

A15 型化合物と Heavy Fermions

名大 理 松浦民房

A15 型化合物、ならびに、高い T_c , H_{c2} をもつ超伝導体 (ニオブニッケル、ロジウムボライド化合物など) は、物性に様々な異常をもつことが知られている。こゝではこれらの物質を Ce, U 化合物で議論されている Heavy Fermion System (HFS) と関連づけ、物性の異常も HFS に共通な性質として理解しようという観点を御紹介したい。¹⁾

まず、どうしてこれらの物質は HFS として捉えられるのかを検討したい。

- (1) γ (比熱の T -1 次係数), $\chi(T)$, T_1/T などには強い温度依存性をもつ。²⁾ すなわち $T \lesssim 10^2 K$ に異常な増大が見られる。これらの事実はフェルミ面近傍に状態密度のピークが存在することを示唆する。実際に従来理論はこのピークを擬一次元モデルに基づいて導出したり、或いはバンド計算で導出してきた。
- (2) しかし、物性の異常は化合物の組成比を変えても依然として存在し、ピークはフェルミ面近傍に存在し続けるように見える。一元的起源のピークは組成比の変化とともに容易にフェルミ準位からはずれてしまうことを考慮すると、状態密度のこのピークは多体的起源のものと考えざるをえない。
- (3) 超伝導もこのピーク、すなわち重い有効質量をもった電子の状態密度、の寄与が大きいのと思われる。このことは $[C_s/C_n]_{T_c} = 3.3$ (Nb_3Ge^{3+}), 3.28 ($Mo_6Se_8^{4+}$), $Hc_2 \sim 10 T$ など重い超伝導電子質量を必要とする実験事実より結論できる。
- (4) このことから、この狭いピークの幅、或は重い電子質量の狭いバンド幅を推定しよう。 $Hc_2(T=0) \sim \phi/2\pi\xi_0^2$, $\phi = hc/2e$, $\xi_0 = \hbar v_F/\Delta \sim \hbar k_F^{-1} \xi_F^*/T_c$ から $Hc_2(0) \sim 30 T_c \sim 10 K$ という典型的な値を入れると $\xi_0 \sim 30 \text{ \AA}$, バンド幅 $\xi_F^* \sim 10^2 K$ となる。
- (5) さらに重い質量をもった粒子 (HF) が超伝導を担っていると考えると、その on-site interaction は repulsive で inter-site interaction が attractive になっている HFS で提案された異方的超伝導体にならざるをえない。これは $C_s \sim T^3$ の実験事実と consistent である。

それでは、Ce, U 系で HF の存在に果たしたスピンの役割は、この系では何によって担われているのであろうか。A15 型などで局所スピンは存在しないので、イオンの自由度に帰着させざるをえない。これについて、重要な提案が Yu-Anderson によって行われた。⁵⁾

Yu-Anderson は高温における電気抵抗値が大きいことから電子-格子相互作用 V_{elph} が大きいと推定する。そしてこの V_{elph} を通して電子はイオンをスクリーンし各イオンの運動を局所フォノンとすると共にポテンシャルを double-well にすると考えた。

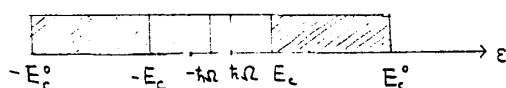
ゆえゆえは Yu-Anderson の局所フォノンモデルをとるが Yu-Anderson とは異なり、

- (1) イオンの振動より速く動く電子のみを消去し、全部は消去しない。
- (2) Q (イオンの変位) の一次項だけでなく、高次項も考慮する。

ハミルトニアンとして次のものとする。

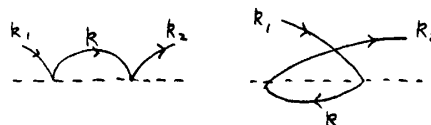
$$H_{el-ph} = \int dr [V(r-Q\hat{z}) - V(r)] \psi^\dagger(r) \psi(r) \\ = \frac{1}{N} \sum_{k,k'} V(k-k') \{ \exp[-i(k_z - k'_z)Q] - 1 \} c_k^\dagger c_{k'} \quad (1)$$

ここで"はまず"スピンレス粒子を考える。Poor-man's スケ-リング⁶⁾により粒子エネルギーがイオン振動エネルギーより大きい部分を消去する。



斜線の部分を消去する。

$$E_c \gg \hbar\Omega$$



$$|\varepsilon_{k_1}|, |\varepsilon_{k_2}| < E_c$$

$$E_c < |\varepsilon_k| < E_c^0$$

近藤問題の場合と異なり、 Q は可換であり、また $|\varepsilon_k| > E_c \gg \hbar\Omega$ を考慮に入れるとエネルギーの繰り込みのみが生じる。これをイオンに対するポテンシャルに繰り込む。

$$\Delta V = \int_{E_c}^{E_c^0} dE \frac{1}{N} \sum_{k_1} \frac{|\varepsilon_{k_1}| < E_c}{\omega - E - |\varepsilon_{k_1}|} 4 \langle V^2(k-k_1) \sin^2(k_2-k_{1,2})Q/2 \rangle, \quad (2)$$

$$V(Q) \equiv \frac{M\Omega^2}{2} Q^2 + \Delta V(Q). \quad (3)$$

イオンに対する繰り込まれたポテンシャル $V(Q)$ が $Q=0$ の囲りで負の曲率をもつ条件は、

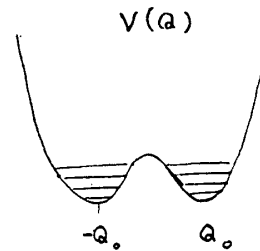
$$\frac{1}{2} M \Omega^2 + \frac{2}{3} \ln 2 \cdot [k_F \rho v_0]^2 (E_c - E_c^0) < 0, \quad (4)$$

となる。 $v_0 \sim v(k_F) \sim \varepsilon_F$ 。

ここで次の仮定をし話を簡単にする。

(1) double-well は十分に深い

$$|V(\pm Q_0)| \gg \hbar \Omega$$



(2) $\pm Q_0$ の周りのポテンシャルの曲率を $M\Omega'^2$ ($Q' \sim \Omega$) とおく。

(3) イオンの振動状態を最低エネルギーの波動関数のみで記述する。

$$\Phi(Q) = \sum_{\alpha=\pm} b_{\alpha} \left(\frac{M\Omega'}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left[-M\Omega' (Q - \alpha Q_0)^2 / 2\hbar \right] \quad (5)$$

b_{α}, b_{α}^+ は Fermion operator と考へる。

これらの仮定をする=とにより消去した電子 (エネルギーの絶対値が E_c より小さいもの) と double-well 中を動くイオンの相互作用ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned} H_{el-ph} &= \langle \Phi | H_{el-ph} | \Phi \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'}^{|\mathbf{k}| < E_c, |\mathbf{k}'| < E_c} V(\mathbf{k}-\mathbf{k}') b_{\alpha}^+ \left[-i(\mathbf{k}_z - \mathbf{k}'_z) Q_0 \hat{\alpha}_z \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar}{M\Omega'} Q_0^2 \exp \left(-M\Omega' Q_0^2 / \hbar \right) \left(-i(\mathbf{k}_z - \mathbf{k}'_z) Q_0 / 2 \right)^2 \hat{\alpha}_x \right] b_{\alpha} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \quad (6) \end{aligned}$$

となる。ここで $\hat{\alpha}_z, \hat{\alpha}_x$ は $\alpha = \pm$ に対するパウリ行列でそれぞれ散乱に伴う、対角、非対角項を与える。

(6) で記述されるハミルトニアンをもつ系は準位として知られ、その多体効果は Kondo⁷⁾ により調べられ、以後何人にもよって研究されてきた。とりわけ、Vladar-Zawadowski⁸⁾ は (6) を詳細に調べ、低温になるに従って電子、準スピンの結合定数は増大し、また x, y, z 成分が等しい等方的準スピン $1/2$ と電子とからなる系に帰着する=とを示した。

従ってこの結果を使えば、われわれは低温の物性を議論するべき。準スピン $1/2$ の $s-d$ モデル或はアンダーソンモデルを用いて系を取り扱えばよいことになる。1個の不純物系の低温の性質は、山田、岡田、吉森等⁹⁾ により十分調べられている。

周期的アンダーソンモデルの低温での状態として HF の出現も多くの著者により研究されており、その超伝導も研究されてきた。しかし、ここでは、A15 型化合物など強い、電子-格子相互作用をもった系のハミルトニアンが周期的アンダーソンハミルトニアン、或いは $s-d$ ハミルトニアンで記述され、HF の出現の可能性があり、実験事実とは HF の存在と整合していることを示したことで話を終えた。

最後に黒田義浩、長岡洋介氏をはじめとする研究室の諸氏、福山秀敏氏との議論に感謝する。

References

- (1) T. Matsuura, K. Miyake : preprint
 " : J. Phys. Soc. Jpn 55 (1986) NO.1
- (2) M. Weger and I. B. Goldberg : Solid State Physics, ed. H. Ehrenreich, F. Seitz and D. Turnbull (Academic Press, New York and London, 1973) Vol. 28, p1.
 S. V. Vonosovsky, Yu. A. Izumov and E. Z. Kurmaev : Superconductivity of Transition metals (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1982) p. 259.
 L.R. Testardi : Rev. Mod. Phys. 47 (1975) 637.
- (3) G. R. Stewart, L. R. Newkirk and F. A. Valencia : Solid State Commun. 26 (1976) 417
- (4) N. Kobayashi, S. Higuchi and Y. Muto : Proc. 4th Conf. on Superconductivity in d- and f-Band Metals (Karlsruhe 1982) p. 173.
- (5) C. C. Yu and P. W. Anderson : Phys. Rev. B 29 (1984) 6165.
- (6) P. W. Anderson : J. Phys. C 3 (1970) 2436
- (7) J. Kondo : Physics (N.Y.) 84B (1976) 40 ; *ibid.* 207
- (8) K. Vlader and A. Zawadowski : Phys. Rev. B 28 (1983) 1564 ; *ibid.* 1582
- (9) K. Yamada : Prog. Theor. Phys. 53 (1975) 970
 K. Yosida and K. Yamada : *ibid.* 1286
 A. Yoshimori : Prog. Theor. Phys. 55 (1976) 67.