

電子ドーピング型鉄系超伝導体 $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{T}_x)_2\text{As}_2$ ($T = \text{Ni, Cu, Zn}$)の Fe サイト置換効果

Effects of transition-metal substitution in the electron-doped $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{T}_x)_2\text{As}_2$ ($T = \text{Ni, Cu, Zn}$)

出田真一郎¹, 吉田鉄平^{1,3}, 西一郎¹, 藤森淳^{1,3}, 久保田正人²,
小野寛太², 中島正道^{1,3,4}, 木方邦宏^{3,4}, 富岡泰秀^{3,4}, 李哲虎^{3,4},
伊豫彰^{3,4}, 永崎洋^{3,4}, 伊藤利充^{3,4}, 中島裕司⁵,
松尾明寛⁵, 笹川崇男⁵, 内田慎一^{1,3}, 有田亮太郎^{3,6}

¹東大理, ²高工研, ³JST-TRIP, ⁴産総研, ⁵東工大応セラ研, ⁶東大工

鉄系高温超伝導体の母物質 BaFe_2As_2 の Fe サイトを Ni, Cu, Zn 置換により電子ドーピングした $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{T}_x)_2\text{As}_2$ ($T = \text{Cu, Ni, Zn}$: T -Ba122) は、置換量 x が同じ場合、Ni, Cu, Zn 置換でドーピングされる電子量は、Co に比べてそれぞれ 2、3、4 倍になると予想される。角度分解光電子分光 (ARPES) を用いた先行研究では、Co-Ba122 についてフェルミ面の 3 次元形状が調べられ [1, 2]、化学ポテンシャルの変化がリジッドバンド的であることが報告されている [1]。一方、スーパーセルに対する密度汎関数法 (DFT) 計算では、Fe サイトを不純物 (Co, Ni, Cu, Zn) で置換すると、増加した電子が不純物サイトに局在することが示されている [3]。このように、Fe サイトの遷移金属置換が電子ドーピング量及び電子構造に与える影響について、いまだコンセンサスが得られていない。

我々は、電子ドーピング型 $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{T}_x)_2\text{As}_2$ ($T = \text{Ni, Cu, Zn}$) の ARPES を行い、フェルミ面の 3 次元形状を調べた。Cu-Ba122 は $x \sim 0.044$ で超伝導転移温度 $T_c \sim 2$ K、Ni-Ba122 は $x \sim 0.05$ で $T_c \sim 20$ K を示す [5, 6]。図 1 に ARPES で観測されたフェルミ面の体積から見積もった電子数を、不純物置換により予想される電子数増加でプロットした結果を示す。この結果から Ni, Cu の置換に伴うフェルミ面の体積変化が、リジッドバンドモデルからずれていることがわかる。Co-, Ni-, Cu-, Zn-Ba122 のフェルミ面の体積、超伝導・磁気構造転移温度の違いについて議論する。

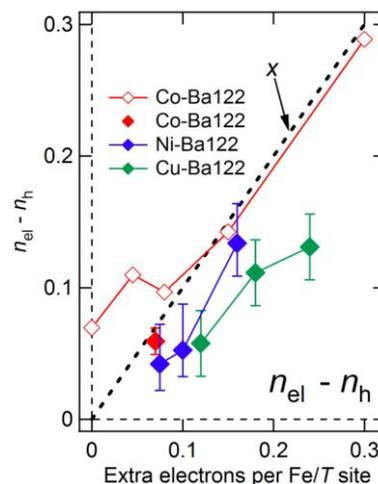


図 1: Co, Ni, Cu の置換により予想される電子数増加とフェルミ面の体積から見積もられた電子数の関係。

[参考文献]

- [1] V. Brouet *et al.*, PRB **80**, 165115 (2009).
- [2] W. Malaeb *et al.*, JPSJ **78**, 123706 (2009).
- [3] H. Wadati, *et al.*, PRL **105**, 157004 (2010).
- [4] P. C. Canfield *et al.*, PRB **80**, 060501(R) (2009).
- [5] N. Ni *et al.*, PRB **82**, 024519 (2010).