

Heavy fermion superconductors の T_c への不純物効果

名大理 寺中久男

1. はじめに

CeCu₂Si₂等の化合物では非常に大きな有効質量を持つ準粒子が形成されており、これらの準粒子が低温での特異な物性に関係していることが明らかになってきた。特に、0.5K近くの転移温度 T_c を持つ超伝導状態は興味ある現象である。この超伝導状態は通常のものとは比べて種々の点で特異な振舞いを示しているが、これも上記の大きな有効質量を持つ準粒子の性質に関係していると思われる。準粒子のバンド幅は約10Kに対して T_c は0.5K程度であるので、これは、ある意味で「高温超伝導」とみなすことができる。以下では、このような超伝導体に非磁性不純物がどのような影響を与えるかを、一つのモデルに基づいて調べてみることにする。まず、2では、heavy fermion の Green 関数を導き、3では Cooper 対形成に寄与する有効相互作用について述べ、4で転移温度の評価をし、5で結果についての簡単なまとめをする。

2. heavy fermion の Green 関数

磁性イオンが各格子点に周期的に並んでいる系を考え、周期的 Anderson 模型に基づいて一粒子的な Green 関数を求める。簡単のために、各格子点に並んでいる局在電子 (f 電子とよぶ) の軌道縮退を無視し、一つの格子点に2つの電子が占有されているときのエネルギーと1つの電子が占有されているときのエネルギーがフルミ準位に対して対称である場合を考える。局在電子間にはよく間接交換相互作用 (RKKY) がそれ程大きくなく、各格子点に、磁性不純物の場合と類似の、Kondo 状態が形成されていると考える。¹⁾

この状態に関連してフルミ準位近傍に現われる f 電子の Green 関数に単一格子点に関する self-energy $-i\varepsilon_n(\tilde{\chi}-1)$ と、局在 f 電子と伝導電子との間によく hybridization の効果を全て取り入れると次のような Green 関数が得られる:

$$\mathcal{G}(k)^{-1} = i\varepsilon_n \tilde{\chi} - V^2 \mathcal{G}_c(k). \quad (1)$$

ここで、 V は hybridization constant, $\tilde{\chi}^{-1}$ は Green 関数の renormalization factor であり、 $\mathcal{G}_c(k)$ は波数ベクトル k , 振動数 ε_n を持つ広いバンド幅の伝導電子の Green 関数である。

Green 関数(1)に、各格子点に形成された束縛状態の間の重なり効果を全て取り入れて、self-energy の補正を行なう。換言すると、独立な Kondo 状態間の coherence を考慮することである。その結果、近似的であるが、^{*)}

$$\mathcal{G}(k)^{-1} = \tilde{\chi} [i\varepsilon_n - \varepsilon_k - (V^2/\tilde{\chi}) \mathcal{G}_c(k)] \quad (2)$$

が得られる。²⁾ ここで、 ε_k は self-energy の補正によって現われた波数 k に依存する項である。これは、フルミ準位近傍にあった virtual bound states が k で表示される状態に移ったこと

*) 実際上、この式を導くときは、伝導電子の状態をフルミ準位的に扱い、フルミ準位近傍の状態が重要であると仮定する。

しかし、以下では、この式が結晶のバンド状態に対しても成立すると仮定する。

とを表わしている。その幅は Kondo 温度 T_K 程度である。

以下では、

$$\tilde{\mathcal{G}}(k) \equiv \tilde{\chi} \mathcal{G}(k) \quad (3)$$

を定義し、 $\tilde{\chi}$ は相互作用の係数にくり込むことにする。 $\mathcal{G}_c(k)$ として、

$$\mathcal{G}_c(k)^{-1} = i\varepsilon_m - \xi_k + i \operatorname{sgn} \varepsilon_m (2\tau)^{-1} \quad (4)$$

を考える。 ξ_k は Γ 準位から測ったバンド・エネルギーである。これはこのバンド状態の電子の寿命を表わす。 \mathcal{G}_c を通して現われる寿命のほか、直接 (2) 式の self-energy の imaginary part として現われる狭いバンドの寿命も存在するが、この項の寄与は τ の寄与と比べて小さいことが予想できるので無視しておく。

(i) $\tau \rightarrow \infty$ の場合

この場合には、(3) 式は次のように書くことができる：

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}(k) &= \sum_{\sigma=\pm} \frac{A_{\sigma}(k)}{i\varepsilon_m - E_{\sigma}(k)} \\ E_{\sigma}(k) &= \frac{1}{2} \left[\varepsilon_k + \xi_k + \sigma \sqrt{(\varepsilon_k - \xi_k)^2 + 4\varepsilon_0^2} \right] \\ A_{\sigma}(k) &= \sigma \frac{E_{\sigma} - \xi_k}{E_{+} - E_{-}} = \frac{1}{2} \left[1 + \sigma \frac{\varepsilon_k - \xi_k}{\sqrt{(\varepsilon_k - \xi_k)^2 + 4\varepsilon_0^2}} \right], \quad \varepsilon_0^2 = \frac{V^2}{\tilde{\chi}} \end{aligned} \quad (5)$$

$E_{\sigma}(k)$ 及び $A_{\sigma}(k)$ の定性的な振舞いは図 1 のようになる。

(ii) $\tau = \text{finite}$ の場合

(2), (4) 式を使って (3) 式を

$$\tilde{\mathcal{G}}(k) = \frac{i\varepsilon_m - \xi_k + i \operatorname{sgn} \varepsilon_m (2\tau)^{-1}}{(i\varepsilon_m - E_{+}(k))(i\varepsilon_m - E_{-}(k)) + i(i\varepsilon_m - \varepsilon_k) \operatorname{sgn} \varepsilon_m (2\tau)^{-1}} \quad (6)$$

と書きかえることができるが、これを次のようにかいて、

$$\tilde{\mathcal{G}}(k) = \sum_{\sigma=\pm} \frac{A_{\sigma}(k)}{i\varepsilon_m - E_{\sigma}(k) + i\delta_{\sigma}(i\varepsilon_m, k)} \quad (6')$$

δ_{σ} を近似的に求めると、

$$\delta_{\sigma}(i\varepsilon_m, k) = \frac{i\varepsilon_m - \varepsilon_k}{i\varepsilon_m - E_{-\sigma}(k)} \frac{\operatorname{sgn} \varepsilon_m}{4\tau} \quad (7)$$

となる。実際に重要になるエネルギー領域は、 δ_{σ} に対しては E_{σ} 近傍であるので $i\varepsilon_m$ の代りに $E_{\sigma}(k)$ を代入して、有効寿命を定義する：

$$\delta_{\sigma} \equiv \frac{E_{\sigma} - \varepsilon_k}{E_{\sigma} - E_{-\sigma}} \frac{\operatorname{sgn} \varepsilon_m}{4\tau} = \frac{\operatorname{sgn} \varepsilon_m}{4\tau} A_{-\sigma}(k) \equiv \frac{\operatorname{sgn} \varepsilon_m}{2\tau_{\sigma}(k)} \quad (8)$$

この結果は、低エネルギー領域 ($A_{\sigma} \approx 1$) では、有効寿命 τ に比べて長くなることを示

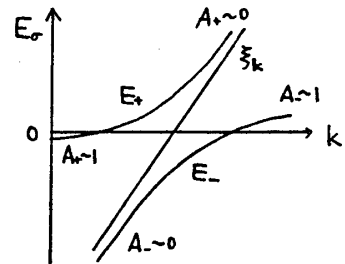


図 1.

している。定性的には、低エネルギー領域では、(5)又は(6)で記述される準粒子の有効質量
 或は元のバンド質量 m に比べて非常に大きくなり、動きがゆっくりとなり衝突時間が \hbar/m
 に比例して長くなることの結果であるとみる事ができる。

3. Cooper対形成に關する有効相互作用

Cooper対の形成に寄与する相互作用として、一般的には、種々のものが考えられ、特に
 triplet (odd parity) の対に対しては、spin-fluctuationsの効果及び dipole-dipole 相互作用も無視で
 きない。しかし、ここでは、対形成の非磁性不純物効果に注目し、heavy fermion-phonon相互
 作用のみを考えることにする。phononが介在する機構として次のものが考えられる：格子
 の局所的な歪みによる①準粒子の準位の変動 ② effective transfer integral の変化。これらの
 効果を tight-binding 近似で取り扱えば、heavy fermion 間の有効相互作用として次のものが得
 られる：³⁾

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{int} = & -g_0 \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - g_1 \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} c_{j\sigma'}^{\dagger} c_{i\sigma'} \\ & - g_2 \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} - g_3 \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} n_{i\sigma} (c_{i-\sigma}^{\dagger} c_{j-\sigma} + c_{j-\sigma}^{\dagger} c_{i-\sigma}), \end{aligned} \quad (9)$$

ここで、 $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$ 、係数 $g_i > 0$ 。 g_0 と g_2 の項は準位の変動に關するものであり、 g_1 の項
 は transfer integral の変化に伴う項である。 g_3 の項は、それらの cross term である。

この \mathcal{H}_{int} に準粒子の運動エネルギーと同一格子点ごとの斥力の項を加えた有効ハミルト
 ニアンを使って、Cooper対形成の議論を行なう。2で述べたように、相互作用の係数は全
 て $\tilde{\chi}^2$ で割られている。

4. 超伝導転移温度

(I) pure system ($\tau \rightarrow \infty$)

転移温度を決める gap eq. ($T = T_c$) は、

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}' \in \mathcal{E}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{k}) \tilde{\mathcal{G}}(-\mathbf{k}) \Delta_{\mathbf{k}'} \quad (10)$$

と書かれる。ここで、 $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ は3で求めた相互作用を \mathbf{k} -表示したものである。 $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ の陽な
 表式は、単純立方格子(格子定数 a) を仮定すると次のように書く事ができる：³⁾

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \equiv V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^S + V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{d\gamma} + V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^P, \quad (11)$$

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^S = U - 2g_3 (\gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}'}) - \frac{1}{3} g_3 \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}'}$$

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{d\gamma} = -\frac{1}{3} g_3 (\eta_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}'} + \zeta_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}'}), \quad V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^P = -2g_t \sum_{d=x,y,z} \sin k_d a \sin k'_d a. \quad (12)$$

ここで、 $\gamma_{\mathbf{k}} = 2 \sum_{d=x,y,z} \cos k_d a$, $\eta_{\mathbf{k}} = \sqrt{6} (\cos k_x a - \cos k_y a)$, $\zeta_{\mathbf{k}} = \sqrt{2} (\cos k_x a + \cos k_y a - 2 \cos k_z a)$,

$$U = \tilde{\Gamma}_N - g_0 \quad (\tilde{\Gamma}_N: \text{on site repulsion}), \quad g_s = g_1 + g_2 \quad \& \quad g_t = -g_1 + g_2. \quad (13)$$

(11) 式の S, P, dy は, それぞれ対応する対称性を持つ $V_{k,k'}$ の成分を表わす.

(i) 一重項 Cooper 対

order (gap) parameter Δ_k は, 一般的には,

$$\Delta_k = \Delta_1 + \Delta_1 \gamma_k + \Delta_1 \eta_k + \Delta_1 \zeta_k \quad (14)$$

の形を持つが, 対称性を考慮すると, (10) 式は S 対称を持つ $\Delta_1 + \Delta_1 \gamma_k$ と dy 対称の $\Delta_1 \eta_k$ と $\Delta_1 \zeta_k$ の部分にそれぞれ分離する.

" S-wave " 転移温度は次式

$$\Delta_1 + \Delta_1 \gamma_k = -\frac{T}{N} \sum_{k', \epsilon'} V_{k,k'}^s \tilde{\mathcal{G}}(k) \tilde{\mathcal{G}}(-k) (\Delta_1 + \Delta_1 \gamma_{k'}) \quad (15)$$

から得られる Δ_1 と $\Delta_1 \gamma_k$ についての連立方程式によって決められる.

$$F(k, T) \equiv T \sum_{\epsilon_n} \tilde{\mathcal{G}}(k) \tilde{\mathcal{G}}(-k) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{A_{\sigma}(k) A_{\sigma'}(k)}{E_{\sigma}(k) + E_{\sigma'}(k)} \left\{ \text{th} \frac{E_{\sigma}}{2T} + \text{th} \frac{E_{\sigma'}}{2T} \right\}, \quad (16)$$

$$\Phi_n(T) = \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k^n F(k, T) \quad (n=0, 1, 2) \quad (17)$$

として,
$$\frac{1}{g_s} = \frac{1}{3} \frac{\Phi_2 - U[\Phi_1^2 - \Phi_0 \Phi_2]}{1 + U\Phi_0 - 4g_3 \Phi_1 + 4g_3^2 [\Phi_1^2 - \Phi_0 \Phi_2]} \quad (18)$$

" d-wave "

$$\frac{1}{g_s} = \frac{1}{3} \frac{1}{N} \sum_k \eta_k^2 F(k, T) \quad (\eta_k \equiv \zeta_k). \quad (19)$$

(ii) 三重項 Cooper 対 " P-wave "

$$\Delta_k = \sum_{\alpha=x,y,z} \Delta_{p\alpha} \sin k_{\alpha} a \quad (20)$$

から,
$$\frac{1}{g_t} = \frac{4}{N} \sum_k \sin^2 k_{\alpha} a F(k, T) \quad (\alpha=x, y, z). \quad (21)$$

(18), (19) と (21) 式から得られた結果を図 2 に示す.

(II) $T = \text{finite}$ の場合
不純物散乱が存在する場合には, 一般には, Green 関数の self-energy の補正と vertex の補正が必要である. 一般的に impurity potential に対しては gap eq. の取り扱いはむずかしいが, impurity potential $U(k, k')$ が $k \ll k'$ の

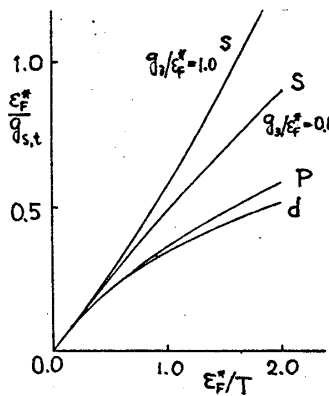


図 2.

half-filled s.c. tight-binding band

$$\xi_k = -\epsilon_F \gamma_k / 6, \quad \epsilon_k = -\epsilon_F^* \gamma_k / 6.$$

$$\epsilon_0 / \epsilon_F^* = 30, \quad \epsilon_F / \epsilon_F^* = 2000,$$

$$U / \epsilon_F^* = 10\pi.$$

分離形になる場合には、 Δ_k は pure system の場合と同様に各対称性ごとに分離する。更に、 d 及び P -wave pairs については、Vertex の補正は消えて、self-energy の補正だけでよい。S-wave pair では Vertex の補正は部分的に残る。相互作用が等方的でないために Abrikosov-Gor'kov 理論のように Self-energy の補正と Vertex の補正が互いに打ち消し合うようなことはおこらない。AG 理論の類推から、Vertex の補正を行なうと不純物の効果は減少するが、以下では、Vertex の補正を無視して不純物効果の最も大きい場合を調べる。

計算は pure system の場合とほぼ同じであるが、(16)式の代りに次式が現われる。

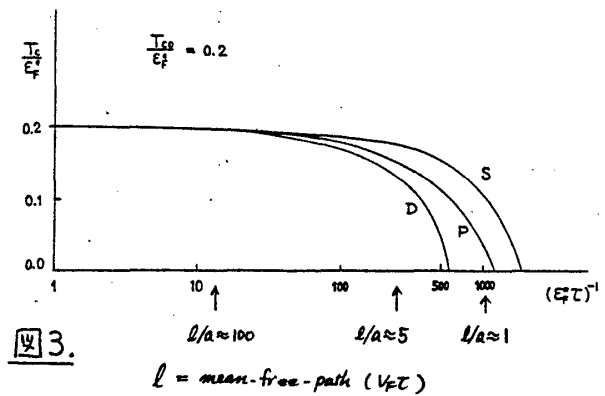
$$T \sum_{\mathbf{k}} \tilde{G}(\mathbf{k}) \tilde{G}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma\sigma'} A_{\sigma} A_{\sigma'} \int_0^{\infty} dx \operatorname{th} \frac{x}{2T} \left\{ \frac{E_{\sigma} + E_{\sigma'}}{(E_{\sigma} + E_{\sigma'})^2 + (\frac{1}{2\tau_{\sigma}} - \frac{1}{2\tau_{\sigma'}})^2} \left[\frac{\frac{1}{2\tau_{\sigma}}}{(x - E_{\sigma})^2 + (\frac{1}{2\tau_{\sigma}})^2} + \frac{\frac{1}{2\tau_{\sigma'}}}{(x - E_{\sigma'})^2 + (\frac{1}{2\tau_{\sigma'}})^2} \right] - \frac{\frac{1}{2\tau_{\sigma}} - \frac{1}{2\tau_{\sigma'}}}{(E_{\sigma} + E_{\sigma'})^2 + (\frac{1}{2\tau_{\sigma}} - \frac{1}{2\tau_{\sigma'}})^2} \left[\frac{x - E_{\sigma}}{(x - E_{\sigma})^2 + (\frac{1}{2\tau_{\sigma}})^2} - \frac{x - E_{\sigma'}}{(x - E_{\sigma'})^2 + (\frac{1}{2\tau_{\sigma'}})^2} \right] \right\}. \quad (22)$$

第2項は $\sigma \neq \sigma'$ のときのみ考慮するが、 $A_{\sigma} A_{\sigma'}$ の係数のため、 $\sigma = \sigma'$ の項に比べて考慮は小さい。第1項の $\sigma = \sigma'$ 項も同様である。第2項を無視し、 $\operatorname{th} x/2T$ を近似形で代用して計算すると、(18)、(19) 及び (21) 式に対応する式が得られる。結果の一部を図示すると図3のようになる。 T_{c0} は pure system の転移温度である。

5. まとめ

S, P, d の対称性を持つ Cooper 対の形成に及ぼす不純物散乱の効果は非常に小さいという結果を得た。これは、(8)式で得た有効寿命の反映である。Vertex の補正を考慮すると、s-wave pair に対する不純物効果はより減少すると予想できる。

結晶構造として、単純立方格子を考えたが、他の構造に対しても定性的な変化はないと思われる。



以上の報告は、松浦民房、三宅和正、黒田義浩及び長岡洋介の各氏との討論にもとづいている。

References

- 1) Yamada, Yosida and Hanzawa, Prog. Theor. Phys. 71 (1984), 450.
- 2) Jichu, Matsuura and Kuroda, Prog. Theor. Phys. 72 (1984), 366.
- 3) Miyake, Matsuura, Jichu and Nagaoka, Prog. Theor. Phys. 72 (1984), No. 6.