

FeSeTe 高温超伝導体の局所構造

出口雄樹^A、細川伸也^B、高野義彦^C

^A熊本大学大学院自然科学研究科、^B熊本大学大学院先端科学研究部、^C物質材料研究機構

FeSe_xTe_{1-x} は、最も単純な鉄系超伝導体の一つとして、構造的あるいは磁性的自由度と超伝導性の関係が詳しく調べられている。特に、磁気ゆらぎがその超伝導性に大きな役割を持つことは広く信じられている。X 線回折[1]によれば、FeSe_{0.4}Te_{0.6} は (Te, Se)-Fe-(Se, Te) と並ぶ層状構造を持ち、Fe 面に対して、Se 面はやや Te 面より低い位置にある。

われわれは、蛍光 X 線ホログラフィー (XFH) 法を用いて Fe 元素のまわりで選択的に、3 次元的な原子イメージを構築した。その結果、X 線回折実験の結果とは必ずしも適合しない特徴がいくつか見られた。例えば、Se 面と Te 面の原子イメージの位置に大きな違いは見られず、Se と Te はかなりランダムに配置していることが考えられる。また、Fe 面上の Fe 原子の位置には格子点からの大きなシフトが見られ、原子間距離は 2 Å 程度で非常に短い。

本研究でわれわれは Fe K 吸収端付近で XAFS 測定を行うことにより、FeSe_{0.4}Te_{0.6} 高温超伝導体の局所構造を詳しく探索することを試みた。その結果は、XFH の結果をほぼ追認していることを見出した。発表では、詳しくその結果を紹介する。

[1] M. Tegal, et al., *Solid State Commun.* **150**, 383-385 (2010).

[2] Y. Ideguchi, et al., *Z. Phys. Chem.* **230**, 489-498 (2016).

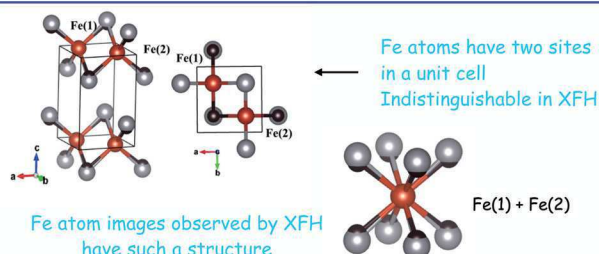
Abstract

$\text{FeSe}_x\text{Te}_{1-x}$ is one of the simplest Fe-based superconductors, and has intensively been studied concerning the interplay between structural or magnetic degrees of freedom and superconductivity. It is widely accepted that magnetic fluctuations play a very important role for their superconducting nature. X-ray fluorescence holography (XFH) is a powerful tool for characterizing local structures of crystals, and three-dimensional atomic images can be reconstructed around a specific element emitting fluorescence x-rays. We have carried out Fe K α XFH experiment on $\text{FeSe}_{0.4}\text{Te}_{0.6}$ at 300 and 100 K at BL39XU of SPring-8. The reconstructed atomic images reveal different from diffraction results using x-ray [1,2] and neutrons [2]. In particular, Fe-Fe neighbor length is too short.

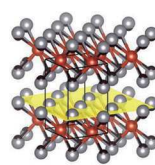
To examine it, XAFS measurements were performed near the Fe K edge in the temperature range of 30-300 K. Peaks are observed at the similar length range around the Fe atoms.

[1] M. Tegel et al., Solid State Commun. 150, 383 (2010).

[2] D. Louca et al., Phys. Rev. B 81, 134524 (2010).



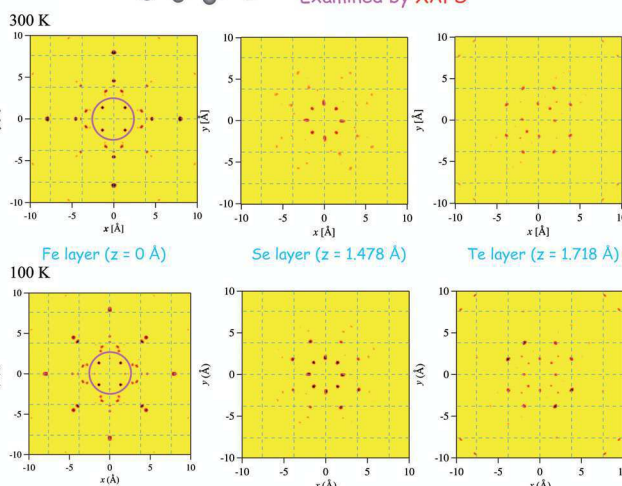
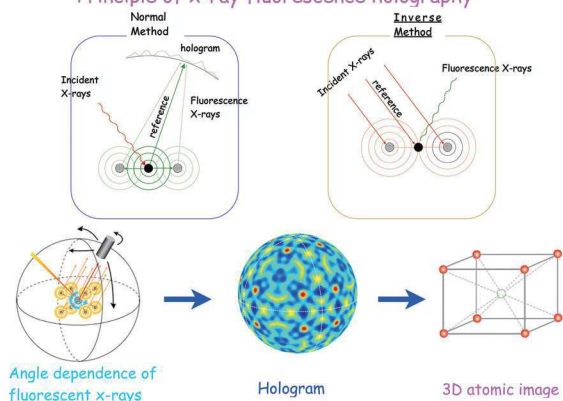
Reconstructed images around Fe



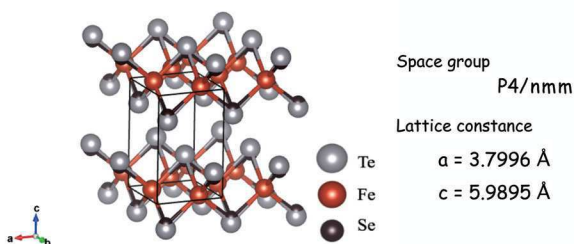
An atomic images on the (001) plane at 300 K and 100 K

Too short Fe-Fe neighbor length of about 1.8-2.0 Å Examined by XAFS

Principle of x-ray fluorescence holography



$\text{FeSe}_{0.4}\text{Te}_{0.6}$ crystal structure



Atomic position in the $\text{FeSe}_{0.4}\text{Te}_{0.6}$ crystal

Atom	Wyckoff position	x	y	z
Fe	2a	3/4	1/4	0
Se	2c	1/4	1/4	0.2468
Te	2c	1/4	1/4	0.2868

bond length

Fe - Se = 2.4071 Å

Fe - Te = 2.5613 Å

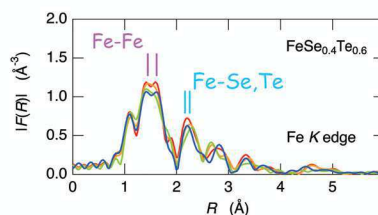
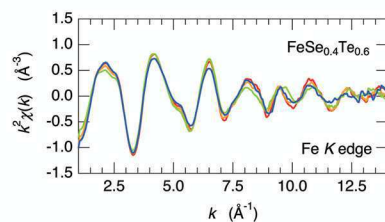
"chalcogen height"

Fe atoms layer - Se atom = 1.478 Å

Fe atoms layer - Te atom = 1.718 Å

The difference between Se and Te atoms = 0.24 Å

XAFS measurements



Clear peaks are observed at the short Fe-Fe neighbor length of about 1.8-2.0 Å