20240409.md 2024-04-09

Magnetism and superconductivity in mixeddimensional periodic Anderson model for UTe2

著者: Ryuji Hakuno 京都大学大学院理学研究科

アブスト

UTe2は、トポロジカルなスピン三重項超伝導体の有力な候補であり、磁気的な揺らぎと超伝導性の相互作用が超伝導性の起源に不可欠であると考えられています。様々な実験が強磁性臨界性を示唆しているにもかかわらず、中性子散乱測定は反強磁性揺らぎのみを観測し、反強磁性量子臨界点近くでのスピン三重項超伝導性の理論を求めました。我々は、UTe2のバンド構造を思わせる、一次元の伝導電子と二次元または三次元のf電子を持つ周期的アンダーソンモデルを構築し、f電子のフェルミ面に依存して、強磁性と反強磁性の揺らぎが再現されることを示します。これらの磁気揺らぎは協力して、スピン三重項p波超伝導性を安定化させます。また、圧力誘起超伝導相の可能な起源として、混成依存性について研究し、適度に大きな混成は反強磁性波数を劇的に変化させ、d波超伝導性を安定化させることを見いだしました。

背景

- UTe2は圧力印加で複数の超伝導相が存在する面白い物質。
- UTe2の超伝導を破壊する磁性の揺らぎについてはよくわかっていないが、反強磁性揺らぎが検出されたことでスピントリプレットの出現可能性が騒がれている。また、結晶作成技術の発展により準二次元フェルミ面も観測された。

問題意識

- 電子状態、磁気揺らぎ、超伝導はどう関連しているのか。
- 超伝導ギャップの対称性とフェルミ面のトポロジーを知るために、超伝導の性質とペアリングメカニズムの調査が必要。
- 反強磁性ゆらぎ、フェルミ面、スピン三重項超伝導を再現するモデルはまだ報告されていないので、 作成しなければならない。

モデル

- 次元混合周期アンダーソンモデルを作成。ここでいう次元混合とは、伝導電子は擬一次元的だがf電子のホッピングが三次元的であることを指している。
- ハミルトニアンは

$$H_0 = H_f + H_d + H_p + H_{fd} + H_{fp} + H_{dp},$$

のように表す。特に

$$H_m = \sum_{k\sigma} (\epsilon_m(k) - \mu) a^{\dagger}_{mk\sigma} a_{mk\sigma} \quad (m = f, d, p),$$

$$H_{ml} = \sum_{k\sigma} V_{ml} a^{\dagger}_{mk\sigma} a_{lk\sigma} + \text{h.c.}$$
 $(ml = fd, fp, dp),$

で、電子のクーロン相互作用は

20240409.md 2024-04-09

$$H_I = U \sum_j n_{fj\uparrow} n_{fj\downarrow}$$

のようになる。

運動エネルギーは

$$\epsilon_f(k) = -2t_{fx}\cos k_x - 2t_{fy}\cos k_y + 2t_{fz}(\cos k_z + 1) + \Delta_f,$$

$$\epsilon_d(k) = -2t_{dx}\cos k_x - 2t_{dy}\cos k_y + \Delta_d,$$

$$\epsilon_p(k) = 2t_{px}\cos k_x + 2t_{py}\cos k_y + \Delta_p.$$

のように表される。

手法

• RPAを用いてスピン揺らぎおよび電荷揺らぎを計算する。

$$\chi_s(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 - U\chi_0(q)} \, \chi_c(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 + U\chi_0(q)}$$

ここで既約感受率

$$\chi_0(q) = -\frac{T}{N} \sum_{k} G_f(k+q) G_f(k)$$

を導入した。

• エリアシュベルグ方程式をD2hの8つの既約表現について解く。 スピンシングレットの有効ポテンシャルは

$$V_s(k-k') = U + \frac{3}{2}U^2\chi_s(k-k') - \frac{1}{2}U^2\chi_c(k-k')$$

スピントリプレットの有効ポテンシャルは

$$V_t(k-k') = -\frac{1}{2}U^2\chi_s(k-k') - \frac{1}{2}U^2\chi_c(k-k')$$

のようになる。エリアシュベルグの方程式は

$$\lambda \Delta(k) = -\frac{T}{N} \sum_{k'} V(k - k') |G_f(k')|^2 \Delta(k')$$

である。 $\lambda = 1$ となる点が転移温度に対応する。

結果

フェルミ面

- 結晶場 Δ_f を少しずつ変化させることで、第一原理計算とよく合う二次元フェルミ面が作成できた。
- フェルミ面のネスティング特性は混成パラメータ V_{fp} とともに変化する。

スピン感受率

20240409.md 2024-04-09

- 強磁性揺らぎ、反強磁性ゆらぎ、それらの共存が示される。
- $q_z = 0$ の寄与が最も大きいので、そこのスライスを見る。
- Δ_f が0.038から0.054の時は反強磁性ゆらぎ(中性子散乱実験と一致)。0.055から0.13では強磁性揺らぎが支配的(f電子の3次元性から自然に生じる)。
- やはり強磁性相関が超伝導において重要な役割を果たす。

超伝導

- B1u、B2u、およびB3u表現がp波超伝導に対応し、Au表現がf波超伝導に対応。他の表現は、s波またはd波の対称性を持つスピンシングレット超伝導を示す。
- エリアシュベルグをとくと、B3uが最も安定。これはスピントリプレットp波超伝導である。さらに Δ_f が0.055の時に安定しているので、強磁性と反強磁性の揺らぎが協力してp波超伝導を安定化させて いる、と考えられる。
- ネスティングベクトルにより差し渡された運動量の間でギャップが同じ符号を持っていれば、反強磁性揺らぎでスピントリプレットが好まれる。これはB1u, B3uに対して実際に満たされている。
- 軌道混成の効果を取り入れると、小さい V_{fp} ではB1u, B3uが安定するが、大きい V_{fp} に対してはB1g, B2gが安定する。つまり奇パリティから偶パリティへの遷移が起きており、複数の超伝導相を説明できるかもしれない。もっとも圧力はいろいろなパラメータを変化させるのでこれですべてを説明するのは早計。

まとめと展望

- 1+3次元PAMを提案し、実験で示唆された反強磁性、強磁性の揺らぎを再現する。
- スピントリプレットp波が、二つの磁気揺らぎで協力的に安定化する。
- スピン軌道相互作用、磁場、複数の軌道やサブラティスを含むように拡張するのが今後の課題。

感想

- これも王道。スピントロニクスの研究もUTe2でなされているのは初めて知った。
- きわめて単純なモデルで、可能性の塊だと思う。