

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年 6月14日現在

機関番号：84502
 研究種目：基盤研究(C)
 研究期間：2010～2012
 課題番号：22540382
 研究課題名（和文） スピン密度波型反強磁性秩序によるフェルミ面不安定化の直接的検証
 研究課題名（英文） Direct Probing of Fermi Surface Instability with SDW-type Anti-ferromagnetic Order
 研究代表者
 櫻井 吉晴 (SAKURAI YOSHIHARU)
 (公財) 高輝度光科学研究センター 利用研究促進部門 副主席研究員
 研究者番号：90205815

研究成果の概要（和文）：高温超伝導体では、反強磁性相と超伝導相が近接して存在することから、スピン密度波型反強磁性体の出現によるフェルミ面不安定化が注目されている。本研究では、高分解能コンプトン散乱実験と再構成法により、反強磁性秩序と強相関遍歴電子系の相関を実験的に明らかにした。具体的には、鉄系高温超伝導体と銅酸化物高温超伝導体に应用した。銅酸化物高温超伝導体では、伝導を担うドーパされたホールの状態は、アンダー・ドーパ領域で揺らいでいる反強磁性秩序の影響を受けていることを明らかにした。

研究成果の概要（英文）：Fermi surface instability associated with SDW-type anti-ferromagnetic order draws much attention because the anti-ferromagnetic phase and superconducting phase exist closely each other. In this study we have performed joint studies of high-resolution Compton scattering experiment and reconstruction method, and have revealed experimentally the relation between anti-ferromagnetic order and correlated itinerant electron system. We measured iron-based superconductors and cuprate superconductors. In the cuprates we found that the conducting doped holes in the under-doped region are influenced by the fluctuating anti-ferromagnetic order.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,700,000	510,000	2,210,000
2011年度	800,000	240,000	1,040,000
2012年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
総計	3,300,000	990,000	4,290,000

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：強相関電子系、金属物性、超伝導材料・素子、物性実験、放射線・X線・粒子線

1. 研究開始当初の背景

フェルミ面は金属基底状態の特徴のひとつであり、物理的に興味深くかつ産業応用上重要な現象と密接な関係にあると考えられている。多くの理論的考察や間接的な実験事実から、フェルミ面の形状や配置がある物質の磁氣的秩序を引き起こすと指摘されている。しかし、多くの場合、磁気転移の前後でのフェルミ面の変化を直接的に観測した例は限られており、フェルミ面に起因した磁気転移機構の理解は進んでいない。

研究代表者のグループは、バルク状態のフェルミ面とその電子相関効果の研究を進めるために、高分解能コンプトン散乱実験技術と解析技術の開発を行ってきた。科学研究費補助金・基盤研究(B)「強相関物質のフェルミ面直接観測法の開発と応用」(2006年度～2009年度)では、高分解能コンプトン散乱実験と再構成手法を組み合わせたフェルミ面マッピング手法の開発を行った。

鉄系高温超伝導体の発見により、遍歴電子系のスピン密度波(SDW)型反強磁性状態におけるフェルミ面の不安定化現象が注目されている。SDW型反強磁性の出現と関係したフェルミ面不安定化はCrで議論されてきた問題であり、ほぼ同じ形状をした電子フェルミ面とホール・フェルミ面のネスティングによりSDW型反強磁性秩序が現れると考えられている。SDW相は中性子散乱や磁化率測定などで観測されているが、この磁気転移に関連したフェルミ面形状とその電子相関効果の変化を直接的に観測した例はほとんどなく、Crにおけるフェルミ面不安定化については未解決の部分が多い。

鉄系高温超伝導体の母物質でもそのSDW型反強磁性状態と関係していると考えられるネストしたフェルミ面構造が報告されている。同超伝導体ではSDWと超伝導が競合し、SDWが消滅すると超伝導が出現する。SDWによるフェルミ面の不安定化が超伝導を抑制しているとも考えられ、SDW型反強磁性相の出現により鉄系高温超伝導体の母物質のフェルミ面がどのように再構成されるか、あるいは消滅するか、は興味深い。

2. 研究の目的

本研究では、高分解能コンプトン散乱実験を利用したフェルミ面マッピング法により、遍歴電子系におけるフェルミ面不安定化を直接的かつ定量的に検証することを目的とする。具体的には、Cr、鉄系高温超伝導体及び銅酸化物高温超伝導体の母物質について実験を行う。鉄系及び銅酸化物高温超伝導体ではスピン密度波型反強磁性と超伝導の競合が指摘されており、本実験結果から不安定化するフェルミ面と超伝導を起こすフェルミ面の関係を考察する。

3. 研究の方法

高分解能コンプトン散乱実験と再構成手法により電子運動量密度を実験的に求め、電子運動量密度の変化からスピン密度波型反強磁性転移によるフェルミ面の形状変化を明らかにする。実験結果の妥当性や構造変化の影響を検討するために、第1原理バンド理論計算を行い、理論電子運動量密度を求める。

4. 研究成果

本研究では、Cr、鉄系高温超伝導体 $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ ($x=0.17, 0.20, 0.25$)、銅酸化物高温超伝導体 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0.0, 0.08, 0.15, 0.30$) のフェルミ面マッピングに必要なコンプトン・プロファイル、電子運動量密度分布、電子占有数密度分布を得た。

Crのコンプトン・プロファイル:

10Kと300Kで100方位のコンプトン・プロファイルを測定した。十分な測定精度をもつ測定を行ったが、有意義な温度変化(CDW転移に伴う変化)は観測されなかった。

鉄系高温超伝導体:

$\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ ($x=0.17, 0.20, 0.25$) の3試料について、c面内10方向のコンプトン・プロファイルを測定し、それぞれの試料のコンプトン・プロファイルにおいて、十分な結晶方位依存性が確認された。現在、直接フーリエ法による2次元電子運動量密度再構成とLCW法による2次元電子占有数密度の導出を行っている。

銅酸化物高温超伝導体:

$\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0.0, 0.08, 0.15, 0.30$) の試料について、直接フーリエ法による再構成とLCW法により、c軸に沿って積分した2次元電子占有数密度分布を求めた。図1に最適ドープ $x=0.15$ の結果を示す。この結果は、図2に示す第1原理バンド理論計算(KKR-CPA法)とよく一致していることを確認した。また、電子占有数密度から推測されるフェルミ面形状は、アンダー・ドープ領域とオーバー・ドープ領域では異なる結果になった。これは、アンダー・ドープ領域において、反強磁性揺らぎの影響を受けているものと推測される。反強磁性秩序の影響は、電子運動量密度分布において、ドープしたホール状態にも観測されており(Y. Sakurai *et al.*, Science **332**, (2011) 698-702)、現在、理論解析と考察を進めている。

また、オーバー・ドープ試料($x=0.30$)において、フェルミ面形状は高次のブリルアン・ゾーン内において観測されることを確認した。これはCu 3d軌道由来の電子状態に起因すると考えられ、Cu 3d軌道電子を検出しな

い陽電子消滅角度相関の結果では、このような高次のブリルアン・ゾーンにフェルミ面形状の痕跡は観測されていない。この結果は、コンプトン散乱のフェルミ面研究における新しい可能性を示唆している。この結果は、Phys. Rev. B **85** (2012) 115109 に発表した。

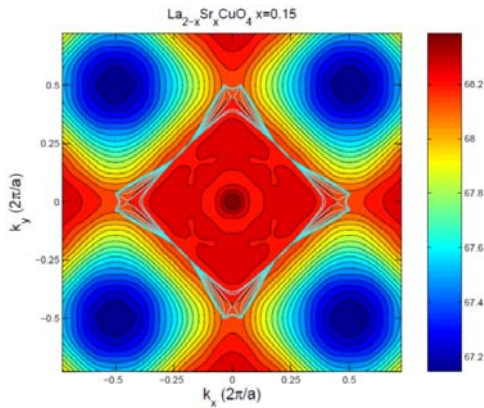


図 1 : $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0.15$) の電子占有数密度分布 (実験)

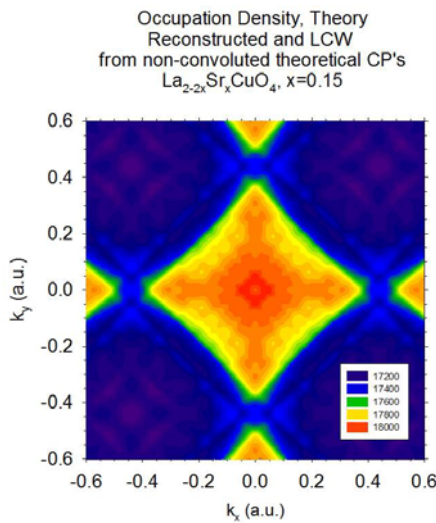


図 2 : $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0.15$) の電子占有数密度分布 (理論計算)

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 4 件)

- ① W. Al-Sawai, B. Barbiellini, Y. Sakurai, M. Itou, P. E. Mijnders, R. S. Markiewicz, S. Kaprzyk, S. Wakimoto, M. Fujita, S. Basak, H. Lin, Yung Jui Wang,

S. W. H. Eijt, H. Schut, K. Yamada and A. Bansil, Bulk Fermi surface and momentum density in heavily doped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ using high-resolution Compton scattering and positron annihilation spectroscopies, Phys. Rev. B, 査読有, **85** (2012) 115109.

- ② A. Koizumi, G. Motoyama, Y. Kubo, T. Tanaka, M. Itou and Y. Sakurai, f Electron Contribution to the Change of Electronic Structure in CeRu_2Si_2 with Temperature; A Compton Scattering Study, Phy. Rev. Lett., 査読有, **106** (2011) 136401.

- ③ Y. Sakurai, M. Itou, B. Barbiellini, P. E. Mijnders, R. S. Markiewicz, S. Kaprzyk, J.-M. Gillet, S. Wakimoto, M. Fujita, S. Basak, Y. J. Wang, W. Al-Sawai, H. Lin, A. Bansil and K. Yamada, Imaging Doped Holes in a Cuprate Superconductor with High-Resolution Compton Scattering, Science, 査読有, **332**, (2011) 698-702.

- ④ Aamir Ahmed, M. Itou, Shenggo Xu, Zhu'an Xu, Guanghan Cao, Y. Sakurai, James Penner-Hahn and Aniruddha Deb, Compting Ferromagnetism and Superconductivity on FeAs Layers in $\text{EuFe}_2(\text{As}_{0.73}\text{P}_{0.27})_2$, Phys. Rev. Lett., 査読有, **105** (2010) 207003.

[学会発表] (計 4 件)

- ① Y. Sakurai, Electron Momentum Density: A Complementary View to Charge Density, European Charge Density Meeting (ECDM-6), 2012 年 9 月 15 - 20 日, Hotel Patria, Strbske Pleso, Slovakia.

- ② Y. Sakurai, Evolving Electronic Structure of High-Tc Cuprates Studied by Compton Scattering, The 19th International Conference on Magnetism with Strongly Correlated Electron Systems, 2012 年 7 月 8 - 13 日, BEXCO, Busan, Korea.

- ③ Y. Sakurai, Evolving Electronic Structure of High-Tc Cuprates by Compton Scattering, ICC-IMR International Workshop on Search for New Physics in Transition Metal Compounds by Spectroscopies, 2011 年 7

月 28 - 30 日, Tohoku University, Sendai,
Japan.

- ④ Y. Sakurai, Electron momentum densities of high-Tc cuprates studied by high-resolution Compton scattering, Advances in X-ray Spectroscopy. Celebrating the achievements of Professor Malcolm J. Cooper, 2010 年 9 月 29 日、Warwick University, UK.

[その他]
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

櫻井 吉晴 (SAKURAI YOSHIHARU)
(公財) 高輝度光科学研究センター・
利用研究促進部門・副主席研究員
研究者番号: 90205815

(2) 研究分担者

伊藤 真義 (ITOU MASAYOSHI)
(公財) 高輝度光科学研究センター:
利用研究促進部門・副主幹研究員
研究者番号: 10344392