

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

子計畫四：非傳統超導的渦旋結構吉磁場又發悟性變化研究

(3/3)

計畫類別：整合型計畫

計畫編號：NSC91-2112-M-009-047-

執行期間：91年08月01日至92年07月31日

執行單位：國立交通大學電子物理學系

計畫主持人：楊宗哲

計畫參與人員：博士生：劉文龍、許永昌、趙遠鳳、吳添全

報告類型：完整報告

報告附件：出席國際會議研究心得報告及發表論文

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 93 年 2 月 3 日

非傳統超導及不尋常磁性研究(三年期)

子計劃：非傳統超導的渦旋結構及磁場誘發材料行為變化研究

執行期限：89年8月1日 ~ 92年7月31日

主持人：楊宗哲教授 國立交通大學電子物理系

計劃參與人員：許永昌(博士生)、劉文龍(博士生)、顧本源(教授)(大陸中國科學院物理所)、李文德(副教授)(黎明技術學院)

一、中文摘要

本研究計畫係三年期，所完成的成果有多項，一為高溫超導的電場效應，它把高溫超導體看成金屬與絕緣層交互疊成，在沿堆疊方向加一均勻電場，金屬層間具有藕合。在 Ginzburg-Landau 理論框架下，提出轉移矩陣方法，得到 T_c 的解析表達式，及 T_c 偏移的準則。二為針對雜化量子網路。在此網路中，電子穿透的或然率譜出現固有的電導下沉，此係為超導環在超導態時所造成。三為二維電子氣體與超導體結的磁電導振盪行為。二維電子氣體以勢位障壁分成二個相互平行的量子波導，二維電子氣體與超導體構成 2DEG-S 結，其磁電導振盪行為的成因有二：一為在介面成多重 Andreev 反射，造成准粒子波函

數的干涉。另一為當在二維電子氣體中引入隔離障壁，造成傳播模數目的改變，在異質結半導體中，電子色散能譜顯現振盪結構附加在 Landan 能階上，這種色散振盪行為強烈地造成磁電導振盪(MCO)的行為，以現象的論點，點出 MCO 物理圖像。由此提出磁電導譜，可由改變隔離位障高度、寬度位置來改變。四為半導體/磁障/超導體形成的系統，其電導特性係由 Andreev 反射造成，它可藉準粒子在外加磁場下的古典迴旋軌道的圖像予以解釋。五為鐵的納米線磁性。以 Full linearized Augmented plane wave (FLAPW) 方法作第一性原理的計算鐵的鏈，立方面心鏈、立方體心鏈等系統的磁矩，發現磁矩與鐵的配位數有強烈的關聯性。六為二維光子晶體的四方晶格，將在中央的圓柱子偏移中央位置，發現填充因子在 0. 時，且圓柱偏移量小於 1.5% 晶格常數下，完全能隙幾乎不變，且與 S 的方向無關，若在追求最高完全能隙的目標下，發現稍微增加 S，反而完全能隙會急遽下降，這種不敏感性與敏感性的特徵是很新奇的。且在樣品製程上是很有助益的。

關鍵詞：高溫超導體，電場效應，二維電子氣體—超導結，磁電導振盪，隔離位障，鐵的納米線，磁矩，配位數，光子晶體，四方格子，完全能隙

二、Abstract

This report is results of the three years term project. Several subjects have been done in this period. The first subject is related to the electric field effect of high T_c superconductors. High T_c superconductor is considered as alternately stacked metal and insulating layers. The electric field is applied along the stacking direction and investigated with in the frame of Ginzburg-Landau theory with the coupling g_3 between metallic layers. The transfermatrix method is proposed and used to get the analytic expression of the transition temperature T_c and the criterion for the enhancement of T_c which the electric field is applied. The second subject is hybrid quantum network. In this network, the transmission probability spectra of electron show up an intrinsic conductance dip. The superconducting ring causes this intrinsic conductance dip. The third subject is the oscillation of magneto-conductance in 2DEG-superconductor junctions stem from two sources: one is the interference of wave functions of quasiparticles owing to multiple Andreev reflections at the interface the other is attributed to variation of the number of the propagation modes when introducing the isolating barrier. The energy dispersion relations of electrons in the hetero-semiconductor exhibit an oscillating structure superimposed on the Landau levels. It is the oscillating behavior of the dispersions may strongly modify the magneto-conductance oscillations (MCO). The physical pictures of the MCO is proposed in a phenomenological way to fit our numerical results. It is anticipated that the magnetoconductance spectrum can be engineered by changing the height, width, and the position of the isolating barrier layer. The fourth subject is semiconductor/magnetic barrier/superconductor junction. The novel properties of conductance of such system are due to Andreev scattering. These properties can be understood via the physical picture of a semi-classical cyclotron orbits of quasi-particle. The fifth subject is the magnetic properties of nano wire iron. The magnetic moments of linear chain Fe atom, fcc iron nano wire and bcc iron nanowire are calculated by ab-initio full linearized augmented plane wave (flapw) method. It is found that the magnetic moment of iron atom on nanowire and linear chain is strongly correlated with the coordination number. The sixth subject is the sensitivity of complete band gap of two dimensional photonic crystal with square lattice on the position of circular cylinder.

It is found that complete band gap is almost unchanged for circular cylinder shifting away $s \leq 1.5\%$ (crystal lattice) from the center of the square lattice for a certain filling factor $f=0$. At the position of maximum complete band gap, a little increasing s , the complete band gap drops rapidly. The feature of sensitivity of complete band gap on s is a novel characterization in this system. This finding is very help full in the process of fabricating sample.

Keywords: high T_c superconductors, electric field effect, 2DEG-superconductor junction, magneto conductance oscillation, isolator barrier, Andreev reflection, magnetic barrier, iron manowire, magnetic moment, coordination number, photonic crystal, square lattice, complete band gap.

二、緣由與目的

自高溫氧化物超導發現以來，嘗試各種方法以提高超導體轉變溫度 T_c ，其中採用物理的方法，諸如壓力、外加電場…等，以提高 T_c 。對於高溫超導體的電場效應有必要將超導機制連貫一起去探討。我們首先將電場效應與超導機制， g_s 藕合模型連貫起來，而導出 T_c 與電場的解析表達式，以及 T_c 偏移的準則。

近年對正常導體/超導體介觀結構的電子傳輸性質的研究已引起人們的注意。介觀物理的主要特色是載電荷的相位相干涉。在正常導體的介觀結構中，電子的傳輸在相干長度 L 的範圍內保留著相位相干性。超導態是以巨觀波函數特徵化，理想上它可在任意大的長度上保留相位相干性。把正常介觀結構與超導體結合在一起的“雜化”系統，會產生奇特的物理現象。許多有趣的現象已在不同的雜化介觀系

統出現。而這些奇特的現象大部份來自於不尋常的反射，即 Andreev 反射。係為正常金屬中，費米能階上方的激發電子在正常金屬/超導體(NS)介面處，以低於費米能階的 hole excitation 反射, 這種 $2e$ 的失落電荷被轉化成超導電流。

目前作成超導薄膜與半導體異質結構形成二維電子氣體(2DEG)的結的技術已成熟。於是利用 high mobility 2DEG 可作成 ballistic transport。因此，像這種雜化系統，將打開 Andreev 反射與介觀效應的交互影響的問題。在這樣的背景之下，就雜化量子網路的傳輸性質作量子的計算。又對 Sm-S 結中準粒子的傳輸性質作計算。進一步對 Sm-S 結介面附近，在 Sm(半導體)區內作成一磁障區，計算磁電導及建立半古典形象理論予以解釋。

為了嚐試了解 PrBCo 系統的磁性行為，學習使用 FLAPW (Full Linearized Augmented Plane Wave)方法作第一性原理的計算，於是先針對鐵的納米線作磁矩及 X-ray magnetic circular dichroism (XMCD) 的計算，而得到很有趣的結果。

在最後一年中，嚐試去揭示超導體材料作成光子晶體結構的一些可能新奇的特性，只好先從基本的光子晶體頻譜計算入手，以熟習一

些光子晶體的基本特性及規律，結果一方面發展新平面波法，始能針對介電常數依賴頻率函數的問題能夠處理，另一方面揭露光子晶體的新奇特性。結果都得到滿意的成果。目前正進入開始計算超導體材料作成的光子晶體的一些新其特性，尤其負折射率問題將是未來的研究目標之一。

三、結果與討論

1. 高溫超導體(HTSC)的電場效應

採用 BCS 弱耦合模型，Poisson 方程式及 Thomas-Fermi 近似，就層狀各向異性超導體的超導體轉變溫度 T_c 的偏移量，以 g_3 層與層間的耦合模型與電漿子 BCS-like 機制計算在外加均勻電場的作用下，推導 T_c 偏移量。在推導過程中，運用轉移矩陣方法，得到 HTSC 的 T_c 偏移量的條件和解析表達式。在電場要增大 T_c 的條件，需滿足 $\alpha(T_c - T_{ci}) > 2|g_3|$ ， $i \leq 3$ ，此處 $T_{ci} = 1.134 E_{fi} \text{Exp}(-1/\lambda_i)$ 。 T_{ci} 是第 i 層 CuO_2 的超導轉變溫度， g_3 是層與層間的耦合常數。 E_{fi} 是第 i 層 CuO_2 的 Fermi 能階。 E_{fi} 中含有外加電壓。 λ_i 是第 i 層 CuO_2 中的電子之間的耦合常數。 α 是在 Ginzburg-Landau 自由能項中，有序參量絕對值平方的一階項前的係數。同時，外加電壓不能超過介質穿透電壓。

2. 雜化量子網路傳輸的量子計算，採用的模型器係由正常導體線切

向地接上超導體環，且一 δ 函數勢位的 Scatter 放在結上，以模擬散射效應。計算的結果呈現，穿透或然率譜通常顯現週期震盪，而對超導體環，自由電導下沈現象出現在譜的第一個突出峰上。不管磁通量發生任何變化，環的幾何大小及散射效應，此一電導下沈總是存留在 spectra 上。此一下沈(dip)的能量位置端賴環的周長及磁通量。當增加磁通量，除了整個譜向高能區偏移，譜的幾何形狀相似。這種 intrinsic conductance dip 頗為穩定，即使系統的物理與幾何參數受到干擾。它只對正常與超導間的相轉變靈敏。在 node 處，有 δ -函數勢位的散射時，spectra 變成以傾斜的 bump unit 作週期性的調制，且 intrinsic conductance dip 存在。此電導下沈的能量位置不受到散射強度的影響。當改變散射勢位的型態，從排斥到吸引時，在 spectra 中，每一 bump unit 的傾斜方向會倒過來。在引入任何小磁通量後，根據在環內必須形成駐波的條件及考量 schrodinger 方程式的時間反演破缺，這些現象都能詮釋的很滿意。最後，解開 intrinsic conductance dip 是來自於超導態。

3. 二維電子氣體與超導體結的磁電導振盪行為

- (a) 在二維電子氣體中用一薄的隔離位障，隔成兩部分而形成 dual 量子波導，二波導經由隔離位障耦合。此一薄的散色層，近似為

δ 函數位疊。在 2DEG 中加上一均勻磁場（垂直於 2DEG 面）。而在超導體中的磁場令為零，同時 2DEG 用一硬體牆限制。經由 Bogoliubov de Gennes 方程式和採用 BTK (Bloder, Tinkham, and Klapwijk) 作法。在介面處，引用有效質量近似，如此可得到在正常區中，電流與偏壓的關係式。進一步可得到，在 $T=0K$ 及零偏壓下的微分電導。從數值計算的結果，了解此一系統的磁電導的來源有二：一為在 2DEG/超導體介面處多重 Andreev 反射造成準粒子波函數的干涉。另一為在 2DEG 中引入的隔離位障造成傳播模數目的振盪變化。MCO 圖樣強烈的依賴元件的不同結構參數，例如 dual 量子波導間的耦合強度，在 2DEG/超導體介面處的散射強度，準粒子的 Fermi 速度的不匹配。當隔離位障的寬度變寬，等效於把 dual 量子波導的耦合削弱，即增強障壁強度。以現象的觀點對 MCO 給予物理圖像，並計算 MCO 的結果，發現與由 Bogoliubov-de Gennes 方程的數值結果很好的一致。證明 MCO 可以以一維的半導體/超導體介面，根據 S 矩陣予以詮釋。在 Sm-s 介面處的多重 Andreev 反射引起準粒子 (QP) 沿好幾個路跡運動，及 electronlike 分支與 holelike 分支間準粒子運動變遷。QP 的古典迴旋運動和由磁場造成的相位移間相互作用，以及隔離位障都扮演著重要角色。在 dual 量子波導中傳播模數目的振盪變化強

烈地修改 MCO。即使在 Sm-s 結中二材料的 QP 費米速度相匹配的情形，也會出現 MCO，但在量子波導的 2DEG/S 結在此情形，卻沒有 MCO。

(b) 在 Sm-s 結之 Sm 區靠近 Sm-s 結處形成一有限的磁障區，(Sm /magnetic barrier /s) (NBS) 的電導隨磁場變化的情形跟 (Sm /magnetic barrier /sm) (NBN) 的電導作一比較。最顯著之處，就 NBN 來說，不等於零的電導起始點是隨磁場變化而變化，對 NBS 來說，卻幾乎不變。此主要來自 Andreev 反射，此說明本系統可作為偵測 Andreev 反射。

4. 以第一性原理計算鐵的鏈及奈米線的電子結構及磁性。

以第一性原理自洽的 FLAW 方法計算 Fe 線性鏈、fcc 及 bcc 納米線的電子及磁結構。正如 Weiner 及 Freeman(1983 年)所預期的，對線性過渡金屬鏈，會造成劇改變它們的特性：van Hove 奇異點引起高密度，大的 s-d 交換分裂及填滿的 majority d bands 及強烈地增大鐵的磁矩，這些鐵的磁矩相依著它們的配位數。這些不尋常及獨特的性質預期在實驗上會出現特有的特徵。

5. 二維光子晶體可移動的柱子對完全頻隙的可調性及敏感性。

以平面波法針對正方介質棒在空氣中擺置成二維四方格子，且在每一單胞中插入圓柱介質形成的結構作頻帶結構計算。計算的

結果顯示在一給定的填充因子及圓柱直徑與方柱邊常之比，圓柱偏離單胞中央位置 $s=0.015a$ 內完全能隙幾乎不變，但在追求最大完全能隙的印值時，稍微增加 s 值，完全能隙會快速的下降。這種對完全能隙的敏感性是至今未被發現及提及的現象。在光子晶體的製程中，會有極大的助益。同時，我們也提供以移動圓柱的辦法，可達到微調完全能隙的大小。

四、未來展望與工作

在未來新的三年期計畫的工作，不僅將延續我們在此一三年期的計畫所完成的工作。尤其，我們也在新的三年計畫的第一年中完成把計算光子晶體能帶結構的平面波改成給定 ω (頻率) 值可得出所有 k^{ω} 的本徵值，包括 k 可為複數。因此，在新的三年計畫裡，可完成超導體的光子晶體表面及能帶的計算，尤其介電常數及磁的 susceptibility 依賴頻率及為負值的情形。另外，針對週期釘扎問題，將會有重大的進展。

五、感謝詞

本報告三年期計畫成果，乃承蒙國科會長期支持高溫超導計畫研究，才有今日較為扎實的基礎，在此真誠地感謝。同時對參與研究的研究生許永昌、劉文龍及李文德副教授、顧本源客座訪問教授等的辛勤工作和討論，使此三年期計畫得以順利推展，在此一併感謝。

六、參考文獻：

1. Tzong-Jer Yang, Wen-Der Lee, *Physica C* 341-291(2000).
2. Shigeki Sakai, *Phys. Rev.* B47, 9042 (1993).
3. Siow-Fon Tsay, Shou-Yih Wang, and T. J. Watson Yang, *Phys. Rev.* B43, B080 (1991).
4. G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev.* B25, 4515 (1982); G. E. Blonder and M. Tinkham, *Phys. Rev.* B27, 112(1983).
5. Y. Takagaki and K. H. Ploog, *Phys. Rev.* B58, 7162 (1998); Y. Asano, *Phys. Rev.* B62, 7447 (2000).
6. T. Schneider, Z. Gedik, and S. Ciraci, *Z. Phys.* B83, 313 (1992).
7. Shiow-Fon Tsay, Shou-Yih Wang, and T. J. Watson Yang, *Phys. Rev.* B43, 13080 (1991).
8. Y. Takagaki, *Phys. Rev.* B57, 4009 (1998).
9. A. F. Andreev, *Sov. Phys. JEPT* 24, 1019 (1967).
10. Y. Asano, *Phys. Rev.* B61, 1732 (2000); Y. Asano and Y. Yuito,

- Phys. Rev. B62, 7477 (2000).
11. Y. Takane, H. Ebisawa, J. Phys. Soc. Jpn 61, 1685 (1992);
ibid 2858 (1992).
 12. Ben-Yuan Gu, Yao Lu, and Tzong-Jer Yang, Eur. Phys. J. B26,
493(2002) and references therein.
 13. Young-Chung Hsue, Tzong-Jer Yang, Ben-Yuan Gu, and Jian Wang,
Eur. Phys. J. B34, 237 (2003).
 14. Yong-Chung Hsue, Tzong-Jer Yang, and Ben-Yuan Gu, submitted
to J. Phys. Soc. Jpn.
 15. Tzong-Jer Yang, Yu-Jun Zhao, and A. J. Freeman, to be
published in J. of Magnetism and Magnetic Materials.
 16. M. Weinert and A. J. Freeman, J. Mag. Magn. Mater. 38, 23
(1983).
 17. E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Phys.
Rev. B24, 864 (1991), and references therein.
 18. J. Hong and R. Q. Wu, Phys. Rev. B67, 20406 (R) (2003).
 19. R. Q. Wu, D. S. Wang, A. J. Freeman, J. Mag, Magn. Mater. 132,
103(1994).
 20. Weng-Long Liu, Tzong-Jer Yang, Pi-Gang Luan, and Ben-Yuan

Gu, to be published in J. of Appl. Physics.

21. E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987).
22. S. John, Phys. Rev. Lett 58, 2486 (1987).
23. S. Sakoda, optical Properties of Photonic Crystals
(Springer-Verlag, 2001).
24. X. H. Wang, B. Y. Gu, Z. Y. Li, and G. Z. Yang, Phys. Rev. B60,
11417 (1999).
25. R. Z. Wang, X. H. Wang, B. Y. Gu, and G. Z. Yang, J. Appl. Phys.
90, 4307 (2001).
26. X. D. Zhang, Z. Q. Zhang, L. M. Li, C. Jin, D. Zhang, B. Man,
and B. Cheng, Phys. Rev. B61, 1892 (2000).