

鉄砒素系反強磁性金属相のスピン・電荷励起

— 非弾性中性子散乱と共鳴非弾性 X 線散乱 —

京都大学 基礎物理学研究所 遠山 貴己¹

鉄砒素系高温超伝導の母物質は反強磁性金属相であり、反強磁性ベクトル $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ で特徴付けられる。反強磁性秩序出現にはファルミ面の形状とともに鉄イオン内の電子間相互作用が重要であると考えられている。モット絶縁体が母物質である銅酸化物ほど相関効果は強くはないが、無視できるほど小さくはない。また、電子状態の詳細を議論するには鉄を構成する 5 個の軌道を取り扱うことが必要である。したがって、鉄砒素系反強磁性金属相の物理は多軌道・相関系の物理ということになる。スピンと電荷の自由度が軌道自由度と絡まってどのように振舞うのか、高温超伝導の起源とも関連して興味をもたれている。

本研究では、5 軌道ハバード模型の基底状態を $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ 反強磁性秩序を持つ平均場近似で求め、そこからの動的スピン・電荷感受率を乱雑位相近似で計算した。反強磁性秩序に加えて yz と zx 軌道の電子占有数差を生み出す強軌道秩序変数を導入した計算も行ったが、その効果は小さいことがわかった。 $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$ 反強磁性秩序は、122 系母物質の非弾性中性子散乱で観測されているマグノン励起強度の異方性 (磁気ゾーンセンターから見て $(\pi, 0)$ 方向と $(0, \pi)$ 方向の違い) を自然に説明する。これは、マグノン励起のダンピングを引き起こす電子-ホール連続帯励起の異方性に起因する [1]。

最近、電荷や軌道励起の分散を観測する有力手法と考えられていた L 端の共鳴非弾性 X 線散乱によって、二次元銅酸化物の単一マグノン励起が観測され興味を集めている。この手法を鉄砒素系に適用し、スピンと電荷励起を同時に観測しようという試みが始まっている。その実験に先立ち、どのようなスピン・電荷・軌道分散やそれらの複合分散が得られるべきか理論から予測することは意味があるだろう。そこで、L 端のスピン・軌道相互作用を考慮し、高速衝突近似のもとで共鳴非弾性 X 線散乱の表式を導出し、乱雑位相近似で得られた感受率を用いて散乱スペクトルの運動量依存性を計算した [2]。単一軌道成分からなるマグノン励起のほかに、強い強度で小さな分散を持つスピン・軌道複合励起の存在を予測した。もしこの励起が実験で同定されれば、鉄砒素系反強磁性金属相の電子状態に対する軌道の効果がさらに解明されることになる。

本研究は、兼下英司 (仙台高専)、筒井健二 (原研 SPring-8) 両氏との共同研究であり、JST-TRIP のサポートを受けて行われた。

[1] E. Kaneshita and T. Tohyama, Phys. Rev. B **82** (2010), 094441.

[2] E. Kaneshita, K. Tsutsui, and T. Tohyama, to appear in Phys. Rev. B; arXiv:1104.5424.

¹E-mail: tohyama@yukawa.kyoto-u.ac.jp