

f-電子系の超伝導：軌道自由度の役割

日本原子力研究所 先端基礎研究センター 堀田 貴嗣

最近、*f*-電子系において新しい超伝導体の発見が相次いでいる。希土類化合物では、CeTIn₅ (T=Ir, Rh, Co) という一連の物質群で超伝導が発見されており [1]、また、充填スクッテルナイト構造をもつ PrOs₄Sb₁₂ において $T_c=1.85\text{K}$ の超伝導が発見された [2]。アクチノイド化合物については、UGe₂ や URhGe において強磁性と共存する超伝導相が発見されており [3]、その機構について様々な議論がなされている。そして、プルトニウム化合物 PuCoGa₅ においては、 $T_c=18.5\text{K}$ という驚くべき高温の超伝導が発見されている [4]。

このような *f*-電子系の超伝導体の相次ぐ発見に対し、その超伝導機構の微視的観点からの議論は急務である。そこでまず、*f*-電子系に対する相対論的バンド計算の知識に立脚して微視的ハミルトニアンを構築する。その際、1 電子状態が明確に定義され、多体効果を取り入れることが容易な *j-j* 結合を用いる。¹ この場合、スピン軌道相互作用によって *f*-電子の 14 重縮退は解け、 $j=7/2$ に対する 8 重項と $j=5/2$ に対する 6 重項に分かれる。相対論的バンド計算によると、この多重項の分裂は 0.4eV から 1eV の大きさであるので、*f*-電子が 7 個未満の場合に低エネルギー励起を考えるには、 $j=5/2$ の 6 重項だけを取り出せば十分である。そこで、 $j=5/2$ の *f*-電子に対する強束縛モデルを構築すると、次のような形になる [5]。

$$H = \sum_{i,\mathbf{a},\mu,\nu} t_{\mu\nu}^{\mathbf{a}} a_{i\mu}^{\dagger} a_{i+\mathbf{a}\nu} + \sum_{i,\mu,\nu} B_{\mu\nu} a_{i\mu}^{\dagger} a_{i\nu} + (1/2) \sum_{i,\mu,\nu,\mu',\nu'} I_{\mu\nu,\mu'\nu'} a_{i\mu}^{\dagger} a_{i\nu}^{\dagger} a_{i\nu'} a_{i\mu'}. \quad (1)$$

ここで、 $a_{i\mu}^{\dagger}$ は *i* サイトにおける μ -状態の *f*-電子の生成演算子、 μ は $j=5/2$ の *z*-成分、 \mathbf{a} はホッピングの方向を表すベクトル、 $t_{\mu\nu}^{\mathbf{a}}$ は 2 つのサイト間のホッピングの大きさ、 $B_{\mu\nu}$ は結晶場ポテンシャル、 $I_{\mu\nu,\mu'\nu'}$ はクーロン積分である。

クラマース二重項を擬スピンによって区別すれば、 H は 3 軌道ハバードモデルと見なせるが、計算を簡単にするために 2 つの軌道を残すことを考える。いろいろな可能性があるが、スピン・軌道自由度を含む *f*-電子系のプロトタイプとして、立方晶での固有状態 Γ_8 (4 重項) に対するハバードモデルを考える。厳密対角化によって得られた Γ_8 モデルの相図を図 1(a) に示す。 U は軌道内クーロン相互作用、 U' は軌道間クーロン相互作用、 ϵ は正方対称結晶場の影響による Γ_8 の 2 つの軌道のエネルギー差を表す。軌道無秩序の金属相から、軌道が強的に配列した反強磁性相への転移が見られ、相境界で *d*-波超伝導相の出現が期待される。実際、乱雑位相近似や揺らぎ交換 (FLEX) 近似に基づく計算によると、その相境界で $d_{x^2-y^2}$ -波の超伝導状態が得られており、軌道自由度の制御によってスピン揺らぎ媒介の *d*-波超伝導が出現する、というシナリオが考えられる [6]。また、FLEX 近似による計算では、結晶場分裂が大きくなると T_c が上昇するという傾

¹ フント結合とスピン軌道相互作用の関係から、*L-S* 結合と *j-j* 結合の 2 つの見方があるが、これらは基本的には相互作用を取り込む順序の違いによるものであり、原理的には同じ結論に到達すると考えられる。

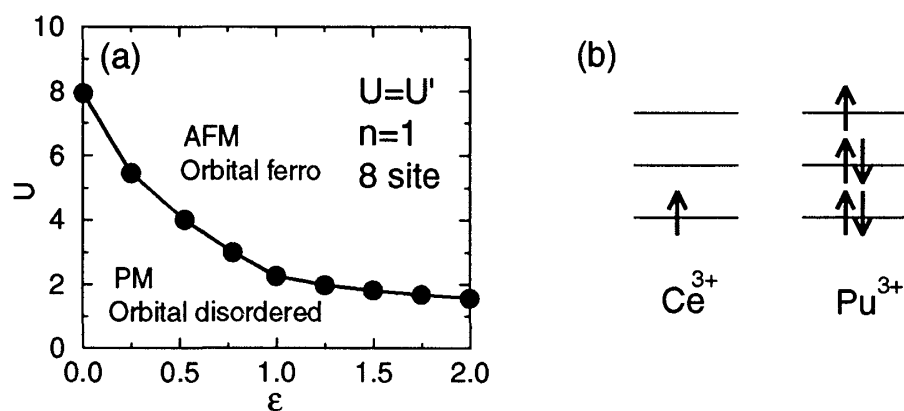


図 1: (a) Γ_8 モデルの基底状態相図。(b) Ce^{3+} および Pu^{3+} イオンの電子配置。

向が得られたが、これは CeIrIn_5 ($T_c=0.4\text{K}$) と CeCoIn_5 ($T_c=2.1\text{K}$) については合致する。一方、 CeRhIn_5 の反強磁性相については一致せず、今後、3次元性や正方対称結晶場の影響をきちんと取り扱う必要があると考えられる。

ところで、 Pu^{3+} イオンは5個の f -電子を有するが、今のモデルでは図 1(b) に示すように、 $j=5/2$ に1つの正孔があるという状況になる。電子・正孔対称性を考えれば、 CeTiIn_5 の超伝導と同じ機構で理解することができ、また、5 f -電子は遍歴性が強いことから、エネルギースケールが大きくなっており、それが T_c の上昇をもたらすという基本的理解が可能である [7]。定量的な議論は将来の課題であり、さらにウラン化合物の超伝導について、特にトリプレット超伝導をどのように捉えるか、という重要な問題が残されているが、ここに述べた j - j 結合に基づく微視的模型が、 f -電子系の超伝導を理解する一つの切り口になることを期待している。

本研究は、瀧本哲也氏、眞榮平孝裕氏、上田和夫氏との共同研究である。また、日本学術振興会科学研究費補助金・若手研究(B)の援助を受けている。

参考文献

- [1] H. Hegger *et al.*, Phys. Rev. Lett. **84**, 4986 (2000); C. Petrovic *et al.*, Europhys. Lett. **53**, 354 (2001); C. Petrovic *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter. **13**, L337 (2001).
- [2] M. B. Maple *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **71**, 23 (2002).
- [3] S. S. Saxena *et al.*, Nature (London) **406**, 587 (2000); D. Aoki *et al.*, Nature (London) **413**, 613 (2001).
- [4] J. L. Sarrao *et al.*, Nature (London) **420**, 297 (2002).
- [5] T. Hotta and K. Ueda, cond-mat/0211467.
- [6] T. Takimoto *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter. **14**, L369 (2002); cond-mat/0212467.
- [7] T. Maehira *et al.*, cond-mat/0212033.