

BaFe₂As₂ の高圧下結晶構造

Crystal structure of BaFe₂As₂ under high pressure

江口直也¹、児玉通大¹、藤巻孔二¹、榮永茉利¹、石川文洋¹
大村彩子²、中山敦子²、山田裕³、光田暁弘⁴、中野智志⁵

1 新潟大院自然、2 新潟大超域、3 新潟大理、4 九大院理、5 NIMS

2008年以降、鉄ニクタイト化合物は、BCS理論では説明できない超伝導物質として注目されるようになった[1]。その中でも、BaFe₂As₂は、キャリアドーピングや加圧により超伝導を生じる物質であることが知られている[2]。我々は、改良型ブリッジマンアンビルセルを用いて、BaFe₂As₂の高圧下電気抵抗測定をおこなった。その結果、BaFe₂As₂が3.0 GPaで超伝導転移温度 $T_c = 35$ Kのゼロ抵抗を伴う超伝導を示すことを発見した[3]。

本研究では、BaFe₂As₂の伝導機構を構造の側面から明らかにすることを目的として、室温・高圧下での粉末X線回折実験をおこなった。ダイヤモンドアンビルセルに試料と圧力媒体のHeを封入して加圧し、BL-18Cにおいて波長 $\lambda = 0.6191$ Åで測定した。そして、リートベルト法を用いて得られた回折パターンを解析した。その結果、BaFe₂As₂は16.5 GPaまで正方晶(空間群 $I4/mmm$)をとることが分かった。また、16.5 GPaの格子パラメータ a 、 c を常圧のものと比較すると、 a で3.4%、 c で6.9%小さいことが分かった。As-Fe-As結合角 α 、 β の圧力依存性をFig.1に示す。一般に、鉄ニクタイト化合物超伝導体において、As-Fe-As結合角が正四面体角度 109.47° に近づくほど、 T_c が高くなる傾向があると示唆されている[4]。しかし、 α と β は16.5 GPaまでの圧力において、 109.47° を示さない。一方で Kimberらは、As-Fe-As結合角が4 GPaで正四面体角に最も近づくことを報告している[5]。この結果は、圧力媒体にメタノール:エタノール = 4 : 1の混合液を用い、高圧下での粉末中性子回折実験により得たものである。これにより、加圧方法の違いでBaFe₂As₂の結晶構造の圧力依存性が異なることが明らかになった。

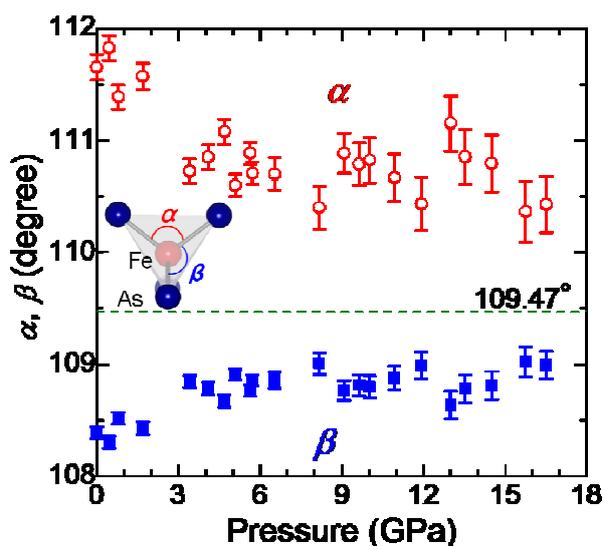


Fig.1 As-Fe-As 結合角の圧力依存性

[1] Y. Kamihara *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **130**, 3296 (2008).

[2] 例えば、M. Rotter *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 107006 (2008).

[3] F. Ishikawa *et al.*, Phys. Rev. B **79**, 172506 (2009).

[4] C-H. Lee *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 083704 (2008).

[5] S. J. Kimber *et al.*, Nat. mater. **8**, 471(2009).