

# 論文内容の要旨

## Anisotropic superconducting gaps in $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ : A first-principles investigation ( $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ における 異方的超伝導ギャップの第一原理的研究)

氏名 河村 光晶

### 1 背景と目的

$\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  はフォノン媒介型超伝導体であるにもかかわらず異方的な超伝導ギャップを生じるという風変わりな特性を持つ。また、ホウ素原子の同位体効果が観測されていることから、軽元素由来のフォノンによって誘起される超伝導体としても興味深い。この物質に対する実験結果、特に異方的超伝導ギャップに関連するものとしては次のような報告がある。

1. トンネル伝導度測定では超伝導ギャップに由来するピークがなまされて広がっている。これは異方的な超伝導ギャップの兆候である。
2. 磁場中の熱伝導度測定では、 $[100]$  方向からの磁場をかけた場合に熱伝導度の上昇がみられる。このとき Doppler シフトによって小さな超伝導ギャップが潰れていると考えられている。
3. 超音波減衰率の測定においては、 $[100]$  方向に伝播する超音波のみ、低温でも大きな減衰が起こる。これは、この超音波の進行方向に対応する Fermi 面の赤道部分での超伝導ギャップが小さいために、容易に準粒子が励起され吸収が起こるためであると考えられる。

本研究の目的は、このような異方的超伝導の起源を理論的に調べることである。この目的の為に、本来 Eliashberg 理論に基づくシミュレーションを行い、相互作用系の異常 Green 関数から超伝導ギャップを計算しなければならない。しかし、その計算の為に現状では実行不可能なほど大きな計算コストが必要となる。私はその代わりに超伝導密度汎関数理論 (density functional theory for superconductors, SCDFT) で現れる Kohn-Sham 超伝導ギャップを用いて半定量的な議論を行った。このギャップ関数は転移温度を得る際に付加的に得られるもので、現実の超伝導ギャップと一致する事は保証されていないが、それらには深い関係があることが知られている。

また、ギャップ関数の波数依存性を詳しく調べるためにはフォノンおよび電子-フォノン結合の高精度な計算を行う必要があるが、この計算に現れる  $k$  空間積分を数値的に評価する上で従来は多くの積分点を用いる必要があり、従って計算コストの問題から精度良く値を求めることができなかった。そこで我々はこの  $k$  空間積分を効率よく行うアルゴリズム「最適化テトラヘドロン法」を開発し、 $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のフォノン等の計算に適用した。

## 2 超伝導密度汎関数理論

超伝導密度汎関数理論 (SCDFT) は密度汎関数理論 (DFT) の超伝導状態への拡張である。ここでは、電荷密度に加えて異常電荷密度を変数としたグラントポテンシャル汎関数を定義し、その汎関数を最小化することによって超伝導秩序変数を得る。実際にはこの計算は正常状態での通常の DFT 計算およびフォノン計算の後処理として次のギャップ方程式を解くことに帰着される。

$$\Delta_{nk} = -\frac{1}{2} \sum_{n'k'} K_{nkn'k'} \tanh \left( \frac{\sqrt{\xi_{n'k'}^2 + \Delta_{n'k'}^2}}{2k_B T} \right) \frac{\Delta_{n'k'}}{\sqrt{\xi_{n'k'}^2 + \Delta_{n'k'}^2}} \quad (1)$$

ここで、 $\xi_{nk}$  はバンド  $n$ 、波数  $k$  の Kohn-Sham 軌道の、Fermi 準位から測った Kohn-Sham エネルギーである。また、 $K_{nkn'k'}$  は電子-フォノン相互作用、電子間 Coulomb 相互作用の効果を含んだ積分核であり、GGA-PBE 汎関数を用いて行われた電子状態計算、フォノン計算の結果を使用して第一原理から計算できる。我々は各温度でこのギャップ方程式を解き、全ての  $\Delta_{nk}$  が消失する温度を探ることにより超伝導転移温度を求めた。また  $\Delta_{nk}$  の波数依存性を詳しく解析した。

## 3 最適化テトラヘドロン法

Kohn-Sham 軌道/エネルギーからフォノンや応答関数の第一原理計算を行う為には、次のような積分を数値的に評価する必要がある。

$$\int d^3k \frac{\theta(-\xi_{nk}) - \theta(-\xi_{n'k+q})}{\xi_{n'k+q} - \xi_{nk}} X_{n'k+qnk} \quad (2)$$

従来の方法では、積分を離散的な格子点上の被積分関数の単純な和で置き換える。しかし、この積分は階段関数による非連続性や、被積分関数の分母が 0 になるところでの特異性をもっており、この方法では精度良く計算を行うことが出来ない。

この数値積分を行う方法として線形テトラヘドロン法がある。ここでは、まず積分範囲を四面体で分割し、各四面体内部で  $\xi_{nk}$  を線形補間する。そうすると各四面体内部で積分を解析的に行うことが出来るようになる。ただし、線形テトラヘドロン法の問題点として、線形補間による凸関数の系統的な過大評価が挙げられる。

我々は、線形補間の代わりに 3 次多項式による補間を行い、その補間多項式に対して最小 2 乗フィットを用いて 1 次関数をフィットし、それを用いて四面体内部での解析的積分を行う手法「最適化テトラヘドロン法」[1] を開発した。この手法を用いることで、線形テトラヘドロン法や、従来用いられてきたブロードニング法よりも少ない計算コストで、より正確な積分を行うことが出来るようになる。

## 4 結果と考察

最適化テトラヘドロン法を用いて SCDFT における積分核  $K_{nkn'k'}$  を精度良く計算し、それを用いてギャップ方程式を数値的に解いた。転移温度 ( $T_c$ ) 及び  $T = 0.1$  K ( $T/T_c \approx 0.01$ ) における準粒子状態密度の計算結果を図 1, 2 に表す。計算で得られた転移温度は実験値よりも少し小さいが概ね良く一致している。また、計算で得られた準粒子状態密度はトンネルコンダクタンス測定に現れる広がったピーク構造を、ピークの幅や相対的な高さについて再現している。

これらの結果から、我々はこの物質の超伝導物性を比較的良くとらえられていると考え、さらなる解析に移る。

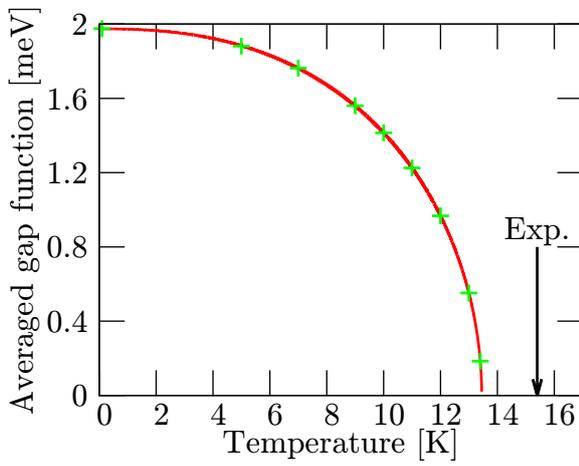


図 1: 転移温度の計算結果及び実験値. グラフ中の点は Fermi 面上で平均した, 各温度でのギャップ関数を表す. 曲線はそれらの点を  $\Delta(T) = \Delta_0 \{1 - (T/T_C)^p\}^{1/q}$  という関数で,  $\Delta_0, T_C, p, q$  についてフィットしたものである.

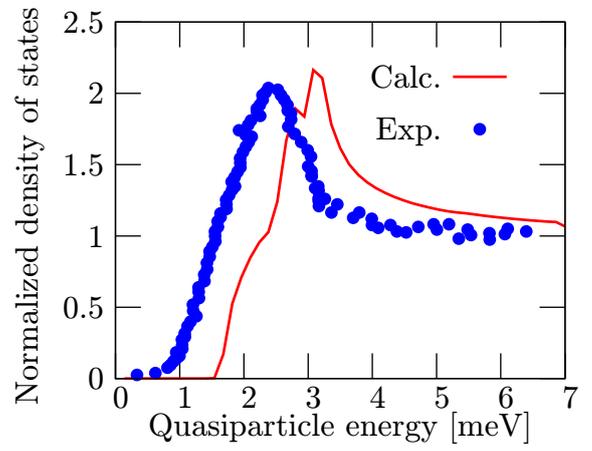


図 2: 実線は  $T = 0.1$  K における準粒子状態密度の計算結果, 点は実験で測定された  $T = 0.5$  K におけるトンネルコンダクタンススペクトル [2] をそれぞれ表す.

図 3 は計算で得られた 0.1 K におけるギャップ関数の Fermi 面上での値をカラープロットで表したものである. 実験から予想されてきたとおり, この物質は Fermi 面上で大きさが著しく変化する超伝導ギャップを持つ. 我々はこの超伝導ギャップの異方性の原因を探るべく, Fermi 面上の各軌道に対する  $Y4d, Ni3d, B2sp, C2sp$  軌道の寄与を調べた. その結果を図 4 に表す. 図 3 と 4 を見比べてみると, 超伝導ギャップの小さい軌道は主に  $Ni3d$  軌道から成る事が分かる. また, 電子-フォノン結合による電子質量繰り込みの効果を見ると (紙面の都合上主旨には図を掲載しない) これらの軌道では電子-フォノン結合が小さくなっていることが分かった.

## 5 まとめ

本研究では, 実験から著しいギャップの非等方性が示唆されてきた  $YNi_2B_2C$  の超伝導相の研究を第一原理計算により行った. 従来は  $k$  空間積分を行う上で困難があり, フォノン計算の精度に問題があったために, このギャップの非等方性を詳しく調べる事が出来なかった. 我々はフォノンや応答関数の計算に現れる  $k$  空間積分を効率よく行う手法開発を行い, それを用いて  $YNi_2B_2C$  のフォノン分散, 超伝導転移温度, 準粒子状態密度を精度良く計算した. 本研究における Fermi 面上のギャップ関数, および軌道成分の解析により, この物質の超伝導の異方性が主に  $Ni3d$  軌道の混ざり具合に起因することが分かった.

## 参考文献

- [1] M. Kawamura, Y. Gohda, S. Tsuneyuki, Phys. Rev. B **89**, 094515 (2014).
- [2] P. Martínez-Samper, H. Suderow, S. Vieira, J. Brison, N. Luchier, P. Lejay, P. Canfield, Phys. Rev. B **67**, 014526 (2003).

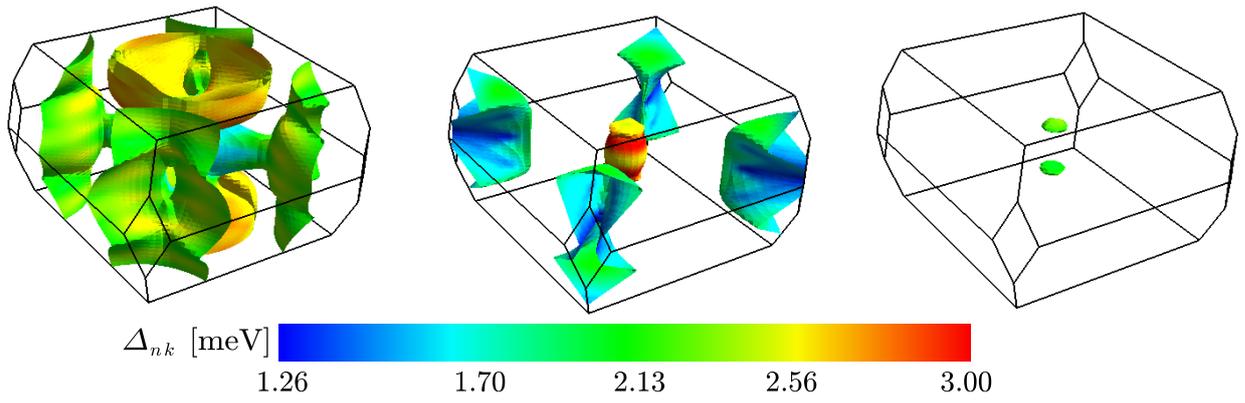


図 3: 0.1 K における, Fermi 面上の各軌道の超伝導ギャップ関数

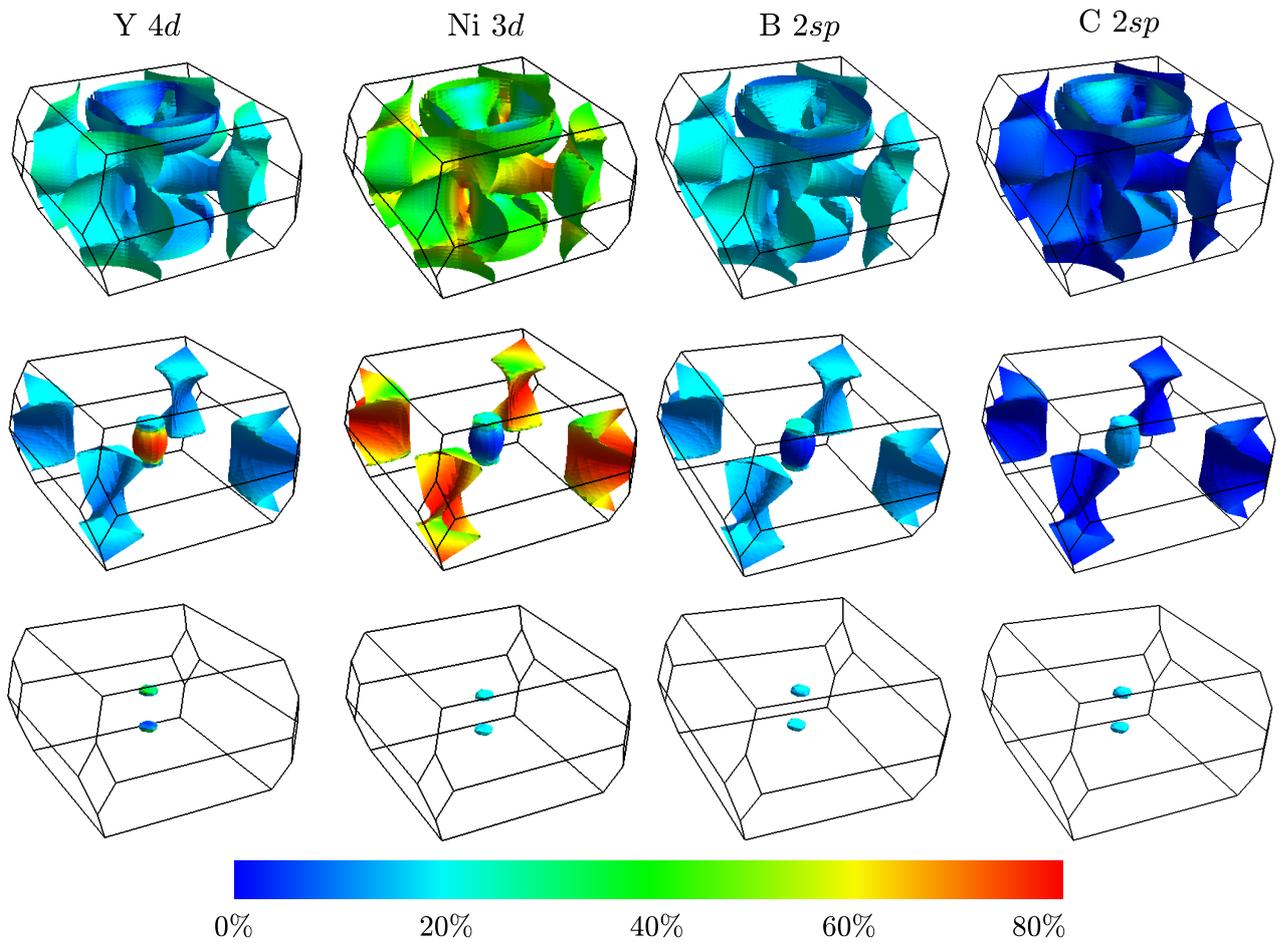


図 4: Fermi 面上の軌道における,  $Y4d$ ,  $Ni3d$ ,  $B2sp$ ,  $C2sp$  軌道成分の割合. 例えば  $Ni 3d$  軌道であれば  $\sum_{\tau=Ni_1, Ni_2} \sum_m |\langle \varphi_{\tau dm} | \varphi_{nk} \rangle|^2$