

## 科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 6 日現在

機関番号：12601  
 研究種目：若手研究(B)  
 研究期間：2011～2012  
 課題番号：23740261  
 研究課題名（和文） 多変数変分モンテカルロ法を用いた鉄系超伝導体の超伝導機構の解明

研究課題名（英文） Study on mechanism of iron-based superconductors by using many-variable variational Monte Carlo Study

## 研究代表者

三澤 貴宏 (TAKAHIRO MISAWA)  
 東京大学・大学院工学系研究科・助教  
 研究者番号：10582687

研究成果の概要（和文）：鉄系超伝導体に対する第一原理有効モデルの解析を多変数変分モンテカルロ法を用いて行った。5種類の異なる鉄系超伝導体に対して解析を行った結果、実験で観測されている磁気秩序モーメントの大きさ及びパターンを第一原理有効モデルでうまく再現できることを示した。また、鉄系超伝導体は、 $d^5$  (5個の  $d$  軌道に 5 電子) のモット絶縁体の大きな影響を受けていることを明らかにした。さらに、有効モデルに電子ドーブをした場合の超伝導発現可能性を吟味した。

研究成果の概要（英文）：We analyze ab initio low-energy effective models for iron-based superconductors by using many-variable variational Monte Carlo method. By analyzing five different materials, we show that the ab initio low-energy effective models successfully reproduce magnitudes of the magnetic ordered moment and magnetic-order patterns observed in iron-based superconductors. We also clarify that the iron-based superconductors are under strong influence of  $d^5$  Mott insulators. Furthermore, we examine the possibility of the superconductivity in electron-doped region.

## 交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性Ⅱ

キーワード：鉄系超伝導体、第一原理計算、強相関電子系、高温超伝導

## 1. 研究開始当初の背景

2008年の鉄系超伝導体の発見以来、その高温超伝導の機構解明を目指して理論・実験の両側面から世界的規模で精力的に研究が行われてきた。研究開始時点(2011年)の段階では鉄系超伝導体の主な物質は発見されており、(1)超伝導及び磁性は主に鉄の二次元面が担っていること、(2)第一原理バンド計算から多くの物質のフェルミ面は類似していること、(3)それにも関わらず、磁気秩序モ

ーメント及び磁性パターンは物質依存性が大きいことが指摘されていた。さらには、鉄系超伝導体における電子相関効果の強さについては、実験手法によって主張が大きく異なり、コンセンサスは得られていなかった。そのため、非経験的な手法に基づき電子相関の大きさを見積もり、その効果を精査することが、鉄系超伝導体を理解する基盤を築くための急務であった。

## 2. 研究の目的

第一原理計算を出発点として非経験的に導いた有効模型を高精度に解析することで、鉄系超伝導体の電子状態を解明することを目的とした。とくに鉄系超伝導体の磁性の物質依存性は大きく、それを非経験的な手法から再現できるかどうかを精査することを目指した。また、いくつかの異なる鉄系超伝導体の解析を通して、鉄系超伝導体における電子相関の効果を明らかにすることを目指した。さらには、超伝導の安定性に関する計算を行い、超伝導の発現機構を解明することを目指した。

## 3. 研究の方法

鉄系超伝導体のいくつかの物質について、第一原理計算に基づいて導出した有効模型の解析を行う。この手法では従来は恣意的に決められることの多かった電子相関の大きさを非経験的に決めることが可能である。これによって、それぞれの物質がもつ特性を恣意性なしに反映させることができる。有効模型の解析は空間相関・量子揺らぎを高精度にとりこめる多変数変分モンテカルロ法を用いて行った。従来の変分モンテカルロ法では変分波動関数の形状を制限することによる恣意性および精度の低下が大きな問題であった。今回用いた多変数変分モンテカルロ法では、変分波動関数の自由度を大幅に広げ、さらに系が持つ対称性を回復するための量子数射影を組み合わせることで、変分モンテカルロ法のもつバイアスを大きく取り除き、定量的かつ定性的な改善を行った。また、大規模並列を用いることで、1万程度の変分パラメータの最適化を行うこと可能であり、空間相関・量子揺らぎを精緻に取り込んだ計算を実行が可能である。

## 4. 研究成果

鉄系超伝導体のおもな物質5種類 (LaFePO, LaFeAsO, BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, FeTe, FeSe) についての有効模型の導出を行い、その有効模型解析を行った。その結果、鉄系超伝導体の磁気秩序モーメントの大きさが相互作用の大きさと統一的に説明できることを示した[図1参照]。すなわち、図1に示したように、電子相関が弱い LaFePO では常磁性解が最安定になり、それから電子相関が強い LaFeAsO, BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, FeTe に行くに従って磁気秩序モーメントが大きくなっていくことを示した。また、FeTe では他の鉄系超伝導体と異なる磁気秩序 (パイコリニア) が実現していることも示した。FeSe では複数の磁気秩序のエネルギーが競合していることを示した。これは、FeSe では磁気秩序が観測されず最低温で超伝導になっている実験結果と対応している

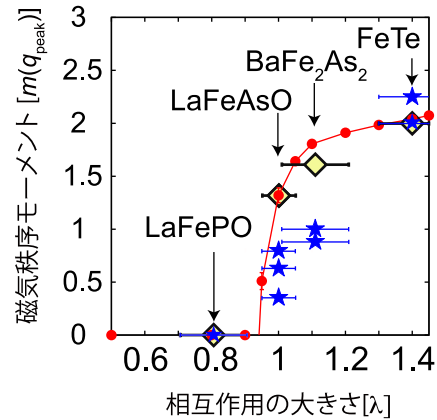


図 1: 鉄系超伝導体の磁気秩序モーメント  $[m(q_{\text{peak}})]$  の相互作用  $[\lambda]$  依存性。ここで、 $\lambda$  は相互作用の大きさを一様にスケールするパラメータである。黄色のダイヤモンドのシンボルが計算結果であり、青い星印が実験値である。鉄系超伝導体の磁気秩序モーメントの大きさが、相互作用の大きさと説明できていることがわかる。

と考えられる。

さらに、有効模型にホールドーピングを行うことにより、 $d^6$  の電子配置 (5 個の  $d$  軌道に 6 電子) にある鉄系超伝導体の母物質は、 $d^5$  (5 個の  $d$  軌道に 5 電子) のモット絶縁体の巨大なドームの端にいることを明らかにした[図2参照]。モット絶縁体の大きな影響を受けている点はもう一つの高温超伝導体である銅酸化物と類似する。しかし、銅酸化物の場合はモット絶縁体のドームはドーピング濃度が 10-20%程度までしか及んでいないのに対して、鉄系超伝導体の場合には 100%以上に及んでいる。この巨大なモット絶縁体の影響は多軌道性及ぶフント結合に起因しており、鉄系超伝導体の大きな特徴であることを明らかにした。われわれの提唱のあとに、この  $d^5$  のモット絶縁体の近接効果は海外の研究グループによって別の理論計算でも指摘され、その重要性が議論されている。

また、有効模型に電子ドーピングをした場合の超伝導発現可能性の吟味も行った。その結果、10-20%ドーピングの領域で超伝導が発現しやすいことを見出した。よ

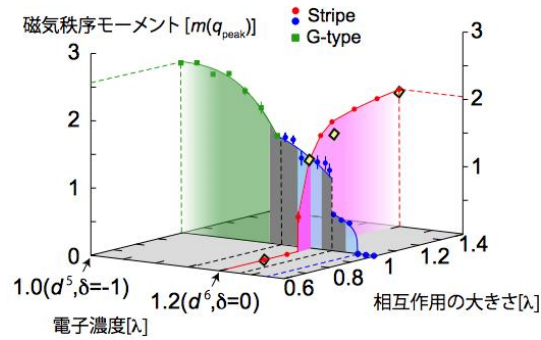


図 2: 鉄系超伝導体の磁気秩序モーメント  $[m(q_{\text{peak}})]$  の相互作用  $[\lambda]$  および電子濃度  $[n]$  依存性。鉄系超伝導体  $[n \sim 1.2]$  が実は  $d^6, n=1.0$  でのモット絶縁体に起因する巨大な反強磁性ドームのふもとにいたることがわかる。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 2 件)

(1) Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, and Masatoshi Imada, “Ab Initio Evidence for Strong Correlation Associated with Mott Proximity in Iron-Based Superconductors”, Phys. Rev. Lett., 査読有り、Vol. 108, 177007(1-5), DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.177007

(2) Hiroshi Shinaoka, Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, and Masatoshi Imada, “Mott Transition and Phase Diagram of  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu(NCS)<sub>2</sub> Studied by Two-Dimensional Model Derived from Ab initio Method”, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有り、Vol. 81, 034701(1-12), DOI: 10.1143/JPSJ.81.034701

[学会発表] (計 15 件)

#### ① 三澤 貴宏、

Analyses of High-Temperature Superconductivity in Doped Hubbard Model -High-Precision Variational Monte Carlo Study-, APS March Meeting 2013, 2013 3/18-3/22, Baltimore (USA)

#### ② 三澤 貴宏、

第一原理電子状態計算法を用いた高温超伝導の機構解明、平成24年度「京」を中核とする HPCIシステム利用研究課題中間 報告会、2013 3/14-15, イノカンファレンスセンター (東京都千代田区)

#### ③ 三澤 貴宏、第一原理電子状態計算法を

もとにした高温超伝導体にたいする電子状態計算、第3回 CMSI 研究会 -超並列計算が拓く新しい計算物質科学 -, 2012 12/3-5, 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

④ 三澤 貴宏、ハバード模型における高温超伝導再考、強相関電子系理論の最前線 - 若手によるオープンイノベーション - [招待講演]、2012 12/13-15, 紀伊勝浦

⑤ 三澤 貴宏、Ab initio Evidence of Strong Correlation and Large Mott Proximity in Iron-based Superconductor、International Conference on Magnetism (ICM2012)、2012 7/8-13, Busan (Korea)

⑥ 三澤 貴宏、Ab initio study of iron-based superconductors -Roles of electron correlations and large Mott proximity-, International Conference on Heavy Electrons and Novel Quantum Phases (ICHN

2012) [招待講演]、2012 7/5-7, Gyeongju (Korea)

⑦三澤 貴宏、鉄砒素系超伝導体におけるドーピングによる電子状態の変化、日本物理学会 第67回年次大会、2012 3/24-3/27、関西学院大学

⑧三澤 貴宏、*Ab initio* Evidence of Strong Correlation Associated with Mott Proximity in Iron-Based Superconductor, APS March Meeting 2012, 2012 2/27-3/2, Boston (USA)

⑨三澤 貴宏、Electronic correlations around commensurate filling other than half-filling - 鉄系超伝導体、近藤格子系を例にして -、強相関電子系理論の最前線 - 若手によるオープン・イノベーション - [招待講演]、2011 12/21-23、紀伊勝浦

⑩三澤 貴宏、有機導体における電子相関効果 -モット転移とその臨界性 -、有機固体若手の会 冬の学校 2011 [招待講演]、2011 12/16-12/17、北海道 定山溪

⑪三澤 貴宏、次元縮約第一原理ダウンフォールディング法を用いて導出された 鉄砒素系超伝導体の有効模型の数値解析 (2)、日本物理学会2011年 秋季大会、2011 9/21-24、富山大学五福キャンパス

⑫三澤 貴宏、Variational Monte Carlo study of strongly correlated electron systems、Japan-Swiss Workshop, New Electronic

Properties through Structure and Correlation [招待講演]、2011 9/16-9/18, Zurich (Swiss)

⑬三澤 貴宏、強相関電子系に対する第一原理有効模型の解析、CMSI 若手技術交流会 [招待講演]、2011 7/7-7/8、理化学研究所計算科学研究機構(神戸)

⑭三澤 貴宏、鉄系超伝導体の第一原理有効模型の解析 -磁気秩序モーメントの物質依存性の解明-、鉄系高温超伝導の物理、2011 6/16-6/17 京都大学基礎物理学研究所

⑮三澤 貴宏、*Ab initio* low-energy models in iron-based superconductors studied by variational Monte Carlo method: Role of electron correlation and origin of small magnetic ordered moment in LaFeAsO<sub>1-x</sub>F<sub>x</sub>, Villa Conference on Iron Pnictide Superconductors [招待講演]、2011 4/21-25, Las Vegas (USA)

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

三澤 貴宏 (TAKAHIRO MISAWA)  
東京大学・大学院工学系研究科・助教  
研究者番号：10582687

(2) 研究分担者：無し

(3) 連携研究者：無し