

R1215

直線偏光二次元光電子分光による  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  の原子軌道解析Atomic-orbital analysis of  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  Fermi surfaces by two-dimensional photoelectron spectroscopy with linearly polarized synchrotron radiation

滝沢 優<sup>a</sup>, 難波 秀利<sup>a</sup>, 太田 俊明<sup>a</sup>, 大串 研也<sup>b</sup>, 松井 文彦<sup>c</sup>, 大門 寛<sup>c</sup>  
 Masaru Takizawa<sup>a</sup>, Hidetoshi Namba<sup>a</sup>, Toshiaki Ohta<sup>a</sup>, Kenya Ohgushi<sup>b</sup>, Fumihiko Matsui<sup>c</sup>,  
 Hiroshi Daimon<sup>c</sup>

<sup>a</sup>立命館大学, <sup>b</sup>東大物性研, <sup>c</sup>奈良先端科学技術大学院大学  
<sup>a</sup>Ritsumeikan Univ., <sup>b</sup>ISSP, <sup>c</sup>NAIST

近年発見された鉄ヒ素系超伝導体のフェルミ面を構成するバンドの  $d$  軌道成分を決定するために、母物質の  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  試料について直線偏光の励起光を用いた二次元光電子分光測定を行った。試料を面内回転することにより、四回対称性を持つフェルミ面の観測に成功した。しかしながら、観測された二次元光電子強度角度分布には、対称性の低下が見られた。このことより、 $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  のフェルミ面を構成する原子軌道は  $d_{yz}$ ,  $d_{zx}$ ,  $d_{3z^2-r^2}$  と示唆された。

We have performed the two-dimensional photoelectron spectroscopy measurements on  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$  with linearly polarized synchrotron radiation in order to determine  $d$  orbital characters of the Fermi surfaces of the iron-based superconductors. By rotating the sample, we have obtained the Fermi surfaces with four-fold symmetry. However, the symmetry-lowered photoelectron intensity angular distribution indicates that the Fermi surface around the  $\Gamma(Z)$  point consists of  $d_{yz}$ ,  $d_{zx}$ , and  $d_{3z^2-r^2}$  orbitals.

**Keywords:**  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ , two-dimensional photoelectron spectroscopy, Fermi surface, atomic-orbital analysis

**背景と研究目的:** 近年発見された鉄ヒ素系超伝導体のフェルミ面は、銅酸化物高温超伝導体とは異なり、3次元的な分散を示し、また、5つの $d$ 軌道が混成した多バンドで構成されている。このような特異な電子状態を持つ鉄ヒ素系超伝導体の超伝導機構解明には、フェルミ面を構成するバンドの $d$ 軌道成分を決定することが重要である。各バンドを構成する原子軌道の対称性の決定には、直線偏光した放射光を励起光として用いる角度分解光電子分光法がとても有用である。特に、二次元表示型球面鏡電子分析器(DIANA)[1]を用いた二次元光電子分光測定を行うと、試料と入射光の幾何的配置を一定にしたまま、広い放出角度範囲の光電子を分析できる。さらに、直線偏光の放射光を用いて測定される光電子スペクトル強度の角度分布に消滅則が見えるという特徴により、バンドを構成する原子軌道の特定が可能である[2]。今回、我々は鉄ヒ素系超伝導体の母物質である $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ のフェルミ面を構成する原子軌道を特定するために、直線偏光二次元光電子分光測定を行った。

**実験:** 二次元光電子分光測定は立命館大学SRセンターにおける直線偏光軟X線ビームラインBL-7で行った。直線偏光した放射光の電場ベクトルは水平面内にある。 $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ 単結晶は自己フラックス法により作製した[3]。 $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ 単結晶の清浄表面は、超高真空中でのへき開によって得た。清浄表面の結晶性は、低速電子回折により $1\times 1$ スポットを確認した。測定温度は室温で、真空度は約 $1\times 10^{-8}$  Paの超高真空中で行った。二次元光電子分光分析には、DIANAを用いた。DIANAを用いることによって、二次元光電子強度角度分布は効率良く得られる。今回の実験では、二次元光電子強度角度分布は、取り込みエネルギー幅を300 meV、ため込み時間を30秒に設定して行った。励起光の光エネルギーを約46.5 eVに設定し、三次元ブリュアン域の $\Gamma$ 面を測定した。全エネルギー分解能は、約600 meVである。角度分解能は、約 $1^\circ$ である。

**結果、および、考察:** 図1に角度積分型光電子分光スペクトルを示す。先行研究と同様に、フェルミ準位近傍に鋭いFe 3d由来のピーク

クが観測された。図 2 に Fe 3d 状態の二次元光電子分光結果を示す。フェルミ準位近傍 ( $E = 0.0$  eV,  $-0.2$  eV) では、 $\Gamma$ (Z)点付近と X 点付近とで強度が強く、先行研究で観測された  $\Gamma$  点でのホール面と X 点での電子面のフェルミ面と一致する[4]。また、エネルギーを変化させると、二次元光電子強度角度分布パターンが変化しており、 $\Gamma$ (Z)点付近の強度が約  $-0.6$  eV 以下で弱くなっている。これは、 $\Gamma$  点付近の Fe 3d のバンドが約  $-0.6$  eV 以下でギャップを持っていることと対応している[5]。

また、試料を面内で回転させた測定結果から、90 度回転させた二次元光電子強度角度分布パターンが同様であった。このことより、観測されたバンド構造は正方晶の結晶構造と同じ四回対称性を持つことが確認された。しかしながら、フェルミ準位近傍 ( $E = 0.0$  eV,  $-0.2$  eV) の二次元光電子強度角度分布パターンにおいて、左右の Z( $\Gamma$ )点付近では光電子強度が強いに対し、上下の Z( $\Gamma$ )点付近では光電子強度が弱い。この四回対称性から二回対称性への対称性の低下は、フェルミ面を構成する原子軌道と励起光の直線偏光との関係によると考えられる。そこで、5 バンド模型で計算されたフェルミ面[6]を用い、各原子軌道からの光電子放出角度分布[7]を考慮したフェルミ面の二次元光電子強度角度分布パターンのシミュレーションと比較したところ、フェルミ面を構成する原子軌道は  $d_{yz}$ ,  $d_{zx}$ ,  $d_{3z^2-r^2}$  と示唆された。

## 文 献

- [1] H. Daimon, Rev. Sci. Instrum. **59**, 545 (1988).
- N. Takahashi *et al.*, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **163**, 45 (2008).
- [2] 例えば、F. Matsui *et al.*, Phys. Rev. B **72**, 195417 (2005).
- [3] Kenya Ohgushi and Yoko Kiuchi, Phys. Rev. B **85**, 064522 (2012).
- [4] W. Malaeb *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 123706 (2009).
- [5] Y. Zhang *et al.*, Phys. Rev. B **83**, 054510 (2011).
- [6] S. Graser *et al.*, New J. Phys. **11**, 025016 (2009).
- [7] S. M. Goldberg, C. S. Fadley, and S. Kono, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **21**, 285 (1981).

## 論文・学会等発表 (予定)

- (1) 滝沢優, 難波秀利, 太田俊明, 大串研也, 松井文彦, 大門寛, 日本物理学会 2012

年秋季大会 (ポスター発表)

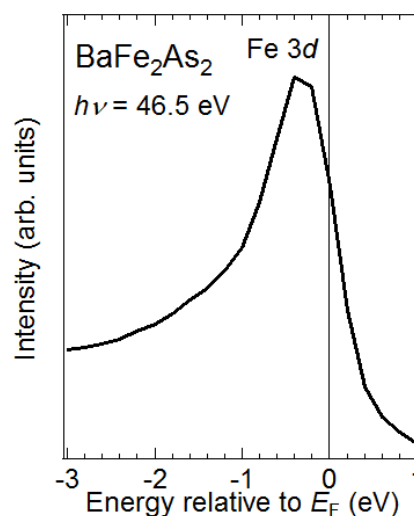


Fig. 1: Angle-integrated photoelectron spectrum of BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>.

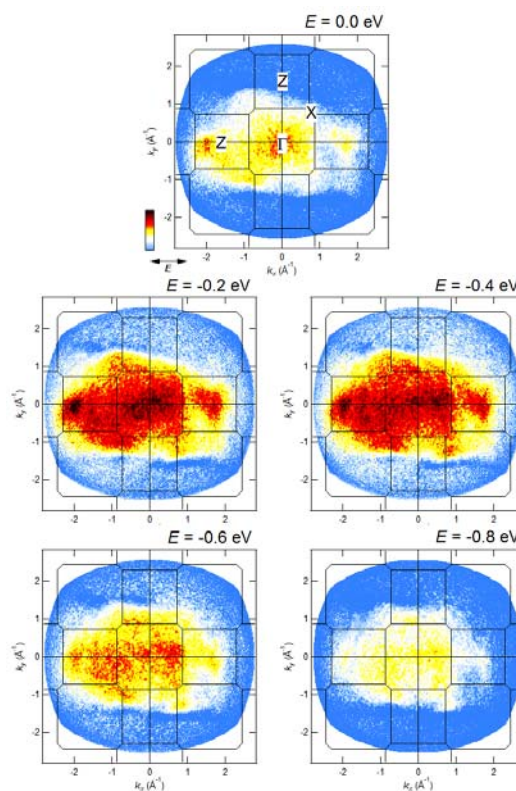


Fig. 2: Two-dimensional photoelectron spectroscopy results of BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>. Solid lines indicate the Brillouin zones.