



Title	超伝導の起源：仲の悪い電子と仲のよい電子たち
Author(s)	黒木, 和彦
Citation	高大連携物理・化学教育セミナー報告書. 2018, 29
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/67775
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

【講義】

—超伝導の起源— 「仲の悪い電子と仲のよい電子たち」

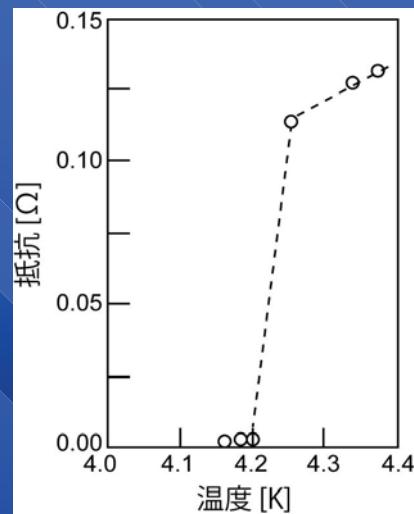


大阪大学・理学研究科・物理学専攻

黒木和彦

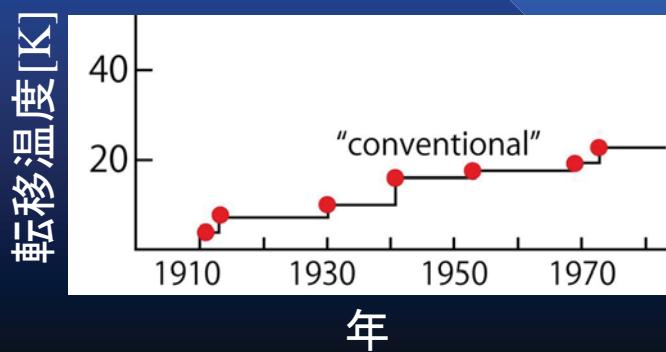
超伝導とは？

ある臨界温度(T_c)と呼ばれる
温度以下において、
電気抵抗が0になる現象

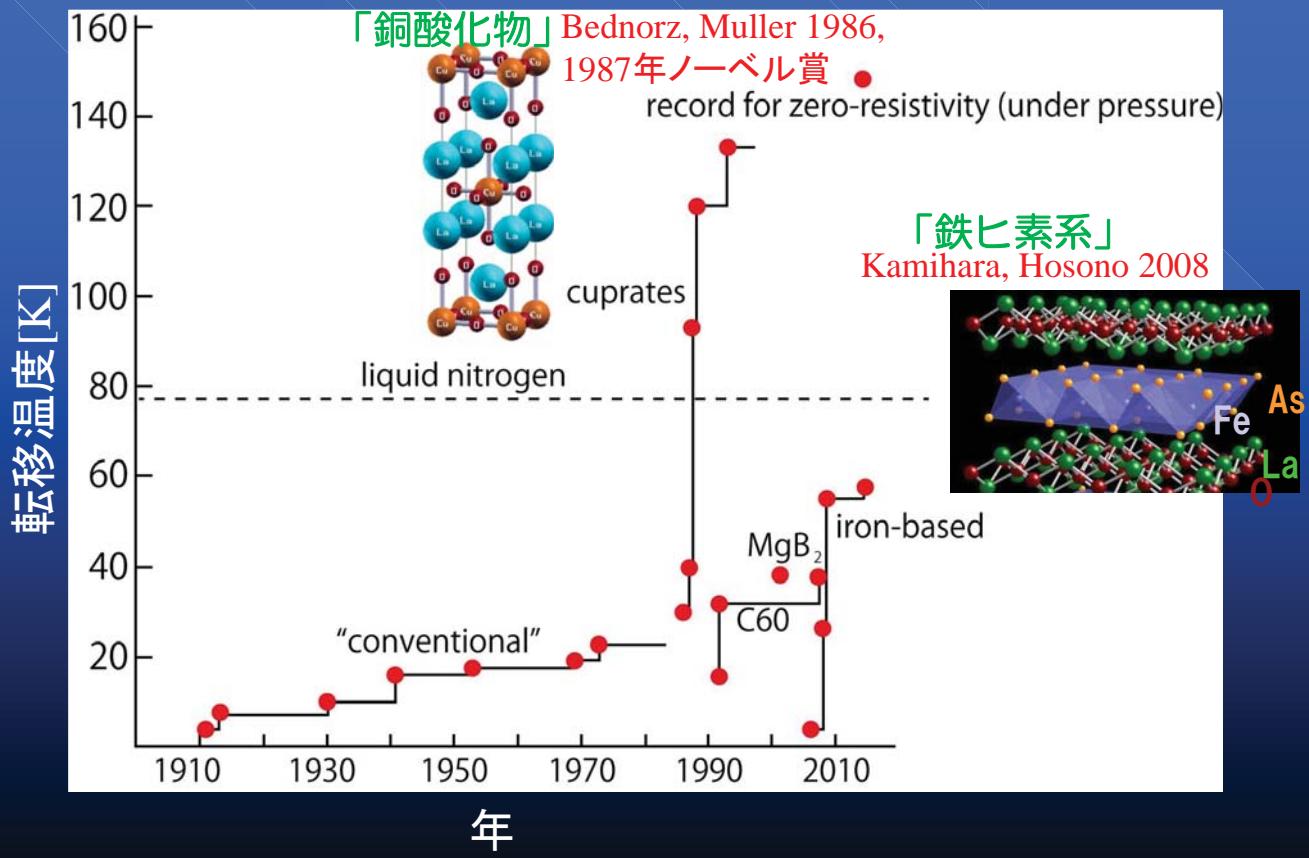


Kamerlingh Onnes 1911

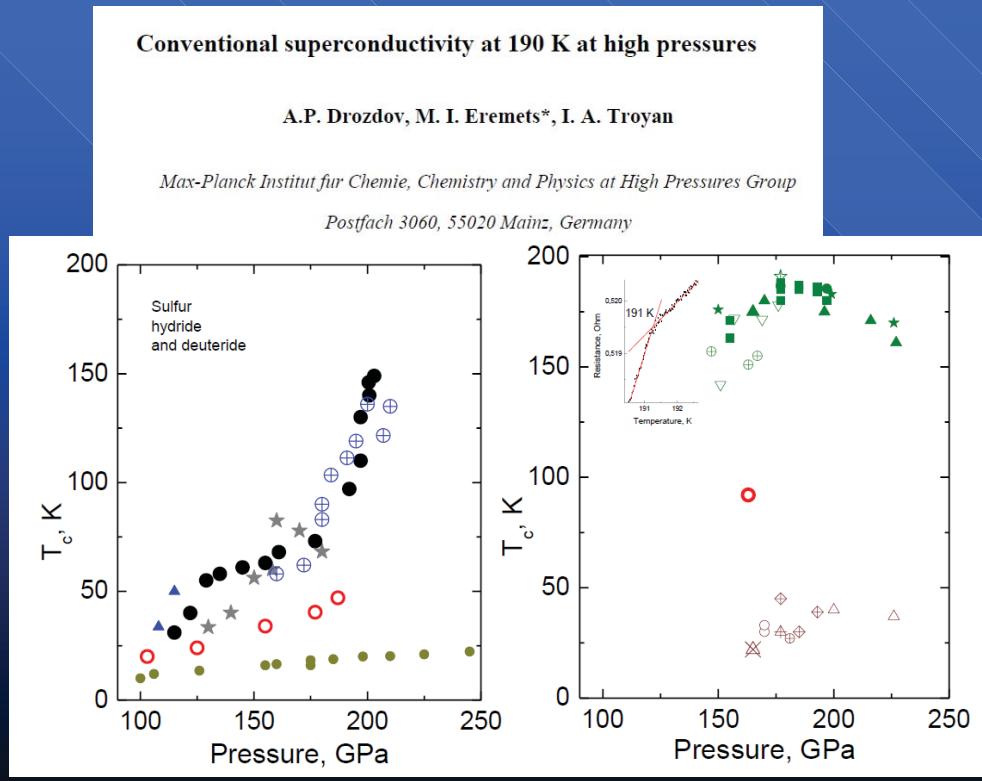
超伝導転移温度は低い！



高温超伝導の発見

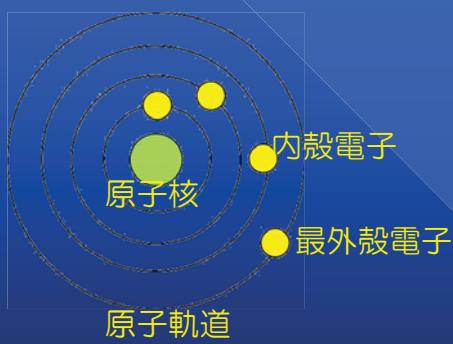


超高压下で高温超伝導の発見



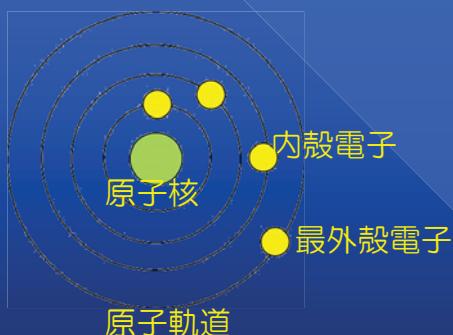
原子、電子、結晶

原子の構成



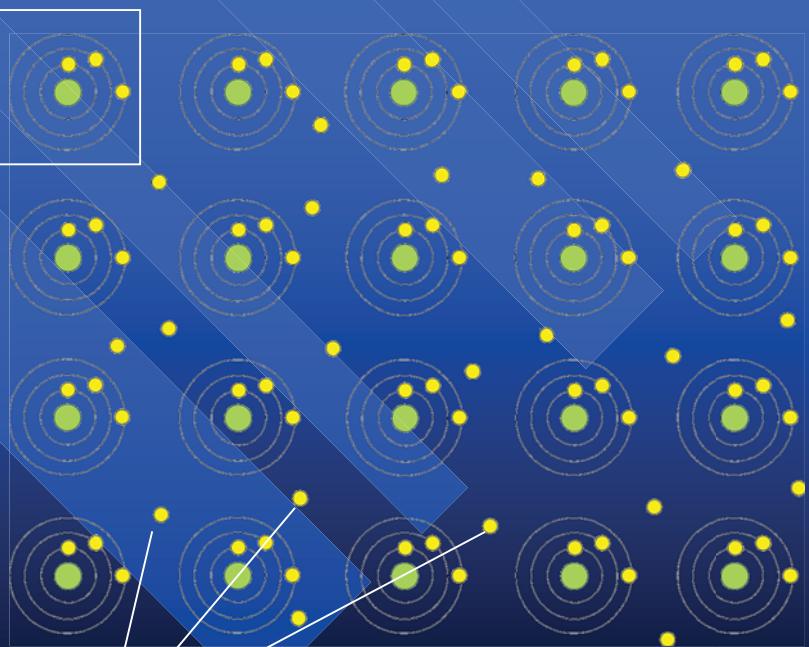
原子、電子、結晶

原子の構成



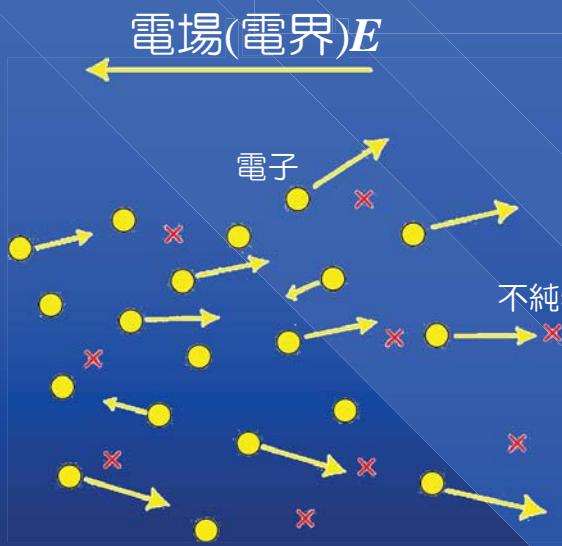
イオン

固体（金属結晶）

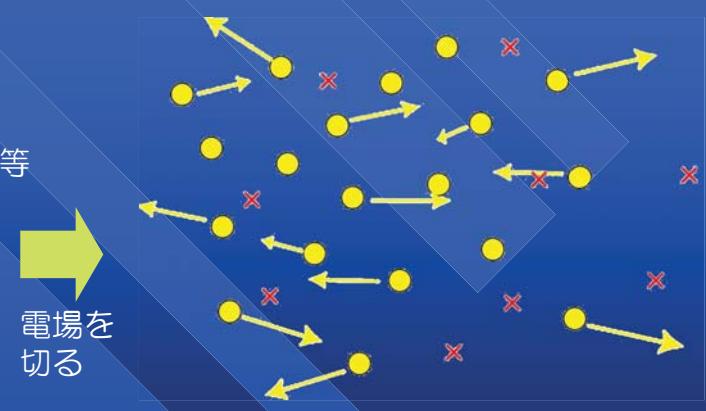


(最)外殻電子は原子を離れて結晶中を動く

電流と電気抵抗



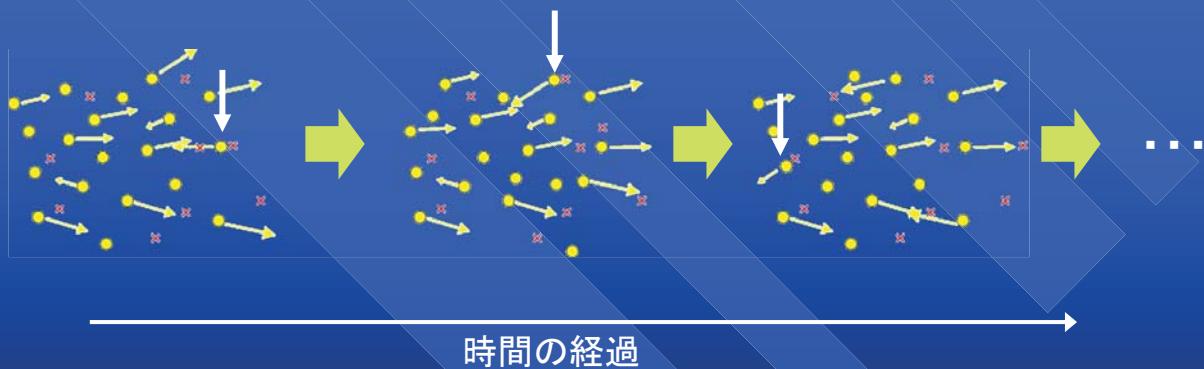
電場と反対方向に電子の正味の流れがある



電場を切ると右向きと左向きの電子が同数の状態に落ち着き、正味の電子の流れはなくなる

不純物、欠陥、イオン振動等が要因となって電気抵抗が生じる

電流の減衰は 「すばやく、しかし徐々に」おこる



電場を切った際に電流が流れなくなるまでの過程は、無数にある電子の運動量が次々とすばやく、しかしあくまで一個づつ変わる変化である。

ド・ブロイ波

1924年、ド・ブロイは博士論文において、
電子などの粒子と考えられているものも、波動性を持つと考えた。

粒子の持つ波動性を「物質波」あるいは「ド・ブロイ波」といい、
その波長 λ を「ド・ブロイ波長」という。

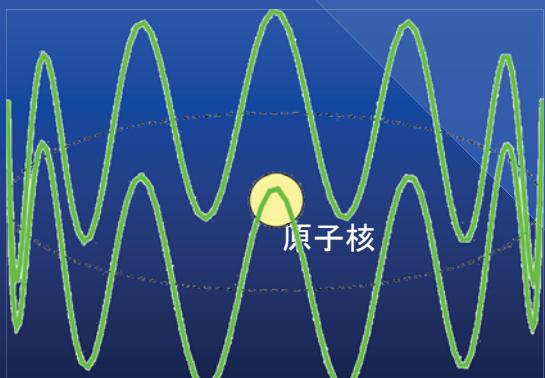
電子の波動性

量子力学では電子の状態は波として記述される

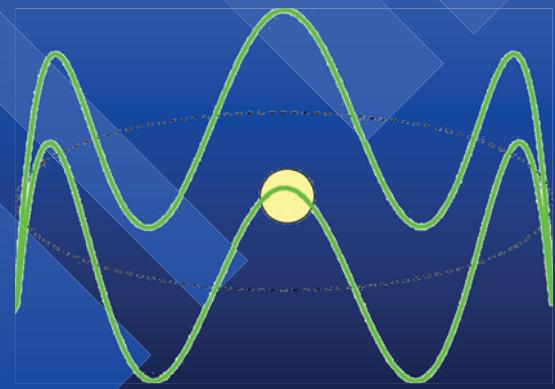
一個の原子の原子軌道の場合

安定な状態（定常状態）に落ち着くための条件

電子の波



波長の整数倍=円周の長さ
[ボーアの量子化条件]



ある定常状態から別の定常状態に移るには不連続な変化が必要

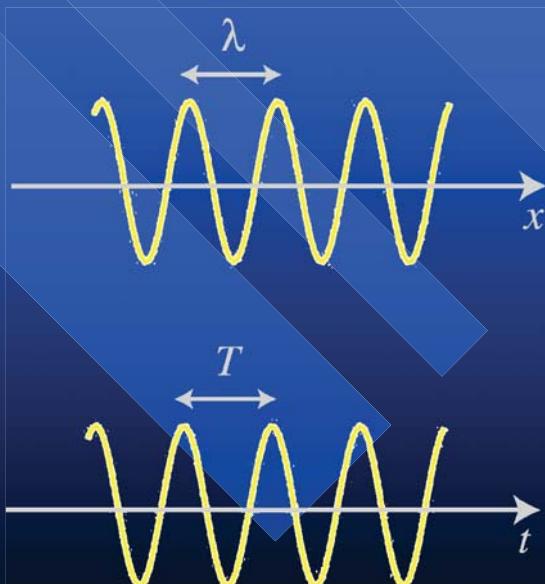
一個の電子の波は「微視的な(目に見えない世界の)波動現象」である

「波」の式

$$y(x,t)=A\sin[2\pi(t/T-x/\lambda)]$$

波の波長 λ , 周期 T

t (時刻を固定)



x (座標を固定)

「波」の式

$$y(x,t) = A \sin[2\pi(t/T - x/\lambda)]$$

波の波長 λ , 周期 T



波数 $k=2\pi/\lambda$, 振動数 $\omega=2\pi/T$, 位相 $kx-\omega t$

$$y(x,t) = B \sin[kx - \omega t]$$

電子の波動性

波数 $k=2\pi/\lambda$, 振動数 $\omega=2\pi/T$, 位相 $kx-\omega t$
 ω と k の間には一定の関係がある（分散関係）



結晶中の各電子の「量子力学的状態」は
波数 k によって指定できる。

粒子としての運動量 p と波としての波数 k には

$p=\hbar k$: ド・ブロイ(de Broglie)の関係

$$\hbar = 1.0546 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

の関係がある

電子のスピンとパウリの原理

電子は小さな磁石の性質をもつ。これを「スピン」という。N極S極の向きに応じて、スピン s は $+\hbar/2$ または $-\hbar/2$ の値をとる。

結局、結晶中の各電子の状態は (k,s) の組で指定される。

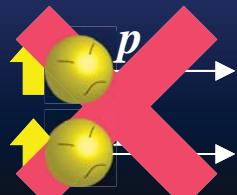
$$\begin{array}{ccc} \uparrow & p=\hbar k & \rightarrow \\ & s=+\hbar/2 & \\ \downarrow & & -\hbar/2 \end{array}$$

電子の「仲の悪さ」その1：パウリ(Pauli)の原理

二つの電子が同じ状態 (k,s) にあることは許されない

$p=\hbar k$ なので、同じスピンを持った二つの電子が同じ運動量を持ってはいけない！
古典力学ではありえないこと

量子力学的粒子「フェルミ粒子」の性質



フェルミ粒子とボーズ粒子

ボーズ粒子：スピンは \hbar の整数倍
一つの同じ状態 (k,s) に何個の粒子がいてもOK

系のすべての粒子が同じ波数 k を持つことが可能
これを「ボーズ・アインシュタイン凝縮」(BEC)という
全ての粒子の波としての位相 $kx-\omega t$ がそろう！
「コヒーレント(coherent)な状態」

コヒーレントな状態



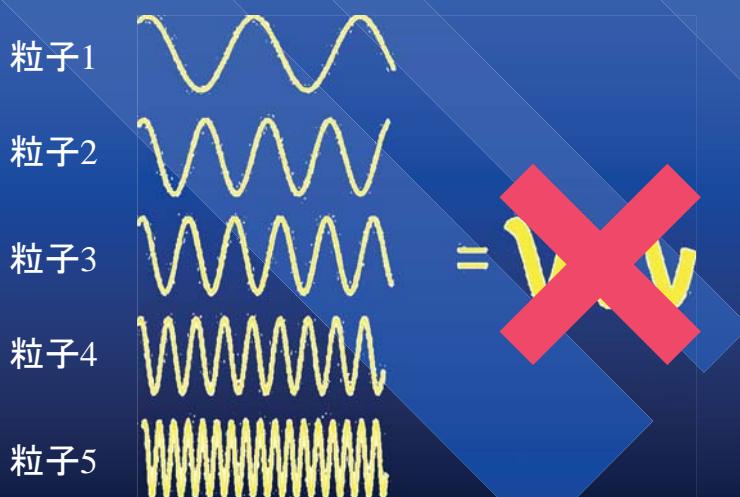
波の位相 $kx - \omega t$ がすべての粒子で同じ

多粒子系全体としての状態を位相の定まった波として表せる

フェルミ粒子とボーズ粒子

フェルミ粒子：スピンは \hbar の半整数 ($1/2, 3/2, \dots$) 倍
一つの状態 (k, s) にはひとつの粒子しかいられない

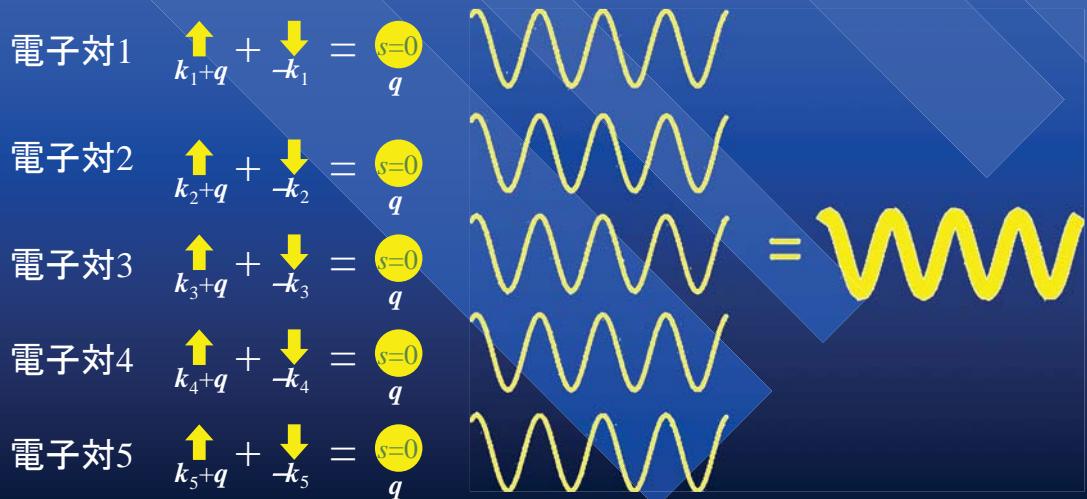
多粒子系では各粒子の波の位相はバラバラ



多粒子系全体として状態を位相の定まった波で表せない

フェルミ粒子×2=ボーズ粒子

スピン $+\hbar/2$ の電子とスピン $-\hbar/2$ の電子が対をつくって
ひとつの粒子とみなせれば、スピンはうち消しあって $s=0$ (\hbar の整数倍)
なので、ボーズ粒子となる→コヒーレントな状態を作りうる！



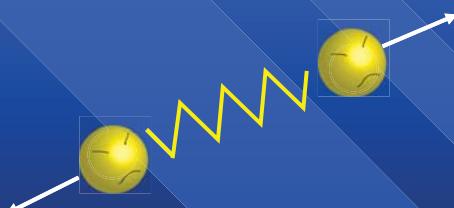
注：二つの電子の波数を合計したものが電子対の波数となる

クーロン反発力

しかし....

電子の「仲の悪さ」その2：クーロン反発力（斥力）

電子は負の電荷を持つので、クーロン力で反発しあう。
力は電子間距離の2乗に反比例、位置エネルギーは距離に反比例

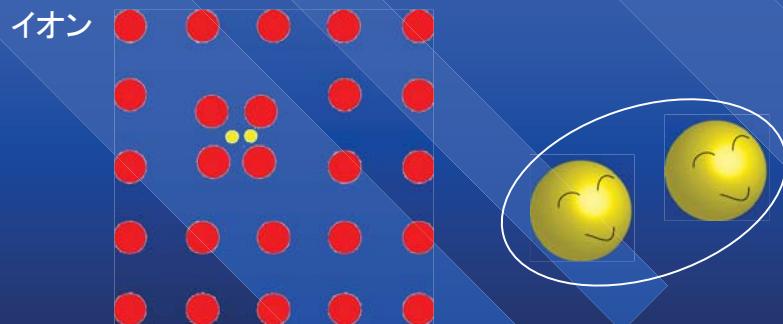


電子が接近すると、位置エネルギーの高い不安定な状態に。
→離れて位置エネルギーの低い安定な状態に戻ろうとする
(物体が高いところから低いところに落ちるのと同じ)

電子対などつくれそうにない

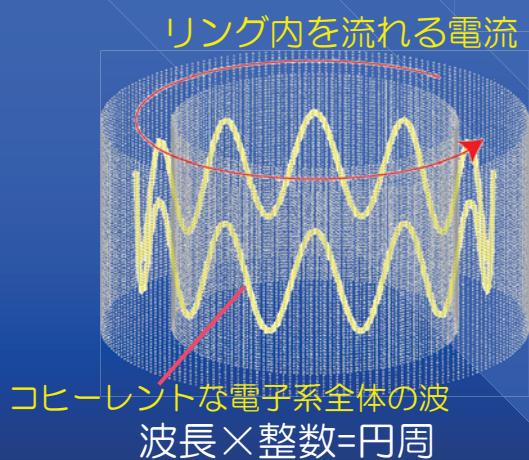
イオン（結晶格子）の効果を利用して電子対をつくる

正に帯電したイオン（正確にはイオンの振動）が
「仲の悪い」電子間の「仲介役」を果たす

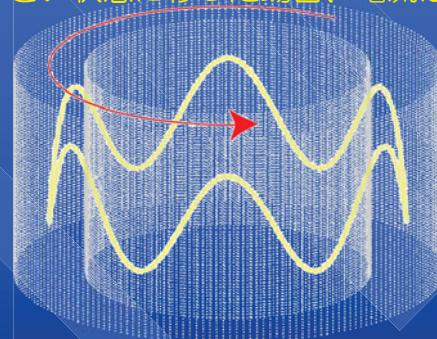


「仲のよい」電子になる→電子対（クーパー対）の形成

巨視的な波の安定な定常状態： 永久電流



波長の長い、すなわち波数（電子対の運動量）の小さい状態に移った場合、電流は減少している

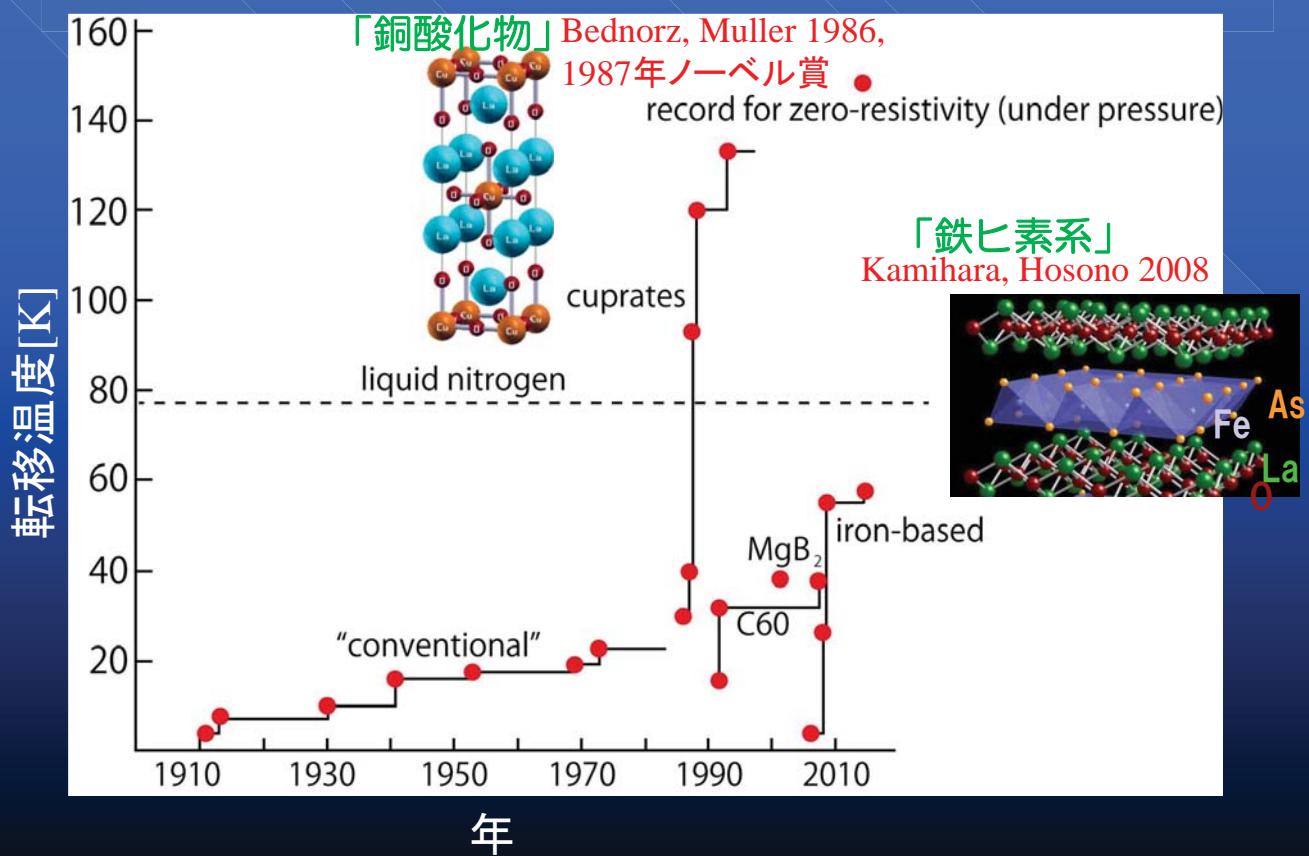


電子系全体が、ある状態から別の状態に移るには、結晶中の（ 10^{23} 個もある）全ての電子の状態を（一個ずつではなく）いっせいに変える、不連続な変化が必要→不可能!!



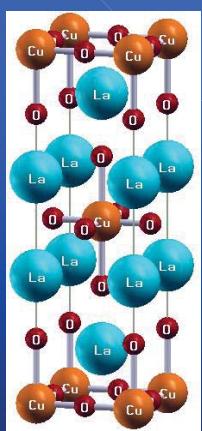
外場がなくても電流は減少しない：電気抵抗0の永久電流

銅酸化物における高温超伝導の発見

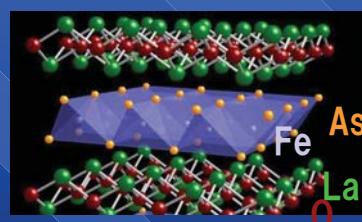
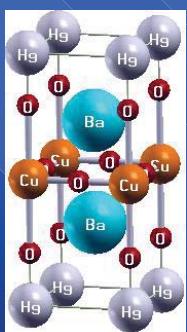


「電子たちのものすごい仲の悪さ」
が原因で起きる超伝導？

銅酸化物

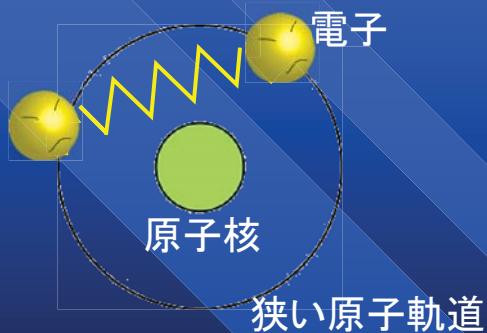


鉄系超伝導



強相関電子系： 「すごく仲の悪い」電子たち

d軌道やf軌道：原子軌道が狭いため、二つの電子がひとつの原子軌道に入ると非常に接近する→強いクーロン反発力による高い位置エネルギー、不安定な状態



上は原子一個の話だが、このような原子が結晶をつくった場合、強いクーロン反発力の効果は生き残る

実空間と波数空間

実空間：座標 r

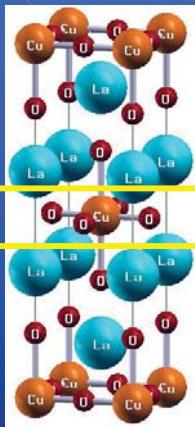
「粒子」

波数空間：波数 k

「波動」

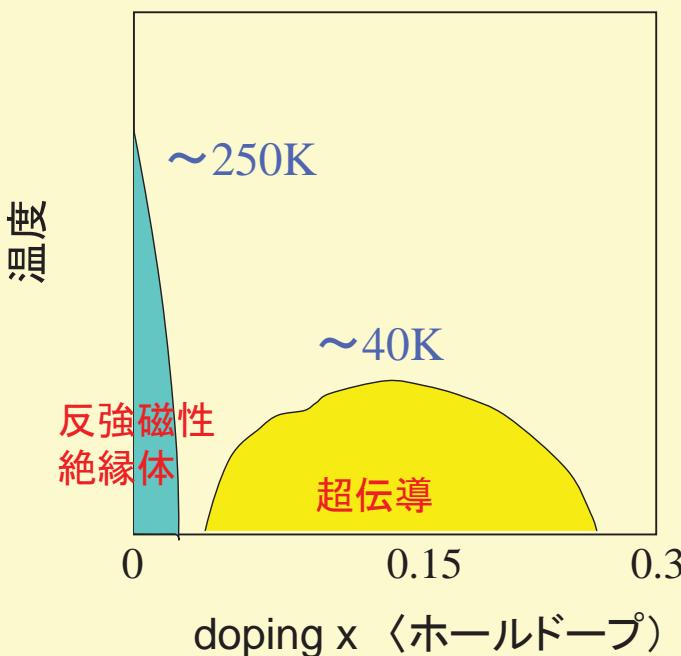
フーリエ変換

銅酸化物



CuO₂面が
主役

相図

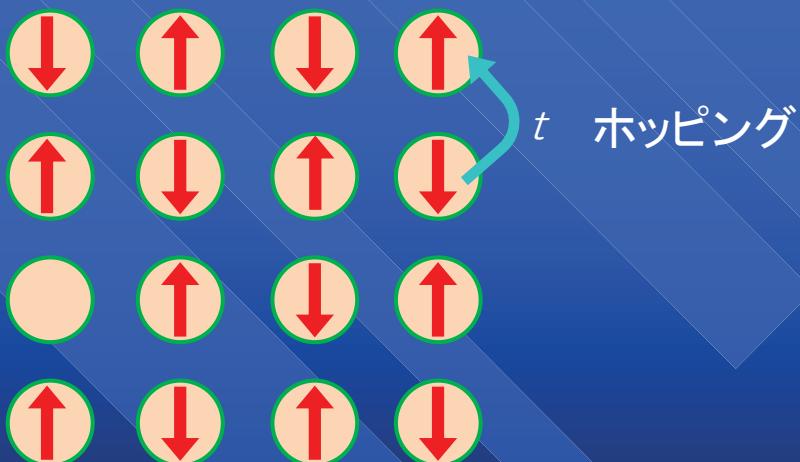


銅酸化物の模型

単一軌道ハバード模型

U オンサイト相互作用

実空間模型：
電子は原子に
「束縛」されて
いて、ときどき
別の原子に移動



電子数=サイト数のとき : half-filled 銅酸化物母物質に対応

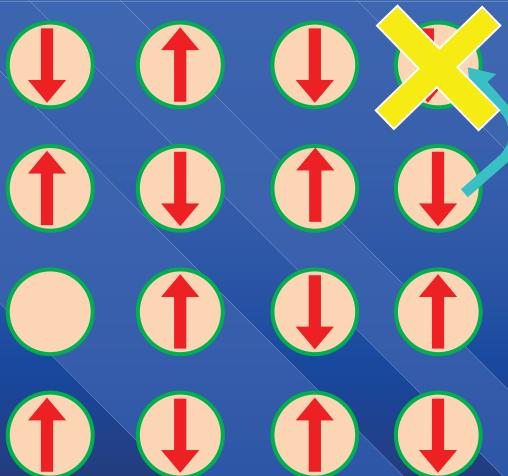
近年、Uやtの値は、計算機を使った理論計算で計算できる。

電子間斥力のみ・フォノンは考えない
→超伝導を記述し得るか？

■ 超伝導を期待しない理由 仲の猛烈な悪さ

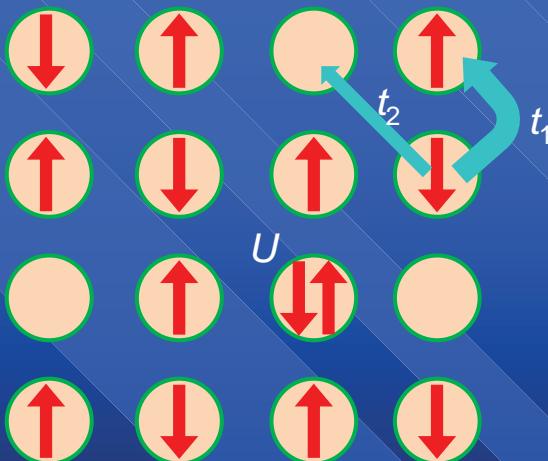
■ 高温超伝導を期待する理由 purely electronic (unconventional) エネルギー規模の説明

銅酸化物の模型 単一軌道ハバード模型



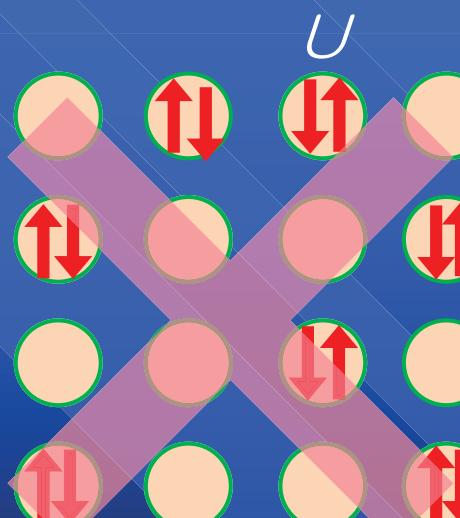
仲の悪さ：実空間におけるパウリの原理
同じ向きのスピンの電子は同じサイトにいられない

銅酸化物の模型 単一軌道ハバード模型

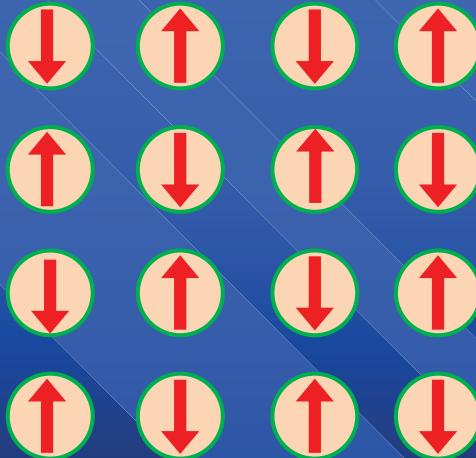


理論計算によると、
銅酸化物の場合、最隣接サイト間ホッピング t_1
がそれ以外のホッピングに比べて大きい

通常の超伝導の実空間イメージ



单一軌道ハバード模型



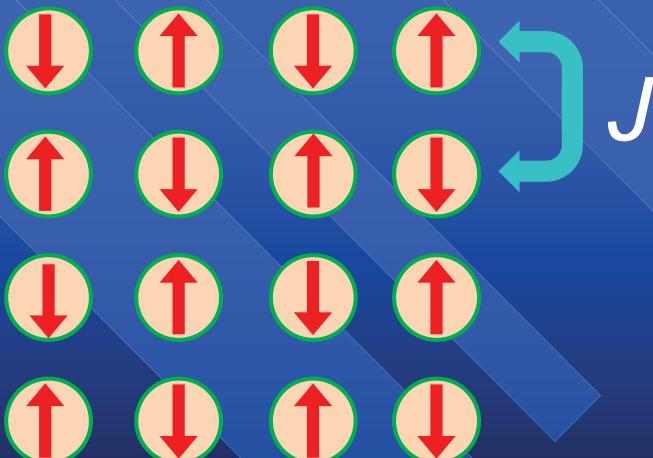
電子数=サイト数のとき : half-filled 銅酸化物母物質に対応

モット絶縁体 :

half-filled = 電子の「強烈な仲の悪さ」
ゆえに身動き取れない絶縁体の状態

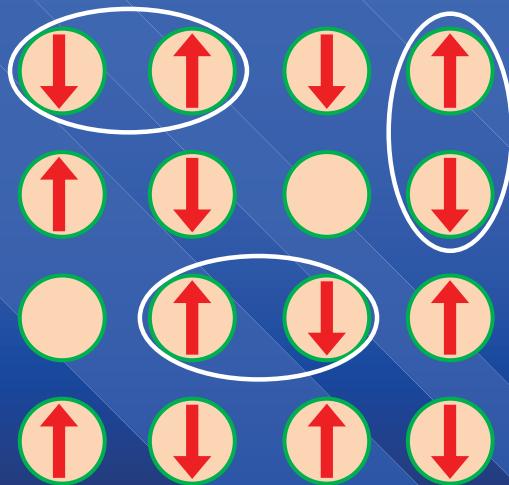
单一軌道ハバード模型

…とはいっても、少しばかり動きたい。



パウリの原理があるので、お隣どうしは、
スピニが反対向きになっていたほうが動ける。
→反強磁性的相互作用

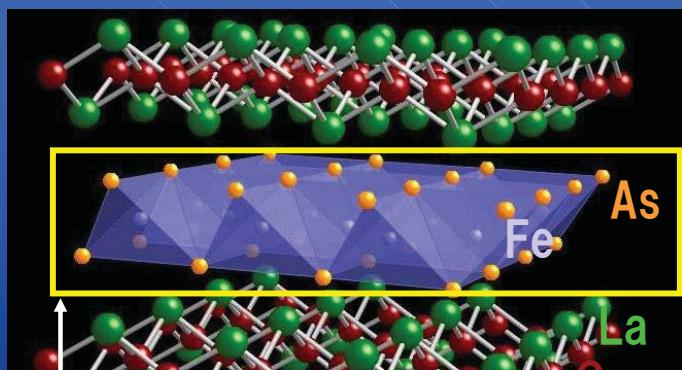
单一軌道ハバード模型



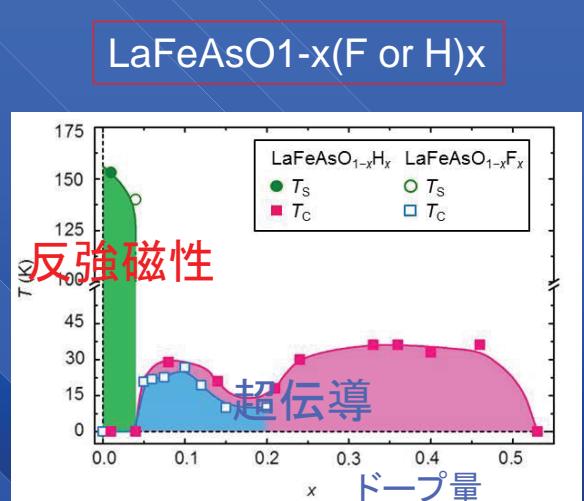
反強磁性的相互作用
＝スピン逆向き電子が

隣に来やすいという「引力」と解釈できる。
ホールが入って（穴が空いて）電子が動けるようになって
も、穴が少なければ、「最隣接サイト間引力」は残る。

鉄系超伝導体

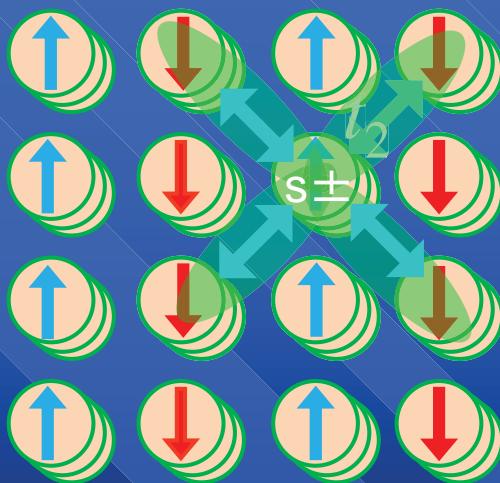


FeAs面が主役



Iimura et al. ,Nat. Comm. 3 943 (2012)

鉄系超伝導体の模型



理論計算によると、鉄系の場合、第二隣接サイト間
ホッピング t_2 がそれ以外のホッピングに比べて大きい
→第二隣接サイト間に反強磁性相互作用
→第二隣接サイト間にスピン逆向き電子間引力

高温超伝導体における共通性



K. Suzuki, KK et al., Phys. Rev. Lett. 113, 027002 (2014)

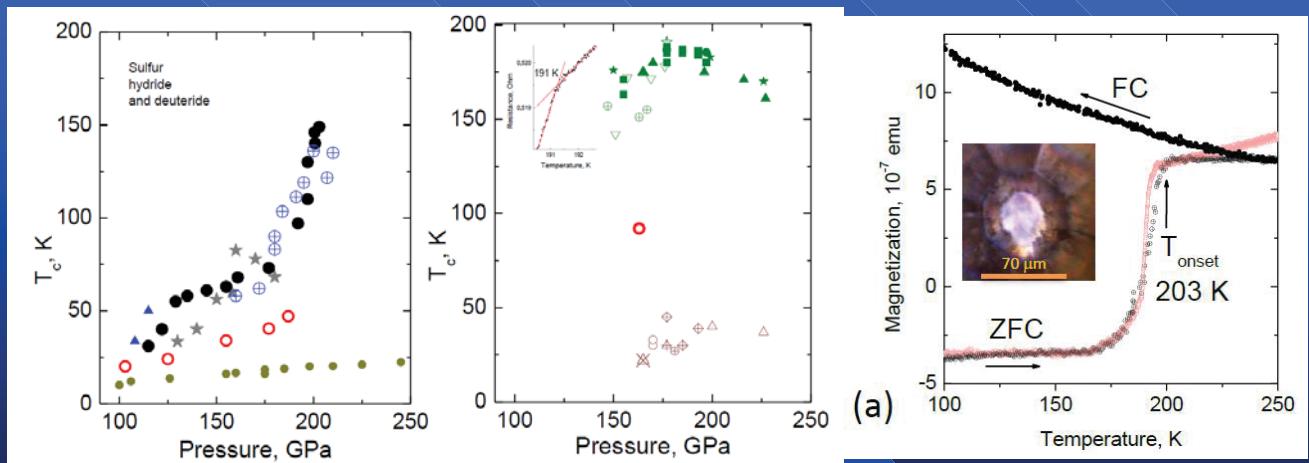
物質に関する理論研究の流れ



超高压下高温超伝導の発見

2014 December, Drozdov et al. Nature 525, 73 (2015)

H_3S に超高压~200GPaで $T_c > 200K$



極めて軽い「水素」の高いフォノン振動数が高温超伝導の一因。
特異なバンド構造も重要な要因であることがわかつてきた。

初の”理論先導”による高温超伝導の発見

2014 April, Y.Li et al. J. Chem. Phys. 140, 174712 2014

H₂S 160GPa でT_c=80K を理論的に予想

2014 Nov, D.Duan et al. Sci. Rep. 4 6968 2014

H₃S 200GPa でT_c=200K を理論的に予想

McMillan Allen Dynes の式

$$T_c \sim \langle \omega \rangle \exp \left[\frac{1 + \lambda}{\lambda - \mu^*} \right]$$

フォノンの振動数

電子・フォノン結合

擬クーロン・ポテンシャル

ただし、H₃Sはフォノン媒介超伝導（高温だが、従来型超伝導）

水素は軽い → 振動数 $\omega \propto 1/m^{1/2}$ (単振動の式) → 高温超伝導

非従来型高温超伝導体における共通性

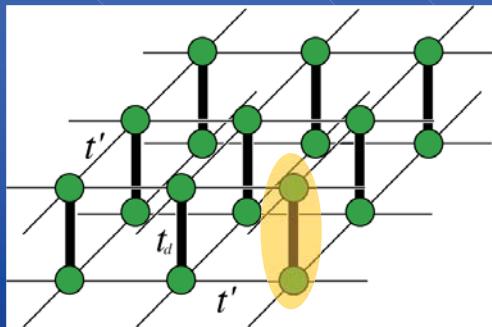


なぜ T_c が高いのか？という質問→フォノンが絡まないことによ
エネルギーの高さ+動きやすさについての説明をした。

非従来型高温超伝導体の「物質設計」

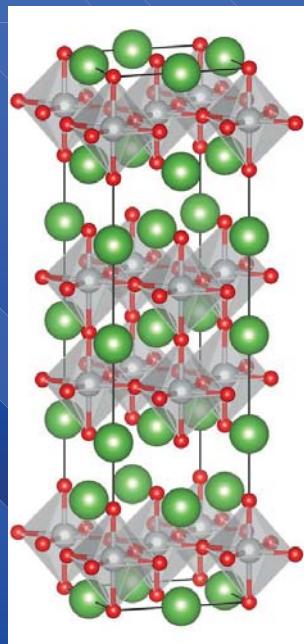
二層系

層間ホッピング>層内ホッピング



層間ペアリング

計算から銅酸化物を超える T_c の可能性
KK et al., Phys. Rev. B 66, 184508 (2002)



このような電子状態を実現する物質を理論的に探索するという
「逆問題」にチャレンジ中

物質に関する理論研究の流れ

