

2次元正方格子上的拡張ハバードモデルにおけるトリプレット超伝導

高知大理・尾崎正明、北大理・宮井英次

オンサイト斥力、最近接のサイト間に引力と交換力のある場合の2次元ハバードモデルを考える。ハミルトニアンは次式で与えられる。

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} (-t - \mu \delta_{ij}) (a_{is}^\dagger a_{js} + H.C.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \\ + V \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{ss'} n_{is} n_{js'} + J \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{ss'} a_{is}^\dagger a_{js'}^\dagger a_{is'} a_{js}$$

運動量表示では

$$\mathcal{H} = \sum_{ks} (-2t\gamma_k - \mu) a_{ks}^\dagger a_{ks} \\ + \sum_{kk'q} \sum_{ss'} \langle k+qs, k's' | V | ks, k'+qs' \rangle a_{k+qs}^\dagger a_{k's'}^\dagger a_{k'+qs'} a_{ks}, \\ a_{ks}^\dagger = \frac{1}{L} \sum_n e^{ikn} a_{ns}^\dagger, \\ \gamma_k = \cos k_x + \cos k_y \\ \langle k+qs, k's' | V | ks, k'+qs' \rangle = \frac{1}{L} (U + 2V\gamma_q + 2J\gamma_{k-k'}),$$

であり、 L は格子点の数である。

系は次の対称性を持つ。

$$G_0 = P \times S \times R$$

$$P = L(e_x, e_y) \wedge D_{4h} : \text{ 正方格子の空間群}$$

$$S = \text{the Group of Spin Rotation} : SU(2)$$

$$R = \Phi + t\Phi$$

$$\Phi = \text{the Group of Gauge Transformation}$$

$$t = \text{time reversal}$$

相互作用 $Z(k, k') = \langle ks, -ks | V | k's, -k's \rangle$ の既約分解によりトリプレット超伝導は $G_0 = P \times S \times R$ の既約表現 $E_u \otimes \hat{S}^1 \otimes \hat{R}^2$ より導かれる。ここで E_u は D_{4h} の2次元表現、 $\hat{S}^1$ は S の角運動量 $j=1$ に対応する3次元表現、 $\hat{R}^2$ は R のゲージ対称性を破る2次元表現である。この既約表現での極大小群を求める事により、次表の8種類のトリプレット超伝導が得られる。第2列は平均場ハミルトニアン

$$H_m = H_m^{00} + H_m^{01} + H_m^1$$

$$H_m^{00} = \sum_{ks} x_0(k) a_{ks}^\dagger a_{ks}$$

$$H_m^{01} = \sum_{ks} y_0^\lambda(k) a_{ks}^\dagger a_{ks'}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda,$$

$$H_m^1 = \frac{1}{2} \sum_k \sum_{ss'} z^\lambda(k) a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger (i\sigma^\lambda \sigma^y)_{ss'} + H.C$$

の超伝導に対応するハミルトニアン H_m^1 を表す。

Table 1. The maximal little groups and the corresponding pairing Hamiltonian H_m^1 .

$T = \{e, t\}$, $C_{2vx} = \{e, C_{2x}, IC_{2x}, IC_{2y}\}$, $A(e_z) = \{u(e_z, \theta) | 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$, $C_{2va} = \{e, C_{2a}, IC_{2a}, IC_{2b}\}$, $\tilde{C}_4 = \{e, C_{4z}^+(\pi/2), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-(\pi/2)\}$, ${}_{II}D_4 = \{pu(p) | p \in D_4\}$, ${}_s\tilde{C}_4 = \{e, C_{4z}^+u_{2a}(\pi/2), C_{2z}\tilde{\pi}, C_{4z}^-u_{2a}(-\pi/2)\}$, ${}_{II}D_2 = \{e, C_{2x}u_{2x}, C_{2y}u_{2y}, C_{2z}u_{2z}\}$, $\tilde{A}(e_z) = \{u(e_z, \theta) | 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$, $C_{2x} = \{e, C_{2x}\}$, $C_{2a} = \{e, C_{2a}\}$,

where e = identity, $u_i = u(e_i, \pi)$, and $u(p)$ is the spin rotation about the same rotation axis by the same rotation-angle as p . In $G(Eu; 3) \sim G(Eu; 8)$, factor $(e + I\tilde{\pi})$ is omitted.

Maximal little group	H_m^1 with H.C. omitted
$G(E_u; 1) = (e + C_{2z}\tilde{\pi})(e + C_{2x}u_{2x})C_{2vx}LA(e_z)T$	$\frac{1}{2} \sum_{kss'} c \sin k_x a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger (\tau^x)_{ss'}$
$G(E_u; 2) = (e + C_{2z}\tilde{\pi})(e + C_{2b}u_{2x})C_{2va}LA(e_z)T$	$\frac{1}{2} \sum_{kss'} c (\sin k_x + \sin k_y) a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger (\tau^x)_{ss'}$
$G(E_u; 3) = (e + u_{2x}\tilde{\pi})(e + tC_{2x})\tilde{C}_4LA(e_z)$	$\frac{1}{2} \sum_{kss'} c (\sin k_x + i \sin k_y) a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger (\tau^z)_{ss'}$
$G(E_u; 4) = (e + C_{2x}u_{2y}\tilde{\pi}){}_{II}D_4LT$	$\frac{1}{2} \sum_{kss'} c (\sin k_x (\tau^x)_{ss'} + \sin k_y (\tau^y)_{ss'}) a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger$
$G(E_u; 5) = (e + tu_{2a}){}_{II}D_2{}_s\tilde{C}_4L$	$\frac{1}{2} \sum_{kss'} c (\sin k_x (\tau^x)_{ss'} + i \sin k_y (\tau^y)_{ss'}) a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger$
$G(E_u; 6) = (e + C_{2x}u_{2x})(e + tu_{2x})C_{2x}\tilde{A}(e_z)L$	$\frac{1}{4} \sum_{kss'} d \sin k_x a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger (\tau^x + i\tau^y)_{ss'}$
$G(E_u; 7) = (e + C_{2x}u_{2x})(e + tu_{2x})C_{2a}\tilde{A}(e_z)L$	$\frac{1}{4} \sum_{kss'} d (\sin k_x + \sin k_y) a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger (\tau^x + i\tau^y)_{ss'}$
$G(E_u; 8) = (e + tC_{2x}u_{2x})\tilde{C}_4\tilde{A}(e_z)L$	$\frac{1}{4} \sum_{kss'} d (\sin k_x + i \sin k_y) a_{ks}^\dagger a_{-ks'}^\dagger (\tau^x + i\tau^y)_{ss'}$

$G(E_u; 6), G(E_u; 7), G(E_u; 8)$ はいわゆる non-unitary state で up-spin の電子だけがペアリングに参加する。 $t = 1, V = -2, U = 2$ でホールドーピングが大きい時の強磁性が出やすい条件では non-unitary state の $G(E_u; 8)$ が最安定であることが分かった。また SCF 条件より、non-unitary state が出現するとパウリの強磁性が生じることが示された。又 $G(E_u; 1), G(E_u; 6)$ 状態は格子変形が生じる事が示された。

関係する発表論文

- 1) M. Ozaki, E. Miyai, T. Konishi and K. Hanafusa: Int. J. Mod. Phys. **B10**, 1397 (1996).
- 2) E. Miyai and M. Ozaki: Int. J. Mod. Phys. **B11**, 1153 (1997).