

課題番号 :2014A-E16  
 利用課題名（日本語） :鉄系超伝導体におけるネマティック相の微視的構造と起源  
 Program Title (English) :Xray study of the nematic state in Fe-based superconductor  
 利用者名(日本語) :池内和彦<sup>1)</sup>, 李尚<sup>2)</sup>, 豊田真幸<sup>2)</sup>  
 Username (English) :Kazuhiko Ikeuchi<sup>1)</sup>, Shang Li<sup>2)</sup>, Masayuki Toyoda<sup>2)</sup>  
 所属名(日本語) :1) CROSS, 2) 名古屋大学  
 Affiliation (English) :1) CROSS, 2) Nagoya University  
 キーワード：鉄系超伝導、ネマティック状態、PDF 解析

## 1. 概要 (Summary)

鉄系における超伝導発現の機構は、その秩序パラメータ $\Delta$ の符号が逆格子空間内の $\Gamma$ 点とM点（反強磁性秩序の $\Gamma$ 点）周りのフェルミ面上で異なるならスピン揺らぎ由来である。一方、符号反転のない場合は、多バンド・多軌道性に伴う軌道揺らぎ（ $3d_{xz}$ - $3d_{yz}$  軌道間の電子占有数の揺らぎ）が関与する新機構が有力となる。後者の機構は、非磁性不純物による超伝導転移温度  $T_c$  の降下速度の研究結果に端を発し、理論側からもその可能性が指摘されたものである。現在さらに、スピンと軌道の二つの揺らぎの“協奏”も唱えられているが、この超伝導は、単一バンド系である銅酸化物系の磁氣的機構とは一線を画す可能性があり、その解明には、スピンと軌道のほか、それらと格子系との結合までを考慮することが重要となる。鉄系では、 $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  の相図がその典型例として知られるが、ここでは、その  $T_c$  や正方晶 $\leftrightarrow$ 斜方晶の転移温度  $T_S$  ( $>T_c$ ) より高い  $T^*$  と呼ばれる温度あたりから見え始めるネマティック相に焦点をあて、その相の起源として、スピン系と軌道自由度のどちらの揺らぎが主に関与しているかをまず識別する。ネマティック相が微視的にも一様な正方晶なら、たとえ、時間的に正方晶 $\leftrightarrow$ 斜方晶の揺らぎを持っている場合でも、静的物理量に4回対称性の破れは現れないので、そこでは極く小さな斜方晶歪みを持つ相への転移が既に実現しているか、静的な斜方晶への局所歪みがある分布で存在する構造をとっているかのいずれかのように思われる。どちらの場合でも、斜方晶軸の方向に偏りが生じた際に、4回対称性の破れが見えてくると思われる。

## 2. 実験(目的,方法) (Experimental)

本実験では、ネマティック相の真の姿が何であるのかを調べるために、X線回折データを使った2体相関分布関数法(atomic pair-distribution function: PDF

解析法)を手段に、その局所構造の観測を試みた。実験はBL14B1で行った。測定試料として、相図が広く知られた $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ 系と、光電子分光で特徴的なバンド準位分裂が高温領域から観測されているLiFeAs系を用いた。これら粉末試料に対してX線回折データを取り、PDF解析を行うことで局所歪みの温度変化を調べた。特に、局所歪みがどの程度の高温まで存在するかを知るために、15 K-300 Kの広い温度域でデータを取得した。

## 3. 結果と考察 (Results and Discussion)

測定したX線回折データのリートベルトフィットから見積もった平均構造をもとに、PDF解析を行った。図1に、その一例として、300Kの結果を示した。現時点での、平均構造のパラメータを用いた局所構造の計算では、正しくフィットできていないことがわかる。

原因として、今回フラックス法で育成した試料については、不純物ピークの影響が無視できない様子が上げられる。また、本系は二次元金属系であり、系の特性上、リートベルトフィットを行う際に選択配向を十分に加味する必要があり、この点も平均構造の決定に大きく影響したものと考えられる。

今後、そのような状況をふまえて、各測定温度におけるPDFの比較から特徴的な温度変化を見せるピークを探し、ネマティック相の出現と関連する変化を議論していく予定である。

また、試料の育成方法を改善して、再挑戦することも検討中である。

## 4. その他・特記事項 (Others)

なし