Spin-lattice relaxation for point-node—like s-wave superconductivity in f-electron systems

著者: Shingo Haruna, Koki Doi, Takuji Nomura, and Hirono Kaneyasu

アブストの翻訳

本研究では、UTe2の有効モデルであるf-d-pモデルを用いて、スピン-格子緩和の温度依存性を調べました。3次摂動理論に基づいてf-d-pモデルの線形化エリヤシベルグ方程式を解くことで、点ノード様のs波対形成状態を得ました。本研究の結果、点ノード様のs波対形成状態におけるヘーベル-シュリクターピークは、等方的なs波対形成状態のピークよりも小さいことが示されました。しかしながら、点ノード様のs波対形成状態においてもヘーベル-シュリクターピークは頑健であり、この点ノード様s波状態は核磁気共鳴測定の結果と矛盾することが明らかとなりました。

研究背景・問題意識

- UTe2の核磁気共鳴実験に着目する。NMRナイトシフトはすべての結晶方向で減少するため、対形成状態がスピン一重項かスピン三重項のAu状態であると考えられる。
- ただし、比熱や浸透深さ測定によれば点ノートの存在可能性も言われている。

手法

- 磁気揺らぎ媒介でない相互作用の効果を仮定し、3次摂動理論で線形化エリアシュベルグ方程式を解く。その結果、点ノード様のギャップ構造を持つs波対形成状態が最も有力な対形成状態として得られた。これはオンサイトクーロン反発により媒介されるため非従来型超伝導とみなされる。
- モデルは「f-d-pモデル」を導入している。これは準2次元的なフェルミ面、 $Q=(0,\pm\pi,0)$ の磁気揺らぎピークを再現している。[1]
- 線形化エリアシュベルグを解いて有力な対形成状態を決定する。ただし、有効な対形成相互作用は3次 摂動理論を用いて近似されていることに注意。

議論

- 線形化エリアシュベルグを解くと、高い異方性を持つs波対形成状態が最有力であることが示された。 このs波状態は $k_z=0$ 平面の α 面角部分に点ノードの構造を持つ。これは偶然ノード状態となる。このようなノードは例エネルギー励起を許容し、s波超伝導体でありながら比熱の T^3 挙動をもたらす。
- 本題の超伝導におけるスピン格子緩和について。

$$\frac{1}{T_1 T} \propto \lim_{\Omega \to 0} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{\operatorname{Im} \chi_{+-}^R(\mathbf{Q}, \Omega)}{\Omega}, \tag{2}$$

ここで

$$\chi_{+-}(\mathbf{Q}) = -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{l_1 l_2} \left[G_{l_2 l_1}(\mathbf{k}) G_{l_1 l_2}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) + F_{l_1 l_2}^{\dagger}(\mathbf{k}) F_{l_1 l_2}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \right], \tag{3}$$

はz軸に垂直な成分の遅延スピン感受率を表す。スピン感受率は次のように与えられる。

スピン一重項超伝導状態の条件下における熱的グリーン関数は以下のように定義される。

$$G_{ll'}(\mathbf{k}) = -\int_0^\beta \langle T_\tau \left[c_{\mathbf{k}l\uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}l'\uparrow}^\dagger \right] \rangle e^{i\omega_n \tau}, d\tau, \tag{4}$$

及び

$$F_{ll'}(\mathbf{k}) = \int_0^\beta \langle T_\tau \left[c_{\mathbf{k}l\uparrow}(\tau) c_{-\mathbf{k}l'\downarrow} \right] \rangle e^{i\omega_n \tau}, d\tau, \tag{5}$$

$$F_{ll'}^{\dagger}(\mathbf{k}) = \int_{0}^{\beta} \langle T_{\tau} \left[c_{-\mathbf{k}l'\downarrow}^{\dagger}(\tau) c_{\mathbf{k}l\uparrow}^{\dagger} \right] \rangle e^{i\omega_{n}\tau}, d\tau, \tag{6}$$

ところで、グリーン関数を解析接続することで、バンド対角のグリーン関数を以下のように定義することができる。

$$G_a^R(\mathbf{k}, \epsilon) = -\frac{\epsilon + i\gamma + \xi_a(\mathbf{k})}{E_a^2(\mathbf{k}) - (\epsilon + i\gamma)^2},\tag{7}$$

$$F_a^R(\mathbf{k}, \epsilon) = \frac{\Delta_a(\mathbf{k})}{E_a^2(\mathbf{k}) - (\epsilon + i\gamma)^2},\tag{8}$$

 $$\ \chi_{+-}^R (\mathbb{Q}, \Omega) \simeq \sum_{\ell=1}^{l_1 l_2} \int_{-\infty}^{\ell_1 l_2} \int_{-\infty}^{\ell_1 l_2} \int_{-\infty}^{\ell_1 l_2} \int_{-\infty}^{\ell_1 l_2}^{\ell_2} \int_{-\infty}^{\ell_1 l_2}^{\ell_2} \int_{-\infty}^{\ell_1 l_2}^{\ell_2} \int_{-\infty}^{\ell_1 l_2}^{\ell_2} \int_{-\infty}^{\ell_1 l_2}^{\ell_2} \int_{-\infty}^{\ell_1 l_2}^{\ell_2} \int_{-\infty}^{\ell_2}^{\ell_2} \int_{-$

- $G_{l_1 l_2}^R \mathbf{k} + \mathbf{Q}, \epsilon + \Omega) G_{l_2 l_1}^A \mathbf{k}, \epsilon) \$
- $F \{l \ 1 \ l \ 2\}^R \mathbf\{k\} + \mathbf\{Q\}, \epsilon + \Omega\} F \{l \ 1 \ l \ 2\}^R \mathbf\{k\}, \epsilon\} \setminus$
- F_{l_1 l_2}^R (\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \epsilon + \Omega) F_{l_1 l_2}^A (\mathbf{k}, \epsilon) \bigg] \
- $\t \$ \tanh\left(\frac{\epsilon + \Omega}{2T}\right) \bigg[G_{l_1 l_2}^R (\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \epsilon + \Omega) G_{l_2 l_1}^A (\mathbf{k}, \epsilon) \
- $G \{l \ 1 \ l \ 2\}^A \mathbf{k} + \mathbb{Q}, \epsilon + \mathbb{Q} \} G \{l \ 2 \ l \ 1\}^A \mathbf{k}, \epsilon) \setminus$
- $F_{l_1 l_2}^R \mathbf{k} + \mathbf{Q}, \epsilon + \Omega) F_{l_1 l_2}^A \mathbf{k}, \epsilon) \$
- F_{l_1 l_2}^A (\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \epsilon + \Omega) F_{l_1 l_2}^A (\mathbf{k}, \epsilon) \bigg] \bigg}. \$\$

•

ギャップが実数関数であるとし、次の二つの関数

$$N_{l_1 l_2}(\epsilon) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \sum_{a} U_{l_1 a}(\mathbf{k}) U_{l_2 a}^*(\mathbf{k}), \operatorname{Im} G_a^R(\mathbf{k}, \epsilon), \tag{10}$$

$$M_{l_1 l_2}(\epsilon) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \sum_{a} U_{l_1 a}(\mathbf{k}) U_{l_2 a}^*(\mathbf{k}), \operatorname{Im} F_a^R(\mathbf{k}, \epsilon).$$
(11)

を仮定する。これによりスピン格子緩和速度は

$$\frac{1}{T_1} \propto \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{\cosh^2(\epsilon/2T)} \sum_{l_1 l_2} \left[N_{l_1 l_2}(\epsilon) N_{l_2 l_1}(\epsilon) + M_{l_1 l_2}(\epsilon) M_{l_2 l_1}(\epsilon) \right]. \tag{12}$$

と定義される。計算は、NMR実験の軽元素からの寄与を考慮してp, p'軌道のみ行う。

• ギャップ方程式は、ギャップを運動量部分と温度依存部分に分けて

$$1 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, a} \frac{\tanh[E_a(\mathbf{k})/2T]}{E_a(\mathbf{k})} |A_a g_a(\mathbf{k})|^2.$$

で与える。これを解く。

スピン格子緩和の温度依存性

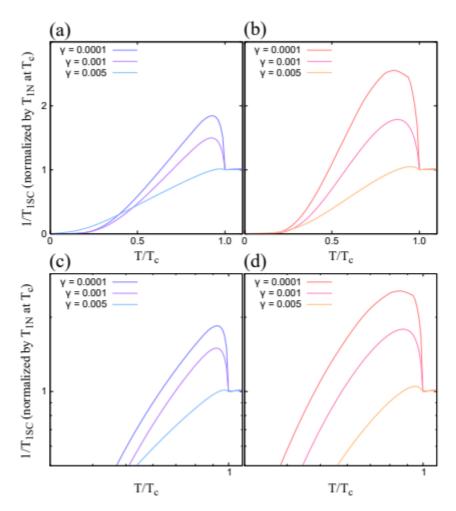


Figure 3: Spin-lattice relaxation rate $1/T_1$ as a function of temperature for $\gamma = 0.0001, 0.001, 0.005$, where the vertical axis is normalized by the normal state value of T_1 at T_c . (a) and (b) show $1/T_1$ in the point-node-like gap and isotropic gap cases, respectively. (c) and (d) show the logarithmic scale plots of (a) and (b), respectively.

 γ の値に応じて、ヘーベルスリクターピークが表れる。比較のため等方的ギャップの場合も与えている。 $\gamma=0.0001,0.001$ の場合は大きなヘーベルシュリクターピークが表れる。一方で点ノード様ギャップ構造 の場合の $1/T_1$ の温度依存性は、等方的ギャップ構造の場合よりも小さいが無視できない。定数パラメータ γ は系の不純物による準粒子の減衰と関連付けることができる。そのため点ノード様及び等方的s波状態の両

方において、不純物によりヘーベルスリクターピークは極めて抑制される。つまりs波ギャップの偶然ノードは、ヘーベルスリクターピークがないことを説明しないことが明らかになった。

• PDOSも計算した。コヒーレンスピークは2つあるが、図4(b)の内側、外側のピークはαバンド、βバンドの等方的超伝導ギャップに対応する。しかし図4(a)では、等方的s波の場合とは対照的に1つのコヒーレンスピークしか観測されない(埋もれている)、等方的s波の場合には大きく鋭いコヒーレンスピークが観測される一方で、点ノード様ギャップのs波の場合にはコヒーレンスピークが小さく広がっていることがわかる。つまりヘーベルスリクターピークが等方的s波対形成状態の場合より小さくなる理由を説明しうる。

感想・メモ

• 15式のDOSの表式はユニタリ行列なしで定義していいのだろうか?と思ったがこれバンド対角したグリーン関数だからユニタリ行列が中に入っているのだな。

[1] モデルの詳細はHaruna S, Nomura T and Kaneyasu H 2024 Journal of the Physical Society of Japan 93 063701. にまとめられている。