



Title	Evolution of the Electronic Phase Diagram for Iron-based Superconductor LaFeP _{1-x} As _x 01-yF _y (y = 0 - 0.1)
Author(s)	Lai, Kwing To
Citation	大阪大学, 2014, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/50465
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

Abstract of Thesis

Name (Kwing To Lai)

Title	Evolution of the Electronic Phase Diagram for Iron-based Superconductor LaFeP _{1-x} As _x O _{1-y} F _y (y = 0 – 0.1) “鉄系超伝導体LaFeP _{1-x} As _x O _{1-y} F _y (y = 0 – 0.1)における電子相図の発展”
-------	--

Abstract of Thesis

Superconductivity of iron-based superconductor LaFeAsO can be induced by suppressing the antiferromagnetic phase through F doping. On the other hand, LaFePO itself is a superconductor, and F doping cannot significantly change T_c . The difference between the electronic behaviors in LaFeAsO and LaFePO can be realized from the difference in their Fermi surface topologies. In particular, around Γ point, a 3-dimenional Fermi surface with d_{z^2} orbital character appears at in LaFePO, while there is a cylindrical Fermi surface with the $d_{x^2-y^2}$ orbital character in LaFeAsO. In our previous study in R FeP_{1-x}As_xO_{0.9}F_{0.1} (R = La, Pr, Nd), a maximum $T_c \sim 28$ K as well as T linear behavior in resistivity and strong temperature dependent R_H are observed at $x = 0.6$ in R = La. Similar behaviors at $x = 0.6$ are also able to be observed in R = Pr and Nd in spite of the difference in lattice size. It suggests that these behaviors are driven by the change of electronic states due to P/As substitution, and such change corresponds to the exchange of the energy levels of the d_{z^2} and $d_{x^2-y^2}$ bands. We call this exchange as band crossover.

In this study, the effect of the band crossover has been further investigated by studying the electronic properties of polycrystalline LaFeP_{1-x}As_xO_{1-y}F_y with $y = 0$ and 0.05. For $y = 0$, a new superconducting dome (SC1 dome) with a maximum T_c of 12 K is observed around $x = 0 - 0.3$. This is separated from another SC dome (SC1 dome) with $T_c \sim 10$ K at $x = 0.6 - 0.8$ by an antiferromagnetic region around $x = 0.3 - 0.6$ (AFM2 phase) which is detected by NMR measurements. These behaviors construct a two-dome structure in the corresponding phase diagram. As y increases, the two SC domes merge together, changing to a double-peak structure at $y = 0.05$, and a single dome at $y = 0.1$. The evolution of the electronic behaviors shows that SC2 dome expands as y increases, and merges with SC1 dome. The expansion of SC2 dome is due to the spin fluctuation coming from the suppression of AFM2 phase when y increases. Strong temperature dependence of Hall coefficient is observed at $x = 0.3 - 0.8$ for $y = 0$, and at $x = 0.6 - 0.8$ for $y = 0.05$ and 0.1. This indicates the reconstruction of Fermi surface due to the band crossover and the presence of two different Fermi surface states in this system.

In addition, the magnetic properties of AFM2 phase for $y = 0$ is different from the antiferromagnetic phase in LaFeAsO (AFM1 phase). It is revealed by NMR that AFM2 phase has a long-ranged order but the magnetic moment is smaller than AFM1 phase. Furthermore, the magnetic transition is rather smooth without any structural transitions. The density of states revealed by NMR and specific heat decreases with increasing x , and it particularly decreases faster around the emergence of AFM2 phase, suggesting that the shrinkage of the d_{z^2} band is essential for the formation of AFM2 phase.

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏名 (Kwing To Lai)		
論文審査担当者	(職)	氏名
	主査 教授	田島節子
	副査 教授	黒木和彦
	副査 教授	萩原政幸
	副査 教授	花咲徳亮
	副査 准教授	宮坂茂樹

論文審査の結果の要旨

2008年に発見された鉄系化合物超伝導体は、銅酸化物に次ぐ高い転移温度 T_c を示すと同時に、複数軌道の関与したマルチバンド系であるということで注目を浴びている。中心骨格となる鉄とニクトゲン（或いはカルコゲン）は共通するものの、その他の構造にバリエーションがあり、組成や構造によって T_c をはじめさまざまな物性の違いがある。これらを統一的に理解する道筋はまだ得られていない。

本研究は、組成によって T_c を大きく変えることができる $\text{LaFeP}_{1-x}\text{As}_x\text{O}_{1-y}\text{F}_y$ をとりあげ、As濃度やF濃度を種々に変化させた一連の試料についての系統的な物性研究による電子状態の解明を目指したものである。3種類のF濃度について、P/As全固溶系を作製し、詳細な結晶構造解析、電気抵抗やホール係数などの輸送特性測定、比熱測定を行った結果、As60% (P40%)付近を境に電子状態が質的に変わる様子を見出した。特にFフリー或いはF濃度の低い試料では、この電子状態の変化が T_c の組成依存性における二つのピークとして観測され、超伝導対形成機構についても二つの異なるものが存在することを強く示唆する結果となった。

P濃度の高い組成における T_c の低い超伝導は、核磁気共鳴実験との比較などから、スピニラギを媒介としたものである可能性が高いことが結論づけられたが、P濃度が低く T_c の高い組成の超伝導機構については、フェルミ面を構成する電子軌道が変化することも考慮し、更なる実験的理論的検討が必要であることがわかった。

本研究の独創性は、(i)作製が困難なPを含む $\text{LaFeP}_{1-x}\text{As}_x\text{O}_{1-y}\text{F}_y$ の一連の試料の合成に成功した点、(ii)それを用いた系統的な物性測定を行った点、(iii)更にはその結果二つの質的に異なる電子状態が存在することを見出した点にある。

結晶構造がAs/P濃度に対して線形に変化するのに対して、 T_c や電気抵抗率、ホール係数などの物理量がすべて途中の濃度で最大値を取るなど非単調な振る舞いをすることは、超伝導対形成に関わる相互作用の大きさがフェルミ面のネスティング条件でのみ決まっているわけではないことを明確に示したものと考えられる。この結果は、鉄系超伝導体全体の統一的理解に大きく貢献するものであり、高く評価できる。

よって、本論文は博士（理学）の学位論文として十分価値あるものと認める。