

11-2 J-PARCとスーパーコンピュータで超伝導の謎に迫る — 鉄系超伝導体の中性子散乱をシミュレーションし電子ペアを決定する —

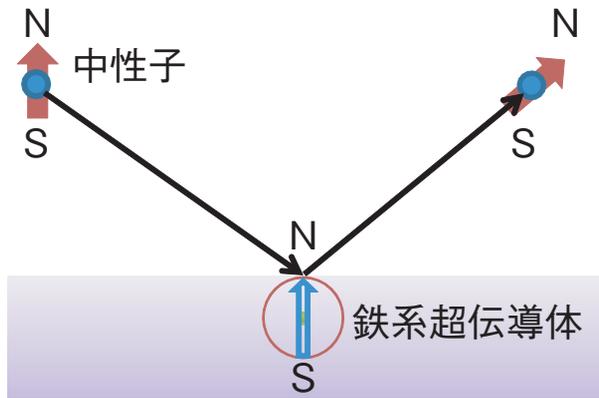


図11-4 中性子散乱実験の模式図

中性子は微小磁石（スピン）を持つため、散乱後の磁石のずれから、物質の電子の作る磁場（磁気モーメント）を知ることができます。

超伝導とは、ある温度以下で電気抵抗が突然ゼロとなる劇的な現象です。この特性を活かし、原子力分野では、核融合炉や加速器等の巨大磁場発生コイルや放射線の検出器等に応用され更なる研究開発が行われています。

2008年、鉄を含む新しい高温超伝導材料（鉄系超伝導体）が発見されました。この材料は様々な化学組成で合成可能なため、より高い超伝導温度を示す組成を探す研究が世界中で行われ、原子力機構でも大強度陽子加速器施設（J-PARC）において、鉄系超伝導体 $\text{BaFe}_2(\text{As},\text{P})_2$ を対象に中性子散乱実験研究が行われました（図11-4）。これらにより、超伝導発現への鉄の磁性の関与が示唆されるようになりましたが、まだ十分裏付けられていません。このためには超伝導発現の起源となる電子ペアの性質を明らかにしなければなりません。実験により見いだすのは困難です。

そこで私たちは、 $\text{BaFe}_2(\text{As},\text{P})_2$ を対象に、中性子散乱の仮想実験（シミュレーションによる中性子散乱強度計算）を行うことで電子ペアの性質を明らかにすることを試みました。ここで、従来の研究では、現実より数10倍高いエネルギースケールの電子相関効果しか扱えていないことが実験結果との齟齬を生んでいる要因であると考

表11-1 $\text{BaFe}_2(\text{As},\text{P})_2$ の中性子散乱強度の実験値と理論計算値
超伝導が起こるとき、二つの電子が引力によりペアを作ります。その引力の起源により作られる電子ペアは異なり、鉄系超伝導体では多くの電子ペアが提案されています。私たちは、シミュレーションにより磁性の関与がやや弱い候補3が最も実験を再現していることを確認しました。

	特 徴	中性子散乱強度 (規格化後)
J-PARCでの実験結果	他の鉄系化合物より強度弱め	~1.7
候補1 (S_{\pm} 波)	磁性の関与が強めな電子ペア	~2.1
候補2 (d_{xy} 波)	非鉄化合物での磁氣的電子ペア	< 1
候補3 (水平ノード付 S_{\pm} 波)	磁性の関与がやや弱めな電子ペア	~1.6

え、その解決のために、第一原理計算に基づいたモデルと、電子相関効果を高精度に計算できる乱雑位相近似を用いた新たな数値計算手法を開発しました。

また、計算量を削減し現実的に実行可能なコードとするために、計算順序の抜本的変更とOpenMP+MPIによるハイブリッド並列計算コードを実装しました。

鉄系超伝導体では、磁性との関与の仕方の異なる電子ペアの候補が複数提案されていますが、これらの中で有力な電子ペアの候補を使って仮想実験を行い、結果をJ-PARCの実験結果と比較しました（表11-1）。その結果、実験結果との齟齬を回避することに成功し、磁性の関与がやや弱い候補3のモデルが最も実験結果を再現することを見いだすことで、鉄が持つ磁性が関与していることを裏付ける結果を得ました。この結果は、ほかの鉄系超伝導体でも同様の機構となっている可能性があることから、機構解明への足がかりとなる成果といえます。

本研究は、独立行政法人科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業（CREST）の助成により実施した受託研究「マイクロ・メゾ・マクロの各スケールのシミュレーション研究基盤の構築、各スケールに跨るマルチスケール・マルチフィジックス研究」の成果の一部です。

●参考文献

Nagai, Y. et al., Theoretical Analysis for Inelastic Neutron Scattering on $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ using Realistic Three-Dimensional 10-Orbital Tight-Binding Model, Journal of the Physical Society of Japan, vol.80, Supplement B, 2011, p.SB021-1-SB021-4.