

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名：量子ビームによる鉄系高温超伝導の物性研究

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）：

研究代表者

社本 真一（(独) 日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門・研究主席）

主たる共同研究者

BARON, Alfred（(独) 理化学研究所播磨研究所 准主任研究員）

3. 研究実施概要

本研究課題では、鉄系超伝導体の物性を明らかにするため、LnFeAs(O,F)系（Ln;ランタニド元素）を主な対象に、量子ビームにより物性を測定し、理論計算との比較を行った。その結果、非共鳴 X 線非弾性散乱により、PrFeAsO_{1-y} 単結晶のフォノン測定を行い、Fe-As の格子振動に第一原理計算との間に顕著な違いがあること(面内ソフト化)を発見した。また、LaFeAsO_{1-x}F_x 系について行った中性子非弾性散乱による磁気励起測定では、オーバードープで磁気揺らぎが消失することが明らかとなった。反強磁性秩序状態についても、5 バンドのタイトバインディング模型にオンサイトの電子間相互作用を導入したモデルハミルトニアンから出発し、平均場近似によって反強磁性秩序状態の秩序パラメータを決定した。さらに、非磁性状態と磁気秩序状態のバンド構造を計算し、バンド間遷移による面内光学伝導度を求めた。実験と同じ磁気モーメントを持つ磁気秩序状態では、実験で観測されているような低エネルギー領域での励起ピークが現れることを確認した。鉄 3d 電子の電子相関効果について、共鳴非弾性 X 線散乱 (RIXS) スペクトル測定を行い、理論計算結果と比較することによって、RIXS スペクトルが電子間斥力 ($U \sim 3$ eV) の大きさや局所的な反強磁性磁気相関を反映していることを明らかにした。母物質 AFe₂As₂ (A=Sr, Eu) の ⁵⁷Fe 核共鳴非弾性散乱スペクトルの温度依存性を測定し、鉄元素を選択してフォノン状態密度を抽出することにより、特定の光学振動モードの異常が、正方晶構造下での低温斜方晶構造の局所的揺らぎに対応していることが示された。さらに、アクチノイド系の物質探索では、U-T-Al 三元系 (T:鉄族元素) において新物質を発見した。URu₂Al₁₀ は斜方晶 YbFe₂Al₁₀ 型結晶構造をとる。ウラン化合物としては非常に珍しく、結晶場励起が観測された。

4. 事後評価結果

4-1. 研究の達成状況及び得られた研究成果

本研究課題では、次のような成果が得られた。

① PrFeAsO_{1-y} 単結晶のフォノン分散

Fe-As のフォノン振動のみが、第一原理計算から予想されるエネルギーより、見かけ上ソフト化していることを見出した。また鉄系超伝導体で単結晶を用いたフォノン測定に世界で初めて成功した。この成果は単結晶育成グループ、放射光非弾性 X 線散乱グループに加えて、理論チームが加わったことで初めて実現できた成果である。

② 反強磁性秩序状態の秩序パラメータの決定

バンドのタイトバインディング模型にオンサイトの電子間相互作用を導入したモデルハミルトニアンから出発し、平均場近似によって反強磁性秩序状態の秩序パラメータを決定した。この結果は、NPG Nature Asia Materials research highlight に掲載された。

③ LaFeAsO_{1-x}F_x 系オーバードープ試料での磁気揺らぎの消失

LaFeAsO_{1-x}F_x 粉末試料 $x=0.06$ および 0.08 の超伝導相 ($T_c > 24$ K) で、母相のスピン密度波相と同程度のスピン揺らぎの散乱強度が残る一方で、 $x=0.16$ の $T_c \sim 7$ K のオーバードープ試料ではそのスピン揺らぎが見えなくなったことから、スピン揺らぎと高い T_c との相関が明らかになった。これは超伝導の対称性の変化も示唆して

いる。

4-2. 総合的評価

JAEA「量子ビーム応用研究部門グループ」と理化学研究所「X線グループ」からなるこの分野を率いている最も大きなグループの一つである。その成果は上記4-1①②③にまとめられている。しかし残念ながら、個々の研究では大きな成果をあげながら、全体として研究代表者の「研究の思想」、別の言葉でいうと「研究の進むべき方向」、が明確でないのは残念である。たとえば①PrFeAsO_{1-y}のフォノン分散に関する研究成果は、それ自体評価されるが超伝導発現機構を追求するという大きな研究活動の中での位置づけが明確にされていない。本グループは日本における研究の中核の1つとして国際会議等を多く開催して鉄系に関する量子ビーム研究をリードしていることを考え一層の奮闘を期待したい。