

研究課題名 高い反強磁性転移温度をもつ鉄系化合物 TlFe_2Se_2 の磁性

研究代表者名
九州工業大学・大学院生命体工学研究科・飯久保 智

研究分担者名
東北大学・金属材料研究所・藤田 全基

1. はじめに

超伝導転移温度 T_c が 50K を超える新規 Fe 系高温超伝導体は、その超伝導発現メカニズムに関して大きな注目を集めている。高い T_c の起源について現在盛んに議論がなされているが、そのうち最も注目を集めているのが磁気揺らぎである。FeAs 系を用いた中性子非弾性散乱では逆格子点(1/2,1/2,1/2)に強い磁気散乱が観測され、超伝導発現に関連があるのではないかと考えられている。申請者らのグループでも類似の結晶構造を持つ $\text{Fe}(\text{Se}_{1-x}\text{Te}_x)_y$ について磁気励起スペクトルの研究を行い、超伝導相では同じ逆格子点(1/2,1/2,1/2)に磁気散乱が観測されることを報告してきた。磁気揺らぎによる超伝導というシナリオのもとで考えると、その超伝導転移温度の上限を決定する重要な因子は磁気相互作用である。これまでに報告されている反強磁性秩序温度は高いもので高々150K 程度であり、それが室温を超える銅酸化物と比較すると低く、超伝導転移温度の大幅な増加も期待できない。

申請者らは類似の結晶構造を有する TlFe_2Se_2 が、450K という大変高い反強磁性秩序温度を有する点に着目した。この系に対する研究報告はこれまでのところほとんどなされておらず、わずかにメスバウアー、第一原理計算の報告があるのみである。元素置換による超伝導化なども期待され、大変興味深い系であると考えている。本研究の目的は、 TlFe_2Se_2 の電子状態の詳細を詳細な試料評価、中性子散乱・電子状態計算を組み合わせることにより明らかにし、高い磁気転移点に寄与する電子状態の全貌を明らかにすることである。

2. 研究経過

今年度に予定していた中性子散乱実験が全てキャンセルされたため、次年度以降の実験に備えた準備を中心に進めた。実験用試料については既に他の共同研究者より 2 g 程度のものを譲り受けていたが、中性子非弾性散乱では追加の試料が必要であると見込まれるため、試料作成環境の整備や試料作成に関する文献調査を行った。また電子状態計算に関しては、文献調査の結果、本系は非化学量論化合物である可能性が高まったため、これに対応できるような計算手法についての調査を行った。

3. 研究成果

まず本系に含まれる元素が有害なものであるため、グローブボックスを導入し、安全に進められる環境を整えた。また試料作成に使用するボックス炉、管状炉を整備し、試料評価用の X 線回折装置についても定常的に使用できる環境を整備した。単結晶作成装置としての FZ 炉についても立ち上げを行った。これらの環境を駆使すれば、系統的な試料作成が可能なる状況にまで来た。また電子状態計算については、本系が非化学量論化合物であることが報告されたため (W. Bao et al., arXiv:1102.0830.)、それに対応する計算手法の検討を行った結果、グリーン関数を用いた KKR-CPA の計算プログラムの入手と試用を行った。例えば FeCo の BCC 固溶体について磁気特性を計算した結果では、磁気モーメントや結晶磁気異方性エネルギーについて先行研究と対応する結果が得られることが確認できた。

4. まとめ

今年度については本課題を遂行する上での準備期間として位置づけ、上記の研究体制を整えることができた。次年度以降はより具体的に、試料作成、中性子実験、計算を進め、本系の高い磁気転移点に関する知見を得ることを進める。