

鉄系超伝導体反強磁性相に現れるディラック分散と 電荷輸送の面内異方性

京大基研、ヨゼフ・ステファン研^A、仙台高専^B
杉本高大、Peter Prelovšek^A、兼下英司^B、遠山貴己

鉄系超伝導体母物質の一つで、鉄原子が二次元正方格子状に並んで層状構造をなす BaFe_2As_2 (122 系) はネール温度以下で反強磁性を示す。このときほぼ同時に構造相転移も起こり、磁気構造は Fe-Fe 結合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なストライプ状になる。このとき、反強磁性によるバンドの折りたたみによりディラック分散が現れ、物性に影響を与えると考えられている。この BaFe_2As_2 単結晶に一軸圧力を加えて非双晶化すると、それぞれの結晶軸方向の抵抗に異方性が現れることが知られている。結合長の違いはおよそ 1% 程度で、出現する異方性の大きさと比べて非常に小さいので、構造相転移が異方性の原因とは考えにくい。ところで、この試料をアニールするとこの異方性はほとんどなくなるが、Fe サイトを Co に置換していくと異方性が単調に増加する。これは不純物による散乱が抵抗の異方性の主要な寄与であることを示唆している[1,2]。

鉄系超伝導体では、フェルミ面に鉄の 3d 電子に含まれる複数の軌道の成分が顔を出している。我々はメモリー関数法[3]を多軌道電子系でも使えるように拡張し、不純物を導入した際のドルーデ緩和時間の計算と解析を進めている。計算に当たって、まずストライプ様の反強磁性秩序が生じている状態を考え、5 軌道ハバード模型の平均場近似にスピンの秩序を考慮し、秩序パラメータを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する。この基底状態を用いてメモリー関数を計算し、緩和時間を得る。

伝導度はフェルミ速度と密接に関係していて、四回対称性の破れたフェルミ面の形状が伝導度の異方性に直結する。「点のホール面の周りに現れるディラックコーンおよび電子面はフェルミ速度が大きく、これらのフェルミ面の大きさや形状が伝導度の異方性に寄与していると考えられる。

不純物散乱によって生じる伝導度の異方性が実験事実と整合することを示し、磁気モーメントの大きさによって伝導度の異方性がどのように変化するかについて議論する。

- [1] M. Nakajima *et al.*, Phys. Rev. Lett. 109, 217003 (2012).
- [2] S. Ishida *et al.*, Phys. Rev. Lett. 110, 207001 (2013).
- [3] W. Götze and P. Wölfle, Phys. Rev. B 6, 1226 (1972).