

UTe₂におけるトポロジカル結晶超伝導の実現可能性

arXiv:2302.09858

鄭従真 水島健 藤本聡

大阪大学大学院 基礎工学研究科

■ 背景：UTe₂における超伝導

スピントリプレット超伝導

- 全方向の高い上部臨界磁場H_{c2}
- Field-reentrant、Field-reinforcement

その一方で、磁気秩序を持たない

時間反転対称性を持つ(DIII class)

トポロジカル超伝導の候補物質

表面や渦にマヨラナ準粒子が現れる

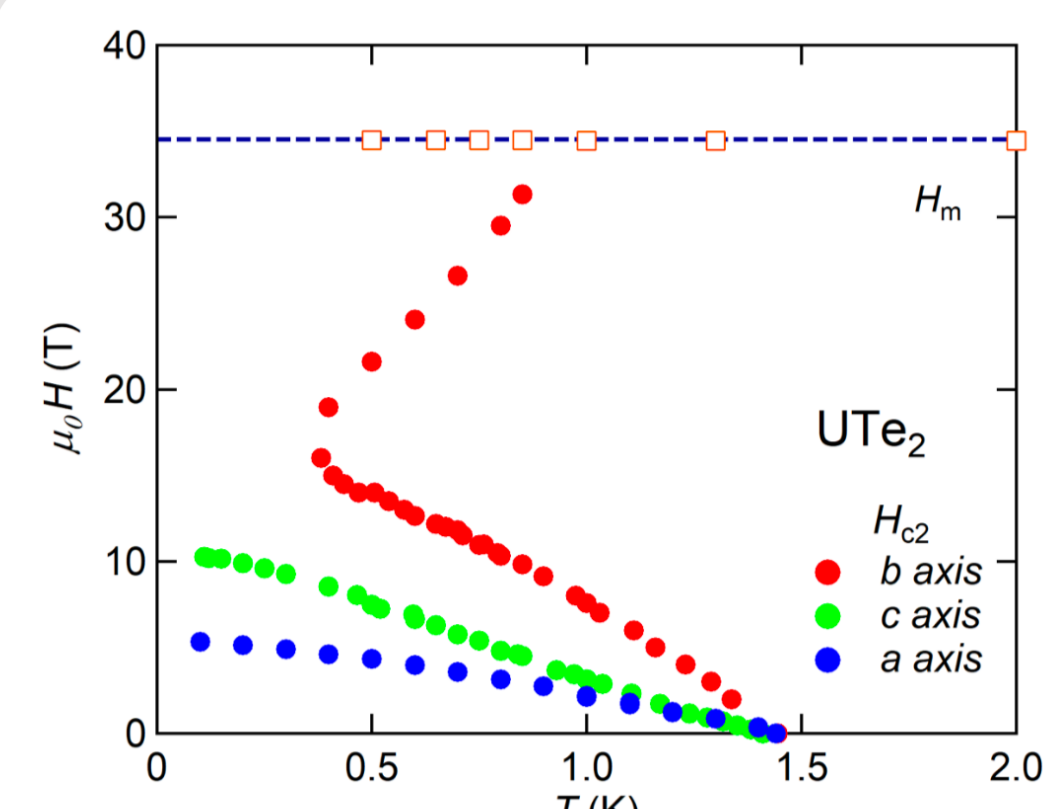


Fig. 1 上部臨界磁場H_{c2}[1]

de Haas-van Alphen効果によるFermi面の観測[2]

- シリンダー形状の電子ホールフェルミ面を持つ(Fig. 2)
- 3次元 DIII classのトポロジカル数は自明な値を持つ

点群対称性（ミラー、回転）を用いた別のトポロジカル数が有限になる可能性

シリンダー形状のフェルミ面を持つUTe₂がトポロジカル結晶超伝導であるか否か数値計算によって確かめる。

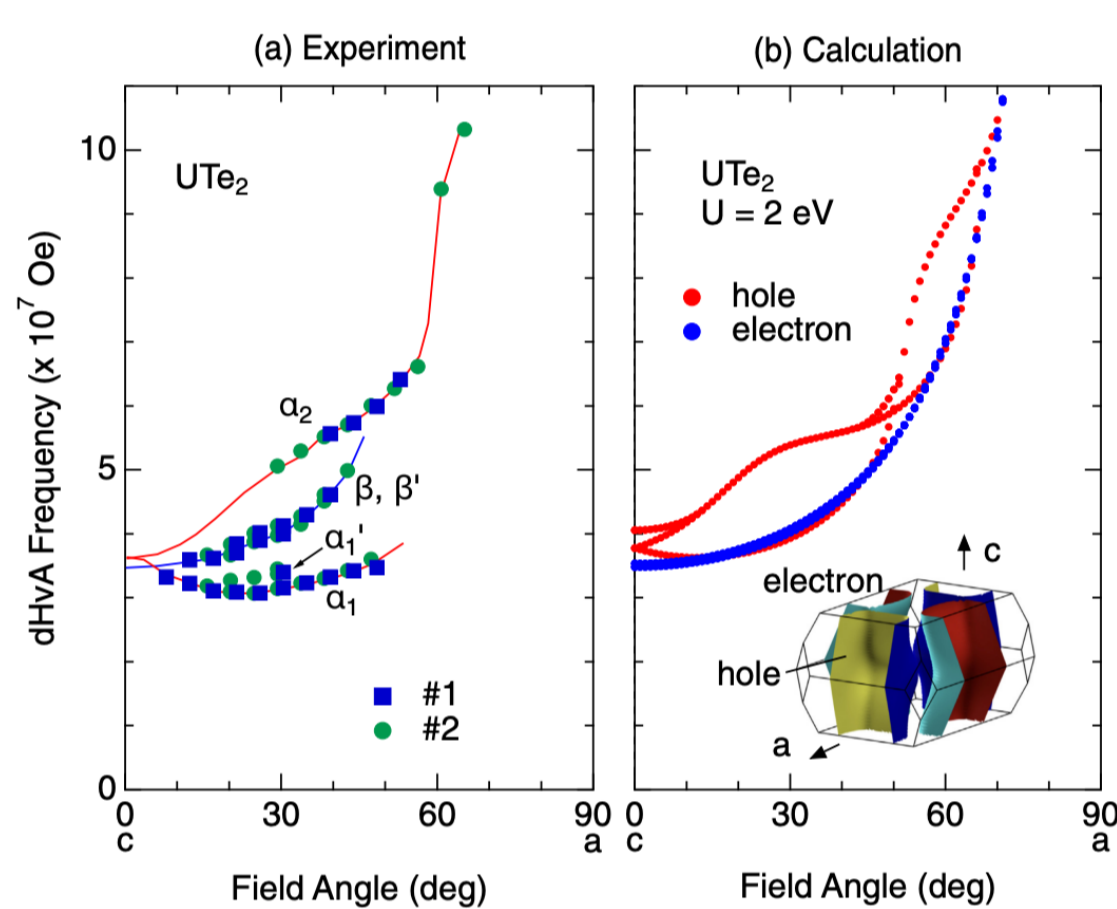


Fig. 2 (a) dHvA 振動の実験の結果 (b) バンド計算で予測されるシリンダーフェルミ面とdHvA振動 [2]

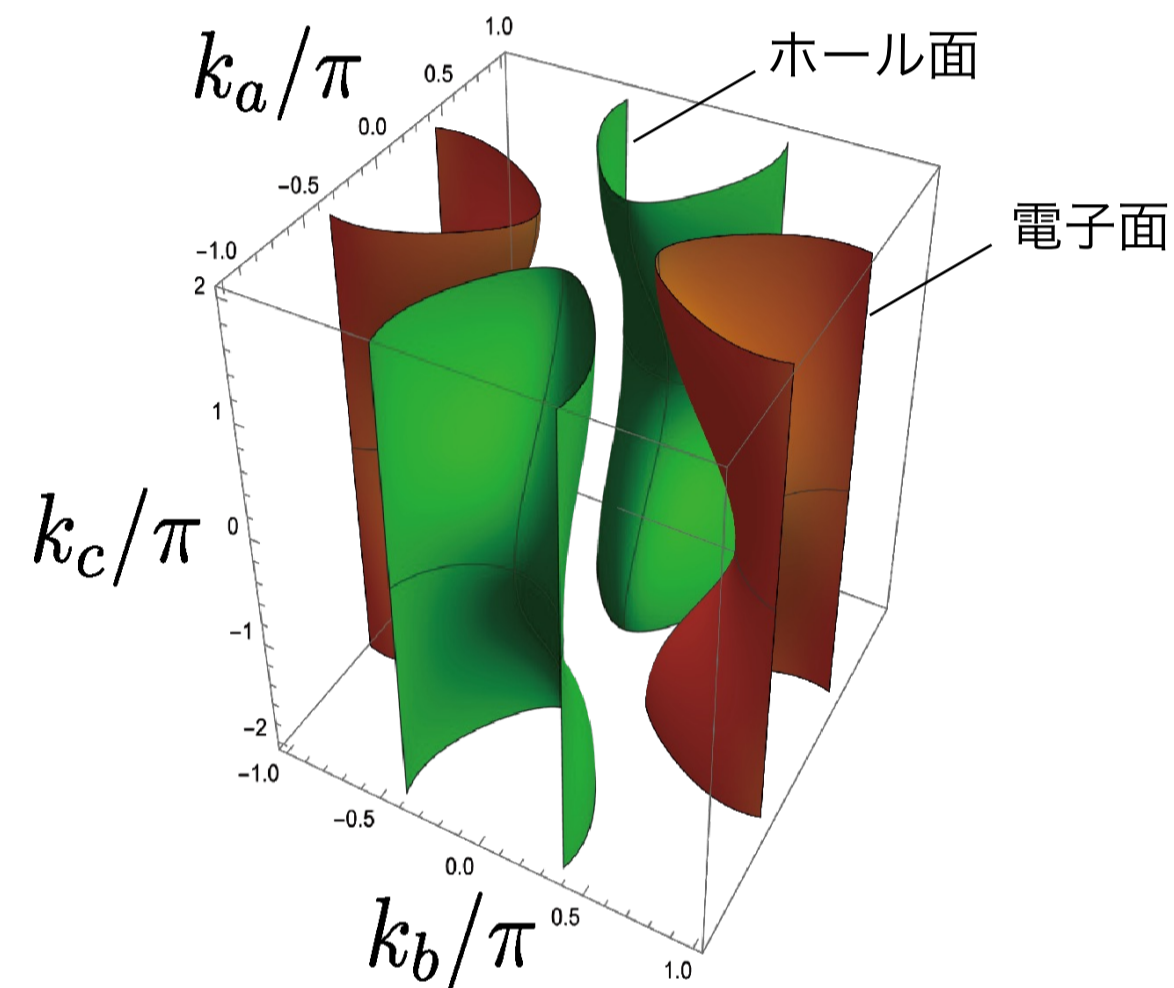


Fig. 3 本研究のモデルハミルトニアンが作るシリンダー型のフェルミ面

■ 手法：モデルと数値計算

UTe₂は体心立方晶、空間群: *I*mmm(#71, *D*_{2h}²⁵) に属し、単位胞に2個のU原子がc軸上に並んだ構造を持つ。

モデルハミルトニアン

*D*_{2h}の対称性を持つ2軌道2スピンの自由度をもつ系

$$H_n = \epsilon_0(k) + \underbrace{f_x(k)\tau_x}_{①} + \underbrace{f_y(k)\tau_y}_{②}$$

τ_i : 軌道のパウリ行列

このハミルトニアンはシリンダー型の電子フェルミ面 [Fig. 2(オレンジ)]を再現

ギャップ関数

二つのU原子のf軌道がスピントリプレット・奇パリティのクーパー対状態に凝縮

$$\Delta_{12}(k) = id(k) \cdot \sigma\sigma_y$$

時間反転対称性を持つユニタリー超伝導を仮定すれば、実現し得るdベクトルは対称群*D*_{2h}の既約表現(IR)のいずれか: A_u, B_{1u}, B_{2u}, B_{3u}

表面マヨラナゼロモード(MZM)の存在を調べるために、一軸方向の表面 $x_{\perp} = 0$ 、 $x_{\perp} = L = 50$ の開面 ($x_{\perp} = a, b, c$) を持つ境界条件でBdGハミルトニアンを対角化する。

$$\text{BdG ハミルトニアン: } H(k) = \begin{pmatrix} H_n(k) & \Delta(k) \\ \Delta^{\dagger}(k) & -H_n^T(-k) \end{pmatrix}$$

Table 1. 対称群*D*_{2h}の既約表現と基底関数

IR	C _a	C _b	C _c	M _{bc}	M _{ca}	M _{ab}	basis function	
							orbital-triplet	orbital-singlet
A _u	+	+	+	-	-	-	$k_a\hat{a}, k_b\hat{b}, k_c\hat{c}$	$i\Delta^e\hat{c}$
B _{1u}	-	-	+	+	+	-	$k_b\hat{a}, k_a\hat{b}$	
B _{2u}	-	+	-	+	-	+	$k_c\hat{a}, k_a\hat{c}$	$i\Delta^e\hat{a}$
B _{3u}	-	-	+	-	+	+	$k_c\hat{b}, k_b\hat{c}$	$i\Delta^e\hat{b}$

■ 結晶対称性によるトポロジカル不変量

1次元 (1D) 巻き付き数

通常(DIII class)のカイラル演算子 $\Gamma = i\Theta C$ $\{\Gamma, \Theta\} = 0$

↓ 対称操作 $U(C, M)$ でギャップ関数 Δ が変化しない場合 (偶パリティ)

新しいカイラル演算子 $\Gamma_U = e^{i\phi}\tilde{U}\Theta C$

BDI classのカイラル演算子が満たす性質 $[\Gamma_U, \Theta] = 0$

1次元の巻き付き数がZトポロジカル数として定義できる

$$w_U(\mathbf{k}_{\parallel}) = -\frac{1}{4\pi i} \int d\mathbf{k}_{\perp} \text{tr}[\Gamma_U H^{-1} \partial_{\mathbf{k}_{\perp}} H(\mathbf{k}_{\perp})]$$

ミラー-Chern数

ミラーの固有値のセクターでChern数が有限になる

$$\nu_{x_{\perp}x_{\parallel 1}} = \frac{1}{2}(\nu_{x_{\perp}x_{\parallel 1}}(+i) - \nu_{x_{\perp}x_{\parallel 1}}(-i))$$

■ 結果と考察

a軸に垂直な表面を持つA_u状態

$$d_{12} = \begin{pmatrix} \sin k_a \\ \sin k_b \\ \sin k_c + i \end{pmatrix}$$

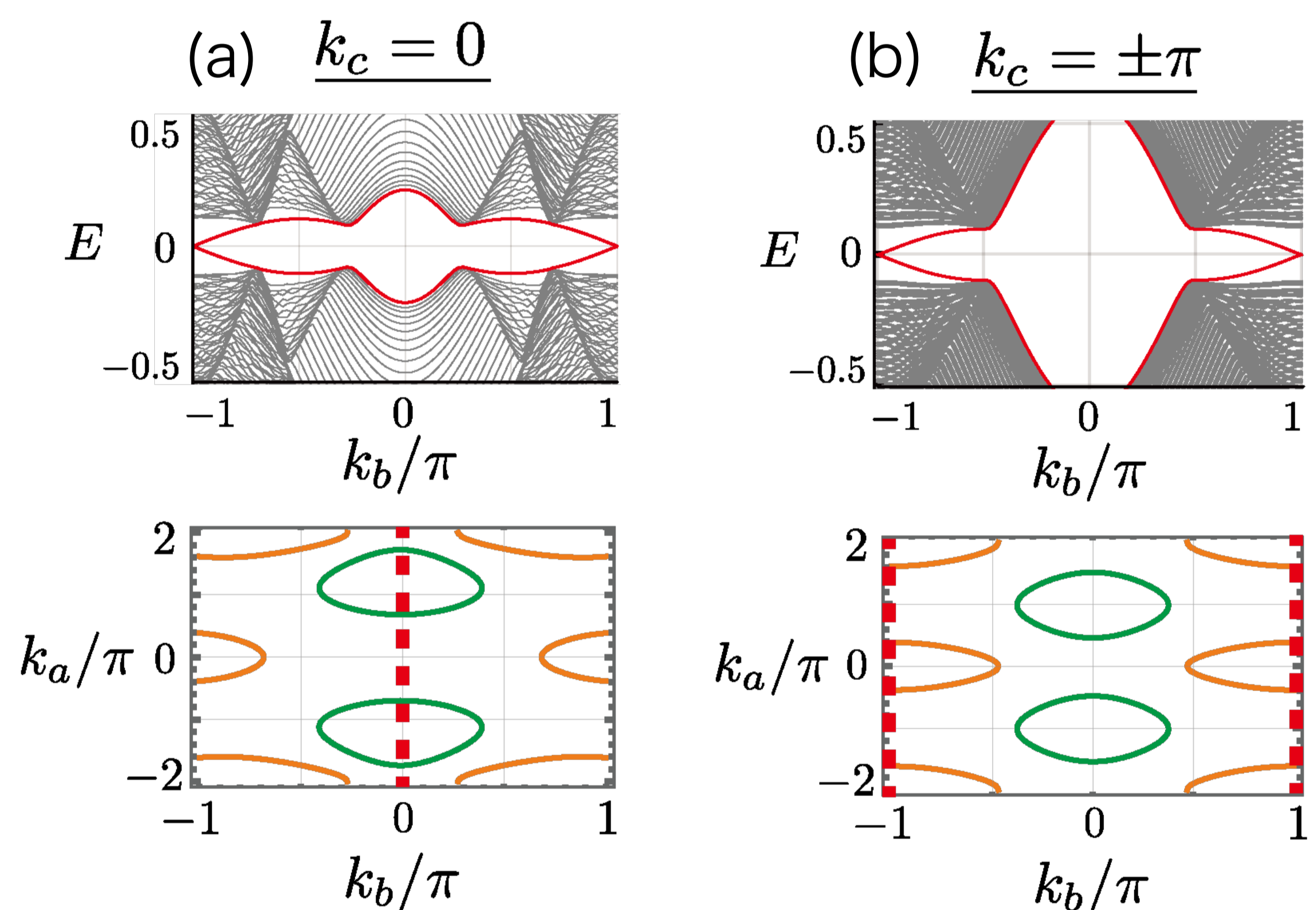


Fig. 4 (上段) a軸に垂直な表面を持つAu状態の準粒子励起スペクトル (a)(b)それぞれ4重縮退したギャップレスモードを持つ (下段) 2次元 BZと交差するフェルミ面

(a) *ab*ミラー面上 $k_c = 0$ のギャップレスモード

ミラー-Chern数 $\nu_{ab} = 2$

(b) a軸周りの2回回転軸上 $k_b = \pi$ $k_c = \pi$ のギャップレスモード

Au状態は回転に対して偶パリティ

➡ 1D 巻き付き数が定義可能

フェルミ面公式

$$w_{c_a} = \sum_{E(\mathbf{k}_F)=0} \text{sgn}[d_a] \text{sgn}[\partial_{k_a} E] = 4$$

ホール面 (緑) を考慮すると

- ミラー-Chern数にホール面の寄与が加わる

モデル依存

電子バンドと同符号のギャップ関数 ➡ $\nu_{ab} = 0$

電子バンドとホールバンドのホッピングがMZMをギャップアウトする可能性

- $k_c = 0$ $k_b = 0$ の回転軸に1D巻き付き数由来の4重縮退したMZM

B_{1u}, B_{2u}, B_{3u}でも同様に結晶対称面でMZMが現れる。シリンダーFermi面を持つUTe₂はトポロジカル結晶超伝導である。

[1] A. Dai, et al.: Journal of physics: Condens. Matter **34**, 243002 (2022).

[2] A. Dai, et al.: Journal of the Physical Society of Japan. **91**, 083704(2022).