

1 研究背景

従来の格子振動を媒介とする超伝導とは異なり、電子間相互作用を起源とする超伝導が注目を集めている。銅酸化物、ルテニウム酸化物、鉄ヒ素系での超伝導などの具体例が知られている。電子間相互作用を起源とする超伝導は、本来クーロン反発によって避けあう電子がペアを組むために、超伝導ギャップに節をもち、方向によってギャップ関数の符号が変わることが多い。一方、模型で斥力と引力を相互作用レンジによって混在させると、異方的超伝導をつくることのできるものの、相分離という超伝導とは直接関係ない電子状態が現れやすくなることが知られている。したがって、平均場近似の範囲で異方的超伝導を再現するのは難しいとされてきた。近年、2軌道模型については平均場近似でも容易に超伝導状態を再現できることがわかってきた [1] ので、その模型を拡張して、超伝導状態と絶縁状態がどのように競合するかを調べることにした。

また、銅酸化物高温超伝導体や鉄系超伝導体をはじめとする様々な物質において、超伝導相と絶縁相が競合するという実験結果 [2, 3] と、多軌道模型による理論研究が知られている [4]。具体的には、銅酸化物 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ の正孔ドーピング量と温度を変えたとき、 d 波超伝導相、反強磁性絶縁相、電荷密度波相 (Charge Density Wave, CDW) やスピン密度波相 (Spin Density Wave, SDW) が相図中で隣接して現れることなどである [3]。これらのことも、多軌道模型を用いて超伝導相と絶縁相の競合を議論する動機である。

2 研究方法

2次元正方格子上において軌道間相互作用のみをもつ2軌道ハバードモデルとして、次のように書けるものを考える。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{TB}} + \mathcal{H}_{\text{int}}, \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{TB}} = & - \sum_{i,\hat{v},\alpha,\alpha',\sigma} \left(t_{\alpha,\alpha'} c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i+\hat{v},\alpha',\sigma} + \text{H.c.} \right) \\ & - \mu \sum_{i,\alpha} n_{i,\alpha} + \delta \sum_i n_{i,2}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = 2V_{\text{sp}} \sum_i \mathbf{S}_{i,1} \cdot \mathbf{S}_{i,2} - \frac{V_{\text{ch}}}{2} \sum_i n_{i,1} \cdot n_{i,2}. \quad (2.3)$$

ここで、 \mathcal{H}_{TB} , \mathcal{H}_{int} はそれぞれ運動エネルギーから化学ポテンシャル \times 電子数を引いたもの、相互作用を表す項であり、 $t_{\alpha,\alpha'}$ は軌道内、軌道間の飛び移り積分、 $c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger, c_{i,\alpha,\sigma}$ はそれぞれサイト i , 軌道 α , スピン σ を持つ電子の生成/消滅演算子であり、

$$\{c_{i,\alpha,\sigma}, c_{j,\alpha',\sigma'}\} \equiv c_{i,\alpha,\sigma} c_{j,\alpha',\sigma'} + c_{j,\alpha',\sigma'} c_{i,\alpha,\sigma} = 0, \quad (2.4)$$

$$\{c_{i,\alpha,\sigma}, c_{j,\alpha',\sigma'}^\dagger\} \equiv c_{i,\alpha,\sigma} c_{j,\alpha',\sigma'}^\dagger + c_{j,\alpha',\sigma'}^\dagger c_{i,\alpha,\sigma} = \delta_{i,j} \delta_{\alpha,\alpha'} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (2.5)$$

$$\{c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger, c_{j,\alpha',\sigma'}^\dagger\} \equiv c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{j,\alpha',\sigma'}^\dagger + c_{j,\alpha',\sigma'}^\dagger c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger = 0, \quad (2.6)$$

を満たす。H.c はエルミート共役な項、 \hat{v} は \hat{x} か \hat{y} を表す単位ベクトル、 μ は化学ポテンシャル、 δ はバンド1と2の相対位置を表す値、 $V_{\text{sp}}, V_{\text{ch}}$ はそれぞれスピン間、電荷間の相互作用の強さを表す係数であり、 $\mathbf{S}_{i,\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\gamma,\beta} c_{i,\alpha,\gamma}^\dagger \sigma_{\gamma,\beta} c_{i,\alpha,\beta}$ はスピン演算子、 $\sigma_{\gamma,\beta}$ はパウリ行列の γ, β 成分、 $n_{i,\alpha}$ は

$$n_{i,\alpha} = \sum_{\sigma} c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i,\alpha,\sigma} = c_{i,\alpha,\uparrow}^\dagger c_{i,\alpha,\uparrow} + c_{i,\alpha,\downarrow}^\dagger c_{i,\alpha,\downarrow}, \quad (2.7)$$

であり, サイト i , 軌道 α における電子の数演算子を表す.
相互作用を展開すると,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} = & V_{\text{sp}} \sum_i \left(c_{i,1,\uparrow}^\dagger c_{i,1,\downarrow} c_{i,2,\downarrow}^\dagger c_{i,2,\uparrow} + c_{i,1,\downarrow}^\dagger c_{i,1,\uparrow} c_{i,2,\uparrow}^\dagger c_{i,2,\downarrow} \right) \\ & + V_- \sum_i \left(c_{i,1,\uparrow}^\dagger c_{i,1,\uparrow} c_{i,2,\uparrow}^\dagger c_{i,2,\uparrow} + c_{i,1,\downarrow}^\dagger c_{i,1,\downarrow} c_{i,2,\downarrow}^\dagger c_{i,2,\downarrow} \right) \\ & - V_+ \sum_i \left(c_{i,1,\uparrow}^\dagger c_{i,1,\uparrow} c_{i,2,\downarrow}^\dagger c_{i,2,\downarrow} + c_{i,1,\downarrow}^\dagger c_{i,1,\downarrow} c_{i,2,\uparrow}^\dagger c_{i,2,\uparrow} \right), \end{aligned} \quad (2.8)$$

となる. ここで, V_+ , V_- を

$$V_+ \equiv \frac{V_{\text{sp}} + V_{\text{ch}}}{2}, \quad (2.9)$$

$$V_- \equiv \frac{V_{\text{sp}} - V_{\text{ch}}}{2}, \quad (2.10)$$

と定義した. この模型に Hartree-Fock-Gor'kov 近似,

$$\begin{aligned} c_A^\dagger c_B c_C^\dagger c_D \doteq & \langle c_A^\dagger c_B \rangle c_C^\dagger c_D + c_A^\dagger c_B \langle c_C^\dagger c_D \rangle - \langle c_A^\dagger c_B \rangle \langle c_C^\dagger c_D \rangle \\ & - \langle c_A^\dagger c_D \rangle c_C^\dagger c_B - c_A^\dagger c_D \langle c_C^\dagger c_B \rangle + \langle c_A^\dagger c_D \rangle \langle c_C^\dagger c_B \rangle \\ & + \langle c_A^\dagger c_C \rangle c_D c_B + c_A^\dagger c_C \langle c_D c_B \rangle - \langle c_A^\dagger c_C \rangle \langle c_D c_B \rangle, \end{aligned} \quad (2.11)$$

を行い, オーダーパラメタを計算することで電子状態を解析した. (2.11) の第 1 行は Hartree 項, 第 2 行は Fock 項, そして第 3 行は Gor'kov 項と呼ばれる.

3 研究結果

スピン間の相互作用 V_{sp} , 電荷間の相互作用 V_{ch} の関数としてオーダーパラメタを図 1 と図 4 に示す. これらを $V_{\text{sp}} - V_{\text{ch}}$ 平面に射影したのが図 2 と図 5 である. 自己無撞着解が複数得られた場合は, それぞれの全エネルギーを比較して図 3 と図 6 に示す相図を得た. V_{sp} が正のとき, 軌道 1 と軌道 2 のスピン密度が反平行になろうとする. おおよそ $V_{\text{sp}} \gtrsim V_{\text{ch}}$, $V_{\text{ch}} > 0$ で d 波超伝導相, $V_{\text{sp}} \gtrsim |V_{\text{ch}}|$, $V_{\text{ch}} < 0$ でエキシトニック CDW 相が得られた.

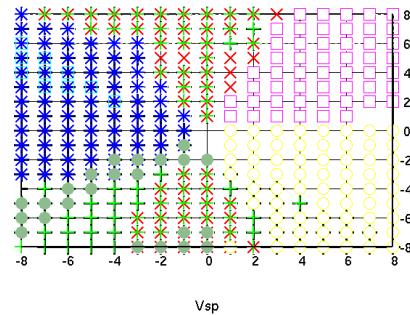
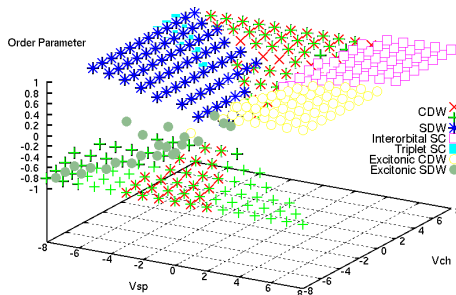


図 1: $t_1 = t_2 = 1, t_3 = -0.1, \delta = 0$ のときの相図. x 軸を V_{sp} , y 軸を V_{ch} , z 軸をオーダーパラメタとした. 軌道 1 と 2 の間で同位相, 逆位相の電荷密度波相とスピン密度波相, 軌道間超伝導相, 励起子電荷密度波相, 励起子スピン密度波相, トリプレット超伝導相が現れている. t_3 がゼロでないとき軌道間超伝導は d 波超伝導である.

図 2: 図 1 を直上から示した図.

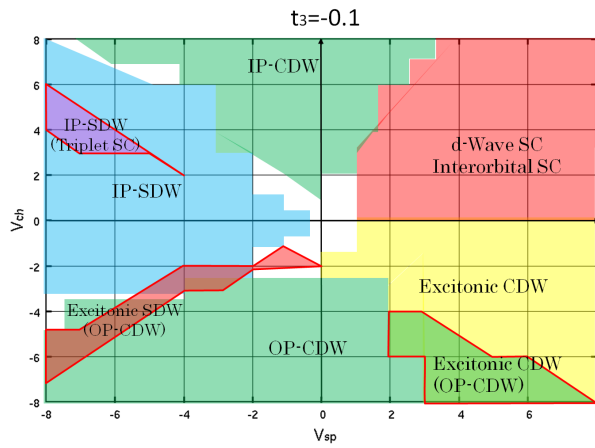


図 3: $t_1 = t_2 = 1, t_3 = -0.1, \delta = 0$ のときの相図. 括弧付きは準安定状態であることを示す.

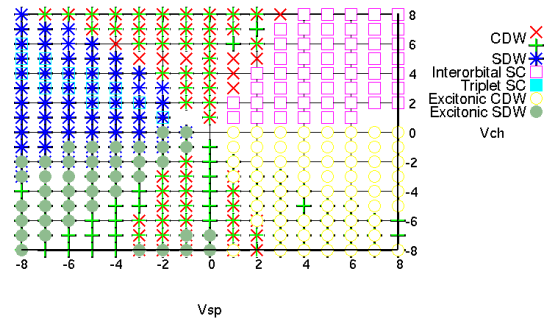
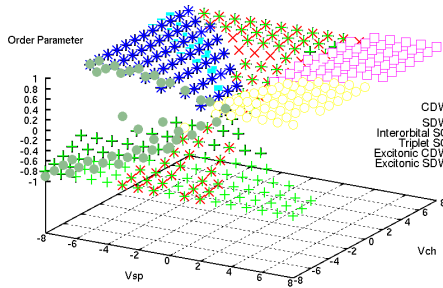


図 4: $t_1 = t_2 = 1, t_3 = \delta = 0$ のときの相図. x 軸を V_{sp} , y 軸を V_{ch} , z 軸をオーダーパラメタとした. 軌道 1 と 2 の間で同位相, 逆位相の電荷密度波相とスピン密度波相, 軌道間超伝導相, 励起子電荷密度波相, 励起子スピン密度波相, トリプレット超伝導相が現れている. t_3 がゼロなので軌道間超伝導は軌道内でペアリングをもたない.

図 5: 図 4 を直上から示した図.

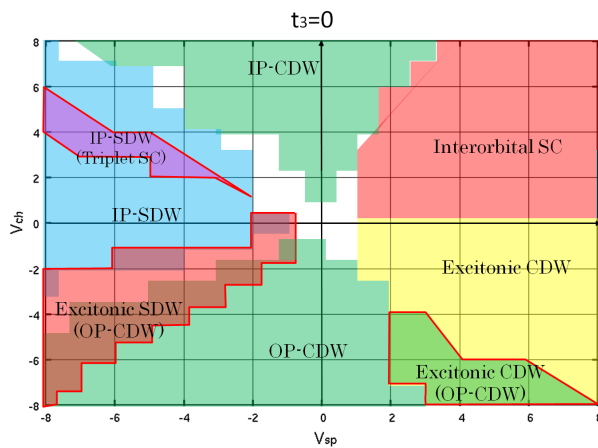


図 6: $t_1 = t_2 = 1, t_3 = \delta = 0$ のときの相図. 括弧付きは準安定状態であることを示す.

4 まとめ

ここで考えた2軌道モデルでは軌道間でのみ相互作用をもつ。それぞれの軌道のスピン密度の間の相互作用 V_{sp} , 電荷密度の間の相互作用 V_{ch} を一致させ, 正の値をとると軌道間のペアリングが起き, 軌道間のトランスファー積分の対称性をうまく選ぶとシングレットの d 波超伝導が再現する。これらの2つの相互作用を変え, 負の値もとれるとすると, 同位相, 逆位相の電荷密度波, スピン密度波, 励起子電荷密度波, 励起子スピン密度波, さらにトリプレット超伝導も含む相図を描けることがわかった。

参考文献

- [1] C. B. Bishop, G. Liu, E. Dagotto, and A. Moreo, “On-site attractive multiorbital Hamiltonian for d -wave superconductors” Phys. Rev. B 93, 224519 (2016).
- [2] M. Hiraishi et al. “Bipartite magnetic parent phases in the iron oxypnictide superconductor” Nat. Phys. 10, 300 (2014).
- [3] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida & J. Zaanen “From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides” Nature 518, 179 (2015).
- [4] M. Daghofer, A. Nicholson, A. Moreo, and E. Dagotto “Three orbital model for the iron-based superconductors” Phys. Rev. B 81, 014511 (2011).