

Structure of Neutron-Scattering Peak in both s++-wave and s±-wave states of an Iron pnictide Superconductor

アブスト

私たちは、ランダム相近似を基にした五軌道モデルにおいて、符号反転を伴う完全ギャップのs波状態（s±）と符号反転を伴わない状態（s++）における鉄系ペクトサイドの中性子散乱スペクトルを研究しました。s++波状態では、強い電子間相互作用による準粒子減衰 γ を考慮することで、スペクトルギャップの直上に顕著なハンプ構造が現れることが分かりました。超伝導が発展するにつれて、 γ の減少はギャップ上のスペクトルに大きなオーバーシュートを引き起こします。得られたハンプ構造は、s±波状態における共鳴ピークに似ていますが、後者の状態のピークの高さと重さははるかに大きいです。本研究では、実験的に観察された鉄系ペクトサイドの広いスペクトルピークは、s++波状態を仮定することで自然に再現されました。

問題意識と研究目的

- 鉄系超伝導体の超伝導ギャップはs++なのか、s±なのか。
- SCギャップの符号反転状態を明らかにするうえで、中性子散乱測定が重要。特にネスティングベクトル \mathbf{Q} での共鳴ピークの存在は、符号反転を伴う反強磁性揺らぎ媒介の超伝導体の強力な証拠であることが知られている。なお共鳴条件は $\omega_{res} < 2\Delta$ 。
- このような共鳴ピークは銅酸化物高温超伝導体など多くの反強磁性揺らぎ媒介の非従来型超伝導体で観測されている。
- 中子弾性散乱による鉄系のピーク構造は、確認できるものの弱い。また、臨界残留抵抗率は大きく、符号反転を伴わないs++を支持する。つまり中性子散乱測定と不純物効果の間には支持する対称性に不一致がある。
- 5軌道モデルに基づくスピン感受率を解析すると、どの対状態で実験結果が再現可能なのか？

モデルと手法

- 5軌道モデルをもとに、10×10の南部BCSハミルトニアンを導入する。グリーン関数は以下のように定義される。
$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega) \equiv \begin{pmatrix} \hat{G}(\mathbf{k}, \omega) & \hat{F}^\dagger(\mathbf{k}, \omega) \\ \hat{F}(\mathbf{k}, \omega) & -\hat{G}(-\mathbf{k}, \omega) \end{pmatrix}^{-1} = (\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} - \hat{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega))^{-1} - \hat{H}(\mathbf{k})^{-1},$$
- d軌道基底の自己エネルギーを用いている。後で見るように、本研究における自己エネルギーは現象論的に導入される。
- 実周波数の関数としてスピン感受率を求めるには、ふつう松原周波数法と数値的解析接続を使用するのが容易だが、本研究では数値計算の前に解析接続を行う。

$$\chi''(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int dx \left[\tanh\left(\frac{x}{2T}\right) G^R_{\mathbf{k}}(x^+, k^+) \rho^A_{\mathbf{k}}(x, k) + \tanh\left(\frac{x^+}{2T}\right) \rho^A_{\mathbf{k}}(x^+, k^+) G^A_{\mathbf{k}}(x, k) + \tanh\left(\frac{x}{2T}\right) F^R_{\mathbf{k}}(x^+, k^+) \rho^A_{\mathbf{k}}(x, k) + \tanh\left(\frac{x^+}{2T}\right) \rho^A_{\mathbf{k}}(x^+, k^+) F^A_{\mathbf{k}}(x, k) \right]$$

$$\Im \chi''_{ll', l'''}(\omega, q) = 0$$

が $x < \omega$ で成り立っており、粒子-ホールの励起ギャップは 2Δ となる。

- スピン感受率は、RPAにより

$$\chi_s(\omega, q) = \sum_{ij} \left[\frac{\chi^{OR}(\omega, q)}{1 - S^0 \chi^{OR}(\omega, q)} \right]_{ii, jj}$$

で与えられる。本モデルでは、 $(\pi, \pi/16)$ のときに χ_s が最大値をとる。

- ところで、強相関係におけるスピン感受率は自己エネルギー補正によって正規化される。例えば nearly AMの金属のキュリーワイス的挙動は自己エネルギーの温度依存性によって引き起こされる。本研究における自己エネルギーとしては、バンド対角な

$$\Sigma_k^R(\epsilon) = i\gamma(\epsilon)\hat{1}$$

を導入する。

- γ の値は通常状態より $2.5(T + \epsilon/\pi)$ と推定される。また、通常状態では $\gamma \sim \gamma_0$ 、超伝導状態では $\gamma \sim a(\epsilon)\gamma$ と設定する。 $a(\epsilon)$ の関数系は $|\epsilon| < 3\Delta$ に対して $a(\epsilon) \ll 1$ 、 $|\epsilon| > 4\Delta$ に対して $a(\epsilon) = 1$ 、その間では線形外挿とする。

結果

- $U = 1.2, \gamma_0 = 0.4, T = 0.01$ として、スピン感受率の虚部を計算する。なおギャップは $\Delta = \gamma_0$ 及び $a(3\Delta) = 0.05$ である。通常状態では、 $\text{Im} \chi^{0R}_{ll',l''}(\omega, q)$ では大きな準粒子減衰によって抑制される。超伝導状態では $|\epsilon| < 3\Delta$ の粒子やホールは非弾性散乱から解放されるために、 $|\epsilon| < 4\Delta$ の粒子 - ホール励起の寿命は長くなる。これによって、 $s++$ 波状態における $\text{Im} \chi^{0R}_{ll',l''}(\omega, q)$ は $2\Delta < \omega < 4\Delta$ に対して大きなハンプ構造を示す。
- 小さな Δ と γ は、数値計算上の都合で設定が難しいので、近似的に

$$\chi^{0R}_{ll',l''}(\omega, q) \approx \frac{1}{N} \sum_k \sum_{l,l'} \frac{f(E_l^k) - f(E_{l'}^{k+q})}{\omega + E_l^k - E_{l'}^{k+q} + i\Gamma_{ll',kq}} \left[U_{\{1,l'\}^{k+q}} U_{\{3,l'\}^{k+q}} U_{\{4\}^k} U_{\{2\}^{k*}} + U_{\{1,l'\}^{k+q}} U_{\{4+5,l'\}^{k+q}} U_{\{3+5,l'\}^k} U_{\{2\}^{k*}} \right]$$

と表現する。ただし、この式の信頼性は γ と Δ が同程度に大きい場合には確認が必要である。フィッティングパラメータ $b \sim 1$ を導入して

$\Gamma = b \cdot \max(\gamma(E^k), \gamma(E^{k+q}))$ とする。

通常不純物の影響によって $\chi^{0R}_{ll',l''}(\omega, q)$ は徐々に減少するが、超伝導状態では不純物にほとんど依存しなくなる。

-バンド依存SCギャップについても測定した。等方的 $s++$ 波の場合 $\omega = \Delta_{max} + \Delta_{min} = 0.105$ で急速に増加し、 $\omega = 0.14$ でピークを持つ。異方的 $s++$ 波の場合はピークは $\omega = 0.125$ に位置している。

実験との比較

- ピークの高さと重量は、図3(b)の場合に鉄系ニクタイトにおける中性子散乱測定の結果と一致する。観測された共鳴エネルギーは $9.5 meV$ であった、さらに、別の文献で有限の $\chi^{0R}_{ll',l''}(\omega, q)$ が存在することはSCギャップの異方性の存在を示唆しているかもしれない。つまり図3(b)の結果(異方的 $s++$)が実験とよくあっている、と結論付けられる。
- $s+-$ についても調べたが、共鳴ピークは実験と比べると大きすぎる。

結論

強相関効果を介した γ により、 $s++$ 波状態では 2Δ の直上に顕著なhump structureが表れることがわかった。このhump structureは、オーバードープされた領域でストナー因子 α_s が減少するか、 $\text{Im} q$ がネスティングから離れるにしたがって小さくなっていく。今のところ、実験データを支持するのは、理論的な解析によれば $s++$ 波状態と推察される。