

YNi₂B₂Cのバンド構造の詳細を考慮 したギャップノードの位置の推定

Theory on Positions of Gap-Nodes with
Considering the Band Structure of YNi₂B₂C

東大理
東大総合文化
ETH-Zürich
CNR-INFM
神戸大理

永井佑紀
加藤雄介
林伸彦
山内邦彦
播磨尚朝

渦糸近傍での準粒子束縛状態

磁場をかけた第二種超伝導体において

渦糸コアでギャップ0: 渦糸近傍に準粒子の束縛状態

渦糸コア近傍にはギャップの異方性を反映した電子状態密度分布が存在する。

運動量空間でのギャップの異方性が実空間に射影されている。

Scanning Tunneling Microscopy and Spectroscopy (STM/STS)

NbSe₂ H. F. Hess et al.: Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 2711

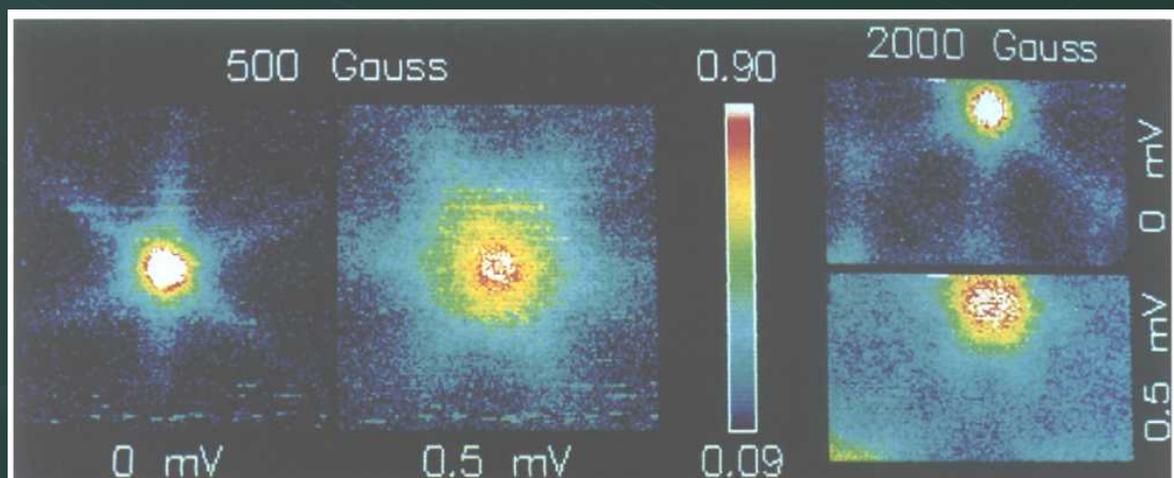


FIG. 4. Simultaneously taken XY images of $dI/dV(0 \text{ mV}, x, y)$ and $dI/dV(0.5 \text{ mV}, x, y)$ with $B=500 \text{ G}$ and the same for 2000 G . The width of all images is 1500 \AA . Differential tunneling conductance of 0.9 and larger in normalized units is shown as white.

STMは局所電子状態密度
を観測できる



ペアリングの異方性を
探るツールになりうる

今回は $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$

YNi₂B₂Cとは

1994年頃、異方的s波超伝導であると考えられ盛んに研究された。

2002年、Makiらがこの物質はポイントノードではないかと述べた。

K. Maki et al.: Phys. Rev. B **65** (2002) 140502(R)



Izawaらが角度分解能のある熱伝導率の実験を行い、Makiらの予言を実証

K. Izawa et al.: Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 137006



ParkらのField-Angle-Dependent Heat Capacityの測定

T. Park et al.: Phys. Rev. Lett. **90** (2003) 177001

WatanabeらのUltrasonic Attenuationの測定

T. Watanabe et al.: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 147002

NishimoriらのSTMによる渦糸コアの測定

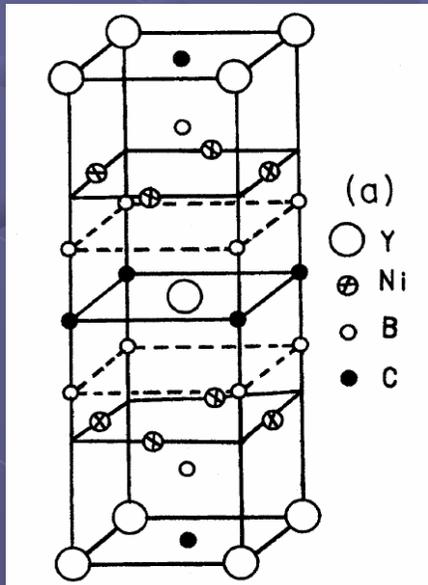
H. Nishimori et al.: J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004) 3247

ポイントノードの位置も特定？

なぜポイントノードなのか？

なぜその位置にポイントノードがあるのか？

わかっていない



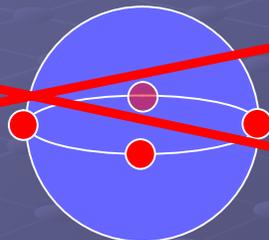
P. Ravindran et al.: Phys. Rev. B **52** (1995) 12921

前回の講演(06年秋季)までの結果

YNi₂B₂Cのポイントノードの関数形(実験で明らかになったと思われていた)

$$\Delta(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \Delta (1 - \sin^4 \theta \cos(4\phi))$$

ノード: $\theta = \pi/2, \phi = 0$



等方的フェルミ面を仮定して実験結果を解析
不正確な解析だとわかった。

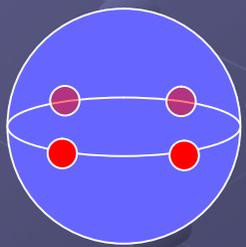
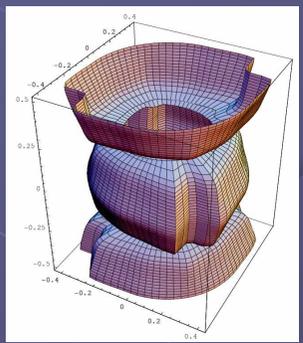
極めて強い異方的フェルミ面を考慮するため、モデル化したフェルミ面を用意

STM/STS以外の実験結果

ノードの位置でのフェルミ速度の方向: $\theta = \pi/2, \phi = 0$

STM: モデル化したフェルミ面での理論計算との比較

ノード: $\theta = \pi/2, \phi = \pi/4$



フェルミ面のネスティングがポイントノード形成?

問題点

1. モデル化フェルミ面は本当に妥当か
2. 実験結果との比較は十分か

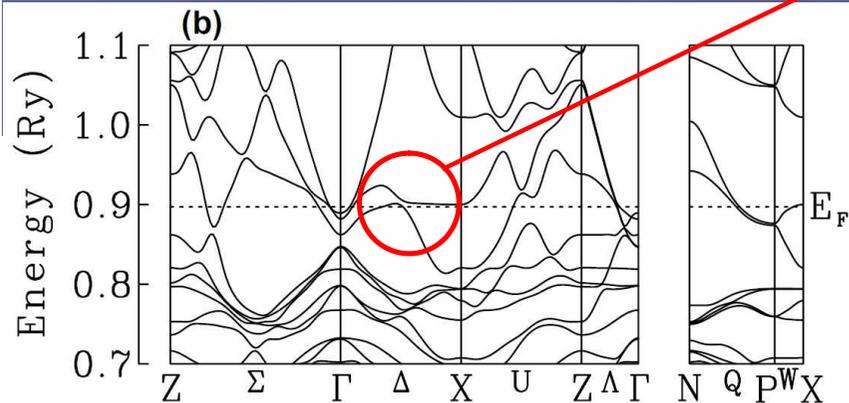
今回

バンド計算によるフェルミ面を用いた計算で実験結果と比較

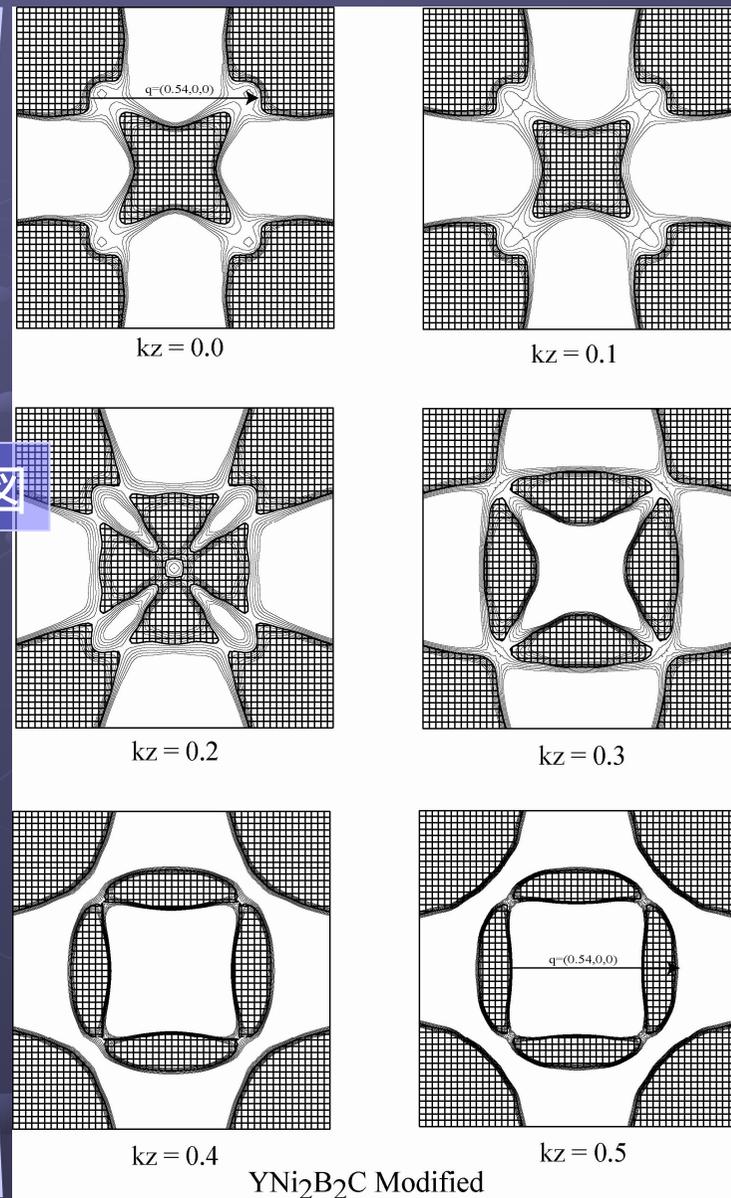
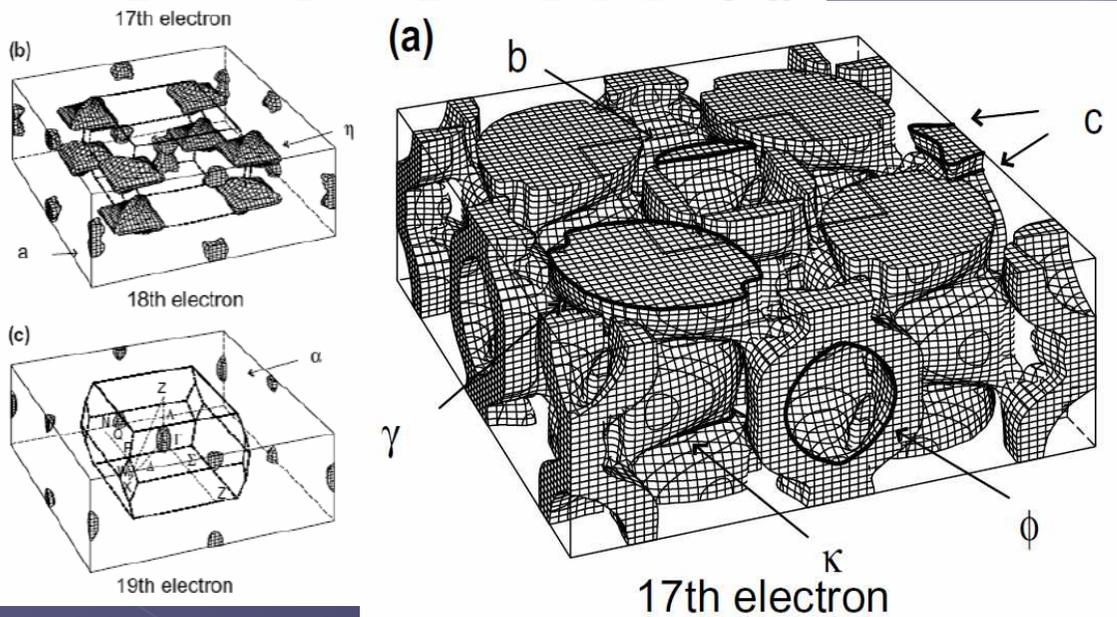
YNi₂B₂Cのバンド構造

YNi₂B₂Cのバンド構造の特徴

Van Hove 的特異性と
Nesting vectorの存在

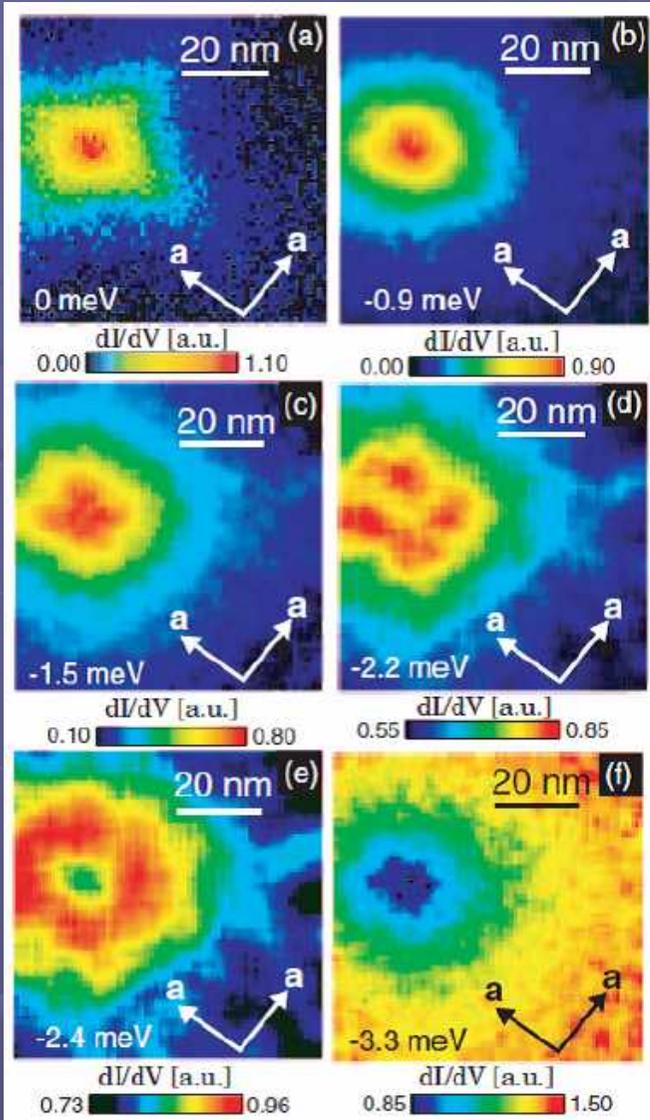


17th Fermi面の断面図



局所電子状態密度(LDOS)

渦糸近傍でのLDOSの分布 (STM/STS) $\lambda = 6.3 \text{ nm}$, $l = 70 \text{ nm}$, $\Delta = 3.3 \text{ meV}$



(a) : 0 meV で a 軸方向に伸びる十字形

ポイントノードは a 軸方向?

(c),(d) : $\Delta = \lambda/4$ の十字方向に四つのピークの存在

どのようなギャップの異方性を反映しているのか?

本研究の目的

1. バンド計算を考慮した異方的フェルミ面を用いて LDOS を求め実験結果と比較する。
2. 得られたギャップ構造を用いて比熱を計算する
3. ポイントノードの位置を確かめる。

計算方法

用いる手法

準古典理論を用いた渦糸コア近傍での局所電子状態密度分布の理論

Y. Nagai et al. :J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 104701.

渦糸コア近傍の準古典Green関数の解析解が得られる

得られた準古典遅延Green関数を

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) = - \int \frac{dS_F}{2\pi^2 v_F} \text{Re tr}(\hat{g}^R).$$

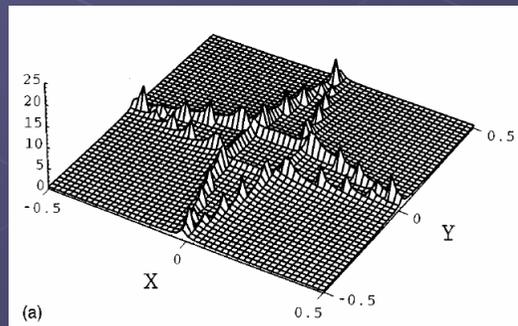
に代入するとLDOSが得られる。

過去の数値計算結果

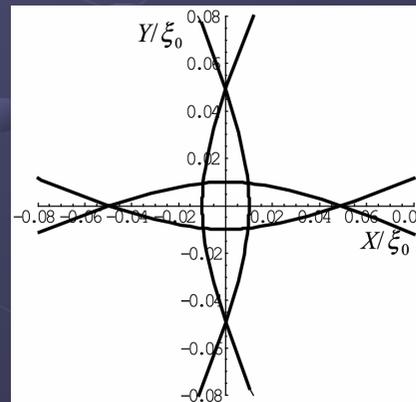
我々の解析計算結果

$\xi_0 = 0.01$

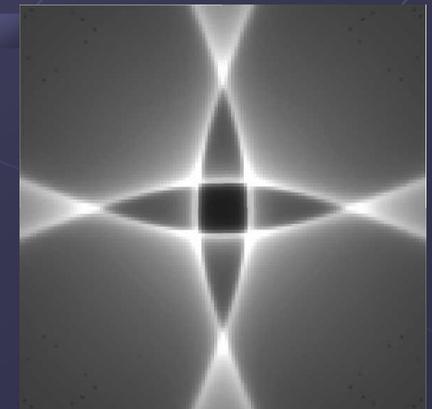
d波超伝導体



LDOSの発散点



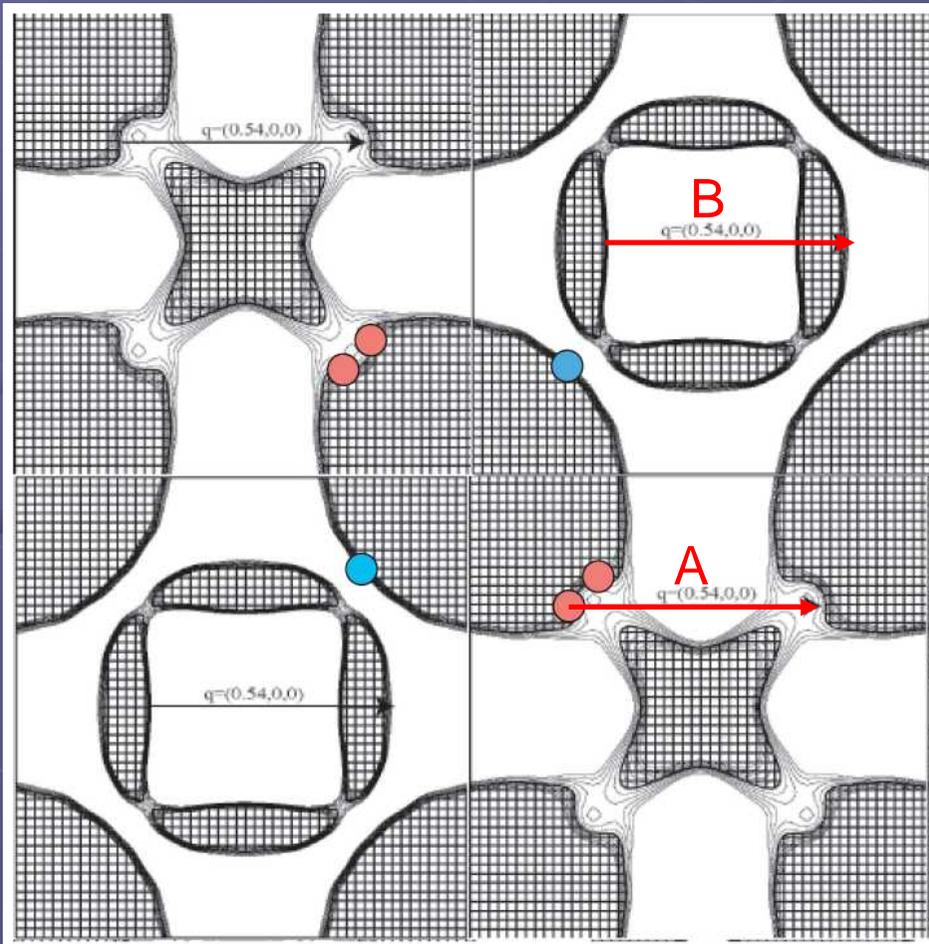
LDOS分布



得られたギャップ構造 (結果)

ノードの位置をさまざまに変えてLDOSを計算し、STM実験と比較した結果

$k_z=0$ でのフェルミ面の断面図



フェルミ面の特徴

ネスティングの存在: 大きく分けて二箇所

得られたギャップ構造の特徴

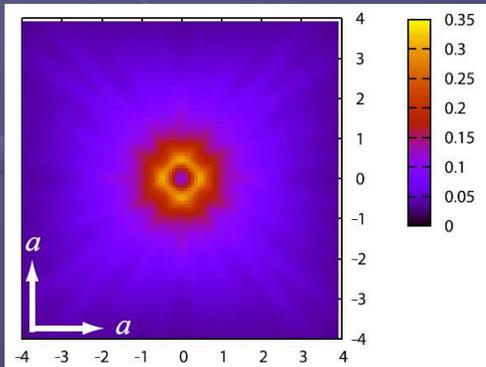
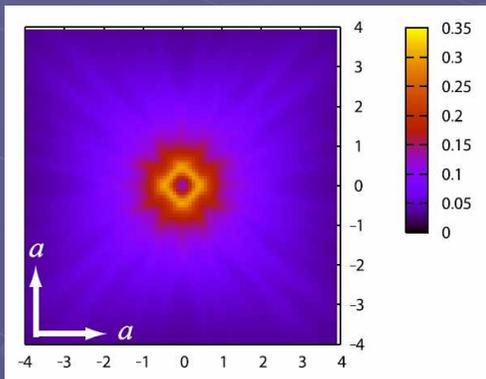
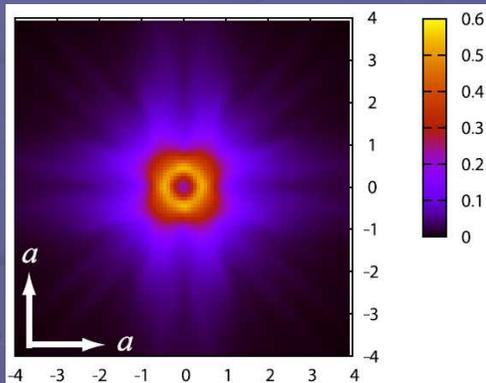
ネスティングAのみにノードがある (赤丸)

ギャップ極小値が他にも存在する (青丸)

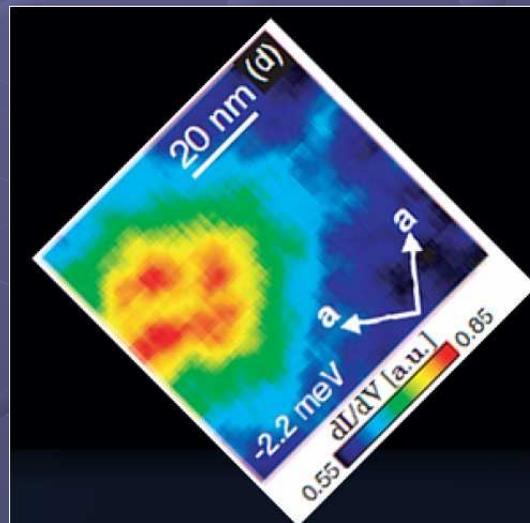
(極小値は $\text{MAX}/2$ 程度)

ギャップ構造の推定(方法) 1/2

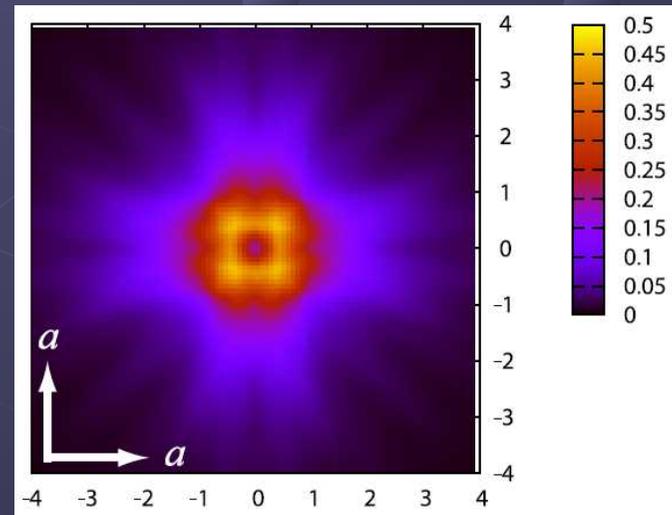
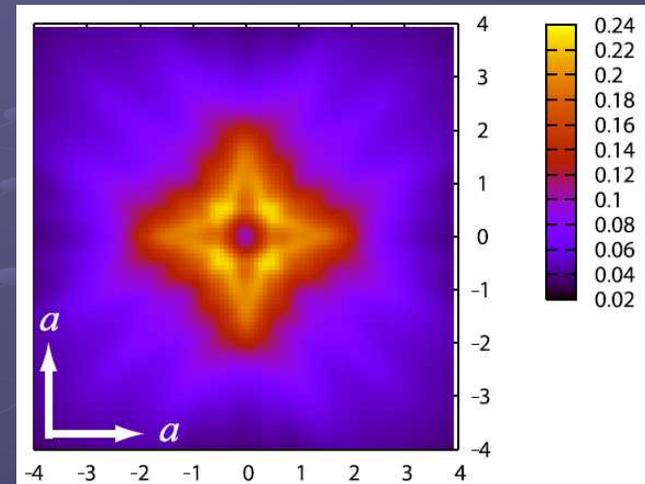
さまざまなギャップ構造を仮定してLDOSを計算した



STM実験結果



ピーク的位置に着目

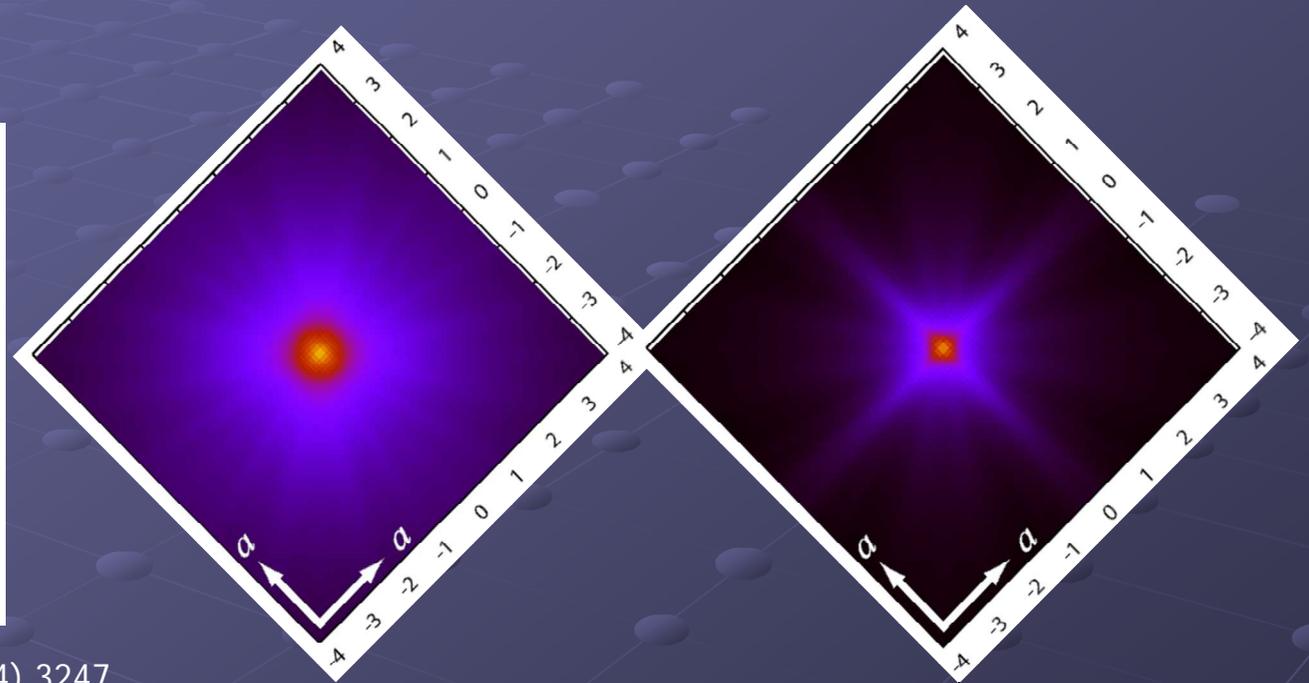
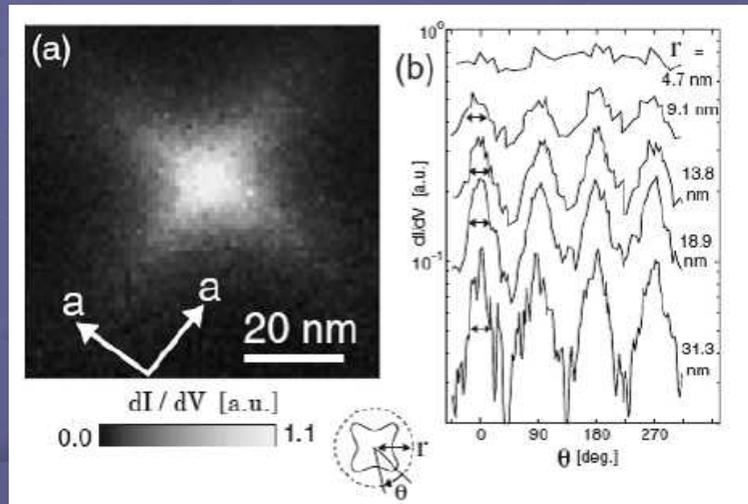


右二つがよく一致しているように見える

ギャップ構造の推定(方法) 2/2

さらに、ゼロバイアスの実験結果との比較を行う

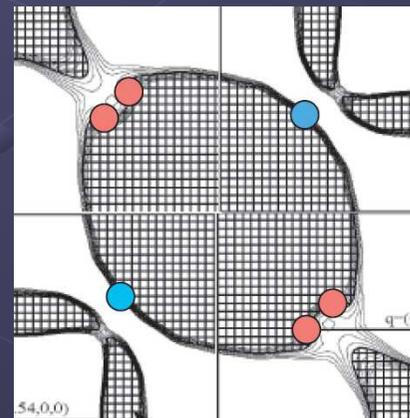
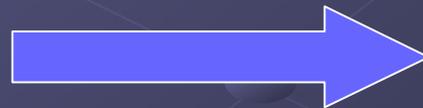
STM実験結果(ゼロバイアス)



H. Nishimori et al.: J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004) 3247

十字形の伸びる方向に着目

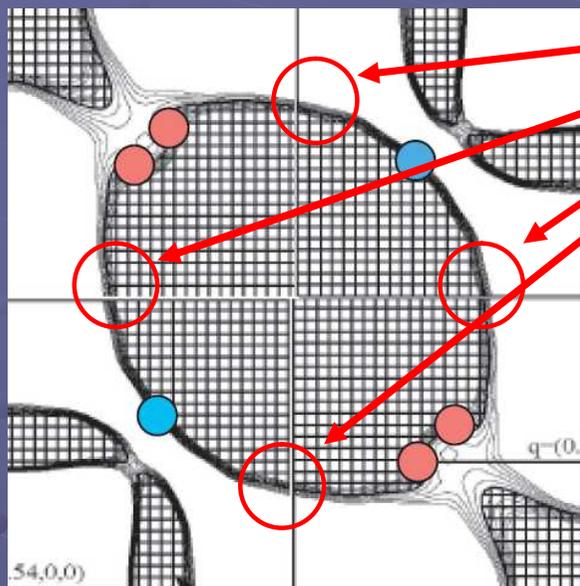
右側のLDOSが一致



そのときのギャップ構造

ギャップ構造とLDOSの解釈

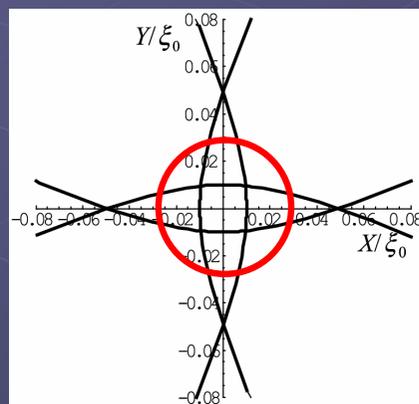
STM(LDOS)はアンチノード情報を拾うプローブであることを考えると.....



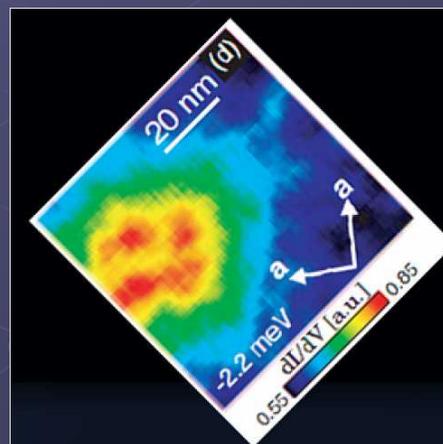
ギャップ極大値の場所

アンチノード近傍では、フェルミ面は比較的等方的

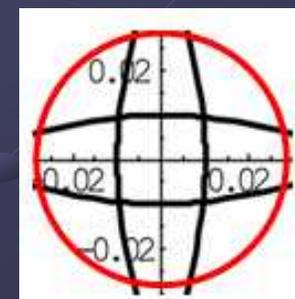
等方的フェルミ面のモデルで解釈が可能



d波のLDOS



ピークは発散線が重なった点に相当



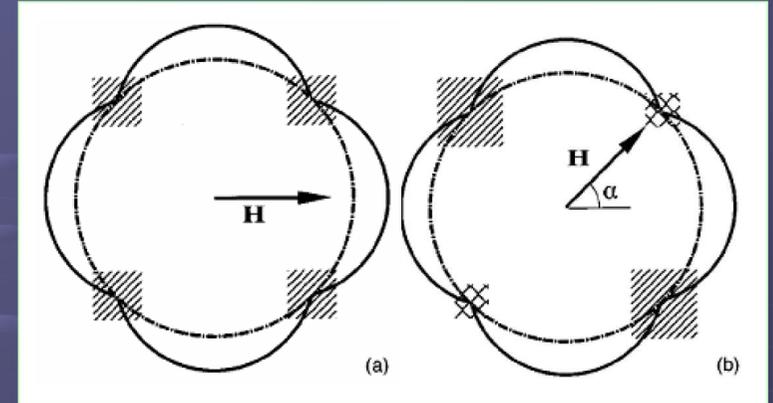
STM実験の結果は十分に理解することができる

比熱・熱伝導率の実験との比較

Doppler Shift Method (Superclean Limit)

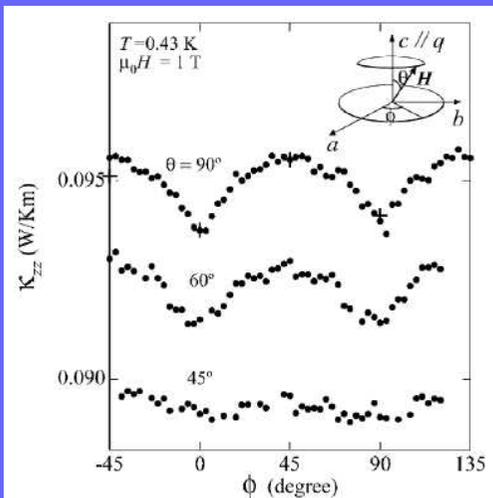
$$\nu(\varepsilon = 0) = \left\langle \text{Re} \frac{|\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{v}_s|}{\sqrt{(|\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{v}_s|)^2 - |\Delta|^2}} \right\rangle$$

\mathbf{v}_s : supercurrent velocity

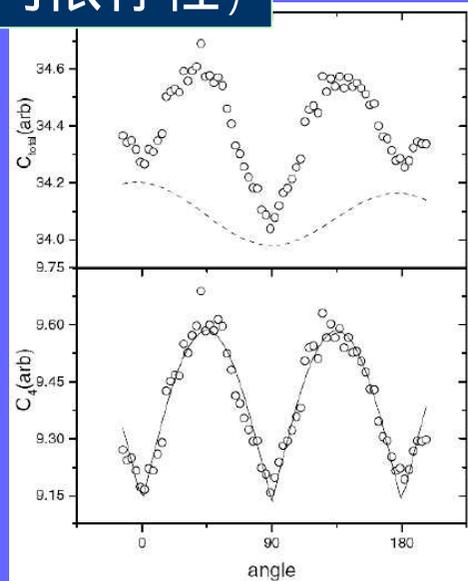


物理的イメージ

実験結果 (面内磁場方向依存性)

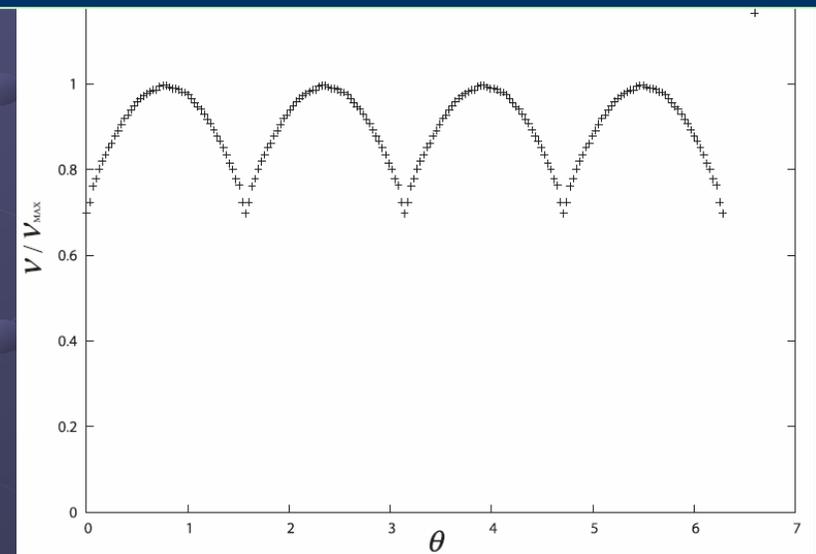


熱伝導率[1]



比熱[2]

数値計算結果 (縦軸: 状態密度)



- [1] K. Izawa et al.: Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 137006
 [2] T. Park et al.: Phys. Rev. Lett. **90** (2003) 177001

実験結果とコンシステント

まとめ

バンド構造を取り入れたLDOSの計算とSTM実験の比較を行った

STM実験結果: アンチノードの情報

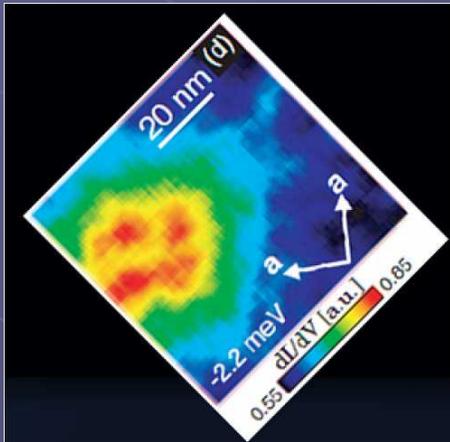
+

比熱・熱伝導率実験: ノード近傍の情報

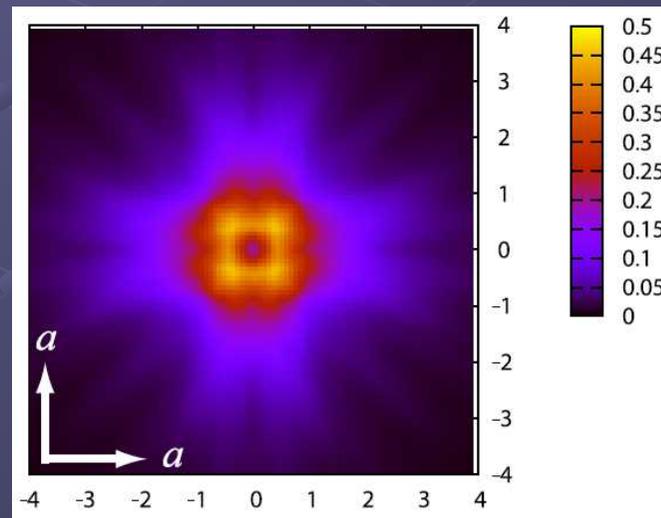
ギャップノードの位置に関してはほぼ一意にギャップ構造が定まる

ネスティングベクトルの位置にポイントノードがある

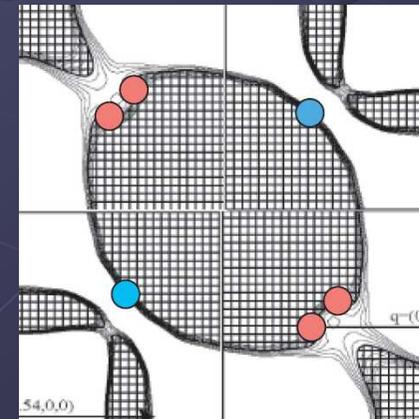
今後の課題: Doppler Shift法以外の比熱・熱伝導率の計算
ポイントノード形成メカニズムの解明等



STM実験



計算結果



ノードの位置