

平成18年度 修士学位論文

超伝導量子渦系系における局所電子状態密度に関する  
解析的理論

永井佑紀

東京大学大学院  
理学系研究科 物理学専攻  
56079

平成19年1月5日



# 目次

第 1 章 序論	7
1.1 はじめに	7
1.1.1 第二種超伝導体	7
1.1.2 渦糸	7
1.1.3 渦糸と秩序変数	7
1.1.4 渦糸コアにおける Andreev 束縛状態	8
1.1.5 状態密度と走査型トンネル顕微鏡	8
1.1.6 異方的超伝導体とその対称性の同定	9
1.1.7 異方的超伝導体における渦糸コアの Andreev 束縛状態	11
1.1.8 渦糸周りの局所電子状態密度分布とペアポテンシャルの異方性	13
1.1.9 局所電子状態密度分布の数値計算	13
1.1.10 局所電子状態密度分布の解析計算	15
1.2 本論文の目的と概要	15
1.2.1 本論文の目的	15
1.2.2 本論文の概要	16
1.3 Green 関数法	16
1.3.1 はじめに	16
1.3.2 第二量子化における物理量の計算	17
1.3.3 Green 関数の定義	18
1.3.4 有限温度における Green 関数	19
1.3.5 Green 関数を使っての物理量の計算	20
1.3.6 自由粒子の温度 Green 関数	20
1.3.7 Wick の定理	21
1.3.8 Green 関数の運動方程式	22
1.4 Gor'kov 方程式の導出	23
1.4.1 はじめに	23
1.4.2 BCS ハミルトニアン	23
1.4.3 超伝導状態における Wick の定理	24
1.4.4 Gor'kov 方程式	24
1.4.5 Green 関数と Gor'kov 方程式の行列表示	26
1.4.6 一様系における解	31
1.5 準古典近似と Eilenberger 方程式	31
1.5.1 はじめに	31
1.5.2 準古典近似	32
1.5.3 磁場がある場合の Gor'kov 方程式	34
1.5.4 Eilenberger 方程式の導出	35
1.5.5 一様系における解	36
1.5.6 規格化条件	38

<b>第 2 章</b>	<b>渦糸周りの局所電子状態密度の解析的理論</b>	<b>39</b>
2.1	はじめに	39
2.1.1	既存の理論の問題	39
2.1.2	本章の目的	39
2.2	Riccati 方程式	40
2.2.1	triplet-pairing の場合の Eilenberger 方程式	40
2.2.2	Projection Method	40
2.3	二次元的フェルミ面	42
2.3.1	座標系の設定	42
2.3.2	初期条件	43
2.3.3	Kramer-Pesch 近似	44
2.3.4	局所状態密度	46
2.3.5	LDOS の発散の強さ	48
2.4	三次元的等方的フェルミ面	50
2.4.1	座標系の設定	50
2.4.2	ペアポテンシャルの座標変換	52
2.4.3	Green 関数の表式	52
2.4.4	LDOS の発散条件	52
2.5	異方的フェルミ面への拡張	57
2.5.1	物理量	57
2.5.2	Eilenberger 方程式	58
2.5.3	Riccati 方程式と温度 Green 関数	58
2.5.4	状態密度	59
2.6	局所電子状態密度	59
2.6.1	NbSe <sub>2</sub> : スピン一重項二次元的フェルミ面	59
2.6.2	YNi <sub>2</sub> B <sub>2</sub> C: スピン一重項三次元的フェルミ面	60
2.6.3	異方的フェルミ面を持つ系	63
2.7	本章の定式化について	64
2.8	まとめ	66
<b>第 3 章</b>	<b>空間反転対称性のない超伝導体: CePt<sub>3</sub>Si の場合</b>	<b>67</b>
3.1	はじめに	67
3.1.1	CePt <sub>3</sub> Si	67
3.1.2	さまざまな実験結果	68
3.1.3	スピン軌道相互作用	72
3.1.4	スピン一重項とスピン三重項の混成	72
3.1.5	ペアポテンシャルの対称性	73
3.1.6	本章の目的	73
3.2	モデル	74
3.2.1	混合 s+p 波モデル	74
3.2.2	Rashba 型スピン軌道相互作用	74
3.2.3	Eilenberger 方程式	74
3.2.4	Riccati 方程式	75
3.3	Green 関数の解析的導出	75
3.3.1	スピン軌道相互作用項のある Riccati 方程式を解く方法	75
3.3.2	Eilenberger 方程式を対角化して解く方法	83

3.4	局所電子状態密度	86
3.4.1	$c$ 軸に平行に磁場をかけた場合	87
3.4.2	$c$ 軸に垂直に磁場をかけた場合	87
3.5	対称性の同定	89
3.6	まとめ	90
<b>第 4 章</b>	<b>異方的フェルミ面を持った異方的 <math>s</math> 波超伝導 : <math>\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}</math> の場合</b>	<b>91</b>
4.1	はじめに	91
4.1.1	$\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$	91
4.1.2	超伝導発現機構と対称性	92
4.1.3	STM/STS 実験による局所電子状態密度分布と対称性の同定	92
4.1.4	バンド構造	93
4.1.5	ネスティングベクトルに関連する実験	98
4.1.6	本章の目的	98
4.2	ノードの位置	101
4.2.1	ノードの位置に関する理論	101
4.2.2	ノードの位置に関する実験	102
4.2.3	実験の解釈	104
4.3	これまでの研究において注意しなければならないこと	105
4.3.1	理論予想との比較とノードの位置の根拠について	105
4.3.2	実験の解析方法について	105
4.3.3	STM の実験結果	105
4.4	異方的フェルミ面での渦糸コア近傍での局所電子状態密度	107
4.4.1	LDOS で何がわかるか	107
4.4.2	異方的フェルミ面とペアポテンシャル	107
4.4.3	それぞれのケースの計算結果	108
4.4.4	得られた LDOS の物理的解釈と STM/STS 実験	115
4.4.5	LDOS の計算から得られたこと	118
4.5	異方的フェルミ面での Doppler Shift 法による状態密度	119
4.5.1	この節の目的	119
4.5.2	Doppler Shift 法における準古典 Green 関数	119
4.5.3	ペアポテンシャルの仮定	119
4.5.4	計算結果	119
4.6	議論とまとめ	121
4.6.1	比熱、熱伝導率、STM 実験から言えること	121
4.6.2	ポイントノード形成のメカニズム	121
4.6.3	他のポロカーバイドの実験との関連	121
4.6.4	ゼロバイアスでの STM 像の解釈	123
4.6.5	本章のまとめ	123
<b>第 5 章</b>	<b>まとめと今後の展望</b>	<b>125</b>
	謝辞	127
	参考文献	129



# 第1章 序論

## 1.1 はじめに

### 1.1.1 第二種超伝導体

超伝導体は内部に磁場を侵入させず、完全反磁性の性質を持つ。これはマイスナー効果と呼ばれている<sup>1)</sup>。マイスナー効果は、常伝導状態になり磁場を侵入させることによる自由エネルギーの得よりも超伝導状態での自由エネルギーの得が大きい状況において生じる現象である。そのため、ある程度以上の磁場を印加をすると、磁場を侵入させたほうがエネルギー的に得になり超伝導状態は破壊される。このとき、多くの単体金属では「中間状態 (intermediate state)」と呼ばれる超伝導領域と常伝導領域の層状構造が現れる。これは、磁場が一部侵入している常伝導超伝導界面の自由エネルギーの得が大きいために、常伝導超伝導界面の面積が最大になるように超伝導領域と常伝導領域が生じる故に起こると考えられている。

1957年、Abrikosovによって異なる種類の超伝導体が存在することが見出された。超伝導状態のGL (Ginzburg-Landau) コヒーレンス長  $\xi$  と磁場侵入長  $\lambda$  の間に  $\lambda/\xi > 1/\sqrt{2}$  という関係が成り立つ物質においては、常伝導超伝導界面が存在すると自由エネルギーを損するため、常伝導超伝導界面の面積が最小になるように常伝導領域ができるだけ小さくなるように磁場が侵入する。このとき、超伝導体には一つの常伝導領域に一つの量子化された磁場 (量子化磁束、渦糸、vortex) が侵入する「混合状態 (mixed state)」が生じる。量子化磁束が侵入を始める磁場を下部臨界磁場、完全に超伝導状態が破壊される磁場を上部臨界磁場と呼ぶ。このような種類の超伝導体は第二種超伝導体と呼ばれている。現在、さまざまな物質が超伝導状態となることがわかっているが、その多くはAbrikosovが見出した第二種超伝導体である。

### 1.1.2 渦糸

下部臨界磁場以上の磁場において、第二種超伝導体には渦糸が複数侵入していることになるが、それらの渦糸同士に相互作用が働くために、渦糸は格子状に配置される (図1.1)。多くの物質においては三角格子 (Abrikosov格子) が生まれ、その他の物質では四角格子等が生まれる。一部の物質 (YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C等) においては、磁場の強弱によって三角格子から四角格子への転移 (square-to-hexagonal transition) が見られる<sup>2)</sup>。

渦糸に関連する現象としては、銅酸化物高温超伝導体などの層状超伝導体では、欠陥を導入すると欠陥が渦糸に対するトラップポテンシャルとして働き Vortex glass 相が生じる、等が知られている<sup>3)</sup>。

また、近年実験理論両面から盛んに研究されている希薄原子気体の BEC (Bose-Einstein condensation) でも渦糸 (運動量を量子化した渦) が観測され、Abrikosov格子、三角格子、渦糸格子の融解等について議論が重ねられている。

渦糸の量子化はマクロな系での量子効果の一つであり、様々な系 (超伝導体、<sup>3</sup>He、<sup>4</sup>He、希薄原子気体等) に現れ、これまで多くの研究が行われている。

### 1.1.3 渦糸と秩序変数

超伝導状態を特徴付ける秩序変数は Cooper pair の波動関数である。この秩序変数は、バルクの典型的超伝導体においては超伝導転移点で square-root で立ち上がり絶対零度で有限の値を持つ。超伝導転移点以下の温度では、電子間の引力がフェルミ面を不安定にさせ、電子は Cooper pair を作って凝縮する。このとき、フェルミエネ

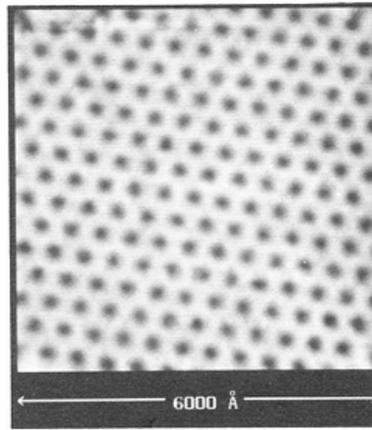


FIG. 2. Abrikosov flux lattice produced by a 1-T magnetic field in NbSe<sub>2</sub> at 1.8 K. The scan range is about 6000 Å. The gray scale corresponds to  $dI/dV$  ranging from approximately  $1 \times 10^{-8}$  mho (black) to  $1.5 \times 10^{-9}$  mho (white).

図 1.1: NbSe<sub>2</sub> における Abrikosov 格子。STM/STS による  $dI/dV$  の空間パターン<sup>5)</sup>。

ギー直上にギャップが開く。このギャップのことをペアポテンシャルと呼ぶ。ペアポテンシャルの空間変動のスケールは GL コヒーレンス長  $\xi$  で特徴付けられる。

第二種超伝導体において外部磁場が下部臨界磁場以上の場合、磁場は量子化され渦糸として超伝導体に侵入している。渦糸コア中心では超伝導状態が壊れておりペアポテンシャルはゼロとなっている。このとき、渦糸コア中心からの距離を  $r$  とすれば、ペアポテンシャルは  $r \sim \xi$  で回復する。また、GL 理論によれば、秩序変数が一価関数であるという要請から、渦度  $n$  の渦糸の回りを一周すると秩序変数の位相は  $2\pi n$  とならなければならない。超伝導状態における渦糸は、磁場の最小単位にまで量子化されているので渦度は 1 であり、位相は一周すると  $2\pi$  変化する。

#### 1.1.4 渦糸コアにおける Andreev 束縛状態

前述したように、渦糸コア中心においてはペアポテンシャルはゼロとなっている。そのため、絶対零度においても準粒子が励起できる状況になっている。ここで、渦糸コアを通る渦糸に垂直な平面上の一本の直線を考える。このとき、渦糸コアではペアポテンシャルがゼロであるためこの領域を常伝導状態とみなすとする、直線上には超伝導-常伝導-超伝導接合が存在しているとみなすことができる。このような SNS 界面が存在するとき、その界面には準粒子の Andreev 束縛状態が生じていることが知られている。

渦糸コアにおける Andreev 束縛状態は、有限の深さの井戸型ポテンシャル内の電子の束縛状態との対応を考えると物理的にイメージを理解しやすい。バルクでのペアポテンシャルよりも小さいエネルギーを持つ準粒子は、バルク領域では存在できず渦糸コア近傍にのみ存在できる。これは、ペアポテンシャルがポテンシャルの役割を果たし準粒子を束縛していると考えられる(図. 1.2 参照)。つまり、渦糸コア中心に Andreev 束縛状態が生じているので、外部からエネルギーを与えなくても実空間の状態密度分布は渦糸コア中心にピークを持つ。

#### 1.1.5 状態密度と走査型トンネル顕微鏡

前節で述べたように、混合状態にある超伝導体では渦糸コアにおいて Andreev 束縛状態が生じており、状態密度は空間分布を持つ。この空間分布は走査型トンネル顕微鏡 (scanning tunneling microscopy: STM) によって測定することができる(図.1.1)。この節では、走査型トンネル顕微鏡の原理について概略する。

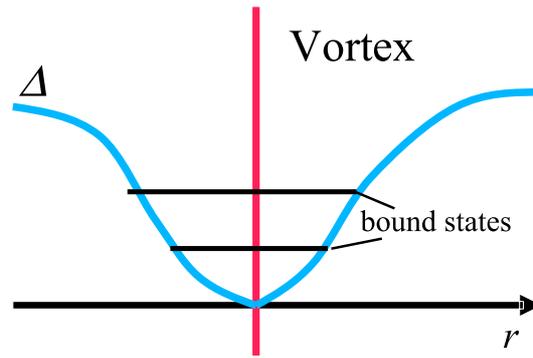


図 1.2: 渦糸コア近傍での束縛状態の模式図。

走査型トンネル顕微鏡は、プローブを物質表面に近づけることにより生じるトンネル電流を測定する装置である。超伝導体表面においては、電子は物質（超伝導状態）からプローブ（常伝導状態）へのトンネルを起こす。これは常伝導-超伝導トンネルであるから、その電流は

$$I_{ns} \propto N_1(0) \int_{-\infty}^{\infty} N_{2s}(E) [f(E) - f(E + eV)] dE \quad (1.1)$$

$$\sim \int_{-\infty}^{\infty} \frac{N_{2s}(E)}{N_2(0)} [f(E) - f(E + eV)] dE \quad (1.2)$$

と書くことができる。ここで、 $N_1$  と  $N_2$  はそれぞれプローブ（金属）と物質の状態密度、 $N_{2s}$  は超伝導状態の物質の状態密度である。また、微分コンダクタンス  $dI/dV$  は

$$\frac{dI_{ns}}{dV} \propto \int_{-\infty}^{\infty} \frac{N_{2s}(E)}{N_2(0)} \left[ -\frac{\partial f(E + eV)}{\partial(eV)} \right] dE \quad (1.3)$$

となる。ここで、 $-\partial f(E + eV)/\partial(eV)$  は  $E = -eV$  に鋭いピークを持つ釣鐘型関数であるので、 $T \rightarrow 0$  の極限を考えると

$$\left. \frac{dI_{ns}}{dV} \right|_{T=0} \propto \frac{N_{2s}(e|V|)}{N_2(0)} \quad (1.4)$$

となる。

以上から、走査型トンネル顕微鏡は  $dI/dV$  を測定することで超伝導表面での状態密度を直接的に測ることができるのである。

### 1.1.6 異方的超伝導体とその対称性の同定

近年、銅酸化物、有機物、重い電子系物質など、さまざまな物質が超伝導を示すことがわかっている。また、これらの物質の中には運動量空間でのペアポテンシャルに異方性があるものがあり、異方的超伝導体 (anisotropic superconductor) と呼ばれている。Cooper が示したように、フェルミ面上の電子間に引力が存在するとフェルミ面は不安定になる。登場当初の BCS 理論では超伝導状態での引力の起源として電子-格子相互作用を考えていたが、どのような種類の相互作用であれ電子間に引力が生じることが超伝導現象を引き起こす原因となる。引力の種類として考えられるものは、電子-格子相互作用のほかにスピン揺らぎ相互作用、電荷揺らぎ相互作用等がある。銅酸化物高温超伝導体はスピン揺らぎ相互作用によって超伝導状態になっているのではないかと考えられている。様々な引力相互作用があるために、Cooper pair にも様々な対称性が存在する。対称性の種類は、水素原子の波動関数の対称性を参考にして s 波、p 波、d 波、f 波などと名づけられている。これらは、Cooper pair の波動関数のスピン部分と空間部分の対称性によって分類される。スピン部分の波動関数を取りうる状態は、合成スピンの  $S = 0$  のスピン一重項 (spin singlet) と  $S = 1$  のスピン三重項 (spin triplet) に分けられる。 $S = 0$  の場合、フェ

ルミオンの交換関係から空間部分の波動関数は偶であることが要求され、相対角運動量  $L$  が偶数でなければならない。 $L = 0$  が s 波、 $L = 2$  が d 波と呼ばれる。次に、 $S = 1$  の場合は空間部分の波動関数は奇であり  $L = 1$  である場合は p 波と呼ばれている。単体金属に代表される従来型超伝導体 (conventional superconductor) と呼ばれる物質は等方的 s 波超伝導体である。このとき、スピンアップとスピンドアウンの電子が Cooper pair を作る。「等方的」とは、ペアポテンシャルが波数ベクトルに依らない、つまりフェルミ面上に等方的にギャップが開いている状況を指す。また、フェルミ面上の特定箇所のギャップがゼロとなっている場所をノードと言い、ノードはその形状によってラインノード、ポイントノードと呼ばれる。そして、ノードを持つ超伝導体のことを非従来型超伝導体 (unconventional superconductor) と言う<sup>4)</sup>。銅酸化物高温超伝導体はラインノードを持ち d 波の対称性を持つと考えられており、非従来型超伝導体の一種である。その他に非従来型超伝導体の例を挙げると (括弧内は予想される対称性)  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  (カイラル p 波)、空間反転対称性のない重い電子系超伝導体  $\text{CePt}_3\text{Si}$  (ラインノードを持つ s+p 波)、ボロカーバイド  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  (ポイントノードを持つ異方的 s 波) 等があり、それぞれ特異な物性を示しており興味深い。このように様々な非従来型超伝導体が発見されており、実験的・理論的に盛んに研究されている。本論文において主に取り上げる物質は  $\text{CePt}_3\text{Si}$  と  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  である。それぞれ第3章、第4章で取り上げ詳述する。

超伝導の秩序変数の対称性を同定するための実験方法は複数ある。例として挙げれば、NMR による  $T_c$  直下での  $T_1^{-1}$  の Hebel-Slichter ピークの有無、低温での比熱や熱伝導率の温度依存性のべき、STM/STS による無磁場バルク超伝導体の  $dI/dV$  特性、比熱や熱伝導率の磁場方向依存性等がある。ここでは、比熱の温度依存性のべきによってペアポテンシャルの異方性を判断する方法について概略することにする。

まず、常伝導金属の比熱の温度依存性を考える。常伝導金属の比熱  $C_{\text{normal}}$  は低温において

$$C/T = \text{const.} \quad (1.5)$$

となることが知られている。常伝導状態とは、フェルミ面上のいたるところでギャップがつぶれている状態と考えることができ、フェルミ面上のいたるところで余分なエネルギーなしで準粒子を励起させることができる状態であるとみなすことができる。一方、等方的 s 波超伝導体においてはフェルミ面上すべてにギャップ  $\Delta$  が開いている。つまり、 $k_B T > \Delta$  となる温度にならなければ準粒子はほとんど励起できない。つまり、比熱  $C_{\text{Full}}$  は  $T_c$  から指数関数的に減少する関数となる。

では、ラインノード、ポイントノードをもつ超伝導体の場合はどうなるであろうか。フルギャップ、ラインノード、ポイントノードをもつ超伝導体のフェルミ面とギャップの模式図を図.1.3 に示す。

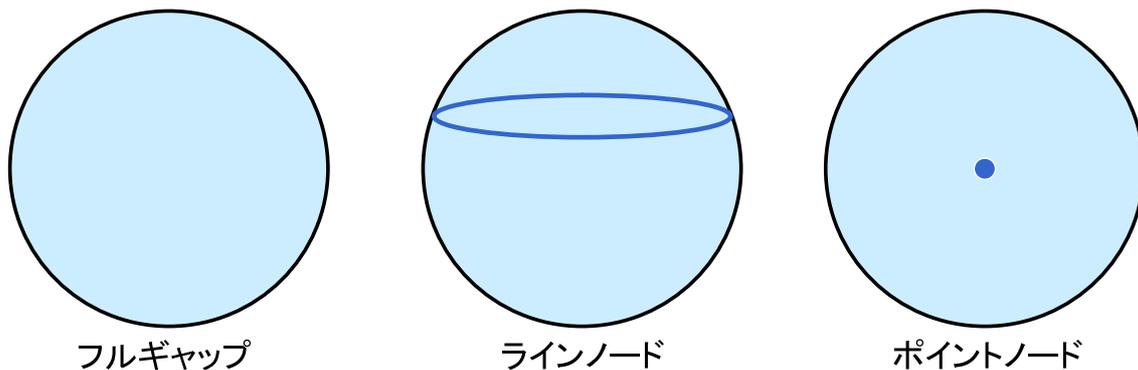


図 1.3: フルギャップ、ラインノード、ポイントノードをもつ超伝導体のフェルミ面とギャップの模式図。濃い青色の領域がギャップがつぶれている領域であるとした。

ラインノードの場合 ラインノードとして、d 波超伝導体を考える。d 波超伝導体のノード近傍でのギャップの運動量空間依存性は図.1.4 のようになり、空間座標に対して一次で立ち上がる形 (ライトコーン型) をしている。そ

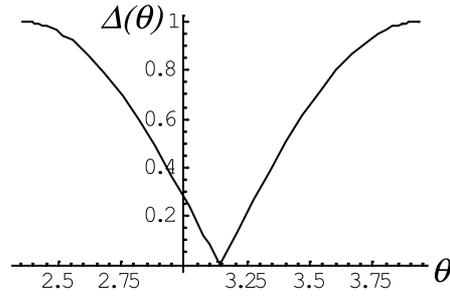


図 1.4: d 波超伝導体におけるギャップの運動量空間依存性の模式図。

れ故に、ある温度ゆらぎ  $k_B T$  があるときに準粒子が生じうる面積  $S_{\text{LineNodes}}$  は

$$S_{\text{LineNodes}} \sim T \quad (1.6)$$

であり、フェルミ面すべてとの面積比  $1 : S_{\text{LineNodes}}$  を考えると比熱  $C_{\text{LineNodes}}$  の温度依存性は

$$C_{\text{LineNodes}}/T \sim T \quad (1.7)$$

となる。

ポイントノードの場合 ポイントノードの場合も、ノード近傍において、ギャップがラインノードギャップと同様にライトコーン型の運動量空間依存性を持っているとする。このとき準粒子が生じうる面積  $S_{\text{PointNodes}}$  は

$$S_{\text{PointNodes}} \sim T \times T = T^2 \quad (1.8)$$

であり、フェルミ面すべてとの面積比  $1 : S_{\text{PointNodes}}$  を考えると比熱  $C_{\text{PointNodes}}$  の温度依存性は

$$C_{\text{PointNodes}}/T \sim T^2 \quad (1.9)$$

となる。

このように、低温での比熱の温度依存性のべきに着目することでギャップノードの形状を推定することができる。しかしながら、比熱の温度依存性ではギャップノードがフェルミ面上のどこにあるのかまではわからない。ペアポテンシャルの異方性をそのノードの位置も含めて同定するには、フェルミ面上における角度分解能がある実験手段を用いなければならない。角度分解能のある実験手段として、比熱・熱伝導率の磁場方向依存性、超音波吸収等があるが、次小節では渦糸の STM 観測について述べる。

### 1.1.7 異方的超伝導体における渦糸コアの Andreev 束縛状態

渦糸コアには準粒子の Andreev 束縛状態が生じており、ペアポテンシャルに異方性がある場合には Andreev 束縛状態にその効果が現れる。Andreev 束縛状態は有限井戸型ポテンシャルにおける電子の束縛状態の問題として考えると理解しやすいことは §1.1.4 で述べた通りである。異方的超伝導体においては、準粒子が感じるペアポテンシャルの大きさはフェルミ面の位置に依る。つまり、井戸型ポテンシャルで言えばポテンシャル井戸の深さが準粒子ごとに異なっている状況であると考えられる (図.1.5)。有限井戸型ポテンシャル内に束縛された電子の波動関数は、ポテンシャルの高さが低いほど井戸の外に染み出す。これは、ギャップノード付近の準粒子が最も外に広がっており、ギャップが大きければ大きいほどコア中心に束縛されていることを意味している。

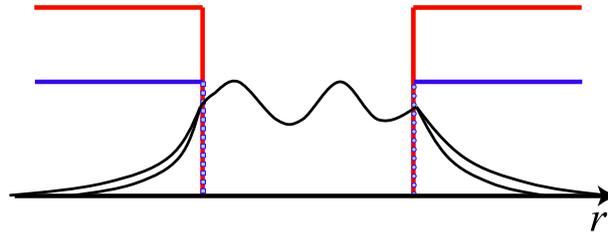


図 1.5: 有限井戸型ポテンシャルとの対応関係。ギャップを小さく感じる準粒子ほどポテンシャルが低い井戸に束縛された電子だとみなすことができる。赤線：ギャップを大きく感じる準粒子のポテンシャルに対応。青線：ギャップを小さく感じる準粒子のポテンシャルに対応。黒線：波動関数。

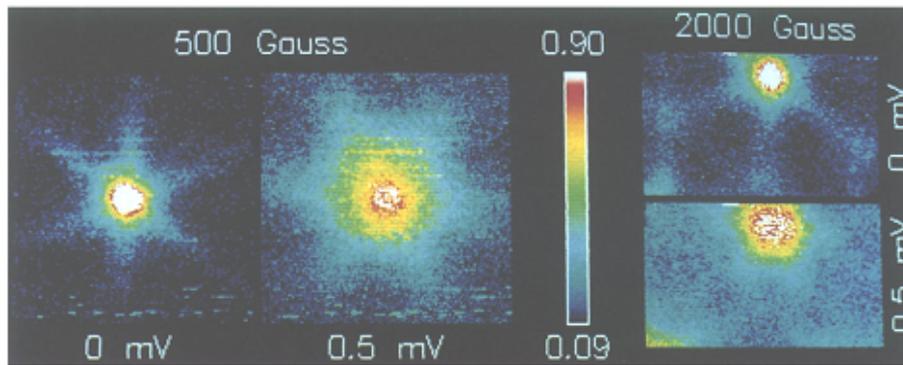


FIG. 4. Simultaneously taken  $XY$  images of  $dI/dV(0 \text{ mV}, x, y)$  and  $dI/dV(0.5 \text{ mV}, x, y)$  with  $B=500 \text{ G}$  and the same for  $2000 \text{ G}$ . The width of all images is  $1500 \text{ \AA}$ . Differential tunneling conductance of  $0.9$  and larger in normalized units is shown as white.

図 1.6: NbSe<sub>2</sub> における STM による  $dI/dV$  の空間パターン<sup>9)</sup>。

### 1.1.8 渦糸周りの局所電子状態密度分布とペアポテンシャルの異方性

最初に実験的に渦糸コア近傍の局所電子状態密度の異方的パターンを観測したのは Hess らである<sup>9)</sup>。彼らは NbSe<sub>2</sub> において六回回転対称性をもつ星型パターンを観測した (図.1.6)。Hess らによる NbSe<sub>2</sub> の STM 観測を受けて、Gygi と Schlüter や Hayashi らによって数値計算が行われた<sup>10, 11)</sup>。Hayashi らの数値計算結果を図. 1.7 に示す。図. 1.7 と Hess らの実験 (図. 1.6 の右端) を比較し、Hayashi らは NbSe<sub>2</sub> の渦糸周りに現れる六回回転対

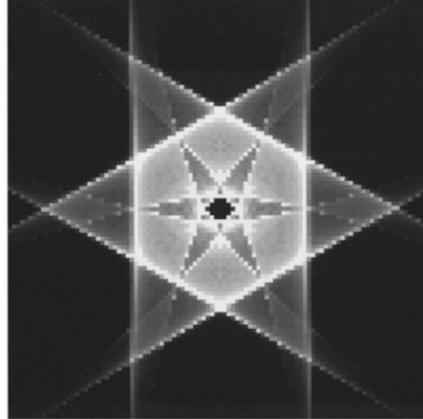


FIG. 9. The LDOS  $N(E, r)$  which is obtained by integrating the direction-dependent LDOS  $N(E, r, \theta)$  over  $\theta$ , where  $E=0.5$ ,  $\eta=0.001$ , and  $6\xi_0 \times 6\xi_0$  is shown.

図 1.7: Hayashi らの数値計算による NbSe<sub>2</sub> の渦糸コア近傍での局所電子状態密度分布。幅は  $6\xi_0 \times 6\xi_0$  である。

称の星型パターンはペアポテンシャルの異方性から理解できることを示した<sup>11)</sup>。つまり、STM/STS 実験というのは、ペアポテンシャルの異方性を探るよいツールになりうるのである。

### 1.1.9 局所電子状態密度分布の数値計算

理論的には、非 s 波超伝導体の渦糸周りの LDOS を最初に得たのは Schopohl と Maki であり、彼らは準古典理論に基づく Riccati formalism を用いて数値的に d 波と s 波の場合の LDOS を計算した<sup>12)</sup> (図. 1.8)。その後、Ichioka らが自己無撞着な数値計算を d 波超伝導に対して行い、Maki らと同様な LDOS を得ている<sup>13)</sup>。また、このとき得られた十字形の LDOS パターンはエネルギーが小さくなると 45 度回転した (図. 1.8(a) と (d) を参照)。

Riccati formalism というのは、Ashida ら<sup>14)</sup> が超伝導常伝導金属界面における境界問題を考える上で開発した手法である<sup>15)</sup>。Ashida らの Riccati formalism をより見通しよくしたのは、Schopohl である。Schopohl も同様の手法を開発している<sup>16)</sup>。Schopohl が用いた手法は一見すると Adachi らの手法とは異なるように思えるが、全く等価な手法である。さらに、この Riccati formalism を非平衡の場合に拡張したのは Eschrig であり<sup>17)</sup>、その際、Shelankov によって開発された projection operator formalism を用いている<sup>18)</sup>。

LDOS に関する数値的な研究は多くあるが、それらは通常多くの machine-time が必要である。また、異方的三次元フェルミ面と異方的なペアポテンシャルを持つ超伝導体等、より複雑な系を扱うのは難しい。したがって、解析的理論を構築することは、数値計算ではできない領域を研究できるという意味で重要である。数値計算によって得られた図. 1.7、図. 1.8、図. 1.9 等の LDOS は空間的なパターンを持ち、それらは何らかのペアポテンシャルの情報を反映しているはずであるが、パターンの起源の説明を行うことは一般的に難しい。そのため、解析的理論によって LDOS の空間パターンを解析し解釈することは重要である。

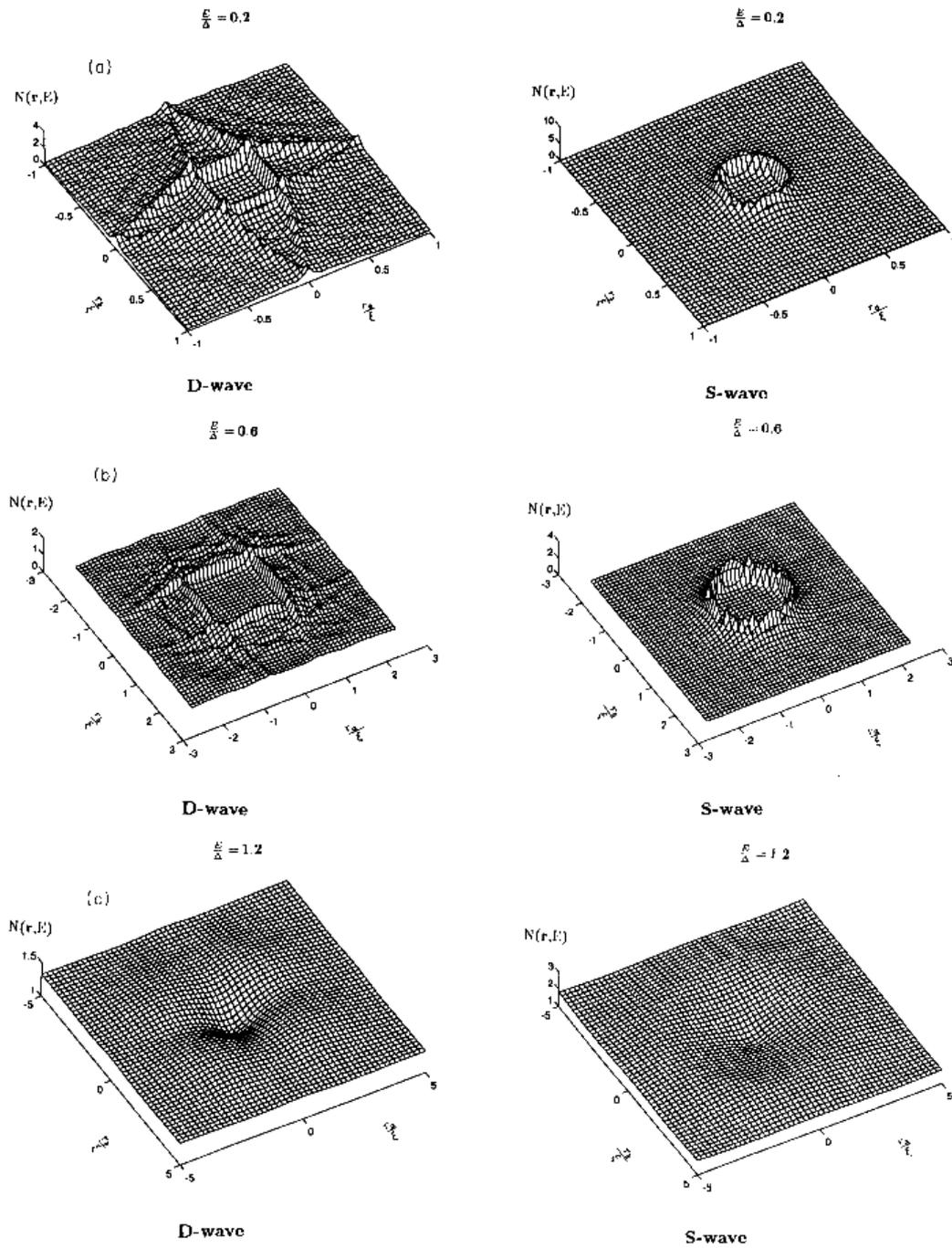


FIG. 1. (a) Local density of states  $N(r, E)$  vs  $r = r_a \hat{a} + r_b \hat{b}$  for  $E/\Delta(T) = 0.2$  for  $d$ - and  $s$ -wave pairing. (b) Local density of states  $N(r, E)$  vs  $r = r_a \hat{a} + r_b \hat{b}$  for  $E/\Delta(T) = 0.6$  for  $d$ - and  $s$ -wave pairing. (c) Local density of states  $N(r, E)$  vs  $r = r_a \hat{a} + r_b \hat{b}$  for  $E/\Delta(T) = 1.2$  for  $d$ - and  $s$ -wave pairing.

図 1.8: Schopohl と Maki による数値計算による LDOS パターン<sup>12)</sup>。左: d 波。右: s 波。

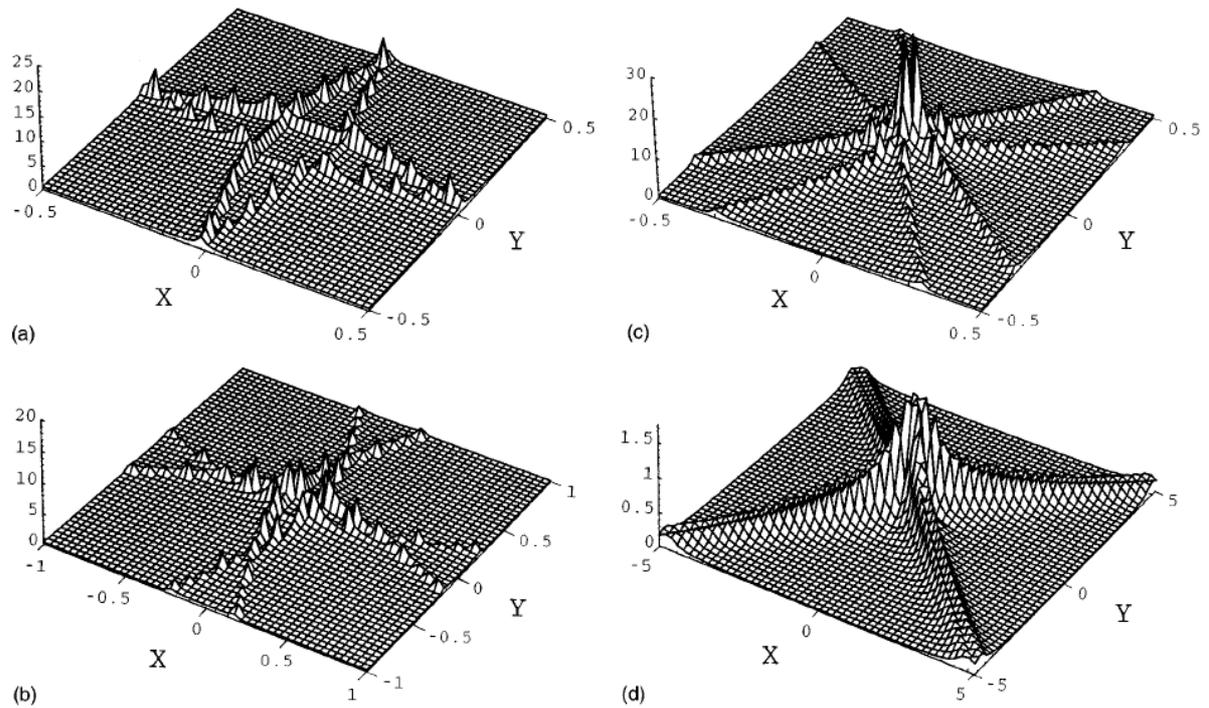


図 1.9: Ichioka らによる数値計算による LDOS パターン<sup>13)</sup>。エネルギーは (a) が一番大きく (d) が一番小さい。

### 1.1.10 局所電子状態密度分布の解析計算

Caroli らは、Bogoliubov-de Gennes 方程式を解析的に解くことで、等方的  $s$  波超伝導体の渦糸コア近傍での束縛状態に関する研究を行った<sup>19)</sup>。また、Kramer と Pesch は、渦糸コア近傍の低エネルギー領域における準古典 Green 関数を解析的に導出している<sup>20)</sup>。我々はこのときに用いられた近似を Kramer-Pesch approximation (KP 近似) と呼ぶことにする。この KP 近似の本質を Kramer と Pesch らの原著論文を読んで理解するのはなかなか難しい。KP 近似は、Riccati formalism による準古典方程式を考えることで理解しやすくなる。Riccati formalism を用いて方程式を書き下してみると、KP 近似は励起エネルギーと渦糸に対するインパクトパラメーターで展開した一次摂動と等価であることがわかる。Ueno は、KP 近似を用いて渦糸コア近傍の二次元と三次元超伝導体の LDOS を解析的に求めたが<sup>21)</sup>、三次元超伝導体に関する議論は不十分であり、三次元超伝導体の LDOS が明らかにされたとは言いがたい。

## 1.2 本論文の目的と概要

### 1.2.1 本論文の目的

近年の計算機の能力の向上により局所電子状態密度分布の数値計算が盛んに行われているが、いまだに多くの machine-time を必要とし、得られる LDOS パターンの物理的解釈は難しい。また、Ueno らが LDOS を解析的に求めているが<sup>21)</sup>、三次元的フェルミ面に関しては十分な議論が行われておらず、スピン-重項のペアポテンシャルにのみしか適用できない。そのため、空間反転対称性のない重い電子系超伝導体  $\text{CePtSi}_3$  のような三次元的フェルミ面と特異なペアポテンシャルを持つ物質を研究することはできない。また、Ueno の理論は等方的なフェルミ面を持つ系でのみ適用可能な理論なので、近年 STM 像が得られた<sup>27)</sup> 極めて異方的な三次元フェルミ面を持つポロカーバイド超伝導体  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  は、既存の理論ではまったく解析することができない。

よって、本論文では、任意の方向の磁場、任意の異方的ペアポテンシャル、任意の異方的フェルミ面を持つ二次元或いは三次元の超伝導体に適用可能な LDOS の解析的理論を構築することを目的とする。また、得られた解析的理論を用いて、いままで Ueno らの理論では解析不可能だった  $\text{CePt}_3\text{Si}$  や  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  の LDOS を計算する。 $\text{CePt}_3\text{Si}$  は空間反転対称性の欠如によりスピン軌道相互作用が強く、スピン一重項とスピン三重項が混成して  $s+p$  波状態が作られているのではないかとされている。 $\text{CePt}_3\text{Si}$  の STM 像はまだ実験的に得られていないが、もし  $s+p$  波混成シナリオが正しければ得られる LDOS パターンを計算しておくことで、今後このシナリオの妥当性を STM で検証することができる。 $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  はポイントノードを持つ  $s$  波超伝導であると考えられており、そのポイントノードの位置と起源が議論されている物質である。フェルミ面に極めて強い異方性があるが、いままで理論では等方的フェルミ面が仮定されて計算されてきた。したがって、本論文で得られた解析的理論を用いて、バンド計算によって得られたより現実的なフェルミ面を仮定した計算は有用である。このような計算を行わなければ、STM 実験の結果<sup>27)</sup>を解析して  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のペアポテンシャルの形を推定することはできないと考えられる。

## 1.2.2 本論文の概要

本論文は次のように構成されている。第2章では、渦糸コア近傍での局所電子状態密度 (LDOS) を Eilenberger 方程式をある近似のもと解析的に解く方法論について述べる。この理論は、スピン一重項、三重項問わず任意の対称性を持つ異方的ペアポテンシャル、任意の形状のフェルミ面、任意の磁場の方向において適用可能であり、二次元等方的フェルミ面スピン一重項異方的超伝導でしか適用できなかった Ueno らの理論を拡張した形となっている。この理論で得られる状態密度とは、渦糸コア近傍に生じる Andreev 束縛状態のことである。第3章では、空間反転対称性のない重い電子系超伝導体  $\text{CePt}_3\text{Si}$  における秩序変数対称性の同定方法を提案する。この物質は空間反転対称性がないためにスピン一重項と三重項の混合ペアリングが生じていると考えられており、第2章で述べた理論が任意の異方的ペアポテンシャルに適用できるということを具体的に示すよい例となっている。第4章では、ポイントノードと考えられているポロカーバイド超伝導体  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のポイントノードの位置を、その極めて強いフェルミ面異方性を考慮に入れた LDOS と STM 実験の結果を比較することで同定する。用いる異方的フェルミ面は第一原理計算によるバンド計算で得られるフェルミ面を用いる。また、異方的フェルミ面を考慮して比熱の磁場方向依存性の実験などの再解釈も行い、様々な実験結果と矛盾しないポイントノードの位置とそのノード形成メカニズムについての考察も行う。第5章において、今回得られた数々の研究成果についてまとめる。

なお、本論文は Journal of the Physical Society of Japan 75 (2006) 043706 と Journal of the Physical Society of Japan 75 (2006) 104701 に掲載された論文のまとめを第2章と第3章に含む。

## 1.3 Green 関数法

### 1.3.1 はじめに

この節では、多体問題を扱うための Green 関数の手法について概観する。有限温度の Green 関数は温度 Green 関数 (Matsubara Green 関数) と呼ばれ、凝縮系物理学、特に超伝導現象を記述する際に非常に強力な数学的ツールとなっている。BCS 理論を Green 関数法で定式化したのは Gor'kov である。得られた方程式は Gor'kov 方程式と呼ばれている。この方程式は秩序変数が空間的に変動している場合も記述でき、また、超伝導臨界温度近傍での現象論的方程式である Ginzburg-Landau 方程式 (GL equation) を導出することができる。Gor'kov 方程式の導出は §1.3 にて述べ、本章では基本となる Green 関数法について述べる。本章で概観した手法を用いて第二章以降の理論は構築されている。

### 1.3.2 第二量子化における物理量の計算

#### 第二量子化のおさらい

まず、生成消滅演算子を導入する。生成演算子  $a_k^\dagger$  は、真空状態に作用させたとき、ある量子数  $k$  を持つ軌道に電子をひとつ生成する役割を持つ。つまり、

$$a_k^\dagger|0\rangle = |k\rangle \quad (1.10)$$

とする。粒子数演算子を

$$n_k = a_k^\dagger a_k \quad (1.11)$$

とする。このとき、 $|k\rangle$  は規格化されており、

$$\langle k|k'\rangle = \delta_{kk'} \quad (1.12)$$

であり、 $\langle x|k\rangle = \varphi_k(x)$  とする。

また、ある場所  $x$  に粒子を生成消滅させる場の演算子

$$\psi(x) = \sum_k a_k \varphi_k(x) \quad (1.13)$$

を導入する。これは、形式的には一粒子波動関数と同じであるが、係数  $a_k$  が演算子であるところが異なっている。ある系に存在する全粒子数を求める演算子は

$$N = \sum_k a_k^\dagger a_k \quad (1.14)$$

である。ここで、

$$\psi^\dagger(x)\psi(x) = \sum_k \sum_{k'} a_k^\dagger a_{k'} \varphi_k^*(x) \varphi_{k'}(x) \quad (1.15)$$

であるから、式 (1.12) より

$$\int \sum_k \sum_{k'} a_k^\dagger a_{k'} \varphi_k^*(x) \varphi_{k'}(x) dx = \sum_k \sum_{k'} a_k^\dagger a_{k'} \delta_{kk'} \quad (1.16)$$

$$= \sum_k a_k^\dagger a_k \quad (1.17)$$

$$N = \int \psi^\dagger(x)\psi(x) dx \quad (1.18)$$

となり、全粒子数演算子を場の演算子で書くことができた。以上のことから考えて、ある物理量を求める演算子  $Q$  は、一粒子あたりの物理量の演算子  $q$  を用いて

$$Q = \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) q(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (1.19)$$

と定義することが可能である。ここで、空間は三次元であるとした。この定義が妥当であるかどうかは、期待値をとったときに、多体の量子力学の期待値と等しくなるかどうかをみることで判断することができる。

#### 基底状態での期待値

式 (1.19) の基底状態での期待値、あるいは統計力学的な平均値  $\langle Q \rangle$  は

$$\langle Q \rangle = \left\langle \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) q(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right\rangle \quad (1.20)$$

$$= \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') q(\mathbf{r}) \langle \psi^\dagger(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \rangle \quad (1.21)$$

である。ここで、 $\psi^\dagger(\mathbf{r}')$  と  $q(\mathbf{r})$  は変数が違うために、期待値の外へ出すことができた。この期待値が多体の量子力学の期待値と等しい<sup>6)</sup>。

### 1.3.3 Green 関数の定義

基底状態における Green 関数

Heisenberg 表示の演算子  $A(t)$ 、 $B(t')$  に対して、Green 関数は

$$G_{AB}(t, t') = -i\langle T[A(t)B(t')] \rangle \quad (1.22)$$

で定義される。ここで  $T$  は時間順序積であり、左から右へと時間  $t$  が減っていくように並べる。Fermi 粒子では、

$$T[(A_1 A_2 \dots A_n)] = (-1)^P A_j A_k \dots A_m \quad (1.23)$$

である。 $t_m < \dots < t_k < t_j$  であり、 $P$  は時間順序に置き換える際に必要なフェルミ粒子演算子同士の置換回数である。演算子が二つのみの場合は、

$$T[A(t)B(t')] = A(t)B(t')\theta(t-t') \mp B(t')A(t)\theta(t'-t) \quad (1.24)$$

とかける。第二項の因子  $\mp$  は、Bose 粒子であれば  $+$ 、Fermi 粒子であれば  $-$  である。また、 $\theta$  関数はステップ関数であり、

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases} \quad (1.25)$$

である。

式 (1.22) の両辺を  $t$  で微分することを考える。つまり、

$$\begin{aligned} -\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial t} G_{AB}(t, t') &= \langle \delta(t-t')A(t)B(t') \mp \delta(t-t')B(t')A(t) + \frac{i}{\hbar} \{ [H, A(t)]B(t')\theta(t-t') \mp B(t')[H, A(t)]\theta(t'-t) \} \rangle \\ &= \delta(t-t')\langle [A(t), B(t')] \mp \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle T[[H, A(t)]B(t')] \rangle \end{aligned} \quad (1.26)$$

となり<sup>1</sup>、移項して整理すると、

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{AB}(t, t') + \frac{i}{\hbar} \langle T[[A(t), H]B(t')] \rangle = \delta(t-t')\langle [A(t), B(t')] \mp \rangle \quad (1.27)$$

となる。ここで、 $[A, B]_{\mp}$  の  $-$  は Bose 型の演算子、 $+$  は Fermi 型の演算子の場合である。

演算子を、 $A = \psi(\mathbf{r})$ 、 $B = \psi^\dagger(\mathbf{r})$  と、場の演算子にとったときを考える。この場合の Green 関数を  $\mathbf{r}, t$  を  $x$ 、また  $\mathbf{r}', t'$  を  $x'$  とし、単に  $G(x, x')$  と書くことにする。すると式 (1.27) の右辺は

$$\delta(t-t')\langle [\psi(\mathbf{r}), \psi^\dagger(\mathbf{r}')] \mp \rangle = \delta(t-t')\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(x-x') \quad (1.28)$$

となる。また、

$$\frac{1}{\hbar} [\psi(\mathbf{r}), H] = L\psi(\mathbf{r}) \quad (1.29)$$

と書けば、式 (1.27) は

$$\left( i \frac{\partial}{\partial t} - L \right) G(x, x') = \delta(x-x') \quad (1.30)$$

となる。ここで、数学的な意味での Green 関数  $G(x, y)$  の定義を考える。数学では、

$$L \left( \frac{d}{dx}, x \right) f(x) = u(x) \quad (1.31)$$

という  $x$  の関数  $f(x)$  に対する線形微分方程式があるときに、

$$LG(x, y) = \delta(x-y) \quad (1.32)$$

<sup>1</sup> $\theta$  関数を微分すると  $\delta$  関数になることを用いた。

を満たす  $G(x, y)$  を  $L$  の Green 関数とよんだ。物理的な意味での Green 関数は、Schrodinger 方程式

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - L\right)\psi(x) = 0 \quad (1.33)$$

の数学的な意味での Green 関数の形をしている。しかし、一般に相互作用のある場合は、 $L$  は  $\psi$  について線形ではないので、(1.31) に対する Green 関数とは異なっている。もし、粒子間に相互作用がなければ、 $L$  は  $\psi$  について線形となり、式 (1.33) は自由な波動場の方程式になる。そして、式 (1.30) は  $G(x, x')$  がその数学的な意味での Green 関数になっていることを示している。ここで、数学的な意味での Green 関数  $G(x, y)$  は  $y$  から出る波、または  $y$  に入る波の  $x$  の振幅を表しており、波の伝播関数と呼ばれることもある。また、相互作用がある場合でも、

$$G(x - x') = -i\langle T[\psi(x)\psi^\dagger(x')] \rangle \quad (1.34)$$

は  $x'$  で生じた粒子が  $x$  で消えるまでのふるまいを表しており、この意味で粒子の伝播関数という意味を持っている。

また、式 (1.27) の方程式を満たすものは  $G_{AB}$  だけとは限らず、たとえば次の関数

$$G_{AB}^R(t, t') = -i\langle [A(t), B(t')]_{\mp} \rangle \theta(t - t') \quad (1.35)$$

$$G_{AB}^A(t, t') = i\langle [A(t), B(t')]_{\mp} \rangle \theta(t' - t) \quad (1.36)$$

も満たしている。 $G^R$  は  $t < t'$  では 0 で、 $t > t'$  でのみ 0 ではない。つまり、 $t'$  におきたこと ( $B$ ) がそれより後の時刻  $t$  で  $A$  に与える影響を表しており、遅延 Green 関数(retarded Green function) と呼ばれている。 $G^A$  はこれとは逆で先進 Green 関数(advanced Green function) と呼ばれている。これらは  $G$  と密接な関係にある。

### 1.3.4 有限温度における Green 関数

有限温度では、基底状態における期待値のかわりに、密度演算子

$$\rho = e^{-\beta(H - \mu N)} / \Xi, \quad \Xi = \text{Tr}[e^{-\beta(H - \mu N)}] \quad (1.37)$$

を使った平均値を使えばよい。この  $\rho$  を使った平均を

$$\text{Tr}[\rho \cdots] = \langle \cdots \rangle \quad (1.38)$$

と表せば、式 (1.35)、式 (1.36) と全く同じ式で  $\mathcal{G}^R$ 、 $\mathcal{G}^A$  が定義できる。この二つと数学的に密接な関係のあるものは、ただ単に密度演算子を用いて平均値をとったものではなく、時間の変数を  $t = -i\tau$ 、 $t' = -i\tau'$  として  $\tau$ 、 $\tau'$  として定義した関数がある。つまり、

$$A(\tau) = e^{\tau K / \hbar} A e^{-\tau K / \hbar} \quad (1.39)$$

$$K = H - \mu N \quad (1.40)$$

として

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau, \tau') = -\langle T_{\tau}[A(\tau)B(\tau')] \rangle \quad (1.41)$$

という関数を使うと便利なが多い。これを温度 Green 関数(thermal Green function) と呼ぶ。

また、 $A = \Psi(\mathbf{r})$ 、 $B = \Psi^\dagger(\mathbf{r})$  とおくと、温度 Green 関数は次の方程式

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}(x, x') = \delta^{(4)}(x - x') - \langle T_{\tau}[[K, \psi(x)]\psi^\dagger(x')] \rangle \quad (1.42)$$

を満たしている。

### 1.3.5 Green 関数を使つての物理量の計算

物理量を Green 関数を用いて表すことを考える。物理量は、式 (1.21) で表されている。Green 関数の定義は式 (1.22) であり、温度 Green 関数は式 (1.47) であるから、式 (1.24) を用いると、物理量  $Q$  の平均値  $\langle Q \rangle$  は

$$\langle Q \rangle = \pm i \int d^3r d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') q(\mathbf{r}) \lim_{t' \rightarrow t+} G(\mathbf{r}t : \mathbf{r}'t') \quad (1.43)$$

$$\langle Q \rangle = \mp \int d^3r d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') q(\mathbf{r}) \lim_{\tau' \rightarrow \tau+} \mathcal{G}(\mathbf{r}\tau : \mathbf{r}'\tau') \quad (1.44)$$

と書くことができる。ここで、上符号は Fermi 粒子、下符号は Bose 粒子である。また、 $\lim_{t' \rightarrow t+}$  は  $t'$  を  $t$  より大きくとって  $t$  に近づける意味であり、 $\lim_{\tau' \rightarrow \tau+}$  についても同様である。これを単に、

$$\langle Q \rangle = \pm i \int d^3r d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') q(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}t : \mathbf{r}'t+) \quad (1.45)$$

$$\langle Q \rangle = \mp \int d^3r d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') q(\mathbf{r}) \mathcal{G}(\mathbf{r}\tau : \mathbf{r}'\tau+) \quad (1.46)$$

と書くこともある。

このように、場の演算子を二個含む形で表すことのできる物理量は、Green 関数を知ることによって平均値を計算することができる。知りたい系はたいいて有限温度の系であるから、温度 Green 関数を知ることができれば系のさまざまな性質を調べることができる。

### 1.3.6 自由粒子の温度 Green 関数

相互作用のない系における温度 Green 関数を求めることにする。この小節以降ではすべて有限温度の系を考えることにし、「Green 関数」とは「温度 Green 関数」を指すことにする。また、温度 Green 関数を  $\mathcal{G}$  ではなく  $G$  と表記することにする。

Green 関数の定義は、

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) = -\langle T_\tau [\tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_1, \tau_1) \tilde{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}_2, \tau_2)] \rangle \quad (1.47)$$

である。ここで  $\tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, \tau)$  は

$$\tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, \tau) = e^{(\mathcal{H} - \mu\mathcal{N})\tau} \psi_\alpha(\mathbf{r}, \tau) e^{-(\mathcal{H} - \mu\mathcal{N})\tau} \quad (1.48)$$

である。時間順序積  $T$  を用いずにもう少し具体的に書くと、

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) = \langle -\tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_1, \tau_1) \tilde{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}_2, \tau_2) \theta(\tau_1 - \tau_2) \pm \tilde{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}_2, \tau_2) \tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_1, \tau_1) \theta(\tau_2 - \tau_1) \rangle \quad (1.49)$$

と書くことができる。また、

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \hat{n}_{\mathbf{p}, \alpha} \epsilon_0(\mathbf{p}), \quad \hat{\mathcal{N}} = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \hat{n}_{\mathbf{p}, \alpha} \quad (1.50)$$

とする。ここで  $\hat{n}_{\mathbf{p}, \alpha} = a_{\mathbf{p}, \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}, \alpha}$  である。このとき、生成消滅演算子は以下の関係を満たす。

$$e^{(\hat{\mathcal{H}}_0 - \mu\hat{\mathcal{N}})\tau} a_{\mathbf{p}, \alpha} e^{-(\hat{\mathcal{H}}_0 - \mu\hat{\mathcal{N}})\tau} = a_{\mathbf{p}, \alpha} e^{-(\epsilon_0(\mathbf{p}) - \mu)\tau} \quad (1.51)$$

$$e^{(\hat{\mathcal{H}}_0 - \mu\hat{\mathcal{N}})\tau} a_{\mathbf{p}, \alpha}^\dagger e^{-(\hat{\mathcal{H}}_0 - \mu\hat{\mathcal{N}})\tau} = a_{\mathbf{p}, \alpha}^\dagger e^{(\epsilon_0(\mathbf{p}) - \mu)\tau} \quad (1.52)$$

ここで、規格化された場の演算子

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}, \alpha} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}, \quad \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}, \alpha}^\dagger e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \quad (1.53)$$

を用意する。 $\tau = \tau_1 - \tau_2 > 0$  のとき温度 Green 関数は

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) = -\frac{1}{V} \left\langle \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \alpha, \beta} e^{i(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} e^{(\mathcal{H}_0 - \mu\mathcal{N})\tau} a_{\mathbf{p}_1, \alpha} e^{-(\mathcal{H}_0 - \mu\mathcal{N})\tau} a_{\mathbf{p}_2, \beta}^\dagger \right\rangle \quad (1.54)$$

となる。式 (1.51)、式 (1.52) を用い、 $\langle \dots \rangle$  が Gibbs の統計平均であることを注意して計算すると

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \alpha, \beta} e^{i(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} e^{-(\epsilon_0(\mathbf{p}_1) - \mu)\tau} \langle a_{\mathbf{p}_1, \alpha} a_{\mathbf{p}_2, \beta}^\dagger \rangle \quad (1.55)$$

となる。ここで、 $\langle a_{\mathbf{p}_1, \alpha} a_{\mathbf{p}_2, \beta}^\dagger \rangle \neq 0$  であるのは、 $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2$ 、 $\alpha = \beta$  のときだけであるから、

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) = -\frac{1}{V} \delta_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} e^{-(\epsilon_0(\mathbf{p}) - \mu)\tau} \langle a_{\mathbf{p}, \alpha} a_{\mathbf{p}, \alpha}^\dagger \rangle \quad (1.56)$$

となる。また、Gibbs の統計平均は

$$\langle a_{\mathbf{p}, \alpha} a_{\mathbf{p}, \alpha}^\dagger \rangle = \langle 1 \mp a_{\mathbf{p}, \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}, \alpha} \rangle = 1 \mp \langle a_{\mathbf{p}, \alpha}^\dagger a_{\mathbf{p}, \alpha} \rangle = 1 \mp n(\mathbf{p}) \quad (1.57)$$

と書くことができる。ここで上符号は Fermion、下符号は Boson である。また、 $n(\mathbf{p})$  は

$$n(\mathbf{p}) = \begin{cases} (e^{\beta(\epsilon_0(\mathbf{p}) - \mu)} + 1)^{-1} & \text{Fermion} \\ (e^{\beta(\epsilon_0(\mathbf{p}) - \mu)} - 1)^{-1} & \text{Boson} \end{cases} \quad (1.58)$$

である。以上から、 $V \rightarrow \infty$  として和を積分に直すと、 $\tau > 0$  のときの一粒子温度 Green 関数：

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) = -\delta_{\alpha\beta} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - (\epsilon_0(\mathbf{p}) - \mu)\tau} [1 \mp n(\mathbf{p})] \quad (1.59)$$

を得ることができる。また、 $\tau < 0$  の温度 Green 関数は

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2, \tau < 0) = \mp G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2, \tau + \beta > 0) \quad (1.60)$$

$$= \pm \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - (\epsilon_0(\mathbf{p}) - \mu)\tau} n(\mathbf{p}) \quad (1.61)$$

と書くことができる。ここで、 $G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2, \tau < 0) = \mp G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2, \tau + \beta > 0)$  という温度 Green 関数の性質を用いた。

### 1.3.7 Wick の定理

Wick の定理は、多体系を考える上でなくてはならない定理である。この小節では、有限温度における Wick の定理を導出する<sup>7)</sup>。

複数の演算子を含む相互作用のない系での統計平均を考える。

$$\langle T_\tau (\tilde{\psi}(1)\tilde{\psi}(2) \dots \tilde{\psi}^\dagger(3)\tilde{\psi}^\dagger(4) \dots) \rangle \quad (1.62)$$

それぞれの場の演算子は規格化されているとする。そのとき上式は生成消滅演算子で表すと、

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_n \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_m \dots \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{n'} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{m'} \dots \\ & \times \langle T_\tau (a_n(\tau_1) a_m(\tau_2) \dots a_{n'}^\dagger(\tau_3) a_{m'}^\dagger(\tau_4) \dots) \rangle \end{aligned} \quad (1.63)$$

という形になっている。統計平均は密度行列演算子を用いて書かれている。したがって、その行列要素が零ではない項が寄与をする。生成演算子と消滅演算子と同じ数だけ出てくるような行列要素は零ではない。たとえば、

$$\frac{1}{V} \sum_n \frac{1}{V} \sum_{m \neq n} \dots \langle T_\tau (a_n(\tau_1) a_m(\tau_2) \dots a_n^\dagger(\tau_3) a_m^\dagger(\tau_4) \dots) \rangle \quad (1.64)$$

のように、二つの生成消滅演算子が同じ量子状態におかれている行列要素は零ではない。このときすべての添え字は異なるとする。また、これの  $n$  と  $m$  の場所を置き換えて得られる行列要素も零ではない。他にも、

$$\frac{1}{V} \sum_n \frac{1}{V} \sum_{m \neq n} \cdots \langle T_\tau (a_n a_n a_m a_m \cdots a_n^\dagger a_n^\dagger a_m^\dagger a_m^\dagger \cdots) \rangle \quad (1.65)$$

のように、四つの生成消滅演算子が同じ量子状態におかれている行列要素は零ではない。どの場合も、生成消滅演算子の数だけ  $1/V$  という因子が存在する。

最終的に巨視的な系の統計平均を得たいので、 $V \rightarrow \infty$  である極限を考える。この極限をとるとき、量子状態に関する和は積分に直すことができる。つまり、

$$\frac{1}{V} \sum_n \cdots \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 p \cdots \quad (1.66)$$

のような変形を行うことができる。式 (1.64) においては、和の数と因子  $1/V$  の数は一致している。しかし、式 (1.65) においては、和の数より因子  $1/V$  の数の方が多い。このため、式 (1.64) 以外の行列要素は、 $V \rightarrow \infty$  で零になる。つまり、各量子状態の生成消滅演算子のトレースは、独立にとっても良いということになる。4つの演算子が含まれている例で言えば、

$$\begin{aligned} \sum^{(d)} \left[ T_\tau \exp \left( \beta(\Omega + \mu \hat{N} - \hat{H}) \right) a_n a_n^\dagger a_m a_m^\dagger \right] &= \sum^{(d)} \left[ T_\tau \exp \left( \beta(\Omega_n + \mu \hat{N}_n - \hat{H}_n) \right) a_n a_n^\dagger \right] \\ &\times \sum^{(d)} \left[ T_\tau \exp \left( \beta(\Omega_m + \mu \hat{N}_m - \hat{H}_m) \right) a_m a_m^\dagger \right] \end{aligned} \quad (1.67)$$

となるのである。このとき  $\sum^{(d)}$  は、あらゆる状態の和をとるという意味である。また、このような積で書くためには、ハミルトニアン  $\hat{H}$  が各量子状態のハミルトニアン  $H_n$  の和で書ける必要がある。したがって、上式は相互作用のない系でなければ厳密には成り立たない。相互作用がある系ではハミルトニアンに相互作用項があるために成り立たないのである。

また、上式を言い換えれば、 $\psi$  と  $\psi^\dagger$  のペアが非常にたくさんあるときの時間順序積の統計平均は、可能なすべての  $\psi\psi^\dagger$  の組み合わせの時間順序積の統計平均の和と等しい、ということである。このとき、各項の符号は、最初の組み合わせからその組み合わせまでの Fermi 演算子の置換回数が偶数であれば +、奇数であれば - である。これが Wick の定理と呼ばれているものである。

たとえば、四つの演算子が含まれている場合は、

$$\begin{aligned} \langle T_\tau \left( \hat{\psi}(1) \hat{\psi}(2) \hat{\psi}^\dagger(3) \hat{\psi}^\dagger(4) \right) \rangle &= \langle T_\tau \left( \hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(4) \right) \rangle \langle T_\tau \left( \hat{\psi}(2) \hat{\psi}^\dagger(3) \right) \rangle \\ &\mp \langle T_\tau \left( \hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(3) \right) \rangle \langle T_\tau \left( \hat{\psi}(2) \hat{\psi}^\dagger(4) \right) \rangle \end{aligned} \quad (1.68)$$

となる。これは最初  $\{(1), (2), (3), (4)\}$  であった組み合わせが、第一項は2回の置換により  $\{(1), (4), (2), (3)\}$  となり、第二項は1回の置換により  $\{(1), (3), (2), (4)\}$  となっている。したがって第一項の符号は +、第二項は演算子が Fermion か Boson かによるので  $\mp$  の符号がついている。

### 1.3.8 Green 関数の運動方程式

Heisenberg 演算子に運動方程式があるように、Green 関数にも運動方程式が存在する。この小節では、Green 関数が満たすべき方程式を導出する。

以前の節で示したように、温度 Green 関数は式 (1.42) を満たす。相互作用をしている粒子系で、ハミルトニアンが

$$H = \int \psi^\dagger(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \int \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' \quad (1.69)$$

という形をしているときを考える。まず、 $\psi(\mathbf{r}, t)$  は Heisenberg の運動方程式:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -[H, \psi(\mathbf{r}, t)] \quad (1.70)$$

$$= h(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) + \int \psi^\dagger(\mathbf{r}', t)v(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}', t)d\mathbf{r}'\psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.71)$$

を満たすので、

$$- [K, \psi(\mathbf{r})] = (h(\mathbf{r}) - \mu)\psi(\mathbf{r}, t) + \int \psi^\dagger(\mathbf{r}_1, t)v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_1, t)d\mathbf{r}_1\psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.72)$$

を式 (1.42) に代入すると、

$$\left[ -\frac{\partial}{\partial \tau} - (h(\mathbf{r}) - \mu) \right] G(x, x') = \delta^{(4)}(x - x') - \int d^3\mathbf{r}_1 v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \times \langle T_\tau [\psi^\dagger(\mathbf{r}_1, \tau)\psi(\mathbf{r}_1, \tau)\psi(\mathbf{r}, \tau)\psi^\dagger(\mathbf{r}', \tau')] \rangle \quad (1.73)$$

となり、 $(\mathbf{r}, \tau) = x$  であることがわかるように書き直すと

$$\left[ -\frac{\partial}{\partial \tau} - (h(\mathbf{r}) - \mu) \right] G(x, x') = \delta^{(4)}(x - x') - \int d^3\mathbf{r}_1 v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \times \langle T_\tau [\psi^\dagger(\mathbf{r}_1, \tau)\psi(\mathbf{r}_1, \tau)\psi(x)\psi^\dagger(x')] \rangle \quad (1.74)$$

となる。変数は  $x = (\mathbf{r}, \tau)$  と  $x' = (\mathbf{r}', \tau')$  である。

上式の右辺第二項の  $\langle \dots \rangle$  は 2 体の Green 関数と呼ばれる。これがわからない限り 1 体の Green 関数は求められない。2 体の Green 関数を求めるためにその運動方程式を作ると、相互作用のために 3 体の Green 関数が現れ、3 体の Green 関数の方程式を作ると 4 体が現れる。こうして方程式はどこまでも続いて閉じないため、正確に解く事はできない。この方程式を近似的に解くために、高次の Green 関数をなんらかの形で低次の Green 関数によって近似的に表し、閉じた形の方程式に変えてしまうということが行われている。この近似解法は平均場近似の一種であると言える。たとえば、2 体の Green 関数を 1 体の Green 関数の積で表したとすると、2 体の相互作用ポテンシャルが消える。つまり、相互作用ポテンシャルの代わりに平均場を用いて 1 体問題に帰着させているのである。

## 1.4 Gor'kov 方程式の導出

### 1.4.1 はじめに

1958 年に、Gor'kov が BCS 理論を Green 関数法で定式化し、臨界点近傍において BCS 理論は GL 理論に帰着できることを示した。BCS 理論のハミルトニアンでは、波数に依存しない電子間引力相互作用を考える。これはつまり、局所的な引力相互作用を考えているということになる。このような近似ハミルトニアンを用い、さらに平均場近似を用いて Green 関数の運動方程式を変形したものが、Gor'kov 方程式である<sup>2</sup>。なお、本論文では、以後は  $\hbar = 1$  という単位系を用いることにする。

### 1.4.2 BCS ハミルトニアン

まず、ハミルトニアンを

$$\hat{H} = \int \psi^\dagger(\mathbf{r})h(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \int \psi^\dagger_\alpha(\mathbf{r})\psi^\dagger_\beta(\mathbf{r}')v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\psi_\beta(\mathbf{r}')\psi_\alpha(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}' \quad (1.75)$$

<sup>2</sup> 引力相互作用として電子-格子相互作用を考えた場合のハミルトニアンを用いると BCS 理論は強結合理論となり、Gor'kov 方程式は Eliashberg 方程式となるが、本論文では触れないことにする。

とおく。BCS 理論においては、ポテンシャルは波数に依存せず定数  $V$  と置けた<sup>3</sup>。したがって、実空間で考えればポテンシャルは  $\delta$  関数と置けるはずである。(ただし、相互作用がフェルミエネルギーやカットオフ周波数よりも十分に小さいときのみ成り立つ。) よって、

$$\hat{H}_{\text{BCS}} = \int \left[ -\psi_{\alpha}^{\dagger} \frac{\nabla^2}{2m} \psi_{\alpha} + \frac{g}{2} \psi_{\beta}^{\dagger} \psi_{\alpha}^{\dagger} \psi_{\alpha} \psi_{\beta} \right] d^3 \mathbf{r} \quad (1.76)$$

となる。ここで  $g < 0$  である。また、粒子数演算子を

$$\hat{N} = \int \psi_{\alpha}^{\dagger} \psi_{\alpha} d^3 \mathbf{r} \quad (1.77)$$

とおく。これらはすべて Heisenberg 形式の演算子であるとし、チルダをはぶく。

### 1.4.3 超伝導状態における Wick の定理

一般のポテンシャル  $v$  に対する Green 関数の運動方程式は

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{\partial}{\partial \tau} - (h(\mathbf{r}) - \mu) \right] G_{\alpha\beta}(x, x') &= \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(x - x') - \int d^3 \mathbf{r}_1 v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \\ &\times \langle T_{\tau} [\psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}_1, \tau) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}_1, \tau) \psi_{\alpha}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(x')] \rangle \end{aligned} \quad (1.78)$$

である。 $h(\mathbf{r}) = -\frac{\nabla^2}{2m}$ 、 $v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  とすれば、

$$\left[ -\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right] G_{\alpha\beta}(x, x') = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(x - x') - g \langle T_{\tau} [\psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\alpha}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(x')] \rangle \quad (1.79)$$

となる。

ここで、右辺第二項の 2 体の Green 関数を 1 体の Green 関数の積で近似する。このとき、BCS ハミルトニアンはなんらかの平均場近似によって相互作用のないハミルトニアンに近似されているとする。そうすれば、Wick の定理を用いることができる。前節で証明した Wick の定理とは、「複数の時間順序積の統計平均が、もとの行列要素が零ではない演算子二つの時間順序積の統計平均の積で書ける」というものであった。通常の状態では、行列要素が零ではない演算子二つのペアは  $\psi\psi^{\dagger}$  のみであった。しかし、超伝導状態では Cooper pair を作るので  $\psi^{\dagger}\psi^{\dagger}$ 、 $\psi\psi$  の行列要素も零ではない。このことを踏まえて Wick の定理を用いると、2 体の Green 関数は

$$\begin{aligned} &\langle T_{\tau} [\psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\alpha}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(x')] \rangle \\ &= -\langle T_{\tau} [\psi_{\gamma}(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}, \tau)] \rangle \langle T_{\tau} [\psi_{\alpha}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(x')] \rangle \\ &\quad + \langle T_{\tau} [\psi_{\alpha}(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{r}, \tau)] \rangle \langle T_{\tau} [\psi_{\gamma}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(x')] \rangle \\ &\quad - \langle T_{\tau} [\psi_{\alpha}(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}, \tau)] \rangle \langle T_{\tau} [\psi_{\gamma}^{\dagger}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(x')] \rangle \end{aligned} \quad (1.80)$$

となる。

### 1.4.4 Gor'kov 方程式

式 (1.80) の第一項と第二項は Green 関数を用いて

$$-\Sigma_{\gamma\gamma}(x) G_{\alpha\beta}(x, x') + \Sigma_{\alpha\gamma}(x) G_{\gamma\beta}(x, x') \quad (1.81)$$

と書き直すことができる。ここで、

$$\Sigma_{\alpha\beta}(x) = -\langle T_{\tau} \psi_{\alpha}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(x) \rangle \equiv G_{\alpha\beta}(x, x) \quad (1.82)$$

<sup>3</sup>ここでは引力相互作用が波数ベクトルに依らない等方的 s 波超伝導体を考える。

は self-energy と呼ばれるものである。これらの項は左辺に移項して与えることができ、化学ポテンシャル  $\mu$  に若干の補正を与えていることがわかる。BCS 理論においては、Cooper pair を作る相互作用以外は無視するので、式 (1.80) の第一項第二項を無視することになる。

第三項は Hartree-Fock 近似のときと同様に

$$- \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \langle T_\tau [\psi_\alpha(\mathbf{r}, \tau + \epsilon) \psi_\gamma(\mathbf{r}, \tau - \epsilon)] \rangle \langle T_\tau [\psi_\gamma^\dagger(x) \psi_\beta^\dagger(x')] \rangle \quad (1.83)$$

という形にかえると、

$$- \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \langle \psi_\alpha(\mathbf{r}, \tau + \epsilon) \psi_\gamma(\mathbf{r}, \tau - \epsilon) \rangle \langle T_\tau [\psi_\gamma^\dagger(x) \psi_\beta^\dagger(x')] \rangle = - \langle \psi_\alpha(\mathbf{r}, \tau) \psi_\gamma(\mathbf{r}, \tau) \rangle \langle T_\tau [\psi_\gamma^\dagger(x) \psi_\beta^\dagger(x')] \rangle \quad (1.84)$$

となる。Hartree-Fock 近似のときとの類推で考えると、 $\langle \psi_\alpha(\mathbf{r}, \tau) \psi_\gamma(\mathbf{r}, \tau) \rangle$  は何らかの平均場であるということがわかる。これが零になれば常伝導状態になると考えられるので、これが秩序変数  $\Delta$  である。したがって、

$$\Delta_{\alpha\beta}(x) = g \langle \psi_\alpha(\mathbf{r}, \tau) \psi_\beta(\mathbf{r}, \tau) \rangle \quad (1.85)$$

とし、異常 Green 関数  $F_{\alpha\beta}$  を

$$F_{\alpha\beta}(x, x') \equiv \langle T_\tau [\psi_\alpha(x) \psi_\beta(x')] \rangle \quad (1.86)$$

$$F_{\alpha\beta}^\dagger(x, x') \equiv \langle T_\tau [\psi_\alpha^\dagger(x) \psi_\beta^\dagger(x')] \rangle \quad (1.87)$$

と定義すれば、式 (1.79) は

$$\left[ -\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right] G_{\alpha\beta}(x, x') + \Delta_{\alpha\gamma}(x) F_{\gamma\beta}^\dagger(x, x') = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(x - x') \quad (1.88)$$

となる。

この方程式は未定関数  $F_{\alpha\beta}^\dagger(x, x')$  が含まれており、単独では解けない。したがって、もうひとつ方程式が欲しい。以前の節において、Green 関数に関する運動方程式を導いた。同様の手順で異常 Green 関数  $F_{\alpha\beta}^\dagger(x, x')$  に関する運動方程式も導けるはずである。まず、

$$\frac{\partial}{\partial \tau} F_{\alpha\beta}^\dagger(x, x') = - \langle T_\tau [[K, \psi^\dagger(x)] \psi^\dagger(x')] \rangle \quad (1.89)$$

が成り立っているのは容易にわかる。 $G$  のときとの大きな違いは、同じ演算子による交換関係、反交換関係を用いたために  $\delta$  関数は零になっているという点である。次に Heisenberg の運動方程式から

$$- [K, \psi^\dagger(\mathbf{r})] = (h(\mathbf{r}) - \mu) \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) + \int \psi^\dagger(\mathbf{r}_1, t) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_1, t) d\mathbf{r}_1 \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \quad (1.90)$$

が成り立っているので、これを用いると、

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right] F_{\alpha\beta}^\dagger(x, x') = -g \langle T_\tau [\psi_\gamma^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \psi_\gamma(\mathbf{r}, \tau) \psi_\alpha^\dagger(x) \psi_\beta^\dagger(x')] \rangle \quad (1.91)$$

となる。2 体の Green 関数の右から三番目の演算子に変更を受けている以外は  $G$  に関する運動方程式とほとんどかわらない。Hartree 項と Fock 項の平均場は零であるとすれば、

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right] F_{\alpha\beta}^\dagger(x, x') - \Delta_{\alpha\gamma}^*(x) G_{\gamma\beta}(x, x') = 0 \quad (1.92)$$

という方程式を得ることができる。同様な手順を用いると、正常 Green 関数、異常 Green 関数に関して四本の方程式：

$$\left( -\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) G_{\alpha\beta}(x, x') + \Delta_{\alpha\gamma}(x) F_{\gamma\beta}^\dagger(x, x') = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(x - x') \quad (1.93)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \bar{G}_{\alpha\beta}(x, x') + \Delta_{\alpha\gamma}^*(x) F_{\gamma\beta}(x, x') = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(x - x') \quad (1.94)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) F_{\alpha\beta}^\dagger(x, x') - \Delta_{\alpha\gamma}^*(x) G_{\gamma\beta}(x, x') = 0 \quad (1.95)$$

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) F_{\alpha\beta}(x, x') - \Delta_{\alpha\gamma}(x) \bar{G}_{\gamma\beta}(x, x') = 0 \quad (1.96)$$

$$(1.97)$$

を得る。これが Gor'kov 方程式である。

#### 1.4.5 Green 関数と Gor'kov 方程式の行列表示

スピンを考慮して、 $2 \times 2$  の行列形式:

$$\hat{G}(x, x') \equiv \begin{pmatrix} G_{\uparrow\uparrow}(x, x') & G_{\uparrow\downarrow}(x, x') \\ G_{\downarrow\uparrow}(x, x') & G_{\downarrow\downarrow}(x, x') \end{pmatrix} \quad (1.98)$$

$$\hat{F}(x, x') \equiv \begin{pmatrix} F_{\uparrow\uparrow}(x, x') & F_{\uparrow\downarrow}(x, x') \\ F_{\downarrow\uparrow}(x, x') & F_{\downarrow\downarrow}(x, x') \end{pmatrix} \quad (1.99)$$

$$\hat{\bar{G}}(x, x') \equiv \begin{pmatrix} \bar{G}_{\uparrow\uparrow}(x, x') & \bar{G}_{\uparrow\downarrow}(x, x') \\ \bar{G}_{\downarrow\uparrow}(x, x') & \bar{G}_{\downarrow\downarrow}(x, x') \end{pmatrix} \quad (1.100)$$

$$\hat{F}^\dagger(x, x') \equiv \begin{pmatrix} F_{\uparrow\uparrow}^\dagger(x, x') & F_{\uparrow\downarrow}^\dagger(x, x') \\ F_{\downarrow\uparrow}^\dagger(x, x') & F_{\downarrow\downarrow}^\dagger(x, x') \end{pmatrix} \quad (1.101)$$

$$\hat{\Delta}(x) \equiv \begin{pmatrix} \Delta_{\uparrow\uparrow}(x) & \Delta_{\uparrow\downarrow}(x) \\ \Delta_{\downarrow\uparrow}(x) & \Delta_{\downarrow\downarrow}(x) \end{pmatrix} \quad (1.102)$$

を導入する。これらを用いると各スピン成分ごとの Gor'kov 方程式は

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{G}(x, x') + \hat{\Delta}(x) \hat{F}(x, x') = \hat{\sigma}_0 \delta^{(4)}(x - x') \quad (1.103)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\bar{G}}(x, x') + \hat{\Delta}^*(x) \hat{F}(x, x') = \hat{\sigma}_0 \delta^{(4)}(x - x') \quad (1.104)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{F}(x, x') - \hat{\Delta}^*(x) \hat{G}(x, x') = \hat{0} \quad (1.105)$$

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{F}^\dagger(x, x') - \hat{\Delta}(x) \hat{\bar{G}}(x, x') = \hat{0} \quad (1.106)$$

$$(1.107)$$

となり、4本の  $2 \times 2$  の行列微分方程式にまとめることができる。これをさらにまとめると

$$\begin{pmatrix} \left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\sigma}_0 & -\hat{\Delta}(x) \\ \hat{\Delta}^* & \left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{G}(x, x') & \hat{F}(x, x') \\ -\hat{F}^\dagger(x, x') & \hat{\bar{G}}(x, x') \end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_0 & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (1.108)$$

となり、 $4 \times 4$  の Gor'kov 方程式を得ることができる。ここで、 $4 \times 4$  の Green 関数の行列表示:

$$\check{G}^{-1}(x) \equiv \begin{pmatrix} \left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\sigma}_0 & -\hat{\Delta}(x) \\ \hat{\Delta}^* & \left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (1.109)$$

$$\check{G}(x, x') \equiv \begin{pmatrix} \hat{G}(x, x') & \hat{F}(x, x') \\ -\hat{F}^\dagger(x, x') & \hat{\bar{G}}(x, x') \end{pmatrix} \quad (1.110)$$

を導入すれば、Gor'kov 方程式は

$$\check{G}^{-1}(x)\check{G}(x, x') = \check{1}\delta^{(4)}(x - x') \quad (1.111)$$

と書くことができる。

$x'$  に関する Gor'kov 方程式は

$$\bar{\check{G}}^{-1}(x') \equiv \begin{pmatrix} \left( \frac{\partial}{\partial \tau'} + \frac{\nabla'^2}{2m} + \mu \right) & -\Delta(x') \\ \Delta^*(x') & \left( -\frac{\partial}{\partial \tau'} + \frac{\nabla'^2}{2m} + \mu \right) \end{pmatrix} \quad (1.112)$$

を定義すれば、Gor'kov 方程式は

$$\check{G}(x, x')\bar{\check{G}}^{-1}(x') = \check{1}\delta(x - x') \quad (1.113)$$

と書くことができる。

### Singlet-pairing の場合

$4 \times 4$  の行列形式の Gor'kov 方程式を用いて、ペアポテンシャルがスピン一重項 (singlet-pairing) の場合の Gor'kov 方程式を導出する。このとき、Gor'kov 方程式は spin 添え字を持たなくなり、 $2 \times 2$  の行列方程式になる。

singlet-pairing においては、ペアポテンシャルは spin 添え字に対して反対称である。したがって、

$$\Delta_{\alpha\beta}(x) = -\Delta_{\beta\alpha}(x) \quad (1.114)$$

が成り立つ。ここで、Pauli 行列

$$\hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (1.115)$$

を導入する。このとき、

$$\hat{\Delta}(x) = i\hat{\sigma}^y \Delta(x) \quad (1.116)$$

$$\hat{\Delta}^\dagger(x) = -i\hat{\sigma}^y \Delta^*(x) \quad (1.117)$$

を導入すれば、spin 添え字を持たない量を定義できる。また、異常 Green 関数はペアポテンシャルと関連しているので、同様な表現を用いることができ、

$$\hat{F}(x, x') = i\hat{\sigma}^y F(x, x') \quad (1.118)$$

$$\hat{\hat{F}}(x, x') = -i\hat{\sigma}^y F^\dagger(x, x') \quad (1.119)$$

とすることができる。これらを式 (1.108) に代入すると

$$\begin{pmatrix} \left( -\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \hat{\sigma}_0 & -i\hat{\sigma}^y \Delta(x) \\ i\hat{\sigma}^y \Delta^* & \left( \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{G}(x, x') & i\hat{\sigma}^y F(x, x') \\ -i\hat{\sigma}^y F^\dagger(x, x') & \hat{\hat{G}}(x, x') \end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_0 & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (1.120)$$

となり、さらに整理すれば

$$\begin{pmatrix} \left( -\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \hat{\sigma}_0 & -i\hat{\sigma}_0 \Delta(x) \\ i\hat{\sigma}_0 \Delta^* & \left( \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{G}(x, x') & i\hat{\sigma}_0 F(x, x') \\ -i\hat{\sigma}_0 F^\dagger(x, x') & \hat{\hat{G}}(x, x') \end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_0 & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (1.121)$$

となるから、正常 Green 関数は  $\hat{\sigma}_0$  に比例し、

$$\hat{G}(x, x') = \hat{\sigma}_0 G(x, x') \quad (1.122)$$

$$\hat{\bar{G}}(x, x') = \hat{\sigma}_0 \bar{G}(x, x') \quad (1.123)$$

とならなければならない。以上より運動方程式はスピン成分を持たない Green 関数で書くことができ

$$\begin{pmatrix} \left( -\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) & -\Delta(x) \\ \Delta^*(x) & \left( \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G(x, x') & F(x, x') \\ -F^\dagger(x, x') & \bar{G}(x, x') \end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.124)$$

となる。この表式は式 (1.108) を  $2 \times 2$  にそのまま直したような形をしている。

### Unitary な triplet-pairing の場合

ここでは、スピン三重項 (triplet-pairing) のペアポテンシャルを持つ場合、ペアポテンシャルが“unitary”と呼ばれる性質を満たす場合には、singlet-pairing の場合と同様にスピン添え字を消去した形の  $2 \times 2$  の Gor'kov 方程式を得ることができることを示す。

スピン三重項のペアポテンシャルは、 $d$  ベクトルというものを導入して

$$\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = i(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma}_y \quad (1.125)$$

$$= \begin{pmatrix} -d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) & d_z(\mathbf{k}) \\ d_z(\mathbf{k}) & d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (1.126)$$

と書くことができる<sup>8)</sup>。また、 $\mathbf{q} = i(\mathbf{d} \times \mathbf{d}^*)$  とすると

$$\hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger = |\mathbf{d}|^2 \hat{\sigma}_0 + \mathbf{q} \cdot \hat{\sigma} \quad (1.127)$$

である。ペアポテンシャルが“unitary”であるというのは、 $\mathbf{q} \cdot \hat{\sigma} = 0$  であるとき、つまり、

$$\hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger = |\mathbf{d}|^2 \hat{\sigma}_0 \quad (1.128)$$

を満たすペアポテンシャルのときである。 $\hat{\Delta}(\mathbf{k})$  のフーリエ変換を

$$\hat{\Delta}(x) = \int d\mathbf{k} \hat{\Delta}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (1.129)$$

とすれば、

$$\hat{\Delta}(x) = \int d\mathbf{k} i(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma}_y e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (1.130)$$

であるので、 $d(\mathbf{k})$  のフーリエ変換  $d(x)$  を用いることで

$$\hat{\Delta}(x) = i(\mathbf{d}(x) \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma}_y \quad (1.131)$$

と書くことができる ( $x$  のベクトル表記は簡略化のため省略した)。ここで、ある超伝導体のペアポテンシャルの対称性は空間的に変化しないとすれば、 $d$  ベクトルの方向が実空間に依存しないと仮定でき、 $d(x) = \vec{d}d(x)$  を用いると<sup>4)</sup>、

$$\hat{\Delta}(x) = i(\vec{d} \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma}_y d(x) \quad (1.132)$$

となる。このような仮定のもとではスピン添え字を消去することができる。このとき、座標に依存しない行列  $\hat{\Delta}$  を導入すれば

$$\hat{\Delta}(x) = \hat{\Delta}d(x) \quad (1.133)$$

<sup>4)</sup>  $\vec{d}$  は単位ベクトルであり、 $|\vec{d}| = 1$  を満たすベクトルである。

となる。この  $\hat{\Delta}$  はペアポテンシャルが unitary の場合は

$$\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger = \hat{\sigma}_0 \quad (1.134)$$

を満たす。また、異常 Green 関数はペアポテンシャルと同様の行列の成分を持つので

$$\hat{F}(x, x') = i(\vec{d} \cdot \hat{\sigma})\hat{\sigma}_y F(x, x') \quad (1.135)$$

$$= \hat{\Delta}\tilde{F}(x, x') \quad (1.136)$$

$$\hat{\tilde{F}}(x, x') = \hat{\Delta}^\dagger F^\dagger(x, x') \quad (1.137)$$

と書くことができる。よって、ペアポテンシャルと異常 Green 関数は

$$\hat{\Delta}(x)\hat{\tilde{F}}(x, x') = d(x)F^\dagger(x, x')\hat{\sigma}_0 \quad (1.138)$$

$$\hat{\Delta}^*(x)\hat{F}(x, x') = d^*(x)F(x, x')\hat{\sigma}_0 \quad (1.139)$$

という関係を満たす。この関係に注意して、得られた異常 Green 関数とペアポテンシャルを式 (1.108) に代入して整理すると

$$\begin{pmatrix} \left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\hat{\sigma}_0 & -\hat{\sigma}_0 d(x) \\ \hat{\sigma}_0 d^*(x) & \left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{G}(x, x') & \hat{\sigma}_0 F(x, x') \\ -\hat{\sigma}_0 F^\dagger(x, x') & \hat{\tilde{G}}(x, x') \end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_0 & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (1.140)$$

という前節で得られたような形式の方程式が得られ、正常 Green 関数は  $\hat{\sigma}_0$  に比例することがわかる。よって、スピン添え字を持たない  $2 \times 2$  の Gor'kov 方程式：

$$\begin{pmatrix} \left(-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) & -d(x) \\ d^*(x) & \left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G(x, x') & F(x, x') \\ -F^\dagger(x, x') & \tilde{G}(x, x') \end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.141)$$

を得る。これは singlet のときの Gor'kov 方程式と形式的には同じである。

$x'$  に関する Gor'kov 方程式

$x'$  に関する Gor'kov 方程式も導きたい。Heisenberg の運動方程式は

$$\frac{\partial\psi_\alpha(x)}{\partial\tau} = \left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\psi_\alpha(x) - g\psi_\gamma^\dagger(x)\psi_\gamma(x)\psi_\alpha(x) \quad (1.142)$$

$$\frac{\partial\psi_\alpha^\dagger(x)}{\partial\tau} = \left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\psi_\alpha^\dagger(x) + g\psi_\alpha^\dagger(x)\psi_\gamma^\dagger(x)\psi_\gamma(x) \quad (1.143)$$

と書けるから、Green 関数を  $\tau'$  で微分すると

$$\frac{\partial G_{\alpha\beta}(x, x')}{\partial\tau'} = \frac{\partial}{\partial\tau'}(\Delta G) - \langle T_\tau \psi_\alpha(x) \frac{\partial\psi_\beta^\dagger(x')}{\partial\tau'} \rangle \quad (1.144)$$

となる。ここで、 $\Delta G$  は  $x = x'$  での Green 関数の不連続性を起因とした項である。上式に Heisenberg の運動方程式を代入して計算していく必要がある。しかし、計算の流れはほとんど  $\tau$  での微分するときと同じであるために省く。ここでは、結果のみを示す。Gor'kov 方程式は

$$\begin{pmatrix} \hat{G}(x, x') & \hat{F}(x, x') \\ -\hat{F}^\dagger(x, x') & \hat{\tilde{G}}(x, x') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial\tau'} + \frac{\nabla'^2}{2m} + \mu\right)\hat{\sigma}_0 & -\hat{\Delta}(x') \\ \hat{\Delta}^*(x') & \left(-\frac{\partial}{\partial\tau'} + \frac{\nabla'^2}{2m} + \mu\right)\hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} = \delta(x - x') \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_0 & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (1.145)$$

という行列表示をすることができる。演算子が右側にあるが、これは  $\tau$  のときと同様な行列表示を行おうとした結果であるだけで、形式的な問題に過ぎない。実際に演算する際は演算子が左側にあるとして計算する。

ここで、

$$\bar{G}^{-1}(x') \equiv \begin{pmatrix} \left( \frac{\partial}{\partial \tau'} + \frac{\nabla'^2}{2m} + \mu \right) \hat{\sigma} & -\hat{\Delta}(x') \\ \hat{\Delta}^*(x') & \left( -\frac{\partial}{\partial \tau'} + \frac{\nabla'^2}{2m} + \mu \right) \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (1.146)$$

を定義すれば、Gor'kov 方程式は

$$\check{G}(x, x') \bar{G}^{-1}(x') = \check{I} \delta(x - x') \quad (1.147)$$

と書くことができる。

### 周波数表示

微分方程式を解くさいには、求める関数を Fourier 変換しておくことと便利なことが多い。したがって、Green 関数を虚時間に対して Fourier 変換を行う。

まず、Green 関数は

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau < 0) = \mp G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau + \beta > 0) \quad (1.148)$$

という関係を満たす。ここで、 $\tau_1 - \tau_2 = \tau$  とし、 $\tau$  と同じ次元である  $\beta$  は  $1/k_B T$  である。したがって、Green 関数は  $\beta$  の周期を持つ。以上から、Green 関数の Fourier 変換は

$$G_{\alpha\beta}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G_{\alpha\beta}(\omega_n) \quad (1.149)$$

と書ける。したがって、

$$\check{G}(x, x') = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n(\tau - \tau')} \check{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) \quad (1.150)$$

$$\check{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) = \int_0^\beta e^{i\omega_n(\tau - \tau')} \check{G}(x, x') d\tau \quad (1.151)$$

と書ける。ここで、

$$\check{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) \equiv \begin{pmatrix} \hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) & \hat{F}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) \\ -\hat{F}^\dagger(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) & \hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) \end{pmatrix} \quad (1.152)$$

である。ここで、

$$\check{G}^{-1}(\mathbf{r}; i\omega_n) \equiv \begin{pmatrix} (i\omega_n + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu) \hat{\sigma}_0 & -\hat{\Delta}(\mathbf{r}) \\ \hat{\Delta}^*(\mathbf{r}) & (-i\omega_n + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu) \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (1.153)$$

を用いれば、Gor'kov 方程式は

$$\check{G}^{-1}(\mathbf{r}, i\omega_n) \check{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) = \check{I} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (1.154)$$

となる。

### 運動量表示

座標に関して Fourier 変換を行うと、

$$\check{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \check{G}(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; i\omega_n) e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}')} \quad (1.155)$$

$$\check{G}(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; i\omega_n) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \check{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}')} \quad (1.156)$$

となる。

### 1.4.6 一様系における解

この小節では、磁場がゼロかつ空間的に一様な系における Gor'kov 方程式を解く。また、singlet あるいは unitary な triplet pairing のみを考え、Gor'kov 方程式はスピン添え字を含まない  $2 \times 2$  の行列方程式であるとする。

周波数表示 Gor'kov 方程式 (1.154) をさらに座標に関して Fourier 変換すると、 $G$  と  $F^\dagger$  に関する方程式は

$$(i\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}) G(\mathbf{p}; i\omega_n) + \Delta F^\dagger(\mathbf{p}; i\omega_n) = 1 \quad (1.157)$$

$$(i\omega_n + \xi_{\mathbf{p}}) F^\dagger(\mathbf{p}; i\omega_n) + \Delta^* G(\mathbf{p}; i\omega_n) = 0 \quad (1.158)$$

$$(1.159)$$

となる。ここで、 $\xi_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu$  である。また、

$$G(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; i\omega_n) = \int \int \frac{d\mathbf{r}_1}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{r}_2}{(2\pi)^3} G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; i\omega_n) e^{i(\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2)} \quad (1.160)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int d(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; i\omega_n) e^{i\mathbf{p}_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} e^{i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\mathbf{r}_2} \quad (1.161)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; i\omega_n) e^{i\mathbf{p}_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \int d\mathbf{r}_2 e^{i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\mathbf{r}_2} \quad (1.162)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{(2\pi)^3} G(\mathbf{p}_1; i\omega_n) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) (2\pi)^3 \quad (1.163)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{(2\pi)^3} G(\mathbf{p}; i\omega_n) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}) \quad (1.164)$$

となることを用いた。ここで、並進対称性から、 $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  と置いている。このとき、上式は容易に解けて、その結果は

$$G(\mathbf{p}; i\omega_n) = -\frac{i\omega_n + \xi_{\mathbf{p}}}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta|^2} \quad (1.165)$$

$$F^\dagger(\mathbf{p}; i\omega_n) = \frac{\Delta^*}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta|^2} \quad (1.166)$$

となる。

この結果からわかることは、 $\xi_{\mathbf{p}}$  空間において、 $G(\xi_{\mathbf{p}})$  は  $\xi_{\mathbf{p}}^{-1}$ 、 $F^\dagger(\xi_{\mathbf{p}})$  は  $\xi_{\mathbf{p}}^{-2}$  で減衰する関数であるということである。

## 1.5 準古典近似と Eilenberger 方程式

### 1.5.1 はじめに

従来型の超伝導体においては、フェルミエネルギー  $E_F$  はペアポテンシャル  $\Delta$  よりもかなり大きい。通常、フェルミエネルギー  $E_F$  は温度換算で  $10^4 \text{K}$  程度であり臨界温度  $T_c$  は  $10 \text{K}$  であるから、この値から見積もられる比  $E_F/\Delta$  は  $10^3$  程度の大きさである。高温超伝導体は臨界温度  $T_c \sim 10^2 \text{K}$  であるから、 $E_F/\Delta$  は  $10 \sim 10^2$  程度であり、それなりに大きい。そこで、 $E_F/\Delta \gg 1$  である状況下において何らかの近似を行えないかどうかを考えてみる。常伝導状態の電子の空間変化を特徴付けるスケールはフェルミ波数の逆数  $1/k_F$  であり、超伝導状態の空間スケールはコヒーレンス長  $\xi$  であるから、Cooper pair の波動関数には二つの空間スケールが存在する。 $E_F/\Delta \gg 1$  という状況は  $\xi k_F \gg 1$  という状況であることを意味している。このような状況で適用可能な近似を準古典近似と呼び、この近似のもとでは Green 関数の代わりに準古典 Green 関数と呼ばれる関数を用いることができる。準古典 Green 関数については後で詳述するが、Green 関数をエネルギーで積分した形をしている。この準古典 Green 関数が従う方程式は Eilenberger 方程式と呼ばれる。次小節以降では、準古典近似について概観し、Eilenberger 方程式を Gor'kov 方程式から導出する。

### 1.5.2 準古典近似

通常、最終的に行いたいことは、物理量を求めることである。以前の節でも述べたように、物理量  $Q$  の平均値は

$$\langle Q \rangle = \int \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) q(\mathbf{r}_1) \lim_{\tau' \rightarrow \tau+} G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \tau) \quad (1.167)$$

与えられる。また、Green 関数を虚時間に対して Fourier 変換すると Green 関数の Fourier 変換は

$$G_{\alpha\beta}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G_{\alpha\beta}(\omega_n) \quad (1.168)$$

となる。さらに、座標に関する Fourier 変換を行うと

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{\beta} \lim_{\tau \rightarrow 0+} \sum_n \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 q(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{-i\omega_n \tau} G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; i\omega_n) \quad (1.169)$$

$$= \frac{1}{\beta} \lim_{\tau \rightarrow 0+} \sum_n \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \frac{d\mathbf{p}_1^3}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_2^3}{(2\pi)^3} q(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{i(\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2)} e^{-i\omega_n \tau} G(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; i\omega_n) \quad (1.170)$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_n \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 q(\mathbf{r}_1) \frac{d\mathbf{p}_1^3}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_2^3}{(2\pi)^3} G(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; i\omega_n) e^{i\frac{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2}{2} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} e^{i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (1.171)$$

となり、 $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2}$ 、 $\mathbf{p}_2 = \mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2}$ 、 $\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{\bar{\mathbf{r}}}{2}$ 、 $\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{\bar{\mathbf{r}}}{2}$  と変数変換すれば

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_n \int d^3\mathbf{R} d^3\bar{\mathbf{r}} q(\mathbf{R} + \bar{\mathbf{r}}/2) \frac{d\mathbf{p}^3}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}^3}{(2\pi)^3} G(\mathbf{p}, \mathbf{k}; i\omega_n) e^{i\mathbf{p}\bar{\mathbf{r}}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \delta(\bar{\mathbf{r}}) \quad (1.172)$$

となる。

上式からわかるように、運動量表示の Green 関数を用いて物理量を求める際、運動量の積分が現れてくる。被積分関数の中で、Green 関数は  $|p|$  に関して急激に変化する。また、BCS 理論から予想されるように、Fermi 面近傍においてエネルギーギャップなどの特異性が現れるので、Green 関数は  $\delta\xi_p \sim \Delta$  程度の幅の局在したピークを持つだろう。このことを考えれば、 $\Delta \ll E_F$  であれば、他の被積分関数はその Fermi 面上の値に置き換えることができるだろう。これは、BCS 理論において常伝導状態密度を  $N(\xi) = N(0)$  と置き換えたのと同じような考え方である。すなわち、運動量  $p$  に関する積分を  $p$  の面積素  $dS_p$  に関する積分と絶対値  $p$  に関する積分にわけ、Green 関数のみが絶対値  $p$  と面積素  $dS_p$  に依存する被積分関数であると、その他の関数は面積素  $dS_p$  に依存する関数として絶対値  $p$  の積分の外に出す、ということを考えるのである。

運動量空間での積分をエネルギー空間の積分になおすと

$$\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = d\xi_p \frac{dS_F}{(2\pi)^3 v_F} \quad (1.173)$$

となる。ここで、 $\xi_p = E_n(p) - E_F$  である。 $E_n$  は常伝導状態で測ったときのエネルギーである。実際は  $p$  は  $v$  にも依存して変化するのだが、自由電子の速度は  $v \propto E^{1/2}$  であるから、 $\Delta \ll E_F$  のとき  $v(E) \approx v(E_F) = v_F$  と置くことが可能である。また、Fermi 面が球であれば、 $dS_F = p_F^2 d\Omega_p$  より

$$\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{p_F^2}{(2\pi)^3 v_F} d\xi_p d\Omega_p \quad (1.174)$$

となる。以上を踏まえると、物理量  $\langle Q \rangle$  は

$$\langle Q \rangle = \frac{p_F^2}{\beta(2\pi)^3 v_F} \sum_n \int d^3\mathbf{R} d^3\bar{\mathbf{r}} q(\mathbf{R} + \bar{\mathbf{r}}/2) \frac{d\mathbf{k}^3}{(2\pi)^3} d\xi_p d\Omega_p G(\mathbf{p}, \mathbf{k}; i\omega_n) e^{i\mathbf{p}\bar{\mathbf{r}}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \delta(\bar{\mathbf{r}}) \quad (1.175)$$

$$= \frac{p_F^2}{\beta(2\pi)^3 v_F} \sum_n \int d^3\mathbf{R} q(\mathbf{R}) \frac{d\mathbf{k}^3}{(2\pi)^3} \int d\Omega_p e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int d\xi_p G(\mathbf{p}, \mathbf{k}; i\omega_n) \quad (1.176)$$

となる。後述するように、 $\int d\xi_{\mathbf{p}} G(\mathbf{p}, \mathbf{k}; i\omega_n)$  は発散するため単純に準古典 Green 関数を定義することはできないが、運動量の大きさに関して何らかの積分量を定義することは有益である。なぜなら、物理量の計算では  $\bar{r} \rightarrow 0$  となるため、絶対値と方向のみの被積分関数しか残らないからである。先ほど述べたように、Green 関数以外の運動量の絶対値依存性をすべて Fermi 面上の値に置き換えるという近似を考えれば、その近似の結果準古典 Green 関数に関する方程式が導出される。

### 準古典異常 Green 関数

まず最初に、異常 Green 関数を考える。異常 Green 関数はペアポテンシャル  $\Delta$  との関係がついていることからわかるように、超伝導状態でのみ値を持ち、 $\xi_{\mathbf{p}}^{-2}$  で減衰する。したがって、準古典異常 Green 関数を

$$\int \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} F(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) = \oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} F(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) \equiv f(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \quad (1.177)$$

$$\int \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} F^\dagger(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) = \oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} F^\dagger(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) \equiv f^\dagger(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \quad (1.178)$$

と定義する。ここで、周回積分は Fermi 面近傍の極を拾ってくるものとする。また、 $\hat{\mathbf{p}}$  は極座標表示をしたさいの  $r$  軸方向に対応する。

### 準古典 Green 関数

それに対して、Green 関数は常伝導状態でも値を持つ。したがって積分は発散してしまう。そこで、周回積分として

$$\oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} G(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) \equiv g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \quad (1.179)$$

を準古典 Green 関数として定義する。

また、全空間での積分が発散してしまうので、物理量を計算する際に単純に  $\xi_{\mathbf{p}}$  の積分として準古典 Green 関数を用いることはできない。したがって、Green 関数  $G$  を常伝導成分  $G^{(n)}$  と超伝導成分  $G - G^{(n)}$  に分ける。すると、

$$\int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} G(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) = \int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} G^{(n)} + \int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} [G - G^{(n)}] \quad (1.180)$$

$$= \int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} G^{(n)} + \nu(\hat{\mathbf{p}}) \oint d\xi_{\mathbf{p}} [G - G^{(n)}] \quad (1.181)$$

となる。ただし、 $\nu(\hat{\mathbf{p}})$  は  $\hat{\mathbf{p}}$  方向における Fermi 面上の状態密度である。ここで、

$$G^{(n)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; i\omega_n) = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G^{(n)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; i\omega_n) e^{i(\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2)} \quad (1.182)$$

$$= \int d(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 G^{(n)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; i\omega_n) e^{i\mathbf{p}_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} e^{i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\mathbf{r}_2} \quad (1.183)$$

$$= \int d(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) G^{(n)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; i\omega_n) e^{i\mathbf{p}_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \int d\mathbf{r}_2 e^{i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\mathbf{r}_2} \quad (1.184)$$

$$= G^{(n)}(\mathbf{p}_1; i\omega_n) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) (2\pi)^3 \quad (1.185)$$

$$= G^{(n)}(\mathbf{p}; i\omega_n) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}) \quad (1.186)$$

と

$$G^{(n)}(\mathbf{p}; i\omega_n) = \frac{1}{\xi_{\mathbf{p}} - i\omega_n} \quad (1.187)$$

$$= \mathcal{P} \frac{1}{\xi_{\mathbf{p}}} + i\pi \text{sign}(\omega_n) \delta(\xi_{\mathbf{p}}) \quad (1.188)$$

を用いると、

$$\oint d\xi_{\mathbf{p}} G^{(n)} = -i\pi \text{sign}(\omega_n) \quad (1.189)$$

となり、超伝導成分の項内の被積分関数  $G^{(n)}$  を変形することができる。以上より、

$$\int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} G = \int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} G^{(n)} + \nu(\hat{\mathbf{p}}) \left[ \oint d\xi_{\mathbf{p}} G + i\pi \text{sign}(\omega_n) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}) \right] \quad (1.190)$$

$$= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}) \mathcal{P} \int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} \frac{1}{\xi_{\mathbf{p}}} + \nu(\hat{\mathbf{p}}) i\pi [g + (2\pi)^3 \text{sign}(\omega_n) \delta(\mathbf{k})] \quad (1.191)$$

が得られる。

$\bar{G}$  についても全く同様に

$$\oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} \bar{G}(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) \equiv \bar{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \quad (1.192)$$

$$\int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} \bar{G} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}) \mathcal{P} \int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} \frac{1}{\xi_{\mathbf{p}}} + \nu(\hat{\mathbf{p}}) i\pi [\bar{g} - (2\pi)^3 \text{sign}(\omega_n) \delta(\mathbf{k})] \quad (1.193)$$

となる。

また、準古典 Green 関数の行列表示として

$$\check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) = \begin{pmatrix} g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) & f(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \\ -f^\dagger(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) & \bar{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \end{pmatrix} \quad (1.194)$$

を導入することにする。また、 $\mathbf{k}$  に関して Fourier 変換を行うと

$$\check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) = \begin{pmatrix} g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) & f(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \\ -f^\dagger(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) & \bar{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \end{pmatrix} \quad (1.195)$$

$$= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \quad (1.196)$$

となる<sup>5</sup>。上式からわかるように、準古典 Green 関数は空間座標として重心座標にのみ依存する関数である。Green 関数には2つの空間座標があったので、準古典近似を用いることで相対座標を落としたことになる。

### 1.5.3 磁場がある場合の Gor'kov 方程式

磁場があるときの Gor'kov 方程式は

$$\begin{pmatrix} \left( -\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hat{\nabla}^2}{2m} + \mu \right) & -\Delta(x) \\ \Delta^*(x) & \left( \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hat{\nabla}^2}{2m} + \mu \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G(x, x') & F(x, x') \\ -F^\dagger(x, x') & \hat{G}(x, x') \end{pmatrix} = \delta(x - x') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.197)$$

と書くことができる。ここで、

$$\hat{\nabla} \equiv \nabla - \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (1.198)$$

$$\check{\nabla} \equiv \nabla + \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (1.199)$$

と定義した。 $\check{\nabla}$  は  $\psi$  に作用するとき、 $\hat{\nabla}$  は  $\psi^\dagger$  に作用するとき用いられる。

<sup>5</sup>ここで、 $\mathbf{r}$  を重心座標と定義しなおしている。

## 1.5.4 Eilenberger 方程式の導出

準古典 Green 関数が従う運動方程式を導く。Green 関数は Cooper pair の座標として相対座標  $\bar{r}$  と重心座標  $r$  を変数に持つ関数だったが、準古典 Green 関数は重心座標  $r$  のみを変数に持つ関数である。したがって、Gor'kov 方程式において相対座標に関する情報が小さいと近似することで、準古典 Green 関数が従う運動方程式を得られると考えられる。その結果得られる運動方程式が Eilenberger 方程式である。

不純物などによる自己エネルギー  $\Sigma$  は小さいとして無視する。ペアポテンシャルはスピン一重項か unitary なスピン三重項であるとし、スピン添え字のない  $2 \times 2$  の Gor'kov 方程式を用いる。また、ゲージとして

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (1.200)$$

をとり、 $\mathbf{A}$  の二次の項を無視する。また、

$$\check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) \\ -\Delta^*(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) & 0 \end{pmatrix} \quad (1.201)$$

とする。相対座標に関する振動が現れる項を小さいとして近似したいので、二つの Gor'kov 方程式の差をとると都合が良い。また、方程式は  $\tau$  に関して Fourier 変換しておく。そうすると、

$$\check{G}^{-1}(\mathbf{r}_1, i\omega_n) \check{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; i\omega_n) - \check{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; i\omega_n) \check{G}^{-1}(\mathbf{r}_2, i\omega_n) = \check{0} \quad (1.202)$$

を変形して、相対座標を方程式から取り除けばよいことがわかる。

以下、式の変形である。

$$\begin{pmatrix} i\omega_n + \frac{1}{2m}(\nabla_1 - \frac{ie}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_1))^2 & 0 \\ 0 & -i\omega_n + \frac{1}{2m}(\nabla_1 + \frac{ie}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_1))^2 \end{pmatrix} \check{G} - \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_1, \mathbf{r}_1) \check{G} \quad (1.203)$$

$$- \check{G} \begin{pmatrix} i\omega_n + \frac{1}{2m}(\nabla_2 - \frac{ie}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_2))^2 & 0 \\ 0 & -i\omega_n + \frac{1}{2m}(\nabla_2 + \frac{ie}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_2))^2 \end{pmatrix} + \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_2, \mathbf{r}_2) \check{G} \quad (1.204)$$

とし、Pauli 行列

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.205)$$

を用いれば、

$$\begin{aligned} & \frac{\nabla_1^2 - \nabla_2^2}{2m} \check{G} + i\omega_n [\sigma^z, \check{G}] - \{ \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_1, \mathbf{r}_1) \check{G} - \check{G} \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_2, \mathbf{r}_2) \} \\ & - \frac{ie}{mc} \{ \mathbf{A}(\mathbf{r}_1) \cdot \nabla_1 \sigma^z \check{G} + \mathbf{A}(\mathbf{r}_2) \cdot \nabla_2 \check{G} \sigma^z \} \end{aligned} \quad (1.206)$$

となり、さらに変形すると、

$$\begin{aligned} & \frac{\nabla_1^2 - \nabla_2^2}{2m} \check{G} + i\omega_n [\sigma^z, \check{G}] - \left[ \frac{\check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_1, \mathbf{r}_1) + \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_2, \mathbf{r}_2)}{2}, \check{G} \right] \\ & - \left[ \frac{\check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_1, \mathbf{r}_1) - \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_2, \mathbf{r}_2)}{2}, \check{G} \right]_+ - \frac{ie}{mc} \{ \mathbf{A}(\mathbf{r}_1) \cdot \nabla_1 \sigma^z \check{G} + \mathbf{A}(\mathbf{r}_2) \cdot \nabla_2 \check{G} \sigma^z \} \end{aligned} \quad (1.207)$$

となる。相対座標に関する振動の特徴的な長さは  $p_F^{-1}$  であり、ペアポテンシャルは  $\xi$  程度、ベクトルポテンシャルは  $\lambda_L$  程度であるから、 $p_F^{-1} \ll \xi, \lambda_L$  であれば、それらのその重心での値と等しいと近似でき

$$\left[ \frac{\check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_1, \mathbf{r}_1) + \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_2, \mathbf{r}_2)}{2}, \check{G} \right] \sim [\check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}), \check{G}] \quad (1.208)$$

$$\left[ \frac{\check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_1, \mathbf{r}_1) - \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}_2, \mathbf{r}_2)}{2}, \check{G} \right]_+ \sim 0 \quad (1.209)$$

$$\{ \mathbf{A}(\mathbf{r}_1) \cdot \nabla_1 \sigma^z \check{G} + \mathbf{A}(\mathbf{r}_2) \cdot \nabla_2 \check{G} \sigma^z \} \sim \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \{ \nabla_1 \sigma^z \check{G} + \nabla_2 \check{G} \sigma^z \} \quad (1.210)$$

となる。これらを用いれば、上式は

$$\frac{\nabla_1^2 - \nabla_2^2}{2m} \check{G} - [i\omega_n \sigma^z + \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}), \check{G}] - \frac{ie}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \{ \nabla_1 \sigma^z \check{G} + \nabla_2 \check{G} \sigma^z \} \quad (1.211)$$

となる。ここで、微分演算子  $\nabla_1$ 、 $\nabla_2$  を、重心座標  $\mathbf{r}$  および相対座標  $\bar{\mathbf{r}}$  に関する微分演算子  $\nabla$ 、 $\bar{\nabla}$  で書き表せば、

$$\nabla_1 = \bar{\nabla} + \frac{1}{2} \nabla \quad (1.212)$$

$$\nabla_2 = -\bar{\nabla} + \frac{1}{2} \nabla \quad (1.213)$$

としてさらに書き直せば、

$$\frac{\nabla \bar{\nabla}}{m} \check{G} - [i\omega_n \sigma^z + \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}), \check{G}] - \frac{ie}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \left\{ [\sigma^z, \bar{\nabla} \check{G}] + \frac{1}{2} [\sigma^z, \nabla \check{G}]_+ \right\} \quad (1.214)$$

となる。また、Green 関数の相対座標  $\bar{\mathbf{r}}$  に関する Fourier 表示は

$$\check{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; i\omega_n) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \check{G}(\mathbf{p}, \mathbf{r}; i\omega_n) e^{i\mathbf{p} \cdot \bar{\mathbf{r}}} \quad (1.215)$$

である。式 (1.214) の第一項と最終項の係数の大きさを比べると、

$$v_F \nabla \check{G} \gg \frac{e}{2mc} \mathbf{A} \nabla \check{G} \quad (1.216)$$

であることがわかり、最終項は無視することができる。よって、式 (1.215) を式 (1.214) に代入して整理すると、

$$-i\mathbf{v} \cdot \nabla \check{G}(\mathbf{p}, \mathbf{r}; i\omega_n) = \left[ i\omega_n \sigma^z - \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) + \frac{e}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \sigma^z, \check{G}(\mathbf{p}, \mathbf{r}; i\omega_n) \right] \quad (1.217)$$

となる。これで、相対座標  $\bar{\mathbf{r}}$  が陽に現れない方程式を作ることができた。

最後に、準古典 Green 関数に関する方程式にするために、Green 関数以外の  $\xi_{\mathbf{p}}$  依存性を無視し Fermi 面上の値に置き換え、両辺を  $\xi_{\mathbf{p}}$  で周回積分すると、

$$-i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) = \left[ i\omega_n \sigma^z - \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) + \frac{e}{c} \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \sigma^z, \check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \right] \quad (1.218)$$

$$= \left[ \begin{pmatrix} i\omega_n + \frac{e}{c} \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) & -\Delta(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) \\ \Delta^*(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) & -i\omega_n - \frac{e}{c} \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \right] \quad (1.219)$$

となり、これが Eilenberger 方程式である。

また、これらを成分ごとに書き出すと、

$$-i\mathbf{v}_F \cdot \nabla g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) + \Delta^*(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) f - \Delta(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) f^\dagger = 0 \quad (1.220)$$

$$-i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \bar{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) - \Delta^*(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) f + \Delta(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) f^\dagger = 0 \quad (1.221)$$

$$-i\mathbf{v}_F \cdot \left( \nabla - \frac{2ie}{c} \mathbf{A} \right) f - 2i\omega_n f - \Delta(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) (g - \bar{g}) = 0 \quad (1.222)$$

$$i\mathbf{v}_F \cdot \left( \nabla + \frac{2ie}{c} \mathbf{A} \right) f^\dagger - 2i\omega_n f^\dagger - \Delta^*(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) (g - \bar{g}) = 0 \quad (1.223)$$

となる。後に述べる規格化条件により、第1式と第2式、第3式と第4式が完全に同等となる。したがって、独立な方程式は二つのみである。

### 1.5.5 一様系における解

この小節では、磁場がゼロかつ空間的に一様な系における Gor'kov 方程式を解いた結果を用いて、準古典 Green 関数を得ることにする。ここでは singlet-pairing の場合を考えることにする。

一様系における Green 関数は式 (1.165) (1.166) である。系が時間反転対称性を持つことから

$$G(\mathbf{p}; i\omega_n) = \bar{G}(-\mathbf{p}; -i\omega_n) \quad (1.224)$$

$$= \bar{G}(\mathbf{p}; -i\omega_n) \quad (1.225)$$

$$F^*(\mathbf{p}; i\omega_n) = F^\dagger(-\mathbf{p}; -i\omega_n) \quad (1.226)$$

$$= F^\dagger(\mathbf{p}; -i\omega_n) \quad (1.227)$$

が成り立つので、

$$\bar{G}(\mathbf{p}; i\omega_n) = -\frac{-i\omega_n + \xi_{\mathbf{p}}}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta|^2} \quad (1.228)$$

$$F(\mathbf{p}; i\omega_n) = \frac{\Delta}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta|^2} \quad (1.229)$$

となる。準古典 Green 関数の定義は

$$\oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} G(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) \equiv g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \quad (1.230)$$

$$\oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} \bar{G}(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) \equiv \bar{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \quad (1.231)$$

$$\int \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} F(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) = \oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} F(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) \equiv f(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \quad (1.232)$$

$$\int \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} F^\dagger(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) = \oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} F^\dagger(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}_-; i\omega_n) \equiv f^\dagger(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \quad (1.233)$$

であるから、準古典 Green 関数は

$$g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \equiv -\oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} \frac{i\omega_n + \xi_{\mathbf{p}}}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta|^2} \quad (1.234)$$

$$= -\frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}} \quad (1.235)$$

$$\bar{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \equiv -\oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} \frac{-i\omega_n + \xi_{\mathbf{p}}}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta|^2} \quad (1.236)$$

$$= \frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}} \quad (1.237)$$

$$f(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \equiv \oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} \frac{\Delta}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta|^2} \quad (1.238)$$

$$= \frac{\Delta}{i\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}} \quad (1.239)$$

$$f^\dagger(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \equiv \oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} \frac{\Delta^*}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta|^2} \quad (1.240)$$

$$= \frac{\Delta^*}{i\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}} \quad (1.241)$$

となる。

ここで注意しなければならないのは、周回積分の範囲である。この積分は上半面と下半面の積分を足して2で割るかたちとなっている。以下に理由を示す。G は常伝導で値が零にならず、 $\xi_{\mathbf{p}}$  で積分すると発散してしまうため、

$$\int_{-\infty}^{\infty} G d\xi_{\mathbf{p}} = \int_{-\infty}^{\infty} G^{(n)} d\xi_{\mathbf{p}} + \int_{-\infty}^{\infty} (G - G^{(n)}) d\xi_{\mathbf{p}} \quad (1.242)$$

のように、常伝導成分  $G^{(n)}$  と超伝導成分  $(G - G^{(n)})$  に分けていた。超伝導部分は十分遠方で0になるので、複素積分として

$$\int_{-\infty}^{\infty} (G - G^{(n)}) d\xi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \left[ 2 \int_{-\infty}^{\infty} (G - G^{(n)}) d\xi_{\mathbf{p}} + \int_{C_1} (G - G^{(n)}) d\xi_{\mathbf{p}} + \int_{C_2} (G - G^{(n)}) d\xi_{\mathbf{p}} \right] \quad (1.243)$$

としてもよい。ここで、 $C_1$ 、 $C_2$  は図.1.10 のように定義されている。さらに、整理すれば

$$\longrightarrow = \frac{1}{2} \left\{ \longrightarrow + \begin{array}{c} \text{C}_1 \\ \text{C}_2 \end{array} \right\} = \text{C}_3$$

図 1.10: 複素平面における積分範囲。

$$\int_{-\infty}^{\infty} (G - G^{(n)}) d\xi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \left[ \int_{C_3} (G - G^{(n)}) d\xi_{\mathbf{p}} \right] = \frac{1}{2} \int_{C_3} G d\xi_{\mathbf{p}} - \frac{1}{2} \int_{C_3} G^{(n)} d\xi_{\mathbf{p}} \quad (1.244)$$

となる。したがって、準古典 Green 関数の積分範囲は  $C_3$  であることがわかる。積分範囲を  $C_3$  のようにとることで、準古典 Green 関数による状態密度が BCS 理論の状態密度が厳密に一致する。

### 1.5.6 規格化条件

Eilenberger 方程式は、行列積  $\check{g}\check{g}$  も解となっている。以下にそれを示す。Eilenberger 方程式を

$$-i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{g} = [B, \check{g}] = B\check{g} - \check{g}B \quad (1.245)$$

とおく。ここで、

$$B\check{g} = \check{g}B - i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{g} \quad (1.246)$$

$$B\check{g}\check{g} = \check{g}B\check{g} - i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{g}\check{g} \quad (1.247)$$

であるから、

$$[B, \check{g}\check{g}] = B\check{g}\check{g} - \check{g}\check{g}B = \check{g}B\check{g} - \check{g}\check{g}B - i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{g}\check{g} \quad (1.248)$$

$$= \check{g}[B, \check{g}] - i\mathbf{v}_F \cdot \{ \nabla(\check{g}\check{g}) - (\nabla\check{g})\check{g} \} \quad (1.249)$$

となり、式 (1.245) を用いると、

$$[B, \check{g}\check{g}] = \check{g}(-i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{g}) - i\mathbf{v}_F \cdot \nabla(\check{g}\check{g}) + i\mathbf{v}_F \cdot (\nabla\check{g})\check{g} \quad (1.250)$$

$$= -i\mathbf{v}_F \cdot \nabla(\check{g}\check{g}) \quad (1.251)$$

となり、これは  $\check{g}\check{g}$  が Eilenberger 方程式の解であることを示している。

さて、 $\check{g}\check{g}$  が解であるということは、 $\hat{\mathbf{p}}$  に沿って

$$\check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) = \begin{pmatrix} gg - ff^\dagger & f(g + \bar{g}) \\ -f^\dagger(g + \bar{g}) & \bar{g}\bar{g} - ff^\dagger \end{pmatrix} \quad (1.252)$$

$$= A\check{1} + B\check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \quad (1.253)$$

を満たすということである。なぜならば、 $\check{g}$  に関する線形な方程式は、その解の線形結合も解であるからである。

ここで、これらの定数を決定したい。定数は系の状況によらないので、単純な状況で準古典 Green 関数の表式を求めることで定数を決定することにする。そこで、十分遠方において系が空間的に一様かつ  $A = 0$  という状態に連続的に移項するという境界条件を課す。そうすることによって、空間的に一様な場合の準古典 Green 関数の具体的な表式から定数が求まる。準古典 Green 関数の具体的な表式は、式 (1.235) ~ (1.241) であるから、規格化条件は

$$\check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) = \check{1} \quad (1.254)$$

となる。この条件によって、4 個の Eilenberger 方程式のうち 2 個のみが独立となる。

## 第2章 渦糸周りの局所電子状態密度の解析的理論

### 2.1 はじめに

#### 2.1.1 既存の理論の問題

近年、渦糸周りの局所電子状態密度分布 (LDOS) の解析的理論を構築したのは Ueno らである<sup>21)</sup>。彼らは、等方的二次元フェルミ面と三次元フェルミ面の LDOS を求め、LDOS のその物理的起源を明らかにした。しかしながら、彼らの三次元的フェルミ面の理論は、三次元的フェルミ面を持つときの LDOS パターンを解析的に求めることができなかった。彼らは、三次元的フェルミ面を持つ系の LDOS を異なるフェルミ速度を持つ二次元的フェルミ面を持つ系の LDOS の重ね合わせで表現した。彼らは、三次元 d 波超伝導体の LDOS は無限遠方へ伸びる LDOS の発散線によって空間が埋め尽くされ、三次元 d 波超伝導体の LDOS は二次元 d 波超伝導体の LDOS よりも異方性が弱まると予想した<sup>21)</sup>。しかしながら、無限遠方に伸びる LDOS の発散線が空間を埋め尽くすことで異方性が弱まるというシナリオは、何故 LDOS の発散線が空間を埋め尽くすと三次元系で得られる LDOS パターンの異方性が弱まるのかという問いには答えられず、物理的根拠が乏しい。本質的には、Eilenberger 方程式を解けば三次元超伝導体でも二次元超伝導体でも LDOS パターンは計算できるはずであるから、彼らの議論には何らかの不足点があり、その結果実際得られるはずの LDOS パターンを予想することができなかったと考えられる。つまり、三次元的フェルミ面をもつ物質に関しては、十分な議論がされていないといえる。また、フェルミ面が異方的な場合に LDOS がどのように変更されるかについてはまったく議論されていない。

#### 2.1.2 本章の目的

本章では、Kramer-Pesch 近似をより一般化し、任意の方向の磁場、任意の異方的ペアポテンシャル、任意の異方的フェルミ面を持つ二次元或いは三次元の超伝導体に適用可能な LDOS の解析的理論を構築する。この理論を用いれば、異方的超伝導体の LDOS に現れていた異方的なパターンの由来を自然に説明することができ、過去の数値計算による LDOS パターンをより容易に理解することができる。また、この理論は二次元超伝導体に関する Ueno の理論<sup>21)</sup> をその内部に含む形となっている。

本章は以下のような流れで構成されている。§2.2 では、序章で得られた Eilenberger 方程式を Riccati formalism を用いて Riccati 方程式へと変形する。§2.3 では、二次元的フェルミ面を仮定して KP 近似を用いて Riccati 方程式を摂動展開し、渦糸コア近傍における準古典 Green 関数の解析的表式を得る。§2.4 では、§2.3 で用いた手法を三次元等方的フェルミ面に拡張する。§2.4 までは Journal of the Physical Society of Japan 75 (2006) 104701 に掲載された論文をまとめたものである。§2.5 では、任意の異方的フェルミ面に対応できるように Eilenberger 方程式を拡張し、それに伴い異方的フェルミ面を持つ系での LDOS の解析的表式を導出する。§2.6 では、これら解析的表式を用いて LDOS を計算する。Hayashi らによって数値計算された NbSe<sub>2</sub> の LDOS と我々の理論による LDOS を比較することで、理論の妥当性を確かめ、その後 YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C、異方的フェルミ面を持つ場合の等方的 s 波や d 波の LDOS を計算し議論する。

## 2.2 Riccati 方程式

### 2.2.1 triplet-pairing の場合の Eilenberger 方程式

singlet-pairing あるいは unitary な triplet pairing の場合の Eilenberger 方程式は式 (1.218) で表される。より一般的な場合、つまりスピン添え字を含めた  $4 \times 4$  の Eilenberger 方程式は

$$-i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) = \left[ \begin{pmatrix} (i\omega_n + \frac{e}{c} \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})) \hat{\sigma}_0 & -\hat{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) \\ \hat{\Delta}^\dagger(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}) & (-i\omega_n - \frac{e}{c} \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})) \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix}, \check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \right] \quad (2.1)$$

と書くことができる。ここで、不純物の効果（自己エネルギーの補正）を無視して Type II limit として  $A \sim 0$  とし、

$$\check{\tau}_3 = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_0 & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

$$\check{\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

を用いれば、式 (2.1) は

$$i\mathbf{v}_F(\tilde{\mathbf{k}}) \cdot \nabla \check{g} + [i\omega_n \check{\tau}_3 - \check{\Delta}, \check{g}] = 0, \quad (2.4)$$

と書くことができる。スピン添え字を含んだ  $4 \times 4$  の Gor'kov 方程式が形式的に  $2 \times 2$  の場合と変わらないため、Eilenberger 方程式の導出を同様の議論でできるのである。

### 2.2.2 Projection Method

次に、 $4 \times 4$  の行列微分方程式である Eilenberger 方程式を、 $2 \times 2$  の二元連立行列微分方程式である Riccati 方程式へと変形する。Eilenberger 方程式を Riccati 方程式に変形する方法はいくつかあるが、本論文ではスピン添え字を含む場合にも適用できる Eschrig の Projection method を用いることにする。

#### Projectors の定義

まず、 $4 \times 4$  の行列で表現される以下の projector を導入する：

$$\check{P}_\pm = \frac{1}{2} (\check{1} \mp \check{g}) \quad (2.5)$$

この行列が

$$\check{P}_\pm \cdot \check{P}_\pm = \check{P}_\pm \quad (2.6)$$

$$\check{P}_+ \cdot \check{P}_- = \check{P}_- \cdot \check{P}_+ = \check{0} \quad (2.7)$$

$$\check{P}_+ + \check{P}_- = \check{1} \quad (2.8)$$

$$\check{g} = \check{P}_- - \check{P}_+ \quad (2.9)$$

$$= -(2\check{P}_+ - \check{1}) = -(\check{1} - 2\check{P}_-) \quad (2.10)$$

を満たすことは容易に確かめられる<sup>1</sup>。この projector を Eilenberger 方程式に代入すると、

$$i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{P}_\pm + \left[ \begin{pmatrix} i\omega_n \hat{\sigma}_0 & -\hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta} & -i\omega_n \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix}, \check{P}_\pm \right] = 0 \quad (2.11)$$

となる。ここで  $\bar{\Delta} \equiv -\hat{\Delta}^\dagger$  である。

<sup>1</sup>規格化条件  $\check{g}\check{g} = \check{1}$  を用いる。

$\hat{a}_+$  及び  $\hat{b}_-$  の導入

次に、spin matrix を持つ  $2 \times 2$  の行列  $\hat{a}_+$ 、 $\hat{b}_-$  を導入する。 $\check{P}_\pm$  を

$$\check{P}_+ = \begin{pmatrix} \hat{1} \\ -\hat{b}_- \end{pmatrix} (\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} (\hat{1}, \hat{a}_+) \quad (2.12)$$

$$\check{P}_- = \begin{pmatrix} -\hat{a}_+ \\ \hat{1} \end{pmatrix} (\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} (\hat{b}_-, \hat{1}) \quad (2.13)$$

と置けば、最初に定義した  $\check{P}_\pm$  の性質のうち  $\check{P}_\pm \cdot \check{P}_\pm = \check{P}_\pm$ 、 $\check{P}_+ \cdot \check{P}_- = \check{P}_- \cdot \check{P}_+ = \check{0}$  を満たしている。ここで

$$\check{P}_+ + \check{P}_- = \begin{pmatrix} -\hat{a}_+ (\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} \hat{b}_- + (\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & -\hat{a}_+ (\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} + (\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ \\ (\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} \hat{b}_- - \hat{b}_- (\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & (\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} - \hat{b}_- (\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

であるから、 $\check{P}_+ + \check{P}_- = \check{1}$  を満たすためには

$$(\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ = \hat{a}_+ (\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} \quad (2.15)$$

という関係があればよい。

### Matrix Riccati 方程式

式 (2.11) に式 (2.12) を代入して計算すると、 $\hat{a}_+$  と  $\hat{b}_-$  に関する方程式を得ることができる。

逆行列の微分が

$$\frac{d}{dx} \hat{A}^{-1}(x) = -\hat{A}^{-1}(x) \frac{d}{dx} \hat{A}(x) \hat{A}^{-1}(x) \quad (2.16)$$

となることに注意して、式を計算して整理すると

$$\begin{aligned} i\mathbf{v}_F \cdot \begin{pmatrix} -(1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} (-\nabla(\hat{a}_+ \hat{b}_-))(1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & -(1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} (-\nabla(\hat{a}_+ \hat{b}_-))(1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ \\ \hat{b}_- (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} (-\nabla(\hat{a}_+ \hat{b}_-))(1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & (1 - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} (-\nabla(\hat{b}_- \hat{a}_+))(1 - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} \hat{b}_- \hat{a}_+ \end{pmatrix} \\ + i\mathbf{v}_F \cdot \begin{pmatrix} 0 & (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \nabla \hat{a}_+ \\ -\nabla \hat{b}_- (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & -(1 - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} \nabla(\hat{b}_- \hat{a}_+) \end{pmatrix} \\ + \begin{pmatrix} \hat{\Delta} \hat{b}_- (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & 2i\omega_n (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ \\ -\hat{\bar{\Delta}} (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} - \hat{b}_- (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ \hat{\bar{\Delta}} & -\hat{\bar{\Delta}} (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ \end{pmatrix} \\ + \begin{pmatrix} (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ \hat{\bar{\Delta}} & \hat{\Delta} \hat{b}_- (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ + (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{\Delta} \\ 2i\omega_n \hat{b}_- (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & -\hat{b}_- (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{\Delta} \end{pmatrix} = \check{0} \end{aligned} \quad (2.17)$$

となる。右上の行列要素に着目して、左上の行列要素の関係式を代入して整理すると、

$$i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \hat{a}_+ + 2i\omega_n \hat{a}_+ - \hat{a}_+ \hat{\bar{\Delta}} \hat{a}_+ + \hat{\Delta} = 0 \quad (2.18)$$

となり、左下の行列要素に着目して、左上の行列要素の関係式を代入して整理すると

$$i\mathbf{v}_F \cdot \nabla \hat{b}_- - 2i\omega_n \hat{b}_- - \hat{b}_- \hat{\Delta} \hat{b}_- + \hat{\bar{\Delta}} = 0 \quad (2.19)$$

となる。これらが Matrix Riccati 方程式である<sup>22, 17)</sup>。

また、 $\check{g} = \check{P}_- - \check{P}_+$  であるから、

$$\check{g} = - \begin{pmatrix} \hat{a}_+ (\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} \hat{b}_- + (\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & \hat{a}_+ (\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} + (\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ \\ -(\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} \hat{b}_- - \hat{b}_- (\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & -(\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} - \hat{b}_- (\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

$$= - \begin{pmatrix} (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} (\hat{1} + \hat{a}_+ \hat{b}_-) & 2(1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} \hat{a}_+ \\ -2(1 - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} \hat{b}_- & -(1 - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} (\hat{1} + \hat{b}_- \hat{a}_+) \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

$$= - \begin{pmatrix} (1 - \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & 0 \\ 0 & (1 - \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\hat{1} + \hat{a}_+ \hat{b}_-) & 2\hat{a}_+ \\ -2\hat{b}_- & -(\hat{1} + \hat{b}_- \hat{a}_+) \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

となる。ここで、式 (2.15) を用いた。

### 変数変換

Scalar Riccati 方程式は

$$\mathbf{v}_F \cdot \nabla a_+ + [2\omega_n + \Delta^* a_+] a_+ - \Delta = 0 \quad (2.23)$$

$$\mathbf{v}_F \cdot \nabla b_- - [2\omega_n + \Delta b_-] b_- + \Delta^* = 0 \quad (2.24)$$

と書けるので、形式的に Scalar Riccati 方程式と一致させるために式 (2.19) の変数を  $\hat{a}_+ \rightarrow i\hat{a}$ 、 $\hat{b}_- \rightarrow i\hat{b}$  と置きなおすと、

$$\mathbf{v}_F \cdot \nabla \hat{a} + 2\omega_n \hat{a} + \hat{a} \hat{\Delta}^\dagger \hat{a} - \hat{\Delta} = 0, \quad (2.25)$$

$$\mathbf{v}_F \cdot \nabla \hat{b} - 2\omega_n \hat{b} - \hat{b} \hat{\Delta} \hat{b} + \hat{\Delta}^\dagger = 0, \quad (2.26)$$

$$\tilde{g} = -\tilde{N} \begin{pmatrix} (\hat{1} - \hat{a}\hat{b}) & 2i\hat{a} \\ -2i\hat{b} & -(\hat{1} - \hat{b}\hat{a}) \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

$$\tilde{N} = \begin{pmatrix} (1 + \hat{a}\hat{b})^{-1} & 0 \\ 0 & (1 + \hat{b}\hat{a})^{-1} \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

となる。

Matrix Riccati 方程式において、 $\nabla$  は常に  $\mathbf{v}_F \cdot \nabla$  の形でしか含まれないため、フェルミ速度  $\mathbf{v}_F$  の方向にそった直線を考えれば方程式は一次元問題に帰着できる。また、準古典近似においては、Eilenberger 方程式がフェルミ面の各点各点に対して独立であるので、準古典 Green 関数はフェルミ面の各点各点で独立に求めることができる。そのため、つねに座標軸をフェルミ速度の方向の軸とそれと直交する軸に選んで Matrix Riccati 方程式を解く事ができる。

## 2.3 二次元的フェルミ面

### 2.3.1 座標系の設定

前節で述べたように、Matrix Riccati 方程式はフェルミ速度の方向を軸とする座標系を用いれば一次元の方程式に帰着できるので、フェルミ速度の方向を基準とした座標系を採用する。この節では二次元的なフェルミ面を持つ系を対象とする。三次元的フェルミ面を持つ系については次節以降を対象とする。

座標系として

$$\mathbf{k} = k \left[ \cos \theta \hat{\mathbf{a}} + \sqrt{\frac{m_y}{m_x}} \sin \theta \hat{\mathbf{b}} \right], \quad (2.29)$$

$$\mathbf{v} = v \left[ \cos \theta \hat{\mathbf{a}} + \sqrt{\frac{m_x}{m_y}} \sin \theta \hat{\mathbf{b}} \right], \quad (2.30)$$

$$\equiv v_F(\theta_v) \left[ \cos \theta_v \hat{\mathbf{a}} + \sin \theta_v \hat{\mathbf{b}} \right], \quad (2.31)$$

$$\mathbf{r} = X \hat{\mathbf{a}} + Y \hat{\mathbf{b}}, \quad (2.32)$$

$$= x \hat{\mathbf{v}} + y \hat{\mathbf{u}}, \quad (2.33)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{v}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \cos \theta_v & \sin \theta_v \\ -\sin \theta_v & \cos \theta_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{a}} \\ \hat{\mathbf{b}} \end{pmatrix}. \quad (2.34)$$

を考える。ここで、 $\theta_v$  は  $a$  軸から測ったフェルミ速度の向きであり (図.2.1 参照)、 $m_x$ 、 $m_y$  は異方的有効質量である。また、 $k_a$  と  $k_b$  は運動量空間において結晶軸に固定された軸である。この系では、フェルミエネルギー

$\varepsilon = k_x^2/(2m_x) + k_y^2/(2m_y)$  を持つフェルミ面上の点  $(k_x, k_y)$  は  $k_x = k \cos \theta$  and  $k_y = k \sqrt{m_y/m_x} \sin \theta$  のようにパラメトライズされている。この座標系で表現できる異方的フェルミ面は楕円形フェルミ面のみである。より一般的な異方的なフェルミ面の場合における座標系と理論の拡張については後述する。

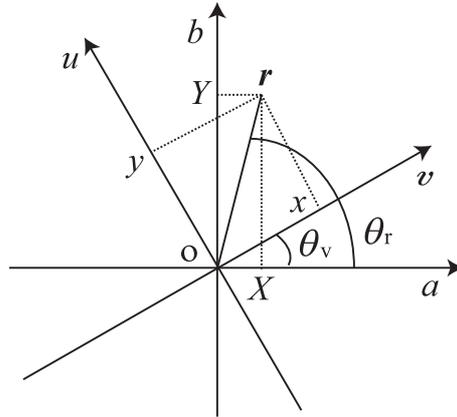


図 2.1: 座標系。v の方向はフェルミ速度の方向と等しい。a 軸と b 軸は結晶軸に固定されている。 $\theta_r$  は a 軸と r の間の角度である。

この座標系において、二次元円形フェルミ面における matrix Riccati 方程式は

$$v_F \frac{\partial}{\partial x} \hat{a} + 2\omega_n \hat{a} + \hat{a} \hat{\Delta}^\dagger \hat{a} - \hat{\Delta} = 0, \quad (2.35)$$

$$v_F \frac{\partial}{\partial x} \hat{b} - 2\omega_n \hat{b} - \hat{b} \hat{\Delta} \hat{b} + \hat{\Delta}^\dagger = 0, \quad (2.36)$$

と書くことができる。また、ペアポテンシャルは

$$\hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = f(r) \exp(i\theta_r) \hat{\Delta}(\mathbf{k}) \quad (2.37)$$

$$= f(r) \exp(i\theta_v) \frac{x + iy}{\sqrt{x^2 + y^2}} \hat{\Delta}(\mathbf{k}), \quad (2.38)$$

$$\hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = f(r) \exp(-i\theta_r) \hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{k}) \quad (2.39)$$

$$= f(r) \exp(-i\theta_v) \frac{x - iy}{\sqrt{x^2 + y^2}} \hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{k}), \quad (2.40)$$

となる。ここで、 $f(r) = f(\sqrt{x^2 + y^2})$  はペアポテンシャルの空間変動部分であり、 $f(0) = 0$  と  $\lim_{r \rightarrow \infty} f(r) = \Delta_\infty$  を満たし、 $\theta_r$  は a 軸と r の間の角度である (図.2.1 参照。)

### 2.3.2 初期条件

以後の小節では、円形のフェルミ面を持つ超伝導体を仮定して考える ( $m_x = m_y = m$ )。異方的フェルミ面を持つ場合は、後述する。ペアポテンシャルが  $\hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger \propto \hat{\sigma}_0$  を満たす場合を考える。この条件は spin-singlet であれば常に満たされ、spin-triplet であればペアポテンシャルが unitary であれば満たされる。このとき、matrix Riccati 方程式は

$$\hat{a} = \frac{\hat{\Delta}}{\omega_n + \sqrt{\omega_n^2 + \frac{1}{2} \text{tr} \hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger}}, \quad \text{for } x = -x_c \quad (2.41)$$

$$\hat{b} = \frac{\hat{\Delta}^\dagger}{\omega_n + \sqrt{\omega_n^2 + \frac{1}{2} \text{tr} \hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger}}, \quad \text{for } x = x_c \quad (2.42)$$

という初期条件のもとで容易に解くことができる。<sup>?)</sup> このとき  $x_c$  は正の実数のカットオフである。

### 2.3.3 Kramer-Pesch 近似

渦糸コア中心では、ペアポテンシャルがゼロになっている。つまり、余分なエネルギーなしで準粒子を励起できる状態になっている。いま、低エネルギー領域 ( $|\omega_n| \ll |\Delta_\infty|$ ) を考える。また、Riccati 方程式の微分方程式の経路として、渦糸コアの極近傍を通るもの (インパクトパラメータ  $y$  が  $|y| \ll \xi_0$  を満たす経路) を考える。このとき、インパクトパラメータ  $y$  とエネルギー  $\omega_n$  に関する摂動を行って Riccati 方程式を解くことを考える。用いている座標系においてペアポテンシャルは式 (2.38)、(2.40) と書けるので、これらを  $y$  について 1 次まで展開すると

$$\hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \sim f(|x|) \exp(i\theta_v) \operatorname{sign}(x) \left(1 + i\frac{y}{x}\right) \hat{\Delta}(\mathbf{k}), \quad (2.43)$$

$$= \hat{\Delta}_0 + \hat{\Delta}_1, \quad (2.44)$$

$$\hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \sim f(|x|) \exp(-i\theta_v) \operatorname{sign}(x) \left(1 - i\frac{y}{x}\right) \hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{k}), \quad (2.45)$$

$$= \hat{\Delta}_0^\dagger + \hat{\Delta}_1^\dagger, \quad (2.46)$$

となる。ここで、 $\hat{\Delta}_1$  は  $i(y/x)\hat{\Delta}_0$  である。上述した展開を用いると  $\hat{\Delta}_1$  は  $x=0$  に特異性を持つように一見思えるが、 $f(|x|)/x$  がいたるところで有限値を持つために  $\hat{\Delta}_1$  は特異性を持たない。

$\omega_n$ 、 $y$  に依存するすべての量を

$$\hat{a} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 \quad (2.47)$$

$$\hat{b} = \hat{b}_0 + \hat{b}_1 \quad (2.48)$$

$$\hat{\Delta} = \hat{\Delta}_0 + \hat{\Delta}_1 \quad (2.49)$$

$$\omega_n = 0 + \omega_n \quad (2.50)$$

$$y = 0 + y \quad (2.51)$$

のように 0 次と 1 次の項に分け、方程式 (2.35)、(2.36) に代入すると

$$v_F \frac{\partial}{\partial x} (\hat{a}_0 + \hat{a}_1) + 2\omega_n (\hat{a}_0 + \hat{a}_1) + (\hat{a}_0 + \hat{a}_1) (\hat{\Delta}_0^\dagger + \hat{\Delta}_1^\dagger) (\hat{a}_0 + \hat{a}_1) - (\hat{\Delta}_0 + \hat{\Delta}_1) = 0 \quad (2.52)$$

$$v_F \frac{\partial}{\partial x} (\hat{b}_0 + \hat{b}_1) - 2\omega_n (\hat{b}_0 + \hat{b}_1) - (\hat{b}_0 + \hat{b}_1) (\hat{\Delta}_0 + \hat{\Delta}_1) (\hat{b}_0 + \hat{b}_1) + (\hat{\Delta}_0^\dagger + \hat{\Delta}_1^\dagger) = 0 \quad (2.53)$$

となる。

#### 0 次の解

方程式 (2.52)、(2.53) を  $y$  と  $\omega_n$  の 0 次までをとると

$$v_F \frac{\partial \hat{a}_0}{\partial x} + \hat{a}_0 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_0 - \hat{\Delta}_0 = 0, \quad (2.54)$$

$$v_F \frac{\partial \hat{b}_0}{\partial x} - \hat{b}_0 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_0 - \hat{\Delta}_0^\dagger = 0, \quad (2.55)$$

となる。初期条件 (2.41)、(2.42) の下で上式を解くと、

$$\hat{a}_0 = \frac{\hat{\Delta}_0}{\sqrt{\frac{1}{2} \operatorname{tr} \hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger}} \Big|_{x \rightarrow -x_c} = \frac{-\hat{\Delta}(\mathbf{k}) \exp(i\theta_v)}{\lambda(\mathbf{k})}, \quad (2.56)$$

$$\hat{b}_0 = \frac{\hat{\Delta}_0^\dagger}{\sqrt{\frac{1}{2} \operatorname{tr} \hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger}} \Big|_{x \rightarrow x_c} = \frac{\hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{k}) \exp(-i\theta_v)}{\lambda(\mathbf{k})}, \quad (2.57)$$

となる。ここで、 $\lambda = \sqrt{\frac{1}{2} \operatorname{tr} \hat{\Delta} \hat{\Delta}^\dagger}$  とした。簡単のため、以後  $\lambda(\mathbf{k})$  は  $\lambda$  と表記することにする。

0 次のときの Green 関数の解について考えてみる。Green 関数と  $\hat{a}$ 、 $\hat{b}$  の関係は式 (2.27) で与えられているので、

$$\check{g} \sim - \begin{pmatrix} (1 + \hat{a}_0 \hat{b}_0)^{-1} & 0 \\ 0 & (1 + \hat{b}_0 \hat{a}_0)^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\hat{1} - \hat{a}_0 \hat{b}_0) & 2i\hat{a}_0 \\ -2i\hat{b}_0 & -(\hat{1} - \hat{b}_0 \hat{a}_0) \end{pmatrix}, \quad (2.58)$$

が 0 次の Green 関数である。いま、

$$\hat{a}_0 \hat{b}_0 = \frac{-\hat{\Delta}(\mathbf{k}) \exp(i\theta_v)}{\lambda} \frac{\hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{k}) \exp(-i\theta_v)}{\lambda} \quad (2.59)$$

$$= -\hat{\sigma}_0 \quad (2.60)$$

であるから、式 (2.58) は発散する。

Kramer-Pesch 近似の 0 次の項を用いると Green 関数が発散するというは、この近似が Green 関数の分母に関する展開であることを意味している。また、0 次近似とはインパクトパラメータ  $y = 0$ 、エネルギー  $\omega_n = 0$  であり、この状況が実現するのは渦糸コア中心であることから、Green 関数は渦糸コア中心で発散することがわかる。これは物理的には状態密度が発散することを意味しているの、渦糸コア中心に Andreev 束縛状態が存在することが 0 次近似からわかる。

### 1 次の解

方程式 (2.52)、(2.53) を  $y$  と  $\omega_n$  の 1 次までをとると

$$v_F \frac{\partial \hat{a}_1}{\partial x} + 2\omega_n \hat{a}_0 + \hat{a}_0 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_0 + \hat{a}_0 \hat{\Delta}_1^\dagger \hat{a}_0 - \hat{\Delta}_1 = 0 \quad (2.61)$$

$$v_F \frac{\partial \hat{b}_1}{\partial x} - 2\omega_n \hat{b}_0 - \hat{b}_0 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_1 - \hat{b}_1 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_0 - \hat{b}_0 \hat{\Delta}_1 \hat{b}_0 + \hat{\Delta}_1^\dagger = 0 \quad (2.62)$$

となる。これらの微分方程式は非同次一階行列微分方程式であるから、同次一階行列微分方程式

$$v_F \frac{\partial \hat{a}_1}{\partial x} + \hat{a}_0 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_0 = 0 \quad (2.63)$$

$$v_F \frac{\partial \hat{b}_1}{\partial x} - \hat{b}_0 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_1 - \hat{b}_1 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_0 = 0 \quad (2.64)$$

の解を利用して解く事ができるかどうかを考えてみる。この方程式に 0 次の解  $\hat{a}_0$ 、 $\hat{b}_0$  の具体形を代入すると、

$$v_F \frac{\partial \hat{a}_1}{\partial x} - 2\lambda f(|x|) \text{sign}(x) \hat{a}_1 = 0 \quad (2.65)$$

$$v_F \frac{\partial \hat{b}_1}{\partial x} - 2\lambda f(|x|) \text{sign}(x) \hat{b}_1 = 0 \quad (2.66)$$

となり、

$$\hat{a}_1 = C_a \exp[2\lambda F(x)] \quad (2.67)$$

$$\hat{b}_1 = C_b \exp[2\lambda F(x)] \quad (2.68)$$

が同次一階行列微分方程式の解である。ここで、 $C_a$ 、 $C_b$  は積分定数であり、

$$F(x) = \frac{1}{v_F} \int_0^x f(|x'|) \text{sign}(x') dx' \quad (2.69)$$

$$= \frac{1}{v_F} \int_0^{|x|} dx' f(x') \quad (2.70)$$

である。よって、非同次一階行列微分方程式は定数変化法を用いると

$$\begin{aligned}\hat{a}_1 &= \frac{2}{v_F} \exp[2\lambda F(x)] \int_{-x_c}^x dx' \left[ i \frac{y}{x'} \hat{\Delta}_0 - \omega_n \hat{a}_0 \right] \exp[-2\lambda F(x')] \\ &\quad + \exp[2\lambda\{F(x) - F(-x_c)\}] \exp(i\theta_v) \frac{(-1)}{\lambda} \left( -i \frac{y}{x_c} - \frac{\omega_n}{\Delta_\infty \lambda} \right) \hat{\Delta}(\mathbf{k}),\end{aligned}\quad (2.71)$$

$$\begin{aligned}\hat{b}_1 &= \frac{2}{v_F} \exp[2\lambda F(x)] \int_{x_c}^x dx' \left[ i \frac{y}{x'} \hat{\Delta}_0^\dagger + \omega_n \hat{b}_0 \right] \exp[-2\lambda F(x')] \\ &\quad + \exp[2\lambda\{F(x) - F(x_c)\}] \exp(-i\theta_v) \frac{1}{\lambda} \left( -i \frac{y}{x_c} - \frac{\omega_n}{\Delta_\infty \lambda} \right) \hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{k})\end{aligned}\quad (2.72)$$

が解となる。

ゆえに、1次までの摂動による Green 関数は

$$\hat{g}(x, y; i\omega_n) \sim -2(\hat{a}_0 \hat{b}_1 + \hat{a}_1 \hat{b}_0)^{-1}, \quad (2.73)$$

$$= -\frac{v_F e^{-2\lambda F(x)} \hat{\sigma}_0}{\int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[ i \frac{y}{|x'|} \lambda f(|x'|) + \omega_n \right] e^{-2\lambda F(x')}}, \quad (2.74)$$

$$= -\frac{v_F e^{-2\lambda F(x)}}{2C [iE + \omega_n]} \hat{\sigma}_0, \quad (2.75)$$

となる。ここで、カットオフは  $x_c \rightarrow \infty$  とし、

$$C(\theta) = \int_0^\infty dx' e^{-2\lambda F(x')}, \quad (2.76)$$

$$E(\theta) = \frac{y}{C} \int_0^\infty dx' \frac{\lambda f(x')}{x'} e^{-2\lambda F(x')}, \quad (2.77)$$

を用いた。  $E(\theta)$  は  $x$  に依らない定数である。

### 2.3.4 局所状態密度

この小節では、  $y$  と  $\omega_n$  の1次の摂動を行って得られた Green 関数を用いて、局所状態密度を得る。局所状態密度  $\nu$  は等方的フェルミ面の場合は

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) = -\nu(0) \int \frac{d\Omega_k}{4\pi} \text{Re tr}(\hat{g}^R). \quad (2.78)$$

と書くことができる。ここで  $\nu(0)$  は常伝導状態でのフェルミ面での状態密度である。遅延準古典 Green 関数は温度 Green 関数を解析接続することで得られ、具体的には

$$\hat{g}^R(x, y; \epsilon) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \hat{g}(x, y; i\omega_n \rightarrow \epsilon + i\delta) \quad (2.79)$$

とすればよい。

フェルミ面が等方的であれば  $\theta_v = \theta$  であり、局所状態密度は

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) \sim \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\nu(0)}{2} \int_0^{2\pi} \frac{v_F d\theta}{2\pi C} \frac{\delta e^{-2\lambda F(x)}}{(\epsilon - E)^2 + \delta^2}, \quad (2.80)$$

$$\sim \frac{\nu(0)v_F}{\xi_0} \int_0^{2\pi} d\theta \lambda \delta(\epsilon - E) e^{-2\lambda F(x)}, \quad (2.81)$$

と近似することができる。ここで、

$$C \sim \int_0^\infty dx' e^{-2\lambda \frac{\Delta_\infty x'}{v_F}} \sim \frac{\xi_0}{\lambda}, \quad (2.82)$$

$$E \sim \frac{y\lambda}{\xi_0} \int_0^{\xi_0} \frac{\Delta_\infty \lambda}{\xi_0} dx' \sim \frac{y}{\xi_0} \Delta_\infty \lambda^2, \quad (2.83)$$

を用いた<sup>2</sup>。式 (2.81) にはデルタ関数が含まれているので、被積分関数は

$$\epsilon - E(\mathbf{r}, \theta) = 0 \quad (2.84)$$

を満たすような点でのみ値を持つ。この関係を満たす解は有限個である (図.2.2 を参照)。式 (2.84) を満たすよ

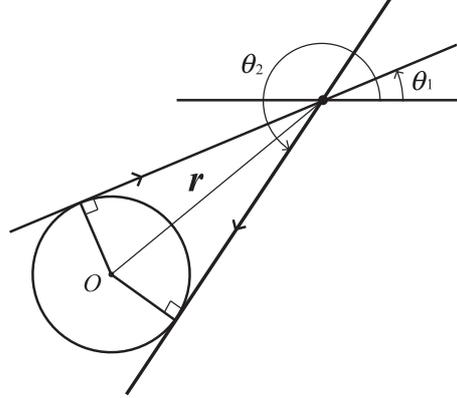


図 2.2: 等方的  $s$  波超伝導体における実空間上の点  $r$  での LDOS の被積分関数に寄与する経路。  $O$  は渦糸の中心を表し、 $\theta_1$  と  $\theta_2$  はこれらの経路を特徴付ける角度である。

うな経路のことを quasiparticle path と呼ぶことにする<sup>21)</sup>。

次に、LDOS が発散する場所について考える。式 (2.81) は  $h(\mathbf{r}, \theta, \epsilon) = \epsilon - E(\mathbf{r}, \theta)$  を用いて

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) \sim \frac{\nu(0)v_F}{\xi_0} \int_0^{2\pi} d\theta \sum_i \lambda(\theta) \frac{\delta(\theta - \theta_i)}{\left| \frac{\partial h(\mathbf{r}, \theta, \epsilon)}{\partial \theta} \right|} e^{-2\lambda(\theta)F(x(\theta))}, \quad (2.85)$$

$$= \frac{\nu(0)v_F}{\xi_0} \sum_i \lambda(\theta_i) \left| \frac{\partial h(\mathbf{r}, \theta, \epsilon)}{\partial \theta} \right|_{\theta=\theta_i}^{-1} \exp\{-2\lambda(\theta_i)F(x(\theta_i))\}, \quad (2.86)$$

と書くことができる。従って、ある場所  $r$  においてあるエネルギー  $\epsilon$  が与えられたとき、

$$h(\mathbf{r}, \theta, \epsilon) = 0, \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, \theta, \epsilon)}{\partial \theta} = 0. \quad (2.88)$$

を満たす場合に LDOS は発散するということと言える。また、式 (2.87) をあるパラメータ  $\theta$  で表された  $x$ - $y$  平面上の直線群とみなせば、式 (2.87) と式 (2.88) を満たす曲線はこの直線群の包絡線であることがいえる。すなわち、quasiparticle path の包絡線が発散点の集合を与え、その集合は

$$\tilde{x} = 2\tilde{\epsilon} \frac{\frac{\partial \lambda(\theta)}{\partial \theta}}{\lambda^3(\theta)}, \quad (2.89)$$

$$\tilde{y} = \frac{\tilde{\epsilon}}{\lambda^2(\theta)} \quad (2.90)$$

を満たすパラメータ表示の方程式が表す曲線である。ここで、無次元量として  $\tilde{\epsilon} = \epsilon/\Delta_\infty$ 、 $\tilde{x} = x/\xi_0$ 、 $\tilde{y} = y/\xi_0$  を用い、 $\lambda(\mathbf{k})$  は  $\lambda(\theta)$  とした。式 (2.32)-(2.34) から、結晶軸に固定された座標系  $(\tilde{X}, \tilde{Y})$  での LDOS の発散点は

$$\begin{pmatrix} \tilde{X} \\ \tilde{Y} \end{pmatrix} = \frac{\tilde{\epsilon}}{\lambda^2(\theta)} \begin{pmatrix} 2 \frac{\frac{\partial \lambda(\theta)}{\partial \theta}}{\lambda(\theta)} \cos \theta - \sin \theta \\ 2 \frac{\frac{\partial \lambda(\theta)}{\partial \theta}}{\lambda(\theta)} \sin \theta + \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (2.91)$$

という包絡線の式で書くことができるのである。

<sup>2</sup> $\xi_0 = v_F/(\pi\Delta_\infty)$

## LDOS の具体例

ここで、二つの具体例を考える。まず最初は、円形のフェルミ面を持つ等方的 s 波超伝導体を考える ( $\lambda(\theta) = 1$ )。このケースでは、図.2.2 のように、 $\theta_1$  と  $\theta_2$  で特徴付けられる quasiparticle path が  $\nu(r, \epsilon)$  に寄与する。また、包絡線の方程式は

$$\begin{pmatrix} \tilde{X} \\ \tilde{Y} \end{pmatrix} = \tilde{\epsilon} \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (2.92)$$

与えられる。このとき、包絡線は図.2.3 のような半径  $\tilde{\epsilon}$  の円を描く。

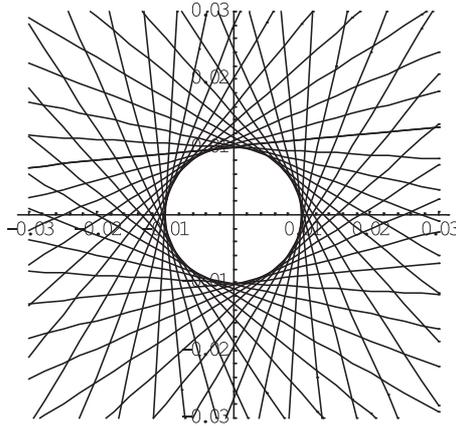


図 2.3: 等方的 s 波超伝導体における  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.01$  である quasiparticle path の集合。LDOS は quasiparticle path の包絡線である  $\tilde{X}^2 + \tilde{Y}^2 = \tilde{\epsilon}^2$  の円上で発散する。

次に、円形フェルミ面を持つ d 波超伝導体を考える。このとき  $\lambda(\theta) = \cos 2\theta$  であり、包絡線の方程式は

$$\begin{pmatrix} \tilde{X} \\ \tilde{Y} \end{pmatrix} = \frac{\tilde{\epsilon}}{\cos^2 2\theta} \begin{pmatrix} -4 \cos \theta \tan 2\theta - \sin \theta \\ -4 \sin \theta \tan 2\theta + \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (2.93)$$

となる。図. 2.4 に、quasiparticle path の集合 (図. 2.4(a)) と包絡線 (Fig. 2.4(b)) を示す。包絡線の形状は、Schopohl ら<sup>12)</sup> や Ichioka ら<sup>13)</sup> が数値計算によって得た LDOS の空間分布 (図. 1.8、図. 1.9) をよく再現している。LDOS パターンはエネルギーが増大するにつれて相似的に拡大するパターンとなっている。これは、包絡線の方程式がエネルギー  $\epsilon$  に比例しているためである。それゆえに、 $\epsilon \rightarrow 0$  の極限を取ると

$$\tilde{Y} = \pm \tilde{X}. \quad (2.94)$$

となる。これが LDOS パターンがエネルギーの上昇とともに 45 度回転する原因となっている<sup>13)</sup> (図. 1.9(a) ~ (d) を参照)。

## 2.3.5 LDOS の発散の強さ

次に、一般的なペアポテンシャルに戻って LDOS の発散の強さについて議論する。以下の議論では、包絡線近傍において LDOS は square-root の特異性を持つということを示す。まず、図.2.5(a) のように包絡線を横切るような動径方向の直線を考える。そして、包絡線直上の点  $A(r_i, \theta_i)$  の周りで式 (2.87) を

$$h(r, \theta) \sim \frac{\partial h}{\partial r} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \Delta r + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \Big|_{(r_i, \theta_i)} (\Delta \theta)^2 + \frac{\partial^2 h}{\partial \theta \partial r} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \Delta r \Delta \theta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial r^2} \Big|_{(r_i, \theta_i)} (\Delta r)^2. \quad (2.95)$$

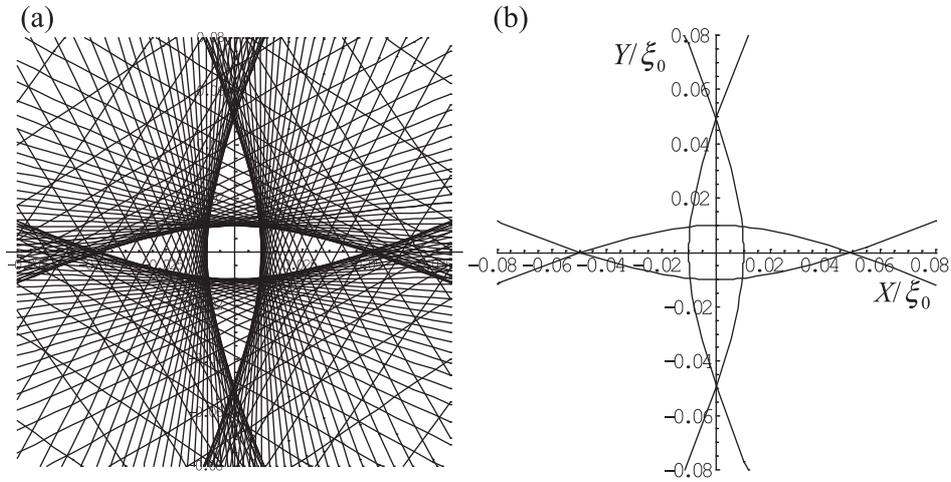


図 2.4:  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.01$  での d 波超伝導体の LDOS 分布。(a): quasiparticle path の集合。(b): quasiparticle path の包絡線。LDOS は quasiparticle path の包絡線上で発散する。

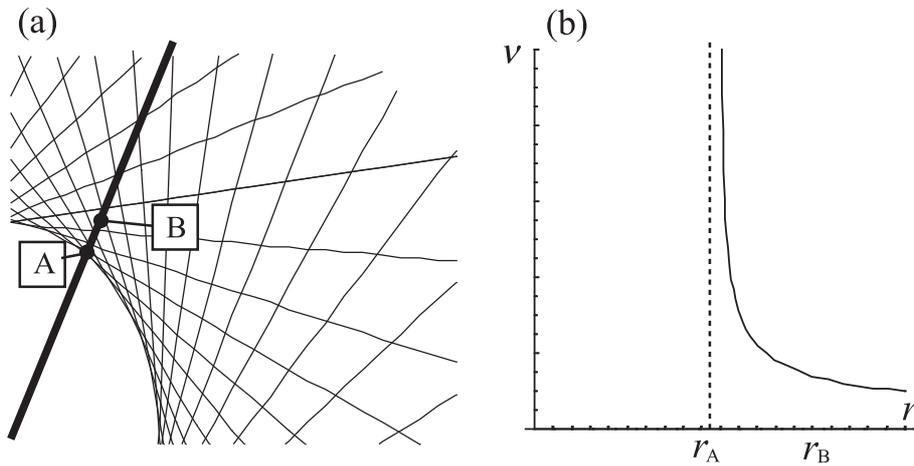


図 2.5: (a) 動径方向の直線 (b) 動径方向に沿った局所電子状態密度の空間依存性。square-root の特異性を持つことがわかる。

のように展開する。式 (2.83)、(2.88) と  $y = r \sin(\theta_r - \theta)$  を用いると

$$\frac{\partial^2 h}{\partial \theta \partial r} \Big|_{(r_i, \theta_i)} = - \frac{\partial^2 E(r, \theta)}{\partial \theta \partial r} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \quad (2.96)$$

$$= - \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial r} r \sin(\theta_r - \theta) \lambda(\theta)^2 \right) \Big|_{(r_i, \theta_i)} \frac{\Delta_\infty}{\xi_0} \quad (2.97)$$

$$= - \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(\theta_r - \theta) \lambda(\theta)^2 \right) \Big|_{(r_i, \theta_i)} \frac{\Delta_\infty}{\xi_0} \quad (2.98)$$

$$= - \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} r \sin(\theta_r - \theta) \lambda(\theta)^2 \right) \Big|_{(r_i, \theta_i)} \frac{\Delta_\infty}{\xi_0} \quad (2.99)$$

$$= - \frac{1}{r_i} \frac{\partial h}{\partial \theta} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \frac{\Delta_\infty}{\xi_0} \quad (2.100)$$

$$= 0 \quad (2.101)$$

であり、 $E(r, \theta) \propto r$  なので

$$\frac{\partial^2 h}{\partial r^2} = 0. \quad (2.102)$$

である。よって、

$$h(r, \theta) \sim \frac{\partial h}{\partial r} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \Delta r + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \Big|_{(r_i, \theta_i)} (\Delta \theta)^2. \quad (2.103)$$

を得る。式 (2.87) に式 (2.103) を用いれば

$$(\Delta \theta) = \pm \left\{ \left( \left( -2 \frac{\partial h}{\partial r} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \right) / \left( \frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \right) \right) \Delta r \right\}^{1/2} \quad (2.104)$$

を得ることができる。ただし、 $\Delta \theta$  が実数である条件

$$(\Delta r) \frac{\partial h}{\partial r} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \Big|_{(r_i, \theta_i)} < 0, \quad (2.105)$$

を満たしていなければならない。動径方向のある曲線上においては、上式左辺の符号は  $\Delta r$  が担っており、それはつまり quasiparticle path は包絡線の片側のみ存在しているということを意味する (図. 2.5(a) を参照)。これは包絡線の定義からも妥当な結果である。さらに、 $h(r, \theta)$  と同様に式 (2.88) を

$$\frac{\partial h}{\partial \theta} \sim \frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \Delta \theta + \frac{\partial^2 h}{\partial \theta \partial r} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \Delta r = \frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \Delta \theta. \quad (2.106)$$

のように  $(r_i, \theta_i)$  周りで展開し、式 (2.86)、(2.103) を用いると、LDOS は

$$\nu(r, \epsilon) \propto \left( - \frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \frac{\partial h}{\partial r} \Big|_{(r_i, \theta_i)} \Delta r \right)^{-1/2}. \quad (2.107)$$

と書くことができる。ゆえに、LDOS は図. 2.5(b) のように square-root で発散する。

## 2.4 三次元的等方的フェルミ面

### 2.4.1 座標系の設定

次に、理論を三次元的フェルミ面を持つ超伝導体も扱えるように拡張する。図. 2.6(a) のように、 $c$  軸から角度  $\phi$  で傾いた  $Z$  軸に沿った vortex を考える。このとき、 $X$  軸を  $a-b$  平面にとれば  $Y$  軸は自動的に定まっている。また、 $X$ 、 $Y$ 、 $Z$  軸の単位ベクトルをそれぞれ  $\hat{a}_M$ 、 $\hat{b}_M$ 、 $\hat{c}_M$  とする。 $Z$  方向には並進対称性が存在し渦糸方向にはペアポテンシャルが空間変化しないことから、Riccati 方程式 (2.25) 中のペアポテンシャル  $\hat{\Delta}(r, \mathbf{k})$  と  $\hat{\Delta}^\dagger(r, \mathbf{k})$  は  $Z$  に依らない。したがって、 $\hat{a}(r, \mathbf{k})$  と  $\hat{b}(r, \mathbf{k})$  は

$$\mathbf{r} = X \hat{a}_M + Y \hat{b}_M + Z \hat{c}_M, \quad (2.108)$$

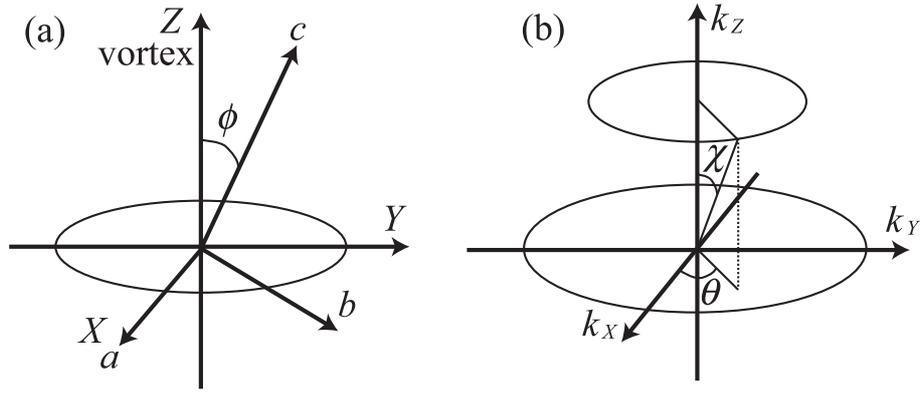


図 2.6: 座標系。(a): 結晶軸に固定された座標系  $(a, b, c)$  と磁場に固定された座標系  $(X, Y, Z)$  との関係。(b): 二つの  $\chi$  が異なる平面。

と書かれる  $r$  に依存するが、それらは  $X$  と  $Y$  を通してのみ変化するのである。したがって、Riccati 方程式における  $\mathbf{v} \cdot \nabla$  は

$$\mathbf{v} \cdot \nabla = v_X \frac{\partial}{\partial X} + v_Y \frac{\partial}{\partial Y}, \quad (2.109)$$

に置き換えることができる。ここで、 $\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{a}}_M = v_X$ 、 $\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{b}}_M = v_Y$  と定義した。以上のことから、三次元系における Riccati 方程式は同様な形の二次元系の Riccati 方程式へと変形することができるのである。そこで、フェルミ面上のある点での運動量とフェルミ速度は

$$\tilde{\mathbf{k}} = \sin \chi \cos \theta \hat{\mathbf{a}}_M + \sin \chi \sin \theta \hat{\mathbf{b}}_M + \cos \chi \hat{\mathbf{c}}_M, \quad (2.110)$$

$$= \tilde{k}_X \hat{\mathbf{a}}_M + \tilde{k}_Y \hat{\mathbf{b}}_M + \tilde{k}_Z \hat{\mathbf{c}}_M, \quad (2.111)$$

$$\mathbf{v} = v_F \hat{\mathbf{v}} = v_F \left[ \sin \chi (\cos \theta \hat{\mathbf{a}}_M + \sin \theta \hat{\mathbf{b}}_M) + \cos \chi \hat{\mathbf{c}}_M \right]. \quad (2.112)$$

と書き、 $\mathbf{a}_M$ - $\mathbf{b}_M$  平面上の実空間座標として  $x, y$  を導入し

$$\mathbf{r} = x \hat{\mathbf{v}} + y \hat{\mathbf{u}} + Z \hat{\mathbf{c}}_M, \quad (2.113)$$

とする。 $x$  はフェルミ速度に沿った座標軸である。 $y$  は  $x$  の直交軸であり、

$$\hat{\mathbf{u}} = -\sin \theta \hat{\mathbf{a}}_M + \cos \theta \hat{\mathbf{b}}_M. \quad (2.114)$$

とおいた。このような座標系を導入することで、三次元系の Riccati 方程式は

$$v_F \sin \chi \frac{\partial \hat{a}}{\partial x} + 2\omega_n \hat{a} + \hat{a} \hat{\Delta}^\dagger \hat{a} - \hat{\Delta} = 0, \quad (2.115)$$

$$v_F \sin \chi \frac{\partial \hat{b}}{\partial x} - 2\omega_n \hat{b} - \hat{b} \hat{\Delta} \hat{b} + \hat{\Delta}^\dagger = 0, \quad (2.116)$$

という  $\mathbf{a}_M$ - $\mathbf{b}_M$  平面上に射影されたフェルミ速度の向きの直線上の一次元 Riccati 方程式へと帰着できるのである。このとき、ペアポテンシャルは  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  を用いて

$$\hat{\Delta}(\mathbf{r}, \tilde{\mathbf{k}}) = f(r) \exp(i\theta_r) \hat{\Delta}(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (2.117)$$

$$\hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{r}, \tilde{\mathbf{k}}) = f(r) \exp(-i\theta_r) \hat{\Delta}^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (2.118)$$

$$\lambda(\tilde{\mathbf{k}}) \equiv \sqrt{\frac{1}{2} \text{tr} \hat{\Delta}(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{\Delta}^\dagger(\tilde{\mathbf{k}})}. \quad (2.119)$$

と書くことができる。以後の議論では二次元系と同様に簡単のため  $\lambda(\mathbf{k})$  は  $\lambda$  と書く。

### 2.4.2 ペアポテンシャルの座標変換

ペアポテンシャル  $\hat{\Delta}(\tilde{\mathbf{k}})$  の  $k$  依存性は、結晶軸  $(a, b, c)$  と関係している。したがって、 $\tilde{\mathbf{k}}$  の成分をそれぞれの結晶軸を基準としたペアポテンシャル  $\hat{\Delta}(\tilde{\mathbf{k}}) = \hat{\Delta}(\tilde{k}_a, \tilde{k}_b, \tilde{k}_c)$  を用いると便利である。磁場 (vortex) は  $b-c$  平面に沿って  $\phi$  だけ  $c$  軸から傾いているので、 $\tilde{k}_a$ 、 $\tilde{k}_b$ 、 $\tilde{k}_c$  はそれぞれ

$$\tilde{k}_a = \tilde{k}_X = \sin \chi \cos \theta, \quad (2.120)$$

$$\tilde{k}_b = \tilde{k}_Y \cos \phi - \tilde{k}_Z \sin \phi, \quad (2.121)$$

$$= \sin \chi \sin \theta \cos \phi - \cos \chi \sin \phi, \quad (2.122)$$

$$\tilde{k}_c = \tilde{k}_Y \sin \phi + \tilde{k}_Z \cos \phi, \quad (2.123)$$

$$= \sin \chi \sin \theta \sin \phi + \cos \chi \cos \phi. \quad (2.124)$$

と書け、ペアポテンシャルは

$$\hat{\Delta}(\tilde{\mathbf{k}}) = \hat{\Delta}(\sin \chi \cos \theta, \sin \chi \sin \theta \cos \phi - \cos \chi \sin \phi, \sin \chi \sin \theta \sin \phi + \cos \chi \cos \phi). \quad (2.125)$$

と書き直すことができる。

### 2.4.3 Green 関数の表式

二次元系の Riccati 方程式 (2.25)、(2.26) と三次元系の Riccati 方程式 (2.115)、(2.116) を比較すれば、三次元系での Green 関数は二次元系での Green 関数の表式 (2.75) の  $v_F$  を  $v_F \sin \chi$  と置き換えることで得られることがわかる。ゆえに、三次元等方的フェルミ面における温度 Green 関数  $\hat{g}(r, \theta, \chi; i\omega_n)$  は

$$\hat{g}(r, \theta, \chi; i\omega_n) \sim -\frac{v_F \sin \chi e^{-2\lambda F(x)}}{2C_{3D} [iE_{3D} + \omega_n]} \hat{\sigma}_0, \quad (2.126)$$

$$\sim -\frac{v_F |\lambda(\theta, \chi)| e^{-2\lambda F(x)}}{2\xi_0 [iE_{3D} + \omega_n]} \hat{\sigma}_0, \quad (2.127)$$

$$C_{3D}(\theta, \chi) \sim \frac{\xi_0}{|\lambda(\theta, \chi)|} \sin \chi, \quad (2.128)$$

$$E_{3D}(\theta, \chi) \sim \frac{y}{\xi_0 \sin \chi} \Delta_\infty \lambda^2(\theta, \chi), \quad (2.129)$$

$$F(x) = \frac{1}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x|} dx' f(x') \quad (2.130)$$

と書ける<sup>3</sup>。局所電子状態密度はこの温度 Green 関数を用いると

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\nu(0)v_F}{4\xi_0} \int_0^\pi d\chi \sin \chi \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{\lambda \delta e^{-2\lambda F(x)}}{(\epsilon - E_{3D})^2 + \delta^2}, \quad (2.131)$$

$$\sim \frac{\nu(0)v_F}{8\xi_0} \int_0^\pi d\chi \sin \chi \int_0^{2\pi} d\theta \lambda \delta (\epsilon - E_{3D}) e^{-2\lambda F(x)}, \quad (2.132)$$

となる。

### 2.4.4 LDOS の発散条件

LDOS の発散条件を議論する。ここで、 $\nu(\mathbf{r}, \epsilon)$  はあるエネルギー  $\epsilon$  において点  $\mathbf{r}_0$  で発散するとする。 $(\theta_0, \chi_0, \mathbf{r}_0)$  の被積分関数にデルタ関数が含まれていることから、

$$h(\theta, \chi, \mathbf{r}) = \epsilon - E_{3D}(\theta, \chi, \mathbf{r}) = 0. \quad (2.133)$$

<sup>3</sup>JPSJ に掲載された Formulation の論文<sup>24)</sup> では式 2.130 の  $\sin \chi$  が抜けてしまっている。本論文の表記の方が正しい。

を満たすときのみ被積分関数は値を持つ。式 (2.133) を満たし発散点から少しずれた点においては、 $\Delta\theta \equiv \theta - \theta_0$ 、 $\Delta\chi \equiv \chi - \chi_0$ 、 $\Delta\mathbf{r} \equiv \mathbf{r} - \mathbf{r}_0$  は

$$\left. \frac{\partial h}{\partial \theta} \right|_0 \Delta\theta + \left. \frac{\partial h}{\partial \chi} \right|_0 \Delta\chi + \left. \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} \right|_0 \cdot \Delta\mathbf{r} = 0, \quad (2.134)$$

が成り立つ。ここで、 $\partial h / \partial \theta|_0 = \partial h / \partial \theta|_{(\theta_0, \chi_0, \mathbf{r}_0)}$  のような表記の簡略化を行った。まずはじめに、

$$\left( \left. \frac{\partial h}{\partial \theta} \right|_0 \right)^2 + \left( \left. \frac{\partial h}{\partial \chi} \right|_0 \right)^2 > 0 \quad (2.135)$$

を仮定し、新しい変数

$$\eta \equiv \left. \frac{\partial h}{\partial \theta} \right|_0 \Delta\theta + \left. \frac{\partial h}{\partial \chi} \right|_0 \Delta\chi, \quad \zeta \equiv -\left. \frac{\partial h}{\partial \chi} \right|_0 \Delta\theta + \left. \frac{\partial h}{\partial \theta} \right|_0 \Delta\chi. \quad (2.136)$$

を導入する。このとき、

$$d\theta d\chi \delta(h(\theta, \chi, \mathbf{r})) = \frac{\delta \left( \eta + \left. \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} \right|_0 \cdot \Delta\mathbf{r} \right) d\eta d\zeta}{\left( \left. \frac{\partial h}{\partial \theta} \right|_0 \right)^2 + \left( \left. \frac{\partial h}{\partial \chi} \right|_0 \right)^2}. \quad (2.137)$$

を得ることができる。条件式 (2.135) より、上式の右辺の分母は 0 にならず、それゆえに  $\nu(\mathbf{r}, \epsilon)$  は有限値である。次に、

$$\left. \frac{\partial h}{\partial \theta} \right|_0 = \left. \frac{\partial h}{\partial \chi} \right|_0 = 0 \quad (2.138)$$

が満たされている場合を考える。このとき、式 (2.133) を満たすためには、 $\Delta\theta$ 、 $\Delta\chi$ 、 $\Delta\mathbf{r}$  の間には

$$a(\Delta\theta)^2 + b(\Delta\chi)^2 + c\Delta\theta\Delta\chi + \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} \cdot \Delta\mathbf{r} = 0, \quad (2.139)$$

という関係が成り立つ必要がある。ここで、

$$a = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \right|_0, \quad b = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 h}{\partial \chi^2} \right|_0, \quad c = \left. \frac{\partial^2 h}{\partial \theta \partial \chi} \right|_0, \quad (2.140)$$

と置いた。変数変換：

$$\begin{pmatrix} \Delta\theta \\ \Delta\chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix}, \quad (2.141)$$

$$\tan 2\varphi = \frac{c}{a-b}, \quad (2.142)$$

を用いると、

$$\tilde{\nu}(\mathbf{r}, \epsilon) \equiv \int d\theta d\chi \delta(h(\theta, \chi, \mathbf{r})) \quad (2.143)$$

$$= \int_{V \ni (0,0)} \delta \left( \alpha P^2 + \beta Q^2 + \left. \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} \right|_0 \cdot \Delta\mathbf{r} \right) dP dQ, \quad (2.144)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \left( a + b + \sqrt{(a-b)^2 + c^2} \right), \quad (2.145)$$

$$\beta = \frac{1}{2} \left( a + b - \sqrt{(a-b)^2 + c^2} \right). \quad (2.146)$$

となる。ここで、 $\tilde{\nu}(\mathbf{r}, \epsilon)$  は  $(\theta_0, \chi_0, \mathbf{r}_0)$  まわりで  $\nu(\mathbf{r}, \epsilon)$  と同じ特異性を持つ関数である。ゆえに、 $\nu(\mathbf{r}, \epsilon)$  の代わりに  $\tilde{\nu}(\mathbf{r}, \epsilon)$  について議論すればよい。

最初に、 $\alpha\beta > 0$  のときには  $\tilde{\nu}(\mathbf{r} = \mathbf{r}_0, \epsilon)$  は発散しないことを示す。 $\alpha > 0$  かつ  $\beta > 0$  のとき、 $\tilde{\nu}(\mathbf{r}_0, \epsilon)$  は

$$\tilde{\nu}(\mathbf{r}_0, \epsilon) \propto \int_0^{R_c} \int_0^{2\pi} \delta(R^2) R dR d\Phi, \quad (2.147)$$

$$= \pi \int_0^{R_c^2} \delta(R^2) d(R^2) = \frac{\pi}{2}, \quad (2.148)$$

という有限値となることがわかる。ここで、 $\sqrt{\alpha}P = R \cos \Phi$ 、 $\sqrt{\beta}Q = R \sin \Phi$ と置いた。また、 $\alpha < 0$ かつ $\beta < 0$ のときも同様な議論で $\tilde{\nu}(r_0, \epsilon)$ は有限値となる。ゆえに、 $\tilde{\nu}(r_0, \epsilon)$ は発散しない。次に、 $\alpha\beta < 0$ のときには $\tilde{\nu}(r = r_0, \epsilon)$ は log 発散することを示す。 $\alpha > 0$ 、 $\beta < 0$ として式 (2.144) を $\sqrt{\alpha}P = R \cos \Phi$ 、 $\sqrt{-\beta}Q = R \sin \Phi$ と変数変換すると

$$\tilde{\nu}(r, \epsilon) \sim \int_0^{R_c} \int_0^{2\pi} \frac{RdRd\Phi}{\sqrt{-\alpha\beta}} \delta \left( R^2 \cos 2\Phi + \left. \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} \right|_0 \cdot \Delta \mathbf{r} \right), \quad (2.149)$$

となる。ここでさらに  $X = R^2$  と変数変換し、 $g(X, \Phi) \equiv X \cos 2\Phi + \left. \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} \right|_0 \cdot \Delta \mathbf{r}$  を用いれば

$$\tilde{\nu}(r, \epsilon) \sim \frac{1}{2\sqrt{-\alpha\beta}} \int_0^{R_c^2} dX \int_0^{2\pi} d\Phi \delta(g(X, \phi)), \quad (2.150)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{-\alpha\beta}} \int_0^{R_c^2} dX \int_0^{2\pi} d\Phi \frac{\partial}{\partial X} \Theta(g(X, \phi)) \frac{1}{\cos 2\Phi} \quad (2.151)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{-\alpha\beta}} \int_0^{2\pi} \frac{d\Phi}{\cos 2\Phi} [\Theta(g(X, \phi))]_0^{R_c^2} \quad (2.152)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{-\alpha\beta}} \int_0^{2\pi} \frac{d\Phi}{\cos 2\Phi} \left\{ \Theta \left( R_c^2 \cos 2\Phi + \left. \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} \right|_0 \cdot \Delta \mathbf{r} \right) - \Theta \left( \left. \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} \right|_0 \cdot \Delta \mathbf{r} \right) \right\} \quad (2.153)$$

となる。ここで、 $\Theta$  は Heaviside step function である。さらに、式 (2.153) を被積分関数が変数  $\Phi$  の周期関数であることを利用して変形すれば、

$$\tilde{\nu}(r, \epsilon) \sim \frac{1}{2\sqrt{-\alpha\beta}} \int_0^{2\pi} \frac{d\Phi}{|\cos 2\Phi|} \Theta \left( R_c^2 \cos 2\Phi - \left| \left. \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} \right|_0 \cdot \Delta \mathbf{r} \right| \right), \quad (2.154)$$

$$\propto \frac{\ln \left| \left. \frac{\partial h}{\partial \mathbf{r}} \right|_0 \cdot \Delta \mathbf{r} \right|}{\sqrt{-\alpha\beta}}, \quad (2.155)$$

となる<sup>4</sup>。最後の式は、被積分関数が  $\cos 2\Phi = 0$  を満たす  $\Phi$  近傍の領域のみが積分に寄与することを用いた。以上から、 $\tilde{\nu}(r_0, \epsilon)$  は log 発散する。ここで、条件  $\alpha\beta = ab - c^2/4 < 0$  は  $h(\theta, \chi) = const.$  を満たす  $\theta$ - $\chi$  平面上における鞍点条件 (saddle point condition):

$$\frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \frac{\partial^2 h}{\partial \chi^2} - \left( \frac{\partial^2 h}{\partial \theta \partial \chi} \right)^2 < 0, \quad (2.156)$$

と等しい。包絡線近傍の LDOS の発散の様子を図. 2.7 に示す。

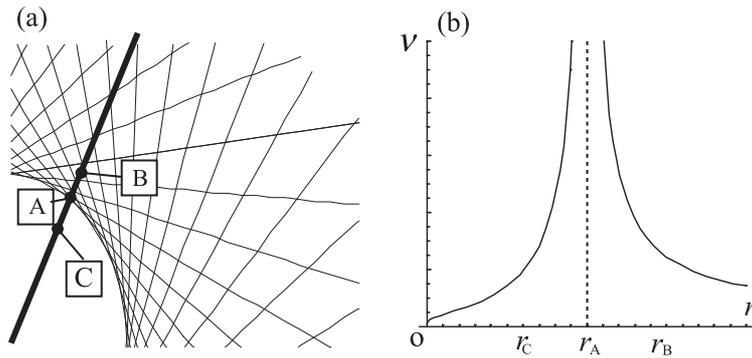


図 2.7: (a) 動径方向の直線 (濃い線) と  $\chi$  を固定したときの quasiparticle path の集合。(b) 局所電子状態密度の動径方向依存性と log 発散。

<sup>4</sup>JPSJ の Formulation の論文は根号が  $\sqrt{\alpha\beta}$  となっているが、本論文が正しい。

以上をまとめると、LDOS が発散する条件は

$$h(\theta, \chi) = 0 \quad (2.157)$$

$$\left. \frac{\partial h}{\partial \theta} \right|_0 = 0 \quad (2.158)$$

$$\left. \frac{\partial h}{\partial \chi} \right|_0 = 0 \quad (2.159)$$

$$\frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \frac{\partial^2 h}{\partial \chi^2} - \left( \frac{\partial^2 h}{\partial \theta \partial \chi} \right)^2 < 0 \quad (2.160)$$

である。この条件は以下のように考えると視覚化しやすい。 $\theta$ - $\chi$  平面において関数  $g_1 = h(\theta, \chi)$  が存在しており、これら条件のうち式 (2.157) を満たす  $(\theta, \chi)$  は曲面  $g_1 = h(\theta, \chi)$  と平面  $g_2 = 0$  の交点であり、式 (2.158) と式 (2.159) を満たす  $(\theta, \chi)$  は曲面  $g_1$  上の極値の点であり、式 (2.158) と式 (2.159) かつ式 (2.160) を満たす  $(\theta, \chi)$  は曲面  $g_1$  上の鞍点である (図, 2.8 参照)。すべての条件が満たされる  $(\theta, \chi)$  は曲面  $g_1$  と平面  $g_2$  との交点であり、かつ曲面  $g_1$  の鞍点である。

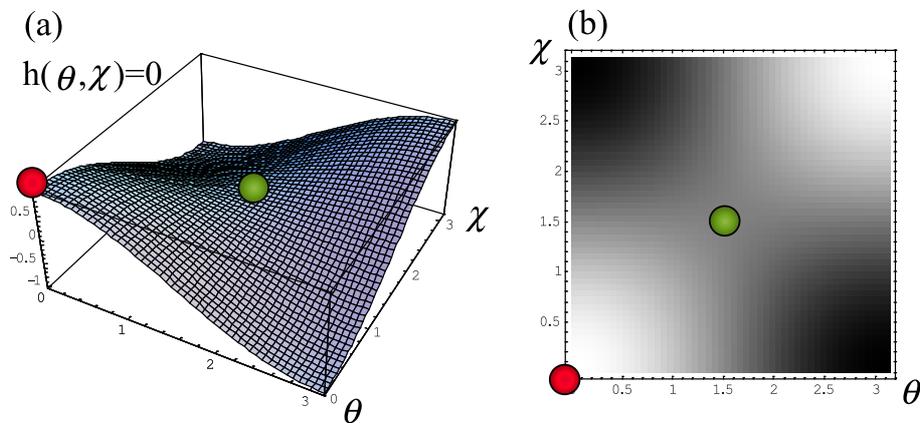


図 2.8:  $r, \epsilon$  を固定した時の曲面  $h(\theta, \chi)$  とその極大値と鞍点のイメージ図。赤丸が極大の点、緑丸が鞍点。 $x$  軸が  $\theta$ 、 $y$  軸が  $\chi$ 。(a): 三次元図。(b): 上から見た図。LDOS が発散するのはこのような曲面上的鞍点であり、かつ平面  $g_2 = 0$  との交点である点である。

### 二次元系と三次元系の比較

三次元的フェルミ面における LDOS の発散の強さが二次元系フェルミ面における LDOS の発散の強さより弱いことについて考える。また、二次元系においては式 (2.105) や図 2.5(b) が示すように発散線の片側では状態が存在していないが、三次元系では図 2.7(b) のように発散線の両側に状態が存在しているという違いもある。これら二つの違いはこれから述べる議論を用いると理解しやすい。

三次元系の LDOS は二次元系の LDOS の和としてみなすことができる。つまり、フェルミ速度が  $v_F \sin \chi$  である  $Z$  軸に垂直な二次元系の LDOS を足し合わせることでその振る舞いを議論できるのである。二次元系の議論を用いれば、あるフェルミ速度  $v_F \sin \chi$  を持つ二次元系は

$$\tilde{x} = 2 \frac{\tilde{\epsilon} \sin \chi \frac{\partial \lambda}{\partial \theta}}{\lambda^3}, \quad (2.161)$$

$$\tilde{y} = \frac{\tilde{\epsilon} \sin \chi}{\lambda^2} \quad (2.162)$$

という場所において状態密度が発散する。これを空間的に表したのが図 2.9(a) である。 $\sin \chi$  が異なるにつれて発散線がシフトしていくのがわかる。三次元系の場合  $\chi$  についての積分を行うので、各  $\chi$  平面の LDOS の特異性は

空間的に均されることになる。結果的に得られる LDOS は図. 2.9(b) のように発散線の両側に状態を持つことになり、また、積分が行われたことにより発散の強さも弱くなる。

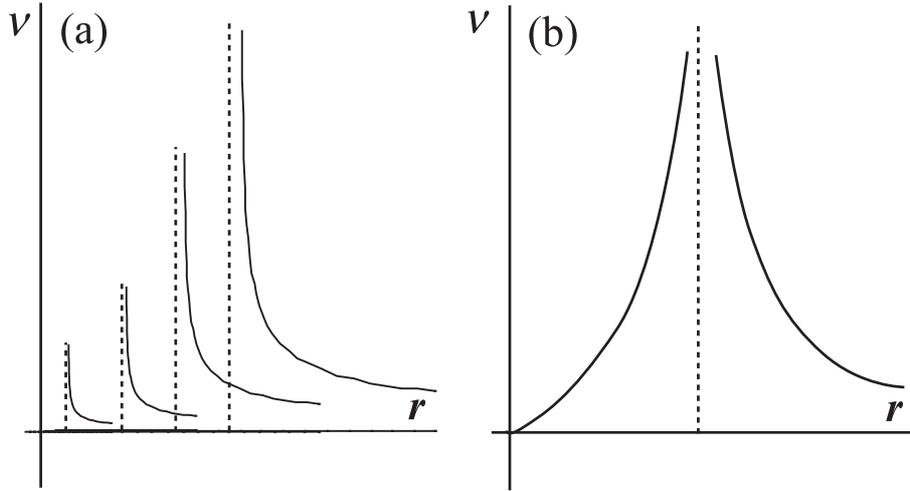


図 2.9: (a):さまざまな  $\chi$  平面での LDOS の発散点の重ね合わせ。(b):三次元系での LDOS。

球状フェルミ面を持つ等方的 s 波超伝導体 ( $\lambda(\theta, \chi) = 1$ ) を例として考える。この系においては、 $\chi$  を固定したときのパラメータ表示の方程式は

$$\begin{pmatrix} \tilde{X} \\ \tilde{Y} \end{pmatrix} = \tilde{\epsilon} \sin \chi \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (2.163)$$

となる。上式は、もし系が二次元系で  $v_F \sin \chi$  というフェルミ速度を持つ系であるならば LDOS が発散するであろう位置を示している。このときの LDOS 発散パターンは半径  $\tilde{\epsilon} \sin \chi$  の円である。さまざまな  $\chi$  平面 (図. 2.6(b) を参照。) における発散パターンを重ね合わせたものを図. 2.10 に示す。異なる  $\chi$  平面での LDOS パターンから、実際に三次元系で LDOS が発散する場所を推定することができる。図. 2.10 より、この系では半径  $\tilde{\epsilon}$  の円上で LDOS が発散するよう見える。

$\chi$  が固定された平面における二次元的 LDOS パターンは求める場合には、

$$h(\theta, \chi) = \tilde{\epsilon} - \frac{\tilde{y}}{\sin \chi} \lambda^2(\theta, \chi) = 0, \quad (2.164)$$

$$\frac{\partial h}{\partial \theta} = \frac{\tilde{x}}{\sin \chi} \lambda^2(\theta, \chi) - \frac{2\tilde{y}}{\sin \chi} \frac{\partial \lambda(\theta, \chi)}{\partial \theta} \lambda(\theta, \chi) = 0, \quad (2.165)$$

を解けばよい。つまり、式 (2.159)、(2.160) が、フェルミ面三次元性を与えているとみなすことができる。この 2 式が  $\theta$  と  $\chi$  の関係を与える。たとえば、ペアポテンシャルが二次元的である場合、つまりペアポテンシャルの異方性  $\lambda$  が  $\chi$  に依らない場合、式 (2.159) は  $\tilde{y} = \tilde{\epsilon} \sin \chi / \lambda^2$  を用いて

$$\frac{\partial h}{\partial \chi} = \tilde{\epsilon} \frac{\cos \chi}{\sin \chi} = 0, \quad (2.166)$$

と書くことができる。それゆえに、 $\chi = \pi/2$  のみがこの関係式を満たすことがわかる。このとき、鞍点条件 (2.160) は  $\tilde{y} = \tilde{\epsilon} \sin \chi / \lambda^2$  と  $\chi = \pi/2$  を用いれば

$$\frac{\partial^2 h}{\partial \theta^2} \frac{\partial^2 h}{\partial \chi^2} - \left( \frac{\partial^2 h}{\partial \theta \partial \chi} \right)^2 = -\tilde{\epsilon}^2 < 0, \quad (2.167)$$

となり常に満たされている。つまり、もしペアポテンシャルが  $\chi$  に依存しないのならば、三次元的フェルミ面を持つ系の LDOS の発散の場所は  $\chi = \pi/2$  平面上の二次元的 LDOS が発散する場所と等しい。球状フェルミ面を持つ等方的 s 波超伝導体の場合には、式 (2.163) より LDOS パターンは半径  $\tilde{\epsilon}$  の円となる。ペアポテンシャルが  $\chi$  による場合は、LDOS パターンはより複雑になる。

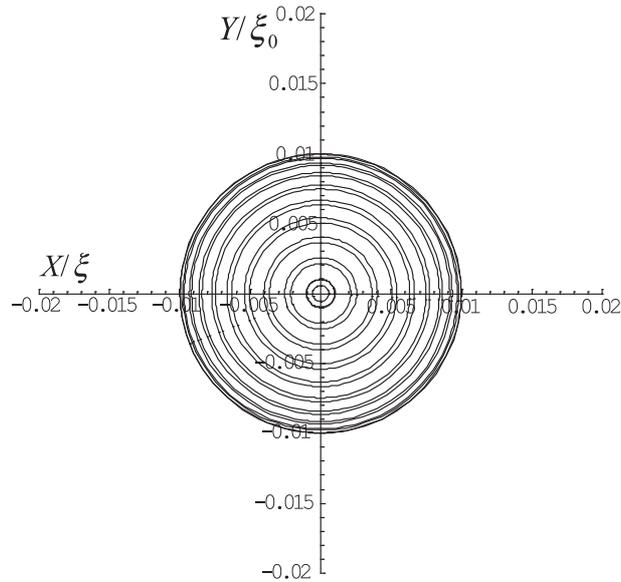


図 2.10: さまざまな  $\chi$  平面での二次元的 LDOS パターンの重ね合わせ。

## 2.5 異方的フェルミ面への拡張

### 2.5.1 物理量

物理量を計算する際に必要なのは

$$\frac{d^3p}{(2\pi)^3} \quad (2.168)$$

という変数の積分である。したがって、この積分を準古典理論で使いやすいように変形することを考える。最終的には、局所電子状態密度の表式を得る。等エネルギー面を考え、その面を張り合わせて  $p$  空間を覆うとする。フェルミ面上での面積素を  $dS_F$  とすると<sup>5</sup>

$$\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{dp dS_F}{(2\pi)^3} \quad (2.169)$$

となる。ここで  $dp = d|p|$  である。このとき、 $\mathbf{k}_F$  をフェルミ面上の位置を示すベクトルとすると、

$$\mathbf{v}_g(\mathbf{k}_F) = \text{grad } \epsilon \quad (2.170)$$

という群速度を考えれば、ある  $\mathbf{k}_F$  における、群速度の大きさ  $v_g(\mathbf{k}_F)$  は

$$v_g(\mathbf{k}_F) = \left( \frac{\partial \epsilon}{\partial p} \right) \quad (2.171)$$

と書け、 $dp$  は

$$dp = v_g(\mathbf{k}_F)^{-1} d\xi_p \quad (2.172)$$

となり

$$\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{dS_F}{(2\pi)^3 v_g(\mathbf{k}_F)} d\xi_p \quad (2.173)$$

となる。故に状態密度は

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) = - \int \frac{dS_F}{2\pi^2 v_g(\mathbf{k}_F)} \text{Re Tr } \hat{g}^R \quad (2.174)$$

となる。

<sup>5</sup>いま行う積分はフェルミ面全体に関する体積積分である、としている。

### 2.5.2 Eilenberger 方程式

Eilenberger 方程式導出の過程において  $-\nabla^2/2m$  を  $\epsilon(-i\nabla)$  と置き換える。そのようにすると、式 (1.211) の第一項が

$$(\epsilon(\nabla_1/i) - \epsilon(\nabla_2/1))\check{G} \quad (2.175)$$

となる。また、式 (1.212)、式 (1.213) は

$$\epsilon(\nabla_1/i) = \epsilon(\bar{\nabla}_1/i) + \mathbf{v}(\bar{\nabla}/i)\frac{1}{2}\nabla/i \quad (2.176)$$

$$\epsilon(\nabla_2/i) = \epsilon(\bar{\nabla}_2/i) - \mathbf{v}(\bar{\nabla}/i)\frac{1}{2}\nabla/i \quad (2.177)$$

というテイラー展開の表式になる。これは、 $\bar{\nabla}$  と  $\nabla$  の変動スケールの違いから言える。以上より、式 (1.219) である Eilenberger 方程式の速度  $\mathbf{v}$  が群速度 (フェルミ速度) となり、異方的な Fermi 面の場合の Eilenberger 方程式が得られる。

### 2.5.3 Riccati 方程式と温度 Green 関数

異方的な Fermi 面の場合の Riccati 方程式は

$$\mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F) \cdot \nabla \hat{a} + 2\omega_n \hat{a} + \hat{a} \hat{\Delta}^\dagger \hat{a} - \hat{\Delta} = 0, \quad (2.178)$$

$$\mathbf{v}_F(\mathbf{k}_F) \cdot \nabla \hat{b} - 2\omega_n \hat{b} - \hat{b} \hat{\Delta} \hat{b} + \hat{\Delta}^\dagger = 0, \quad (2.179)$$

となる。等方的二次元系、等方的三次元系と同様に、 $X$ - $Y$  平面上に射影されたフェルミ速度  $\mathbf{v}_{F,XY}(\mathbf{k}_F)$  の方向を座標軸  $x$  ととれば、

$$v_F g(\mathbf{k}_F) \frac{\partial \hat{a}}{\partial x} + 2\omega_n \hat{a} + \hat{a} \hat{\Delta}^\dagger \hat{a} - \hat{\Delta} = 0, \quad (2.180)$$

$$v_F g(\mathbf{k}_F) \frac{\partial \hat{b}}{\partial x} - 2\omega_n \hat{b} - \hat{b} \hat{\Delta} \hat{b} + \hat{\Delta}^\dagger = 0, \quad (2.181)$$

のように書ける。ここで、 $|\mathbf{v}_{F,XY}(\mathbf{k}_F)| = v_F g(\mathbf{k}_F)$  と置いた。また、座標系は

$$x(\mathbf{k}_F) = r \cos(\alpha - \theta_v(\mathbf{k}_F)), \quad (2.182)$$

$$y(\mathbf{k}_F) = r \sin(\alpha - \theta_v(\mathbf{k}_F)), \quad (2.183)$$

であり、 $\theta_v$  が  $\mathbf{k}$  に依る。このように書くことで、等方的三次元的フェルミ面を持つ系と同様に、等方的二次元的フェルミ面を持つ系の  $v_F$  を  $v_F g(\mathbf{k}_F)$  と置き換えることで温度 Green 関数  $\hat{g}(r, \mathbf{k}_F; i\omega_n)$  を

$$\hat{g}(r, \mathbf{k}_F; i\omega_n) \sim -\frac{v_F g(\mathbf{k}_F) e^{-2\lambda F(x)}}{2C_{\text{ani}} [iE_{\text{ani}} + \omega_n]} \hat{\sigma}_0, \quad (2.184)$$

$$\sim -\frac{v_F |\lambda| e^{-2\lambda F(x)}}{2\xi_0 [iE_{\text{ani}} + \omega_n]} \hat{\sigma}_0, \quad (2.185)$$

$$C_{\text{ani}}(\mathbf{k}_F) \sim \frac{\xi_0}{|\lambda(\mathbf{k}_F)|} g(\mathbf{k}_F), \quad (2.186)$$

$$E_{\text{ani}}(\mathbf{k}_F) \sim \frac{y(\mathbf{k}_F)}{\xi_0 g(\mathbf{k}_F)} \Delta_\infty \lambda^2(\mathbf{k}_F), \quad (2.187)$$

$$F(x) = \frac{1}{v_F g(\mathbf{k}_F)} \int_0^{|x|} dx' f(x') \quad (2.188)$$

と書くことができる。

### 2.5.4 状態密度

温度 Green 関数 (2.185) を解析接続すると、遅延 Green 関数は

$$\hat{g}^R(r, \mathbf{k}_F; \epsilon + i\delta) = -\frac{v_F g(\mathbf{k}_F)}{2C_{\text{ani}}} \frac{\delta - i(E_{\text{ani}} - \epsilon)}{(\epsilon - E_{\text{ani}})^2 + \delta^2} e^{-2\lambda F(x)} \hat{\sigma}_0 \quad (2.189)$$

となり、状態密度の表式 (2.174) に代入すると、

$$\nu(r, \epsilon) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int \frac{dS_F}{2\pi^2 v_F(\mathbf{k}_F)} \frac{v_F g(\mathbf{k}_F)}{C_{\text{ani}}} \frac{\delta e^{-2\lambda F(x)}}{(\epsilon - E_{\text{ani}})^2 + \delta^2} \quad (2.190)$$

となる。これが、異方的フェルミ面を持つ場合における渦糸コア近傍における状態密度の表式である。

二次元的フェルミ面における状態密度の発散点

簡単のため、フェルミ面は極座標表示の角度変数  $\theta$  で一意に定まるとする。このとき、式 (2.87) は

$$h(\theta) = \epsilon - E_{\text{ani}}(\theta) \quad (2.191)$$

$$= \epsilon - E(\theta)/g(\theta) \quad (2.192)$$

に書き換えられる。また、式 (2.89)、(2.90) は

$$\tilde{x} = \frac{g\tilde{\epsilon}}{\frac{\partial \theta}{\partial \tilde{\epsilon}} \lambda^2} \left( 2 \frac{\partial \lambda}{\partial \theta} \frac{1}{\lambda} - \frac{\partial g}{\partial \theta} \frac{1}{g} \right), \quad (2.193)$$

$$\tilde{y} = \frac{g\tilde{\epsilon}}{\lambda^2}, \quad (2.194)$$

となる。これが、二次元的異方的フェルミ面における状態密度が発散する点を表す方程式である。

## 2.6 局所電子状態密度

この節では、さまざまなペアポテンシャルの超伝導体の LDOS パターンを示す。具体的には、NbSe<sub>2</sub>、YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C、simple cubic tight-binding model を用いた異方的フェルミ面を持つ d 波超伝導体、の LDOS パターンを示す。この節では、状態密度の表式における  $\delta$  を有限の値に留め数値的に積分を行い、LDOS の空間分布を求める。

### 2.6.1 NbSe<sub>2</sub>: スピン一重項二次元的フェルミ面

NbSe<sub>2</sub> は擬二次元的フェルミ面を持つ超伝導体である。この小節では、NbSe<sub>2</sub> は異方的 s 波超伝導体であるとし、ペアポテンシャルを

$$\hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = i\hat{\sigma}_y \psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}), \quad (2.195)$$

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = |\Delta(\mathbf{r})| \exp(i\theta_r)(1 + c_A \cos 6\theta). \quad (2.196)$$

と仮定する。ここで、 $\theta_r$  は実空間における位相であり、 $c_A$  は超伝導ギャップの異方性の度合いを示すパラメータである。scanning tunneling spectroscopy の実験データから、 $c_A \sim 1/3$  とする。<sup>11)</sup> 磁場は  $c$  軸に平行な方向であるとすると、 $\lambda$  は

$$\lambda = 1 + \frac{1}{3} \cos 6\theta. \quad (2.197)$$

と書くことができる。また、NbSe<sub>2</sub> は二次元的フェルミ面を持つと仮定し、簡単のため等方的フェルミ面 ( $g = 1$ ) を考える。図. 2.11(a) は、エネルギーが  $\epsilon = 0.01\Delta_\infty$  であるとき Andreev 束縛状態の quasiparticle path の集合を示したものである。また、LDOS が発散する点を示す包絡線の方程式は

$$\tilde{X} = \frac{\tilde{\epsilon}}{(1 + \frac{1}{3} \cos 6\theta)^2} \left( -4 \frac{\cos \theta \sin 6\theta}{(1 + \frac{1}{3} \cos 6\theta)} - \sin \theta \right), \quad (2.198)$$

$$\tilde{Y} = \frac{\tilde{\epsilon}}{(1 + \frac{1}{3} \cos 6\theta)^2} \left( -4 \frac{\sin \theta \sin 6\theta}{(1 + \frac{1}{3} \cos 6\theta)} + \cos \theta \right). \quad (2.199)$$

で与えられる。この方程式から得られる LDOS が発散する場所を図. 2.11(b) に示す。また、式 (2.80) を数値積分して得られた LDOS の空間分布を図. 2.12 に示した。得られた LDOS パターンは、以前 Hayashi らによって行われた数値計算結果の LDOS パターン (図. 1.7) とよく一致している<sup>11)</sup>。

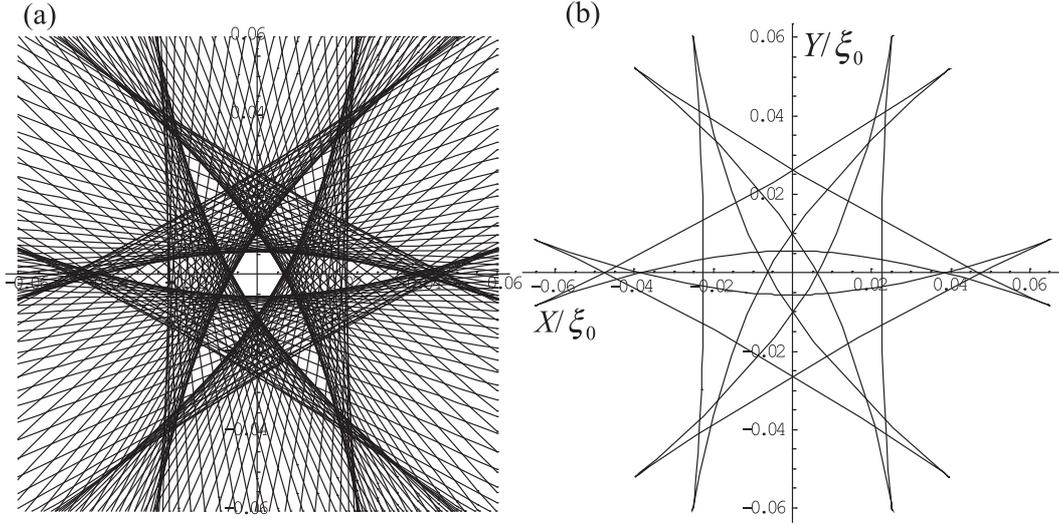


図 2.11: エネルギーが  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.01$  のときの NbSe<sub>2</sub> における LDOS の空間分布。(a):quasiparticle path の集合。(b):quasiparticle path の包絡線。LDOS は quasiparticle path の包絡線の上で発散する。

### 2.6.2 YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C: スピン一重項三次元的フェルミ面

次に、YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C について考える。この物質は異方的  $s$  波的超伝導体であり、ポイントノードを持つと考えられている。Maki らは  $s+g$  波であると述べ、ノードはネスティングベクトルが存在する場所にあると述べた<sup>25)</sup>。Maki らの予想は Izawa らによって実験的に確かめられたとされている<sup>26)</sup>。しかし、Izawa らが実験結果から結論付けたポイントノードの方向は Maki らの予想とは  $\pi/4$ [rad] 異なっており、その結果、フェルミ面のネスティングがポイントノード形成の原因であるという Maki らの主張を裏付ける結果とはなっていない。また、Izawa らは等方的フェルミ面を仮定して実験結果を解析しており、極めて異方的なフェルミ面を持つ YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C でそのような仮定が正しいかわからない。したがって、Maki らの議論は不完全であり、Izawa らの実験結果の解析は不十分であり、ポイントノードの位置とメカニズムについては実験的にも理論的にもまだ結論に至っていないと我々は考えている。実験結果とポイントノードの位置とポイントノード形成メカニズムについては、YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C のフェルミ面の構造を考慮した議論を第 4 章で行っている。したがって、この節においては、一番簡単な仮定として、Maki らが提唱したペアポテンシャル

$$\hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = i\hat{\sigma}_y \psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}), \quad (2.200)$$

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = |\Delta(\mathbf{r})| \exp(i\theta_r) \frac{1}{2} (1 - \sin^4 \chi \cos 4\theta), \quad (2.201)$$

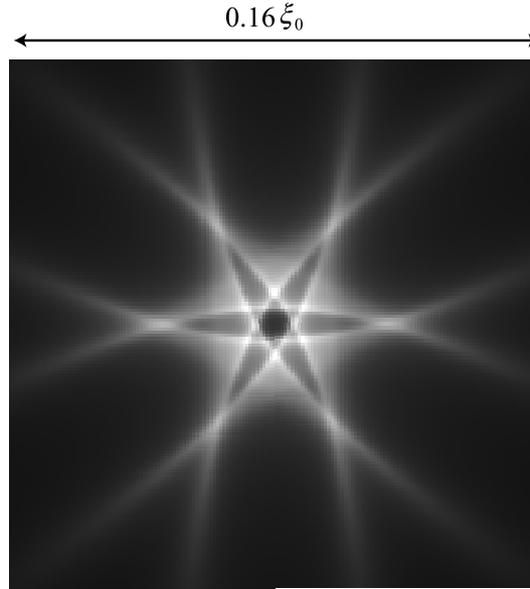


図 2.12: NbSe<sub>2</sub> の局所電子状態密度の空間分布。ここで、エネルギーは  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.01$ 、smearing factor は  $\delta/\Delta_\infty = 0.001$  としている。水平軸は  $a$  軸と等しい。

$$\lambda = \frac{1}{2}(1 - \sin^4 \chi \cos 4\theta). \quad (2.202)$$

を仮定したときにどのような LDOS パターンが得られるかについてを考える。このペアポテンシャルの妥当性については本論文第 4 章で議論する。また、実際には極めて異方的なフェルミ面を持つ物質であるが、ここでは簡単のため球状フェルミ面を持つ ( $g = 1$ ) と仮定し、磁場は  $c$  軸と平行であるとする。式 (2.138) を解くと、式 (2.159) が

$$\frac{\partial h}{\partial \chi} = \frac{\cos \chi}{\sin \chi} \left( \frac{1 + 7 \sin^4 \chi \cos 4\theta}{1 - \sin^4 \chi \cos 4\theta} \right) \epsilon = 0 \quad (2.203)$$

となり、解が二つあることから包絡線の方程式は二種類得られる。一つ目の解は  $\cos \chi = 0$  によって与えられ、そのときの包絡線の方程式は

$$\tilde{X} = \frac{4\tilde{\epsilon}}{(1 - \cos 4\theta)^2} \left( 8 \frac{\sin 4\theta \cos \theta}{(1 - \cos 4\theta)} - \sin \theta \right), \quad (2.204)$$

$$\tilde{Y} = \frac{4\tilde{\epsilon}}{(1 - \cos 4\theta)^2} \left( 8 \frac{\sin 4\theta \sin \theta}{(1 - \cos 4\theta)} + \cos \theta \right), \quad (2.205)$$

となる。もう一つの解は  $\sin^4 \chi = -(7 \cos 4\theta)^{-1}$  によって与えられ、包絡線の方程式は

$$\tilde{X} = -\frac{49}{16} \tilde{\epsilon} \left( -\frac{1}{7 \cos 4\theta} \right)^{1/4} (\tan 4\theta \cos \theta + \sin \theta), \quad (2.206)$$

$$\tilde{Y} = -\frac{49}{16} \tilde{\epsilon} \left( -\frac{1}{7 \cos 4\theta} \right)^{1/4} (\tan 4\theta \sin \theta - \cos \theta), \quad (2.207)$$

となる。ここで、上式には

$$0 < -\frac{1}{7 \cos 4\theta} < 1, \quad (2.208)$$

という条件が課されていることに注意する。これら二つの包絡線から得られる LDOS の発散線を図. 2.13 に示す。一つ目の包絡線を表現している曲線は無限遠まで伸びており、二つ目の包絡線を表現している曲線は式 (2.208) という条件があるために原点から有限の距離で切れている。図. 2.14 は、式 (2.131) を数値積分して得られた LDOS の空間分布である。仮定したペアポテンシャルが妥当かどうかは、STM 実験<sup>27)</sup> と比較すればよいが、等方的フェルミ面を仮定している等現実的ではない仮定があるため、直接比較はこの節では行わない。第 4 章において、フェルミ面の異方性まで考えて YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C のペアポテンシャルの形を LDOS から推定する。

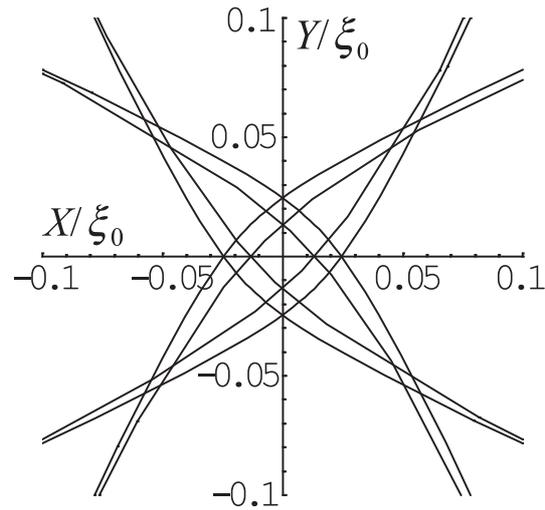


図 2.13:  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  の局所電子状態密度が発散する点の分布。 $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のペアポテンシャルは式 (2.200)-(2.202) であると仮定した。ここで、エネルギーは  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.01$  である。

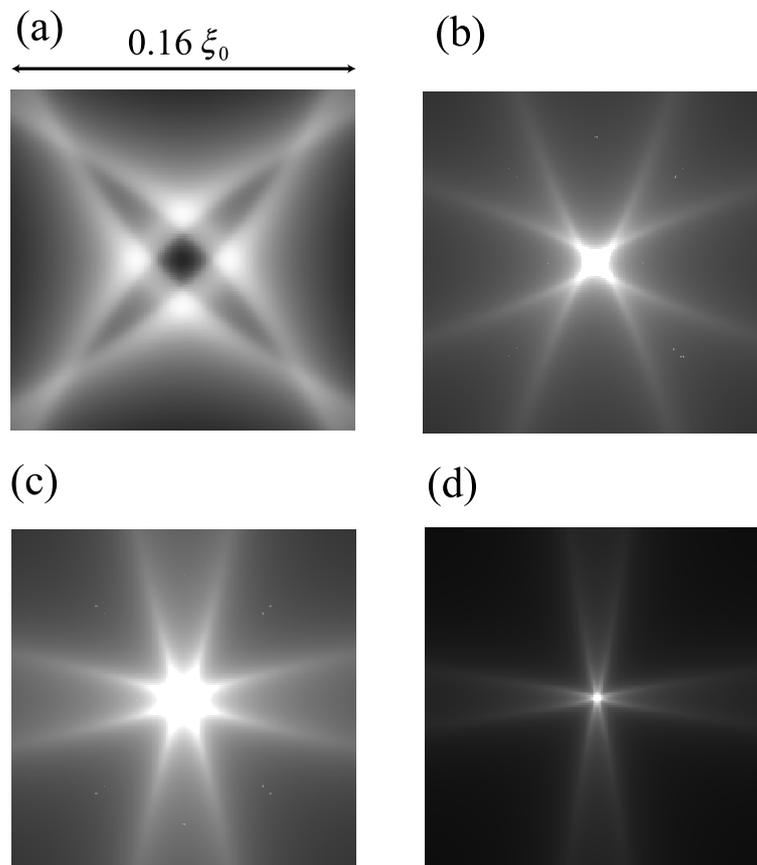


図 2.14:  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  の磁場を  $c$  軸方向にかけたときの局所電子状態密度分布。(a)  $\epsilon/\Delta_\infty = 1.0 \times 10^{-2}$ 、the smearing factor  $\delta/\Delta_\infty = 0.25 \times 10^{-2}$ : (b)  $\epsilon/\Delta_\infty = 1.0 \times 10^{-3}$ 、 $\delta/\Delta_\infty = 0.5 \times 10^{-3}$ : (c)  $\epsilon/\Delta_\infty = 1.0 \times 10^{-4}$ 、 $\delta/\Delta_\infty = 0.95 \times 10^{-4}$ : (d)  $\epsilon/\Delta_\infty = 1.0 \times 10^{-5}$ 、 $\delta/\Delta_\infty = 0.95 \times 10^{-5}$ 。水平方向と垂直方向の軸はそれぞれ  $a$  軸と  $b$  軸に一致している。

## 2.6.3 異方的フェルミ面を持つ系

具体例の最後として、異方的フェルミ面を持つ系の場合、どのような LDOS が得られるかについて議論する。この小節では、simple cubic tight-binding model

$$\epsilon_k = \alpha + \beta(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) \quad (2.209)$$

を用いて異方的フェルミ面の効果を考える。ここで  $\alpha$ 、 $\beta$  はパラメータである。 $\alpha$ 、 $\beta$  を調節して、最も異方性の強いフェルミ面として図. 2.15(d) を LDOS 計算に用いた。このフェルミ面にはネスティングが存在している。

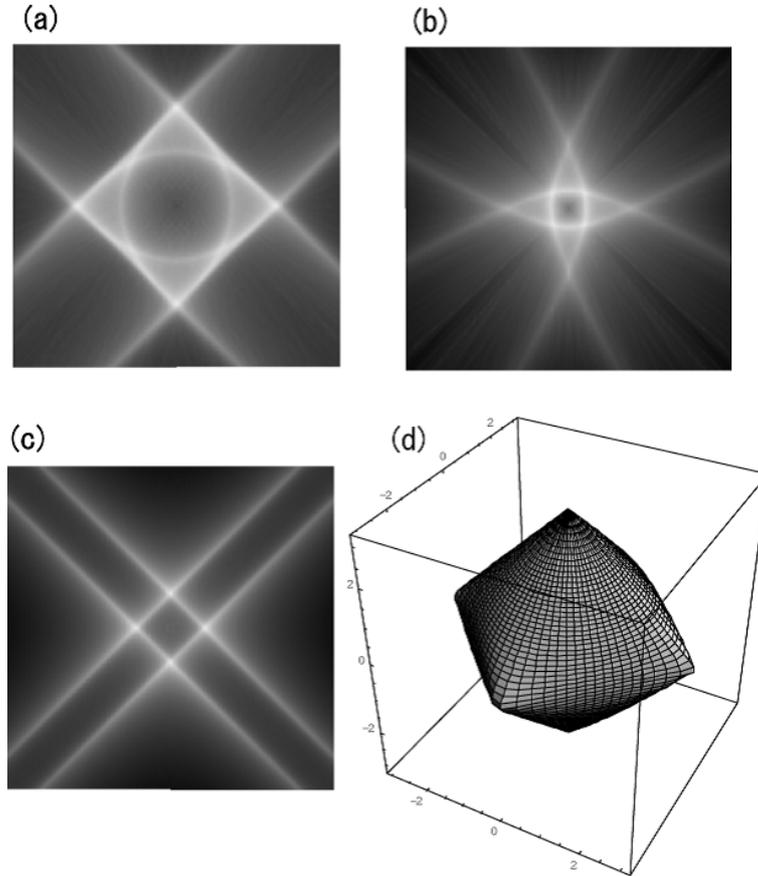


図 2.15: フェルミ面が異方的な場合の渦糸コア近傍の局所電子状態密度パターン。(a) 等方的 s 波超伝導体。(b) ノードが軸から  $\pi/4$  回転した方向にある場合の d 波超伝導体。(c) ノードが軸方向である d 波超伝導体。(d) 用いたフェルミ面。

## 等方的 s 波超伝導体

等方的 s 波超伝導体 ( $\lambda = 1$ ) の場合の LDOS の計算結果を図. 2.15(a) に示す。フェルミ面にネスティングが存在しており、フェルミ速度が  $k_x^2 - k_y^2 = 0$  の方向である領域が非常に大きい。そのため、この方向を向いている quasiparticle path が非常に多く、その結果 LDOS には 45 度方向の直線が現れていると解釈できる。等方的 s 波超伝導の LDOS は等方的フェルミ面であれば円であったから、異方的フェルミ面等方的 s 波超伝導体の LDOS はフェルミ面の異方性が LDOS に大きな影響を与えることができるという例の一つとなっている。

## d 波超伝導体その一

ノードが軸から  $\pi/4$ [rad] 方向にある  $d_{x^2-y^2}$  の対称性を持つペアポテンシャル

$$\lambda = \cos 2\theta \quad (2.210)$$

を仮定して LDOS を計算した結果が図. 2.15(b) である。このときの LDOS は等方的フェルミ面を仮定した場合の d 波の LDOS ( 図. 2.4(b) ) とほとんど変わらない。式 (2.193)、(2.194) より、フェルミ面上のある点  $\mathbf{k}_F$  における実空間上の発散点  $r(\mathbf{k}_F)$  は

$$r(\mathbf{k}_F) = \sqrt{x^2 + y^2} \propto y \propto \frac{\epsilon |v_{\text{FXY}}(\mathbf{k}_F)|}{\lambda^2(\mathbf{k}_F)} \quad (2.211)$$

であるから、ペアポテンシャル  $\lambda$  が小さい場所、つまりギャップノード近傍のフェルミ面上の準粒子は、実空間上では渦糸コアから遠く離れた場所での LDOS に寄与しているということがわかる。したがって、得られた LDOS パターンは感じるギャップが大きい準粒子からの寄与から作られている。ノードが  $\pi/4$ [rad] 方向にあり、ネスティングベクトルの方向も  $\pi/4$ [rad] 方向であることから、LDOS へのフェルミ面のネスティングの効果 (フェルミ面の異方性の効果) は効いてこないので、LDOS が等方的なフェルミ面の場合をほとんど変わらないのである。

## d 波超伝導体その二

ノードが  $0$ [rad] 方向にある d 波超伝導体としてペアポテンシャルを

$$\lambda = \cos 2(\theta - \pi/4) \quad (2.212)$$

と仮定して計算した結果を図. 2.15(c) に示す。このときの LDOS は等方的フェルミ面を仮定した場合の d 波の LDOS ( 図. 2.4(b) を 45 度回転させたもの ) とは大きく異なる。式 (2.211) より、渦糸コア近傍の LDOS は、感じるギャップが大きい準粒子からの寄与である。フェルミ面上でギャップが一番大きい場所は、軸から  $\pi/4$ [rad] 方向である。ネスティングベクトルが  $\pi/4$ [rad] 方向であるから、LDOS パターンはフェルミ面の異方性を強く受けることになる。フェルミ面にネスティングが存在している場合、ネスティングしている領域におけるフェルミ速度はネスティングベクトル方向である。したがって、渦糸コア近傍の LDOS に寄与している準粒子の quasiparticle path はネスティングベクトル方向を向いており、LDOS にはネスティングベクトル方向の直線状のパターンが現れるのである。

## 異方的フェルミ面のまとめ

フェルミ面の異方性は、準古典理論の枠組みの中ではフェルミ速度の異方性となって現れる。LDOS パターンを等方的フェルミ面から大きく変える要因は、フェルミ速度の方向の異方性である。渦糸コア近傍の LDOS パターンはギャップが大きく感じる準粒子からの寄与で決まっており、フェルミ面上でのギャップが大きい場所でのフェルミ面の異方性が、渦糸近傍の LDOS パターンを決めているのである。逆に言えば、どんなに異方的なフェルミ面であっても、その異方性の強い場所がギャップノード近傍であるならば、LDOS パターンは等方的フェルミ面での LDOS とほとんど変わらない。

## 2.7 本章の定式化について

本章において、Riccati 方程式の係数  $a(x, y, \epsilon)$  を、 $y$  と  $\epsilon$  で

$$a(x, y, \epsilon) \sim \frac{\partial a(x, y=0, \epsilon=0)}{\partial y} y + \frac{\partial a(x, y=0, \epsilon=0)}{\partial \epsilon} \epsilon, \quad (2.213)$$

と展開した。特徴的な長さとしてエネルギーがそれぞれ  $\xi_0$ ,  $\Delta_\infty$  であるので、 $|y|/\xi_0 \ll 1$  と  $|\epsilon|/\Delta_\infty \ll 1$  が満たされるとき、この展開は妥当であるといえる。ペアポテンシャルは  $y$  で展開され、式 (2.43) と (2.45) と書けたわけだが、 $x = 0$  近傍においてペアポテンシャルのこのような展開は危険であるように思えるかもしれない。しかし、無次元の展開パラメータは  $y/x$  ではなく  $y/\xi_0$  であることに注意すれば、 $x = 0$  近傍でも式 (2.43)、(2.45) は問題ないことがわかる。そして、状態密度が発散する点では式 (2.90) より  $y \propto \epsilon$  であるから、 $|\epsilon|/\Delta_\infty \ll 1$  が満たされれば自動的に  $|y|/\xi_0 \ll 1$  も満たされる。また、本論文で用いられた近似の範囲は  $|x|/\xi_0 < 1$  である。なぜなら、 $\hat{a}$  や  $\hat{b}$  の摂動計算はそれぞれ  $-\infty < x \leq \xi_0$ ,  $-\xi_0 \leq x < \infty$  が適用範囲だからである。実際的にはこの条件はさほど気にする条件ではない。なぜならば、LDOS は渦糸コアから離れるに従って  $\exp(-|r|/\xi_0)$  で指数関数的に減少するからである。以上から、本章の定式化で得られた状態密度分布の妥当性は  $r$  の大きさに依らず、低エネルギーであるという条件 ( $|\epsilon|/\Delta_\infty \ll 1$ ) のみが必要であることがわかる。なお、本章の定式化では、式 (2.82) や式 (2.83) 等においてペアポテンシャルの空間依存性  $f(r)$  をある形に仮定しているが、この  $f(r)$  を数値計算によりセルフコンシステントに求めた関数にすれば近似の精度が上がる。しかし、この  $f(r)$  の影響は定性的に LDOS パターンを変更するほどではなく、d 波で言うところのコア近傍での楕円形のふくらみに若干の影響を及ぼす程度である。

我々の解析的理論には、Riccati 方程式を直接数値的に解く方法と比べて二つの利点がある。一つ目は、LDOS パターンの物理的解釈が得られるという点である。あるフェルミ速度を持つ準粒子は渦糸コアから一定距離離れた場所に Andreev 束縛状態を生じる。フェルミ速度の大きさと向きによって渦糸コアからの距離は異なるので、Andreev 束縛状態となる quasiparticle path の包絡線によって LDOS パターンが決定されるのである。つまり、実空間上での LDOS が大きい場所が、運動量空間のフェルミ面上のどの位置の準粒子の寄与からくるかを容易に理解することができるのである。LDOS の解釈については第 4 章において詳述する。二つ目は、任意の方向の磁場、任意のペアポテンシャル、任意の形状のフェルミ面、準古典近似が使える系であればどんな系でも LDOS を計算できるという点である。これらの諸条件を用いて数値的に解くよりも、我々の理論で解析的に解くほうがより容易である。

我々は、NbSe<sub>2</sub> や YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C、d 波、s 波などの渦糸コア近傍の LDOS を計算した。式 (2.161)、(2.162) より、LDOS パターンはエネルギー  $\epsilon$  に比例していることがわかる。ゼロエネルギーにおいては、LDOS は原点で発散する。エネルギー  $\epsilon$  が大きくなれば、LDOS パターンのサイズは大きくなる。従って、LDOS パターンのより細かい構造を見たい場合には、より高エネルギー領域の LDOS パターンを見ればよい。また、Eilenberger 方程式を数値的に解いた場合<sup>11)</sup> の NbSe<sub>2</sub> の LDOS パターン (図. 1.7) と我々の理論による LDOS パターン (図. 2.11) がほとんど等しいことから、近似の有効範囲に関するさきほど述べた議論が正しく、我々の理論が少なくとも  $\epsilon \sim 0.3\Delta_\infty$  程度のエネルギー領域までは適用可能であることを示唆している。

渦糸コア近傍の準古典 Green 関数を解析的に導出しているので、LDOS のほかに一体の演算子で表現される物理量ならば計算することができる。たとえば、渦糸コア近傍での電流密度の分布は

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 2e\pi T \sum_n \int \frac{dS_k}{2\pi^2} \frac{v_F}{v_F} \text{Tr} \hat{g}(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}; i\omega_n). \quad (2.214)$$

と書くことができ、計算できる。

実際の物質においては、スミアリング効果 (smearing effect) があるために LDOS は発散しない。フォノンや不純物の効果がスミアリング効果に寄与する。それゆえに、式 (2.80) や (2.131) におけるスミアリング因子 (smearing factor)  $\delta$  は、LDOS パターンのぼやけ具合を決定付けるパラメータである。スミアリング因子はコヒーレンス長 (coherence length) と平均自由行程 (mean free path) から見積もることができる。Green 関数にはスミアリング因子は  $\tilde{\epsilon} + i\delta/\Delta_\infty$  という形でのみ入ってくるので、LDOS には  $\tilde{\epsilon}$  あるいは  $\delta/\Delta_\infty$  のどちらか大きい方が寄与をすることになる。低エネルギー極限  $\tilde{\epsilon} \ll \delta/\Delta_\infty$  では、スミアリング効果によって LDOS パターンは  $\tilde{\epsilon}$  に依らなくなる。それゆえに、STM 実験におけるゼロバイアスのデータと、clean limit ( $\delta \rightarrow 0$ ) のときの我々の理論による計算結果を比較するときは、 $\tilde{\epsilon} \rightarrow 0$  の計算結果ではなく、エネルギー  $\tilde{\epsilon}$  が electron-phonon relaxation rate や impurity scattering rate のエネルギースケールと等しい場合の計算結果を用いなければならない。第 4 章において、YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C の STM 実験結果と、我々の理論を用いた計算結果を比較し妥当なペアポテンシャルを検討する。

## 2.8 まとめ

本章において、我々は超伝導の準古典理論を用いて渦糸コア近傍における局所電子状態密度 (LDOS) を研究した。その結果、Kramer-Pesch 近似を用いて、スピン-重項三重項問わずどんな異方的ペアポテンシャルでもどんな異方的フェルミ面でも適用可能な、任意の方向の磁場をかけた場合の LDOS の解析的な導出に成功した。我々は NbSe<sub>2</sub> や YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C 等の LDOS パターンを計算した。NbSe<sub>2</sub> の LDOS パターンは六回回転対称の星型のパターンであり、これは Hayashi ら<sup>11)</sup> による数値計算とコンシステントである。また、異方的なフェルミ面として非常に強いネスティングを持つフェルミ面を考え、等方的 s 波、d 波等の LDOS を計算した結果、ペアポテンシャルのノードの位置とネスティングベクトルの位置の関係によって LDOS パターンが大きく変わることがわかった。

## 第3章 空間反転対称性のない超伝導体：CePt<sub>3</sub>Siの場合

### 3.1 はじめに

#### 3.1.1 CePt<sub>3</sub>Si

結晶構造に空間反転対称性がない場合、空間反転対称性のない系が実現する。2004年、Bauerら<sup>28)</sup>が空間反転対称性のない重い電子系の超伝導体 CePt<sub>3</sub>Si が超伝導を示すことを発見した。重い電子系は電子相関が強いため有効質量が増大している系である。重い電子系では、いわゆる「非従来型」の超伝導状態が発現すると言われており、近年、実験理論双方で精力的に研究されている。たとえば、重い電子系超伝導体である CeCoIn<sub>5</sub> では、ペアポテンシャルが空間（あるいは運動量空間）変動する Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) 状態と呼ばれる超伝導の新しい相が実験的に発見された<sup>29)</sup> と言われている。本節では CePt<sub>3</sub>Si の結晶構造とその特異な物性について概観する。

CePt<sub>3</sub>Si の結晶構造を図.3.1 に示す。単位格子は tetragonal である。ここで重要なのは、Si 原子の位置である。

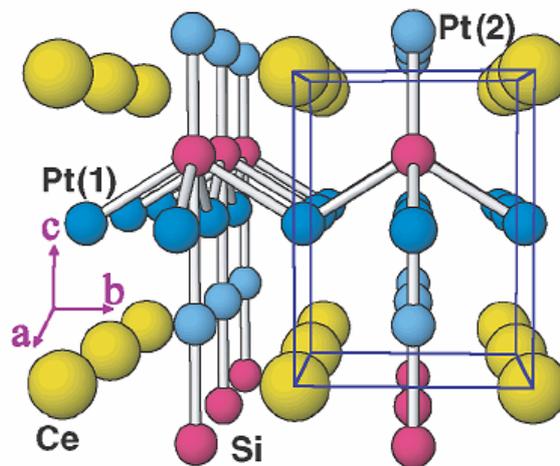


図 3.1: CePt<sub>3</sub>Si の結晶構造<sup>28)</sup>。

単位格子中に Si 原子は一つ含まれる。その Si 原子の位置は、図.3.1 を見ればわかるように、単位格子の中心ではなく、中心から  $c$  軸方向に少し（図では上に）ずれた場所にある。その結果、 $a$ - $b$  平面を鏡面とした鏡面反転に対して非対称となっている。系は空間反転  $r \rightarrow -r$  に対して非対称であるから、このような系を「空間反転対称性のない系」と呼ぶ。空間反転対称性のない系ではスピン軌道相互作用が強く、スピン軌道相互作用の存在は Cooper pair 形成を抑制する。そのため、結晶に空間反転対称性のない物質では超伝導は起こりにくいと考えられていた。そのような点でも、空間反転対称性のない重い電子系超伝導体 CePt<sub>3</sub>Si は反転対称性のある系とは異なる物性を示すと考えられる。

### 3.1.2 さまざまな実験結果

次に、CePt<sub>3</sub>Si の興味深い実験結果について概観する。Bauer らによる比熱の温度依存性のグラフを図.3.2 に示す。 $T_N \sim 2.2\text{K}$  に一次相転移である反強磁性相転移があり、 $T_c \sim 0.75\text{K}$  に超伝導転移があることがわかる。また、

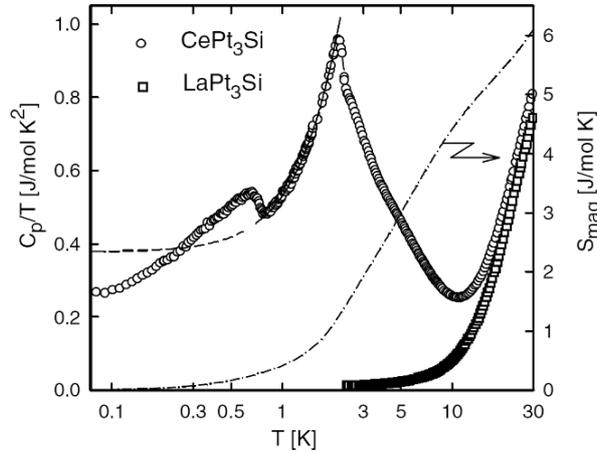


図 3.2: CePt<sub>3</sub>Si の多結晶試料の比熱の温度依存性<sup>28)</sup>。

抵抗の温度依存性 (図. 3.3) を見ると、CePt<sub>3</sub>Si は反強磁性と超伝導が共存しているように見える。図. 3.4 から絶対零度での上部臨界磁場  $H_{c2}$  を読み取ると  $H_{c2}(0) \sim 8.5\text{T}$  となり、臨界温度  $T_c \sim 0.75$  から見積もられるパウリ・リミット  $\sim 1\text{T}$  をはるかに超えていることから、超伝導のペアリング状態は純粋なスピン重項状態ではないことが推察されている。パウリ・リミットとは、Cooper pair を破壊することのできる磁場である。スピン重項における Cooper pair はスピンアップとダウンがペアを組んでいるので、磁場が系のスピンを一方向に揃えようとする力で Cooper pair を壊すことができるのである。中性子散乱実験によれば<sup>30)</sup>、この物質の  $T_N \sim 2.2\text{K}$  以下

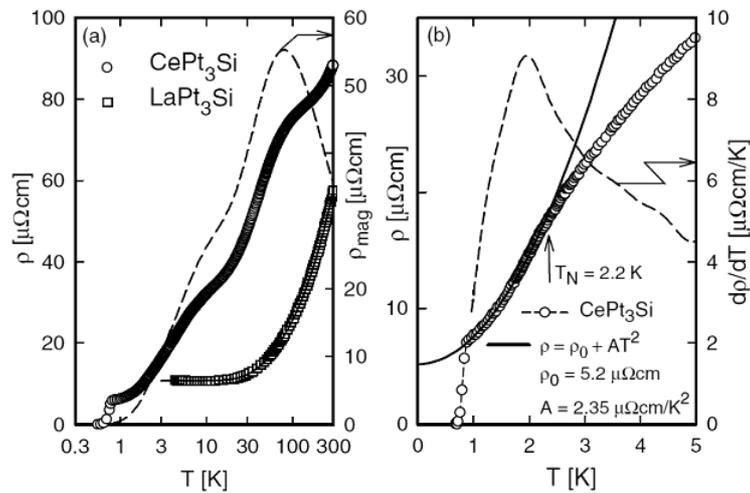


図 3.3: 抵抗の温度依存性<sup>28)</sup>。(a) CePt<sub>3</sub>Si と LaPt<sub>3</sub>Si の温度依存性。横軸は log。(b) 低温での CePt<sub>3</sub>Si の温度依存性。

の反強磁性相では、図. 3.5 のような磁気構造があると言われている。磁気モーメントを持っているのは Ce 原子であり、 $a$ - $b$  面内では強磁性的にスピンの揃っており、 $c$  軸方向には反強磁性的にスピンの配置されている。モーメントは  $a$ - $b$  平面内を向いている。

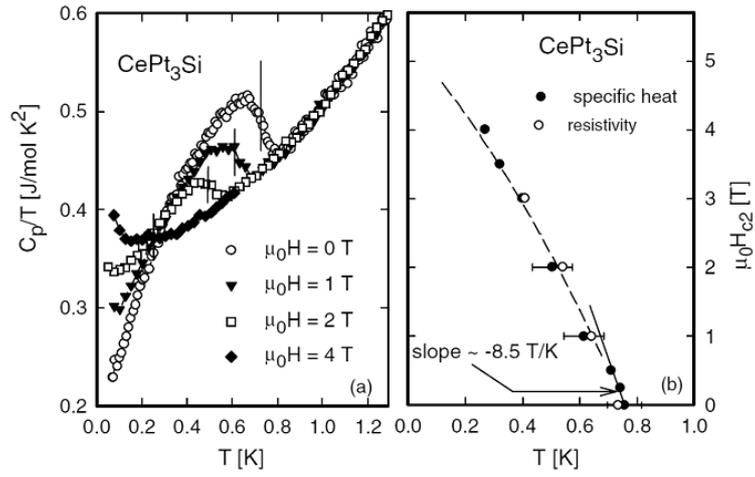


図 3.4: (a) 様々な強さの印加磁場における CePt<sub>3</sub>Si の比熱の温度依存性<sup>28)</sup>。(b) 抵抗と比熱から見積もった上部臨界磁場  $H_{c2}$  の温度依存性<sup>28)</sup>。

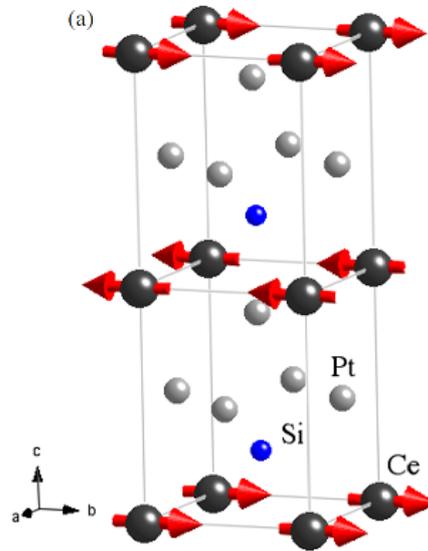


図 3.5: 中性子散乱から求めた CePt<sub>3</sub>Si の磁気構造<sup>30)</sup>。 $a-b$  面内では強磁性的、 $c$  軸方向には反強磁性的にオーダリングしている。

CePt<sub>3</sub>Siの発見当初に作成された多結晶の試料による比熱のグラフ(図. 3.2)では、絶対零度極限における $C/T$ の値に大きな残留値が見られた。ところが、最近作成された質のよい単結晶の試料においては、絶対零度極限における $C/T$ の残留値はほぼゼロに近づいている(図. 3.6)。Takeuchiらが比熱を測定した単結晶は、そのシャープな比熱のとびから質のよい試料であると考えられるが、このときの超伝導転移温度は $T_c \sim 0.46\text{K}$ である<sup>31)</sup>。この試料において抵抗がゼロになるのは $0.65\text{K}$ 程度であり、多結晶の試料の転移温度 $T_c \sim 0.75\text{K}$ と近いことは興味深い。

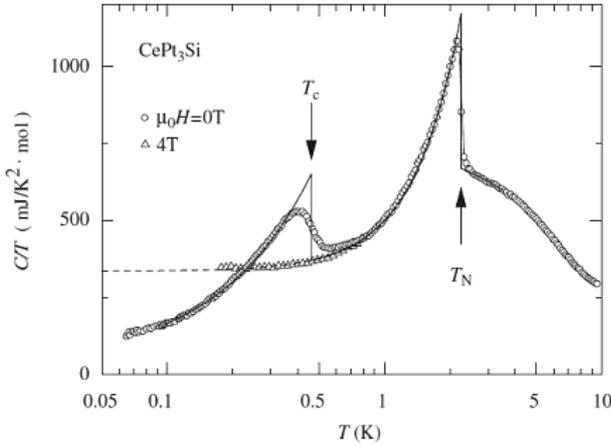


Fig. 1. Temperature dependence of the specific heat divided by temperature  $C/T$  of CePt<sub>3</sub>Si single crystals. Circles and triangles show the data on the single crystal measured at  $H = 0$  and  $4\text{T}$ , respectively. Solid lines show idealized jumps at  $T_c$  and  $T_N$ . A broken line indicates an extrapolation below  $T_N$  expressed as  $C/T = 335 + 165T^2$  (mJ/K<sup>2</sup> mol).

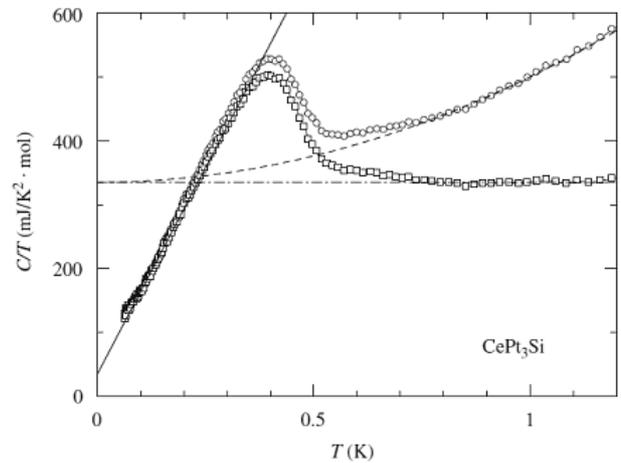


Fig. 2. Specific heat divided by temperature  $C/T$  around  $T_c$  of CePt<sub>3</sub>Si. Circles show the raw data. Squares indicate the  $C/T$  after subtracting  $165T^2$  (mJ/K<sup>2</sup> mol) from the raw data. The solid line shows the linear temperature dependence of  $C_s/T = 34.1 + 1294T$  (mJ/K<sup>2</sup> mol).

図 3.6: CePt<sub>3</sub>Si の単結晶試料の比熱の温度依存性<sup>31)</sup>。

核磁気緩和率  $T_1^{-1}$  の観測では<sup>32)</sup>、超伝導転移温度近傍でコヒーレントピークが見られ  $s$  波であり、低温付近では温度依存性のべきがラインノードのそれに似ており自明ではない振る舞いをしている(図. 3.7)。また、熱伝導率の低温付近の振る舞いをみると<sup>33)</sup>、 $\kappa/T \sim T$  となっており、ラインノードの存在が示唆されている(図. 3.8)。

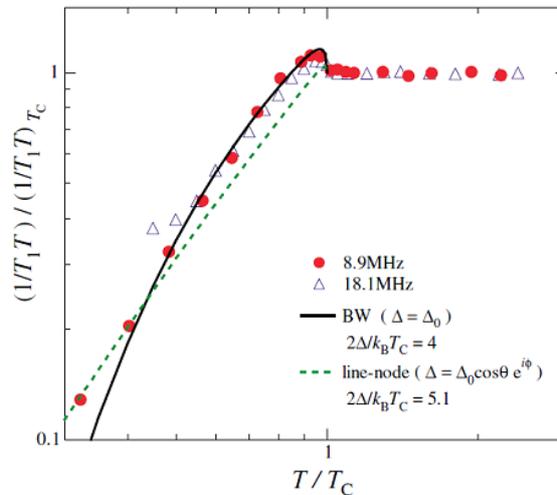


図 3.7: CePt<sub>3</sub>Si の核磁気緩和率の温度依存性<sup>32)</sup>。

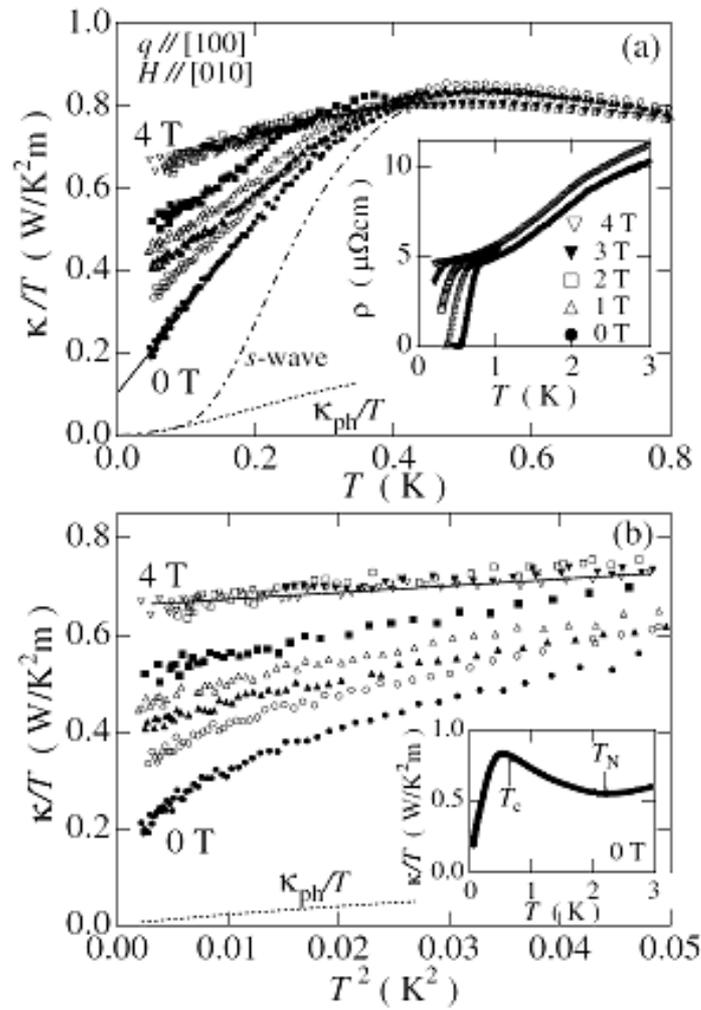


図 3.8:  $\text{CePt}_3\text{Si}$  の熱伝導率の温度依存性<sup>33)</sup>。

### 3.1.3 スピン軌道相互作用

空間反転対称性のない系では、スピン軌道相互作用が生じる。電場  $E$  の中を走る電子は、 $\hbar = 1$ 、 $S$  をスピン演算子として

$$H_{\text{SO}} = -\frac{e}{2mc^2} [\mathbf{v} \times \mathbf{E}] \cdot \mathbf{S} \equiv \mathbf{G} \cdot \mathbf{S} \quad (3.1)$$

というスピン軌道相互作用のエネルギーを持つ。これは電子の速度  $v$  の大きさに比例した相対論的效果によって生じている。結晶中の電子の Bloch 関数を  $\phi_k = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_k(\mathbf{r})$  とすると、ベクトル  $\mathbf{G}$  (スピン軌道相互作用  $H_{\text{SO}}$ ) の単位格子中の平均は

$$\int_{u.c.} d^3r \phi_k^* \mathbf{G} \phi_k(\mathbf{r}) = \int_{u.c.} d^3r \phi_k^*(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{e}{2mc^2} [\mathbf{v} \times \mathbf{E}] \right\} \phi_k(\mathbf{r}) \quad (3.2)$$

$$= -\frac{e}{2mc^2} \int_{u.c.} d^3r \mathbf{J}_k(\mathbf{r}) \times \nabla V(\mathbf{r}) \quad (3.3)$$

$$\mathbf{J}_k(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2mi} [u_k^*(\mathbf{r})(i\mathbf{k} + \nabla)u_k(\mathbf{r}) + u_k(\mathbf{r})(i\mathbf{k} - \nabla)u_k^*(\mathbf{r})] \quad (3.4)$$

となる。もし結晶に空間反転対称性があれば、電子の感じる電気的な一体ポテンシャル  $V(\mathbf{r})(E = \nabla V(\mathbf{r}))$  は単位格子の内部に空間反転対称点をもち、ベクトル  $\mathbf{G}$  の単位格子点中の平均はゼロになる。しかし、結晶に空間反転対称性がなければ、式 (3.3) は有限の値をもつ<sup>34, 35)</sup>。また、 $z \rightarrow -z$  の鏡像反転対称性が破れている場合には  $E \parallel \hat{z}$  であり、式 (3.1) の  $\mathbf{G} \sim \mathbf{v} \times \mathbf{E} \sim \mathbf{k} \times \mathbf{E}$  は、 $\mathbf{G} \sim \mathbf{k} \times \hat{z} = (ky, -kz, 0)$  となる。ここで、座標軸は  $\hat{x} \parallel \hat{a}$ 、 $\hat{y} \parallel \hat{b}$ 、 $\hat{z} \parallel \hat{c}$  ととった。

### 3.1.4 スピン一重項とスピン三重項の混成

系に空間反転対称性がない場合、スピン一重項とスピン三重項の混成が許可される。空間反転対称性がある系においては、このようなことは起こらない。空間反転対称性の有無が Cooper pair の対称性にどのような影響を与えるかについて、この節では議論する<sup>35)</sup>。まず、位置  $\mathbf{r}$ 、スピン変数を  $s$  とし、電子 1 ( $\mathbf{r}_1, s_1$ ) と電子 2 ( $\mathbf{r}_2, s_2$ ) によって形成された Cooper pair の波動関数 (ペアポテンシャル)  $\Delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, s_1, s_2)$  を考える。ここで、系には並進対称性があるとして波動関数は電子 1 と電子 2 の相対座標にのみ依るとした。このとき、Cooper pair の波動関数を

$$\Delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, s_1, s_2) = \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) F(s_1, s_2) \quad (3.5)$$

のように軌道部分の関数  $\Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  のとスピン部分の関数  $F(s_1, s_2)$  に分けることができる。また、関数  $\Phi$  は偶関数と奇関数に：

$$\text{even: } \Phi_{\text{even}}(-\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) = \Phi_{\text{even}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (3.6)$$

$$\text{odd: } \Phi_{\text{odd}}(-\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) = -\Phi_{\text{odd}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (3.7)$$

関数  $F$  はスピン一重項とスピン三重項：

$$\text{spin singlet } F_s(s_1, s_2) = -F_s(s_2, s_1) \quad (3.8)$$

$$\text{spin triplet } F_t(s_1, s_2) = F_t(s_2, s_1) \quad (3.9)$$

と分類することができる。パウリの排他律より、二つの電子の交換に対して波動関数は反対称でなければならない。つまり、座標とスピンの取替え ( $1 \leftrightarrow 2$ ) に対して

$$\Delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, s_2, s_1) = -\Delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, s_1, s_2) \quad (3.10)$$

を満たす必要がある。ゆえに、ペアポテンシャルは、スピン部分が反対称で軌道部分が対称か、スピン部分が対称で軌道部分が反対称でなければならない、

$$\Delta_{\text{even},s}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, s_1, s_1) = \Phi_{\text{even}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) F_s(s_1, s_2) \quad (3.11)$$

$$\Delta_{\text{odd},t}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, s_1, s_1) = \Phi_{\text{odd}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) F_t(s_1, s_2) \quad (3.12)$$

という組み合わせのみが許可される。

空間反転対称性が存在する場合、波動関数はパリティ演算子  $\hat{P}$  の固有状態でなければならない。つまり、

$$\hat{P}\Delta = \pm\Delta \quad (3.13)$$

を満たす必要がある。パリティ演算子は空間反転の演算子 ( $r \rightarrow -r$ ) なので、波動関数の軌道部分  $\Phi$  にのみ作用し、

$$\hat{P}\Phi_{\text{even}} = +\Phi_{\text{even}} \quad (3.14)$$

$$\hat{P}\Phi_{\text{odd}} = -\Phi_{\text{odd}} \quad (3.15)$$

であることがわかる。ここで、スピン一重項  $\Delta_{\text{even},s}$  とスピン三重項  $\Delta_{\text{odd},t}$  の線形結合  $\Delta_{\text{st}} = \Delta_{\text{even},s} + a\Delta_{\text{odd},t}$  を考える。 $a$  は定数である。この線形結合にパリティ演算子を作用させると

$$\hat{P}\Delta_{\text{st}} = \hat{P}\Delta_{\text{even},s} + a\hat{P}\Delta_{\text{odd},t} \quad (3.16)$$

$$= +\Delta_{\text{even},s} - a\Delta_{\text{odd},t} \quad (3.17)$$

$$\neq \Delta_{\text{st}} \quad (3.18)$$

となり、 $\Delta_{\text{st}}$  は固有状態ではないことがわかる。ゆえに、空間反転対称性のある系においてはスピン一重項とスピン三重項の混成は許されない。空間反転対称性のない系においては波動関数がパリティ演算子の固有状態である必要はないので、このような制限はない。したがって、スピン一重項とスピン三重項の混成は許されることになる。もちろん、混成が許可されていても実際に混成が起きているかについては別の問題であり、実際に混成が起きるには、電子間のスピン一重項三重項間の相互作用の存在、または反対称スピン軌道相互作用によって分裂した二つのフェルミ面上において状態密度の値に差があることが必要である<sup>36)</sup>。

### 3.1.5 ペアポテンシャルの対称性

核磁気緩和率 (図. 3.7)、熱伝導率 (図. 3.8) および磁場侵入長<sup>37)</sup> の測定から、CePt<sub>3</sub>Si にはラインノードが存在することが示唆されている。このラインノード出現の起源としては、いろいろな可能性が考えられる。たとえば、CePt<sub>3</sub>Si では反強磁性オーダーが超伝導と共存していると考えられているため、Fujimoto はその磁気オーダーの影響で超伝導ギャップにノードができるというシナリオを提案している<sup>38, 39)</sup>。また、実空間でペアポテンシャルが空間変動する FFLO 状態 (LO 状態) がゼロ磁場下で実現しているのであれば、実空間でペアポテンシャルの値がゼロとなるノードを持ち、熱力学量の温度依存性にべき的な振る舞いが現れるというシナリオもある。もう一つは、前節で述べたようなスピン一重項と三重項の混成によるものである<sup>36, 40, 41)</sup>。

### 3.1.6 本章の目的

本章では、超伝導ペアポテンシャルのギャップノード形成シナリオとして、スピン一重項とスピン三重項の混成を考える<sup>36, 40, 41)</sup>。そして、そのようなシナリオのもとでのペアポテンシャルを仮定したとき、渦糸コア近傍の状態密度がどのような空間分布を示すかを議論する。用いる手法は第 2 章で述べた渦糸コア近傍での解析的理論であり、LDOS パターンからペアポテンシャルの対称性に関する情報を引き出すことを目的とする。STM 実験において我々の理論が予想する LDOS パターンが得られれば、スピン一重項スピン三重項の混成シナリオがその他のシナリオよりも妥当性が高いと言う事ができるだろう。また、スピン一重項とスピン三重項の混成ペアリングによる超伝導ペアポテンシャル  $\hat{\Delta}$  は、後述するように Unitary ではない ( $\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger \neq \hat{\sigma}_0$ ) ため、我々の理論が Unitary ではないスピン三重項の場合にどのように適用すればよいのかを示す良い具体例となっている。

なお、本章は Journal of the Physical Society of Japan 75 (2006) 043706 に掲載された論文をまとめたものである。

## 3.2 モデル

### 3.2.1 混合 s+p 波モデル

CePt<sub>3</sub>Si を研究するにあたり、スピン-重項三重項混成ペアリングモデル (mixed spin-singlet-triplet model) として

$$\hat{\Delta}(\mathbf{r}, \bar{\mathbf{k}}) = [\Psi(\mathbf{r})\hat{\sigma}_0 + \mathbf{d}_k(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}] i\hat{\sigma}_y \quad (3.19)$$

$$= [\Psi(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r})(-k_b\hat{\sigma}_x + k_a\hat{\sigma}_y)] i\hat{\sigma}_y \quad (3.20)$$

を仮定する。ここで、s 波成分を  $\Psi$ 、 $d$  ベクトルを  $\mathbf{d}_k = \Delta(-\tilde{k}_b, \tilde{k}_a, 0)$ 、Pauli 行列を  $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ 、単位行列を  $\hat{\sigma}_0$  とした。Hayashi らの数値計算の結果から

$$\Psi(\mathbf{r}) \propto \Delta(\mathbf{r}) = \Psi\Delta(\mathbf{r}) \quad (3.21)$$

と仮定する ( $\Delta(\mathbf{r}) > \Psi(\mathbf{r})$ )。このとき、ペアポテンシャルは

$$\hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{r}) [\Psi + \Delta(-k_b\hat{\sigma}_x + k_a\hat{\sigma}_y)] i\hat{\sigma}_y \quad (3.22)$$

$$= \Delta(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} \Delta(k_b + ik_a) & \Psi \\ -\Psi & \Delta(-k_b + ik_a) \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

$$= \Delta(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} \tilde{k}_b + i\tilde{k}_a & \tilde{\Psi} \\ -\tilde{\Psi} & -\tilde{k}_b + i\tilde{k}_a \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

$$= |\Delta(\mathbf{r})| e^{i\varphi} \begin{pmatrix} i\tilde{k}_- & \tilde{\Psi} \\ -\tilde{\Psi} & i\tilde{k}_+ \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

と書くことができる。ここで、バルクでの singlet と triplet 成分の比を  $\tilde{\Phi} = \Psi/\Delta$  と定義し、 $\tilde{k}_+ = \tilde{k}_a + i\tilde{k}_b$ 、 $\tilde{k}_- = \tilde{k}_a - i\tilde{k}_b$  とおいた。また、運動量空間での単位ベクトル  $\tilde{\mathbf{k}}$  の各成分は結晶軸に固定された座標系で表している。この混合 s+p 波モデル (mixed s+p wave model) は Frigeri らによって CePt<sub>3</sub>Si のペアポテンシャルとして提案されている<sup>36)</sup>。

### 3.2.2 Rashba 型スピン軌道相互作用

前述したように、空間反転対称性のない系では、スピン軌道相互作用が生じる。 $a$ - $b$  面を鏡像面としたときに鏡像反転対称性がない系では、

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}, \eta, \eta'} \alpha \mathbf{g}_k \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\eta\eta'} c_{\mathbf{k}\eta}^\dagger c_{\mathbf{k}\eta'} \quad (3.26)$$

という形の Rashba 型と呼ばれるスピン軌道相互作用が生じることが知られている<sup>36, 41, 42)</sup>。ここで、

$$\mathbf{g}_k = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{k_F} (-k_b, k_a, 0) \quad (3.27)$$

であり、 $\alpha$  はスピン軌道相互作用の強さを表す。

### 3.2.3 Eilenberger 方程式

スピン軌道相互作用項が存在する場合の Eilenberger 方程式は

$$iv_F(\tilde{\mathbf{k}}) \cdot \nabla \check{g} + [i\omega_n \check{\tau}_3 - \alpha' \check{\mathbf{g}}_k \cdot \check{\mathbf{S}} - \check{\Delta}, \check{g}] = 0, \quad (3.28)$$

と書ける<sup>40, 41, 43, 44, 78</sup>)。ここで、

$$\check{g}_k = \begin{pmatrix} \mathbf{g}_k \hat{\sigma}_0 & 0 \\ 0 & \mathbf{g}_{-k} \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{g}_k \hat{\sigma}_0 & 0 \\ 0 & -\mathbf{g}_k \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

$$\mathbf{g}_k = \sqrt{\frac{3}{2}}(-\tilde{k}_b, \tilde{k}_a, 0), \quad \tilde{\tau}_3 = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_0 & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_0 \end{pmatrix}, \quad (3.30)$$

$$\check{S} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}^{tr} \end{pmatrix}, \quad \check{\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\Delta} \\ -\hat{\Delta}^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

である。また、CePt<sub>3</sub>Si は非常にクリーンな物質なので、自己エネルギーとしての不純物効果を無視した。

### 3.2.4 Riccati 方程式

ハミルトニアンにスピン軌道相互作用項が入っていても、§2.2.2 の Projection Method を用いることができる。このとき、matrix Riccati 方程式は

$$v_F \cdot \nabla \hat{a}_+ + 2\omega_n \hat{a}_+ + \hat{a}_+ \hat{\Delta}^\dagger \hat{a}_+ - \hat{\Delta} + i(\hat{a}_+ \alpha (\mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma})^{tr} + \alpha \mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma} \hat{a}_+) = 0, \quad (3.32)$$

$$v_F \cdot \nabla \hat{b}_- - 2\omega_n \hat{b}_- - \hat{b}_- \hat{\Delta} \hat{b}_- + \hat{\Delta}^\dagger - i(\hat{b}_- \alpha \mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma} + \alpha (\mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma})^{tr} \hat{b}_-) = 0, \quad (3.33)$$

となる。ここで、

$$\check{g} = -\check{N} \begin{pmatrix} (\hat{1} - \hat{a}_+ \hat{b}_-) & 2i\hat{a}_+ \\ -2i\hat{b}_- & -(\hat{1} - \hat{b}_- \hat{a}_+) \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

$$\check{N} = \begin{pmatrix} (1 + \hat{a}_+ \hat{b}_-)^{-1} & 0 \\ 0 & (1 + \hat{b}_- \hat{a}_+)^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.35)$$

である。

## 3.3 Green 関数の解析的導出

スピン軌道相互作用がある場合の Eilenberger 方程式を解く方法は、

1. 上述したスピン軌道相互作用項のある場合の Riccati 方程式を解くという方法
2. Eilenberger 方程式を対角化しスピン軌道相互作用項を落とす方法

の二通りある。1. の方法を用いて解く場合は unitary ではないペアポテンシャルに対して第 2 章の理論を使うことになるが、2. の方法を用いて解く場合はペアポテンシャルが unitary な形になっており第 2 章のスピン-重項の結果をそのまま使うことができる。第三章は unitary ではないペアポテンシャルの場合の解き方の例という役割も果たしているので、1. の方法を詳述したあと、その後 2. の方法の概略を述べる。1. の方法では近似として  $\alpha \ll \Delta_\infty$  を用いなければ解けないが、2. の方法ではそのような近似は必要ない。しかし、1. の方法でも 2. の方法でも全く同じ Green 関数が導出できる。

### 3.3.1 スピン軌道相互作用項のある Riccati 方程式を解く方法

まず、式 (3.33) を直接解く方法を述べる。第 2 章と同様に Kramer-Pesch 近似を用いて解く。ただし、展開は  $y$  と  $\omega_n$  だけではなく、 $\alpha$  でも展開を行う。まず、0 次の Riccati 方程式は

$$v_F \sin \chi \frac{\partial \hat{a}_0}{\partial x} + \hat{a}_0 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_0 - \hat{\Delta}_0 = 0, \quad (3.36)$$

$$v_F \sin \chi \frac{\partial \hat{b}_0}{\partial x} - \hat{b}_0 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_0 - \hat{\Delta}_0^\dagger = 0, \quad (3.37)$$

であり、式 (2.54)、(2.55) を三次元系に拡張した方程式となっている。ここで、第2章において Kramer-Pesch 近似を行った際には0次の解が空間的に一様な解であったことから、解くべき0次の Riccati 方程式の解は

$$\hat{a}_0 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_0 - \hat{\Delta}_0 = 0 \quad (3.38)$$

$$\hat{b}_0 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_0 - \hat{\Delta}_0^\dagger = 0 \quad (3.39)$$

という空間的に一様な方程式の解と等しいと仮定する。次に、0次の解を

$$\hat{a}_0 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad \hat{b}_0 = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}, \quad (3.40)$$

と仮定して上式に代入する。そして、各方程式を行列の成分で書き下し、四元連立方程式として解くと

$$\hat{a}_0 = \pm \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \pm \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & 0 \\ 0 & -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

$$\hat{b}_0 = \pm \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \pm \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & 0 \\ 0 & -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \end{pmatrix}, \quad (3.42)$$

という解が得られる。ここで、簡単のため  $\tilde{k}_\pm \rightarrow k_\pm$ 、 $\tilde{\Psi} \rightarrow \Psi$  と表記した。また、各解の符号は0次の Green 関数

$$\hat{g}_0 = -(\hat{1} + \hat{a}_0 \hat{b}_0)^{-1} (\hat{1} - \hat{a}_0 \hat{b}_0) \quad (3.43)$$

が発散するように  $\hat{a}_0 \hat{b}_0 = -\hat{1}$  となるように選んだ (§2.3.3 参照。)

ここで、二つの極限、 $|d| \rightarrow 0$ 、 $\Psi \rightarrow 0$  をそれぞれ考える。これらの極限においてペアポテンシャルはそれぞれ unitary である。 $|d| \rightarrow 0$  の極限の場合、ペアポテンシャルには s 波成分しか含まれない。このとき、式 (2.56)、(2.57) のように解を得ることができて、 $\hat{a}_0 \propto i\hat{\sigma}_y$  となり、0次の解の片方と一致する。 $\Psi \rightarrow 0$  の極限の場合、ペアポテンシャルには p 波成分しか含まれない。このとき、解は0次の解のもう一方と一致する。つまり、両極限の振る舞いを再現させるためにはどちらか一方の解を採用することはできない、ということである。この物理的意味を解釈するならば、一様な状況においては、singlet 成分と triplet 成分がそれぞれ独立に存在しておりチャンネルは二本ある、とすることができる。言い換えれば、 $\alpha \rightarrow 0$  というスピン軌道相互作用のない場合には s 波と p 波の成分は混ざらないということを示している。したがって、1次の摂動計算を行う際には、それぞれのチャンネル (singlet チャンネル、triplet チャンネル) を0次とした摂動計算を行う必要がある。

次に1次近似を考える。このとき、Riccati 方程式は

$$v_F \sin \chi \frac{\partial \hat{a}_1}{\partial x} + 2\omega_n \hat{a}_0 + \hat{a}_0 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_0 + \hat{a}_0 \hat{\Delta}_1^\dagger \hat{a}_0 - \hat{\Delta}_1 + i(\hat{a}_0 \alpha' (\mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma})^{\text{tr}} + \alpha' \mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma} \hat{a}_0) = 0, \quad (3.44)$$

$$v_F \sin \chi \frac{\partial \hat{b}_1}{\partial x} - 2\omega_n \hat{b}_0 - \hat{b}_0 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_1 - \hat{b}_1 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_0 - \hat{b}_0 \hat{\Delta}_1 \hat{b}_0 + \hat{\Delta}_1^\dagger - i(\hat{b}_0 \alpha' \mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma} + \alpha' (\mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma})^{\text{tr}} \hat{b}_0) = 0. \quad (3.45)$$

となる。ここで、 $\hat{a}_0$ 、 $\hat{b}_0$  としてどの解を用いても、

$$\hat{a}_0 \alpha' (\mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma})^{\text{tr}} + \alpha' \mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma} \hat{a}_0 = 0 \quad (3.46)$$

$$\hat{b}_0 \alpha' \mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma} + \alpha' (\mathbf{g}_k \cdot \hat{\sigma})^{\text{tr}} \hat{b}_0 = 0 \quad (3.47)$$

であることに注意しなければならない。つまり、1次摂動の範囲内では Eilenberger 方程式のスピン軌道相互作用項は Green 関数に影響を与えず、第2章と同様の手法を用いて解くことができるのである。

第2章と同様に、同次形の方程式

$$v_F \sin \chi \frac{\partial \hat{a}_1}{\partial x} + \hat{a}_0 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_0 = 0, \quad (3.48)$$

$$v_F \sin \chi \frac{\partial \hat{b}_1}{\partial x} - \hat{b}_0 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_1 - \hat{b}_1 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_0 = 0. \quad (3.49)$$

を考え、その解として

$$\hat{a}_1 = C \exp\left(\frac{\lambda}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x|} dx' \Delta(x')\right) \hat{A}, \quad (3.50)$$

を仮定して行列  $\hat{A}$  を求める。このとき、 $\hat{A}$  は

$$\lambda \hat{A} + \hat{a}_0 \Delta^\dagger \hat{A} + \hat{A} \hat{\Delta}^\dagger \hat{a}_0 = 0 \quad (3.51)$$

となるので、上式を満たす  $\lambda$  を見つければよい。具体的には、行列を計算し整理して、方程式をベクトル  $\vec{A} = (a, b, c, d)$  の方程式

$$\lambda \vec{A} + \hat{M} \vec{A} = 0 \quad (3.52)$$

とみなし、 $\hat{M}$  の固有値  $\lambda'$  を見つけることができれば

$$\lambda \vec{A} + \lambda' \vec{A} = 0 \quad (3.53)$$

となり、 $\lambda = -\lambda'$  が一階線形同次微分方程式の解となっている。

singlet チャンネルの場合

$\hat{a}_0$  として

$$\hat{a}_0 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

を用いる。ここで、 $\vec{A}$  と行列  $\hat{M}$  を用いて

$$\hat{M} \vec{A} = \begin{pmatrix} -2\Psi & -i\sqrt{k_+ k_-} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & i\sqrt{k_+ k_-} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & 0 \\ i\sqrt{k_+ k_-} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & -2\Psi & 0 & i\sqrt{k_+ k_-} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ -i\sqrt{k_+ k_-} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & 0 & -2\Psi & -i\sqrt{k_+ k_-} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ 0 & -i\sqrt{k_+ k_-} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & i\sqrt{k_+ k_-} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & -2\Psi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

とである。よって、行列  $\hat{M}$  の固有値、固有ベクトルを求めれば、解の  $\lambda$ 、 $\hat{A}$  を求めることができる。解くと、行列  $\hat{M}$  の固有値は

$$\lambda_A = -2(\Psi - \sqrt{k_+ k_-}) \quad (3.56)$$

$$\lambda_B = -2\Psi \quad (3.57)$$

$$\lambda_C = -2\Psi \quad (3.58)$$

$$\lambda_D = -2(\Psi + \sqrt{k_+ k_-}) \quad (3.59)$$

となる。 $k_+ k_- < \Psi$  のときにのみこの解はなりたつ。singlet チャンネルでの固有ベクトルは triplet チャンネルでの固有ベクトルと等しいために、後述する。

triplet チャンネルの場合

$\hat{a}_0$  として

$$\hat{a}_0 = \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & 0 \\ 0 & -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \end{pmatrix} \quad (3.60)$$

を用いる。singlet チャンネルのときと同様に、 $\hat{M}\vec{A}$  は

$$\hat{M}\vec{A} = \begin{pmatrix} -2\sqrt{k_+k_-} & -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}}\Psi & i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}}\Psi & 0 \\ i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}}\Psi & -2\sqrt{k_+k_-} & 0 & i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}}\Psi \\ -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}}\Psi & 0 & -2\sqrt{k_+k_-} & -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}}\Psi \\ 0 & -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}}\Psi & i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}}\Psi & -2\sqrt{k_+k_-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} \quad (3.61)$$

となる。この行列  $\hat{M}$  の固有値、固有ベクトルは

$$\lambda_A = -2\sqrt{k_+k_-}, \vec{A}_A = \begin{pmatrix} -\frac{k_-}{k_+} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

$$\lambda_B = -2\sqrt{k_+k_-}, \vec{A}_B = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.63)$$

$$\lambda_C = -2(\sqrt{k_+k_-} - \Psi), \vec{A}_C = \begin{pmatrix} \frac{k_-}{k_+} \\ i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.64)$$

$$\lambda_D = -2(\sqrt{k_+k_-} + \Psi), \vec{A}_D = \begin{pmatrix} \frac{k_-}{k_+} \\ -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.65)$$

$$(3.66)$$

となる。したがって、同次形の微分方程式の解は

$$\hat{a}_1 = \sum_{i=1}^4 C_i \exp\left(-\frac{\lambda_i}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x|} dx' \Delta(x')\right) \hat{A}_i \quad (3.67)$$

となる。

次に、得られた同次形の解を用いて、定数変化法によって非同次の微分方程式を解くこととする。解くべき方程式は

$$v_F \sin \chi \nabla \hat{a}_1 + \hat{a}_0 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_0 = i \frac{y}{x} \hat{a}_0 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_0 + i \frac{y}{x} \hat{\Delta}_0 - 2\omega_n \hat{a}_0 \quad (3.68)$$

である。ここで、0次近似の関係式 (3.38) を用いれば

$$v_F \sin \chi \nabla \hat{a}_1 + \hat{a}_0 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_1 \hat{\Delta}_0^\dagger \hat{a}_0 = 2i \frac{y}{x} \hat{\Delta}_0 - 2\omega_n \hat{a}_0 \quad (3.69)$$

と整理することができる。さらに、この行列微分方程式を成分表示して整理して

$$\hat{a}_0 \rightarrow \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ 0 \\ 0 \\ -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^4 a'_i \vec{A}_i \quad (3.70)$$

$$\hat{\Delta}_0 \rightarrow \begin{pmatrix} ik_- \\ \Psi \\ -\Psi \\ ik_+ \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^4 \Delta'_i \vec{A}_i \quad (3.71)$$

のように  $\hat{M}$  の固有ベクトルで展開する。そして、定数変化法として、ベクトル表記した同次形の解

$$\hat{a}_1 = \sum_{i=1}^4 C_i(x) \exp\left(-\frac{\lambda_i}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x|} dx' \Delta(x')\right) \vec{A}_i \quad (3.72)$$

を代入する。その結果、解くべき微分方程式は

$$\frac{d}{dx} C_i(x) = \frac{1}{v_F \sin \chi} \left[ 2i \frac{y}{x} \Delta'_i - 2\omega_n a'_i \right] e^{\frac{\lambda_i}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x|} dx' \Delta(x')} \quad (3.73)$$

という  $C_i(x)$  を決定する微分方程式となる。以上から、1 次の Matrix Riccati 方程式の解は

$$\hat{a}_1 = \sum_{i=1}^4 \frac{1}{v_F \sin \chi} \int_{-x_c}^x \left[ 2i \frac{y}{x'} \Delta'_i - 2\omega_n a'_i \right] e^{\frac{\lambda_i}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x'|} dx'' \Delta(x'')} \cdot e^{-\frac{\lambda_i}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x|} dx' \Delta(x')} \hat{A}_i \quad (3.74)$$

となる。ここで、 $x \rightarrow -x_c$  で解が一様解と一致し Riccati 方程式の1 次の解が零になるという境界条件を課した。

次に、 $a'_i$ 、 $\Delta'_i$  の値を求める。これらの値は、 $\hat{M}$  の固有ベクトルからなる行列

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} -\frac{k_-}{k_+} & 0 & \frac{k_-}{k_+} & \frac{k_-}{k_+} \\ 0 & 1 & i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ 0 & 1 & -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.75)$$

の逆行列

$$\hat{P}^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \frac{k_+}{k_-} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{k_+}{4k_-} & -\frac{i}{4} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & \frac{i}{4} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & \frac{1}{4} \\ \frac{k_+}{4k_-} & \frac{i}{4} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & -\frac{i}{4} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (3.76)$$

を  $\hat{a}_0$ 、 $\hat{\Delta}_0$  のベクトル表示に演算させれば得ることができ、

$$\hat{a}_0 \rightarrow \hat{P}^{-1} \begin{pmatrix} i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ 0 \\ 0 \\ i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \\ -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \end{pmatrix} \quad (3.77)$$

$$\hat{\Delta}_0 \rightarrow \hat{P}^{-1} \begin{pmatrix} ik_- \\ \Psi \\ -\Psi \\ ik_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{i}{2} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} (\sqrt{k_+ k_-} - \Psi) \\ \frac{i}{2} \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} (\sqrt{k_+ k_-} + \Psi) \end{pmatrix} \quad (3.78)$$

となり、 $\hat{a}_1$  は  $\hat{A}_A$ 、 $\hat{A}_B$  の成分を持たないことがわかる。

次に、 $\hat{b}_1$  を求める。 $\hat{M}_B \vec{B}$  は

$$\hat{M}_B \vec{B} = - \begin{pmatrix} -2\sqrt{k_+ k_-} & -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \Psi & i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \Psi & 0 \\ i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \Psi & -2\sqrt{k_+ k_-} & 0 & i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \Psi \\ -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \Psi & 0 & -2\sqrt{k_+ k_-} & -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \Psi \\ 0 & -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \Psi & i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \Psi & -2\sqrt{k_+ k_-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} \quad (3.79)$$

であり、固有値、固有ベクトルは

$$\lambda_A = -2\sqrt{k_+k_-}, \vec{B}_A = \begin{pmatrix} -\frac{k_+}{k_-} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.80)$$

$$\lambda_B = -2\sqrt{k_+k_-}, \vec{B}_B = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.81)$$

$$\lambda_C = -2(\sqrt{k_+k_-} - \Psi), \vec{B}_C = \begin{pmatrix} \frac{k_+}{k_-} \\ i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \\ -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.82)$$

$$\lambda_D = -2(\sqrt{k_+k_-} + \Psi), \vec{B}_D = \begin{pmatrix} \frac{k_+}{k_-} \\ -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \\ i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.83)$$

$$(3.84)$$

となる。同次形の微分方程式の解は

$$\hat{b}_1 = \sum_{i=1}^4 G_i \exp\left(-\frac{\lambda_i}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x|} dx' \Delta(x')\right) \hat{B}_i \quad (3.85)$$

となる。

$\hat{a}_0$  と同様に、得られた同次形の解を用いて、定数変化法によって非同次の微分方程式を解くこととする。解くべき方程式は

$$v_F \sin \chi \nabla \hat{b}_1 - \hat{b}_0 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_1 - \hat{b}_1 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_0 = i \frac{y}{x} \hat{b}_0 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_0 + i \frac{y}{x} \hat{\Delta}_0^\dagger + 2\omega_n \hat{b}_0 \quad (3.86)$$

である。ここで、0次の方程式を用いれば

$$v_F \sin \chi \nabla \hat{b}_1 - \hat{b}_0 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_1 - \hat{b}_1 \hat{\Delta}_0 \hat{b}_0 = 2i \frac{y}{x} \hat{\Delta}_0^\dagger + 2\omega_n \hat{b}_0 \quad (3.87)$$

と整理することができる。 $\hat{a}_1$  のときと同様の議論で、これらの行列をベクトルとみなし

$$\hat{b}_0 \rightarrow \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \\ 0 \\ 0 \\ -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^4 b'_i \vec{B}_i \quad (3.88)$$

$$\hat{\Delta}_0^\dagger \rightarrow \begin{pmatrix} -ik_+ \\ -\Psi \\ \Psi \\ -ik_- \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^4 \Delta_i'^\dagger \vec{B}_i \quad (3.89)$$

のように  $\hat{M}_B$  の固有ベクトルで展開すれば、

$$\frac{d}{dx} G_i(x) = \frac{1}{v_F \sin \chi} \left[ 2i \frac{y}{x} \Delta_i'^\dagger + 2\omega_n b'_i \right] e^{\frac{\lambda_i}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x|} dx' \Delta(x')} \quad (3.90)$$

となり、方程式は  $G_i(x)$  を決める微分方程式となる。以上から、1 次の Riccati 方程式の解は

$$\hat{b}_1 = \sum_{i=1}^4 \frac{1}{v_F \sin \chi} \int_{x_c}^x \left[ 2i \frac{y}{x'} \Delta_i^\dagger + 2\omega_n b_i' \right] e^{\frac{\lambda_i}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x'|} dx'' \Delta(x'')} \cdot e^{-\frac{\lambda_i}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x'|} dx' \Delta(x')} \hat{B}_i \quad (3.91)$$

となる。 $\hat{a}_0$  と同様に、 $\hat{M}_B$  の固有ベクトルからなる行列

$$\hat{P}_B = \begin{pmatrix} -\frac{k_+}{k_-} & 0 & \frac{k_+}{k_-} & \frac{k_+}{k_-} \\ 0 & 1 & i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \\ 0 & 1 & -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \\ 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.92)$$

の逆行列

$$\hat{P}_B^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \frac{k_-}{k_+} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{k_-}{4k_+} & -\frac{i}{4} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & \frac{i}{4} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & \frac{1}{4} \\ \frac{k_-}{4k_+} & \frac{i}{4} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & -\frac{i}{4} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (3.93)$$

を演算させれば各係数が求まり、

$$\hat{b}_0 \rightarrow -\hat{P}_B^{-1} \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \\ 0 \\ 0 \\ -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \end{pmatrix} \quad (3.94)$$

$$\hat{\Delta}_0^\dagger \rightarrow \hat{P}_B^{-1} \begin{pmatrix} -ik_+ \\ -\Psi \\ \Psi \\ -ik_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} (\sqrt{k_+ k_-} - \Psi) \\ -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} (\sqrt{k_+ k_-} + \Psi) \end{pmatrix} \quad (3.95)$$

となる。

### Green 関数

triplet 成分の  $\hat{a}_0$ 、 $\hat{b}_0$  を用いて得られた 1 次の表式は

$$\begin{aligned} \hat{a}_1(x) &= \frac{1}{v_\chi} \int_{-x_c}^x dx' \left[ -|\Delta(r')| \text{sign}(x') \frac{y}{x'} (\sqrt{k_+ k_-} - \Psi) + i\omega_n \right] \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} e^{-2(\sqrt{k_+ k_-} - \Psi)F(x')} \cdot e^{2(\sqrt{k_+ k_-} - \Psi)F(x)} \hat{A}_C \\ &\quad + \frac{1}{v_\chi} \int_{-x_c}^x dx' \left[ -|\Delta(r')| \text{sign}(x') \frac{y}{x'} (\sqrt{k_+ k_-} + \Psi) + i\omega_n \right] \sqrt{\frac{k_+}{k_-}} e^{-2(\sqrt{k_+ k_-} + \Psi)F(x')} \cdot e^{2(\sqrt{k_+ k_-} + \Psi)F(x)} \hat{A}_D \end{aligned} \quad (3.96)$$

$$\begin{aligned} \hat{b}_1(x) &= \frac{1}{v_\chi} \int_{x_c}^x dx' \left[ |\Delta(r')| \text{sign}(x') \frac{y}{x'} (\sqrt{k_+ k_-} - \Psi) - i\omega_n \right] \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} e^{-2(\sqrt{k_+ k_-} - \Psi)F(x')} \cdot e^{2(\sqrt{k_+ k_-} - \Psi)F(x)} \hat{B}_C \\ &\quad + \frac{1}{v_\chi} \int_{x_c}^x dx' \left[ |\Delta(r')| \text{sign}(x') \frac{y}{x'} (\sqrt{k_+ k_-} + \Psi) - i\omega_n \right] \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} e^{-2(\sqrt{k_+ k_-} + \Psi)F(x')} \cdot e^{2(\sqrt{k_+ k_-} + \Psi)F(x)} \hat{B}_D \end{aligned} \quad (3.97)$$

である。ここで、 $v_\chi \equiv v_F \sin \chi$ 、 $F(x) = \int_0^{|x|} dx' \Delta(x')/v_\chi$  である。

また、Kramer-Pesch 近似の1次までの Green 関数は

$$\hat{g}_1 = -2(\hat{a}_0\hat{b}_1 + \hat{a}_1\hat{b}_0)^{-1} \quad (3.98)$$

である。これを計算するために、 $\hat{a}_0\hat{B}_i$ 、 $\hat{A}_i\hat{b}_0$  を計算すると、

$$\hat{a}_0\hat{B}_C = \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & 1 \\ -\frac{k_+}{k_-} & -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \end{pmatrix}, \hat{A}_C\hat{b}_0 = \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & \frac{k_-}{k_+} \\ -1 & -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \end{pmatrix} \quad (3.99)$$

$$\hat{a}_0\hat{B}_D = \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & -1 \\ \frac{k_+}{k_-} & -i\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} \end{pmatrix}, \hat{A}_D\hat{b}_0 = \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} & -\frac{k_-}{k_+} \\ 1 & -i\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \end{pmatrix} \quad (3.100)$$

となり、

$$\sqrt{\frac{k_-}{k_+}}\hat{a}_0\hat{B}_C = \sqrt{\frac{k_+}{k_-}}\hat{A}_C\hat{b}_0 \equiv \hat{O}_C \quad (3.101)$$

$$\sqrt{\frac{k_-}{k_+}}\hat{a}_0\hat{B}_D = \sqrt{\frac{k_+}{k_-}}\hat{A}_D\hat{b}_0 \equiv \hat{O}_D \quad (3.102)$$

となる。

以上より、triplet チャンネルを0次とした Kramer-Pesch 近似の一次までの Green 関数は

$$\hat{g} = \frac{\hat{O}_C e^{-2(\sqrt{k_+k_-} + \tilde{\Psi})F(x)}}{2F_D} + \frac{\hat{O}_D e^{-2(\sqrt{k_+k_-} - \tilde{\Psi})F(x)}}{2F_C}, \quad (3.103)$$

となる。ここで、

$$F_{C,D} = \frac{1}{v_F \sin \chi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[ -\frac{|\Delta(r')|}{|x'|} \frac{y}{\sin \chi} (\sqrt{k_+k_-} \mp \tilde{\Psi}) + i\omega_n \right] e^{-2(\sqrt{k_+k_-} \mp \tilde{\Psi})F(x')}, \quad (3.104)$$

$$\hat{O}_{C,D} = \begin{pmatrix} -i & \pm\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \\ \mp\sqrt{\frac{k_+}{k_-}} & -i \end{pmatrix}, \quad (3.105)$$

$$F(x) = \frac{1}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x|} dx' \Delta(x') \quad (3.106)$$

である。また、解が遠方で発散しないためには、 $\sqrt{k_+k_-} - \tilde{\Psi} > 0$  が必要である。

singlet チャンネルを0次とした場合の Green 関数は、triplet チャンネルを0次とした場合と同様に計算することができ、その結果は triplet チャンネルの結果の  $\sqrt{k_+k_-} - \tilde{\Psi}$  を  $\tilde{\Psi} - \sqrt{k_+k_-}$  に置き換えたものとなる。以上から、singlet チャンネルの場合の Green 関数が発散しない条件は  $\sqrt{k_+k_-} - \tilde{\Psi} < 0$  であり、triplet チャンネルの場合の Green 関数が発散しない条件は  $\sqrt{k_+k_-} - \tilde{\Psi} > 0$  であるので、triplet チャンネルの Green 関数の  $\sqrt{k_+k_-} - \tilde{\Psi}$  を  $|\sqrt{k_+k_-} - \tilde{\Psi}|$  と置き換えれば、 $\sqrt{k_+k_-} - \tilde{\Psi}$  の正負に依らず運動量空間すべてにおいて Green 関数を定義することができる。また、渦糸近傍であるという近似  $r \ll \xi_0$  を用いれば、

$$F_{C,D} \sim -\frac{\tilde{y}|\sqrt{k_+k_-} \mp \tilde{\Psi}|}{\sin \chi} + \frac{i\tilde{\omega}_n}{|\sqrt{k_+k_-} \mp \tilde{\Psi}|}, \quad (3.107)$$

となり、

$$\frac{1}{v_F} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-2aF(x')} \sim \frac{1}{a\Delta_\infty}, \quad (3.108)$$

$$\int_0^{\infty} dx' \frac{\Delta(x')}{x'} e^{-2aF(x')} \sim \Delta_\infty. \quad (3.109)$$

となる。よって、渦糸コア近傍での局所電子状態密度分布は

$$\tilde{\nu}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\epsilon}) = -\left\langle \text{Re}\{\text{tr}\hat{g}^R(i\tilde{\omega}_n \rightarrow \tilde{\epsilon} + 0^+)\} \right\rangle_{\tilde{\mathbf{k}}} \quad (3.110)$$

$$\begin{aligned} &= \tilde{\nu}_{\text{I}}(0) \int_0^\pi \sin \chi d\chi \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{4} (\sqrt{k_+ k_-} + \tilde{\Psi}) \delta[h_{\text{I}}(\theta, \chi)] e^{-2(\sqrt{k_+ k_-} + \tilde{\Psi})F(x')} \\ &\quad + \tilde{\nu}_{\text{II}}(0) \int_0^\pi \sin \chi d\chi \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{4} |\sqrt{k_+ k_-} - \tilde{\Psi}| \delta[h_{\text{II}}(\theta, \chi)] e^{-2|\sqrt{k_+ k_-} - \tilde{\Psi}|F(x')}, \end{aligned} \quad (3.111)$$

となる。ここで、 $h_{\text{I,II}}(\theta, \chi) = \tilde{\epsilon} - \tilde{y}(\sqrt{k_+ k_-} \pm \tilde{\Psi})^2 / \sin \chi$  を用いた。

得られた Green 関数は、二種類のペアポテンシャル

$$\lambda_{\pm}(\mathbf{k}) = |\sqrt{k_+ k_-} \pm \tilde{\Psi}| \quad (3.112)$$

を持つ系とみなすことができる (式 (2.126) 参照)。これはスピン軌道相互作用によってスピン縮退が解けたことによりフェルミ面が二つに分裂した、と解釈することができる。

なお、磁場が結晶軸の  $c$  軸方向にかかっているとすれば、 $\tilde{k}_a = \cos \theta \sin \chi$ 、 $\tilde{y} = \sin \theta \sin \chi$  となり、二種類のペアポテンシャルは

$$\lambda_{\pm}(\mathbf{k}) = |\Delta \sin \chi \pm \Psi| \quad (3.113)$$

と表現することができる。これは Hayashi らの結果<sup>41)</sup> と等しい。

### 3.3.2 Eilenberger 方程式を対角化して解く方法

次に、Eilenberger 方程式を対角化して解く方法を概観する。

#### ハミルトニアンの対角化

スピン軌道相互作用がある常伝導状態のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) & -i\alpha'\tilde{k}_- \\ i\alpha'\tilde{k}_+ & \epsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (3.114)$$

である。このハミルトニアン  $\hat{H}$  は、

$$\hat{U}_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i\tilde{k}_- \\ -i\tilde{k}_+ & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.115)$$

$$\hat{U}_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i\tilde{k}_- \\ i\tilde{k}_+ & 1 \end{pmatrix} \quad (3.116)$$

というユニタリ行列 ( $\hat{U}_k^\dagger \hat{U}_k = \hat{U}_k \hat{U}_k^\dagger = \hat{\sigma}_0$ ) によって対角化される<sup>36)</sup>。ここで、 $\tilde{k}_{\pm} = \tilde{k}_{\pm} / |\tilde{k}_{\pm}|$  である。このとき、

$$\hat{U}_k^\dagger \hat{H} \hat{U}_k = \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) - \alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})| & 0 \\ 0 & \epsilon(\mathbf{k}) + \alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})| \end{pmatrix} \quad (3.117)$$

となる。これはつまり、スピン軌道相互作用によってスピン縮退が解け、バンドが二つ ( $\xi_{\text{I,II}} \equiv \epsilon(\mathbf{k}) \pm \alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})|$ ) に分裂していることを意味している。ハミルトニアンに作用させたユニタリ行列は、スピン空間における回転を表す。また、ユニタリ行列は波数  $k$  に依るので、フェルミ面上にいる各電子のスピンはその波数に応じて回転していることになる。これは、 $z$  軸がもはやスピン量子化軸ではなくなったことを意味する。

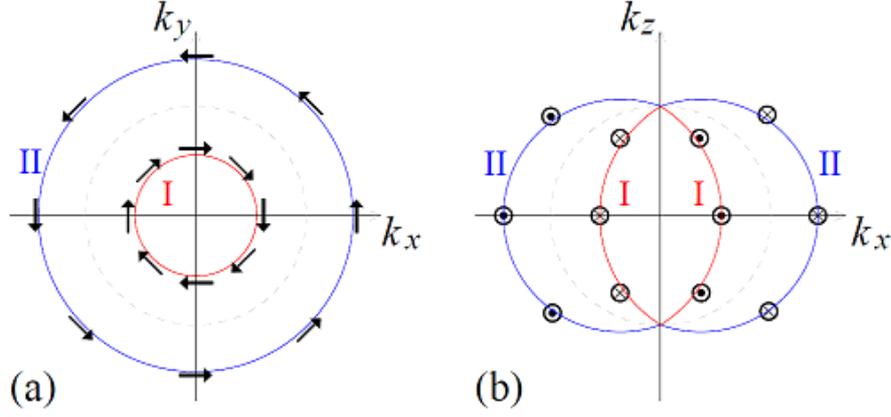


図 3.9: 二つに分裂したフェルミ面 (I と II) の模式図。点線は分裂前のフェルミ面。矢印はそれぞれのフェルミ面上のスピン向きを表す<sup>35)</sup>。

### Eilenberger 方程式の対角化

ハミルトニアンを対角化するためにユニタリ行列を用いて、Eilenberger 方程式をそれぞれのフェルミ面に対応する二つの方程式に分離することができる<sup>41, 46)</sup>。そのとき得られる Eilenberger 方程式は

$$i\mathbf{v}_{I,II} \cdot \nabla \check{g}_{I,II} + [i\omega_n \check{\tau}_3 - \check{\Delta}_{I,II}, \check{g}_{I,II}] = 0 \quad (3.118)$$

である。ここで、

$$\check{\Delta}_{I,II} = [(\check{\tau}_1 + i\check{\tau}_2)\Delta_{I,II} - (\check{\tau}_1 - i\check{\tau}_2)\Delta_{I,II}^*] \quad (3.119)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{I,II} \\ -\Delta_{I,II}^* & 0 \end{pmatrix} \quad (3.120)$$

$$\Delta_{I,II} = \Psi \pm \Delta \sin \chi \quad (3.121)$$

である。Green 関数  $\check{g}_{I,II}$  はそれぞれフェルミ面 I とフェルミ面 II における Green 関数であり、

$$\check{g}_{I,II}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, i\omega_n) = \begin{pmatrix} g_{I,II} & f_{I,II} \\ -\bar{f}_{I,II} & \bar{g}_{I,II} \end{pmatrix} \quad (3.122)$$

と定義されている。また、通常の Green 関数はスピン空間の行列として表現すると

$$\hat{g} = g_I \hat{\sigma}_I + g_{II} \hat{\sigma}_{II} \quad (3.123)$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} g_I + g_{II} & -(\tilde{k}_b + i\tilde{k}_a)(g_I - g_{II}) \\ -(\tilde{k}_b - i\tilde{k}_a)(g_I - g_{II}) & g_I + g_{II} \end{pmatrix} \quad (3.124)$$

となる。ここで、

$$\hat{\sigma}_{I,II} = (\hat{\sigma}_0 \pm \bar{\mathbf{g}}_k \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})/2 \quad (3.125)$$

$$\bar{\mathbf{g}}_k = (-\tilde{k}_b, \tilde{k}_a, 0) \quad (3.126)$$

である。

また、一様解は

$$g_{I,II} = -\frac{\omega_n}{B_{I,II}} \quad (3.127)$$

$$f_{I,II} = -i \frac{\Delta_{I,II}}{B_{I,II}} \quad (3.128)$$

$$\bar{f}_{I,II} = -i \frac{\Delta_{I,II}^*}{B_{I,II}} \quad (3.129)$$

$$\bar{g}_{I,II} = \frac{\omega_n}{B_{I,II}} \quad (3.130)$$

$$B_{I,II} = \sqrt{\omega_n^2 + |\Delta_{I,II}|^2} \quad (3.131)$$

であり、規格化条件:

$$\check{g}_{I,II} \check{g}_{I,II} = \check{1} \quad (3.132)$$

を満たす。

### 分離された Riccati 方程式

二つに分離された Eilenberger 方程式と一様解を、通常のスピン一重項の Eilenberger 方程式と §1.4.5 で述べた一様解とそれぞれ比べると、 $g_{I,II}$  はペアポテンシャルが

$$\Delta_{I,II} = |\Psi \pm \Delta \sin \chi| \quad (3.133)$$

であるスピン一重項の Green 関数とみなすことができる。また、規格化条件も満たされているので Projection Method を用いることができ、Riccati 方程式を

$$\mathbf{v}_F \cdot \nabla a_{I,II} + [2\omega_n + \Delta_{I,II}^* a_{I,II}] a_{I,II} - \Delta_{I,II} = 0 \quad (3.134)$$

$$\mathbf{v}_F \cdot \nabla b_{I,II} - [2\omega_n + \Delta_{I,II} b_{I,II}] b_{I,II} + \Delta_{I,II}^* = 0 \quad (3.135)$$

というスピン添え字を含まない形に書くことができる。

つまり、図.3.10(a) のようなフルギャップを持つフェルミ面 I と、(b) のようなラインノードギャップを持つフェルミ面 II において、それぞれのフェルミ面の上で Riccati 方程式を解けばよいということである。

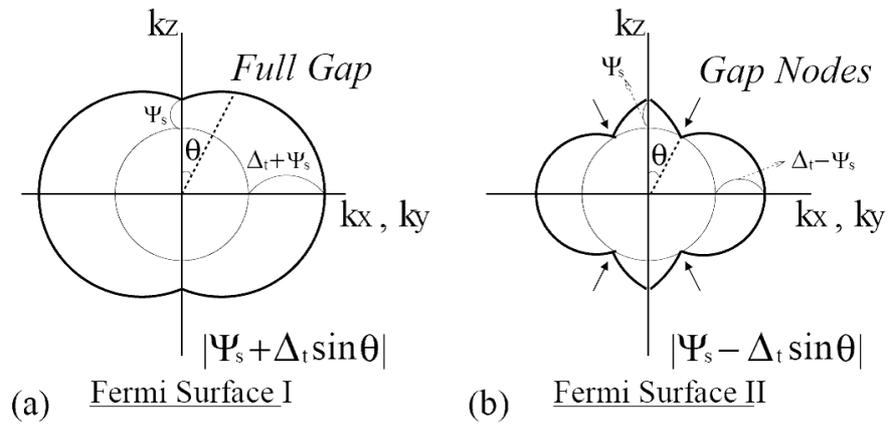


図 3.10: CePt<sub>3</sub>Si のギャップの構造<sup>35)</sup>。図では極座標表示として  $(\phi, \theta)$  を用いており本論文では  $(\theta, \chi)$  を用いているため、図での  $\theta$  は本論文での  $\chi$  に対応する。

## Green 関数

スピン-重項の場合とまったく同じ解き方をすることが可能なので、第2章で用いた Kramer-Pesch 近似によって得られた Green 関数 (2.126) にペアポテンシャル (3.133) を代入すると得ることができ、

$$\hat{g}_{I,\Pi}(r, \theta, \chi; i\omega_n) \sim -\frac{v_F \sin \chi e^{-2\lambda F(x)}}{2C_{I,\Pi} [iE_{I,\Pi} + \omega_n]}, \quad (3.136)$$

$$\sim -\frac{v_F |\Psi \pm \Delta \sin \chi| e^{-2\lambda F(x)}}{2\xi_0 [iE_{I,\Pi} + \omega_n]}, \quad (3.137)$$

$$C_{I,\Pi}(\theta, \chi) \sim \frac{\xi_0}{|\Psi \pm \Delta \sin \chi|} \sin \chi, \quad (3.138)$$

$$E_{I,\Pi}(\theta, \chi) \sim \frac{y}{\xi_0 \sin \chi} \Delta_\infty |\Psi \pm \Delta \sin \chi|^2, \quad (3.139)$$

$$F(x) = \frac{1}{v_F \sin \chi} \int_0^{|x|} dx' f(x') \quad (3.140)$$

となる。ゆえに、渦糸コア近傍での局所電子状態密度は

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}(\tilde{r}, \tilde{\epsilon}) \sim & \tilde{\nu}_I(0) \int_0^\pi \sin \chi d\chi \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{4} |\Psi + \Delta \sin \chi| \delta[h_I(\theta, \chi)] e^{-2|\Psi + \Delta \sin \chi| F(x')} \\ & + \tilde{\nu}_{II}(0) \int_0^\pi \sin \chi d\chi \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{4} |\Psi - \Delta \sin \chi| \delta[h_{II}(\theta, \chi)] e^{-2|\Psi - \Delta \sin \chi| F(x')}, \end{aligned} \quad (3.141)$$

となる。ここで、 $h_{I,\Pi}(\theta, \chi) = \tilde{\epsilon} - \tilde{y} |\Psi \pm \Delta \sin \chi|^2 / \sin \chi$  を用いた。

以上から、方法 1. でも 2. でも同じ結果を与えるということがわかる。

## 3.4 局所電子状態密度

Green 関数を求める方法は二種類あったが、両方とも同じ結果が得られた。方法 1. ではスピン軌道相互作用の強さ  $\alpha$  が小さいと仮定しているため、 $\Delta \ll \alpha$  である CePt<sub>3</sub>Si の現状と合わない。方法 2. にはそのような制限がない。

LDOS が発散する条件は式 (2.157) ~ (2.160) であり、結晶軸に固定された座標系  $(\tilde{k}_a, \tilde{k}_b, \tilde{k}_c)$  を用いて書けば

$$\tilde{x}_\pm = \frac{2\tilde{\epsilon} \sin \chi \frac{\partial}{\partial \theta} \sqrt{\tilde{k}_a^2 + \tilde{k}_b^2}}{\left(\sqrt{\tilde{k}_a^2 + \tilde{k}_b^2} \pm \tilde{\Psi}\right)^3}, \quad (3.142)$$

$$\tilde{y}_\pm = \frac{\tilde{\epsilon} \sin \chi}{\left(\sqrt{\tilde{k}_a^2 + \tilde{k}_b^2} \pm \tilde{\Psi}\right)^2}, \quad (3.143)$$

$$0 = \frac{\tilde{\epsilon} \cos \chi}{\sin \chi} - \frac{\tilde{\epsilon} \frac{\partial}{\partial \chi} (\tilde{k}_a^2 + \tilde{k}_b^2)}{\tilde{k}_a^2 + \tilde{k}_b^2 \pm \tilde{\Psi} \sqrt{\tilde{k}_a^2 + \tilde{k}_b^2}}, \quad (3.144)$$

$$0 > \frac{\partial^2 h_{I,\Pi}}{\partial \theta^2} \frac{\partial^2 h_{I,\Pi}}{\partial \chi^2} - \left(\frac{\partial^2 h_{I,\Pi}}{\partial \theta \partial \chi}\right)^2, \quad (3.145)$$

と書ける。変数  $(\theta, \chi)$  は磁場に固定された座標系での極座標なので、印加される磁場の方向に合わせて  $(\tilde{k}_a, \tilde{k}_b, \tilde{k}_c)$  を座標変換することで、任意の磁場の方向の LDOS を得ることができる。たとえば、図 2.6(a) のように  $c$  軸が磁場方向である  $Z$  軸から  $Y$ - $Z$  平面上に  $\phi$  だけ傾いている場合には、

$$\tilde{k}_a = \tilde{k}_X, \quad (3.146)$$

$$\tilde{k}_b = \tilde{k}_Y \cos \phi - \tilde{k}_Z \sin \phi, \quad (3.147)$$

$$\tilde{k}_c = \tilde{k}_Y \sin \phi + \tilde{k}_Z \cos \phi. \quad (3.148)$$

と座標変換すればよい。これらを  $(\theta, \chi)$  を用いて書けば

$$\tilde{k}_a = \cos \theta \sin \chi, \quad (3.149)$$

$$\tilde{k}_b = \sin \theta \sin \chi \cos \phi - \cos \chi \sin \phi, \quad (3.150)$$

$$\tilde{k}_c = \sin \theta \sin \chi \sin \phi + \cos \chi \cos \phi \quad (3.151)$$

となる。

### 3.4.1 $c$ 軸に平行に磁場をかけた場合

$c$  軸方向に磁場をかけた場合を考える ( $\phi = 0$ )。このとき、式 (3.144) から  $\chi = \pi/2$  の平面での LDOS の発散線が三次元系での LDOS の発散線となる。ゆえに、

$$\tilde{X}_{\pm} = -\frac{\tilde{\epsilon} \sin \theta}{(1 \pm \tilde{\Psi})^2}, \quad (3.152)$$

$$\tilde{Y}_{\pm} = \frac{\tilde{\epsilon} \cos \theta}{(1 \pm \tilde{\Psi})^2}, \quad (3.153)$$

が LDOS が発散する点の集合である。つまり、半径  $\tilde{\epsilon}/(1 \pm \tilde{\Psi})$  の二つの円上で LDOS は発散する。 $\chi = \pi/2$  という平面は、図. 3.10 における赤道部分 (図中の  $\theta = \pi/2$  に対応) であるから、二つのフェルミ面 I、II のどちらにおいても  $k_X-k_Y$  平面においてはペアポテンシャルに異方性はない。その結果、等方的 s 波の場合と同様な LDOS パターンが得られるのである。また、この結果は Hayashi ららの数値計算結果<sup>46)</sup> とコンシステントである。この LDOS パターンの半径の比を得ることで singlet 成分と triplet 成分の比を得ることができる。

### 3.4.2 $c$ 軸に垂直に磁場をかけた場合

次に、磁場を  $b$  軸方向にかけた場合を考える ( $\phi = \pi/2$ )。このときも、式 (3.144) から  $\chi = \pi/2$  の平面での LDOS の発散線が三次元系での LDOS の発散線となる。ゆえに、

$$\tilde{X}_{\pm} = \frac{-\tilde{\epsilon} \sin \theta}{(|\cos \theta| \pm \tilde{\Psi})^3} \left\{ 3|\cos \theta| \pm \tilde{\Psi} \right\}, \quad (3.154)$$

$$\tilde{Y}_{\pm} = -2 \frac{\tilde{\epsilon} \sin^2 \theta \text{sign}[\cos \theta]}{(|\cos \theta| \pm \tilde{\Psi})^3} + \frac{\tilde{\epsilon} \cos \theta}{(|\cos \theta| \pm \tilde{\Psi})^2}, \quad (3.155)$$

が LDOS の発散点の集合である。このとき、式 (3.145) より、フェルミ面 II に関しては  $\tilde{\Psi} < |\cos \theta|$  という条件がある。図. 3.11 に、あるエネルギー  $\tilde{\epsilon}$  のときの LDOS の発散線を示す。

図. 3.11(a) はフェルミ面 I からの寄与で生じる LDOS パターンであるが、これは秩序変数の形状を反映した結果であるといえる。 $b$  軸方向に磁場をかけている場合の  $\chi = \pi/2$  の平面とは、図. 3.10(a) における  $k_x-k_z$  平面であり、その位置でのペアポテンシャルの形状は図. 3.10(a) そのもののひょうたん型である。つまり、ペアポテンシャルは二つの円の中心をずらして重ね合わせたような形をしており、 $k_x$  方向に反転対称性 (二回回転対称性) を持つ。したがって、実空間での LDOS パターンに二回回転対称性が現れる。

もし、フェルミ面 II の LDOS 発散条件において  $\tilde{\Psi} < |\cos \theta|$  が必要ではない場合には、図. 3.11(b) は d 波的なパターンになる (図. 2.4 参照)。なぜならば、図. 3.10(b) の  $k_x-k_z$  平面には 4 つのノードが存在するからである。実際得られた LDOS のパターンは、ペアポテンシャルの三次元的異方性による  $\theta$  と  $\tilde{\Psi}$  の関係式 (??) があるために、d 波の LDOS の一部のみの形になっている。

LDOS の空間依存性を見るために、式 (3.141) を数値積分した結果を図. 3.12 に示す。図. 3.11 と図. 3.12 がコンシステントであることが見て取れる。 $\tilde{\Psi} \rightarrow 0$  の極限を考えると、ラインノードが消失するために LDOS パターンは等方的 s 波と同じパターンになる。ゆえに、図. 3.12 は singlet チャンネルと triplet チャンネルが混成した結果得られる LDOS パターンであると言える。

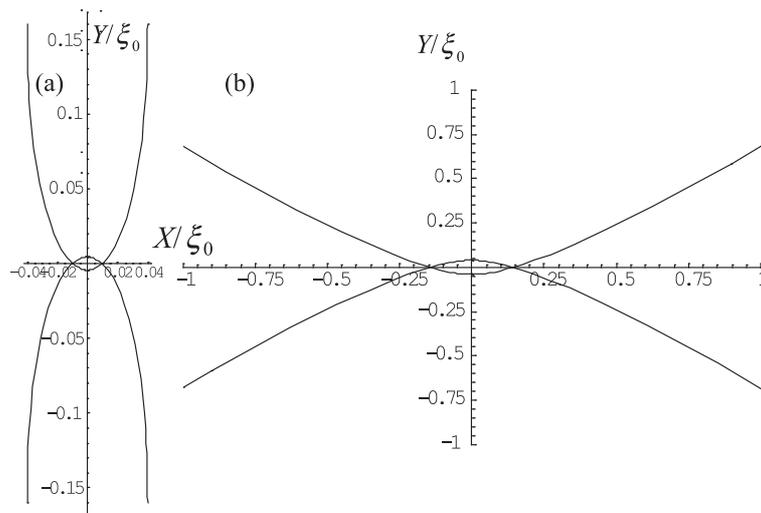


図 3.11:  $c$  軸に垂直な方向に磁場をかけたときの渦糸コア近傍における LDOS の発散線。(a) はフェルミ面 I からの寄与、(b) はフェルミ面 II からの寄与である。ここで、singlet 成分と triplet 成分の比  $\tilde{\Psi} = 0.5$  と置き、 $\epsilon/\Delta_\infty = 0.01$  とした。

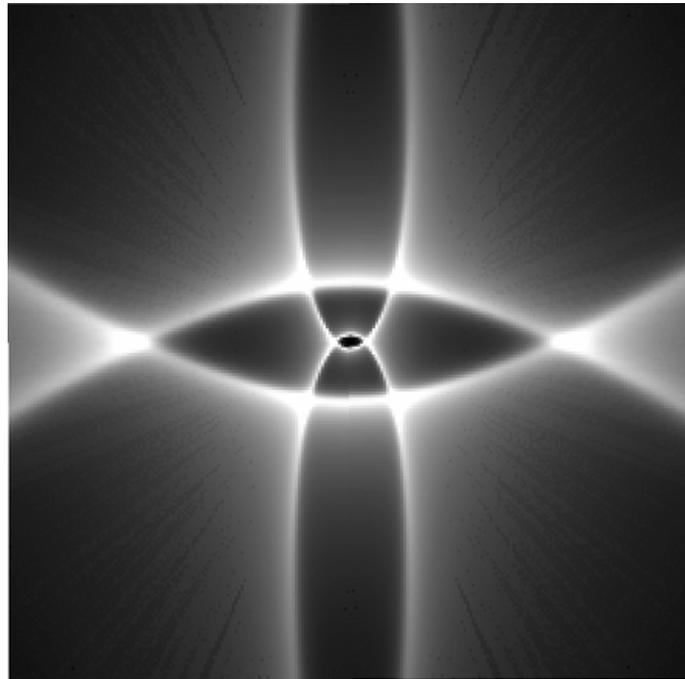


図 3.12:  $c$  軸に垂直な方向に磁場をかけたときの渦糸コア近傍における LDOS の空間分布。ここで、singlet 成分と triplet 成分の比  $\tilde{\Psi} = 0.5$  と置き、 $\epsilon/\Delta_\infty = 0.01$  とした。

### 3.5 対称性の同定

$c$  軸に垂直な方向に磁場をかけた場合の LDOS ( 図. 3.11、図. 3.12 ) から、singlet 成分と triplet 成分の比  $\tilde{\Psi}$  を同定する方法を考える。フェルミ面 I からの寄与の LDOS とフェルミ面 II からの寄与の LDOS では、フェルミ面 II からの寄与の LDOS の方が大きいので、その LDOS に着目する。この LDOS の渦糸コア近傍の楕円形の比  $r$  に着目する ( 図. 3.13 参照。 )。この比の値は、式 (3.154)、(3.155) における  $X$  切片の値  $X_0$  と  $Y$  切片の値  $Y_0$  との比

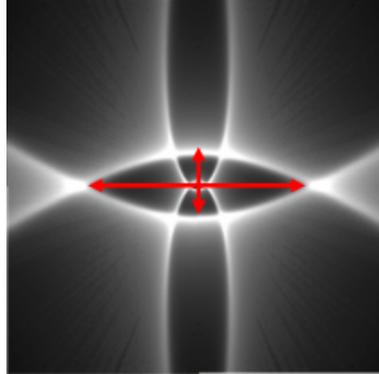


図 3.13: LDOS の楕円形の長軸と短軸の比。

であるから、容易に計算することができる。その結果、楕円形の比  $r = Y_0/X_0$  は

$$r = \frac{(-5\tilde{\Psi} + \sqrt{24 + \tilde{\Psi}^2})^3}{108(1 - \tilde{\Psi})^2(-\tilde{\Psi} + \sqrt{\tilde{\Psi}^2 + 24})\sqrt{1 - \left(\frac{\tilde{\Psi} + \sqrt{\tilde{\Psi}^2 + 24}}{6}\right)^2}}, \quad (3.156)$$

という  $\tilde{\epsilon}$  に依らない形に書ける。上式のプロットを図. 3.14 に示す。したがって、楕円率  $r$  がわかれば、singlet 成

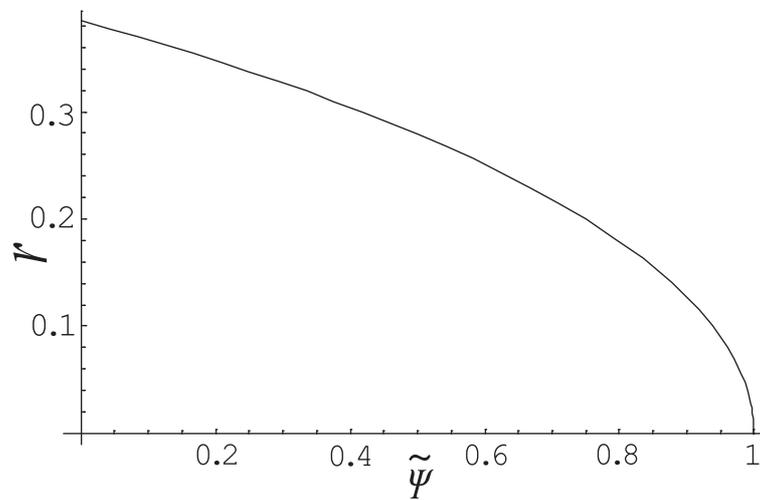


図 3.14: 渦糸コア近傍におけるフェルミ面 II の寄与による LDOS の楕円率  $r$  と、singlet 成分と triplet 成分の比  $\tilde{\Psi}$  との関係。

分と triplet 成分の比  $\tilde{\Psi}$  を得ることができる。また、ギャップノードの位置  $\theta_{\text{node}}$  も  $|\cos \theta_{\text{node}}| = \tilde{\Psi}$  から同定することができる。CePt<sub>3</sub>Si は正方晶であり、 $c$  軸と  $a$  軸  $b$  軸の長さが異なる。この影響が LDOS の形状に及ぼす影響を考えるために、フェルミ面を楕円的三次元フェルミ面にしても、得られる結果はほとんど変わらない。

### 3.6 まとめ

本章においては、我々は空間反転対称性のない超伝導体の渦糸コア近傍における局所電子状態密度を研究した。そして、局所電子状態密度の解析的表式を得ることができた。また、結果として得られる LDOS パターンは、スピン軌道相互作用でフェルミ面が二つに分裂したことにより、それぞれのギャップによる LDOS の重ね合わせで得られることを示した。 $c$  軸方向に磁場をかけた場合、LDOS は二つの同心円となる。これは Hayashi らの結果とコンシステントである<sup>46)</sup>。 $c$  軸に垂直な方向に磁場をかけた場合、LDOS の空間分布は図. 3.11 や図. 3.12 のようなパターンになった。フェルミ面 II による LDOS パターンは  $d$  波の一部分に似ているパターンとなった。また、異方的な LDOS パターンは singlet チャンネルと triplet チャンネルが混成した結果であることがわかった。そして、LDOS パターンにおける楕円形の長軸と短軸の比  $r$  を見ることによって、singlet 成分と triplet 成分の比を同定できることがわかった。なお、この  $r$  はエネルギー  $\tilde{\epsilon}$  に依らない。また、フェルミ面を三次元等方的な球から楕円形的形状にしたとしても、結果はほとんどかわらないことがわかった。今後の課題としては、バンド構造を考慮した現実的なフェルミ面を採用したときにどのように結果が異なるかを調べることである。

## 第4章 異方的フェルミ面を持った異方的s波超伝導： YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>Cの場合

### 4.1 はじめに

#### 4.1.1 YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C

1994年、ボロカーバイドと呼ばれるRNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>Cは、超伝導転移温度  $T_c \sim 15\text{K}$  が高いことが発見された<sup>47)</sup>。ここで、Rには希土類元素、つまり、Yやランタノイド(Lu、Dy、Ho、Er等)が入る(図. 4.1参照)。原子番号39番のYと、ランタノイドの一番右端のLu以外は、4f電子の存在により磁性があり超伝導転移と磁氣的転移が存在する物質が多い。本章では、YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>Cを取り上げる。YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>Cは、非磁性の物質であり、超伝導転移温度は

周 期 表  
(基底状態の中性原子の外殻電子配置)

原子およびイオンの電子配置を示す記号についてはすべての初歩的な原子物理学の教科書において述べられている。文字  $s, p, d, \dots$  は  $l$  を単位とする軌道角モーメント  $0, 1, 2, \dots$  をもっている電子を示す。文字の左側の数字は軌道の主量子数を示す。右肩上の数字はその軌道の電子数を示す。

H <sup>1</sup>																	He <sup>2</sup>				
1s																	1s <sup>2</sup>				
Li <sup>3</sup>	Be <sup>4</sup>															B <sup>5</sup>	C <sup>6</sup>	N <sup>7</sup>	O <sup>8</sup>	F <sup>9</sup>	Ne <sup>10</sup>
2s	2s <sup>2</sup>															2s <sup>2</sup> 2p	2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>
Na <sup>11</sup>	Mg <sup>12</sup>															Al <sup>13</sup>	Si <sup>14</sup>	P <sup>15</sup>	S <sup>16</sup>	Cl <sup>17</sup>	Ar <sup>18</sup>
3s	3s <sup>2</sup>															3s <sup>2</sup> 3p	3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>
K <sup>19</sup>	Ca <sup>20</sup>	Sc <sup>21</sup>	Ti <sup>22</sup>	V <sup>23</sup>	Cr <sup>24</sup>	Mn <sup>25</sup>	Fe <sup>26</sup>	Co <sup>27</sup>	Ni <sup>28</sup>	Cu <sup>29</sup>	Zn <sup>30</sup>	Ga <sup>31</sup>	Ge <sup>32</sup>	As <sup>33</sup>	Se <sup>34</sup>	Br <sup>35</sup>	Kr <sup>36</sup>				
4s	4s <sup>2</sup>	3d	3d <sup>2</sup>	3d <sup>3</sup>	3d <sup>4</sup>	3d <sup>5</sup>	3d <sup>6</sup>	3d <sup>7</sup>	3d <sup>8</sup>	3d <sup>10</sup>	3d <sup>10</sup>	4s <sup>2</sup> 4p	4s <sup>2</sup> 4p <sup>1</sup>	4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>				
Rb <sup>37</sup>	Sr <sup>38</sup>	Y <sup>39</sup>	Zr <sup>40</sup>	Nb <sup>41</sup>	Mo <sup>42</sup>	Tc <sup>43</sup>	Ru <sup>44</sup>	Rh <sup>45</sup>	Pd <sup>46</sup>	Ag <sup>47</sup>	Cd <sup>48</sup>	In <sup>49</sup>	Sn <sup>50</sup>	Sb <sup>51</sup>	Te <sup>52</sup>	I <sup>53</sup>	Xe <sup>54</sup>				
5s	5s <sup>2</sup>	4d	4d <sup>2</sup>	4d <sup>4</sup>	4d <sup>5</sup>	4d <sup>6</sup>	4d <sup>7</sup>	4d <sup>8</sup>	4d <sup>10</sup>	4d <sup>10</sup>	4d <sup>10</sup>	5s <sup>2</sup> 5p	5s <sup>2</sup> 5p <sup>1</sup>	5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>				
Cs <sup>55</sup>	Ba <sup>56</sup>	La <sup>57</sup>	Hf <sup>58</sup>	Ta <sup>59</sup>	W <sup>60</sup>	Re <sup>61</sup>	Os <sup>62</sup>	Ir <sup>63</sup>	Pt <sup>64</sup>	Au <sup>65</sup>	Hg <sup>66</sup>	Tl <sup>67</sup>	Pb <sup>68</sup>	Bi <sup>69</sup>	Po <sup>68</sup>	At <sup>65</sup>	Rn <sup>66</sup>				
6s	6s <sup>2</sup>	5d	5d <sup>2</sup>	5d <sup>3</sup>	5d <sup>4</sup>	5d <sup>5</sup>	5d <sup>6</sup>	5d <sup>8</sup>	5d <sup>9</sup>	5d <sup>10</sup>	5d <sup>10</sup>	6s <sup>2</sup> 6p	6s <sup>2</sup> 6p <sup>1</sup>	6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	6s <sup>2</sup> 6p <sup>3</sup>	6s <sup>2</sup> 6p <sup>4</sup>	6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup>				
Fr <sup>87</sup>	Ra <sup>88</sup>	Ac <sup>89</sup>																			
7s	7s <sup>2</sup>	6d																			
			Ce <sup>58</sup>	Pr <sup>59</sup>	Nd <sup>60</sup>	Pm <sup>61</sup>	Sm <sup>62</sup>	Eu <sup>63</sup>	Gd <sup>64</sup>	Tb <sup>65</sup>	Dy <sup>66</sup>	Ho <sup>67</sup>	Er <sup>68</sup>	Tm <sup>69</sup>	Yb <sup>70</sup>	Lu <sup>71</sup>					
			4f <sup>2</sup>	4f <sup>3</sup>	4f <sup>4</sup>	4f <sup>5</sup>	4f <sup>6</sup>	4f <sup>7</sup>	4f <sup>7</sup>	4f <sup>8</sup>	4f <sup>10</sup>	4f <sup>11</sup>	4f <sup>12</sup>	4f <sup>13</sup>	4f <sup>14</sup>	4f <sup>14</sup>					
			6s <sup>2</sup>	6s <sup>2</sup>	6s <sup>2</sup>	6s <sup>2</sup>	6s <sup>2</sup>														
			Th <sup>90</sup>	Pa <sup>91</sup>	U <sup>92</sup>	Np <sup>93</sup>	Pu <sup>94</sup>	Am <sup>95</sup>	Cm <sup>96</sup>	Bk <sup>97</sup>	Cf <sup>98</sup>	Es <sup>99</sup>	Fm <sup>100</sup>	Md <sup>101</sup>	No <sup>102</sup>	Lr <sup>103</sup>					
			6d <sup>2</sup>	5f <sup>2</sup>	5f <sup>3</sup>	5f <sup>5</sup>	5f <sup>6</sup>	5f <sup>7</sup>	5f <sup>7</sup>	6d	6d	6d	6d	6d	6d	6d					
			7s <sup>2</sup>	7s <sup>2</sup>	7s <sup>2</sup>	7s <sup>2</sup>	7s <sup>2</sup>														

図 4.1: 周期表<sup>48)</sup>。赤で囲んだ領域の元素がボロカーバイド超伝導体と呼ばれるRNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>CのRに該当する元素。

$T_c \sim 15.5\text{K}$  である。また、結晶は図. 4.2のような体心正方晶である。

1994年に発見されてからYNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>Cは盛んに研究されてきた。その結果、1990年代終わり頃までに研究に一段落がつき、YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>Cは異方的s波超伝導体であると言われるようになった<sup>50, 51, 52, 53, 54)</sup>。その後、2002年にMakiらがこの超伝導体にはポイントノードがあるのではないかと述べ<sup>25)</sup>、IzawaらがMakiらの予言を実験的に確認して以降、再び脚光を浴びるようになってきている。なお、2001年までに行われたボロカーバイド超伝導体に関する研究の総説がMullerらによって報告されている<sup>55)</sup>。

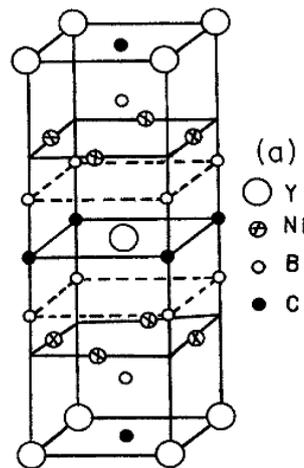


図 4.2: YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C の結晶構造<sup>49)</sup>。

#### 4.1.2 超伝導発現機構と対称性

ポロカーバイドに関する実験と理論は数多くあり<sup>55)</sup>、典型的な超伝導体なのか非従来型超伝導体なのかについて議論されてきた<sup>56, 57, 58, 59, 60, 61)</sup>。最近、比熱や熱伝導率の磁場方向依存性、point-contact tunneling、超音波吸収によって、YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C はペアポテンシャルにポイントノードを持つ異方的s波超伝導体であると示唆されており、Maki らが理論的に提案したs+g波超伝導を支持する実験であると言われている。また、電子間の引力の起源は電子格子相互作用ではないかと言われている<sup>56, 62)</sup>。

電子格子相互作用を引力の起源とするBCS理論による超伝導転移温度の上限はデバイ温度(数百K)の十パーセントほどと言われており<sup>63)</sup>、ポロカーバイドと呼ばれる物質群は、MgB<sub>2</sub> について超伝導転移温度が高い物質群であるといえる。また、RT<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C のRには希土類(Sc, Y, La, Th, Dy, Ho, Er, Tm, Lu) Tには金属(Ni, Ru, Pd, Pt) という組み合わせが可能であり<sup>1)</sup>、結晶構造がYNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C のような体心正方晶の形(図. 4.2)であれば、T<sub>c</sub> ~ 10K という転移温度を示し、元素を取り替えることで系統的に研究することができるので興味深い。

ノードを持つ異方的s波超伝導の原因として、Kontani は反強磁性ゆらぎと電子格子相互作用を考慮した二次元フェルミ面強結合理論を用いた理論<sup>64)</sup> を提案しているが、二次元等方的フェルミ面を仮定したこの理論で極めて異方的な三次元フェルミ面を持つYNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C のポイントノード形成メカニズムが説明できるかどうかは、わからない。

また、臨界磁場の温度依存性や比熱の温度依存性等の実験の結果から、YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C の物性は、MgB<sub>2</sub> のような2バンド超伝導体の性質ではないかというグループもいる<sup>65, 66, 67, 77, 76)</sup>。

#### 4.1.3 STM/STS 実験による局所電子状態密度分布と対称性の同定

2004年、Nishimori らによって渦糸コア近傍のSTM/STS測定が行われた<sup>27)</sup>(図. 4.3、図. 4.4)。第2章、第3章で論じたように、渦糸コア近傍の局所電子状態密度分布にはペアポテンシャルの異方性とフェルミ面の異方性が反映される。したがって、Nishimori らの実験結果を議論するためには、ペアポテンシャルとフェルミ面の両方の異方性を考えなければならない。YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C のフェルミ面の詳細については後述するが、三次元等方的フェルミ面からは程遠い極めて異方性の強いフェルミ面であることがわかっている。いままでYNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C に関する理論も実験も、計算の困難さもあり解析はほとんどが等方的フェルミ面を仮定して行われてきている。少なくとも、STM実験で得られる結果は異方的フェルミ面の効果を受けることが第2章においてわかっているため、STM像に対し等

<sup>1)</sup> これらで挙げたすべての組み合わせに超伝導相があるわけではない。

方的フェルミ面を仮定した解析を行ってもペアポテンシャルの異方性を調べることはできない。したがって、フェルミ面の異方性を容易に取り込める我々の理論を用いて STM 像を解析する意味は重要である。

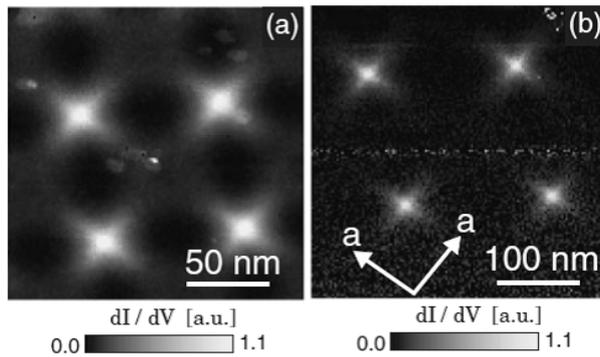


Fig. 2. Vortex lattice in  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  imaged by plotting  $N_s(E=0\text{ meV}, r)$  on gray scale at 0.46 K (a) in 0.30 T ( $180 \times 180\text{ nm}^2$ ) and (b) 0.07 T ( $360 \times 360\text{ nm}^2$ ). Arrows in (b) indicate the directions of the  $a$ -axis.

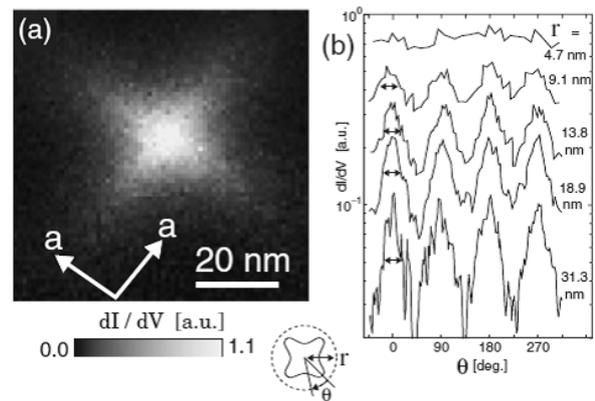


Fig. 3. (a) Vortex image focused on lower left of vortices in Fig. 2(b) at 0.46 K in 0.07 T ( $72 \times 72\text{ nm}^2$ ). (b) The angular dependence of  $N_s(0\text{ meV}, r, \theta)$  is shown. The angle was measured against the  $a$ -axis.

図 4.3: Nishimori らの STM による渦糸コアの測定<sup>27)</sup>

#### 4.1.4 バンド構造

$\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のフェルミ面は非常に強い異方性を持っている。したがって、本節ではバンド構造について議論する。

まず、 $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  と同様に非磁性なボロカーバイド超伝導体である  $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のバンド構造を図. 4.5、図. 4.6 に示す<sup>70)</sup>。図. 4.5 では、バンド計算により得られたフェルミ面のうち、もっとも大きいフェルミ面を示した。また、図. 4.6 は、フェルミ面の  $k_z = 0$  における中央断面を図示したものである。上が実験結果下がバンド計算結果によるフェルミ面である。特徴は、図. 4.6 の矢印のある位置におけるフェルミ面のネスティングの存在である。この物質では、図. 4.6 を見ればわかるように、実験で得られたフェルミ面とバンド計算で得られたフェルミ面がコンシステントになっており、図. 4.5 のフェルミ面が実験と大きく異なる可能性はないと考えられる。詳細は後述するが、2002 年当時においては、 $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$  と同程度に信頼できる  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のバンド計算によるフェルミ面の論文が存在していなかったため、Maki らは  $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のフェルミ面からポイントノードの位置を推定した。

$\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のバンド計算の中で、現在一番精度が良く実験的にも尤もらしいと考えられている計算は 2004 年に Yamauchi らによって行われた<sup>71)</sup>。そのバンド図を図. 4.7(b) に示す。このバンド構造は、ドハース・ファンアルフェン (dHvA) 効果による実験的に得られたバンド構造とよく一致している<sup>71)</sup>。また、そのフェルミ面を図. 4.8 に示す。バンド計算によると、超伝導状態に効いているのは 17th バンドである。したがって、17th バンドに着目する (図. 4.8(a))。

このフェルミ面にはいくつかの特徴がある。

1. 図. 4.7(b) の 点近傍において、状態密度が非常に大きい場所 (Van Hove-like) が見受けられる<sup>71)</sup>
2. フェルミ面が大きく分けて二つのフェルミ面からなっているといえる
3. フェルミ面にネスティングが存在している

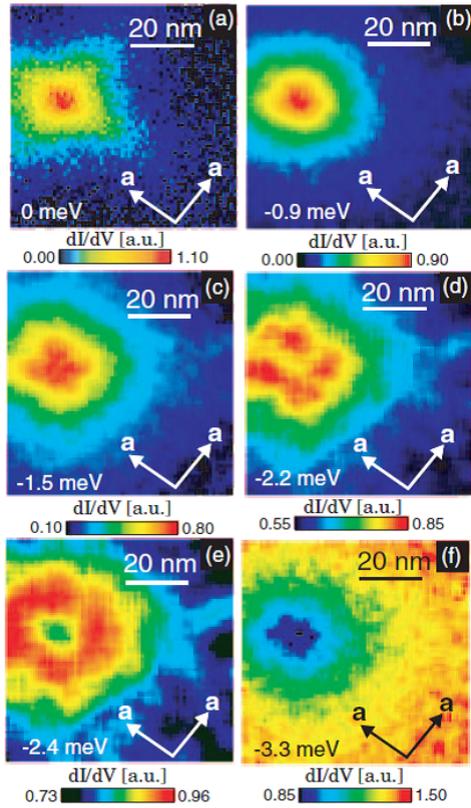


図 4.4: STM/STS 測定の実験結果<sup>27)</sup>。左：印加電圧を上げていったときの、渦糸コア近傍での  $dI/dV$  の分布の移り変わり。左上から右下に向かって印加電圧が上がっている。右：渦糸コアから  $\langle 110 \rangle$  方向に離れていった各点における  $dI/dV$  の変化。

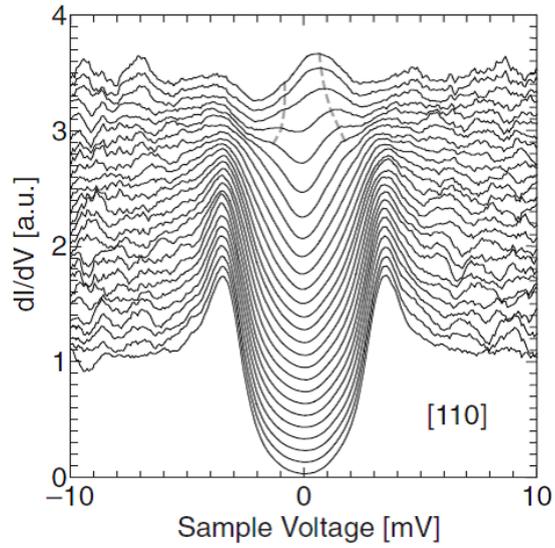


Fig. 6. The spectral evolution along  $\langle 110 \rangle$  from the vortex center (top) to the middle point of the nearest-neighbor vortices (bottom) with the spacing of 1.6 nm at 0.46 K in 0.3 T is shown. The spectra are offset by 0.1 for clarity. We calculated  $N_s(E, \mathbf{r})$  by averaging the  $I$ - $V$  characteristics at  $3 \times 3$  points (about  $2 \times 2 \text{ nm}^2$ ) around the reference point and differentiating them numerically. The dotted lines are guides to the eye.

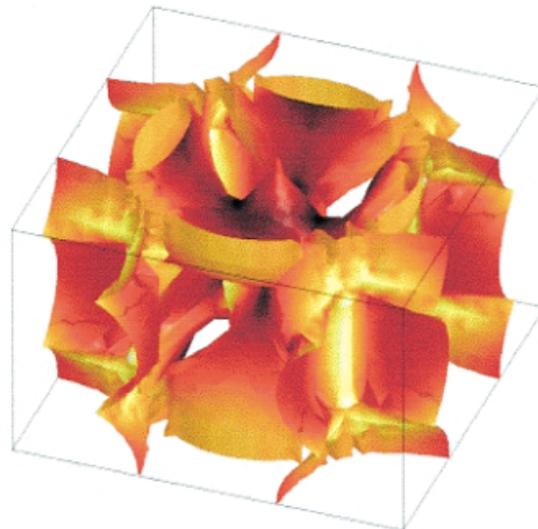


図 4.5: Dugdale らによる  $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のバンド計算で得られた最も大きなフェルミ面<sup>70)</sup>。

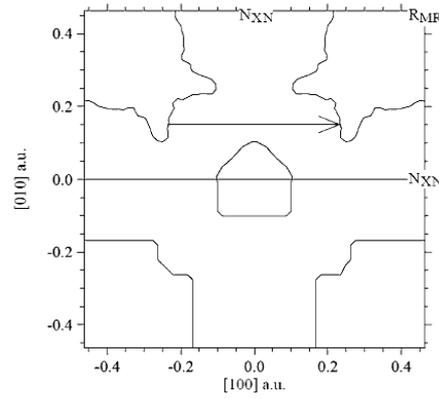


FIG. 4. The experimental (top) and calculated (bottom) FS topology of  $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ . The calculation is of the FS in the third band in the (001) plane through the  $\Gamma$  point. The arrow indicates the nesting feature.

図 4.6: Dugdale らによる  $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のバンド構造<sup>70)</sup>

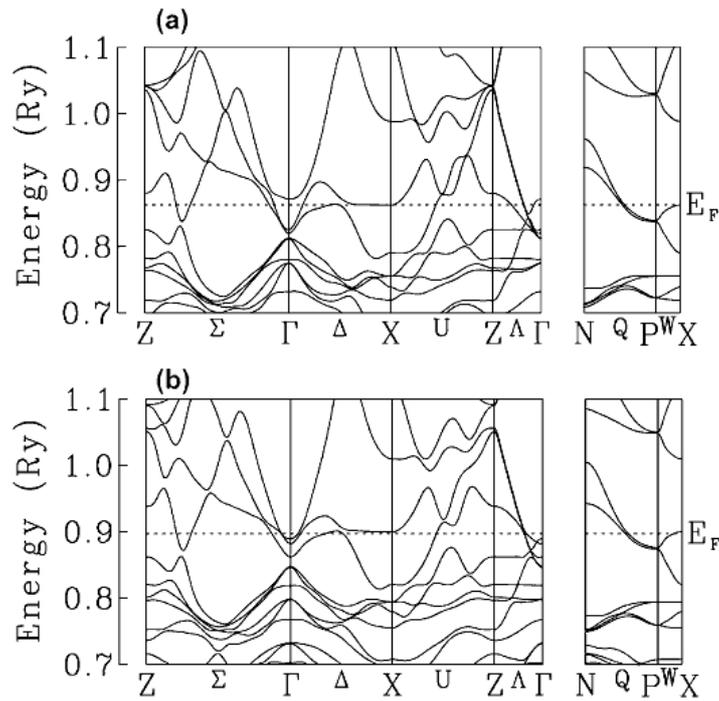


Fig. 1. Band structures of  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ : (a) the result based on the LDA calculation, (b) the result obtained by shifting upward Y-d and Ni-d levels by 0.11Ry and 0.05Ry (see text).

図 4.7: Yamauchi らによるバンド計算<sup>71)</sup>。(a) が LDA による計算であり、(b) はより精度がよく dHvA 実験とコンシステントな計算である。

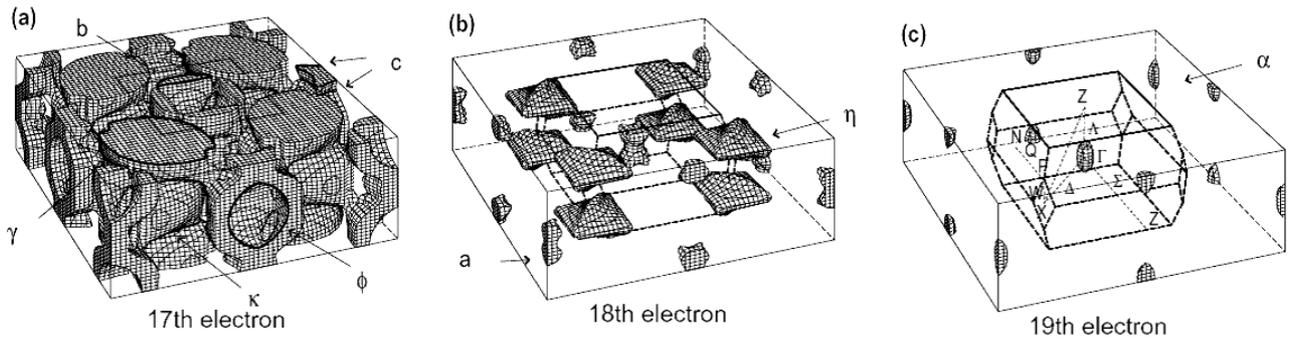


図 4.8: バンド計算によるフェルミ面<sup>71)</sup>。

である。

2. と 3. に関しては、図. 4.8 を見ただけではわかりにくいので、共同研究者である山内氏からいただいたフェルミ面の断面図を図. 4.9 に示す<sup>72)</sup>。 $k_z = 0$  の断面に着目する。これは、Dugdale らのバンド計算と良く似ている<sup>70)</sup>。体心正方晶のブリリアンゾーン境界を考慮すると、図.4.9 の  $k_z = 0$  の左下の四角は、 $k_z = 0.5$  の右上の丸と接続することがわかる (図.4.10)。

2. に関しては、図. 4.10 と図. 4.8 を眺めるとよく理解することができる。つまり、断面図左下と、断面図中央に二つの大きなフェルミ面があるように見える。これらをそれぞれフェルミ面 A、B と呼ぶことにする。フェルミ面 A は中身の詰まった砂時計型に近く、フェルミ面 B はより複雑な形状をしていてチューリップ型に近い。

3. に関してであるが、図. 4.9 の  $k_z = 0$  の断面に着目する。これは、図. 4.6 の Dugdale らのバンド計算によるフェルミ面断面と良く似ている<sup>70)</sup>。ネスティングが起きている場所も同じである。

1. に関しては、図. 4.7(b) と図. 4.9 を比べることで、Van Hove like な特異性は図.4.9 で言うと  $k_z = 0$  でのフェルミ面 B の星型突起頂上にあることがわかる。

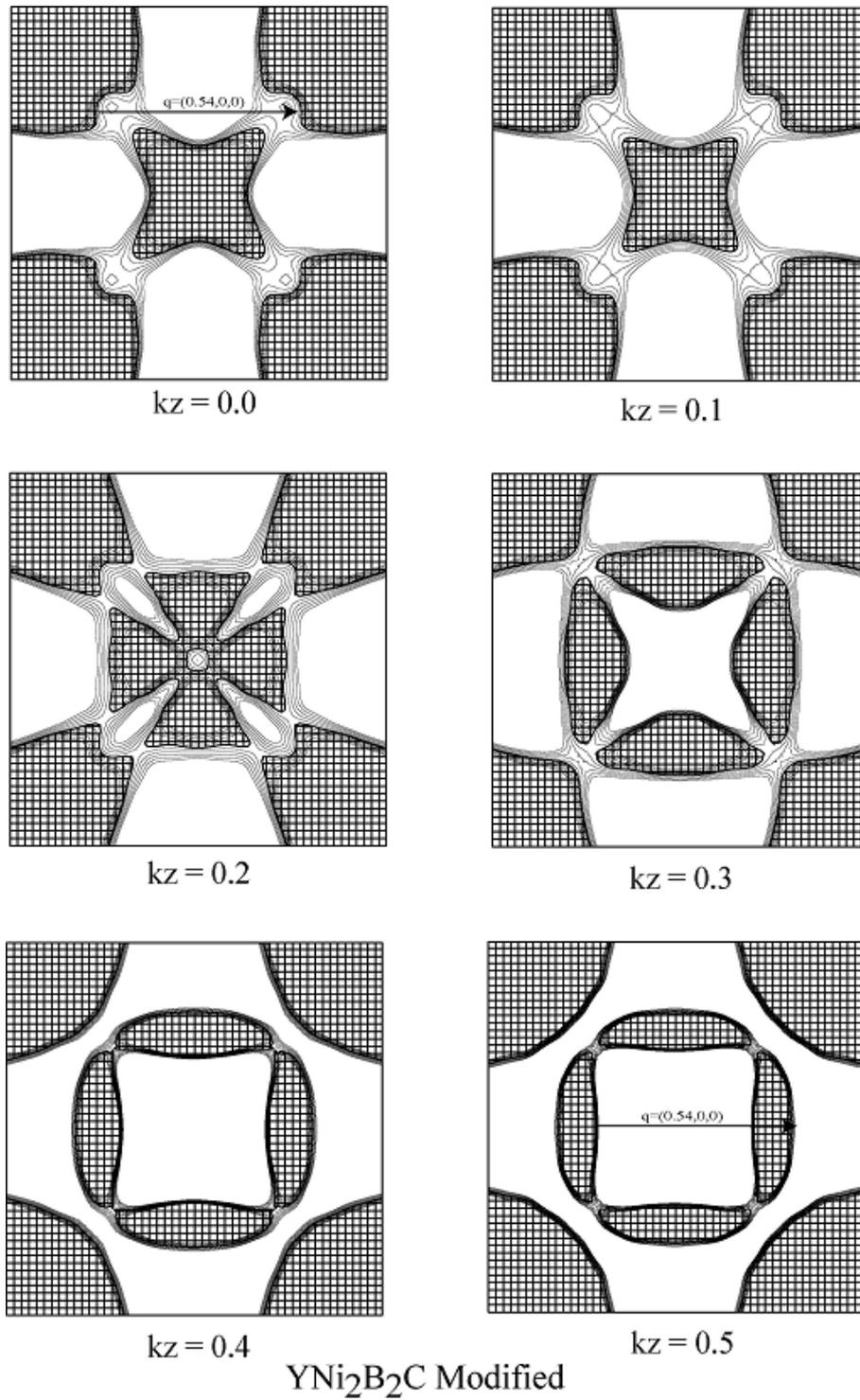


図 4.9: フェルミ面の断面<sup>71, 72)</sup>。

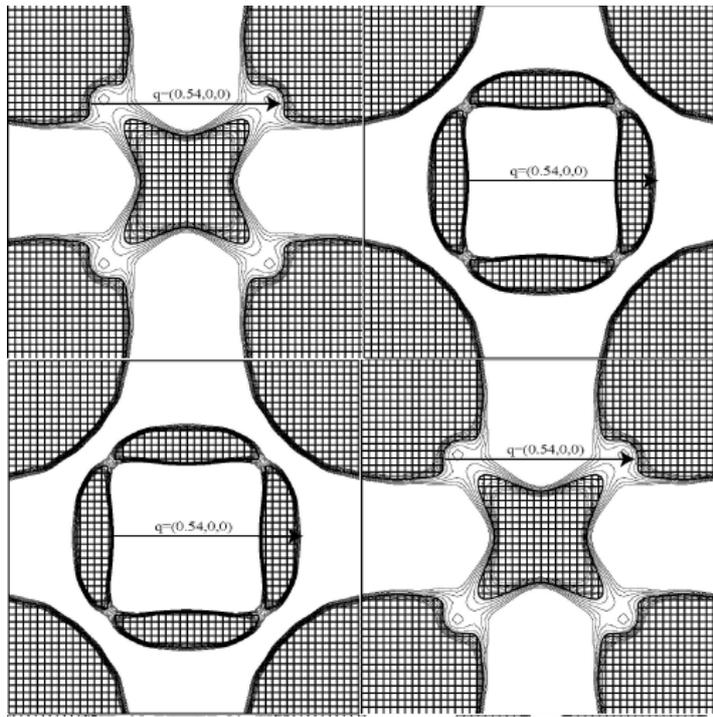


図 4.10: 断面図を張り合わせたもの。

#### 4.1.5 ネスティングベクトルに関連する実験

ネスティングベクトルに関連する実験はいくつかある。Kohara らの  $\text{B}^{11}$  の NMR の緩和率の測定によると<sup>73)</sup>、高温領域から転移温度近傍へ向かうにつれて  $T_1^{-1}$  があがっていくことから (BCS 理論では常伝導状態にこのような異常は見られないことから) 反強磁性揺らぎが存在しているのではないかとされている (図.4.11)。Kawano らの Inelastic neutron scattering の実験によると<sup>74)</sup>、ある  $Q(0.55, 0.8)$  ベクトルにおいて、横軸をエネルギー-縦軸を強度としたときギャップのエネルギーに相当する箇所にピークがある。このピーク構造が生じる特定の  $Q$  ベクトルは運動量空間におけるネスティングベクトルの位置と一致し、ネスティングベクトルが超伝導現象に何らかの寄与をしていることを示唆している (図.4.12)。

しかしながら、Kohara らと同様な実験結果を得たが、反強磁性揺らぎは大きくないという Suh らの研究もある<sup>75)</sup>。これは、不純物の効果まで入れて考えれば反強磁性揺らぎを仮定しなくても実験結果を説明できる、とのことである。

#### 4.1.6 本章の目的

このように、 $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  はその超伝導転移温度の高さ、ペアポテンシャルの異方性、フェルミ面の強い三次元的異方性、反強磁性揺らぎの存在、などから、BCS 的な電子格子相互作用でありながら多くの理論家実験家の興味を引いてきた。近年、ペアポテンシャルの構造は、後述する比熱の磁場方向依存性や超音波吸収等の実験結果により、Maki らの提唱した s+g 波超伝導モデルではないかと言われていたが、最近行われた比熱の温度依存性の実験<sup>76)</sup> や Point-contact spectroscopy の実験<sup>77)</sup> では、two-band モデルが定性的に一致し s+g 波モデルは一致しないと報告している。したがって、どのようなペアポテンシャルが実現しているかについては、まだ統一的な見解が得られていないと言える。また、STM/STS 実験により渦糸コア近傍の局所電子状態密度分布が得られている数少ない物質のひとつであり、第2章、第3章で我々が用いた理論との比較によってペアポテンシャルの対称性を調べることができる物質である。そこで、我々は第一原理計算によるフェルミ面を用いて、渦糸近傍の局所電子状

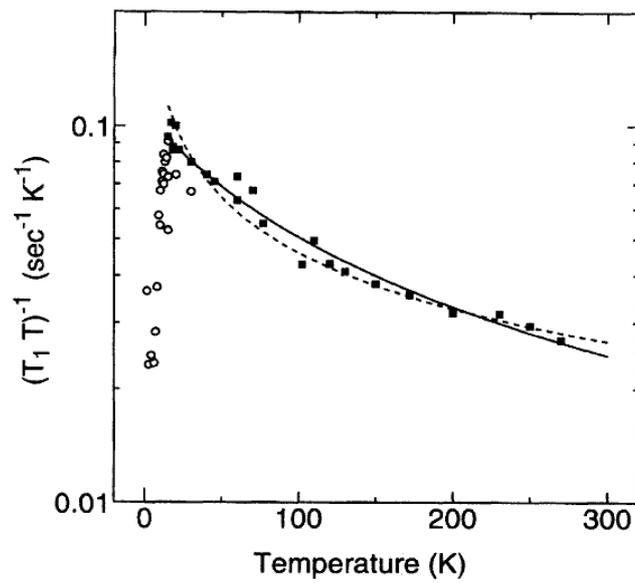


FIG. 3. Analysis of the temperature dependence of  $(T_1T)^{-1}$  for  $^{11}\text{B}$ . Solid squares and open circles are the measured values of relaxation in the normal and superconducting states, respectively. The solid and dotted lines show the calculated values by SCR theory, which correspond to  $(T_1T)^{-1}=9.86/(T+98.1)$  and  $(T_1T)^{-1}=0.465/(T+0.0273)^{1/2}$  for 2D AF and 3D AF, respectively (see text).

図 4.11: Kohara らによる  $\text{B}^{11}$  の NMR による緩和率<sup>73)</sup>。

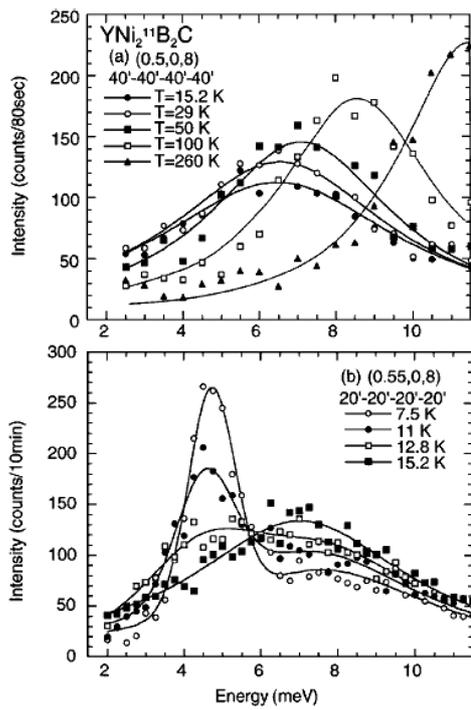


FIG. 1. Temperature dependence of phonon profiles. Upper panel:  $T > T_c$  and  $Q = (0.5, 0, 8)$ . Lower panel:  $T \leq T_c$  and  $Q = (0.55, 0, 8)$ .

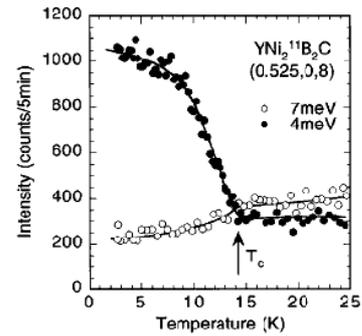


FIG. 2. Temperature dependence of inelastic scattering intensity at  $(0.525, 0, 8)$ . Filled and open symbols indicate the intensity at  $E = 4.0$  and  $7.0$  meV, respectively.

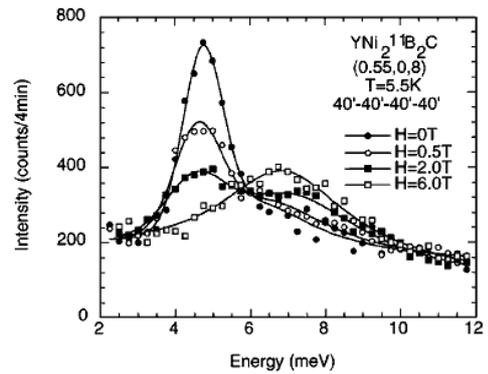


FIG. 3. Field dependence of the profiles measured at  $Q = (0.55, 0, 8)$ . Solid lines are guides for the eye.

図 4.12: Kawano らによる Inelastic neutron scattering の実験<sup>74)</sup>。

状態密度を計算し、どのようなペアポテンシャルが実現しているか実験と比較して推定する。そのとき、ポイントノードの位置はどこにあるのか、そしてなぜそこにポイントノードが存在するのかについての議論を行う。

本章は以下のような構成である。§4.2 では、現在まで行われている研究結果を概観し、ポイントノードの位置に関して現在どのような理解にあるのかということについて述べる。§4.3 では、これまでの研究において見逃されている点を指摘し、注意しなければならない事柄について述べる。§4.4 と §4.5 では、共同研究者の山内邦彦氏からいただいたバンド計算によるフェルミ面を用いて、渦糸コア近傍の局所電子状態密度分布と状態密度の磁場方向依存性を計算した結果をそれぞれ示す。§4.5 で得られた結果をまとめる。この節において、ノードの位置がどこにある場合が一番実験結果を説明するのかについて述べる。

## 4.2 ノードの位置

以後の節において、特に断りがなければノードの位置は  $a$ - $b$  面内とし、 $a$  軸方向を  $0[\text{rad}]$  とする。また、実験との対応をわかりやすくするために極座標表示として  $(\theta, \chi)$  ではなく  $(\phi, \theta)$  を用いる。

### 4.2.1 ノードの位置に関する理論

$\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  がポイントノードであるのではないかと述べたのは、Maki らである<sup>25)</sup>。この論文で、Maki らはバンド構造<sup>70)</sup> から、ネスティングベクトルがある場所においてギャップが小さくなると考え、ポイントノードとして

$$\Delta(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\Delta(1 + \sin^4\theta \cos(4\phi)) \quad (4.1)$$

を仮定した。ノードの位置は、 $\pi/4$  方向である (図.4.6)。このとき、状態密度は図.4.13 のようになる。また、彼らは、Field-Angle-Dependent Heat Capacity を測定すれば、運動量空間におけるノードが存在する方向をそのカusp構造の位置によって特定できる、と提案した (図.4.14)。

Maki らはネスティングが生じている場所においては磁気的な秩序が立ちやすく、その結果超伝導秩序パラメータの形成が局所的に抑制され、その位置でノードが生じるというシナリオを考えた。

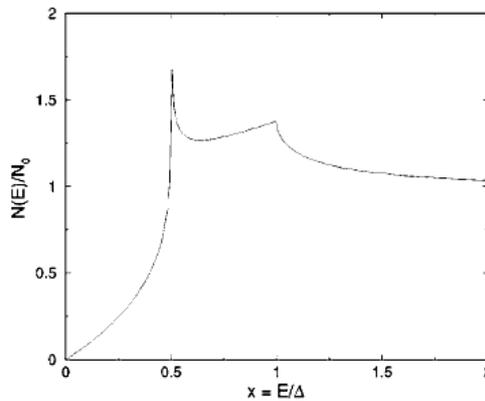


FIG. 2. Quasiparticle density of states. Logarithmic singularity occurs at  $E = \Delta/2$  due to the saddle points at  $\vartheta = 0, \pi$ . The cusp at  $E = \Delta$  is due to the gap maxima at  $(\vartheta, \phi) = (\pi/2, 0)$ ,  $(\pi/2, \pm\pi/2)$  and  $(\pi/2, \pi)$ .

図 4.13: Maki らのペアポテンシャルによる状態密度<sup>25)</sup>

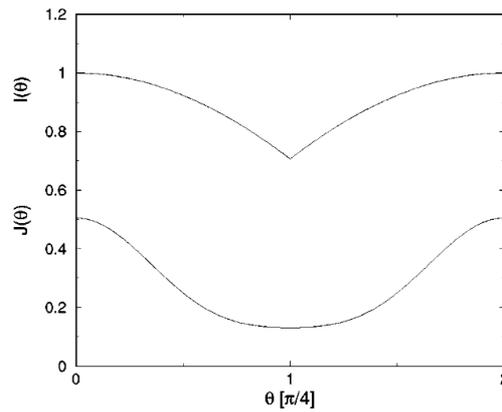


FIG. 3. Angular dependence of specific heat  $C_s \sim I(\theta)$  and excess Dingle temperature  $\sim J(\theta)$  in an external field in the  $a$ - $b$  plane.  $\theta$  is the angle between field direction and  $a$  axis.

図 4.14: Maki らによる Field-Angle-Dependent Heat Capacity の理論予想<sup>25)</sup>。

#### 4.2.2 ノードの位置に関する実験

##### 最初の実験

最初に実験的にこの物質がポイントノードであると示唆したのは、Izawa らの熱伝導率の実験である<sup>26)</sup>。熱伝導率は、比熱と同様の磁場方向依存性を持つ。ここで Izawa らは Maki らの理論予想 (図.4.14) と実験結果 (図.4.15) を比較し、ペアポテンシャルは Maki らの提案した位置 ( $\pi/4$  方向) のノードを持つのではなく、

$$\Delta(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\Delta(1 - \sin^4 \theta \cos(4\phi)) \quad (4.2)$$

というノードを 0 方向に持つペアポテンシャルが妥当ではないか、という結論を下した。

##### ポイントノードを示唆する実験

Maki らが YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C がポイントノードであるのではないかと述べたあとから、関連する実験：

1. Izawa らの熱伝導率の測定<sup>26)</sup>。
2. Park らの Field-Angle-Dependent Heat Capacity の測定<sup>78)</sup>。
3. Watanabe らの Ultrasonic Attenuation の測定<sup>79)</sup>。
4. Nishimori らの STM による渦糸コアの測定<sup>27)</sup>。

がいろいろ行われた。

1.2. に関しては、Volovik による Doppler Shift 法<sup>80)</sup> による解析法を用いて、熱伝導率のカスプの位置からノード方向を決定した、という論文である。3. に関しては、Rodriguez による the variation of the distribution of Bogoliubov quasiparticles の方法<sup>81)</sup> を用いてノードの位置と吸収係数の比  $\alpha_n/\alpha_s$  の関係を調べて、ノード方向を特定したという論文である。それぞれの実験結果を図に示す (図.4.15、図.4.16、図.4.17、図.4.3、図.4.4)。

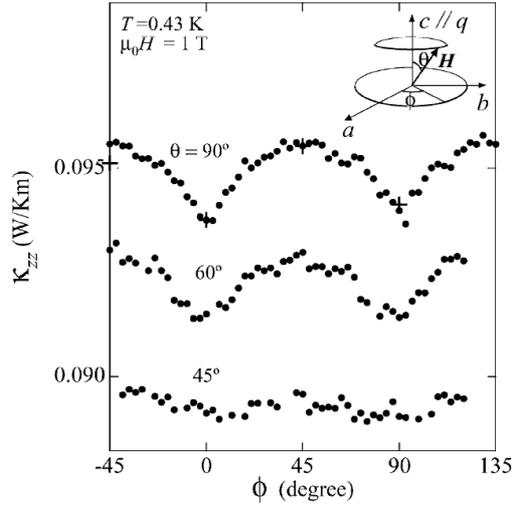


FIG. 2. Angular variation of  $\kappa_{zz}$  at  $H = 1$  T and  $T = 0.43$  K ( $q \parallel c$ ).  $\kappa_{zz}$  are measured by rotating  $\mathbf{H} = H(\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$  conically as a function of  $\phi$  at fixed  $\theta = 90^\circ, 60^\circ,$  and  $45^\circ$  (see the inset). The crosses represent the data obtained under the field cooling condition at each angle.

図 4.15: Izawa らの熱伝導率の測定<sup>26)</sup>

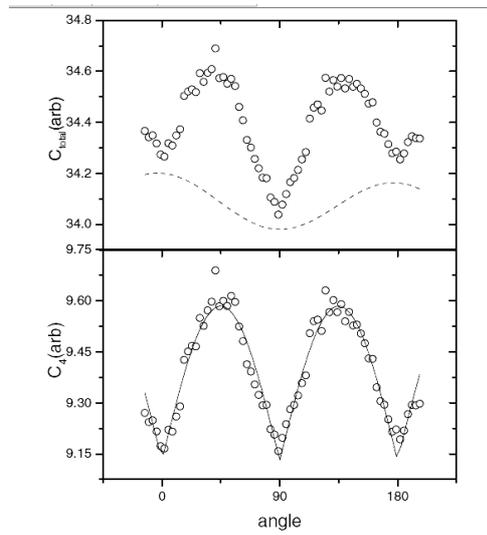


FIG. 2. Field directional dependence of the heat capacity at 2 K in 1 T. The field angle  $\alpha$  is measured with respect to the  $a$  axis. The top panel shows the total heat capacity (open circles) and the twofold component,  $C_2(\alpha)$ , relative to the baseline of 34.1 (dashed line). The bottom panel shows the same data after subtracting the background,  $C_4(\alpha) = C_{\text{total}}(\alpha) - C_0 - C_2(\alpha)$ . The solid line describes a fit with a cusped function,  $C_4(\alpha) = c_4(1 + \Gamma|\sin 2\alpha|)$  with  $\Gamma = 0.05$ .

図 4.16: Park らの Field-Angle-Dependent Heat Capacity の測定<sup>78)</sup>

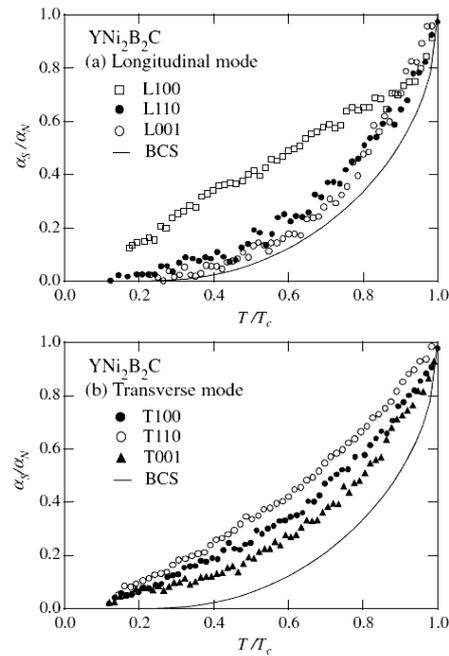


FIG. 4. Ultrasonic attenuation divided by normal state attenuation  $\alpha_S/\alpha_N$  as a function of reduced temperature  $T/T_c$  for (a) longitudinal modes and (b) transverse modes. The solid lines represent  $\alpha_S/\alpha_N$  for the BCS model.

図 4.17: Watanabe らの Ultrasonic Attenuation の測定 <sup>79)</sup>

### 4.2.3 実験の解釈

1,2 については、先ほども述べたように Doppler Shift 法を実験の解析に用いている。1 では  $a$ - $b$  平面内のフェルミ速度と  $c$  方向のフェルミ速度が異なるフェルミ面を仮定して解析を行っており、2 では  $k_z$  方向に大きさが変動するような円柱型フェルミ面を仮定して解析を行っている。その結果、彼らは、熱伝導率、比熱ともにカスプの位置にノードがある、つまり 0 度方向にノードがあることを示唆していると報告した (図.4.15、図.4.16)。3. では 0 度方向に特徴的な吸収パターンが見取れる (図.4.17)。4. は、零エネルギーのときの LDOS パターンの十字の先の伸びる方向 (図.4.3) から、ノードが 0 度方向であると彼らは解釈した。

つまり、これらの実験結果はすべて、この物質のノードは 0 度方向である、と示唆しているように思える。

以上が、YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C のノードについて現在知られていることのまとめである。

## 4.3 これまでの研究において注意しなければならないこと

### 4.3.1 理論予想との比較とノードの位置の根拠について

前節で述べたように、Maki らは  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のバンド構造からノードの位置を予測した。そのときのノードの位置は  $\pi/4$  方向である。したがって、ノード方向を同定する実験結果によるノードの位置 (0 度方向) とは異なる。つまり、実験の解析によって得られたノードの方向には、理論的根拠は何もないということがわかる。このときに用いられた解析は、円筒形フェルミ面を用いており、比較的等方的な単純なフェルミ面を仮定している。そこで我々は、 $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  が極めて異方的なフェルミ面を持つということに着目して、実験結果を慎重に解析することを試みた。

### 4.3.2 実験の解析方法について

さて、 $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  は図. 4.8 に示したように非常に異方的なフェルミ面を持つことがわかっている。そこで、異方的なフェルミ面において比熱と熱伝導率等の実験の解析を行う際、何に注意しなければならないかについて述べる。

Volovik による Doppler Shift 法は、比熱や熱伝導率の実験の解析を行う際に用いられる手法である<sup>80)</sup>。この方法では、準粒子の励起エネルギーのエネルギーシフトは  $v_F \cdot v_s$  に比例するとしている。Doppler Shift によるエネルギーシフトは  $v_s$  によっているので、磁場の方向に依存する。また、絶対零度において準粒子が励起されるのはギャップノードの位置のみである。つまり、準粒子励起の状態密度は磁場の方向に依存している<sup>82)</sup> (図.4.18 に物理的描像を示す)。ここで重要なのは、ノードの位置でのフェルミ速度が磁場の方向と一致した時にそのノードからの状態密度の寄与がなくなるということである。状態密度が磁場の方向に依存しているので、ノードの位置を磁場の方向を代えることで探すことができるのである。通常円筒形や球形のフェルミ面においては、フェルミ速度の方向は波数ベクトルの方向であり、ノードの位置を特定できる。しかしながら、一般的に異方的なフェルミ面においては、Doppler Shift 法でわかることはノードの位置でのフェルミ速度の方向である。つまり、実験で得られた「ノードの方向」とは、「ノードの位置におけるフェルミ速度の方向」である、ということがわかる。

同様に、超音波吸収の実験での解析方法も、Rodriguez の論文を見ると<sup>81)</sup> 重要なのは  $v_F \cdot v_s$  であり、波数ベクトルではなくてフェルミ速度ベクトルである。

つまり、実験結果は、ノードの方向が 0 度なのではなくノードの位置でのフェルミ速度の方向が 0 度であることを示唆しているのである。ここで、Maki らの理論について考える。ネスティングベクトルは図.4.9 を見るとわかるように  $\pi/4$  方向にある。この位置でのフェルミ速度の方向は 0 度方向である。つまり、Maki らのネスティングシナリオは比熱、熱伝導率、超音波吸収の実験結果と矛盾しない。

では、STM 実験の結果はどのように解釈すればよいのだろうか。

### 4.3.3 STM の実験結果

Nishimori らは STM によって渦糸コアまわりの状態密度分布を得た<sup>27)</sup>。このとき、LDOS は四回対称の十字形が得られ、彼らは十字の伸びる方向からノードの方向が 0 度方向であると結論付けた。また、エネルギーをあげていくと  $\pi/4$  方向に四つのピークが観測された (図.4.4 左)。そして、渦糸中心付近での DOS を見ると、particle-hole symmetry の破れが観測された (図.4.4 右)。また、無磁場の DOS の結果 (図.4.19) から<sup>83)</sup>、Maki らの DOS にある (図.4.13)  $\epsilon/\Delta = 0.5$  においての特異性が実験においては見られないことがわかる。

しかしながら、前節で見たように、その他の実験結果によるノードの方向の結論が異方的フェルミ面を仮定することで 0 度ではなくなったことと同様に、STM 実験の結果も単純な解析ではノード方向の特定は難しいのではないかと考えることができる。

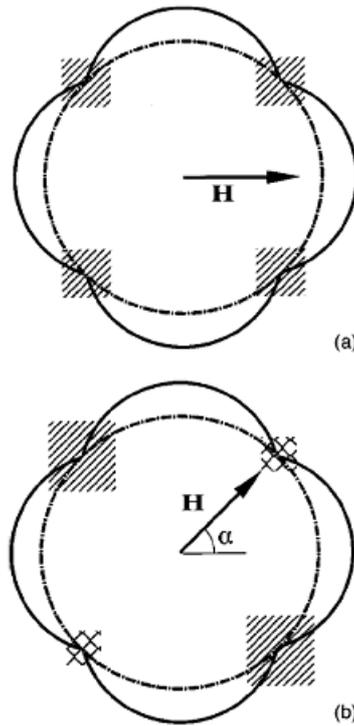


FIG. 2. The regions contributing to the density of states for the antinodal (a), and nodal (b) orientation of the magnetic field.

図 4.18: d 波の場合の状態密度の磁場方向依存性<sup>82)</sup>。磁場の方向とあるノードの位置でのフェルミ速度の方向が一致したとき、そのノードからの状態密度の寄与が無くなる。

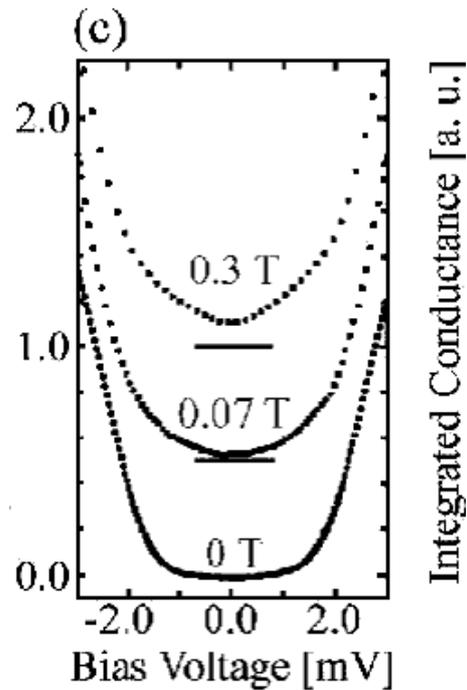


図 4.19: DOS の磁場依存性<sup>83)</sup>。無磁場における DOS は Maki らの DOS (図.4.13) とは異なることがわかる。

## 4.4 異方的フェルミ面での渦糸コア近傍での局所電子状態密度

我々は、共同研究者の山内氏から  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のバンド計算によるエネルギー分散のデータの提供を受け、異方的フェルミ面を考慮した渦糸コア近傍での局所電子状態密度分布 (LDOS) を理論的に計算した。

### 4.4.1 LDOS で何がわかるか

第 2 章の理論の極座標を  $(\theta, \chi) \rightarrow (\phi, \theta)$  とした場合の等方的三次元フェルミ面をもつ系での渦糸近傍での局所電子状態密度は

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\nu(0)v_F}{4\xi_0} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\lambda \delta e^{-2\lambda F(x)}}{2\pi (\epsilon - E_{3D})^2 + \delta^2} \quad (4.3)$$

$$= \frac{\nu(0)v_F}{8\xi_0} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \lambda \delta (\epsilon - E_{3D}) e^{-2\lambda F(x)} \quad (4.4)$$

$$E_{3D}(\phi, \theta) \sim \frac{y}{\xi_0 \sin \theta} \Delta_\infty \lambda(\phi, \theta)^2 \quad (4.5)$$

$$\lambda(\phi, \theta) = \sqrt{\frac{1}{2} \text{tr} \hat{\Delta}(\phi, \theta) \hat{\Delta}^\dagger(\phi, \theta)} \quad (4.6)$$

である。このとき、あるフェルミ速度を持つ準粒子の渦糸近傍でのインパクトパラメータを  $y$  とすると、Andreev 束縛状態におけるある準粒子のインパクトパラメータは

$$y = \frac{\epsilon}{|\Delta(\phi, \theta)|^2} \quad (4.7)$$

を満たさなければならない<sup>2</sup>。異方的なフェルミ面を持つ系においても同様な議論をすることができて

$$y = \frac{|v_{\text{FXY}}(\phi, \theta)|}{|v_{\text{F0}}|} \frac{\epsilon}{|\Delta(\phi, \theta)|^2} \quad (4.8)$$

である。ここで、 $v_{\text{FXY}}(\phi, \theta)$  は磁場に垂直な平面に射影されたフェルミ速度、 $v_{\text{F0}}$  はフェルミ面上でのある位置におけるフェルミ速度である。

この結果から、エネルギーを固定したとき、あるフェルミ面上の準粒子の束縛状態の位置は、その準粒子が感じるギャップの大きさが大きいほど、あるいは、フェルミ速度が小さいほど渦糸コアに近くなることがわかる。言い換えれば、渦糸コア近傍に見える状態密度分布はすべてギャップが大きいフェルミ速度が小さい準粒子の寄与によるものである、ということであり、LDOS を観測してわかるのはフェルミ面上でのノードの情報ではなくアンチノードの情報であるということである。

### 4.4.2 異方的フェルミ面とペアポテンシャル

共同研究者山内邦彦氏が計算した<sup>71)</sup> バンド分散を異方的フェルミ面として採用する。つまり、図. 4.7 の 17th バンドによるフェルミ面を仮定する。このようなフェルミ面を仮定したうえで、どのようなペアポテンシャルが実験的に最も妥当なのかを議論する。そこで、さまざまなペアポテンシャルの場合における LDOS を計算して、Nishimori らの STM 実験結果<sup>27)</sup> (図. 4.3、図. 4.4) と比較することにする。前節の結果から、ネスティングベクトルのある位置にノードが存在しうると考え、以下のようなペアポテンシャル

1. 等方的 s 波ペアポテンシャル
2. フェルミ面 A のネスティングベクトルの位置にのみノードが存在するペアポテンシャル
3. フェルミ面 B のネスティングベクトルの位置にのみノードが存在するペアポテンシャル

<sup>2</sup>singlet か unitary な triplet 超伝導体では  $\lambda = |\Delta|$  となることを用いた。また、 $y$  や  $\epsilon$  はそれぞれ  $\xi_0$ 、 $\Delta_\infty$  で規格化されてあるとする。

4. フェルミ面 A とフェルミ面 B のネスティングベクトルの位置にノードが存在するペアポテンシャル
5. フェルミ面 A とフェルミ面 B のネスティングベクトルの位置にノード、フェルミ面 A の特定箇所ギャップの極値を作ったペアポテンシャル
6. フェルミ面 A のネスティングベクトルの位置にノード、特定箇所ギャップの極値を作ったペアポテンシャル。

を考えた。

以後の計算結果のパラメータは、特に断りがない限り  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.3$ 、smearing factor  $\delta/\Delta_\infty = 0.1$  である。ここで、コヒーレンス長と平均自由行程の比がこの物質の場合約 1:10 であるため<sup>27)</sup> このような値の smearing factor とした。なお、以下に述べる計算結果はすべて、ポイントノード近傍のギャップの運動量空間依存性はライトコーン型  $\Delta(\phi, \theta) \propto \phi + \theta$  を仮定している。また、運動量空間においてギャップが回復する運動量幅を変化させても以下に示す計算結果は定性的に変わらない。得られた計算結果と比較すべき STM 実験結果 (図. 4.4) を、図.4.20 に再掲した。

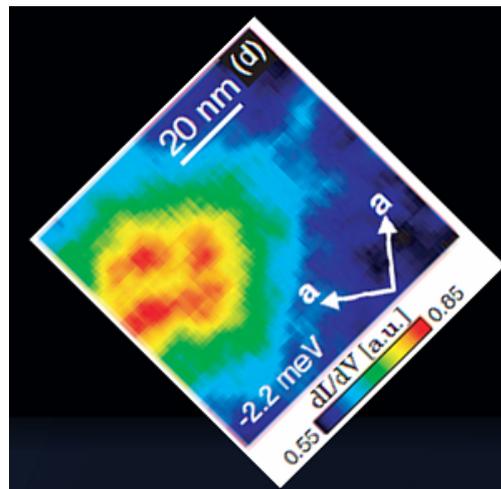


図 4.20: Nishimori らの STM 実験結果<sup>27)</sup>。計算と比較しやすいよう画像を回転させてある。

#### 4.4.3 それぞれのケースの計算結果

case 1. 等方的 s 波ペアポテンシャルの場合の計算結果を図.4.21 に示す。状態密度のピークは円状に広がっており、STM 実験とは一致しない。

case 2. フェルミ面 A のネスティングベクトルの位置にのみノードが存在するペアポテンシャルでの計算結果を図.4.22 に示す。a 軸方向に四点状態密度のピークが見られ、そのピークは a 軸に平行な辺をもつ長方形の辺の中心部分である。よって、STM 実験の像とは一致しない。

case 3. フェルミ面 B のネスティングベクトルの位置にのみノードが存在するようなペアポテンシャルでの計算結果を図.4.24 に示す。a 軸から 45 度傾けた直線に平行な辺が存在する長方形が見える。そしてその長方形の角、つまり a 軸方向にピークがある。よって STM 実験の像とは一致しない。

case 4. フェルミ面 A とフェルミ面 B のネスティングベクトルの位置にノードが存在するようなペアポテンシャルでの計算結果を図.4.26 に示す。case 2. と case 3. を合成したようなパターンのはずだが、case 3. のパターンが支配的であることが見て取れる。四つのピークの位置は、case 2.、case 3. と同じく a 軸方向である。ここまでの

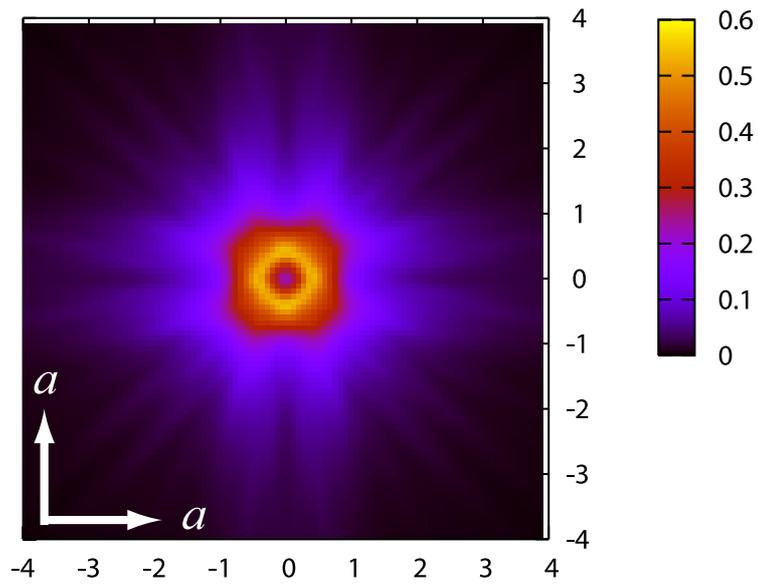


図 4.21: case 1. 等方的 s 波ペアポテンシャルでの LDOS。横軸は a 軸。

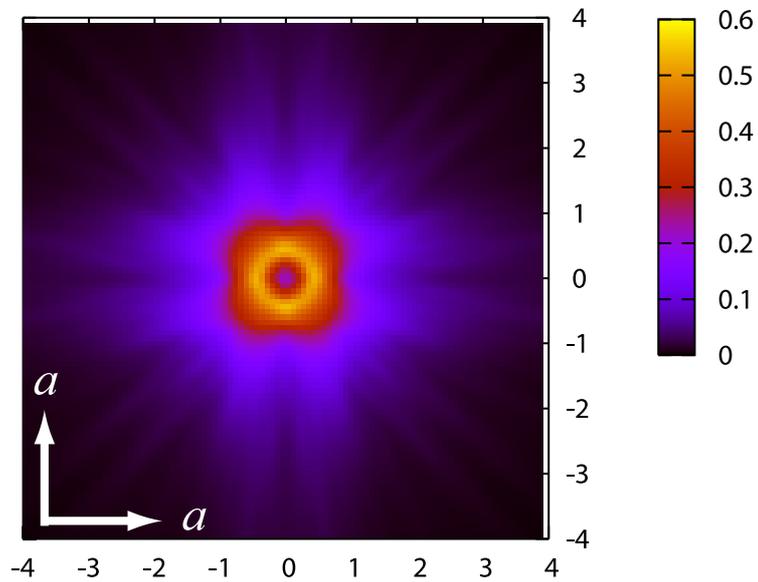


図 4.22: case 2. フェルミ面 A のネスティングベクトルの位置にのみノードが存在するようなペアポテンシャルでの LDOS。横軸は a 軸。

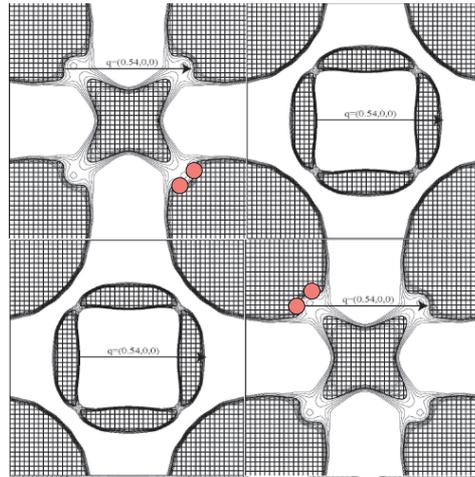


図 4.23: 赤丸がギャップノード。case 2. の場合。

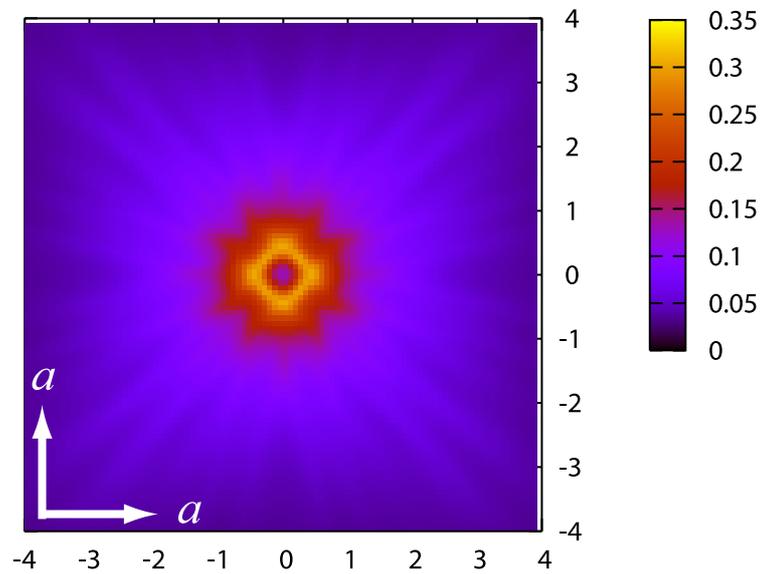


図 4.24: case 3. フェルミ面 B のネスティングベクトルの位置にのみノードが存在するようなペアポテンシャルでの LDOS。横軸は a 軸。

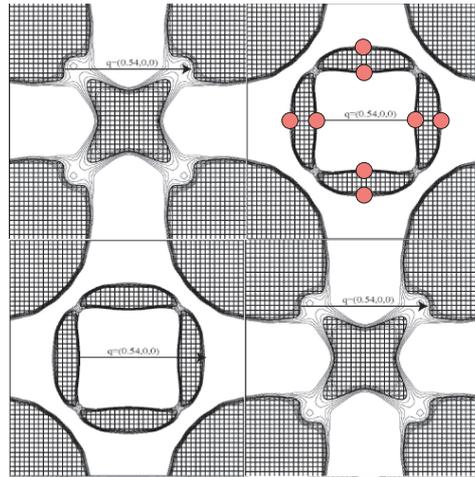


図 4.25: 赤丸がギャップノード。case 3. の場合。

結果から、ネスティングベクトルの場所にもみギャップの運動量空間での変化がある場合では、実験結果を再現できないことがわかった。

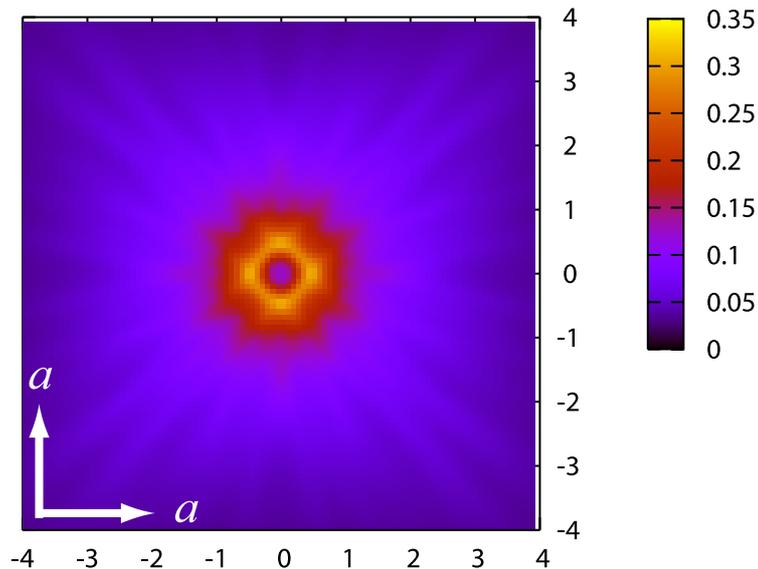


図 4.26: case 4. フェルミ面 A とフェルミ面 B のネスティングベクトルの位置にノードが存在するようなペアポテンシャルでの LDOS。横軸は a 軸。

case 5. 次に、フェルミ面 A とフェルミ面 B のネスティングベクトルの位置にノード、フェルミ面 A の特定箇所にギャップの極小値を作ったペアポテンシャルの場合の LDOS を計算した (図.4.28)。これは、図.4.29 のような場所にギャップノードとギャップの極小値を持つ場合である。このときのギャップの極値はギャップの最大値の半分とした。このときは、d 波的なパターンが見られた。このとき得られた四つのピークは、a 軸方向ではなく実験と同じ a 軸から 45 度方向である。また、ギャップの極値 (青丸) の値をいろいろ変化させても、ある程度極値の値が最大値の半分程度よりも小さければパターンは定性的には変わらなかった。しかし、エネルギーをゼロにしたときにはこのペアポテンシャルでは図.4.30 となり、パターンは図.4.3 のような十字形を作らない。したがって、このペアポテンシャルも実験と一致していない。

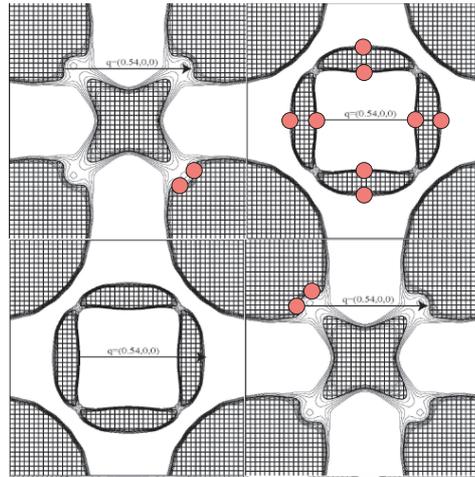


図 4.27: 赤丸がギャップノード。case 4. の場合。

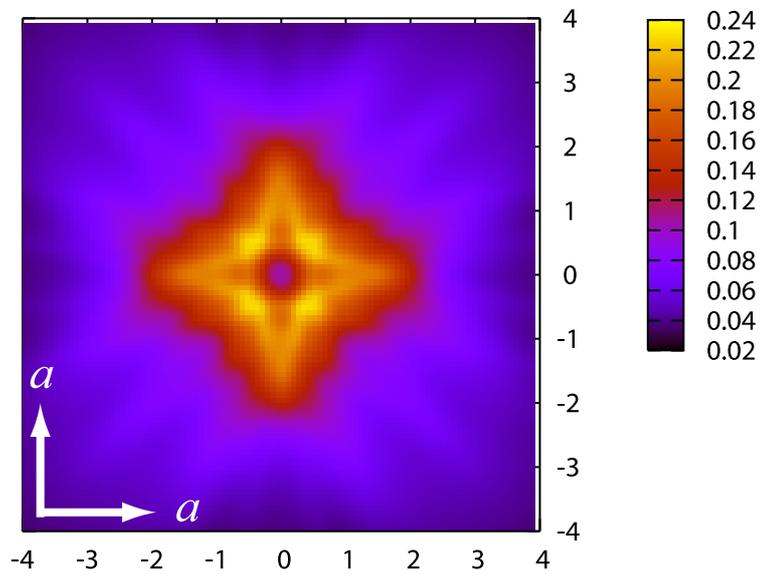


図 4.28: case 5. フェルミ面 A とフェルミ面 B のネスティングベクトルの位置にノード、フェルミ面 A の特定箇所ギャップの極値を作ったペアポテンシャルでの LDOS。横軸は  $a$  軸。

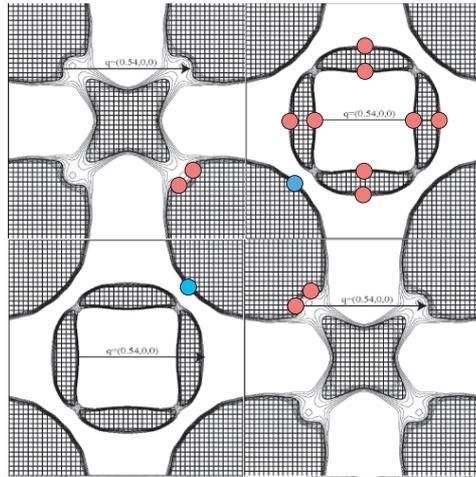


図 4.29: 赤丸がギャップノード、青丸はギャップの最大値の半分の極値。case 5. の場合。

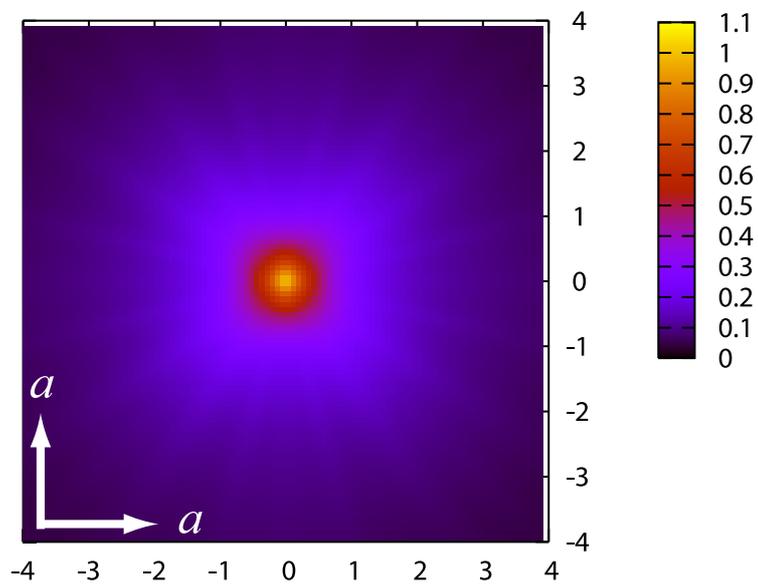


図 4.30: case 5. フェルミ面 A とフェルミ面 B のネスティングベクトルの位置にノード、フェルミ面 A の特定箇所ギャップの極値を作ったペアポテンシャルでの LDOS。横軸は  $a$  軸。エネルギーがゼロのとき。

case 6. 最後に、フェルミ面 A のネスティングベクトルの位置にノード、特定箇所ギャップの極小値を作ったペアポテンシャルでの計算結果を図.4.31 に示す。このときのギャップノードとギャップ極小値の位置は図.4.32 で示した。このパターンは case 5. と同様、STM 実験と同じ位置 (a 軸から 45 度方向) に四つのピークを持つ。四つのピークはギャップ極値の値の大きさで相対的な強度を変える。ギャップ極小値の大きさがギャップ最大値の半分よりも小さい場合には、LDOS のパターンは定性的にあまり変わらず、実験で見られる四つのピークを再現している。さらにギャップ極小値の値を大きくしていくと case 2. の LDOS へと連続的に変化する。

次に、ゼロエネルギーのときの LDOS を図.4.33 に示す。これは十字形のパターンを持っており、STM 実験結果である図.4.3 と一致している。また、エネルギー依存性については図.4.34 に示した。

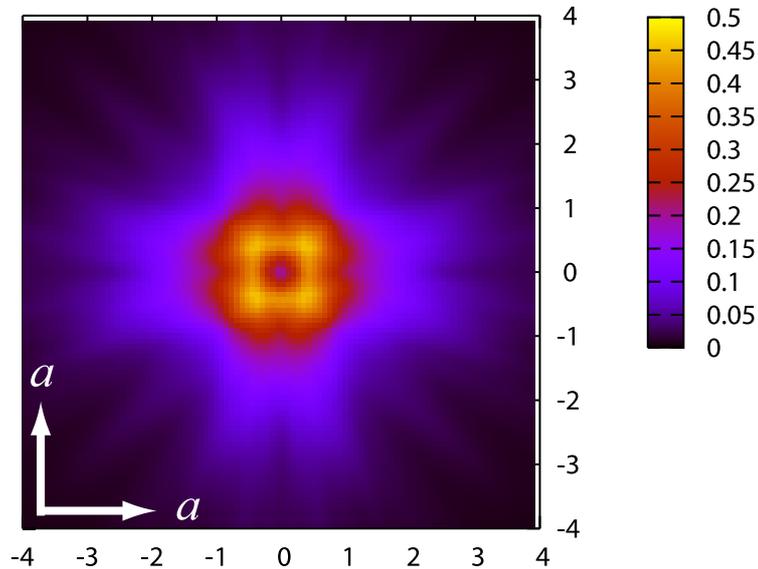


図 4.31: case 6. フェルミ面 A のネスティングベクトルの位置にノード、特定箇所ギャップの極値を作ったペアポテンシャルでの LDOS。横軸は a 軸。

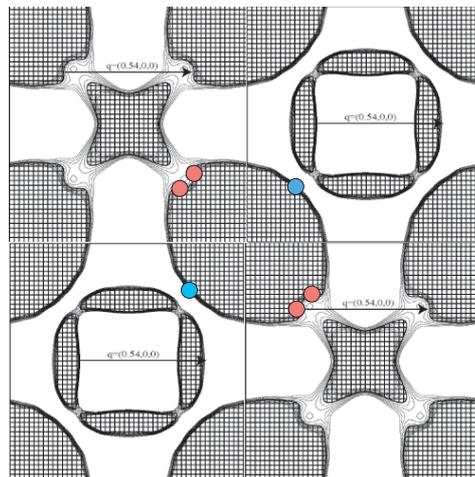


図 4.32: 赤丸がギャップノード、青丸はギャップの最大値の半分の極値。case 6. の場合。

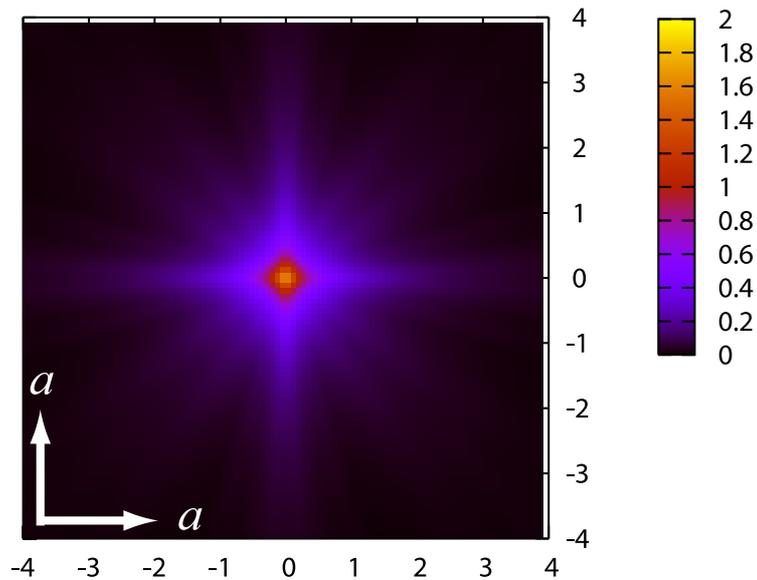


図 4.33: case 6. フェルミ面 A のネスティングベクトルの位置にノード、特定箇所ギャップの極値を作ったペアポテンシャルでの LDOS。横軸は  $a$  軸。ゼロエネルギーの場合。

#### 4.4.4 得られた LDOS の物理的解釈と STM/STS 実験

非常に複雑なフェルミ面を用いた計算であるが、ある程度は得られた LDOS パターンの物理的解釈ができる。LDOS パターンは quasiparticle path の包絡線で形作られていることは第 2 章で論じた。たとえば、第 2 章において NbSe<sub>2</sub> の quasiparticle path とその包絡線と数値積分を図で示した (図. 2.11、図. 2.12)。これらの比較からわかるように、実空間上で LDOS に濃い直線が存在していれば、その直線の方がその位置での準粒子のフェルミ速度の方向である。例として、case 3. の場合の渦糸コア近傍における準粒子の方向を図. 4.35 に示す。 $\pi/4$ [rad] 方向の準粒子が渦糸コアの局所電子状態密度分布に大きく寄与していることがわかる。

case 2. の LDOS が、ペアポテンシャルにノードが存在しているにもかかわらず等方的 s 波の場合の case 1. に似ているのは次の議論で説明することができる。case 2. のフェルミ面におけるノードは  $k_z = 0$  の断面と  $k_z = 0.5$  の断面に存在している。 $k_z = 0$  と  $k_z = 0.5$  での断面図の重ね合わせを図. 4.36 に示す。この図を見ると、フェルミ面 A のネスティングは円柱座標表示で言うところ  $\pi/4 + n\pi/2$  ( $n = 0, 1, 2, 3$ )[rad] のところに存在しているのがわかる。第 2 章の議論よりノード近傍のフェルミ面の異方性は渦糸コア近傍の LDOS に効いてこないことから、case 2. の LDOS を、 $\pi/4$ [rad] と  $\pi/4 + \pi$ [rad] の二箇所ノードを持つ円形フェルミ面と、 $\pi/4 + \pi/2$ [rad] と  $\pi/4 + 3\pi/2$ [rad] の二箇所ノードを持つ円形フェルミ面の LDOS の寄与の和として考えることができる。ゆえに、図. 4.37(a) と (b) の重ね合わせである (c) のような LDOS が得られ、この LDOS パターンは中心に円形のピークを持つことがわかる。

フェルミ面の詳細がわかっているので、フェルミ面上のどの準粒子が渦糸コア近傍の局所電子状態密度に寄与しているかを推測することができる。逆に言えば、実験結果から渦糸コア近傍で寄与している準粒子を推測することができる。渦糸コア近傍の LDOS に寄与する準粒子はギャップが大きな準粒子であるから、STM 像 (図. 4.20) の  $a$  軸方向を一辺とした四角形の存在から、フェルミ速度が  $\pi/4$ [rad] の準粒子のギャップは最大ではないことがわかる。ゆえに、case 6. のような  $\pi/4$ [rad] 方向の準粒子がいる場所にギャップの極値を作ったペアポテンシャルが一番実験を再現するのである。

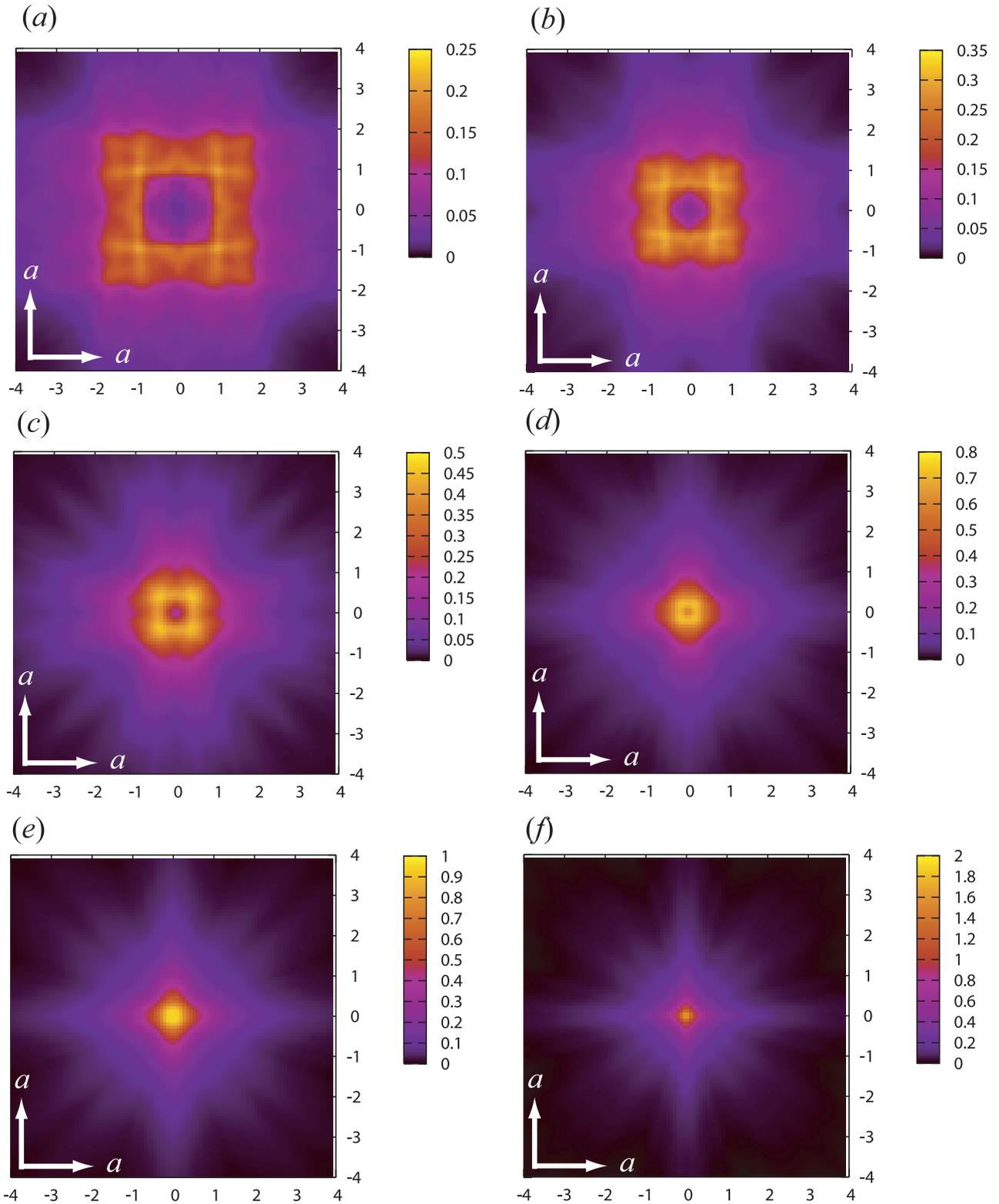


図 4.34: case 6. エネルギー依存性。(a) :  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.8$ 、(b) :  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.5$ 、(c) :  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.3$ 、(d) :  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.15$   
 (e) :  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.1$ 、(f) :  $\epsilon/\Delta_\infty = 0.0$

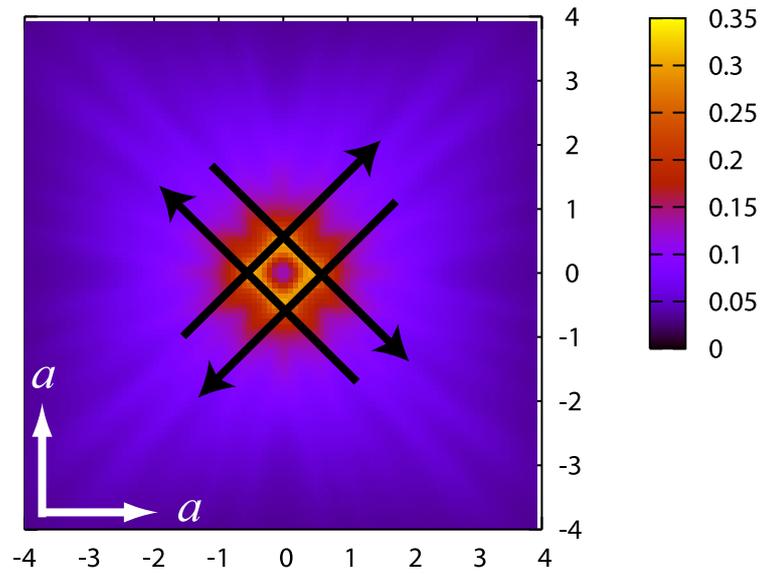


図 4.35: case 3. のペアポテンシャルにおける渦系コア近傍の準粒子の寄与。黒矢印は準粒子のフェルミ速度の方向を表している。

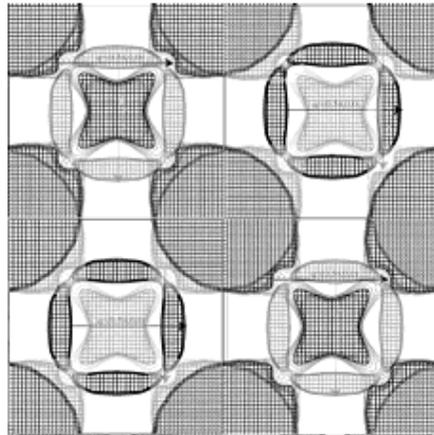


図 4.36:  $k_z = 0$  の断面図と  $k_z = 0.5$  の断面図の重ね合わせ。フェルミ面 A のネスティングは円柱座標表示で言うと  $\pi/4 + n\pi/2$  ( $n = 0, 1, 2, 3$ )[rad] のところに存在しているのがわかる。

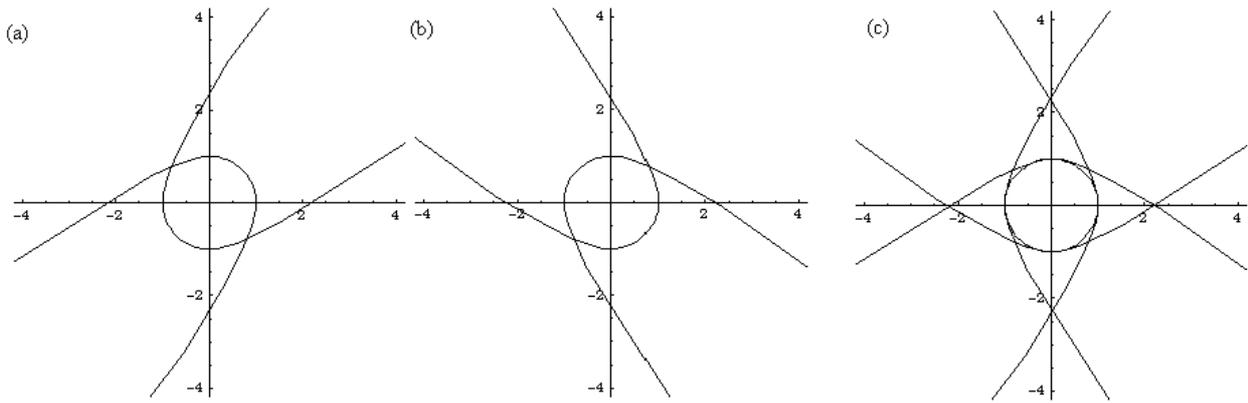


図 4.37: (a): $\pi/4[\text{rad}]$  と  $\pi/4 + \pi[\text{rad}]$  の二箇所にもードを持つ円形フェルミ面による LDOS。 (b): $\pi/4 + \pi/2[\text{rad}]$  と  $\pi/4 + 3\pi/2[\text{rad}]$  の二箇所にもードを持つ円形フェルミ面の LDOS。 (c) 二つの LDOS の和。

#### 4.4.5 LDOS の計算から得られたこと

LDOS の計算を行うことにより、どのようなペアポテンシャルが STM 像に近いかを議論することができた。その結果、「フェルミ面 A にのみギャップノード、ある位置にギャップ極少値を持つ場合」、もっともよく実験結果を再現することがわかった。ここで、ギャップ極値でのフェルミ速度の方向は  $\pi/4$  方向であり、比熱と熱伝導率の実験結果からこのようなフェルミ速度を持つフェルミ面上の一点はギャップノードにはならないことがわかる。それゆえに、ギャップノードではなくギャップ極値となるのである。

## 4.5 異方的フェルミ面での Doppler Shift 法による状態密度

### 4.5.1 この節の目的

§4.3 節において、比熱と熱伝導率の実験結果によってわかるのは「ノードの方向ではなくノードの位置でのフェルミ速度の方向」であることを定性的な議論から述べた。この節では、山内氏のバンド計算によるフェルミ面を用いて状態密度の磁場方向依存性を実際に計算する。計算した結果から、「比熱や熱伝導率の磁場方向依存性におけるカスプ構造が現れる磁場の方向がノードの位置でのフェルミ速度の方向である」ということを定量的に結論する。

### 4.5.2 Doppler Shift 法における準古典 Green 関数

Superclean Limit として不純物の効果を無視すると、このときの励起状態の準古典温度 Green 関数は

$$g(i\omega_n, \mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\omega_n + i\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{v}_s}{\sqrt{(\omega_n + i\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{v}_s)^2 + |\Delta|^2}} \quad (4.9)$$

である<sup>3</sup>。ここで、 $\mathbf{v}_s$  は磁束を中心に回転する超伝導電流に対応する。状態密度  $\nu(\varepsilon)$  は

$$\nu(\varepsilon) = \langle \text{Re } g^R \rangle \quad (4.10)$$

と書ける。ここで、 $\langle \dots \rangle$  は運動量空間でフェルミ面平均と実空間で磁場と垂直な平面における空間平均をとるものとする。また、

$$\text{Re } g^R(\varepsilon) = \text{Re} \frac{-i\varepsilon + i|\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{v}_s|}{\sqrt{(-i\varepsilon + i|\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{v}_s|)^2 + |\Delta|^2}} \quad (4.11)$$

を用いると<sup>4</sup>、エネルギーゼロにおける状態密度は

$$\nu(\varepsilon = 0) = \langle \text{Re} \frac{|\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{v}_s|}{\sqrt{(|\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{v}_s|)^2 - |\Delta|^2}} \rangle \quad (4.12)$$

となり、 $\langle \dots \rangle$  内は  $|x| > \Delta$  のときのみゼロでない実部を持つ。ここで  $x = |\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{v}_s|$  とおいた。

つまり、 $x \ll \Delta_{\text{MAX}}$  であれば、運動量空間においてノード近傍のみが状態密度に寄与することがわかる(図.4.18)。ここで、励起状態が比熱に主に寄与することからコアから十分離れた場所における空間平均をとることにし、ギャップの大きさの空間依存性は無視し、渦糸周りの位相変化の空間依存性のみを考慮するとする。

### 4.5.3 ペアポテンシャルの仮定

§4.4 における LDOS の計算結果と STM 像の比較結果から、ペアポテンシャルとして case.6 を仮定する。LDOS ではアンチノード方向の準粒子が重要となるのに対し、Doppler Shift 法による状態密度はノード方向の準粒子が重要となる。したがって、ギャップノードは  $\pi/4$  にあるのではなく、ネスティングベクトルの位置  $\pi/4 \pm \pi/32$  あたりに二つ存在するとした(図.4.38)。

### 4.5.4 計算結果

バンド計算フェルミ面を用いた状態密度の磁場方向依存性は図.4.39 となった。これは、前節までの定性的な議論を裏付ける結果となっている。つまり、状態密度、つまり比熱や熱伝導率における最小値は、磁場がノードの位置でのフェルミ速度ベクトルの方向を向いた時であり、Izawa らや Park らの実験<sup>26, 78)</sup> はノードの位置でのフェルミ速度ベクトルを測っているということになる。

<sup>3</sup>Doppler Shift 法の詳細は Barash らの論文<sup>84)</sup> や Thalmeier and Maki の論文<sup>85)</sup> 等を参考にした。

<sup>4</sup>遅延 Green 関数の実部だけに着目するとこの関係が満たされていることを確認できる。

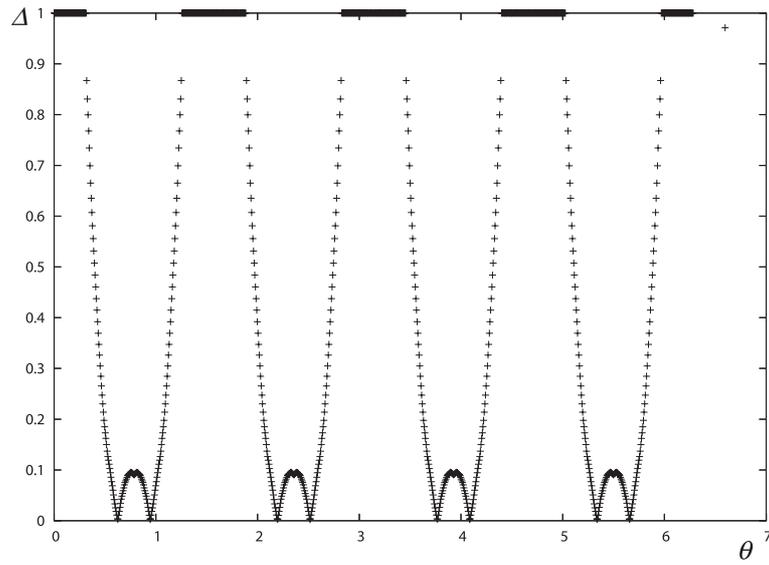


図 4.38: フェルミ面 A における  $k_z = 0$  でのギャップの角度依存性。角度は  $\Gamma$  点を中心とした円柱座標表示における  $\theta$  である。

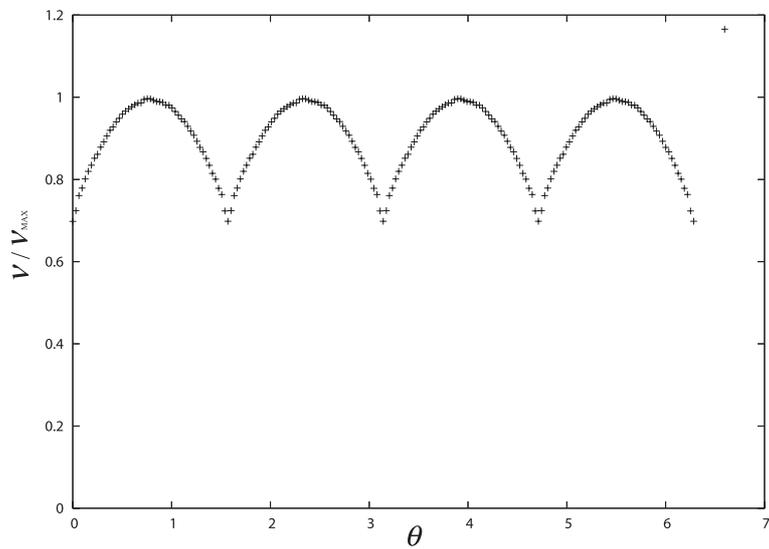


図 4.39: バンド構造を考慮した状態密度の磁場方向依存性の数値計算結果。最大値で規格化してある。

バンド計算を取り入れて異方的なフェルミ面を考慮したのに定性的な結果「ノードの位置でのフェルミ速度ベクトルの方向にカスプが出る」が変わらなかったのは理由がある。 $x \ll \Delta_{\text{MAX}}$  の条件から状態密度に寄与している準粒子がノード近傍の準粒子であることは、異方的フェルミ面であっても変わらない。この領域はフェルミ面上で非常に狭い領域なので、この狭い領域では事実上  $x$  の  $k$  依存性を無視することができ、またギャップは  $k$  に関する一次で近似できる(図4.40)。つまり、状態密度に寄与する領域ではフェルミ面の変化が非常に滑らかであり、異方的な場合も等方的な場合もフェルミ面の形状の効果が状態密度に効いてこないのである。

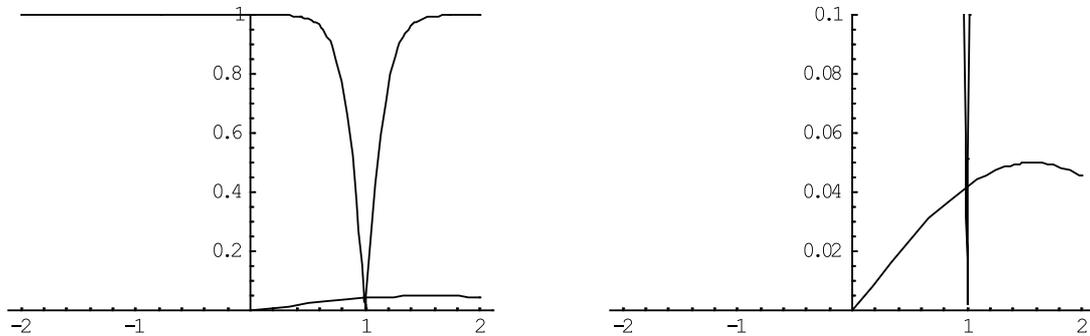


図 4.40: ギャップと Doppler Shift によるエネルギーシフトの比較。左図：上の曲線がギャップ、下の曲線がエネルギーシフト。右図：左図の拡大図。

## 4.6 議論とまとめ

### 4.6.1 比熱、熱伝導率、STM 実験から言えること

結局、図4.32のようなギャップとなっている場合が、現在行われているポイントノード特定関連実験のすべての結果を矛盾無く説明できることがわかった。比熱、熱伝導率はギャップノードでのフェルミ速度ベクトルの方向、STM はギャップが大きいところの準粒子の情報を得ることができる。つまり、片方だけではノードの位置を特定することはできない。二種類の方法を相補的に用いることで、ギャップの位置に関する情報を引き出すことができると考えられる。

### 4.6.2 ポイントノード形成のメカニズム

得られたペアポテンシャルは、ネスティングベクトルの位置にポイントノードがあり、ある場所にギャップの極値があるような構造を持つ。ギャップの極値がある場所は、運動量空間上でネスティングベクトルの位置からブリリアンゾーンを半分だけ下に行った場所であり、これも何らかの意味でネスティングと関連しているように考えられる。つまり、「フェルミ面上のネスティングの存在がその位置での反強磁性的な磁気揺らぎを局所的に強め、その結果 Cooper pair がその位置で形成しづらくなっている」というシナリオを考えることができる<sup>25, 64</sup>。今後は、三次元的なフェルミ面において本当にネスティングベクトルの存在でノードを作ることができるかという点について理論的に確証を得ることが必要だと考えられる。

### 4.6.3 他のポロカーバイドの実験との関連

ネスティングベクトルの位置にポイントノードが生じるというシナリオを支持しないグループも存在することをこの節で述べておく。Matsuda らは Angle Resolved Thermal Transport Measurements に関するレポート<sup>86</sup>の中で、

1. Y(Ni<sub>1-x</sub>Pt<sub>x</sub>)<sub>2</sub>Cの熱伝導率の磁場方向依存性のカスプ構造は  $x = 0.05$  で消失する
2. spin-density-wave 転移を起こしておりネスティングが消えているはずの ErNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C でも同様のカスプ構造が見られる

を上げ、ネスティングはポイントノードと無関係であることを主張している (図. 4.41)。しかしながら、これら

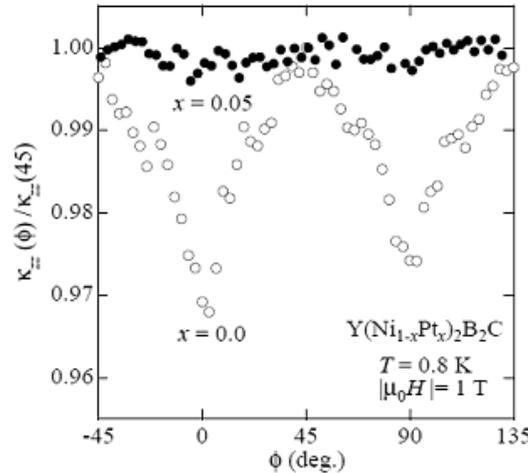


Figure 8. Angular variation of  $\kappa_{xx}$  for YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C (open circle) and Y(Ni<sub>0.95</sub>Pt<sub>0.05</sub>)<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C (solid circles), measured by rotating  $H$  as a function of  $\phi$  within the  $ab$ -plane. Angular variation disappears in Y(Ni<sub>0.95</sub>Pt<sub>0.05</sub>)<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C.

図 4.41: Y(Ni<sub>1-x</sub>Pt<sub>x</sub>)<sub>2</sub>C の熱伝導率の磁場方向依存性。  $x = 0.05$  でカスプ構造が消失している。

の実験結果はネスティングとポイントノードが無関係であるという主張を支持するものではない。

1. についてであるが、「フェルミ面のネスティングもカスプ構造を作るのでカスプ構造があればポイントノードであるとは必ずしも言えない」という Udawaga ら<sup>87)</sup>の主張に対しては、1. の実験結果によって主張を退けることは可能である。なぜならば、ネスティング構造がほとんどかわらない程度である  $x = 0.05$  という Pt への置換でカスプ構造が消失しているからである。カスプ構造がネスティング由来であれば  $x = 0.05$  ではカスプ構造は消失しないはずである。しかし、我々の「ネスティングがポイントノードを作っている」という主張を退けることはできない。むしろ図. 4.41 は我々の主張を支持していると考えられる。なぜならば、Doppler Shift 法による解析によると、Doppler Shift によるエネルギーが不純物のエネルギー  $\Gamma$  を超えるとカスプが消失するからである。つまり、図. 4.39 の結果を与える条件である Clean limit が破れたことでカスプが消失するのである。これは Doppler shift によるエネルギーと  $x = 0.05$  での実験における不純物のエネルギーの大小関係を議論すれば定量的に決着がつくと考えられる。

2. についてであるが、Park らの HoNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C の比熱の磁場方向依存性の実験<sup>88)</sup>において、超伝導転移後磁気転移前の温度における磁場方向依存性は、特定方向の magnetic disorder の大きさの違いが magnetic entropy change を生んでいることで説明することができることを指摘しておく。つまり、ErNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C の熱伝導率の磁場方向依存性も magnetic disorder の方向依存性が現れているために生じている可能性があるため、観測したカスプ構造がポイントノード由来かどうかは判断できない。また、Er、Ho は Y と違い 4f 電子を持ち磁性があり、周期表 (図. 4.1) では Y とはかなり異なる電子配置を持つ。したがって、Er 化合物で得られた結果を Y 化合物の議論に使うのは妥当であるとは言えない。

#### 4.6.4 ゼロバイアスでの STM 像の解釈

第2章でも述べたように、実験におけるゼロバイアス時の LDOS パターンは smearing factor  $\delta$  で決定付けられる。このとき、渦糸コア近傍の LDOS パターンに寄与する準粒子は、 $\Delta_{\text{MAX}}$  と  $\delta$  の大小関係で決まる。ここで、 $\Delta_{\text{MAX}}$  とは、フェルミ面上でのギャップの最大値である。有限の  $\delta$  をもつ系の  $\epsilon = 0$  での LDOS パターンは、 $\epsilon = \delta$  と同様なパターンを示す。つまり、 $\delta \sim \Delta_{\text{MAX}}$  のときは、 $\epsilon = 0$  での渦糸コア近傍の LDOS はギャップの大きな準粒子による寄与が大きい。一方、 $\delta \ll \Delta_{\text{MAX}}$  のときは、 $\epsilon = 0$  での渦糸コア近傍の LDOS はノードにおける準粒子の寄与が大きくなり、LDOS パターンはノードでの準粒子のフェルミ速度の方向によって決定付けられる。つまり、case 6. において、 $\delta = 0.01\Delta_{\infty}$ 、 $\epsilon = 0$  で得られる LDOS パターンは、ノードにおける準粒子のフェルミ速度方向 ( $a$  軸方向) に伸びる十字形となる (図. 4.42)。したがって、今回採用した case 6. のようなペアポテンシャルであれば、 $\delta$  の大小に関わらずゼロバイアス ( $\epsilon = 0$ ) における LDOS は  $a$  軸方向に伸びる十字形となり (図. 4.33、図. 4.42)、実験結果 (図. 4.3) とコンシステントである。

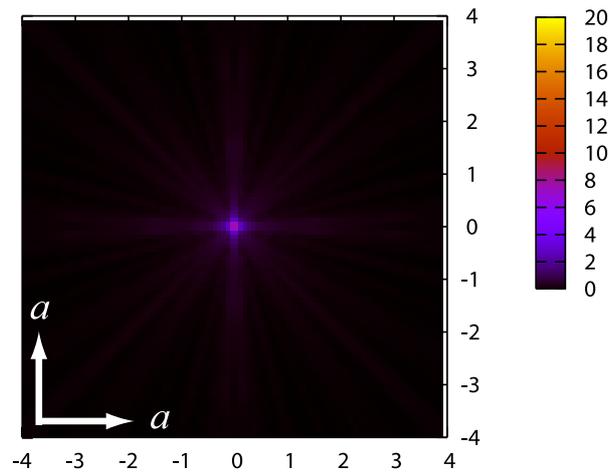


図 4.42: case 6. のペアポテンシャルでの  $\delta = 0.01\Delta_{\infty}$ 、 $\epsilon = 0$  での LDOS パターン。  $a$  軸方向の十字形が見える。

#### 4.6.5 本章のまとめ

本章において、共同研究者山内邦彦氏の第一原理計算によって得られたフェルミ面を用い、 $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  の渦糸近傍における局所電子状態密度分布と状態密度の磁場方向依存性を計算した。そして、さまざまな試行ペアポテンシャルを用いた計算結果と、Nishimori らの STM 実験<sup>27)</sup> と Izawa らの熱伝導率の磁場方向依存性<sup>26)</sup> の結果を比較し、実験的に最も妥当なペアポテンシャルを推定した。その結果、図.4.32 のようなペアポテンシャルであれば実験結果を矛盾無く説明できることがわかった。得られたペアポテンシャルは、ネスティングベクトルの存在する位置においてノードが存在し、ある場所においてギャップの極小値が存在するような構造である。また、この結果はフェルミ面のネスティングがノードを作るというシナリオを支持している。



## 第5章 まとめと今後の展望

渦糸近傍での局所電子状態密度 (LDOS) 分布は、ペアポテンシャルとフェルミ面の異方性を反映し、走査型トンネル顕微鏡 (STM) で実際に観測することができる。最近のナノテクノロジーの進展により、今後 STM/STS 技術の精度は良くなると考えられ、渦糸コアの STM 観測が超伝導秩序変数の対称性を決定する有力なツールとなると予想される。我々は、理論的に渦糸コア近傍の局所電子状態密度分布を研究した。以下に各章で行ったことの概要を述べる。

第2章では、準古典近似と Kramer-Pesch 近似を用いて、渦糸コア近傍での準古典温度 Green 関数を解析的に導出した。ここで開発した理論は、二次元的超伝導体の場合にのみ適用できた Ueno らの理論<sup>21)</sup>を拡張し、任意の異方的三次元的フェルミ面、スピン-重項スピン三重項問わず任意の対称性のペアポテンシャルに適用可能であり、結晶軸に対してどのような方向に磁場をかけた場合でも計算が可能である。この理論を用いた結果は、Hayashi らが行った NbSe<sub>2</sub> の数値計算<sup>11)</sup>とコンシステントとなった。我々の解析的理論を用いれば、実空間上の一点での局所電子状態密度が、フェルミ面上のどの準粒子からの寄与なのかを理解することができ、物理的描像を容易に得ることができる。例として、強くネスティングしているフェルミ面をもつ d 波を考え、フェルミ面のネスティングとノードの位置との関係を議論した。その結果、ネスティングベクトルのある位置とノードの位置が一致した場合には、フェルミ面のネスティングは LDOS にほとんど影響を及ぼさないことがわかった。これは、渦糸コア近傍の LDOS はギャップが大きい準粒子の寄与によって形作られているということを考えれば理解することができる。

第3章では、第2章で開発した理論を使い、空間反転対称性の無い重い電子系超伝導体 CePt<sub>3</sub>Si の渦糸コア近傍の局所電子状態密度分布を計算した。このとき、スピン-重項スピン三重項混合ペアリングモデル (s+p 波) を仮定して計算した。結果として得られる LDOS パターンは、スピン軌道相互作用でフェルミ面が二つに分裂したことにより、それぞれのギャップによる LDOS の重ね合わせで得られることを示した。c 軸方向に磁場をかけた場合、LDOS は二つの同心円となる。これは Hayashi らの結果とコンシステントである<sup>46)</sup>。c 軸に垂直な方向に磁場をかけた場合、LDOS の空間分布は図. 3.11 や図. 3.12 のようなパターンになった。フェルミ面 II による LDOS パターンは d 波の一部分に似ているパターンとなった。また、異方的な LDOS パターンは singlet チャンネルと triplet チャンネルが混成した結果であることがわかった。そして、LDOS パターンにおける楕円形の長軸と短軸の比  $r$  を見ることによって、singlet 成分と triplet 成分の比を同定できることがわかった。将来 CePt<sub>2</sub>Si の渦糸を STM/STS 観測することができれば、仮定したペアポテンシャルの妥当性を確かめることができる。また、この章は、ペアポテンシャルが Unitary ではない ( $\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger \neq \hat{\sigma}_0$ ) ペアポテンシャルにおける第2章の理論の適用例ともなっている。そして、より現実的なフェルミ面を用いて LDOS パターンがどの程度変更を受けるかということを議論することが CePt<sub>3</sub>Si の LDOS の研究の今後の課題である。

第4章では、第2章で用いた理論と、共同研究者山内氏から頂いた第一原理計算によるバンド構造のデータを用いて、極めて異方的なフェルミ面を持つ YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C のペアポテンシャルの形を推定した。このとき、我々は渦糸コア近傍の局所電子状態密度と状態密度の磁場方向依存性を計算した。さまざまな試行ペアポテンシャルを用いて計算し、Nishimori らの STM 実験結果<sup>27)</sup>と比較した結果、実験的に最も妥当なペアポテンシャルの形を推定することができた。得られたペアポテンシャルは、ネスティングベクトルの存在する位置においてノードが存在し、ある場所においてギャップの極小値が存在するような構造であることがわかった。これらの結果は、YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C のポイントノードはフェルミ面のネスティングの存在によって生じるのではないかというシナリオを支持している。今後、このシナリオを検証するためには、三次元的フェルミ面を持つ超伝導体においてネスティングベクトルが存在したときに確かにポイントノードを形成するかどうかを調べる必要がある。具体的には、反強磁性揺らぎを考慮した場合の BCS 理論が強結合理論を用いて、ポイントノードを持つ異方的 s 波が d 波よりも等方的 s 波

よりもエネルギー的に得かどうかを調べる必要がある。また、ポイントノードの位置についての議論をする際には、状態密度の磁場方向依存性を計算する際に用いた Doppler Shift 法は低磁場でのみよく成り立つ近似であることに注意をしなければならない。なぜならば、行われた実験の磁場が Doppler Shift 法がよく成り立つ磁場領域になかったのではないかという Udagawa らの主張がある<sup>87)</sup>からである。彼らは、高磁場領域でよく成り立つ近似を用いて、ノードの有無ではなくフェルミ面のネスティングが比熱の磁場方向依存性に現れるカスプ構造を形成するのではないかと主張している。したがって、バンド構造を考慮して Doppler Shift 法以外の方法で状態密度の磁場方向依存性を計算して、実験が低磁場領域なのか高磁場領域なのかを判断する必要があり、これは今後のもうひとつの課題である。

本論文において、渦糸コアの STM/STS 観測の意義が重要なものであるということを示した。今後は、本論文で得られたポイントノードの位置の結果から、 $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  のポイントノード形成メカニズムを解明すること等が課題である。また、今後様々な超伝導体の STM/STS 観測が行われ、ペアポテンシャルの対称性を探るツールとして本理論が有用となることを期待したい。

## 謝辞

この修士論文を作成するにあたっては、多くの方々にお世話になりました。以下の方々に深く感謝致します。指導教官である加藤雄介助教授には、研究を遂行する上での終始さまざまな支援・助言を頂きました。共同研究者である林伸彦博士には、 $\text{CePt}_3\text{Si}$ に関する詳細な知識に基づく助言を頂き、また、さまざまな議論を通じてLDOSに関連する理論と解釈の精度を高めて頂きました。共同研究者の山内邦彦博士と播磨尚朝教授には、快く $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ のバンド計算のデータを提供して頂きました。加藤研究室の方々（浅沼伸雄氏、藤田朗丈氏、仲井良太氏、小田修太郎氏）には、セミナー等を通じてお世話になりました。特に、浅沼伸雄氏には、計算機サーバー管理や研究室の日常的業務等で色々と助けていただきました。また、吉岡研究室、福島研究室の方々には主にセミナー等でお世話になりました。M1の時に同じ部屋で過ごした清水研究室、池上研究室、國場研究室の院生の方々、物性理論秘書の豊田久子さん、駒場16号館の方々には、日々の研究生活を楽しく実り多いものにしていただき感謝しています。また、私と議論してくださったすべての方々に感謝します。

最後に、私に関わるすべての人、特にここまで健康に育ててくれた両親に深く感謝し、この修士論文が多くの人に読まれることを願います。



## 参考文献

- [1] M. Tinkham: "Introduction to Superconductivity second edition" (Dover).
- [2] H. Sakata, M. Oosawa, K. Matsuba and N. Nishida: Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 1583.
- [3] G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin and V. M. Vinokur: Rev. Mod. Phys. **66** (1994) 1125.
- [4] M. Sigrist and K. Ueda: Rev. Mod. Phys. **63** (1991) 239.
- [5] H. F. Hess, R. B. Robinson, R. C. Dynes, J. M. Valles, Jr. and J. V. Waszczak: Phys. Rev. Lett. **62** 214.
- [6] 高野文彦、「多体問題」(培風館 新物理学シリーズ 18) .
- [7] N. Kopnin: "Theory of Nonequilibrium Superconductivity" (Oxford Science Publications)
- [8] M. Sigrist and K. Ueda: Rev. Mod. Phys. **63** (1991) 239.
- [9] H. F. Hess, R. B. Robinson and J. V. Waszczak: Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 2711.
- [10] F. Gygi and M. Schlüter: Phys. Rev. B **43** (1991) 7609.
- [11] N. Hayashi, M. Ichioka and K. Machida: Phys. Rev. B **56** (1997) 9052.
- [12] N. Schopohl and K. Maki: Phys. Rev. B **52** (1995) 490.
- [13] M. Ichioka, N. Hayashi, N. Enomoto and K. Machida: Phys. Rev. B. **53** (1996) 15316.
- [14] M. Ashida, S. Aoyama, J. Hara and K. Nagai: Phys. Rev. B **40** (1989) 8673.
- [15] Y. Nagato, K. Nagai and J. Hara: J. Low Temp. Phys. **93** (1993) 33.
- [16] N. Schopohl: cond-mat/9804064.
- [17] M. Eschrig: Phys. Rev. B **61** (2000) 9061.
- [18] A. L. Shelankov: J. Low Temp. Phys. **60** (1985) 29.
- [19] C. Caroli, P. G. de Gennes and J. Matricon: Phys. Lett. **9** (1964) 307.
- [20] L. Kramer and W. Pesch: Z. Phys. **269** (1974) 59.
- [21] 植野洋介、東京大学修士論文 (2003).
- [22] A. B. Vorontsov, J. A. Sauls, Phys. Rev. B **68**, 064508 (2003).
- [23] Y. Kato and N. Hayashi: J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 3368.
- [24] Y. Nagai, Y. Ueno, Y. Kato and N. Hayashi: J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 10471.
- [25] K. Maki, P. Thalmeier and H. Won: Phys. Rev. B **65** (2002) 140502.

- [26] K. Izawa, K. Kamata, Y. Nakajima, Y. Matsuda, T. Watanabe, M. Nohara, H. Takagi, P. Thalmeier and K. Maki: *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 137006.
- [27] H. Nishimori, K. Uchiyama, S. Kaneko, A. Tokura, H. Takeya, K. Hirata and N. Nishida: *J. Phys. Soc. Jpn.* **73** (2004) 3247.
- [28] E. Bauer, G. Hilscher, H. Michor, Ch. Paul, E. W. Scheidt, A. Griбанov, Yu. Seropegin, H. Noël, M. Sigrist, and P. Rogl: *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 027003.
- [29] K. Kakuyanagi, M. Saitoh, K. Kumagai, S. Takashima, M. Nohara, H. Takagi and Y. Matsuda: *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 047602.
- [30] N. Metoki, K. Kaneko, T. D. Matsuda, A. Galatanu, T. Takeuchi, S. Hashimoto, T. Ueda, R. Settai, Y. Onuki and N. Bernhoeft: *J. Phys. Condens. Matter* **16** (2004) L207.
- [31] T. Takeuchi, M. Tsujino, T. Yasuda, S. Hashimoto, R. Settai, Y. Onuki: *J. Mag. Mag. Mater* (2006).
- [32] M. Yogi, Y. Kitaoka, S. Hashimoto, T. Yasuda, R. Settai, T. D. Matsuda, Y. Haga, Y. Onuki, P. Rogl and E. Bauer: *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 027003.
- [33] K. Izawa, Y. Kasahara, Y. Matsuda, K. Behnia, T. Yasuda, R. Settai and Y. Onuki: *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 197002.
- [34] P. A. Frigeri, D. F. Agterverg and M. Sigrist: *New J. Phys.* **6** (2004) 115.
- [35] 林伸彦、Mangred Sigrist: *固体物理* **41** (2006) 631.
- [36] P. A. Frigeri, D. F. Agterberg, I. Milat and M. Sigrist: *cond-mat/0505108*.
- [37] I. Bonalde, W. Brämer-Escamilla and E. Bauer: *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 207002.
- [38] S. Fujimoto: *Phys. Rev. B* **72** (2005) 024515.
- [39] S. Fujimoto: *cond-mat/0605723*.
- [40] N. Hayashi, K. Wakabayashi, P. A. Frigeri and M. Sigrist: *Phys. Rev. B* **73** (2006) 092508.
- [41] N. Hayashi, K. Wakabayashi, P. A. Frigeri and M. Sigrist: *Phys. Rev. B* **73** (2006) 024504.
- [42] P. A. Frigeri, D. F. Agterberg, A. Koga and M. Sigrist: *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 097001.
- [43] N. Schopohl: *J. Low Temp. Phys.* **41** (1980) 409.
- [44] C. T. Rieck, K. Sharnberg and N. Schopohl: *J. Low Temp. Phys.* **84** (1991) 381.
- [45] C. H. Choi and J. A. Sauls: *Phys. Rev. B* **48** (1993) 13684.
- [46] H. Hayashi, Y. Kato, P. A. Frigeri, K. Wakabayashi, M. Sigrist: *Physica C* **437-438** (2006) 96.
- [47] R. J. Cava, H. Takagi, H. W. Zandbergen, J. J. Krajewski, W. F. Peck, Jr., T. Siegrist, B. Batlogg, R. B. van Dover, R. J. Felder, K. Mizuhashi, J. O. Lee, H. Eisaki and S. Uchida: *Nature (London)* **367** (1994) 252.
- [48] C. Kittel: *固体物理学入門第七版*
- [49] P. Ravindran, S. Sankaralingam and R. Asokamani: *Phys. Rev. B* **52** (1995) 12921.

- [50] H. Kawano, H. Yoshizawa, H. Takeya and K. Kadowaki: *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 4628.
- [51] T. Yokoya, T. Kiss, T. Watanabe, S. Shin, M. Nohara, H. Takagi and T. Oguchi: *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 4952.
- [52] T. Ekino, H. Fujii, M. Kosugi, Y. Zenitani and J. Akimitsu: *Physica C* **235-240** (1994) 2529.
- [53] S. B. Roy, Z. Hossain, A. K. Pradhan, C. Mazumdar, P. Chaddah, R. Nagarajan, C. Godart and L. C. Gupta: *Physica C* **228** (1994) 319.
- [54] M. Xu, P. C. Canfield, J. E. Ostenson, D. K. Finnemore, B. K. Cho, Z. R. Wang and D. C. Johnston: *Physica C* **227** (1994) 321.
- [55] K-H. Muller and V. N. Narozhnyi : *Rep. Prog. Phys.* **64** (2001) 943.
- [56] L. F. Mattheiss: *Phys. Rev. B* **49** (1994) R13279.
- [57] A. A. Carter, B. Batlogg, R. J. Cava, J. J. Krajewski, W. F. Peck, Jr. and H. Takagi: *Phys. Rev. B* **50** (1994) R4216.
- [58] H. Michor, T. Holubar, C. Dusek and G. Hilscher: *Phys. Rev. B* **52** (1995)16165.
- [59] R. S. Gonnelli, A. Morello, G. A. Ummarino, V. A. Stepanov, G. Behr, G. Graw, S. V. Shulga and S. L. Drechsler: *Int. J. Mod. Phys. B* **54** (2000) 2840.
- [60] M. Nohara, M. Isshiki, H. Takagi and R. J. Cava: *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** (1997) 1888.
- [61] M. Nohara, M. Isshiki, F. Sakai and H. Takagi: *J. Phys. Soc. Jpn.* **68** 1078.
- [62] W. E. Pickett and D. J. Singh: *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994) 3702.
- [63] 黒木和彦、青木秀夫: 多体電子論 II 超伝導
- [64] H. Kontani: *Phys. Rev. B* **70** (2004) 054507.
- [65] H. Doh, M. Sigrist, B. K. Cho and S-I. Lee: *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999) 5350.
- [66] S. V. Shulga, S-L. Drechsler, G. Fuchs, K-H. Muller, K. Winzer, M. Heinecke and K. Krug: *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 1730.
- [67] S. Mukhopadhyay, G. Sheet, P. Raychaudhuri and H. Takeya: *Phys. Rev. B* **72** (2005) 014545.
- [68] D. L. Bashlakov, Y. G. Naidyuk, I. K. Yanson, S. G. Wimbush, B. Holzapfel, G. Fuch and S. L. Drechsler: *Supercond. Sci. Technol.* **18** (2005) 1094.
- [69] C. L. Huang, J-Y. Lin, C. P. Sun, T. K. Lee, J. D. Kim, E. M. Choi, S. I. Lee and H. D. Yang: *Phys. Rev. B* **73** (2006) 012502.
- [70] S. B. Dugdale, M. A. Alam, I. Wilkinson and R. J. Hughes: *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999) 4824.
- [71] K. Yamauchi, H. Katayama-Yoshida, A. Yanase and H. Harima: *Physica C* **412-414** (2004) 225-229.
- [72] K. Yamauchi: private communication.
- [73] T.Kohara, T. Oda, K. Ueda, Y. Yamada A. Mahajan, K. Elankumaran, Zakir Hossian, L. C. Gupta, R. Nagarajan, R. Vijayaraghavan and Chandan Mazumdar: *Phys. Rev. B* **51** (1995) 3985.

- [74] H. Kawano, H. Yoshizawa, H. Takeya and K. Kadowaki: Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 4628.
- [75] B. J. Suh, F. Borsa, D. R. Torgeson, B. K. Cho, P. C. Canfield, D. C. Johnston, J. Y. Rhee and B. N. Harmon: Phys. Rev. B **54** (1996) 15341.
- [76] C. L. Huang, J.-Y. Lin, C. P. Sun, T. K. Lee, J. D. Kim, E. M. Choi, S. I. Lee and H. D. Yang: Phys. Rev. B **73** (2006) 012502.
- [77] D. L. Bashlakov, Yu. G. Naidyuk, I. K. Yanson, G. Behr, S.-L. Drechsler, G. Guchs, L. Schultz and D. Souptel: cond-mat/0611441.
- [78] Tuson Park, M. B. Salamon, Eun Mi Choi, Heon Jung Kim and Sung-Ik Lee: Phys. Rev. Lett. **90** (2003) 177001.
- [79] T. Watanabe, M. Nohara, T. Hanaguri and H. Takagi: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 147002.
- [80] G. E. Volovik, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **58**, 457 (1993)[JETP Lett. **58**, 469 (1993)].
- [81] J. P. Rodriguez: Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 250.
- [82] I. Vekhter, P. J. Hirschfeld, J. P. Carbotte and E. J. Nicol: Phys. Rev. B **59** (1999) R9023.
- [83] N. Nakai, P. Miranovic, M. Ichioka, H. F. Hess, K. Uchiyama, H. Nishimori, S. Kaneko, N. Nishida and K. Machida : Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 147001.
- [84] Yu. S. Barash, A. A. Svindzinskii and V. P. Mineev: JETP Lett. **65** (1997) 638.
- [85] P. Thalmeier and K. Maki: cond-mat/0109351.
- [86] Y. Matsuda, K. Izawa, I. Vekhter: cond-mat/0611371.
- [87] M. Udagawa, Y. Yanase and M. Ogata: Phys. Rev. B **71** (2005) 024511.
- [88] T. Park, M. B. Salamon, E. M. Choi, H. J. Kim and S-I. Lee: Phys. Rev. B **69** (2004) 054505.