

鉄系超伝導母物質における磁気 及び 電荷四重極モーメントと軌道秩序

— 第一原理計算 LDA+U 法によるアプローチ —

日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター, CREST(JST)

町田昌彦¹, 中村博樹

鉄系超伝導体の発見以来、その母物質の磁気モーメントについては、多くの議論がなされてきたが、クリアな解決には、未だ至っていない。まず、発見以後、直ぐにストライプ型反強磁性が安定であることが第一原理計算により示されたが、その磁気モーメント値は $2\mu_B$ と大きく実験にて観測された値 ($\sim 0.3\mu_B$) とは大きくかけ離れており、その原因が問題となっていた。しかし、最近報告された F. Cricchio らによる LDA + U 法による第一原理計算 (F. Cricchio et al., (Phys. Rev. B 81 (2010) 140403)) によると、U の値が 0 (つまり、従来 of 計算と同じ) とすると、やはり $2\mu_B$ を示す反強磁性状態が安定だが、U の値を増大させると、 $2\mu_B$ と $0.3\mu_B$ 程度の低い値を示す二つの状態が二つのミニマムを構成するようになり、中間的値 (2~3) になると、最安定状態は、 $0.3\mu_B$ 程度の低い状態に移行することが分かった。しかも、興味深いことは、 $0.3\mu_B$ 程度の低い状態は、軌道毎に入る電子のスピンの向きが逆向きとなり、軌道間でスピンを相殺している上、電荷密度分布はラグビーボール状にひしゃげることが分かった。つまり、電気四重極モーメントが有意な値を持ち、軌道秩序が発達する。一方、 $2\mu_B$ と高いモーメントを示す状態は、軌道間でスピンを揃え、電気四重極モーメントはほぼゼロであり、電荷密度分布は等方的である。以上の結果から、鉄系超伝導体においては、二つの状態がエネルギー的に近い状態にあり、中間的 U 値では、電気四重極モーメントを持つ低スピン状態が安定となることが分かったが、これは、最近の複数の実験事実と矛盾なく低スピン軌道秩序状態が母物質の基底状態である可能性が高い。講演では、この新しい状態について、詳述する他、何故、その状態が安定にあらわうのかについて議論し、最後に超伝導発現メカニズムとの関連について言及したい。

¹E-mail: machida.masahiko@jaea.go.jp