



Title	Effect of magnetism on lattice dynamics in Sr(Fe <sub>1-x</sub> Co <sub>x</sub> ) <sub>2</sub> As <sub>2</sub> as seen via high-resolution inelastic x-ray scattering
Author(s)	村井, 直樹
Citation	大阪大学, 2016, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/56091">https://doi.org/10.18910/56091</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

## 論文内容の要旨

氏名 ( 村井直樹 )

論文題名

Effect of magnetism on lattice dynamics in  $\text{Sr}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  as seen via high-resolution inelastic x-ray scattering  
 (高分解能非弾性X線散乱を用いた $\text{Sr}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ の格子ダイナミクスへの磁性の効果)

論文内容の要旨

鉄系超伝導体のフォノン分散の研究はこれまで多く報告されているが、実験結果と第一原理計算との間に顕著な不一致が見られる。具体的には、(1): 理論的に予想されるフォノン分散の異方性が実験的に観測されていない、(2): 常磁性相のフォノンを適切に再現するモデルが存在しないという2点が主な問題点である。

本研究では非弾性X線散乱を用いて鉄系超伝導体 $\text{Sr}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ のフォノン分散測定を行い、上記(1), (2)の解明を目指した。多くの鉄系超伝導体物質は低温相で微小なマルチドメイン領域が形成されるため、結晶の持つ異方的な性質を抽出できないという問題が生じる。そこで我々は、一軸圧の印加によって単一ドメイン化した結晶を用意し、フォノン分散の測定を行った。その結果、結晶の4回対称性を破る磁気秩序に由来するフォノン分散の異方性の観測に初めて成功した。

測定結果と第一原理計算との比較を行い、実験的に決定した磁気秩序相におけるフォノン分散の異方性は理論予想よりも約3倍近く小さいことを明らかにした。我々は実験と理論との不一致を解消する簡単なモデルを考え、磁気秩序相における実験結果を再現した。さらに、常磁性相でのフォノン分散を同様のモデルで再現し、磁気揺らぎのフォノンへの影響を指摘した。これらの結果は、上記の(1),(2)の問題を解消すると同時に、鉄系超伝導体における静的・動的な磁性とフォノンとの強い結合を示す結果である。

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( 村 井 直 樹 )			
	(職)	氏 名	
論文審査担当者	主 査	教授	田島 節子
	副 査	教授	萩原 政幸
	副 査	教授	黒木 和彦
	副 査	招聘教授	Alfred Q. R. Baron
	副 査	准教授	宮坂 茂樹
	副 査	准教授	酒井 英明
論文審査の結果の要旨			
<p>2008年に発見された鉄化合物超伝導体は、銅酸化物に次ぐ転移温度の高さと磁性を持った鉄の電子が担う超伝導であることから、大きな注目を浴び、世界中で活発に研究が行われている。従来のBCS理論で考えられてきたような格子振動（フォノン）が直接超伝導対形成機構に関与している可能性は低いことがわかっているが、フォノンと電子系との相互作用については未解明な部分が多い。また、この系は電子相関もそれほど強くないことから、第一原理計算が比較的種々の物性実験結果をよく説明すると考えられている。一方で、フォノン分散に関しては、第一原理計算結果が実験結果と顕著に異なることも報告されており、本研究はこれらの問題の原因究明に挑んだものである。</p> <p>本論文の研究では、典型的な鉄化合物超伝導体である <math>\text{Sr}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2</math> を取り上げ、SPRING-8において非弾性X線散乱実験を行い、フォノン分散を詳細に測定した。その結果、本系の低温でのフォノンモード分裂の観測に、世界で初めて成功し、これが構造相転移に由来するものではなく、磁気秩序に起因した分裂であることも突き止めた。磁気秩序によって引き起こされたフォノンモードの分裂は、過去に観測例はない。1ミリメートル以下の微小結晶を用いたフォノン分散の測定は、非弾性X線散乱しか手段がない。一軸加圧による測定や単一ドメイン領域での測定、複数の温度点や組成での測定など、結論を得るために多くの緻密な実験を行ったことは、高く評価できる。</p> <p>また、密度汎関数法によるフォノン分散の理論計算を自ら行い、磁性のフォノンへの影響を“バネ定数を2回対称性を与える成分”と“4回対称性を与える成分”に分けて考えるというモデルでうまく取り込み、実験結果をほぼ再現することに成功した。これにより、(i)モード分裂の大きさが磁性を考慮しない第一原理計算より小さい理由、(ii)高温の常磁性相でもフォノン周波数が第一原理計算からずれる理由、の両方を説明できた。簡単なモデルではあるが、この結果の物理的意味は大きく、鉄系超伝導体の電子状態について、重要な情報を引き出したと言える。即ち、磁気秩序相でも常磁性相でも、秩序相で観測されているようなストライプ型の磁気秩序揺らぎが存在しており、その格子ダイナミクスへの影響が非常に大きいことがわかった。これにより、磁気揺らぎを正しく取り込んでいない理論モデルは、本物質系の物性の記述には不適であることが判明した。揺らぎの時間スケールに関する情報は、今回の測定では抽出できなかったが、今後別の実験手法で決定できる可能性も示唆された。</p> <p>以上のように、本研究は、鉄化合物超伝導体の電子状態において本質的に重要な因子をあぶりだした点、また磁気・格子相互作用を世界で初めて観測した点、フォノンの測定から磁性についての情報を引き出す方法を提示した点などから、極めて独創的なものであると評価できる。よって、本論文は博士（理学）の学位論文として十分価値のあるものと認める。</p>			