

Theory of itinerant magnetic excitations in the SDW phase of iron-based superconductors

アブストの翻訳

我々は、鉄系超伝導体のSDW相における磁気励起の顕著な実験的特徴が、遍歴模型の枠組みで理解できると主張する。最小限の模型を特定し、動的スピン感受率の多バンドRPA（ランダム位相近似）処理を用いる。秩序する運動量近傍では弱減衰のスピン波が観測され、それらが粒子-ホール連続体に溶け込む様子が示されている。電子バンドの楕円性が異なる結晶方向に沿ったスピン波の異方性と、秩序する運動量と共役な運動量でのギャップを説明することを示す。我々の理論は中性子散乱データと良く一致すると主張している。

問題意識・研究背景

- 鉄系超伝導体で磁性が遍歴しているか、局在しているかは議論が続いている。磁性が遍歴しているとして、ネスティングで反強磁性の起源を説明する立場もあるが、磁性が局在しているとして $J_1 - J_2$ モデルを用いた解析を行うといくつかの実験データを説明できるとされているが、異常に大きな面内異方性を仮定しなければならなくなる。
- 中性子による磁気励起測定が遍歴模型の枠組みで説明できるだろうか？

モデルと手法

- 4バンドモデルから出発し、 Γ 点付近にある2つのホールフェルミ面のうち一方がほかのバンドと比べて電子バンドとの相互作用が弱く、磁性にとって重要でないと仮定する。

$$H_2 = \sum_{p,\sigma} \left(\epsilon_{ap} \alpha_{p\sigma}^\dagger \alpha_{p\sigma} + \epsilon_{\beta 1p} \beta_{1p\sigma}^\dagger \beta_{1p\sigma} + \epsilon_{\beta 2p} \beta_{2p\sigma}^\dagger \beta_{2p\sigma} \right).$$

分散は次のようになる。

$$\epsilon_{\alpha p} = t_{\alpha} (\cos p_x + \cos p_y) - \mu,$$

$$\epsilon_{\beta 1 p} = \epsilon_0 + t_{\beta} \left([1 + \epsilon] \cos(p_x + \pi) + [1 - \epsilon] \cos(p_y) \right) - \mu,$$

$$\epsilon_{\beta 2 p} = \epsilon_0 + t_{\beta} \left([1 - \epsilon] \cos(p_x) + [1 + \epsilon] \cos(p_y + \pi) \right) - \mu.$$

- ハミルトニアン of 相互作用は $H_4 = \sum_{\mathbf{p}} U_1 \alpha_{\mathbf{p}3\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{p}4\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{p}2\sigma} \alpha_{\mathbf{p}1\sigma}$
- $\frac{U_3}{2} \left(\beta_{\mathbf{p}3\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{p}4\sigma}^\dagger \alpha_{\mathbf{p}2\sigma} \alpha_{\mathbf{p}1\sigma} + \text{h.c.} \right).$

で表現できる。SDWのオーダーパラメータは $\Delta_1 \propto \sum_{\mathbf{p}} \langle \alpha_{\mathbf{p}\Delta}^\dagger \beta_{\mathbf{1}, \mathbf{p}+\mathbf{Q}1, \gamma} \sigma_{\Delta\gamma} \rangle$,

$\Delta_2 \propto \sum_{\mathbf{p}} \langle \alpha_{\mathbf{p}\Delta}^\dagger \beta_{\mathbf{2}, \mathbf{p}+\mathbf{Q}2, \gamma} \sigma_{\Delta\gamma} \rangle$,

で仮定する。

- Δ_1 をz軸に沿うようにすると、平均場のハミルトニアンは標準的なボゴリューボフ変換により対角化され

$$H_{\text{diag}}^{\text{SDW}} = \sum_{p,\sigma} \left(E_c^p c_{p\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + E_d^p d_{p\sigma}^\dagger d_{p\sigma} + \epsilon_{\beta 2p} \beta_{2p\sigma}^\dagger \beta_{2p\sigma} \right),$$

となる。ここで

$$E_c^p, E_d^p = \frac{1}{2} \left(\epsilon_{ap} + \epsilon_{\beta 1p+Q1} \pm \sqrt{(\epsilon_{ap} - \epsilon_{\beta 1p+Q1})^2 + 4\Delta_1^2} \right)$$

である。SDWの式は

$$\Delta_1 = -U_{\text{SDW}} \sum_p u_p v_p (f(E_c^p) - f(E_d^p)),$$

, $U_1 + U_3$ の式で自己無撞着に決定できる。

- RPAのアプローチを採用する。

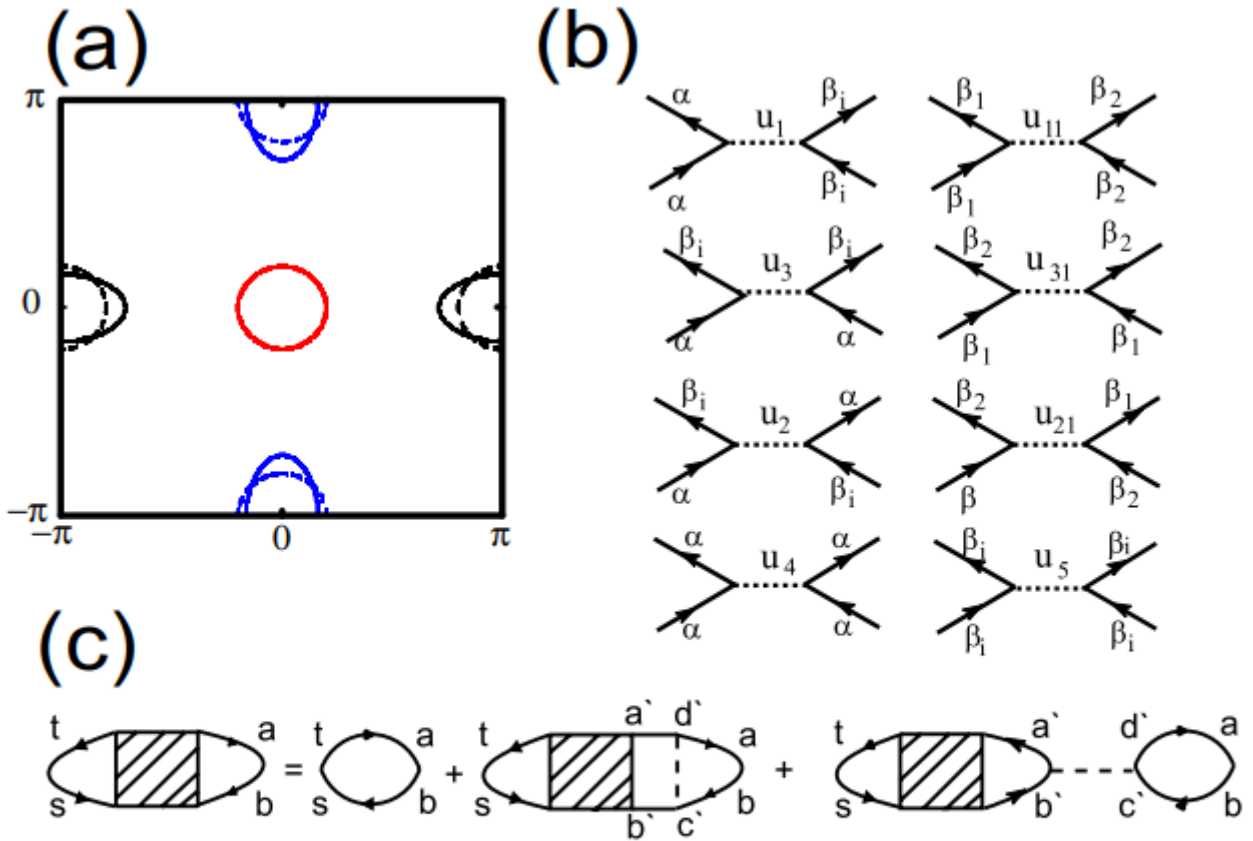


FIG. 1: (color online) (a) Calculated Fermi surfaces for the three band model. The dashed curves refer to the case of $\epsilon = 0$, i.e., complete nesting; Diagrammatic representations of the density-density type interactions (b) and the Dyson equation for the RPA spin susceptibility (c) in the three band model.

$$\chi_{st,ab}^{zz}(q, i\Omega) = -\frac{1}{2\beta} \sum_{\omega_n} \sum_{p, \sigma} G_{bs}^{p\sigma} (i\omega_n) G_{ta}^{p+q\sigma}(i\omega_n + i\Omega),$$

$$\chi_{st,ab}^{\pm}(q, i\Omega) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \sum_p G_{bs}^{\pm}(p \uparrow \omega_n) G_{ta}^{\pm}(p+q \downarrow \omega_n + i\Omega).$$

磁気感受率は $\hat{\chi}_{lm}^{\pm}(\text{RPA}) = \hat{\chi}_{lm}^{\pm} \left(1 - \hat{U}_{lm} \hat{\chi}_{lm}^{\pm} \right)^{-1}$ で与えられる。

結果

- U_{SDW} をおよそ 0.52 eV に設定する。これにより $T = 0$ における値は $\Delta_1 \sim 31 \text{ meV}$ となる。

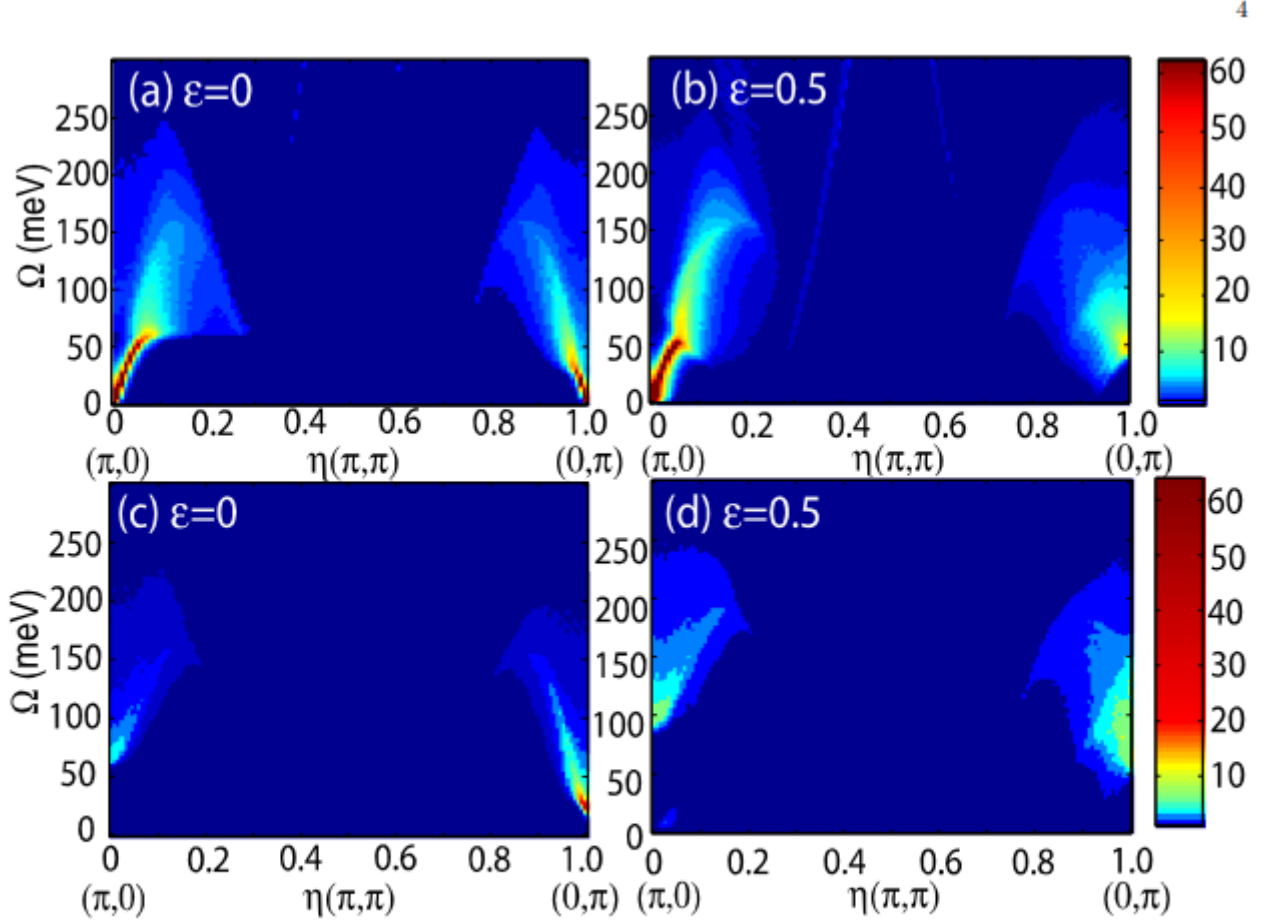


FIG. 2: (color online) Calculated imaginary part of the transverse (upper panel) and longitudinal (lower panel) component of the physical RPA spin susceptibility as a function of frequency and momentum (plotted along $(0, \pi) \rightarrow (\pi, 0)$ points of the BZ) for $\epsilon = 0$ (a)-(c), and $\epsilon = 0.5$ (b)-(d). The color bars refer to the intensity in units of st./eV. For numerical purposes we set the damping constant $\delta = 1/300 \text{ eV}$.

- 円形ポケットの場合。横感受率 $\chi_{st,ab}^{\pm}(q, i\Omega)$ を見ると、対応する基底状態は縮退しているため、励起スペクトルは Q_1 にゴールドストーンモードがあり、ギャップレスモードが Q_2 にある。 Q_1 での励起は 60 meV まで伝播している。 Q_2 の励起も伝播するが、大体 Δ_1 ほど。
- 有限楕円ポケットの場合、縮退が解消されて Q_2 近傍の励起が有限のギャップを持つようになる。ギャップが開けば $\chi_{st,ab}^{\pm}(q, i\Omega)$ の部分は検出されなくなる。また Q_1 の近傍のスピンの励起は $\Omega = 0$ までランダウ減衰を示す。これは SDW がもはやホールと電子のフェルミ面を完全にはギャップ化しなくなるため。

結論

- 鉄系の 5 バンドモデルを簡略化したモデルを採用したが、磁気励起に関する実験データをうまく再現する。まず

1. 運動量 Q_2 近傍の励起は50meVまでギャップがある。
2. Q_1 で測定された励起は100meVまで伝播するスピン波で、減衰は有限だが小さいもの。
3. スピン波が連続体に入っても励起が依然として見える。

感想・メモ

- かなり簡略化したモデルでも実験値が再現できるとのことだったが、磁気秩序下での磁気分散に限った話ではないのか？
- 縦感受率に関する図はあるものの、詳細な議論がない。実験は縦感受率ではなく横感受率を検出しているということか？
- 感受率やモードの見方等、超伝導状態に関する議論とは少し趣が異なっている気がする。
- モードの消失でギャップの存在をいう議論は飯田さんの授業で聞いた気がするな。