修士論文審查会

2006年度修士論文

超伝導量子渦糸系における局所電子状態密度に関する解析的理論

加藤雄介研究室 永井佑紀

研究内容

1、渦糸周りの局所電子状態密度の解析的理論

- 2、空間反転対称性のない超伝導体: CePt₃Siの場合
- 3、異方的フェルミ面をもった異方的s波超伝導:YNi₂B₂Cの場合

渦糸周りの局所電子状態密 度の解析的理論

異方的超伝導体

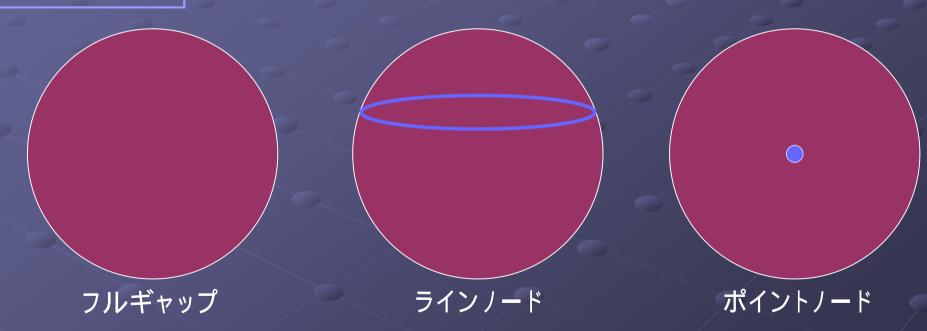
異方的超伝導:運動量空間においてギャップに異方性を持つ超伝導

等方的s波超伝導体:ノード無し

ノード: ギャップが零になる領域

d波超伝導体(銅酸化物高温超伝導体?):ラインノード

ノードの模式図



それぞれ励起される準粒子数の温度依存性が異なる

状態密度や比熱の温度依存性が異なる

ギャップ構造の実験的検出法の例

比熱の温度依存性: ギャップとノードの面積比で決まる

常伝導金属: C/T = const. (フェルミ球すべてギャップ0)

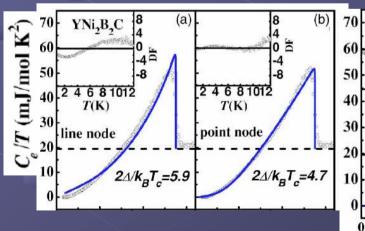
ラインノード: C/T

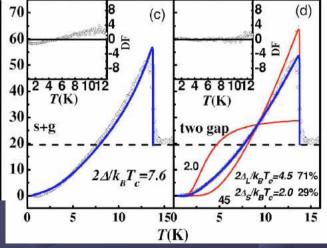
ポイントノード:C/T

ギャップの角度依存性 0.2

比熱の温度依存性を見ることでノード構造の推定が可能

比熱の実験の例: YNi,B,C YNi,B,C:ポイントノードと考えられている超伝導体





欠点: ノードが「どこ」 にあるか がわからない。

角度依存性のある プローブが必要

その他の方法は?

C. L. Huang et al.: PRL 73 (2006) 012502

Andreev束縛状態とSTM 1/2

ギャップの異方性を調べる:比熱、熱伝導率、NMR、STM、超音波吸収、光電子分光等

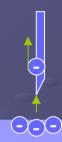
第二種超伝導体を考える

下部臨界磁場以上で量子化磁束

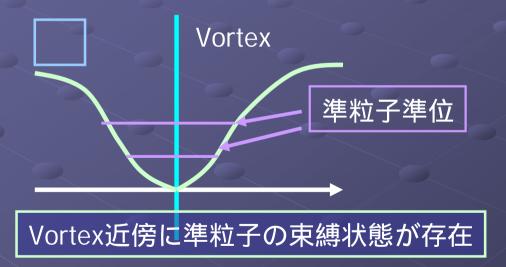
走査型トンネル顕微鏡

模式図

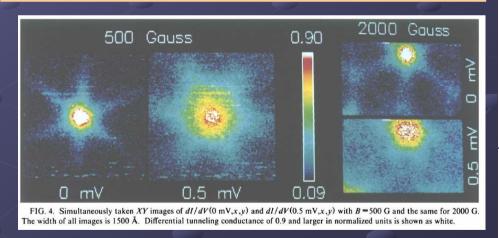
dI/dV 測定=状態密度測定



Vortex coreでは、ギャップが0になる。



Vortex近傍のLDOSはSTMで観測できる。



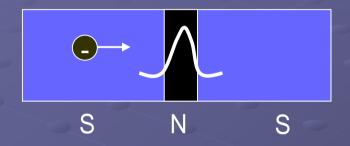
H. F. Hess et al.: Phys. Rev. Lett. 64 (1990) 2711

LDOSを調べると ノード構造を調べられる。

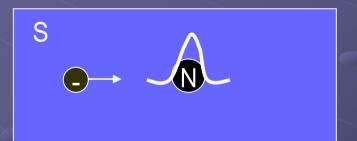
Andreev束縛状態とSTM 2/2

磁束量子系とジョセフソン接合系

ジョセフソン接合系



磁束量子系



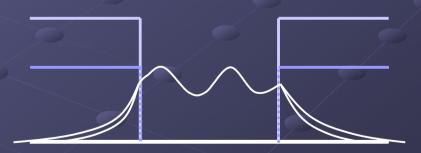
(運動量空間で)個々の準粒子が感じるギャップの大きさ



(実空間で)個々の準粒子が作る束縛状態の大きさ

ギャップが小さい準粒子ほど広がって存在

模式図:染み出した距離~束縛状態の大きさ



準古典Green関数を用いて局所電子状態密度(LDOS)を解析的に得たい。

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) = -\int \frac{dS_{\mathrm{F}}}{2\pi^2 v_{\mathrm{F}}} \operatorname{Re} \operatorname{tr}(\hat{g}^{\mathrm{R}}).$$

gR: 準古典遅延Green関数

Green関数と準古典近似

LDOSをどのように求めるか

準古典近似を用いて、Gor'kov equationをEilenberger equationにする。

Gor'kov equation: 超伝導状態を表すGreen関数が従うべき方程式

$$\begin{pmatrix} \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\dot{\nabla}^2}{2m} + \mu \right) & -\Delta(x) \\ \Delta^*(x) & \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\dot{\nabla}^2}{2m} + \mu \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G(x, x') & F(x, x') \\ -F^{\dagger}(x, x') & \hat{G}(x, x') \end{pmatrix} = \delta(x - x') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

準古典近似: フェルミ波長~1/kF程度の振動を無視する近似

Green関数がE=E Fで局在しているとして、ほかの関数のエネルギー依存性を無視 $F(\hat{\mathbf{p}},|\mathbf{p}|)$ \longrightarrow $F(\hat{\mathbf{p}},|\mathbf{p}|)$

Eilenberger equation: 4x4の行列微分方程式

$$-i\boldsymbol{v}_{F}\cdot\nabla\check{g}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_{n}) = \begin{bmatrix} \left(\begin{array}{cc} i\omega_{n}+\frac{e}{c}\boldsymbol{v}_{F}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) & -\Delta(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r}) \\ \Delta^{*}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r}) & -i\omega_{n}-\frac{e}{c}\boldsymbol{v}_{F}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \end{array}\right),\check{g}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_{n}) \end{bmatrix}$$

準古典Green関数

 $g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \equiv \oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} G(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; i\omega_n)$

この方程式を渦糸コア近傍で解く。

解析的に解ける

解析的に解くために

Eilenberger equation: 4x4の行列微分方程式



$$\check{g} = -\check{N} \begin{pmatrix} (\hat{1} - \hat{a}\hat{b}) & 2i\hat{a} \\ -2i\hat{b} & -(\hat{1} - \hat{b}\hat{a}) \end{pmatrix}, \ \check{N} = \begin{pmatrix} (1 + \hat{a}\hat{b})^{-1} & 0 \\ 0 & (1 + \hat{b}\hat{a})^{-1} \end{pmatrix}.$$

2x2の二元連立行列微分方程式に変換(Riccati eq.)

$$\mathbf{v}_{\mathrm{F}} \cdot \mathbf{\nabla} \hat{a} + 2\omega_n \hat{a} + \hat{a} \hat{\Delta}^{\dagger} \hat{a} - \hat{\Delta} = 0,$$

$$\mathbf{v}_{\mathrm{F}} \cdot \mathbf{\nabla} \hat{b} - 2\omega_n \hat{b} - \hat{b} \hat{\Delta} \hat{b} + \hat{\Delta}^{\dagger} = 0,$$



渦糸中心でGreen関数は発散 分母を渦糸近傍で摂動展開(後述)

渦糸コア近傍を通る準粒子に着目して、impact parameter yと励起エネルギー で摂動展開

$$v_{\rm F} \frac{\partial \hat{a}_{1}}{\partial x} + 2\omega_{n} \hat{a}_{0} + \hat{a}_{0} \hat{\Delta}_{0}^{\dagger} \hat{a}_{1} + \hat{a}_{1} \hat{\Delta}_{0}^{\dagger} \hat{a}_{0} + \hat{a}_{0} \hat{\Delta}_{1}^{\dagger} \hat{a}_{0} - \hat{\Delta}_{1} = 0,$$

$$v_{\rm F} \frac{\partial \hat{b}_{1}}{\partial x} - 2\omega_{n} \hat{b}_{0} - \hat{b}_{0} \hat{\Delta}_{0} \hat{b}_{1} - \hat{b}_{1} \hat{\Delta}_{0} \hat{b}_{0} - \hat{b}_{0} \hat{\Delta}_{1} \hat{b}_{0} + \hat{\Delta}_{1}^{\dagger} = 0.$$

これを解〈事で渦糸コア近傍の準粒子の束縛状態を示すGreen関数が得られる

摂動展開の物理的意味

Kramer-Pesch近似(KPA)

インパクトパラメータッと励起エネルギーで摂動展開

L. Kramer and W. Pesch: Z. Phys. **269** (1974) 59 KPAの物理的説明

Andreev束縛状態が生じるので、渦糸コアでは低エネルギーでGreen関数が発散する(ゼロバイアスピーク)

Green関数の分母を渦糸コア近傍で摂動展開することが可能

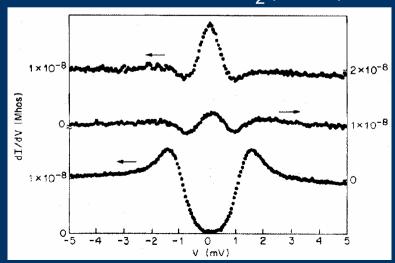
ゼロバイアスピーク

渦糸コアで V=0meVのとき、dI/dV は大きなピークを持つ



渦糸コアでは局所電子状態密度が発散する

dl/dV in NbSe₂(STM)



H. F. Hess et al.: Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 214

局所電子状態密度の解析解

渦糸近傍でのLDOSの解析解:二次元系の場合(三次元系も同様に解ける)

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) \sim \lim_{\delta \to 0} \frac{\nu(0)}{2} \int_{0}^{2\pi} \frac{v_{\mathrm{F}} d\theta}{2\pi C} \frac{\delta e^{-2\lambda F(x)}}{(\epsilon - E)^{2} + \delta^{2}},$$

$$\sim \frac{\nu(0)v_{\mathrm{F}}}{\xi_{0}} \int_{0}^{2\pi} d\theta \lambda \underline{\delta(\epsilon - E)} e^{-2\lambda F(x)},$$

: ギャップの大きさ

:励起エネルギー

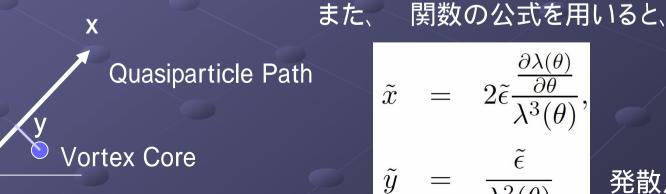
$$\epsilon - E(\mathbf{r}, \theta) = 0$$

 $\epsilon - E(r, \theta) = 0$ を満たす時状態が存在する

$$E \sim \frac{y\lambda}{\xi_0} \int_0^{\xi_0} \frac{\Delta_{\infty}\lambda}{\xi_0} dx' \sim \frac{y}{\xi_0} \Delta_{\infty}\lambda^2$$

$$rac{y}{\xi_0} = rac{\epsilon}{\Delta_\infty} rac{1}{\lambda^2}$$
 という関係式が得られる

ある準粒子の インパクトパラメータyが一意に定まる



$$\tilde{x} = 2\tilde{\epsilon} \frac{\frac{\partial \lambda(\theta)}{\partial \theta}}{\lambda^3(\theta)},$$

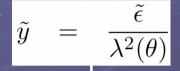
$$\tilde{y} = \frac{\tilde{\epsilon}}{\lambda^2(\theta)}$$

発散点が存在することがわかる

物理的イメージ

二次元系(NbSe₂)

方向に移動している準粒子 のPathは一意に定まる



: ギャップの大きさ

ギャップが小さいと渦糸コアから遠い 以前の定性的イメージと一致



Vortex Core

すべての方向の準粒子の寄与を足し合わせる





$$\tilde{x} = 2\tilde{\epsilon} \frac{\frac{\partial \lambda(\theta)}{\partial \theta}}{\lambda^{3}(\theta)},$$

$$\tilde{y} = \frac{\tilde{\epsilon}}{\lambda^{2}(\theta)}$$

発散点

Quasiparticle Pathの包絡線がLDOSの発散するパターンを与える

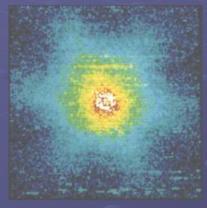
$NbSe_2$

過去の研究

NbSe₂ N. Hayashi et al.: Phys. Rev. B **56** (1997) 9052



数值計算結果

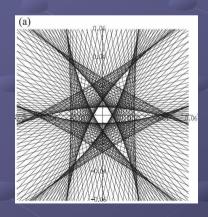


STM像

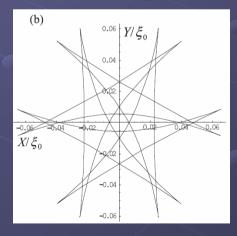
Eilenberger方程式を直接数値的に解き STM像を説明

物理的意味を捉えることが難しい

我々の結果



Quasiparticle Paths



包絡線

ある点においてどの方向の準粒子が 寄与しているかがわかる。



パターンの由来がよくわかる

得られたパターンからギャップの 性質を推定できる

角度分解能あり

他の研究との比較

過去の研究で得られたLDOSと、我々の方法による結果を比較

過去の数値計算結果 我々の解析計算結果 =0.01LDOS分布 LDOSの発散点 Y/ξ_0 d波超伝導体 NbSe₂

我々の方法は任意の異方的超伝導のLDOSを計算できる

異方的フェルミ面を持つ系

Riccati方程式(準古典近似の方程式)は、フェルミ面の各点ごとに独立に解ける

$$\mathbf{v}_{\mathrm{F}} \cdot \nabla \hat{a} + 2\omega_n \hat{a} + \hat{a} \hat{\Delta}^{\dagger} \hat{a} - \hat{\Delta} = 0,$$

$$\mathbf{v}_{\mathrm{F}} \cdot \mathbf{\nabla} \hat{b} - 2\omega_n \hat{b} - \hat{b} \hat{\Delta} \hat{b} + \hat{\Delta}^{\dagger} = 0,$$

フェルミ面異方性はすべて フェルミ速度に押し込められ ている

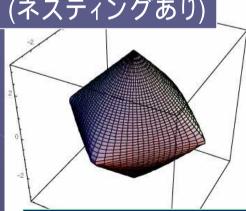
フェルミ速度が運動量空間で異方性を持つ

容易に解ける

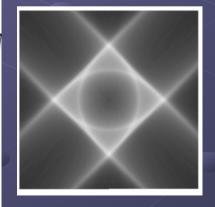
例: simple cubic tight binding model

ネスティングとノードの位置の関係

フェルミ面 (ネスティングあり)

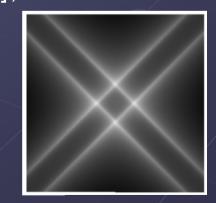


s波



d波(ノード /4[rad]) d波(ノード0度)





ネスティングベクトル: /4[rad]方向

アンチノード方向が中心のパターンを作る

LDOSから言えること

方向に移動している準粒子 のPathは一意に定まる

$$\tilde{y} = \frac{\tilde{\epsilon}}{\lambda^2(\theta)}$$

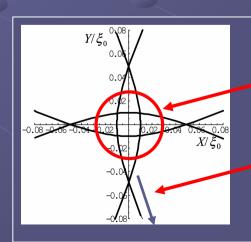


渦糸中心近傍ではギャップ大の準粒子の寄与が多い

ノード近傍の準粒子(<<1)のインパクトパラメータyは、y >> っとなる



渦糸近傍のLDOSには寄与しない



運動量空間上でギャップが大きい準粒子の寄与

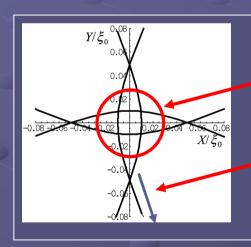
ギャップがより小さい準粒子の寄与が増える

渦糸コア近傍のLDOSパターンはギャップがより大きい(アンチノード)準粒子の寄与で決まる

第二章のまとめ

準古典近似($\Delta << E_F$)で、渦糸コア近傍の局所電子状態密度 (LDOS)を解析的に求めた。

LDOS上の状態密度が大きい実空間上の一点が、フェルミ面上のどの点からの寄与によって得られているかを知ることができる。



運動量空間上でギャップが大きい準粒子の寄与

ギャップがより小さい準粒子の寄与が増える

渦糸コア近傍のLDOSパターンはギャップがより大きい(アンチノード)準粒子の寄与で決まる

STMはアンチノードの情報を拾うことのできるプローブである 他の物理量の測定と組み合わせることでギャップ構造の推定が可能

異方的フェルミ面をもった異方的 s波超伝導:YNi₂B₂Cの場合

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。

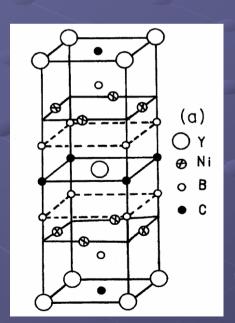
2002年、Makiらがこの物質はポイントノードではないかと述べた。

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?

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

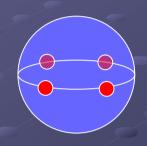
わかっていない

ポイントノードの関数形

2002年のMakiらの論文

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

結晶構造から四回回転対称性を持つ

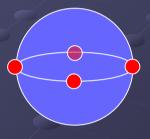


根拠:バンド構造

2002年のIzawaらの熱伝導率の実験の論文

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

= /2、 =0にポイントノード



その他の実験(比熱、超音波吸収、STM): = /2、 =0にポイントノード

実験の解析は等方的フェルミ面を仮定している

- 1.実験と理論(バンド計算由来)でポイントノードの位置が食い違っている。 ポイントノードの位置に理論的な根拠がまだ存在していない。
- 2.YNi₂B₂Cのフェルミ面は強い異方性を持つ。 実験が示唆するポイントノードの方向が正しいとは限らない。

本当にこのポイントノードでよいのか?

Makiらのシナリオ

Makiらのポイントノードの位置の根拠:フェルミ面にネスティングベクトルが存在

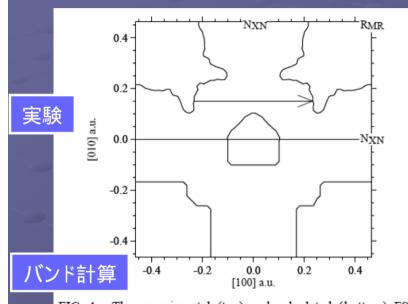
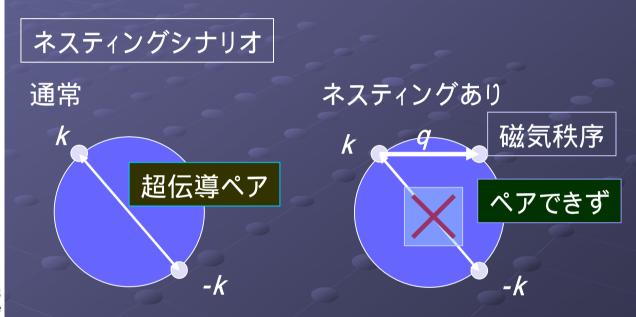


FIG. 4. The experimental (top) and calculated (bottom) FS topology of $LuNi_2B_2C$. The calculation is of the FS in the third band in the (001) plane through the Γ point. The arrow indicates the nesting feature.



two-dimensional angular correlation of electron-positron annihilation radiation (2D-ACAR) LuNi₂B₂C

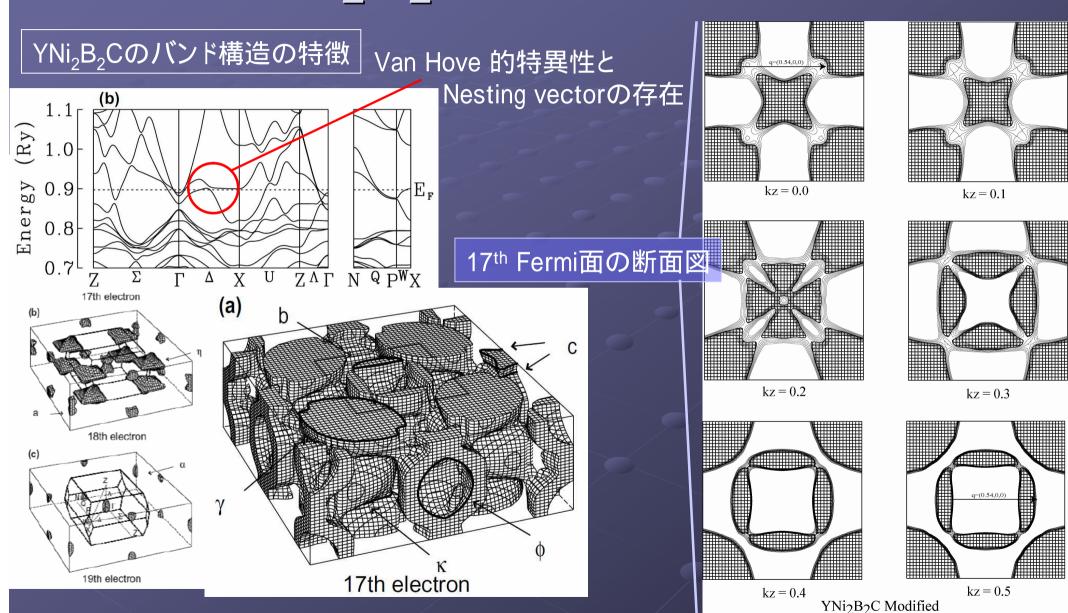
S. B. Dugdale et al.: Phys. Rev. Lett. 83 (1999) 4824

電子-フォノン相互作用かつネスティングの存在 異方的s波超伝導というシナリオ

問題点:実験でのノードの方向とは異なっている

YNi₂B₂Cの超伝導現象はバンド構造が絡んでいるのではないか?

YNi₂B₂Cのバンド構造



K. Yamauchi et al.: Physica C 412-414 (2004) 225

等方的フェルミ面で解析するには異方的すぎる?

実験結果の再解析

「ノード方向を決めた」という実験で用いられている解析方法

Doppler Shift Method:エネルギーがドップラーシフトにより上昇するという方法

G. E. Volovik: Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 58 (1993) 457 [JETP Lett. 58 (1993) 469]

ノードに関する情報

波数ベクトルの方向(フェルミ面上でのノードの位置):

= /2. -じにパイントノード

等方的フェルミ面の場合にのみ正しい

言えない

Doppler Shift Methodは、準粒子のエネルギーに いい に比例する項があることを用いている

超音波吸収の 解析でも成り立つ

異方的フェルミ面の場合

ノードに関する情報

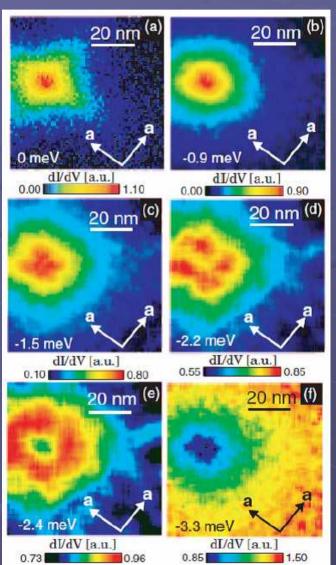
フェルミ速度ベクトルの方向がわかる:位置は不明

Izawaらの熱伝導率の実験は、フェルミ速度がa軸方向(nesting vector方向)であることを示唆

Makiらのノードでのフェルミ速度はa軸方向であり、実験結果は理論予想と矛盾しない

局所電子状態密度(LDOS)

渦糸近傍でのLDOSの分布(STM/STS) =6.3 nm、I = 70 nm、 =3.3meV



(a):0meV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): = /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?

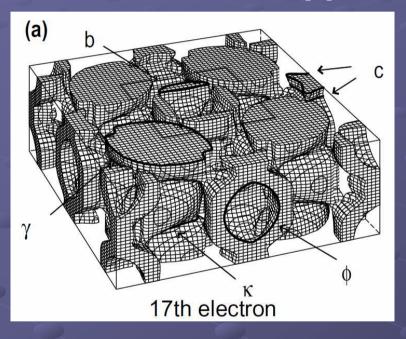
本研究の目的

- 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.ポイントノードの位置を確かめる。

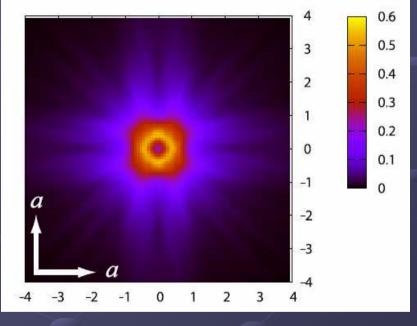
異方的フェルミ面の効果

バンド計算によるフェルミ面を用いて、s波の場合のLDOSを計算

用いたフェルミ面(再掲)[1]



s波の場合のLDOS (case 1.)



/ =0.3, / =0.1, : smearing factor (/1 ~ 0.1)

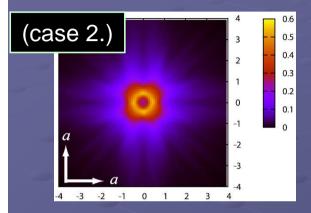
バンドの異方性だけでは、STM実験の結果は再現できない

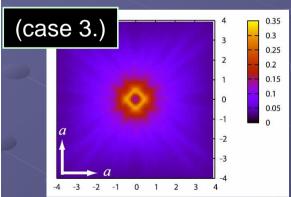
STM実験の結果は異方的ギャップが原因

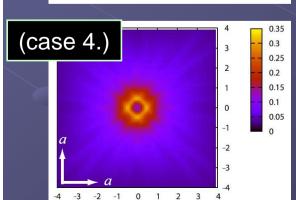
[1] 山内邦彦氏(INFM)から分散 (kx,ky,kz)のデータの提供を受けた。

ギャップ構造の推定 1/2

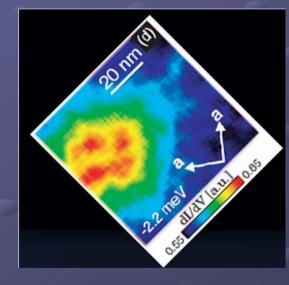
ノードの位置をさまざまに変えてLDOSを計算



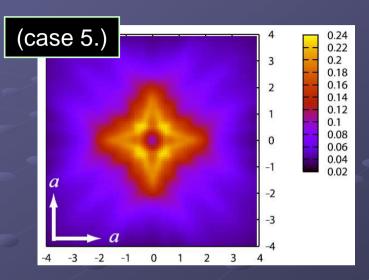


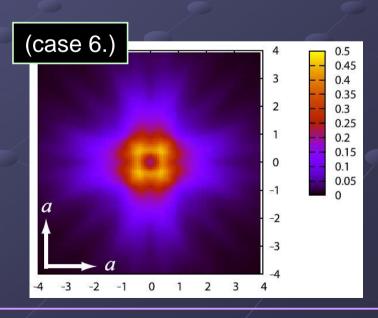


STM実験結果



ピークの位置に着目



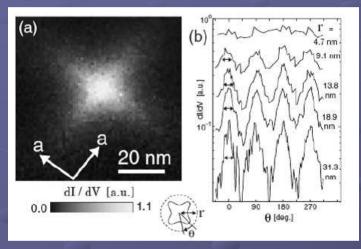


case 5.と6.が実験結果と一致しているように見える

ギャップ構造の推定 2/2

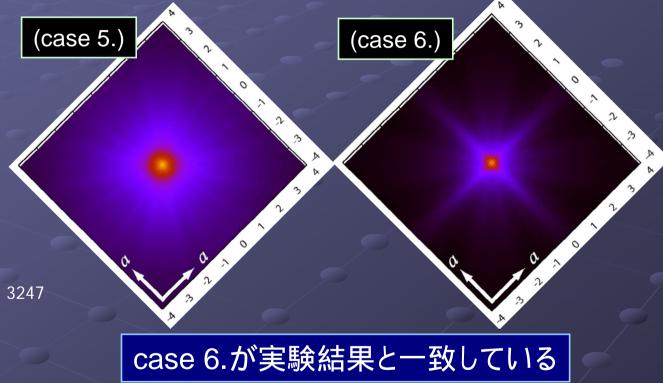
ゼロバイアスの実験結果との比較を行う

STM実験結果(ゼロバイアス)



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

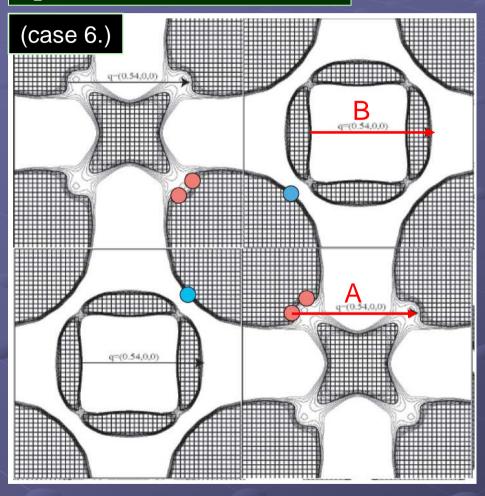
十字形の伸びる方向に着目



実験結果をもっともよく再現するのは、case 6.のギャップ構造である

推定されたギャップ構造

k_z=0でのフェルミ面の断面図

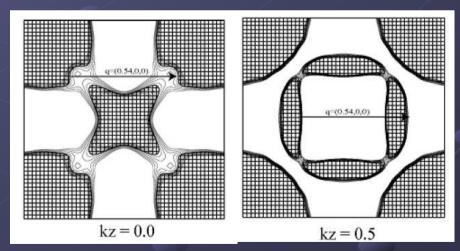


フェルミ面の特徴

ネスティングの存在: 大き〈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 _{MAX}/2程度)



青丸の極小値はkz=0における赤丸の真上(運動量空間)である

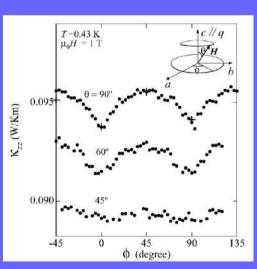
比熱・熱伝導率の実験との比較

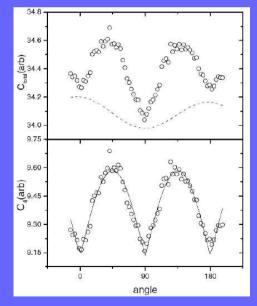
Doppler Shift Method (Superclean Limit)

$$\nu(\varepsilon = 0) = \langle \text{Re} \, \frac{|\boldsymbol{v}_{\mathbf{F}} \cdot \boldsymbol{v}_{\mathbf{s}}|}{\sqrt{(|\boldsymbol{v}_{\mathbf{F}} \cdot \boldsymbol{v}_{\mathbf{s}}|)^2 - |\Delta|^2}} \rangle$$

v_s: supercurrent velocity

実験結果

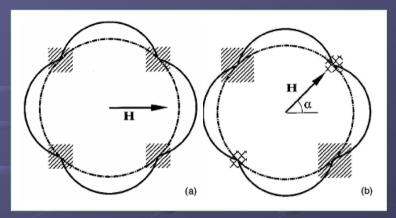




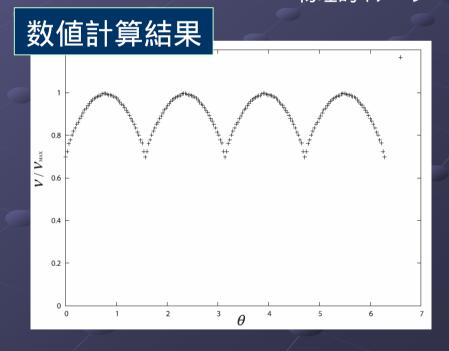
熱伝導率[1]

比熱[2]

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



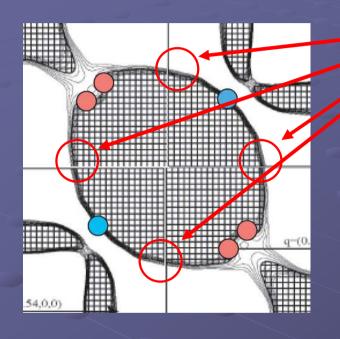
物理的イメージ



実験結果とコンシステント

ギャップ構造とLDOSの解釈

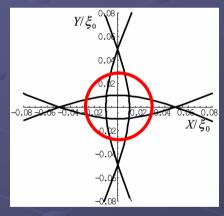
第二章の結論: STM(LDOS)はアンチノード情報を拾うプローブである



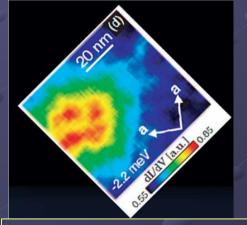
ギャップ極大値の場所

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

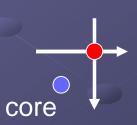


d波のLDOS



ピークは発散線が重なった点に相当

四回回転対称性+四つのピーク



ピークの位置ではフェルミ速度の向きが 0[rad]と /2[rad]である準粒子の寄与が大

ポイントノードの位置のまとめ

STM実験結果: フェルミ速度の方向が0[rad]と /2[rad]の準粒子のギャップは大(図1)

比熱·熱伝導率実験:フェルミ速度の方向がn /2(n = 0,1,2,3)[rad]でギャップが0(図2)



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

計算結果も実験結果とコンシステント(図1、図3)

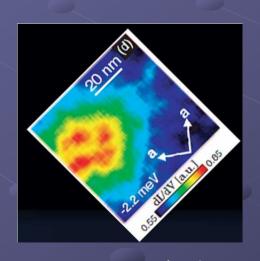


図1:STM実験

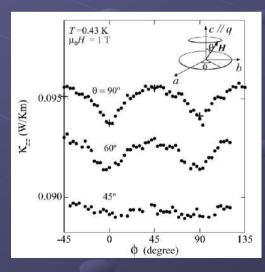


図2:熱伝導率実験

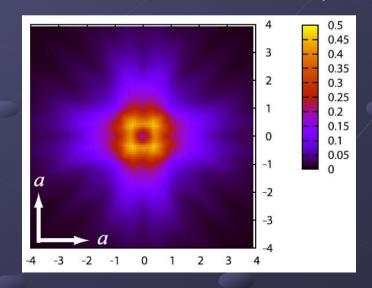
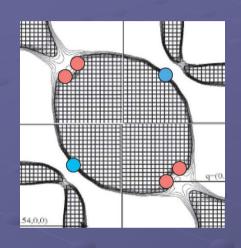


図3:計算結果

まとめと今後の課題

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



- 1、ポイントノードはフェルミ面のネスティングの位置に存在している
- 2、ネスティング以外の場所にギャップ極小値が存在する
- 3、Doppler Shift Methodを用いたバンド構造を考慮した状態密度の磁場方向依存性を計算し、比熱・熱伝導率実験結果と矛盾しなかった

今後の課題

- 1、Doppler Shift Methodの妥当性を検証: 状態密度の磁場方向依存性はノード由来か否か
- 2、ノードの有無を判定する実験手段の提案:STM(LDOS)ではノード情報はわからない
- 3、ネスティングBの位置にノードがないのは何故か:ネスティングの強さが異なる?
- 4、ギャップノード(or極小値)の生成メカニズムの検証: 反強磁性ゆらぎで説明できるか

STM/STSは強力なツールである。今後の技術的発展を期待する