

鉄系超伝導体反強磁性相における光学遷移の異方性

京大 基研^A, 仙台高専^B, JST-TRIP^C 杉本 高大^{A, 1}, 兼下 英司^B, 遠山 貴己^{A, C}

鉄ヒ素系超伝導体母物質の一つである BaFe_2As_2 (122 系) はネール温度以下で反強磁性を示す。このとき同時に構造相転移も起こり、Fe-Fe ボンド長の短い方に強磁性的で、それに垂直な方向に反強磁性的である。 BaFe_2As_2 単結晶に一軸圧力を加えることで detwin した試料を用いた実験から、構造相転移温度前後よりも低い温度で光学伝導度に異方性が現れることがわかっている [1, 2]。これらの実験によると、低エネルギーでは反強磁性方向の光学伝導度が強磁性方向のそれよりも大きくなるが、高エネルギーではその大小関係が逆転する。バンド間遷移による光学伝導度の異方性と反強磁性相の関係を明らかにするため、一粒子励起状態を詳しく調べる必要がある。

我々はまず、5 軌道ハバード模型を平均場近似によって自己無撞着に解くことで基底状態の波動関数とエネルギーバンド分散を数値的に導出した。この結果を用いて、直接遷移に基づく光学伝導度を求めると、実験と一致した傾向の異方性を見出すことができた。我々はこの異方性が次の二つの要素に起因することを突き止めた [3]。一つはバンド間遷移の始状態と終状態のパリティで、もう一つはバンド構造における線形分散（ディラック分散）である。相互作用のパラメータを変化させてバンド分散からディラック分散を消滅させることで、この異方性が消えることもわかった。当日は BaFe_2As_2 で得られた上述の結果に加えて、 LaFeAsO (1111 系) における光学伝導度の数値計算の結果も紹介する。また、異方性の起源として盛んに議論されている軌道秩序を入れたときの光学伝導度の変化についても説明する。

参考文献

- [1] A. Dusza *et al.*, EPL **93** (2011), 37002.
- [2] M. Nakajima *et al.*, J. Phys. Chem. Solids **72** (2011), 511; M. Nakajima *et al.*, private communication.
- [3] K. Sugimoto *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 033706.

¹E-mail: koudai@yukawa.kyoto-u.ac.jp