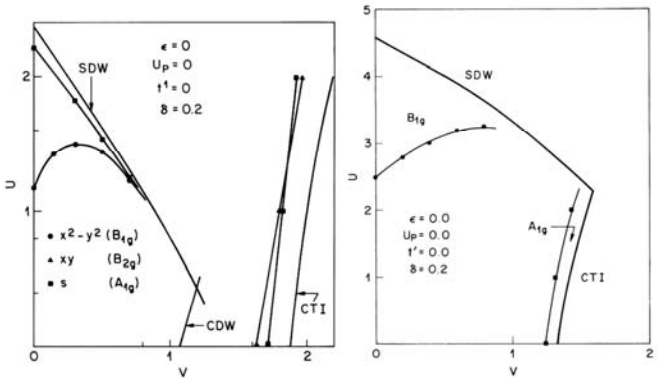
U=U'+2J

J=J'=0.1 eV

P. B. Littlewood *et al.*, PRL **63** (1989) 2602



d-p model for Cuprates



no self-energy correction | 2nd order self-energy correction

Charge transfer instability (CTI) takes place for the realistic value of U_{pd}

Oxypnictides: multi-orbital, non-half-filled ⟷ Cuprates: single-orbital, near half-filled

1/N expansion study (U=∞)
D. S. Hirashima *et al.*, JPSJ **61** (1992) 649

Summary

We obtained the phase diagram for the two-dimensional 16-band d-p model including the magnetic, charge and orbital ordered states and the superconductivity.

Magnetic order

- ISDW ($\mathbf{Q}\sim(\pi,\pi)$) : $U > U'$

Charge-orbital order

- Ferro orbital order ($\mathbf{Q}$=(0,0)) : $U' > U$
- Charge transfer instability: realistic value of U_{pd}

Superconductivity

- Spin-singlet $s_{\pm}$-wave near the ISDW phase
- Spin-singlet s_{++}-wave near the ferro orbital ordered phase
- Spin-singlet s-wave near the charge transfer instability

Future study

Effects of electron-phonon interaction

20.　2 バンド超伝導体におけるコヒーレンス効果

早大先進理工
増田啓介，栗原進

Coherence effect in a two-band superconductor

Department of Physics, Waseda University
Keisuke Masuda, Susumu Kurihara

鉄ニクタイド超伝導体の理論における主たるテーマの 1 つは超伝導ギャップの対称性の決定である．これまでこの点に関して様々な研究がなされ，s_{+-}波対称性が有力な候補とされてきた[1,2]．しかし，最近の研究において s_{+-}波対称性は非磁性不純物に対して極めて弱くs_{++}波対称性が有力であるという指摘がなされた[3]．ARPES においてs波対称性は確認されているものの[4]，ホール面に開くギャップと電子面に開くギャップの位相差を明らかにした実験は未だ存在しない．

我々は，鉄ニクタイド超伝導体においてどちらの対称性が実現されているのかを特定する実験を理論的に提案する．既に提案されている 2 バンド強束縛モデルをもとに 2 バンド BCS モデルを構築し，s_{+-}波対称性，s_{++}波対称性のそれぞれに関して密度応答関数とスピン応答関数を計算した．その結果，s_{+-}波の場合とs_{++}波の場合では両応答関数が定性的に相異なる振る舞いを示すことがわかった[図(a)，(b)]．この結果は多バンド超伝導体のコヒーレンス効果によって説明されうる．我々は，ネスティングベクトル近傍で両応答関数(実際の実験では密度，スピン構造因子)の温度依存性を中性子散乱実験等で測定することにより対称性が決定されうることを主張する．

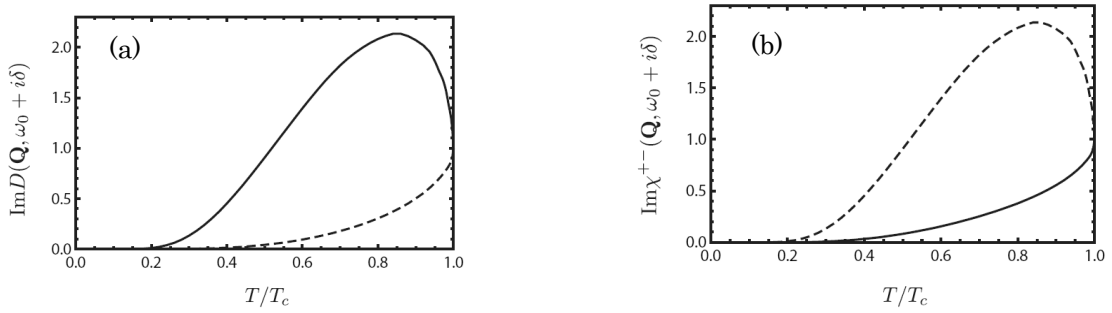


図 (a)密度応答関数の温度依存性. (b)スピン応答関数の温度依存性．実線: s_{+-}波, 破線: s_{++}波, $|\Delta^{(0)}_{+}|=|\Delta^{(0)}_{-}|=0.05t_1$,Tc=$0.03t_1$, $\omega_0=0.001t_1$,Q=(π,0), δ (収束因子)=$0.0001t_1$

参考文献

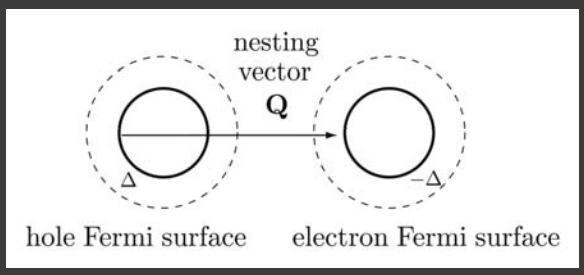
[1] I.I Mazin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 057003 (2008).
[2] K. Kuroki *et al.*, Phys. Rev. Lett.　**101**, 087004 (2008).
[3] S. Onari, and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. **103**, 177001 (2009).
[4] H. Ding *et al.*, Europhys. Lett. **83**, 47001 (2008).

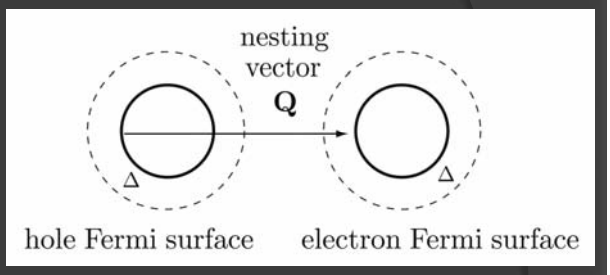
2009.11.28 @上野「鉄系高温超伝導体研究の最前線」

2バンド超伝導体におけるコヒーレンス効果 ~超伝導ギャップの対称性を決定するために~

早大先進理工
増田啓介, 栗原進

1. 鉄ニクタイドにおける超伝導ギャップの対称性





s_{+-}ギャップ

s_{++}ギャップ

どちらの対称性が実現しているのであろうか？

⟶ 対称性を決定する実験を理論的に提案する

2. コヒーレンス効果

外場に誘起された相互作用の時間反転対称性に応じて，超伝導体における揺らぎの干渉効果が異なる現象

外場に対する応答関数に含まれる因子

コヒーレンス因子（準粒子散乱過程）

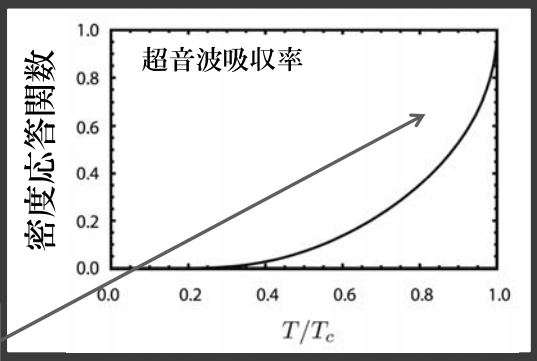
$$(u_{\mathbf{k+q}}u_{\mathbf{k}} \mp v_{\mathbf{k+q}}v_{\mathbf{k}})^2 = \frac{1}{2}\left(1 \mp \frac{\Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k+q}}}{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k+q}}}\right)$$

上の符号：外場が時間反転に対して偶パリティ（密度を揺らす外場）

下の符号：外場が時間反転に対して奇パリティ（スピンを揺らす外場）

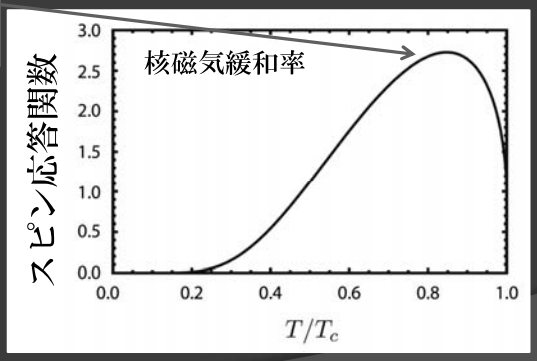
シングルバンドs波の場合の応答関数

$$(u_{\mathbf{k+q}}u_{\mathbf{k}} \mp v_{\mathbf{k+q}}v_{\mathbf{k}})^2 = \frac{1}{2}\left(1 \mp \frac{\Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k+q}}}{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k+q}}}\right)$$



上の符号
偶パリティ

相互作用の種類により
Tc直下でのピークの
有無が異なる

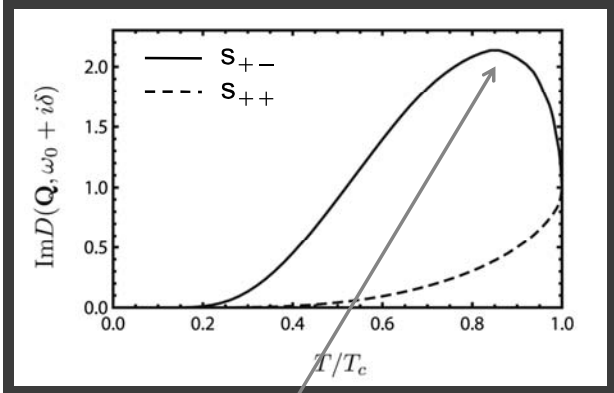


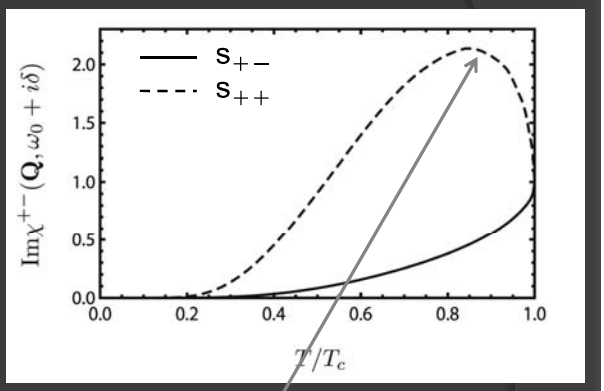
下の符号
奇パリティ

⟶ s_{+-}，s_{++}の場合に応答関数を計算すれば異なる特徴が得られるはず

3. 計算結果

密度応答関数　　スピン応答関数





s_{+-}にコヒーレンスピーク

s_{++}にコヒーレンスピーク

2つの応答関数に相異なる振る舞いが見られることが重要！！

$|\Delta_+^{(0)}| = |\Delta_-^{(0)}| = 0.05|t_1|,\ T_c = 0.03|t_1|,\ \omega_0 = 0.001|t_1|,\ \mathbf{Q} = (\pi, 0),\ \delta = 0.0001|t_1|$

4. 結論

中性子散乱等で密度およびスピン応答関数を測定し，それらに相異なる振る舞いが見られれば，超伝導ギャップの対称性を決定することが可能である

密度応答関数にコヒーレンスピーク → s_{+-}ギャップ

スピン応答関数にコヒーレンスピーク → s_{++}ギャップ

K. Masuda and S. Kurihara, arXiv:0911.0528

付録

鉄ヒ素超伝導研究会

システム計算科学センター（東京都　上野）

２００９年１１月２８日（土）

Program

午前の部

座長：福山秀敏

09:00-09:10 「はじめに」 藤井保彦（原子力機構）

09:10-10:10 「鉄系超伝導体の電子構造と超伝導発現機構」 黒木和彦（電通大）

10:10-10:20 休　憩

座長：安岡弘志

10:20-11:20 「鉄系高温超伝導体の光学スペクトルと電気抵抗率」 内田慎一（東大理）

11:20-12:00 「鉄系超伝導体の NMR」 石田憲二（京大理）

座長：永崎洋

12:00-12:15 「J－PARC で始まる新たな中性子非弾性散乱測定法」 梶本亮一（J-PARC）

12:15-12:45 《ポスタープレビュー》

12:45-13:30 《昼食およびポスター発表》

午後の部

座長：室町英治

13:30-14:00 「層状ニクタイドにおけるブロック層の構造と超伝導特性」 荻野拓（東大工）

14:00-14:30 「FeSe, FeTe 系超伝導体」 高野義彦（物材機構）

14:30-15:00 「鉄系超伝導体の STM」 花栗哲郎（理研）

15:00-15:10 休　憩

座長：加倉井和久

15:10-15:40 「鉄ヒ素系超伝導体の光電子分光」 藤森淳（東大理）

15:40-16:10 「鉄系超伝導体の中性子散乱」 社本真一（原子力機構）

16:10-16:40 「砒素系とリン系の違いについて」 田島節子（阪大理）

16:40-16:50 休　憩

座長：高木英典

16:50-17:20 「鉄系超伝導体の超伝導ギャップ対称性」 芝内孝禎（京大理）

17:20-17:50 「鉄系超伝導体のフォノンと磁性」 町田昌彦（原子力機構）

17:45-18:00 「最後に」 永崎洋（産総研）

18:00-19:00 《写真撮影、懇親会およびポスター発表》

研究会での様子

参 加 者 リ ス ト

荒 川 直 也	東京大学大学院理学系研究科
家 哲 也	京都大学大学院理学研究科
石 井 賢 司	日本原子力研究開発機構
石 角 元 志	日本原子力研究開発機構
石 田 憲 二	京都大学大学院理学研究科
出田真一郎	東京大学大学院理学系研究科
臼 井 秀 知	電気通信大学
内 田 慎 一	東京大学大学院理学系研究科
梅 山 規 男	産業技術総合研究所
永 崎 洋	産業技術総合研究所
太 田 幸 宏	日本原子力研究開発機構
大 西 弘 明	日本原子力研究開発機構
荻 野 拓	東京大学大学院工学研究科
苅 宿 俊	東京大学大学院理学系研究科
加倉井和久	日本原子力研究開発機構
笠 原 成	京都大学低温物質科学研究センター
兼 下 英 司	京都大学基礎物理学研究所
梶 本 亮 一	J-PARCセンター
加 藤 甲 馬	日本大学大学院理工学研究科
河 村 幸 彦	物質・材料研究機構
樹神 克 明	日本原子力研究開発機構
北 川 俊 作	京都大学大学院理学研究科
北 澤 英 明	物質・材料研究機構
木 田 孝 則	大阪大学極限量子科学研究センター
熊谷明日香	東北大学大学院理学研究科
黒 木 和 彦	電気通信大学量子・物質工学科
小 出 常 晴	高エネルギー加速器研究機構 物構研
小 山 冨 男	東北大学金属材料研究所
榊 原 寛 史	電気通信大学
塩 見 雄 毅	東京大学大学院工学系研究科
芝 内 孝 禎	京都大学大学院理学研究科
社 本 真 一	日本原子力研究開発機構
鈴 木 雄 大	電気通信大学
高 木 英 典	東京大学大学院工学系研究科、理化学研究所
高 野 義 彦	物質・材料研究機構
田 島 節 子	大阪大学大学院理学研究科
徳 本 圓	防衛大学校応用物理学科
利 根 川 翔	京都大学大学院理学研究科
中 井 宣 之	日本原子力研究開発機構
永 井 佑 紀	東京大学大学院理学系研究科
中 井 祐 介	京都大学大学院理学研究科
中 島 正 道	東京大学大学院理学系研究科
長 谷 正 司	物質・材料研究機構
中 村 博 樹	日本原子力研究開発機構
新 高 誠 司	理化学研究所
西 一 郎	東京大学大学院理学系研究科
野 村 拓 司	日本原子力研究開発機構
芳 賀 芳 範	日本原子力研究開発機構
萩 原 政 幸	大阪大学極限量子科学研究センター
橋本顕一郎	京都大学大学院理学研究科
花 栗 哲 郎	理化学研究所
林 伸 彦	大阪府立大学
原 嘉 昭	茨城工業高等専門学校
福 山 秀 敏	東京理科大学
藤 井 保 彦	日本原子力研究開発機構
藤 森 淳	東京大学大学院理学系研究科
増 田 啓 介	早稲田大学大学院先進理工学研究科
町 田 昌 彦	日本原子力研究開発機構
松 田 雅 昌	日本原子力研究開発機構
松 田 祐 司	京都大学大学院理学研究科
水木純一郎	日本原子力研究開発機構
水 野 文 夫	東北大学大学院理学研究科
室町 英 治	物質・材料研究機構
森 道 康	東北大学金属材料研究所
安 岡 弘 志	日本原子力研究開発機構
柳 有 起	新潟大学大学院自然科学研究科

This is a blank page.

国際単位系（SI）

表１．SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表２．基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m^2
体積	立法メートル	m^3
速さ，速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s^2
波数	毎メートル	m^{-1}
密度，質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m^3
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m^2
比体積	立方メートル毎キログラム	m^3/kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m^2
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度[a]，濃度	モル毎立方メートル	mol/m^3
質量濃度	キログラム毎立法メートル	kg/m^3
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m^2
屈折率[b]	（数字の） 1	1
比透磁率[b]	（数字の） 1	1

(a) 量濃度（amount concentration）は臨床化学の分野では物質濃度（substance concentration）ともよばれる。
(b) これらは無次元量あるいは次元１をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の１は通常は表記しない。

表３．固有の名称と記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン[b]	rad	1 [b]	m/m
立体角	ステラジアン[b]	sr[c]	1 [b]	m^2/m^2
周波数	ヘルツ[d]	Hz		s^{-1}
力	ニュートン	N		$m\ kg\ s^{-2}$
圧力，応力	パスカル	Pa	N/m^2	$m^{-1}\ kg\ s^{-2}$
エネルギー，仕事，熱量	ジュール	J	N m	$m^2\ kg\ s^{-2}$
仕事率，工率，放射束	ワット	W	J/s	$m^2\ kg\ s^{-3}$
電荷，電気量	クーロン	C		s A
電位差（電圧），起電力	ボルト	V	W/A	$m^2\ kg\ s^{-3}\ A^{-1}$
静電容量	ファラド	F	C/V	$m^{-2}\ kg^{-1}\ s^4\ A^2$
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	$m^2\ kg\ s^{-3}\ A^{-2}$
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V	$m^{-2}\ kg^{-1}\ s^3\ A^2$
磁束	ウエーバ	Wb	Vs	$m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-1}$
磁束密度	テスラ	T	Wb/m^2	$kg\ s^{-2}\ A^{-1}$
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	$m^2\ kg\ s^{-2}\ A^{-2}$
セルシウス温度	セルシウス度[e]	℃		K
光束	ルーメン	lm	cd sr[c]	cd
照度	ルクス	lx	lm/m^2	$m^{-2}\ cd$
放射性核種の放射能[f]	ベクレル[d]	Bq		s^{-1}
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	$m^2\ s^{-2}$
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量	シーベルト[g]	Sv	J/kg	$m^2\ s^{-2}$
酸素活性	カタール	kat		$s^{-1}\ mol$

(a)SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。
(b)ラジアンとステラジアンは数字の１に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の１は明示されない。
(c)測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
(d)ヘルツは周期現象についてのみ、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてのみ使用される。
(e)セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの単位の大きさは同一である。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。
(f)放射性核種の放射能（activity referred to a radionuclide）は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
(g)単位シーベルト（PV,2002,70,205）についてはCIPM勧告2（CI-2002）を参照。

表４．単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘度	パスカル秒	Pa s	$m^{-1}\ kg\ s^{-1}$
力のモーメント	ニュートンメートル	N m	$m^2\ kg\ s^{-2}$
表面張力	ニュートン毎メートル	N/m	$kg\ s^{-2}$
角速度	ラジアン毎秒	rad/s	$m\ m^{-1}\ s^{-1}=s^{-1}$
角加速度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s^2	$m\ m^{-1}\ s^{-2}=s^{-2}$
熱流密度，放射照度	ワット毎平方メートル	W/m^2	$kg\ s^{-3}$
熱容量，エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	$m^2\ kg\ s^{-2}\ K^{-1}$
比熱容量，比エントロピー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	$m^2\ s^{-2}\ K^{-1}$
比エネルギー	ジュール毎キログラム	J/kg	$m^2\ s^{-2}$
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	$m\ kg\ s^{-3}\ K^{-1}$
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m^3	$m^{-1}\ kg\ s^{-2}$
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	$m\ kg\ s^{-3}\ A^{-1}$
電荷密度	クーロン毎立方メートル	C/m^3	$m^{-3}\ sA$
表面電荷	クーロン毎平方メートル	C/m^2	$m^{-2}\ sA$
電束密度，電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m^2	$m^{-2}\ sA$
誘電率	ファラド毎メートル	F/m	$m^{-3}\ kg^{-1}\ s^4\ A^2$
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m	$m\ kg\ s^{-2}\ A^{-2}$
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	$m^2\ kg\ s^{-2}\ mol^{-1}$
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	$m^2\ kg\ s^{-2}\ K^{-1}\ mol^{-1}$
照射線量（Ｘ線及びγ線）	クーロン毎キログラム	C/kg	$kg^{-1}\ sA$
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	$m^2\ s^{-3}$
放射強度	ワット毎ステラジアン	W/sr	$m^4\ m^{-2}\ kg\ s^{-3}=m^2\ kg\ s^{-3}$
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2\ sr)$	$m^2\ m^{-2}\ kg\ s^{-3}=kg\ s^{-3}$
酵素活性濃度	カタール毎立方メートル	kat/m^3	$m^{-3}\ s^{-1}\ mol$

表５．SI 接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10^{24}	ヨタ	Y	10^{-1}	デシ	d
10^{21}	ゼタ	Z	10^{-2}	センチ	c
10^{18}	エクサ	E	10^{-3}	ミリ	m
10^{15}	ペタ	P	10^{-6}	マイクロ	μ
10^{12}	テラ	T	10^{-9}	ナノ	n
10^{9}	ギガ	G	10^{-12}	ピコ	p
10^{6}	メガ	M	10^{-15}	フェムト	f
10^{3}	キロ	k	10^{-18}	アト	a
10^{2}	ヘクト	h	10^{-21}	ゼプト	z
10^{1}	デカ	da	10^{-24}	ヨクト	y

表６．SIに属さないが、SIと併用される単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1h =60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	’	1’=(1/60)°=(π/10800) rad
秒	”	1”=(1/60)’=(π/648000) rad
ヘクタール	ha	$1ha=1hm^2=10^4m^2$
リットル	L, l	$1L=1l=1dm^3=10^3cm^3=10^{-3}m^3$
トン	t	$1t=10^3$ kg

表７．SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位で表される数値
電子ボルト	eV	$1eV=1.602\ 176\ 53(14)\times10^{-19}J$
ダルトン	Da	$1Da=1.660\ 538\ 86(28)\times10^{-27}kg$
統一原子質量単位	u	1u=1 Da
天文単位	ua	$1ua=1.495\ 978\ 706\ 91(6)\times10^{11}m$

表８．SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
バール	bar	$1\ bar=0.1MPa=100kPa=10^5Pa$
水銀柱ミリメートル	mmHg	1mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	$1\ Å=0.1nm=100pm=10^{-10}m$
海里	M	1 M=1852m
バーン	b	$1\ b=100fm^2=(10^{-12}cm)2=10^{-28}m^2$
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的な関係は、対数量の定義に依存。
ベル	B	
デジベル	dB	

表９．固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
エルグ	erg	$1\ erg=10^{-7}\ J$
ダイン	dyn	$1\ dyn=10^{-5}N$
ポアズ	P	$1\ P=1\ dyn\ s\ cm^{-2}=0.1Pa\ s$
ストークス	St	$1\ St\ =1cm^2\ s^{-1}=10^{-4}m^2\ s^{-1}$
スチルブ	sb	$1\ sb\ =1cd\ cm^{-2}=10^4cd\ m^{-2}$
フォト	ph	$1\ ph=1cd\ sr\ cm^{-2}\ 10^4lx$
ガル	Gal	$1\ Gal\ =1cm\ s^{-2}=10^{-2}ms^{-2}$
マクスウェル	Mx	$1\ Mx = 1G\ cm^2=10^{-8}Wb$
ガウス	G	$1\ G =1Mx\ cm^{-2} =10^{-4}T$
エルステッド[c]	Oe	$1\ Oe \triangleq (10^3/4\pi)A\ m^{-1}$

(c) ３元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「 ≙ 」は対応関係を示すものである。

表10．SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位で表される数値
キュリー	Ci	$1\ Ci=3.7\times10^{10}Bq$
レントゲン	R	$1\ R = 2.58\times10^{-4}C/kg$
ラド	rad	$1\ rad=1cGy=10^{-2}Gy$
レム	rem	$1\ rem=1\ cSv=10^{-2}Sv$
ガンマ	γ	1 γ =1 nT=10-9T
フェルミ		1フェルミ=1 fm=10-15m
メートル系カラット		1メートル系カラット = 200 mg = 2×10-4kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリー	cal	1cal=4.1858J（「15℃」カロリー），4.1868J（「IT」カロリー）4.184J（「熱化学」カロリー）
ミクロン	μ	1 μ =1μm=10^{-6}m

（第8版，2006年改訂）

この印刷物は再生紙を使用しています