

博士論文

強結合超伝導体における渦の研究

黒澤 範行

目次

目次	3
第 1 章 緒論	5
1.1 対象	5
1.2 目的	7
第 2 章 超伝導の理論	11
2.1 経路積分による超伝導の記述	11
2.2 準古典理論	20
2.3 フォノンに起因する超伝導	38
第 3 章 渦の解析	41
3.1 準古典理論による孤立渦の解析	41
第 4 章 強結合超伝導の渦	55
4.1 対象とする系	55
4.2 自己エネルギーの対角成分	57
4.3 円筒対称性を破る渦	64
第 5 章 結論	81
付録 A 巨視的理論	83
A.1 弱結合での Ginzburg-Landau 方程式	83
A.2 強結合カイラル p 波超伝導の Ginzburg-Landau 方程式	88
A.3 London 理論での自由エネルギー	89
付録 B 準古典理論	91
B.1 Wigner 変換と積	91
B.2 結合定数と転移温度	93
B.3 Eilenberger の自由エネルギー汎関数	94
参考文献	99
謝辞	107

第1章

緒論

1.1 対象

1911年にKamerlingh Onnesによって発見された超伝導は、低温におけるFermi粒子系の基本的な相の一つである。超伝導相では電気抵抗が零になるという劇的な現象の他にも、完全反磁性や磁束が磁束量子 $\Phi_0 = \pi\hbar/e_0$ の整数倍^{*1}に量子化されるなどの、常伝導状態では存在しない様々な現象が発現し、興味を惹き続ける研究対象となっている。理論面においては、1957年にBardeenらによって発表されたBardeen-Cooper-Schrieffer(BCS)理論[1]における、有効引力相互作用が働く二つのFermi粒子がCooper対を形成し、そのCooper対が凝縮するという描像が、超伝導現象の普遍的な説明になっていると考えられている。

本研究では特に強結合超伝導[2-4]に注目する。“強結合”は物性物理の分野ごとに様々な意味を持つが、金属における超伝導の文脈では、しばしばAndersonとMorel[5, 6], Migdal[7], Eliashberg[8]らによって開発された理論(Migdal-Eliashberg理論あるいはEliashberg理論と呼ばれる)を用いていることを意味する。電子-フォノン結合が強い^{*2}(すなわち強結合の場合)には、狭義のBCS理論^{*3}(しばしばEliashberg理論と対比して弱結合理論と呼ばれる)におけるフォノン(あるいは一般に“糊”となるBose粒子)の特徴的なエネルギーが、超伝導の特徴的なエネルギーの尺度 $k_B T_c$ に比べてずっと大きいという仮定に修正の必要が生じ、このため遅延効果を明示的に取り入れる必要が生じる。これにともないギャップ方程式も(狭義の)BCS理論のそれではなく、Eliashberg方程式を採用することになる。すなわち強結合理論で超伝導を扱うことは、Cooper対を形成する“糊”となるBose粒子の遅延効果を考慮することを意味しており、このため超伝導秩序変数(ペアポテンシャル)は周波数依存性を持つ。

鉛や水銀などの金属では、強結合性の効果として、超伝導エネルギーギャップ Δ と無磁場下の転移温度 $k_B T_c$ との比 $2\Delta/(k_B T_c)$ が、狭義のBCS理論による普遍的な値3.53から顕著にずれる。Eliashberg理論によってこれらのずれは説明可能であるが、Eliashberg理論が

^{*1} e_0 は素電荷。

^{*2} ただし結合が強すぎると電子は自己束縛されたポーラロン(格子振動(フォノン)と電子の結合によって生じるフェルミ粒子的な準粒子)を形成し動けなくなったり、二つのポーラロンが結合した準粒子であるバイポーラロンを形成してボーズ粒子として振る舞ったりもするため、広義のBCS理論であるEliashberg理論では記述できなくなる。実際の系でEliashberg理論が使えるためには結合が強すぎてもいけない。

^{*3} 本論文では広義のBCS理論を電子がCooper対を組んで凝縮する理論を指すとし、また狭義のBCS理論を電子-フォノンの相互作用による超伝導で、電子間有効相互作用の遅延効果が無視できるもの、すなわちEliashberg理論を用いる必要がないものを指すこととする。

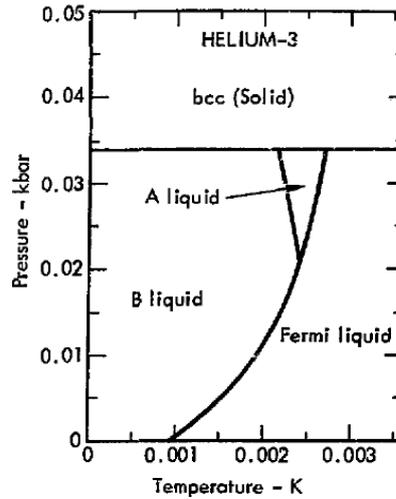


図 1.1: 無磁場での ${}^3\text{He}$ の相図 [21].

必要になる場面はそれだけではない. 例えば, 近年, ペアポテンシャルが周波数に対して奇の対称性を持つ奇周波数超伝導 [9, 10] がバルクで実現する可能性が注目されているが, 相互作用の遅延による奇周波数超伝導^{*4}を扱うためには, Eliashberg 理論, すなわち強結合超伝導の理論が必要となる.

本研究ではカイラル p 波超伝導を主たる対象とした. この超伝導秩序は d ベクトルが $\mathbf{d} = (k_x \pm ik_y)\mathbf{e}_z$ の形であり, その基底状態は時間反転対称性を自発的に破り, “右巻き”と“左巻き”の二状態^{*5}が縮退している^{*6}.

現在, カイラル p 波超伝導体が実現していると考えられている系として, 超流動ヘリウム 3-A 相 [12, 13] と Sr_2RuO_4 [14–17] の二つの系が知られている. 超流動ヘリウム 3-A 相は超流動ヘリウム 3-B 相に対して高温-高磁場側で実現する超流動相である (図 1.1). 三次元での超流動ヘリウム 3-A 相は, l ベクトル, d ベクトルの向きが空間的に変調し, 織目構造 (texture) を取ることによって量子化された渦が実現しており, 通常の超伝導・超流動における量子渦が存在しないという点で, 特異な超流動体になっている [18]. また二次元性が強い薄膜の系では, 壁に対する境界条件によって l ベクトルと d ベクトルが固定され, 軸が面直方向を向いた二次元カイラル p 波が実現していると考えられており [19], 実際に実験によって二つの基底状態がなすドメイン構造の可視化もなされている [20].

Sr_2RuO_4 は銅酸化物超伝導体 $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ とよく似たペロブスカイト型の結晶構造を持ち (図 1.2), 1994 年に 1.5 K で超伝導転移を示すことが発見された物質である. この物質は不純物効果 [22] や NMR (Nuclear Magnetic Resonance, 核磁気共鳴) 実験 [23] によって異方的なスピン三重項超伝導であることが強く示唆され, また μSR (muon spin relaxation) の測定 [24] や極 Kerr 効果の測定 [25] によって自発的な時間反転対称性の破れが観測されたことから, 結晶の対称性と併せ, カイラル p 波超伝導であると考えられている. ただし

^{*4} 例えば [11]

^{*5} $k_x + ik_y$ と $k_x - ik_y$ の二状態.

^{*6} 分野が異なった場合に “カイラル”(chiral) という単語の意味は必ずしも一致しない. 超伝導では時間反転対称性が破れていることをもって “カイラル” と呼ぶが, 例えばカイラル磁性体における “カイラル” はその意味ではない.

NMR での Knight シフトに方向依存性が見られない [26] ことや、エッジ流による自発磁化が観測されないこと [27], あるいはそれぞれの実験手法で見積もられたドメインの典型サイズが異なることなどから、カイラル p 波であることを疑問視する主張も強い。Sr₂RuO₄ が三つの Fermi 面を持つマルチバンド超伝導体であることもこの系の解析を難しくしており、2016 年現在でも秩序変数の対称性が何であるかという論争が続いている [28, 29].

以上のように、現在のところカイラル p 波は非常に限られた系でしか実現しておらず、さらに広く認められている系としてはヘウリム 3 ただ一つしか存在していない。しかしそれにもかかわらず、カイラル p 波超伝導・超流動は以下の点で非常に重要な系であると考えられる。

まず、カイラル p 波超伝導を含む p 波超伝導・超流動の Cooper 対が持つ角運動量は 1 であり、異方的超伝導の中で最も小さいことが挙げられる。すなわち角運動量が 2 である d 波や 3 である f 波と比較した場合に p 波は最も単純な異方的超伝導・超流動であり、その理論は異方的超伝導の理論の原型と考えることができる。

次に、カイラル p 波は二次元においてはノードがないという点が挙げられる。一般に異方的超伝導ではペアポテンシャルはノードを持ち、バルクにおいても低エネルギー状態が存在している。一方、二次元カイラル p 波のペアポテンシャルはノードを持たず、不純物がなければバルクではギャップ端以下の低エネルギー状態は存在しない。そのため二次元カイラル p 波超伝導は、 s 波のときと同様に、渦の内部に生じる低エネルギー状態がバルクの状態と明確に区別され、渦を解析しやすくなっている。

さらにカイラル p 波超伝導はそれ自身が豊富な物理現象の舞台となっている。例えば時間反転対称性の破れに由来する intrinsic Magnus effect (あるいは internal Magnus effect)[30–33] やエッジ流 [34, 35], あるいは運動量空間のトポロジーに由来する Majorana 準粒子 [36] の出現 [37–39] など、数多くの新奇な物理現象が理論、実験の両面から調べられている。

他にも p 波超伝導は様々な理由により興味を持たれている。例えば p 波はスピン三重項超伝導であり、Cooper 対にはスピン空間の自由度が存在している。すなわち内部自由度のある超流動体の系の一つとしても p 波超伝導は注目されている。さらに標準理論における真空のトポロジーと三次元カイラル p 波の真空のトポロジーが似ているという指摘もなされており、素粒子論を念頭に置いたヘウリム 3 の研究もなされている [18]。また近年は、その豊富な新奇現象の実現を目標として、冷却 Fermi 原子系 [40–45] などにおいてカイラル p 波超伝導・超流動が実現する系を人工的に設計・作成しようとする試みが、幾つもなされている。本研究では以上を念頭に置き、カイラル p 波超伝導を主たる対象とした。

1.2 目的

二体相互作用のある電子系を考える際、相互作用の最低次の平均場として Hartree 項 (Hartree ポテンシャル), Fock 項 (Fock ポテンシャル), Cooper 項を考えることができる。Hartree 項は密度の平均場であり、Fock 項は交換項とも呼ばれる。Cooper 項は消滅 (生成) 演算子同士の積の平均であり、通常は常伝導状態には存在しておらずペアポテンシャルとして超伝導の秩序変数となる。弱結合超伝導の理論的研究において、Hartree 項および Fock 項は常伝導状態においても存在するため、化学ポテンシャル μ にくりこまれているとみなし、また μ は常伝導状態と超伝導状態ではほとんど変化しないとしてその変化は無視するこ

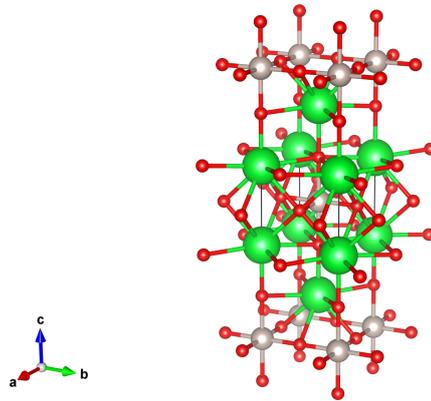


図 1.2: Sr_2RuO_4 の結晶構造 [46] (緑球: ストロンチウム原子, 白球: ルテニウム原子, 赤球: 酸素原子). 描画には VESTA[47] を用いた.

とがほとんどである. 実際には一様系の超伝導と常伝導との化学ポテンシャルには Δ^2/μ 程度の差があることが知られている [2, 48] が⁷, 通常の超伝導では $\Delta \ll \mu$ であるため⁸, 銅酸化物超伝導体や鉄砒素系超伝導体などの高温超伝導体⁹を考える場合でなければ [49, 50], この効果は小さいと考えられている.

しかし, 超伝導と常伝導の接合や渦 (量子化された磁束) といった非一様系を考える場合には, 超伝導秩序変数 Δ の空間変調の効果が入ってくるため, 一般に一様系の結果だけを用いて議論することはできない. 例えば常伝導-超伝導接合において, s 波超伝導は低エネルギー束縛状態を作らない [51, 52] が, p 波超伝導や d 波超伝導は低エネルギー束縛状態を作る場合があることが知られている [51, 53–55]. 一方, 渦における物理はしばしば超伝導内部の円筒状の常伝導部分として素朴に定式化されるが, 常伝導-超伝導接合では低エネルギー束縛状態を作らない s 波であっても, 渦内部には低エネルギー束縛状態が存在している [56]. これらは Δ^2/μ の大きさの物理を無視する近似理論でも議論・導出が可能であり, 系の詳細による多様性の多くは Δ の位相の運動量・実空間の対称性に由来している.

以上のように, 常伝導状態に存在する項であったとしても, 非一様系の場合には化学ポテンシャル μ あるいは周波数へのくりこみが一様系と同じように行なうことが可能であるかどうかは非自明であり, 無視してよいかは分からない. また強結合超伝導の場合には, 相互作用の遅延の影響により Fock 項を常伝導状態のそれとは異なるものとして明示的に扱う必要が生じる [2, 57]. この場合は一様系において明示的に扱っていることもあり, 非一様系の場合に一様系の場合と同じものと扱ってよいかどうかはより非自明である. しかしながら, 一様系に対する豊富な研究に対して, これまでのところ微視的な理論に基づき, 低エネルギー束縛状態に着目するという観点からの, 渦や接合系などの非一様系における Eliashberg 方程式に従う強結合超伝導の解析はほとんど行なわれていない.

非一様系に対して, 上記に関連する研究が行なわれてこなかった, 少なくとも論文に記載

⁷ 化学ポテンシャルの違いの程度は強結合の場合も弱結合の場合と変わらない [2].

⁸ 化学ポテンシャルすなわち Fermi エネルギー μ が典型的には $1 \times 10^3 \text{ K}$ から $1 \times 10^4 \text{ K}$ であるのに対して Δ は典型的には 1 K から 10 K である.

⁹ Δ/μ が大きい (典型的には 0.1 程度の) 超伝導体

されてこなかった理由としては、本論文でも示されるように、従来型の s 波超伝導の場合には、Eliashberg 方程式によって自己エネルギーへ周波数依存性を導入した場合でも、渦に定性的な変化が生じないことが考えられる。しかしこれは本来は自明なことではなく、本研究で行なうような何らかの議論が必要である。また異方的超伝導においては本論文で見出されるように非自明かつ定性的な効果が生じるが、それについても無視してよい理由はない。

以上をふまえ、本研究では非一様系における自己エネルギー対角成分 (Fock 項) の影響を調べることを目的とする。系としては強結合超伝導を考え、その弱結合極限として Fock 項を明示的に扱った弱結合超伝導を考える。非一様な系としては孤立した磁束量子渦を対象とする。本研究では微視的な手法によって上記の系の解析を行ない、方程式で Fock 項 (強結合性) の存在を陽に取りこむことが、渦においてどのような形で現れるかを考察する。

本論文は以下の構成を取る。まず第 2 章では本論文で使用する解析手法をまとめる。最初の 2.1 節では強結合超伝導に適用可能な理論形式として、超伝導の理論を経路積分の枠組みの下で定式化する。続く 2.2 節では、2.1 節で得られる式から本論文で主に用いることとなる“準古典理論”を導く。2.3 節では強結合理論の典型例として、フォノンによる超伝導の理論を簡単にまとめる。第 3 章では準古典理論を用いた孤立渦の解析手法について述べる。本研究で得られた結果を第 4 章で記述する。まず 4.1 節で数値計算の詳細を述べる。本研究で得られた結果は主に二つに分けられる。一つは弱結合極限でも無視できない大きさを持つ自己エネルギー対角項 (Fock 項) の存在であり、もう一つは自己エネルギー対角項の存在により現出する円筒対称性を自発的に破る渦の発見である。4.2 節および 4.3 節では上記二つの結果についてそれぞれ記述する。最後の第 5 章では結論と将来の展望を述べまとめとする。

第2章

超伝導の理論

本章では, 本研究において主に用いられることとなる方程式 (Eliashberg 方程式および Eilenberger 方程式) を経路積分から導出し, その詳細と周辺を述べる.

2.1 経路積分による超伝導の記述

本節では, 経路積分 (汎関数積分) を用いて Eliashberg 方程式とその自由エネルギー^{*1}の表式を導出する^{*2}. 本節では簡単のため波数 \mathbf{k} は連続であるとし (連続体模型), 必要があれば原子の大きさ程度のカットオフが存在しているとする. 以下では $1, 2$ 等は虚時間, スピン, 位置座標を併せた座標変数の, \int_1, \int_2 等をそれらを積分変数とした積分の省略表記とし, それぞれの要素を $\tau_1, \varsigma_1, \mathbf{x}_2$ 等と書くこととする. 例えばスピン S を持つ粒子に対しては

$$\int_1 = \int_0^{\hbar/T} d\tau_1 \int d\mathbf{x}_1 \sum_{\varsigma_1=-S}^S \quad (2.1)$$

である. 以下では電子を考えスピンの大きさ $S = 1/2$ とする. また $\delta(1-2)$ は $\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\delta(\tau_1 - \tau_2)\delta_{\varsigma_1, \varsigma_2}$ の略記とする. ベクトルポテンシャル, スカラーポテンシャルはそれぞれ \mathbf{A} および A_0 と書き, q は電子の電荷とする. また空間次元は d とする.

2.1.1 有効作用

m を電子の有効質量, μ を電子の化学ポテンシャル, \hat{c}^\dagger, \hat{c} を電子の生成消滅演算子としたとき, 電子系のハミルトニアンは通常

$$H_e = \sum_{\varsigma} \int d\mathbf{x} \hat{c}^\dagger_{\varsigma}(\mathbf{x}) H_0(\mathbf{x}) \hat{c}_{\varsigma}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sum_{\varsigma_1, \varsigma_2} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 u_0(\mathbf{x}_1, \varsigma_1, \mathbf{x}_2, \varsigma_2) \hat{c}^\dagger_{\varsigma_1}(\mathbf{x}_1) \hat{c}^\dagger_{\varsigma_2}(\mathbf{x}_2) \hat{c}_{\varsigma_2}(\mathbf{x}_2) \hat{c}_{\varsigma_1}(\mathbf{x}_1) \quad (2.2a)$$

$$H_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} - q\mathbf{A}(\mathbf{x}) \right)^2 - qA_0(\mathbf{x}) - \mu \quad (2.2b)$$

^{*1} 本論文では大正準分配関数, 大正準ポテンシャル (熱力学関数) をそれぞれ単に分配関数, 自由エネルギーと呼ぶことにする.

^{*2} 多体量子系における経路積分の手法を詳しく記述した教科書としては [58–60] 等が有名である. 本章の経路積分部分に関する内容も基本的にはこれらに従っている. また経路積分による超伝導の定式化や記法に関して [61, 62] も参考にした.

という形, またフォノン (一般には何らかの Bose 粒子^{*3}) のハミルトニアンは生成消滅演算子を \hat{b}^\dagger, \hat{b} としたとき

$$H_p = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \hbar\omega(\mathbf{k}) \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{b}(-\mathbf{k}) \quad (2.3)$$

という形で書ける^{*4}. ただし簡単のためフォノンの非線形部分およびフォノンのブランチの区別は考えず, フォノンの周波数は一律 $\omega(\mathbf{k})$ として書けるとした. またフォノンにとって系は一様であり波数がよい量子数になっていると仮定して, 電子系と違ってあらかじめ Fourier 変換を行なっている. $u_0(\mathbf{x}_1, \zeta_1, \mathbf{x}_2, \zeta_2)$ の項は電子間相互作用を表わし, 例えば有効 Coulomb 相互作用の場合は k_{TF}^{-1} を Thomas・Fermi 遮蔽長, $r_{12} = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$ として

$$u_0(\mathbf{x}_1, \zeta_1, \mathbf{x}_2, \zeta_2) = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_4) \delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3) \delta(\tau_1 - \tau_4) \delta(\tau_2 - \tau_3) \delta(\tau_1 - \tau_2) \frac{q^2 e^{-k_{\text{TF}} r_{12}}}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (2.4)$$

である.

電子-フォノンの相互作用作用ハミルトニアンの模型は演算子形式では

$$H_{\text{ep}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{y} \int d\mathbf{x} \sum_{\zeta} \hat{c}_{\zeta}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{c}_{\zeta}(\mathbf{x}) v_{\text{ep}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{y}) \quad (2.5)$$

という形が採用されることが多い^{*5}. ここで $v_{\text{ep}}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は電子-フォノンの結合で通常は $v_{\text{ep}}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ の形であり, また \mathbf{u} は何らかの座標で表わした原子の変位である. フォノンを量子化し, $\mathbf{u}(\mathbf{y})$ をフォノンの生成消滅演算子 \hat{b}^\dagger, \hat{b} を用いて $i\mathbf{u}_0[\hat{b}(\mathbf{y}) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{y})]$ と書き, \mathbf{y} に関する Fourier 変換を行なうと,

$$H_{\text{ep}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \sum_{\zeta} \hat{c}_{\zeta}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{c}_{\zeta}(\mathbf{x}) \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_0 v_{\text{ep}}(\mathbf{x}, \mathbf{k}) [b(\mathbf{k}) + \hat{b}^\dagger(-\mathbf{k})] \quad (2.6)$$

となる. ただし \mathbf{u}_0 は波数 \mathbf{k} のフォノンの進行方向を向くベクトルであり, フォノンの縦波成分のみを扱っていることを意味している. 以下では生成消滅演算子以外をまとめて v と書き, また相互作用をより一般化して例えば電子のスピンが相互作用で変わる場合にも適用できる表示を行なう.

以下では遅延効果を導入するため, 系を経路積分で記述することにする^{*6}. 経路積分の定式化を行なうに当たり, 相互作用に虚時間への依存性を導入し, ハミルトニアンに代わって系を記述することになる作用を

$$S_{\text{tot}}[\bar{b}, b, \bar{c}, c] = S_e[\bar{c}, c] + S_p[\bar{b}, b] + S_{\text{e-p}}[\bar{b}, b, \bar{c}, c], \quad (2.7a)$$

$$S_e[\bar{c}, c] = \int_1 \bar{c}(1) (\hbar\partial_{\tau_1} + H_0(1)) c(1) + \frac{1}{2} \int_{1234} \bar{c}(1)\bar{c}(2)u_0(1, 2, 3, 4)c(3)c(4), \quad (2.7b)$$

$$S_p[\bar{b}, b] = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n [-i\hbar v_n + \hbar\omega(\mathbf{k})] \bar{b}(iv_n, \mathbf{k}) b(iv_n, \mathbf{k}), \quad (2.7c)$$

$$S_{\text{e-p}}[\bar{b}, b, \bar{c}, c] = \int_{12} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n v(1, 2, iv_n, \mathbf{k}) [\bar{b}(iv_n, \mathbf{k}) + b(-iv_n, -\mathbf{k})] \bar{c}(1)c(2), \quad (2.7d)$$

$$H_0(1) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} - q\mathbf{A}(\mathbf{x}_1) \right)^2 - qA_0(\mathbf{x}_1) - \mu \quad (2.7e)$$

^{*3} スピンは 0 とする.

^{*4} 零点振動の項 $1/2$ は省略した.

^{*5} 例えば [63].

^{*6} 有効相互作用の遅延が重要な場合, ハミルトニアンではなく経路積分を用いて議論する必要がある場合があることも知られており [64], 一般に経路積分を使うのが自然な場合が多いと考えられる.

と書くことにする. ここで $\nu_n = 2n\pi k_B T/\hbar$ は Bose 粒子の松原周波数, \bar{c}, c は電子の生成消滅演算子に対応する変数 (Grassmann 数), \bar{b}, b はフォノンの生成消滅演算子に対応する変数 (複素数) である. 以下ではフォノンの状態密度等は電子状態によって影響をほとんど受けない^{*7}とし, さらにフォノンにとって空間反転対称性が破れていないとして, 分散に $\omega(\mathbf{k}) = \omega(-\mathbf{k})$ の関係も仮定する. またフォノンに関しては波数と同様周波数もあらかじめ Fourier 変換を行なっている. $v(1, 2, i\nu_n, \mathbf{k})$ はハミルトニアンの場合と同様に電子フォノン相互作用を一般的に表わしている.

系の分配関数は S_{tot} を用いて

$$\mathcal{Z} = \int D(\bar{b}, b) \int D(\bar{c}, c) e^{-S_{\text{tot}}[\bar{b}, b, \bar{c}, c]/\hbar} \quad (2.8)$$

と書くことができる. Bose 粒子の自由度 b, \bar{b} は二次形式をなしているから, 積分によって消去することができる. b および \bar{b} を消去すると, 残った電子の自由度によって表わされた分配関数は

$$\mathcal{Z} = \int D(\bar{c}, c) e^{-S[\bar{c}, c]/\hbar}, \quad (2.9a)$$

$$S[\bar{c}, c] = S_c[\bar{c}, c] - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \sum_n \frac{1}{-i\hbar\nu_n + \hbar\omega(\mathbf{k})} \rho(-i\nu_n, -\mathbf{k}) \rho(i\nu_n, \mathbf{k}), \quad (2.9b)$$

$$\rho(i\nu_n, \mathbf{k}) = \int_{12} v(1, 2, i\nu_n, \mathbf{k}) \bar{c}(1) c(2) \quad (2.9c)$$

と書ける. ただし積分によって生じる定数部分は省略した. (2.9b) の右辺第 2 項のダミー変数を $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, $i\nu_n \rightarrow -i\nu_n$ として足して 2 で割ると

$$(\text{2nd term of r.h.s. of (2.9b)}) = -\frac{1}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \sum_n \frac{2\omega(\mathbf{k})/\hbar}{\nu_n^2 + \omega^2(\mathbf{k})} \rho(-i\nu_n, -\mathbf{k}) \rho(i\nu_n, \mathbf{k}) \quad (2.10)$$

となるから, 改めて作用を書き直すと

$$S[\bar{c}, c] = S_0[\bar{c}, c] + S_1[\bar{c}, c], \quad (2.11a)$$

$$S_0[\bar{c}, c] = \int_1 \bar{c}(1) (\hbar\partial_{\tau_1} + H_0(1)) c(1), \quad (2.11b)$$

$$S_1[\bar{c}, c] = -\frac{1}{2} \int_{1234} \bar{c}(1) \bar{c}(2) u(1, 2, 3, 4) c(3) c(4), \quad (2.11c)$$

$$u(1, 2, 3, 4) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \sum_n \frac{2\omega(\mathbf{k})/\hbar}{\nu_n^2 + \omega^2(\mathbf{k})} v(2, 3, -i\nu_n, -\mathbf{k}) v(1, 4, i\nu_n, \mathbf{k}) - u_0(1, 2, 3, 4) \quad (2.11d)$$

となる [60, 65]. 通常は ν による Bose 粒子と電子の相互作用は逆過程も同じだけ存在し, u_0 は二体の相互作用の行列要素だから, u は粒子の入れ替えに対する対称性 $u(1, 2, 3, 4) = u(4, 2, 3, 1) = u(1, 3, 2, 4) = u(2, 1, 4, 3)$ を満たすとしてよい. 後述の 2.2.2 節を除いて, 本節で以下示される方程式群は u の入れ替えの対称性のみを用いて導出されており, (2.11d) の具体形には依存していない.

^{*7} あるいは最初からフォノンの自己エネルギーがくりこまれた周波数を使用しているとする. Migdal の定理 [7] に相当.

2.1.2 補助場

作用 S に対して, 複素補助場 $\bar{\Delta}, \Delta$ および実補助場 ϱ を導入して Stratonovich-Hubbard 変換 [66, 67] を行なう^{*8}. u^{-1} を

$$\int_{34} u^{-1}(1, 2, 3, 4)u(3, 4, 5, 6) = \int_{34} u(1, 2, 3, 4)u^{-1}(3, 4, 5, 6) = \delta(1-5)\delta(2-6) \quad (2.12)$$

として

$$\text{const.} = \int D(\bar{\Delta}, \Delta) \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \int_{1234} \bar{\Delta}(1, 2)u^{-1}(1, 2, 3, 4)\Delta(3, 4) \right], \quad (2.13a)$$

$$\text{const.} = \int D\varrho \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \int_{1234} \varrho(1, 2)u^{-1}(1, 2, 3, 4)\varrho(3, 4) \right] \quad (2.13b)$$

を分配関数の式に挿入し, 変数変換

$$\bar{\Delta}(1, 2) \rightarrow \bar{\Delta}(1, 2) - \int_{56} \bar{c}(5)\bar{c}(6)u(5, 6, 1, 2), \quad (2.14a)$$

$$\Delta(3, 4) \rightarrow \Delta(3, 4) - \int_{56} u(3, 4, 5, 6)c(5)c(6), \quad (2.14b)$$

$$\varrho(1, 2) \rightarrow \varrho(1, 2) + i \int_{56} c(5)\bar{c}(6)u(5, 6, 1, 2) \quad (2.14c)$$

を行なうと

$$\begin{aligned} S[\bar{c}, c] &\rightarrow S_0[\bar{c}, c] \\ &+ \frac{1}{2} \int_{1234} \bar{\Delta}(1, 2)u^{-1}(1, 2, 3, 4)\Delta(3, 4) \\ &- \frac{1}{2} \int_{12} \bar{c}(1)\bar{c}(2)\Delta(1, 2) - \frac{1}{2} \int_{12} \bar{\Delta}(1, 2)c(1)c(2) \\ &- \frac{1}{2} \int_{1234} i\varrho(1, 2)u^{-1}(1, 2, 3, 4)i\varrho(3, 4) + \int_{12} c(1)\bar{c}(2)i\rho(1, 2) \end{aligned} \quad (2.15)$$

となる^{*9}. 後の便宜のため, 補助場は

$$\Delta(1, 2) = -\Delta(2, 1), \quad (2.16a)$$

$$\bar{\Delta}(1, 2) = -\bar{\Delta}(2, 1) \quad (2.16b)$$

を満たしているとする.

二次形式の形を明示するため, 変数 ψ および $\bar{\psi}$ を

$$\psi(1) = \begin{pmatrix} \bar{c}(1) \\ c(1) \end{pmatrix}, \quad (2.17a)$$

$$\bar{\psi}(1) = (\bar{c}(1) \quad c(1)) \quad (2.17b)$$

^{*8} $\bar{\Delta}$ と Δ は Cooper 項, ϱ は Fock 項に対応している. Hartree 項は μ にくりこんであるとする.

^{*9} $(\bar{\Delta}, \Delta)$ の項と ϱ の項で二重に取るのは, k_F 付近の電子のみが平均場に寄与し, また補助場の変動に関する特徴的な長さが k_F^{-1} に比べてずっと長いという条件を課したためである. これは, もともとの波数積分は全波数に渡っている一方で, 補助場によって切り出される波数積分部分がそれぞれ異なっていることを意味・意図している [58, 60].

と定義する. $\psi, \bar{\psi}$ を用いると S を

$$S[\bar{c}, c] = -\frac{1}{2} \int_{1234} i\rho(1, 2)u^{-1}(1, 2, 3, 4)i\rho(3, 4) + \frac{1}{2} \int_{1234} \bar{\Delta}(1, 2)u^{-1}(1, 2, 3, 4)\Delta(3, 4) \\ + \int_{12} \bar{\psi}(1) \left(-\frac{1}{2} \mathfrak{h}(1, 2) \right) \psi(2), \quad (2.18a)$$

$$\mathfrak{h}(1, 2) = \begin{pmatrix} \Delta(1, 2) & \delta(1-2) [-\hbar\partial_{\tau_2} - H_0(2)] + i\rho(2, 1) \\ \delta(1-2) [-\hbar\partial_{\tau_2} + H_0^*(2)] - i\rho(1, 2) & \bar{\Delta}(1, 2) \end{pmatrix} \quad (2.18b)$$

と書くことができる. $\mathfrak{h}(1, 2)$ を行列 \mathfrak{h} の行列要素とみなした場合に行列 \mathfrak{h} が歪対称行列であることに注意して, $\bar{\psi}$ と ψ に関する (すなわち \bar{c}, c に関する) 汎関数積分を実行すると

$$\mathcal{Z} = \int D(\bar{\Delta}, \Delta) \int D\rho \int D(\bar{c}, c) e^{-S[\bar{\Delta}, \Delta, \rho, \bar{c}, c]/\hbar} \\ = \int D(\bar{\Delta}, \Delta) \int D\rho \exp \left[\ln \text{pf} \left(-\frac{1}{\hbar} \mathfrak{h} \right) \right. \\ \left. - \frac{1}{2\hbar} \int_{1234} \bar{\Delta}(1, 2)u^{-1}(1, 2, 3, 4)\Delta(3, 4) + \frac{1}{2\hbar} \int_{1234} i\rho(1, 2)u^{-1}(1, 2, 3, 4)i\rho(3, 4) \right] \quad (2.19)$$

である^{*10}. 行列式ではなく Pfaff 多項式であるのは, $(\bar{c}, c) \rightarrow (\bar{\psi}, \psi)$ で次元が倍になっていることの反映である^{*11}. \mathfrak{h} の次元は 4 の倍数であるから^{*12}

$$\ln \text{pf} \left(-\frac{1}{\hbar} \mathfrak{h} \right) = \ln \det \left(-\frac{1}{\hbar} \mathfrak{h} \right)^{1/2} = \frac{1}{2} \ln \det \left(-\frac{1}{\hbar} \mathfrak{h} \right) \quad (2.22)$$

である. $\check{G}_0^{-1}, \check{\Sigma}, \check{G}^{-1}$ を

$$\hbar\check{G}_0^{-1}(1, 2) = \begin{pmatrix} \delta(1-2) [-\hbar\partial_{\tau_2} - H(2)] & 0 \\ 0 & \delta(1-2) [\hbar\partial_{\tau_2} - H_0^*(2)] \end{pmatrix}, \quad (2.23a)$$

$$\check{\Sigma}(1, 2) = \begin{pmatrix} i\rho(2, 1) & \Delta(1, 2) \\ -\bar{\Delta}(1, 2) & i\rho(1, 2) \end{pmatrix}, \quad (2.23b)$$

$$\hbar\check{G}^{-1}(1, 2) = \hbar\check{G}_0^{-1}(1, 2) - \check{\Sigma}(1, 2) \quad (2.23c)$$

^{*10} 以下の \det, pf の適用対象は, $\Delta a, \Delta \tau$ を空間, 時間座標の離散化格子定数として, 必要があれば $\lim_{\Delta a \rightarrow 0} \lim_{\Delta \tau \rightarrow 0} (\Delta a)^d \Delta \tau$ 等がかかっているものとする. この項は tr を積分で評価する際に測度となる.

^{*11} η_1, \dots, η_{4n} を Grassmann 数とする. $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1 \dots \eta_{4n})^T$ と $4n$ 次元の歪対称行列 M に対して

$$\boldsymbol{\eta}^T M \boldsymbol{\eta} = \sum_{i,j=1}^{4n} \eta_i M_{ij} \eta_j = \sum_{i<j} (2M_{ij}) \eta_i \eta_j \quad (2.20)$$

であることに注意すると, $\int D\eta_1 \dots D\eta_{4n} \exp[-\boldsymbol{\eta}^T M \boldsymbol{\eta}]$ で残る項は

$$\sum_{\sigma} \eta_{\sigma(1)} \eta_{\sigma(2)} (2M_{\sigma(1)\sigma(2)}) \dots \eta_{\sigma(4n-1)} \eta_{\sigma(4n)} (2M_{\sigma(4n-1)\sigma(4n)})$$

である. ここで σ は置換であり, $\sigma(2i-1) < \sigma(2i), \sigma(1) < \sigma(3) < \dots < \sigma(4n-1)$ を満たす空間を走るとする. Grassmann 数の積分を実行すると, 置換に対し符号 -1 が付くから, Pfaff 多項式の定義と併せると

$$\int D\eta_1 \dots D\eta_{4n} \exp[-\boldsymbol{\eta}^T M \boldsymbol{\eta}] = \sum_{\sigma} \text{sgn}(\sigma) (2M_{\sigma(1)\sigma(2)}) \dots (2M_{\sigma(4n-1)\sigma(4n)}) \\ = \text{pf}(2M) \quad (2.21)$$

が得られる.

^{*12} スピン空間 \times 南部空間の $2 \times 2 = 4$.

と定義して, 補助場のゆらぎが小さいとして $\bar{\Delta}, \Delta, \varrho$ に関する停留値近似を行なうと, 自由エネルギー \mathcal{J} は

$$\begin{aligned}\mathcal{J} &= -k_B T \ln \mathcal{Z} \\ &= -\frac{k_B T}{2} \text{tr} \ln \left(-\check{G}^{-1} \right) + \frac{k_B T}{2\hbar} \int_{1234} \bar{\Delta}(1, 2) u^{-1}(1, 2, 3, 4) \Delta(3, 4) \\ &\quad - \frac{k_B T}{2\hbar} \int_{1234} i\varrho(1, 2) u^{-1}(1, 2, 3, 4) i\varrho(3, 4)\end{aligned}\quad (2.24)$$

となる. ここで $\ln \det = \text{tr} \ln$ および

$$\check{G}^{-1} = \mathfrak{h}(1, 2) \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.25a)$$

$$\det \left(-\frac{1}{2\hbar} \mathfrak{h} \right) = \det \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \det \left(-\check{G}^{-1} \right) = \det \left(-\check{G}^{-1} \right) \quad (2.25b)$$

を用いた^{*13}.

2.1.3 Green 関数

電子の二点相関関数 (Green 関数) G

$$G(1, 2) = -\langle\langle c(1)\bar{c}(2) \rangle\rangle = -\frac{1}{\mathcal{Z}} \int D(\bar{c}, c) e^{-S[\bar{c}, c]/\hbar} c(1)\bar{c}(2) \quad (2.26)$$

を求めるため源 $J(1, 2)$ を導入する.

$$\mathcal{Z}_J = \int D(\bar{c}, c) e^{-S[\bar{c}, c]/\hbar - \int_{12} J(1, 2) c(1)\bar{c}(2)} \quad (2.27)$$

とすると

$$G(1, 2) = \left. \frac{\delta \ln \mathcal{Z}_J}{\delta J(1, 2)} \right|_{J=0} \quad (2.28)$$

と書くことができる. 自由エネルギーの式に J を入れると, (2.24) では J は $\check{\Sigma}$ の中で ϱ に足し合わされた形として出現する. 公式

$$\frac{\delta}{\delta \mathbf{w}} \text{tr} \ln W^{-1}[\mathbf{w}] = \text{tr} \left(W \frac{\delta}{\delta \mathbf{w}} W^{-1}[\mathbf{w}] \right) \quad (2.29)$$

を (2.24) および (2.28) に適用すると

$$G(1, 2) = \check{G}_{11}(1, 2) \quad (2.30)$$

となる (\check{G} の添字は南部空間での位置を表わすとする).

同様に源 \bar{J} を

$$\mathcal{Z}_{\bar{J}} = \int D(\bar{c}, c) e^{-S[\bar{c}, c]/\hbar + \int_{12} \bar{J}(1, 2) \bar{c}(1)c(2)} \quad (2.31)$$

と入れることによって

$$\bar{G}(1, 2) = \langle\langle \bar{c}(1)c(2) \rangle\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int D(\bar{c}, c) e^{-S[\bar{c}, c]/\hbar} \bar{c}(1)c(2) \quad (2.32)$$

^{*13} 前述のように tr は $\int d\mathbf{r} \int d\tau$ の積分によって評価できる.

を

$$\bar{G}(1, 2) = \left. \frac{\delta \ln \mathcal{Z}_J}{\delta \bar{J}(1, 2)} \right|_{\bar{J}=0} \quad (2.33)$$

と書くことができるから、停留値近似の下では

$$\bar{G}(1, 2) = \check{G}_{22}(1, 2) \quad (2.34)$$

となる。\$G(1, 2) = \bar{G}(2, 1)\$ だから \$\check{G}_{11}(1, 2) = \check{G}_{22}(2, 1)\$ である。異常 Green 函数

$$F(1, 2) = -\langle\langle c(1)c(2) \rangle\rangle = -\frac{1}{\mathcal{Z}} \int D(\bar{c}, c) e^{-S[\bar{c}, c]/\hbar} c(1)c(2) \quad (2.35a)$$

$$\bar{F}(1, 2) = -\langle\langle \bar{c}(1)\bar{c}(2) \rangle\rangle = -\frac{1}{\mathcal{Z}} \int D(\bar{c}, c) e^{-S[\bar{c}, c]/\hbar} \bar{c}(1)\bar{c}(2) \quad (2.35b)$$

も同様にして、源を加えて変分することにより

$$F(1, 2) = \check{G}_{12}(1, 2) \quad (2.36)$$

$$\bar{F}(1, 2) = -\check{G}_{21}(1, 2) \quad (2.37)$$

が得られる。すなわち \$\check{G}\$ は

$$\check{G}(1, 2) = \begin{pmatrix} G(1, 2) & F(1, 2) \\ -\bar{F}(1, 2) & \bar{G}(1, 2) \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

と書け、南部形式における Green 函数 (Gor'kov Green 函数) とみなせる^{*14}。よって \$\check{\Sigma}\$ は南部形式における自己エネルギーであり、(2.23c) は Dyson 方程式 (Gor'kov 方程式) とみなすことができる。

2.1.4 ギャップ方程式 (Eliashberg 方程式)

(2.29) を用いて \$J\$ を \$\bar{\Delta}\$ で変分すると

$$\frac{\delta J}{\delta \bar{\Delta}(1, 2)} = -\frac{k_B T}{2\hbar} \text{Tr} \check{G}(2, 1) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{k_B T}{2\hbar} \int_{34} u^{-1}(1, 2, 3, 4) \Delta(3, 4) \quad (2.39)$$

となる。\$J\$ は \$\bar{\Delta}\$ に関して停留値を取るから変分は 0 であり、すなわち

$$\check{G}_{12}(2, 1) = \int_{12} u^{-1}(1, 2, 3, 4) \Delta(3, 4) \quad (2.40)$$

である。(2.40) の両辺に \$\int_{12} u(5, 6, 1, 2)\$ を作用させると

$$\int_{34} u(1, 2, 3, 4) \check{G}_{12}(3, 4) = \Delta(2, 1) \quad (2.41)$$

が得られる。同様にして

$$\int_{34} \check{G}_{21}(3, 4) u(3, 4, 1, 2) = -\bar{\Delta}(2, 1), \quad (2.42a)$$

$$\frac{1}{2} \int_{34} u(1, 2, 3, 4) \left(\check{G}_{21}(3, 4) + \check{G}_{22}(4, 3) \right) = -i\rho(2, 1) \quad (2.42b)$$

^{*14} Green 函数の定義には符号や引数の順序に関して幾つかの流儀があり、どの定義を選ぶかにより Dyson 方程式で \$\check{\tau}_3\$ の有無や \$H_0\$ の符号などに差異が生じる。本論文では \$\check{\tau}_3\$ を含める形で Gor'kov Green 函数を定義した。

が得られる.

$$\Sigma(1, 2) = i\rho(2, 1) \quad (2.43a)$$

$$\bar{\Sigma}(1, 2) = i\rho(1, 2) \quad (2.43b)$$

すなわち

$$\check{\Sigma}(1, 2) = \begin{pmatrix} \Sigma(1, 2) & \Delta(1, 2) \\ -\bar{\Delta}(1, 2) & \bar{\Sigma}(1, 2) \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

と置くと, 前小節の内容と併せてギャップ方程式 (Eliashberg 方程式)

$$\Delta(2, 1) = \int_{34} u(1, 2, 3, 4)F(3, 4), \quad (2.45a)$$

$$\bar{\Delta}(2, 1) = \int_{34} u(1, 2, 3, 4)\bar{F}(3, 4), \quad (2.45b)$$

$$\Sigma(2, 1) = \int_{34} u(1, 2, 3, 4)G(3, 4), \quad (2.45c)$$

$$\bar{\Sigma}(2, 1) = \int_{34} u(1, 2, 3, 4)\bar{G}(3, 4) \quad (2.45d)$$

が得られる. Green 関数は定義より入れ替えの対称性

$$G(1, 2) = \bar{G}(2, 1) \quad (2.46a)$$

$$F(1, 2) = -F(2, 1) \quad (2.46b)$$

$$\bar{F}(1, 2) = -\bar{F}(2, 1) \quad (2.46c)$$

を満たす. ギャップ方程式 (2.45) において (2.46) を用いて引数を入れ替えると, u の対称性と併せて, 自己エネルギーの対称性として (2.16) および $\bar{\Sigma}(1, 2) = \Sigma(2, 1)$ が満たされていることが分かる.

偶周波数超伝導では F および \bar{F} は

$$(F(1, 2))^* = \bar{F}(2, 1) \quad (2.47)$$

を満たす $((\dots)^*$ は複素共軛)^{*15}. よって $u(1, 2, 3, 4)$ を実とするとギャップ方程式より

$$\begin{aligned}\Delta(1, 2) &= \int_{34} u(2, 1, 3, 4)F(3, 4) \\ &= \int_{34} u(2, 1, 3, 4) (\bar{F}(4, 3))^* \\ &= \left(\int_{34} u(1, 2, 3, 4)\bar{F}(3, 4) \right)^* \\ &= (\bar{\Delta}(2, 1))^*\end{aligned}\quad (2.48)$$

が満たされている.

2.1.5 自由エネルギー

本小節では \check{G} と $\check{\Sigma}$ が既知として \mathcal{J} を求める. まず, s を実数, $\check{\Sigma}$ を与えられた条件下での解として, G_s を

$$\hbar\check{G}_s^{-1} = \hbar\check{G}_0^{-1} - s\check{\Sigma} \quad (2.49)$$

と定義する ($\check{G}_s^{-1}\check{G}_s = \check{\tau}_0\mathbf{1}$ である). 定義より $\check{G} = \check{G}_{s=1}$ であり $\check{G}_0 = \check{G}_{s=0}$ である. このとき

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial s} \text{tr} \ln (-\check{G}_s^{-1}) &= \text{tr} \left[-\check{G}_s \frac{\partial}{\partial s} (-\check{G}_s^{-1}) \right] \\ &= \frac{1}{\hbar} \text{tr} (-\check{G}_s \check{\Sigma}),\end{aligned}\quad (2.50)$$

すなわち \check{G}^{-1} を含む項は

$$\text{tr} \ln (-\check{G}^{-1}) - \text{tr} \ln (-\check{G}_0^{-1}) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^1 ds \text{tr} (\check{G}_s \check{\Sigma}) \quad (2.51)$$

^{*15} 偶周波数超伝導の時, 演算子形式では異常 Green 関数は T を虚時間での時間順序演算子として $F(1, 2) = -\langle n | T \hat{\rho} \hat{c}(1) \hat{c}(2) | n+2 \rangle$, $\bar{F}(1, 2) = -\langle n+2 | T \hat{c}^\dagger(1) \hat{c}^\dagger(2) \hat{\rho} | n \rangle$ と書ける. ただし $\hat{\rho} = e^{-\beta \hat{H}} / \mathcal{Z}$ は密度行列で $|n+2\rangle$ は $|n\rangle$ に 2 粒子を付け加えた状態とする. このとき

$$\begin{aligned}(F^\dagger(1, 2))^* &= -\theta(\tau_1 - \tau_2) \sum_n \langle n+2 | \hat{c}^\dagger(1) \hat{c}^\dagger(2) \hat{\rho} | n \rangle^* + \theta(\tau_2 - \tau_1) \sum_n \langle n+2 | \hat{c}^\dagger(2) \hat{c}^\dagger(1) \hat{\rho} | n \rangle^* \\ &= -\theta(\tau_1 - \tau_2) \sum_{mn} \langle n+2 | \hat{c}^\dagger(1) | m \rangle^* \langle m | \hat{c}^\dagger(2) \hat{\rho} | n \rangle^* \\ &\quad + \theta(\tau_2 - \tau_1) \sum_{mn} \langle n+2 | \hat{c}^\dagger(2) | m \rangle^* \langle m | \hat{c}^\dagger(1) \hat{\rho} | n \rangle^* \\ &= -\theta(\tau_1 - \tau_2) \sum_n \langle n | \hat{\rho} \hat{c}(2) \hat{c}(1) | n+2 \rangle + \theta(\tau_2 - \tau_1) \sum_n \langle n | \hat{\rho} \hat{c}(1) \hat{c}(2) | n+2 \rangle \\ &= -\sum_n \langle n | T \hat{\rho} \hat{c}(2) \hat{c}(1) | n+2 \rangle = F(2, 1)\end{aligned}$$

となる.

と書きかえることができる. 一方, ギャップ方程式 (2.45) を用いれば

$$\begin{aligned} \int_{1234} \bar{\Delta}(1, 2) u^{-1}(1, 2, 3, 4) \Delta(3, 4) &= - \int_{123456} \check{G}_{12}(6, 5) u(5, 6, 1, 2) u^{-1}(1, 2, 3, 4) \Delta(3, 4) \\ &= - \int_{12} \check{G}_{21}(2, 1) \Delta(1, 2) \\ &= - \int_{12} \check{G}_{12}(2, 1) \bar{\Delta}(1, 2), \end{aligned} \quad (2.52a)$$

$$\begin{aligned} \int_{1234} \Sigma(1, 2) u^{-1}(1, 2, 3, 4) \Sigma(3, 4) &= \int_{123456} \Sigma(1, 2) u^{-1}(1, 2, 3, 4) u(3, 4, 5, 6) \check{G}_{11}(6, 5) \\ &= \int_{12} \Sigma(1, 2) \check{G}_{11}(2, 1) \\ &= \int_{12} \bar{\Sigma}(2, 1) \check{G}_{22}(1, 2) \end{aligned} \quad (2.52b)$$

が得られる. すなわち電子系の自由エネルギーは

$$\begin{aligned} \mathcal{J} - \mathcal{J}_0 &= \frac{k_B T}{2\hbar} \int_0^1 ds \operatorname{tr} \left(\check{G}_s \check{\Sigma} \right) - \frac{k_B T}{2\hbar} \int_{12} \check{G}_{21}(1, 2) \Delta(2, 1) - \frac{k_B T}{2\hbar} \int_{12} \check{G}_{11}(1, 2) \Sigma(2, 1) \\ &= \frac{k_B T}{2\hbar} \int_0^1 ds \operatorname{tr} \left(\check{G}_s \check{\Sigma} \right) - \frac{k_B T}{4\hbar} \operatorname{tr} \left(\check{G} \check{\Sigma} \right) \end{aligned} \quad (2.53)$$

と書くことができる. ここで

$$\mathcal{J}_0 = -\frac{k_B T}{2} \operatorname{tr} \ln \left(-\check{G}_0^{-1} \right) \quad (2.54)$$

は相互作用 u がなかった場合の (自由電子系の) 自由エネルギーである. 相互作用がないときの磁場, 電場分布を $\mathbf{B}_0, \mathbf{E}_0$ とすれば, 電磁場の寄与を加えた自由エネルギーは

$$\begin{aligned} \mathcal{J} - \mathcal{J}_0 &= \frac{k_B T}{2\hbar} \int_0^1 ds \operatorname{tr} \left(\check{G}_s \check{\Sigma} \right) - \frac{k_B T}{4\hbar} \operatorname{tr} \left(\check{G} \check{\Sigma} \right) \\ &\quad + \int d\mathbf{r} \left[\frac{\epsilon_0}{2} (\mathbf{E}^2 - \mathbf{E}_0^2) + \frac{1}{2\mu_0} (\mathbf{B}^2 - \mathbf{B}_0^2) \right] \end{aligned} \quad (2.55)$$

となる.

2.1.6 補足

Green 関数を用いた超伝導の研究では, 自由エネルギーはダイアグラム法に基づいて Luttinger-Ward 汎関数 [68] から導出されることが多い. 本節では, より直感的であると思われる経路積分を用いた自由エネルギーの導出を行なった. この方法によって得られた式は, Luttinger-Ward 汎関数から得られる式 [69, 70] およびそれを準古典化したもの [71-73] と同じである.

2.2 準古典理論

本節では, 空間変調がある超伝導系の解析に広く用いられる準古典理論について述べる.

2.2.1 Eilenberger 方程式

超伝導系には系の特徴的なエネルギー尺度として系の Fermi エネルギー μ_F と超伝導ポテンシャル Δ (あるいは転移温度 $k_B T_c$) が存在している. 多くの系ではこの二つのエネ

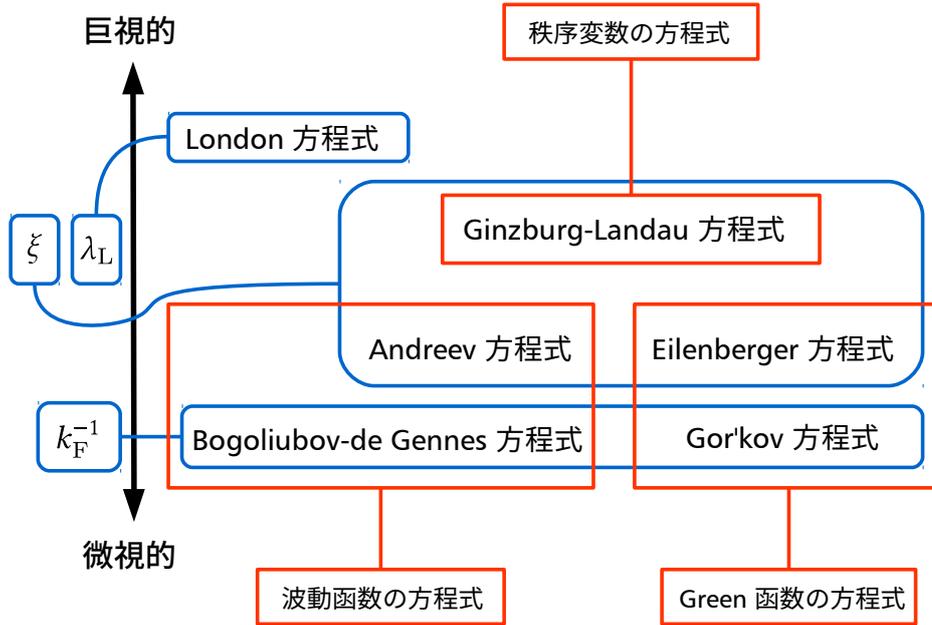


図 2.1: 超伝導の主な方程式とその階層. コヒーレンス長 ξ , London 侵入長 (磁場侵入長) λ_L , Fermi 波長 k_F^{-1} という複数の長さの尺度が存在していることに対応して, それぞれの長さ尺度に対応する方程式の階層が存在している.

ルギーは大きく異なっている^{*16}. 超伝導のコヒーレンス長 ξ は $\xi \sim \hbar v_F / \Delta$ だから^{*17},

$$1 \ll \frac{\mu_F}{\Delta} = \frac{\hbar k_F v_F}{2\Delta} \sim k_F \xi \quad (2.56)$$

すなわち系の特徴的な長さの尺度である Fermi 波長とコヒーレンス長も大きく異なっている.

これらの大きく異なる尺度が存在することによる困難さを解決する手法の一つとして, Eilenberger[74] および Larkin と Ovchinnikov[75] による準古典理論が存在する. 準古典理論では, Green 関数は Fermi 面を離ればすみやかに減衰するとし, またバンド幅は自己エネルギーの大きさに比べて十分大きいと仮定して, Green 関数 \check{G} をエネルギー $\xi_k = \hbar^2 k^2 / (2m) - \mu_F$ で積分した準古典 Green 関数 \check{g} を用いる. 準古典理論では, エネルギー積分によって Fermi 面から離れた電子状態を除外することにより, 大きく異なる二つのエネルギー尺度が存在することによる困難を回避している. 別の言い方をすれば, Fermi 波長を特徴的な長さとする Dyson 方程式 (Gor'kov 方程式) に対して, 準古典理論はコヒーレンス長を特徴的な長さとする理論であり, Fermi 波長の物理に興味がない場合により適した理論となっている (図 2.1).

準古典 Green 関数が従う輸送方程式を求めるため, Dyson 方程式 (Gor'kov 方程式)

$$\int_2 \left(\hbar \check{G}_0^{-1}(1, 2) - \check{\Sigma}(1, 2) \right) \check{G}(2, 3) = \hbar \delta(1 - 3) \check{\tau}_0 \quad (2.57)$$

^{*16} 金属において, 典型的には μ_F / k_B は 1×10^3 K から 1×10^4 K の程度であるのに対して T_c は 1 K から 10 K の程度である

^{*17} 分散として $\mu_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m)$ を用いた.

を考える. 準古典 Green 関数の式に変形するため, まず $\check{G}(1, 2)$ と $\check{\Sigma}(1, 2)$ を重心座標と相対座標で書き (Wigner 表示 [76]), 相対座標に関し Fourier 変換する^{*18}.

$$\check{G}(1, 2) = \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \check{G}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{-i\epsilon_n \tau + i\bar{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{k}}, \quad (2.58a)$$

$$\check{\Sigma}(1, 2) = \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \check{\Sigma}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{-i\epsilon_n \tau + i\bar{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{k}}. \quad (2.58b)$$

ここで $\check{G}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r})$ と $\check{\Sigma}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r})$ は南部空間とスピン空間からなる 4×4 の行列, $\epsilon_n = (2n+1)\pi k_B T / \hbar$ は Fermi 粒子の松原周波数, $\bar{\tau} = \tau_1 - \tau_2$, $\bar{\mathbf{r}} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ とし, また平衡状態を扱うため Green 関数は重心時間には依存しないとした. Dyson 方程式の $\check{G}_0^{-1} - \check{\Sigma}$ と \check{G} の積を Wigner 表示で書き直す際, 微分を含まない項 (すなわち平均場, 外場と Green 関数の積の項) は, 場の空間変調が小さいとして, Moyal 積の最低次まで取って単なる積に置き換える (付録 B.1.1). 微分を含む項が

$$\partial_{\tau_1} = \partial_{(\tau_1 + \tau_2)/2} + \partial_{\bar{\tau}} \rightarrow -i\epsilon_n, \quad (2.59a)$$

$$\nabla_{\mathbf{r}_1} = \nabla_{\mathbf{r}}/2 + \nabla_{\bar{\mathbf{r}}} \rightarrow \nabla_{\mathbf{r}}/2 + i\mathbf{k} \quad (2.59b)$$

であることに注意し, また重心座標に関する空間変調は特徴的な波数 $|\mathbf{k}| \sim k_F$ よりずっと小さいとして $(-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}/2 \pm q\mathbf{A})^2$ を無視すれば

$$\begin{aligned} H_0(1) &\rightarrow \left[\frac{1}{2m} (\hbar^2 \mathbf{k}^2 - i\hbar^2 \mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} - 2q\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})) - qA_0 - \mu \right] \check{\sigma}_0 \\ &= H_L \check{\sigma}_0, \end{aligned} \quad (2.60a)$$

$$\begin{aligned} H_0^*(1) &\rightarrow \left[\frac{1}{2m} (\hbar^2 \mathbf{k}^2 - i\hbar^2 \mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + 2q\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})) - qA_0 - \mu \right] \check{\sigma}_0 \\ &= H_L^* \check{\sigma}_0 \end{aligned} \quad (2.60b)$$

となり, Dyson 方程式は Wigner 形式で

$$\left[\begin{pmatrix} +i\hbar\epsilon_n - H_L & 0 \\ 0 & -i\hbar\epsilon_n - H_L^* \end{pmatrix} \check{\sigma}_0 - \check{\Sigma}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \right] \check{G}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = \hbar \check{\tau}_0 \check{\sigma}_0 \quad (2.61)$$

と表わすことができる.

次に, (2.57) において, (2.46) および (2.16) の対称性を用いて自己エネルギーと Green 関数における引数を入れ替え, $\check{G}_{0,R}^{-1}$ を

$$\hbar \check{G}_{0,R}^{-1}(2, 3) = \begin{pmatrix} +\hbar \partial \tau_2 - H_0^*(2) & 0 \\ 0 & -\hbar \partial \tau_2 - H_0(2) \end{pmatrix} \delta(2-3) \quad (2.62)$$

と定義すると, Dyson 方程式 (2.57) を

$$\int_2 \check{G}(1, 2) \left(\hbar \check{G}_{0,R}^{-1}(2, 3) - \check{\Sigma}(2, 3) \right) = \hbar \delta(1-3) \check{\tau}_0 \quad (2.63)$$

^{*18} Eilenberger 方程式を求めるときだけならば Moyal 積の最低次を取ればよく, この場合は Wigner 変換は単純に Fourier 変換を行なうだけでよい. 一方, Hall 項を含む“拡張された Eilenberger 方程式”[77] を求める際には, Moyal 積の微分の一次の展開まで取る必要がある, この場合は重心座標に関するゲージ不変性を保つように変換を行なう必要がある [77, 78]. 本論文では従来の Eilenberger 方程式のみを用いるため, 簡単のためゲージ不変性を保つための手続きは省略した.

と書きかえることができる^{*19}. ここで $\check{G}_{0,R}^{-1}$ の微分は右から左に作用しているとする. (2.57) と対比する場合は (2.57) を左 Dyson 方程式 (左 Gor'kov 方程式), (2.63) を右 Dyson 方程式 (右 Gor'kov 方程式) と呼ぶ. 右 Dyson 方程式も同様に Wigner 変換を行なった形で書く. 右 Dyson 方程式は Wigner 変換を行なった後でも左 Dyson 方程式と等価の内容を持つ [79]. $\nabla_{r_2} = \nabla_r/2 - \nabla_{\bar{r}} = \nabla_r/2 - \mathbf{i}\mathbf{k}$ であることに注意すれば

$$\begin{aligned} H_0(2) &\rightarrow \left[\frac{1}{2m} (\hbar^2 \mathbf{k}^2 + i\hbar^2 \mathbf{k} \cdot \nabla_r + 2q\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})) - qA_0 - \mu \right] \check{\sigma}_0 \\ &= H_R, \end{aligned} \quad (2.64a)$$

$$\begin{aligned} H_0^*(2) &\rightarrow \left[\frac{1}{2m} (\hbar^2 \mathbf{k}^2 + i\hbar^2 \mathbf{k} \cdot \nabla_r - 2q\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})) - qA_0 - \mu \right] \check{\sigma}_0 \\ &= H_R^* \end{aligned} \quad (2.64b)$$

である. 同様に $\partial_{r_2} = -\partial_{\bar{r}} \rightarrow i\epsilon_n$ であることに注意すれば右 Dyson 方程式は

$$\check{G}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \left[\begin{pmatrix} +i\hbar\epsilon_n - H_R^* & 0 \\ 0 & -i\hbar\epsilon_n - H_R \end{pmatrix} \check{\sigma}_0 - \check{\Sigma}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \right] = \hbar\check{\tau}_0\check{\sigma}_0 \quad (2.65)$$

と書き直せる. H_R および H_R^* 内の空間微分は $G_{0,R}^{-1}$ のときと同様に右から左に作用している.

以上の準備の下に, 準古典 Green 関数

$$\check{g}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\hbar} \int d\xi_k \check{G}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.66)$$

の式が従う式を導出する^{*20}. ここで $\hat{\mathbf{k}}$ は Fermi 面上での波数 (運動量) の方向を表わすこととする. $\hat{\mathbf{k}}$ を固定してエネルギー ξ_k で積分することにより, 準古典 Green 関数 \check{g} は $\hat{\mathbf{k}}$ の関数となっている.

エネルギー積分で発散する項を取り除くため, 左 Dyson 方程式から右 Dyson 方程式を引けば

$$\frac{i\hbar^2}{m} \mathbf{k} \cdot \nabla \check{G}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) + \left[i\hbar\epsilon_n \check{\tau}_3 \check{\sigma}_0 + \frac{q\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})}{m} \check{\tau}_3 \check{\sigma}_0 - \check{\Sigma}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}), \check{G}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \right] = 0 \quad (2.67)$$

が得られる. ここで $[X, Y] = XY - YX$ は交換子である. (2.67) において自己エネルギーを Fermi 面での値に置き換え, $\hbar \mathbf{k}/m = \mathbf{v}_F$ とし, $\int d\xi_k$ を適用すれば

$$i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{g}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) + \left[i\hbar\epsilon_n \check{\tau}_3 \check{\sigma}_0 + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \check{\tau}_3 \check{\sigma}_0 - \check{\Sigma}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}), \check{g}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \right] = 0 \quad (2.68)$$

また

$$\check{g}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \underline{g}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) & \underline{f}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \\ -\underline{\bar{f}}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) & \underline{\bar{g}}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

として, (2.68) を南部空間の各成分に分解して書くと

$$i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla \underline{g} + \Delta \underline{\bar{f}} - \underline{f} \Delta + [\underline{g}, \underline{\Sigma}] = 0 \quad (2.70a)$$

$$i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla \underline{\bar{g}} + \Delta \underline{f} - \underline{\bar{f}} \Delta + [\underline{\bar{g}}, \underline{\bar{\Sigma}}] = 0 \quad (2.70b)$$

$$i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla \underline{f} + 2(i\hbar\epsilon_n + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}) \underline{f} - \Delta \underline{\bar{g}} + \underline{g} \Delta - \underline{\Sigma} \underline{f} + \underline{f} \underline{\bar{\Sigma}} = 0 \quad (2.70c)$$

$$-i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla \underline{\bar{f}} + 2(i\hbar\epsilon_n + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}) \underline{\bar{f}} + \Delta \underline{g} - \underline{\bar{g}} \Delta + \underline{\bar{\Sigma}} \underline{\bar{f}} - \underline{\bar{f}} \underline{\Sigma} = 0 \quad (2.70d)$$

^{*19} $\check{G}_{0,R}^{-1}$ の形が \check{G}_0^{-1} が異なるのは, $\check{\tau}_3$ を含む形で Green 関数を定義したことに由来する.

^{*20} 準古典 Green 関数の定義は, (2.66) の他に π で割るものや \hbar で割らないものなど様々なものが存在している.

が得られる ((2.70) では簡単のため引数を省略した). (2.68) あるいは (2.70) は \mathbf{v}_F に沿った一次元的な方程式であり, $\mathbf{v}_F/|\mathbf{v}_F|$ は準粒子の進行方向と解釈できる. \mathbf{v}_F に沿った経路は “quasiclassical path” や “quasiparticle path”, “quasiclassical trajectory” などと呼ばれる. 本研究ではこれを準古典経路と呼ぶことにする. 準古典 Green 関数が従うこれらの輸送方程式は Eilenberger 方程式と呼ばれる. $i\epsilon_n \rightarrow \omega \pm i\eta$ と解析接続することにより実周波数での Green 関数の方程式が得られる. このときは自己エネルギーを適切に解析接続したのち (2.68) で $i\epsilon_n$ を $\omega \pm i\eta$ に置き換えればよい. 以下ではしばしば複素周波数 z で松原周波数と実周波数をまとめて表現する.

2.2.2 準古典 Green 関数とギャップ方程式

電子間有効相互作用 u が簡単な場合の準古典 Green 関数によるギャップ方程式を考える. u として, 二点間の時空の距離のみによる相互作用

$$u(1, 2, 3, 4) = U(\tau_1 - \tau_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta(1-4)\delta(2-3) \quad (2.71)$$

を考える. U は入れ替えの対称性 $U(\tau, \mathbf{r}) = U(-\tau, -\mathbf{r})$ を満たし, また簡単のため相互作用はスピンには依存しないとする. このときギャップ方程式は

$$\begin{aligned} \check{\Sigma}(2, 1) &= \int_{34} u(1, 2, 3, 4)\check{G}(3, 4) = U(\tau_1 - \tau_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\check{G}(2, 1) \\ &= U(\tau_2 - \tau_1, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)\check{G}(2, 1) \end{aligned} \quad (2.72)$$

だから, Wigner 変換を行なうと

$$\check{\Sigma}_{S_1 S_2}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{k_B T}{\hbar} \sum_{n'} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d} U(i\epsilon_n - i\epsilon_{n'}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') \check{G}_{S_1 S_2}(i\epsilon_{n'}, \mathbf{k}', \mathbf{r}) \quad (2.73)$$

となる.

$$U(i\nu_n, \mathbf{k} - \mathbf{k}') = U(i\nu_n, k_F(\hat{k} - \hat{k}')) \quad (2.74)$$

と書けるとすれば, 準古典理論ではギャップ方程式 (2.73) は

$$\begin{aligned} \check{\Sigma}_{S_1 S_2}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) &= \frac{k_B T}{\hbar} \sum_{n'} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d} U(i\epsilon_n - i\epsilon_{n'}, k_F(\hat{k} - \hat{k}')) \check{G}_{S_1 S_2}(i\epsilon_{n'}, \mathbf{k}', \mathbf{r}) \\ &\simeq k_B T \sum_{n'} \left\langle N_0(\hat{k}') U(i\epsilon_n - i\epsilon_{n'}, k_F(\hat{k} - \hat{k}')) \check{g}_{S_1 S_2}(i\epsilon_{n'}, \hat{k}', \mathbf{r}) \right\rangle_{\hat{k}'} \end{aligned} \quad (2.75)$$

となる. ここで $N_0(\hat{k}')$ は Fermi 面上での状態密度であり, $\langle \dots \rangle_{\hat{k}}$ は Fermi 面上で波数 \hat{k} が走るときの平均値である. 例えば等方的な二次元円状の Fermi 面の場合は N_0 は定数であり

$$\langle X(\alpha) \rangle_\alpha = \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} X(\alpha) \quad (2.76)$$

である. $U(i\nu_n, \hat{k})$ が周波数依存部分 $v(i\nu_n)$ と運動量依存部分 φ に

$$U(i\nu_n, \hat{k} - \hat{k}') = v(i\nu_n)\varphi(\hat{k}, \hat{k}') \quad (2.77)$$

と分離できるとしたとき, 等方的な Fermi 面を持つ s 波超伝導のギャップ方程式は

$$\check{\Sigma}_{S_1 S_2}(i\epsilon_m, \mathbf{r}) = N_0 k_B T \sum_n v(i\epsilon_n, i\epsilon_m) \langle \check{g}_{S_1 S_2}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) \rangle_{\hat{k}} \quad (2.78)$$

また二次元カイラル p 波超伝導のギャップ方程式は

$$\tilde{\Sigma}_{S_1 S_2}(i\epsilon_m, \alpha, \mathbf{r}) = N_0 k_B T \sum_n v(i\epsilon_n, i\epsilon_m) \langle 2 \cos(\alpha - \alpha') \check{g}_{S_1 S_2}(i\epsilon_n, \alpha', \mathbf{r}) \rangle_{\alpha'} \quad (2.79)$$

となる。弱結合超伝導の場合、 U が周波数 $i\epsilon_n - i\epsilon_{n'}$ に依存しない。このとき $\tilde{\Sigma}$ もカットオフよりも小さい周波数においては周波数に依存しなくなり、弱結合 s 波の場合は U は定数 v となる。

2.2.3 スピン一重項超伝導とユニタリなスピン三重項超伝導

Wigner 表示したペアポテンシャル (自己エネルギー非対角成分) は

$$\begin{aligned} (\Delta_{S_1 S_2}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}))^* &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{-i\epsilon_n \tau} \int d\mathbf{r} e^{+i\mathbf{k}\bar{\mathbf{r}}} (\Delta_{S_1 S_2}(\mathbf{r} + \bar{\mathbf{r}}/2, \mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}/2, +\tau))^* \\ &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{-i\epsilon_n \tau} \int d\mathbf{r} e^{+i\mathbf{k}\bar{\mathbf{r}}} \bar{\Delta}_{S_2 S_1}(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}/2, \mathbf{r} + \bar{\mathbf{r}}/2, -\tau) \\ &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{+i\epsilon_n \tau} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\bar{\mathbf{r}}} \bar{\Delta}_{S_2 S_1}(\mathbf{r} + \bar{\mathbf{r}}/2, \mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}/2, +\tau) \\ &= \bar{\Delta}_{S_2 S_1}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.80)$$

を満たしている。よって準古典理論においてペアポテンシャルは対称性

$$(\Delta_{S_1 S_2}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}))^* = \bar{\Delta}_{S_2 S_1}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \quad (2.81)$$

を満たす^{*21}。また以下では \underline{g} と $\underline{\Sigma}$, $\underline{\bar{g}}$ と $\underline{\bar{\Sigma}}$ はスピンに関して同じ対称性を持つ、すなわち

$$[\underline{g}, \underline{\Sigma}] = [\underline{\bar{g}}, \underline{\bar{\Sigma}}] = 0 \quad (2.82)$$

とする。

スピン一重項超伝導はペアポテンシャルがスピンの入れ替えに関して反対称である。よってペアポテンシャルは $\bar{d}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r})$ をスカラー関数として

$$\Delta(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) = \bar{d}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \check{\sigma}_2 \quad (2.83)$$

と書くことができる。(2.80) を用いると

$$\bar{\Delta}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) = \bar{d}^*(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \check{\sigma}_2 \quad (2.84)$$

である。このとき \underline{f} と $\underline{\Delta}$, $\underline{\bar{f}}$ と $\underline{\bar{\Delta}}$ がスピンに関して同じ対称性を持つとすると

$$\underline{f} = f \check{\sigma}_2, \quad \underline{\bar{f}} = \bar{f} \check{\sigma}_2 \quad (2.85)$$

と書けるから、(2.70a) および (2.70b) より

$$\underline{g} = g \check{\sigma}_0, \quad \underline{\bar{g}} = \bar{g} \check{\sigma}_0 \quad (2.86)$$

また

$$\underline{\Sigma} = \Sigma \check{\sigma}_0, \quad \underline{\bar{\Sigma}} = \bar{\Sigma} \check{\sigma}_0 \quad (2.87)$$

^{*21} Green 関数等の定義によって i の違いが生じる。

と書けることが分かる. よって (2.70) においてスピン部分をくり出すことができ, (2.70) は

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla g + \bar{d}\bar{f} - f\bar{d}^* = 0, \quad (2.88a)$$

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla \bar{g} + d^*f - \bar{f}\bar{d} = 0, \quad (2.88b)$$

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla f + 2(i\hbar\epsilon_n + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A})f + (g - \bar{g})\bar{d} - (\Sigma - \bar{\Sigma})f = 0, \quad (2.88c)$$

$$-i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla \bar{f} + 2(i\hbar\epsilon_n + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A})\bar{f} + (g - \bar{g})\bar{d}^* - (\Sigma - \bar{\Sigma})\bar{f} = 0 \quad (2.88d)$$

に還元できる.

スピン三重項はペアポテンシャルがスピン入れ替えに関して対称である. ペアポテンシャルの対称性が位置によって変化しないとすれば d ベクトル $\mathbf{d} = (d_x, d_y, d_z)$ によって

$$\begin{aligned} \underline{\Delta}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) &= D(i\epsilon_n, \mathbf{r}) \left(\mathbf{d}(\hat{k}) \cdot \check{\sigma} \right) i\check{\sigma}_2 \\ &= D(i\epsilon_n, \mathbf{r}) \begin{pmatrix} -d_x(\hat{k}) + id_y(\hat{k}) & d_z(\hat{k}) \\ d_z(\hat{k}) & d_x(\hat{k}) + id_y(\hat{k}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.89)$$

と書くことができる ($D(i\epsilon_n, \mathbf{r})$ はスカラー値関数であり $\check{\sigma} = (\check{\sigma}_1, \check{\sigma}_2, \check{\sigma}_3)$ である). (2.80) より $\bar{\Delta}$ は

$$\bar{\Delta}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) = D^*(i\epsilon_n, \mathbf{r}) (\mathbf{d}^*(\hat{k}) \cdot \check{\sigma}^*) i\check{\sigma}_2 \quad (2.90)$$

である.

$\mathbf{d} \times \mathbf{d}^* = \mathbf{0}$ であるスピン三重項超伝導はユニタリな超伝導と呼ばれる [57]. このとき

$$[(\mathbf{d} \cdot \check{\sigma})i\check{\sigma}_2][(\mathbf{d}^* \cdot \check{\sigma}^*)i\check{\sigma}_2] = |\mathbf{d}|^2 \check{\sigma}_0 + i(\mathbf{d} \times \mathbf{d}^*) \cdot \check{\sigma} = |\mathbf{d}|^2 \check{\sigma}_0, \quad (2.91a)$$

$$[(\mathbf{d}^* \cdot \check{\sigma}^*)i\check{\sigma}_2][(\mathbf{d} \cdot \check{\sigma})i\check{\sigma}_2] = |\mathbf{d}|^2 \check{\sigma}_0 + i(\mathbf{d}^* \times \mathbf{d}) \cdot \check{\sigma}^* = |\mathbf{d}|^2 \check{\sigma}_0 \quad (2.91b)$$

であるから, $\mathbf{d}(\hat{k})$ を大きさ $\bar{d}(\hat{k})$ と向き $\hat{d}(\hat{k})$ に分解して

$$\mathbf{d} = \bar{d}\hat{d}, \quad |\hat{d}|^2 = 1, \quad [(\hat{d} \cdot \check{\sigma})i\check{\sigma}_2][(\hat{d}^* \cdot \check{\sigma}^*)i\check{\sigma}_2] = [(\hat{d}^* \cdot \check{\sigma}^*)i\check{\sigma}_2][(\hat{d} \cdot \check{\sigma})i\check{\sigma}_2] = \check{\sigma}_0 \quad (2.92)$$

と書くことができる. スピン一重項の場合と同様 f, \bar{f} と $\underline{\Delta}$ がスピンに関して同じ対称性を持つとすれば, f と \bar{f} をスカラー値関数として

$$\underline{f}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) = f(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) (\hat{d}(\hat{k}) \cdot \check{\sigma}) i\check{\sigma}_2, \quad (2.93a)$$

$$\underline{\bar{f}}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) = \bar{f}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) (\hat{d}^*(\hat{k}) \cdot \check{\sigma}^*) i\check{\sigma}_2 \quad (2.93b)$$

と書ける. よって (2.70a), (2.70b) より

$$\underline{g} = g\check{\sigma}_0, \quad \underline{\bar{g}} = \bar{g}\check{\sigma}_0 \quad (2.94)$$

すなわち

$$\underline{\Sigma} = \Sigma\check{\sigma}_0, \quad \underline{\bar{\Sigma}} = \bar{\Sigma}\check{\sigma}_0 \quad (2.95)$$

が言え, スピン一重項の場合と同様に (2.70) の各式からスピン部分をくり出すことができ (2.70) を

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla g + D\bar{d}\bar{f} - fD^*\bar{d}^* = 0, \quad (2.96a)$$

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla \bar{g} + D^*\bar{d}^*f - \bar{f}D\bar{d} = 0, \quad (2.96b)$$

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla f + 2(i\hbar\epsilon_n + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A})f + (g - \bar{g})D\bar{d} - (\Sigma - \bar{\Sigma})f = 0, \quad (2.96c)$$

$$-i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla \bar{f} + 2(i\hbar\epsilon_n + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A})\bar{f} + (g - \bar{g})D^*\bar{d}^* - (\Sigma - \bar{\Sigma})\bar{f} = 0 \quad (2.96d)$$

と書くことができる. スピン一重項の場合 \bar{d} を Δ , ユニタリなスピン三重項の場合 $D\bar{d}$ を Δ と置くことにすれば (2.88) と (2.96) は

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla g + \Delta \bar{f} - f \Delta^* = 0, \quad (2.97a)$$

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla \bar{g} + \Delta^* f - \bar{f} \Delta = 0, \quad (2.97b)$$

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla f + 2(i\hbar\epsilon_n + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A})f + (g - \bar{g})\Delta - (\Sigma - \bar{\Sigma})f = 0, \quad (2.97c)$$

$$-i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla \bar{f} + 2(i\hbar\epsilon_n + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A})\bar{f} + (g - \bar{g})\Delta^* - (\Sigma - \bar{\Sigma})\bar{f} = 0 \quad (2.97d)$$

と書き直すことができる.

$$\check{g} = \begin{pmatrix} g & f \\ -\bar{f} & \bar{g} \end{pmatrix}, \quad \check{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma & \Delta \\ -\Delta^* & \bar{\Sigma} \end{pmatrix} \quad (2.98)$$

と置けば (2.97) は改めて

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{g}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) + \left[i\hbar\epsilon_n \check{\tau}_3 + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \check{\tau}_3 - \check{\Sigma}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}), \check{g}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) \right] = 0 \quad (2.99)$$

と書くことができる. ギャップ方程式においても, Green 関数と自己エネルギーのスピン空間の対称性が同じであればスピン部分をくくり出せるから

$$\check{\Sigma}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) = k_B T \sum_{n'} \left\langle N_0(\hat{k}') U(i\epsilon_n - i\epsilon_{n'}, k_F) \check{g}(i\epsilon_{n'}, \hat{k}', \mathbf{r}) \right\rangle_{\hat{k}'} \quad (2.100)$$

と書ける.

本論文で考える二次元カイラル p 波超伝導は, d ベクトルが

$$\mathbf{d}(\hat{k}) = (k_x \pm ik_y) \mathbf{e}_z \quad (2.101)$$

の形をしておりユニタリである. 以降では特にことわりなく Green 関数, 自己エネルギーとしてスピンを消去した (2.98) を, また Eilenberger 方程式として (2.97), (2.99) を用いる.

ここでは Eilenberger 方程式に関して変形を行なったが, Gor'kov 方程式上でも同様にスピン一重項あるいはユニタリなスピン三重項超伝導ではスピン自由度をくりこんで, 4×4 の行列ではなく南部空間のみの 2×2 の行列で記述できることが知られている.

2.2.4 準古典 Green 関数の解

(2.97) より運動量方向に沿って

$$g + \bar{g} = \text{const.} \quad (2.102)$$

である. 一方, 常伝導状態すなわち $\bar{\Delta} = \Delta = 0$ の場合, 電磁場がない一様系の準古典 (正常) Green 関数は

$$\begin{aligned} g(z, \hat{k}) &= \frac{1}{\hbar} \int d\xi_k G(z, \mathbf{k}) \\ &= \int d\xi_k \frac{1}{\hbar z - \xi_k - \Sigma(z, \mathbf{k})} \\ &\simeq \int d\xi_k \frac{1}{\hbar z - \xi_k - \Sigma(z, \hat{k})} \\ &= -i\pi \text{sgn}(\text{Im } z) \end{aligned} \quad (2.103)$$

であり^{*22}, また同様に

$$\begin{aligned}\bar{g}(z, \hat{k}) &\simeq \int d\xi_k \frac{1}{-\hbar z - \xi_k - \bar{\Sigma}(z, \hat{k})} \\ &= +i\pi \operatorname{sgn}(\operatorname{Im} z)\end{aligned}\quad (2.104)$$

である. ここで Σ の値を Fermi 面のものに置き換え, $\operatorname{Im} z \neq 0$ として \ln の分岐切断は実軸上 (正負のいずれか) に取った. よってこのとき $g + \bar{g} = 0$ である. 今, 一時的にギャップ方程式を考えずペアポテンシャルを外場とみなし, 一様系の常伝導状態から \mathbf{v}_F に沿って断熱的にペアポテンシャルを加えていくことを考える^{*23}. ペアポテンシャルを加えて十分たった後は一様系の超伝導とみなせるが, このときも $g + \bar{g} = 0$ であるから, 超伝導においても一様系, あるいはもっと一般に Eilenberger 方程式を解く際に境界条件 (初期条件) として一様系を取る場合には $g + \bar{g} = 0$ としてよい. このときは同時に $\bar{\Sigma} = -\Sigma$ も言える.

\check{g} が Eilenberger 方程式を満たしているとする. このとき (2.99) に左から \check{g} をかけたものと右から \check{g} をかけたものを足し合わせると

$$i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla(\check{g}\check{g}) + [\hbar z \check{\tau}_3 + q\mathbf{v}_F \cdot A\check{\tau}_3 - \check{\Sigma}, (\check{g}\check{g})] = 0 \quad (2.105)$$

すなわち \check{g}^2 も Eilenberger 方程式の解であることが分かる. 一方常伝導の一様系では $\check{g}^2 = g^2 \tau_0 = -\pi^2 \tau_0$ であるから, 境界条件として常伝導一様系を採用した場合には $i\hbar \mathbf{v}_F \cdot \nabla(\check{g}\check{g})$ は恒等的に 0 となる. よって断熱的に自己エネルギーを導入した場合にも \check{g}^2 は変化せず, 境界条件として一様系を取る場合には準古典 Green 関数に規格化条件

$$\check{g}^2 = -\pi^2 \check{\tau}_0 \quad (2.106)$$

すなわち $g^2 - f\bar{f} = -\pi^2$ が成立する.

規格化条件 (2.106) と (2.97) で $\mathbf{v}_F \cdot (\nabla \pm 2iq\mathbf{A}/\hbar) = 0$ とした

$$\Delta \bar{f} - f\Delta^* = 0 \quad (2.107a)$$

$$2(\hbar z - \Sigma)f + 2g\Delta = 0 \quad (2.107b)$$

$$2(\hbar z - \Sigma)\bar{f} + 2g\Delta^* = 0 \quad (2.107c)$$

を連立させることにより, 一様系の準古典 Green 関数の解

$$g = \frac{-\pi\hbar\check{z}}{\sqrt{-\check{z}^2 + |\Delta|^2}} \quad (2.108a)$$

$$f = \frac{\pi\Delta}{\sqrt{-\check{z}^2 + |\Delta|^2}} \quad (2.108b)$$

$$\bar{f} = \frac{\pi\Delta^*}{\sqrt{-\check{z}^2 + |\Delta|^2}} \quad (2.108c)$$

が得られる. ここで表記の簡単のため $\hbar\check{z} = \hbar z - \Sigma$ とし, $\Delta \rightarrow 0$ で常伝導の準古典 Green 関数が得られるように符号を選んだ.

^{*22} $G(\mathbf{z}, \mathbf{k}, \mathbf{r})$ は $\check{G}(\mathbf{z}, \mathbf{k}, \mathbf{r})$ の (1,1) 成分.

^{*23} 物理系としては超伝導体に接合した常伝導金属へのペアポテンシャルのしみだしに対応している

2.2.5 準古典 Green 関数と物理量

電流

粒子流は演算子形式で $[c^\dagger((\hat{\mathbf{p}} - 2iq\hat{\mathbf{A}}/\hbar)c) + \text{H.c.}]/2$ だから、電流 \mathbf{j} は

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(1) &= \lim_{1' \rightarrow 1} \frac{q\hbar}{2mi} \langle\langle \bar{c}(1) (\nabla_{\mathbf{r}_{1'}} - 2iq\mathbf{A}/\hbar) c(1') - (\nabla_{\mathbf{r}_1} + 2iq\mathbf{A}/\hbar) \bar{c}(1)c(1') \rangle\rangle \\ &= \lim_{1' \rightarrow 1} \frac{q\hbar}{2mi} [(\nabla_{\mathbf{r}_{1'}} - 2iq\mathbf{A}/\hbar) - (\nabla_{\mathbf{r}} + 2iq\mathbf{A}/\hbar)] G(1', 1) \end{aligned} \quad (2.109)$$

$$= \lim_{1' \rightarrow 1} \frac{q\hbar}{2mi} [-(\nabla_{\mathbf{r}_{1'}} - 2iq\mathbf{A}/\hbar) + (\nabla_{\mathbf{r}} + 2iq\mathbf{A}/\hbar)] \bar{G}(1, 1') \quad (2.110)$$

である。 $G(1', 1)$ を Wigner 変換し準古典化する

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}, \varsigma) &= q \frac{k_B T}{\hbar} \sum_{\epsilon_n} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \left[\frac{\hbar\mathbf{k}}{m} - \frac{2q\mathbf{A}(\mathbf{r})}{m} \right] G_{\varsigma\varsigma}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \\ &= qk_B T \sum_{\epsilon_n} \left\langle N_0 [\mathbf{v}_F - 2q\mathbf{A}(\mathbf{r})/m] g(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \right\rangle_{\hat{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (2.111)$$

である。一方 $\bar{G}(1, 1')$ を Wigner 変換し準古典化する

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}, \varsigma) &= q \frac{k_B T}{\hbar} \sum_{\epsilon_n} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \left[-\frac{\hbar\mathbf{k}}{m} - \frac{2q\mathbf{A}(\mathbf{r})}{m} \right] \bar{G}_{\varsigma\varsigma}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \\ &= qk_B T \sum_{\epsilon_n} \left\langle N_0 [-\mathbf{v}_F - 2q\mathbf{A}(\mathbf{r})/m] \bar{g}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \right\rangle_{\hat{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (2.112)$$

である。 $g + \bar{g} = 0$ であることに注意すれば

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= \sum_{\varsigma} \mathbf{j}(\mathbf{r}, \varsigma) \\ &= qk_B T \sum_{\epsilon_n} \left\langle N_0 \mathbf{v}_F [g(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) - \bar{g}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r})] \right\rangle_{\hat{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (2.113)$$

となる。

状態密度

状態密度^{*24} $N(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r})$ は Green 関数を用いて

$$N(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\omega + i\eta, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.114)$$

と書けるから準古典理論での状態密度は

$$\begin{aligned} N(\omega, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) &= \frac{1}{\hbar} \int d\xi_{\mathbf{k}} N(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \\ &= -\frac{1}{\pi} N_0 \text{Im} g(\omega + i\eta, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.115)$$

となる。

^{*24} 空間的に一様な系を考える際には波数 \mathbf{k} がよい量子数であるため \mathbf{k} で分解した状態密度を考える必要はないが、空間非一様な系の場合は \mathbf{k} は必ずしもよい量子数ではなく、さらに準古典理論では $\xi_{\mathbf{k}}$ による積分も行なうため、周波数と波数 (の向き) を指定した状態密度を考える必要が生じてくる。

自由エネルギー

Tr_4 をスピンおよび南部空間の跡とする.

$$\text{tr}(\check{X}\check{Y}) = \text{Tr}_4 \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \check{X}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \check{Y}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.116)$$

を用いて (付録 B.1.2) Wigner 変換および準古典化を施すと

$$\begin{aligned} \text{tr}(\check{G}_s \check{\Sigma}) &= \text{Tr}_4 \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \check{G}_s(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \check{\Sigma}(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \\ &\simeq \text{Tr}_4 \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \check{G}_s(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \check{\Sigma}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \\ &\simeq 2 \text{Tr}_2 k_B T \sum_n \int d\mathbf{r} \left\langle N_0 \check{g}_s(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \check{\Sigma}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \right\rangle_{\hat{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (2.117)$$

であるから (Tr_2 は南部空間の跡), 系の自由エネルギーは準古典 Green 関数を用いて

$$\begin{aligned} \mathcal{J} - \mathcal{J}_0 &= \text{Tr}_2 N_0 k_B T \sum_n \int d\mathbf{r} \left[\int_0^1 ds \langle \check{g}_s \check{\Sigma} \rangle - \frac{1}{2} \langle \check{g} \check{\Sigma} \rangle \right] \\ &\quad + \int d\mathbf{r} \left[\frac{\epsilon_0}{2} (E^2 - E_0^2) + \frac{1}{2\mu_0} (B^2 - B_0^2) \right] \end{aligned} \quad (2.118)$$

と書ける^{*25*26}. (2.118) に (2.108) を代入すれば一様系の自由エネルギー

$$\mathcal{J} - \mathcal{J}_0 = \int d\mathbf{r} \pi N_0 k_B T \sum_{\epsilon_n} \left\langle \frac{i\hbar \tilde{\epsilon} \Sigma + |\Delta|^2}{\sqrt{\hbar^2 \tilde{\epsilon}^2 - |\Delta|^2}} + 2\sqrt{\hbar^2 \tilde{\epsilon}^2} - 2\sqrt{\hbar^2 \tilde{\epsilon}^2 + |\Delta|^2} \right\rangle \quad (2.119)$$

が得られる. 一様系では自由エネルギーの空間変調はないはずだから, 積分の中身はそのまま自由エネルギー密度である.

2.2.6 不純物効果

多量の弱い不純物が無秩序に存在している系を経路積分で扱う際には, レプリカ法が多く用いられる. 本小節では教科書 [60] に従って系に (弱い) 不純物を導入する. 簡単のためフォノンに対する不純物効果は考えないことにする.

無秩序な位置 \mathbf{r}_n に存在する不純物ポテンシャル

$$V_i(\mathbf{r}) = \sum_n v_i(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}) \quad (2.120)$$

の分布が Gauss 分布に従っていると, 不純物平均 $\langle \dots \rangle_{\text{dis}}$ が

$$\langle \dots \rangle_{\text{dis}} = \int D\mathbf{V}_i \dots \exp \left[-\frac{1}{2\gamma^2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' V_i(\mathbf{r}) K^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V_i(\mathbf{r}') \right] \quad (2.121a)$$

$$\langle V_i(\mathbf{r}) V_i(\mathbf{r}') \rangle_{\text{dis}} = \gamma^2 V_i(\mathbf{r}) K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V_i(\mathbf{r}') \quad (2.121b)$$

^{*25} 簡単のため Fermi 面は等方的とした.

^{*26} 準古典 Green 関数を用いた自由エネルギーの表式として (2.118) の他に Eilenberger が原論文で与えた式が知られている (付録 B.3).

と表わされるとする. 以下では $K(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$ とする. レプリカ法では分配函数 \mathcal{Z} をレプリカの数 N_R 回かけたもの^{*27}の不純物平均 $\langle\langle \mathcal{Z}^{N_R} \rangle\rangle_{\text{dis}}$ を考え, 不純物平均された自由エネルギーや物理量 A を

$$\mathcal{J} = -k_B T \lim_{N_R \rightarrow 0} \frac{1}{N_R} \ln \langle\langle \mathcal{Z}^{N_R} \rangle\rangle_{\text{dis}} \quad (2.122a)$$

$$A = - \lim_{N_R \rightarrow 0} \frac{1}{N_R} \frac{\delta}{\delta J} \langle\langle \mathcal{Z}^{N_R}[J] \rangle\rangle_{\text{dis}} \quad (2.122b)$$

のように求める^{*28}. このとき作用 S は (2.11d) において電子の変数がレプリカの添字 \mathfrak{R} を足に持ち, さらに $V_i(\mathbf{r})\bar{c}c$ の項を加えた形で

$$S'[\bar{c}, c] = S'_0[\bar{c}, c] + S'_1[\bar{c}, c], \quad (2.123a)$$

$$S'_0[\bar{c}, c] = \sum_{\mathfrak{R}=1}^{N_R} \int_1 \bar{c}_{\mathfrak{R}}(1) (\hbar\partial_{\tau_1} + H_0(1) + V_i(\mathbf{r}_1)) c_{\mathfrak{R}}(1), \quad (2.123b)$$

$$S'_1[\bar{c}, c] = -\frac{1}{2} \sum_{\mathfrak{R}=1}^{N_R} \int_{1234} \bar{c}_{\mathfrak{R}}(1)\bar{c}_{\mathfrak{R}}(2)u(1, 2, 3, 4)c_{\mathfrak{R}}(3)c_{\mathfrak{R}}(4) \quad (2.123c)$$

と書くことができる. V_i に関する Gauss 積分を実行すると有効相互作用としては (2.11d) に有効引力相互作用

$$-\frac{\gamma^2}{2} \sum_{\mathfrak{R}_1, \mathfrak{R}_2=1}^{N_R} \int_{12} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \bar{c}_{\mathfrak{R}_1}(1) \bar{c}_{\mathfrak{R}_2}(2) c_{\mathfrak{R}_2}(2) c_{\mathfrak{R}_1}(1) \quad (2.124)$$

の項が加わった形となる. (2.124) においてレプリカ添字に対し非対角な項は全て等しいとする^{*29}と, 非対角項は

$$(2.124) = \sum_{\mathfrak{R}=1}^{N_R} \int_1 \mu_{\mathfrak{R}}(\mathbf{r}_1) \bar{c}_{\mathfrak{R}}(1) c_{\mathfrak{R}}(1) \quad (2.125a)$$

$$\mu_{\mathfrak{R}}(\mathbf{r}) = -\frac{\gamma^2}{2} \sum_{\mathfrak{R}=1}^{N_R-1} \int_1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \bar{c}_{\mathfrak{R}}(1) c_{\mathfrak{R}}(1) \quad (2.125b)$$

と, Hartree 項のように扱うことができる. Hartree 項の寄与はあらかじめ化学ポテンシャルにくりこんでいるとすれば, 不純物の効果として (2.124) におけるレプリカ添字の対角項

$$-\frac{\gamma^2}{2} \sum_{\mathfrak{R}=1}^{N_R} \int_{12} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \bar{c}_{\mathfrak{R}}(1) \bar{c}_{\mathfrak{R}}(2) c_{\mathfrak{R}}(2) c_{\mathfrak{R}}(1) \quad (2.126)$$

だけを見ればよい. (2.123), (2.126) の項は全てレプリカに関し対称だから, 対数を取って $\lim_{N_R \rightarrow 0} (1/N_R)$ を作用させると添字 \mathfrak{R} が消去した形が得られる. よって不純物効果は有効二体引力相互作用

$$S_{\text{imp}}[\bar{c}, c] = -\frac{1}{2} \int_{1234} \bar{c}(1)\bar{c}(2)u_{\text{imp}}(1, 2, 3, 4)c(3)c(4) \quad (2.127a)$$

$$u_{\text{imp}}(1234) = \gamma^2 \delta(1-4)\delta(2-3)\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (2.127b)$$

を (2.11d) に加えることによって表現できる.

^{*27} この段階では $N_R \gg 1$ とする.

^{*28} J は A を生成する源.

^{*29} レプリカ対称性を持っているとする.

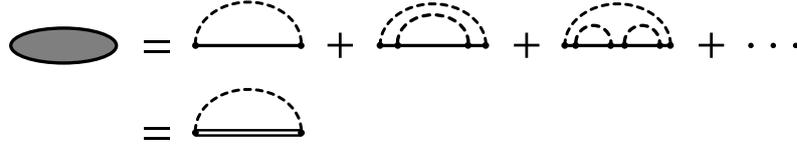


図 2.2: 自己無撞着 Born 近似での自己エネルギーの図形 (非交差図).

準古典理論においての (2.127) からの自己エネルギーへの寄与は, (2.72) において

$$U(\tau_2 - \tau_1, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = \gamma^2 \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \quad (2.128)$$

すなわち (2.73) に

$$U(i\epsilon_n - i\epsilon'_n, \hat{k} - \hat{k}') = \frac{\hbar}{k_B T} \gamma^2 \delta_{n, n'} \quad (2.129)$$

を代入して

$$\check{\Sigma}_{\text{imp}, \zeta_1 \zeta_2}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) = \hbar \gamma^2 \left\langle N_0(\hat{k}') \check{g}_{\zeta_1 \zeta_2}(i\epsilon_n, \hat{k}', \mathbf{r}) \right\rangle_{\hat{k}'} \quad (2.130a)$$

である*30. この結果は不純物を Green 関数の平均化に基づく自己無撞着 Born 近似で扱ったもの (図 2.2) と一致する*31. 等方的 Fermi 面の場合, 一様系の常伝導状態を考えると

$$\Sigma_{\text{imp}}(z) = -i\pi\hbar\gamma^2 N_0 \text{sgn}(z) \quad (2.131)$$

であるから, 不純物によって生じた常伝導での準粒子の寿命 τ_{imp} あるいは準粒子の散乱率 $\Gamma_n = (2\tau_{\text{imp}})^{-1}$ は

$$\frac{1}{2\tau_{\text{imp}}} = \Gamma_n = \pi\hbar\gamma^2 N_0 \quad (2.132)$$

であり, よって

$$\check{\Sigma}_{\text{imp}}(i\epsilon_n, \mathbf{r}) = \frac{\Gamma_n}{\pi} \left\langle \check{g}_{\zeta_1 \zeta_2}(i\epsilon_n, \hat{k}', \mathbf{r}) \right\rangle_{\hat{k}'} \quad (2.133)$$

と書ける.

2.2.7 実周波数への解析接続

Eliashberg 方程式に従う超伝導の場合, 不純物自己エネルギーを考えない場合でも, 自己エネルギーが周波数に依存するため, 弱結合理論でのように, 松原周波数の計算で得られた自己エネルギーを実周波数でそのまま使用することができない. 松原周波数上で得られた Green 関数や自己エネルギーから直接的に実周波数上の Green 関数や自己エネルギーを得るためには, 数値的に解析接続を行なう必要がある. 松原周波数から実周波数への数値解析接続の手段としては Padé 近似 [81] や最大エントロピー法 [82] がよく用いられるが, 自己エネルギーが Green 関数から Eliashberg 方程式によって得られる場合には, 自己エネルギーの解析接続を行なうよりよい方法が Marsiglio らによって提案されている [83]*32. 本論文では Marsiglio らの方法を用いた.

*30 $\check{\Sigma}_{\text{imp}}$ は \hat{k} によらない.

*31 例えば [57, 80].

*32 論文 [83] の結果の式はおそらく間違っている. 同じ著者らによるレビュー [4] での式の方が正しい.

相互作用 $U(i\epsilon_n - i\epsilon_m)$ が周波数 $i\epsilon_n - i\epsilon_m$ に関して何らかの Bose 粒子の Green 関数 D に比例し同じ解析性を持っているとし^{*33},

$$U(i\epsilon_n, i\epsilon_{n'}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\alpha^2(\mathbf{k}')D(i\epsilon_n - i\epsilon_{n'}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.134)$$

と書けると仮定する. 以下では表記の簡単のため

$$(D * \check{G})(\mathbf{k}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \alpha(\mathbf{q})^2 D(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \check{G}(\mathbf{q}) \quad (2.135)$$

と書くことにし, 引数の運動量は適宜省略することにする. また空間の重心座標に関しては独立に解析接続を行なうため, 本節では省略する^{*34}. このとき, 松原周波数での Eliashberg 方程式は

$$\check{\Sigma}(i\epsilon_n, \mathbf{k}) = -\frac{k_B T}{\hbar} \sum_m D(i\epsilon_n - i\epsilon_m) * \check{G}(i\epsilon_m) \quad (2.136)$$

と書くことができる.

(2.136) に \check{G} と \check{D} のスペクトル表示

$$\check{G}(i\epsilon_n, \mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \int dz' \frac{\check{S}(z', \mathbf{k})}{i\epsilon_n - z'} \quad (2.137a)$$

$$D(iv_n, \mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \int dz' \frac{B(z', \mathbf{k})}{iv_n - z'} \quad (2.137b)$$

を代入すると

$$\begin{aligned} \Sigma(i\epsilon_n) &= -\frac{1}{4\pi^2} \frac{k_B T}{\hbar} \sum_m \int dz \int dz' \frac{B(z) * \check{S}(z')}{(i\epsilon_n - i\epsilon_m - z)(i\epsilon_m - z')} \\ &= -\frac{1}{4\pi^2} \int dz \int dz' B(z) * \check{S}(z') \frac{k_B T}{\hbar} \sum_m \frac{1}{i\epsilon_n - z - z'} \left(\frac{1}{i\epsilon_n - i\epsilon_m - z} + \frac{1}{i\epsilon_m - z'} \right) \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int dz \int dz' B(z) * \check{S}(z') \frac{1}{i\epsilon_n - z - z'} \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar z'}{2k_B T} \right) \end{aligned} \quad (2.138)$$

よって実周波数 $i\epsilon_n \rightarrow \omega + i\eta$ に解析接続すると

$$\Sigma(\omega + i\eta) = \frac{1}{8\pi^2} \iint dz dz' B(z) * \check{S}(z') \frac{1}{\omega - z - z' + i\eta} \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar z'}{2k_B T} \right) \quad (2.139)$$

となる. 2 行目から 3 行目への変形では公式 [84]

$$\begin{aligned} \tanh z &= z \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^2 + [\pi(n + 1/2)]^2} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{z + i\pi(n + 1/2)} + \frac{1}{z - i\pi(n + 1/2)} \right) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z + i\pi(n + 1/2)} \end{aligned} \quad (2.140a)$$

$$\begin{aligned} \coth z &= z \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^2 + (\pi n)^2} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{z + i\pi n} + \frac{1}{z - i\pi n} \right) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z + i\pi n} \end{aligned} \quad (2.140b)$$

^{*33} 本論文での模型では $D(iv, \mathbf{k}) \propto 1/(v_n^2 + \omega(\mathbf{k})^2)$ である.

^{*34} 簡単のため相互作用はスピンによらないとしている.

を用いた. $\check{S}(z')$ の非対角部分は一般にはペアポテンシャルの位相部分 $\exp(i\theta)$ が含まれるため複素数である^{*35*}^{*36}. 解析を簡単にするため, S からペアポテンシャルの位相部分を分離するため南部空間の行列 \check{P} を

$$\check{P} = \begin{pmatrix} e^{+i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta/2} \end{pmatrix} \quad (2.141)$$

と定義して^{*37},

$$\begin{aligned} \check{\Sigma}(\omega + i\eta) &= \frac{1}{8\pi^2} \iint dz dz' B(z) * \check{P} \check{P}^{-1} \check{S}(z') \check{P} \check{P}^{-1} \frac{1}{\omega - z - z' + i\eta} \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar z'}{2k_B T} \right) \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int dz B(z) * \check{P} \check{\sigma}(\omega + i\eta, z) \check{P}^{-1} \end{aligned} \quad (2.142a)$$

$$\check{\sigma}(\omega + i\eta, z) = \int dz' s(z') \frac{1}{\omega - z - z' + i\eta} \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar z'}{2k_B T} \right) \quad (2.142b)$$

$$\check{s}(z') = \check{P}^{-1} \check{S}(z') \check{P} \quad (2.142c)$$

とする, 以下では σ について考える.

遅延 Green 関数を \check{G}^R とし, $\check{\check{G}}^R = \check{P}^{-1} \check{G}^R \check{P}$ とする. $\check{\check{G}}^R$ は非対角部の位相を除いた Green 関数だから

$$\check{s}(z') = -2 \operatorname{Im} \check{\check{G}}^R \quad (2.143)$$

である. \check{s} の代わりに $\check{\check{G}}^R$ を用いて $\check{\sigma}$ の (各要素の) 実部と虚部を書き下すと

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \check{\sigma}(\omega + i\eta, z) &= - \int dz' \operatorname{Im} \check{\check{G}}^R(z') \left(\frac{1}{\omega - z - z' + i\eta} + \frac{1}{\omega - z - z' - i\eta} \right) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar z'}{2k_B T} \right) \\ &= - \operatorname{Im} \int dz' \check{\check{G}}^R(z') \left(\frac{1}{\omega - z - z' + i\eta} + \frac{1}{\omega - z - z' - i\eta} \right) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar z'}{2k_B T} \right) \end{aligned} \quad (2.144a)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \check{\sigma}(\omega + i\eta, z) &= i \int dz' \operatorname{Im} \check{\check{G}}^R(z') \left(\frac{1}{\omega - z - z' + i\eta} - \frac{1}{\omega - z - z' - i\eta} \right) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar z'}{2k_B T} \right) \\ &= \operatorname{Re} \int dz' \check{\check{G}}^R(z') \left(\frac{1}{\omega - z - z' + i\eta} - \frac{1}{\omega - z - z' - i\eta} \right) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar z'}{2k_B T} \right) \end{aligned} \quad (2.144b)$$

^{*35} $S = S(z') \exp(i\theta)$ と書けるから, 複素数であっても $z' \in \mathbf{C}$ 平面の上半面で $S(z')$ は解析的である.

^{*36} θ は一般に位置と運動量の関数.

^{*37} 簡単のため一成分のスピン一重項あるいはユニタリなスピン三重項超伝導を考えている. 多成分の場合は成分ごとに分けられよい.

となる。 $\check{\mathcal{G}}^R$ は上半面で解析的だから z' 積分を上半面での周回積分にして極を集めると

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \check{\sigma}(\omega + i\eta, z) = & + \operatorname{Im} \left[2\pi i \check{\mathcal{G}}^R(\omega - z + i\eta) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar(\omega - z + i\eta)}{2k_B T} \right) \right] \\ & - \operatorname{Im} \left[4\pi i \frac{k_B T}{\hbar} \sum_{n \geq 0} \check{\mathcal{G}}^R(i\epsilon_n) \left(\frac{1}{\omega - z - i\epsilon_n + i\eta} + \frac{1}{\omega - z - i\epsilon_n - i\eta} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.145)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \check{\sigma}(\omega + i\eta, z) = & - \operatorname{Re} \left[2\pi i \check{\mathcal{G}}^R(\omega - z + i\eta) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar(\omega - z + i\eta)}{2k_B T} \right) \right] \\ & + \operatorname{Re} \left[4\pi i \frac{k_B T}{\hbar} \sum_{n \geq 0} \check{\mathcal{G}}^R(i\epsilon_n) \left(\frac{1}{\omega - z - i\epsilon_n + i\eta} - \frac{1}{\omega - z - i\epsilon_n - i\eta} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.146)$$

となる。 $\operatorname{Im} z - i \operatorname{Re} z = -iz$, $-\operatorname{Im} z - i \operatorname{Re} z = -iz^*$ だから

$$\begin{aligned} \check{\sigma}(\omega + i\eta, z) &= -i \left[2\pi i \check{\mathcal{G}}^R(\omega - z + i\eta) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar(\omega - z + i\eta)}{2k_B T} \right) \right] \\ &+ i \left[4\pi i \frac{k_B T}{\hbar} \sum_{n \geq 0} \check{\mathcal{G}}^R(i\epsilon_n) \frac{1}{\omega - z - i\epsilon_n + i\eta} \right] - i \left[4\pi i \frac{k_B T}{\hbar} \sum_{n \geq 0} \check{\mathcal{G}}^R(i\epsilon_n) \frac{1}{\omega - z - i\epsilon_n - i\eta} \right]^* \\ &= 2\pi \check{\mathcal{G}}^R(\omega - z) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar(\omega - z)}{2k_B T} \right) - 4\pi \frac{k_B T}{\hbar} \sum_{n \geq 0} \left(\frac{\check{\mathcal{G}}^R(i\epsilon_n)}{\omega - z - i\epsilon_n} + \frac{\check{\mathcal{G}}^{R*}(i\epsilon_n)}{\omega - z + i\epsilon_n} \right) \end{aligned} \quad (2.147)$$

となる。 $\check{\mathcal{G}} = \check{P}^{-1} \check{G} \check{P}$ とすると $\check{\mathcal{G}}^R(i\epsilon_{n \geq 0}) = \check{g}(i\epsilon_n)$ であり, また $\check{g}^*(i\epsilon_n) = \check{g}(-i\epsilon_n)$ だから

$$\check{\sigma}(\omega + i\eta, z) = 2\pi \check{\mathcal{G}}^R(\omega - z) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar(\omega - z)}{2k_B T} \right) - 4\pi \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n \frac{\check{g}(i\epsilon_n)}{\omega - z - i\epsilon_n} \quad (2.148)$$

となる。(2.142a) に戻すと

$$\begin{aligned} \check{\Sigma}(\omega + i\eta) &= \frac{1}{8\pi^2} \int dz B(z) * \left[2\pi \check{\mathcal{G}}^R(\omega - z) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar(\omega - z)}{2k_B T} \right) - 4\pi \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n \frac{\check{G}(i\epsilon_n)}{\omega - i\epsilon_n - z} \right] \\ &= \frac{1}{4\pi} \int dz B(z) * \check{G}^R(\omega - z) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar(\omega - z)}{2k_B T} \right) - \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n D(\omega - i\epsilon_n) * \check{G}(i\epsilon_n) \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int dz \operatorname{Im} D^R(z) * \check{G}^R(\omega - z) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} + \tanh \frac{\hbar(\omega - z)}{2k_B T} \right) - \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n D(\omega - i\epsilon_n) * \check{G}(i\epsilon_n) \end{aligned} \quad (2.149)$$

が得られる^{*38}. 変形には (2.137b) と

$$B(\omega) = -2 \operatorname{Im} D^R(\omega) = -2 \operatorname{Im} D(\omega + i\eta) \quad (2.150)$$

を用いた.

^{*38} D の解析性に注意.

coth の扱い

数値計算を行なう際には $\coth x$ が $x = 0$ で発散するのが厄介である。計算時には次のように処理すればよい。

$$\int dz B(z) * \check{G}^R(\omega - z) \coth \frac{\hbar z}{2k_B T} = \int dz B(z) * \check{G}^R(\omega - z) \left(\coth \frac{\hbar z}{2k_B T} - \frac{2k_B T}{\hbar z} \right) + \int dz B(z) * \check{G}^R(\omega - z) \frac{2k_B T}{\hbar z} \quad (2.151)$$

B と \check{G}^R は上半面で解析的だから右辺第二項は

$$\begin{aligned} \int dz B(z) * \check{G}^R(\omega - z) \frac{2k_B T}{\hbar z} &= \frac{k_B T}{\hbar} \int dz B(z) * \check{G}^R(\omega - z) \left(\frac{1}{z + i\eta} + \frac{1}{z - i\eta} \right) \\ &= 2\pi i \frac{k_B T}{\hbar} B(0) * \check{G}^R(\omega) \end{aligned} \quad (2.152)$$

となる。残る $\coth x - 1/x$ は実軸上で発散しないため、安全に数値積分を実行することができる。

不純物自己エネルギーの扱い

不純物の自己エネルギー $\check{\Sigma}_{\text{imp}}$ の式 (2.133) をここでの表記で書くと、運動量平均を $\Gamma_n * G$ で表現して

$$\check{\Sigma}_{\text{imp}}(i\epsilon_n) = \frac{\Gamma_n}{\pi} * \check{G}(i\epsilon_n) \quad (2.153)$$

と書くことができる。 Γ_n には周波数依存性はないから、第二項を実軸上 $\omega + i\eta$ に解析接続するとそのまま

$$\check{\Sigma}_{\text{imp}}(\omega + i\eta) = \frac{\Gamma_n}{\pi} * \check{G}(\omega + i\eta) \quad (2.154)$$

となる。自己エネルギー全体は D から来るものと $\check{\Sigma}_{\text{imp}}$ の単純な和であるから、解析接続したのもも前節で得られる $\check{\Sigma}$ と不純物からくる $\check{\Sigma}_{\text{imp}}$ の和となる。

Einstein フォノンの低温での振る舞い

(2.149) を数値計算に使用する際、第一項目の存在により一般的には松原周波数での値だけでなく実周波数での値による自己無撞着計算が必要となる。一般にこの値は素早く収束する [83] が、場合によっては値が小さいため最初から無視することが可能である。

フォノンの特徴的な周波数を ω_0 としたとき、Einstein フォノンの Green 関数は

$$D(\omega) \propto \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2} \quad (2.155)$$

であり、そのスペクトル関数は

$$B(\omega) \propto \delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0) \quad (2.156)$$

である。一方 $\coth[\hbar z/(2k_B T)] + \tanh[\hbar(\omega - z)/(2k_B T)]$ の項は原点で発散するが、 $1 \ll |\hbar z|/(2k_B T), \hbar|\omega - z|/(2k_B T)$ すなわち $k_B T \ll |\hbar z|, |\hbar(\omega - z)|$ なる低温領域では非常に小さくなる。関数の振る舞いを図 2.3 に示した。 $k_B T, \hbar\omega$ が $\hbar\omega_0$ に比べて十分小さければ、この

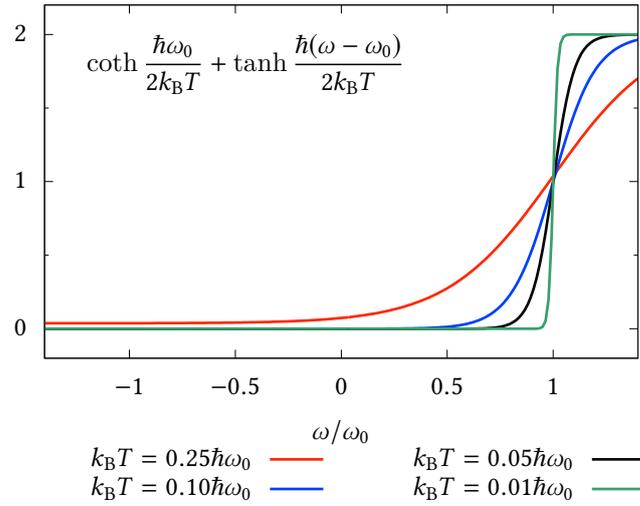


図 2.3: $\coth[\hbar\omega_0/(2k_B T)] + \tanh[\hbar(\omega - \omega_0)/(2k_B T)]$ の振る舞い.

項は $|z| \sim \omega_0$ の領域ではほとんど値を持たないことが分かる. すなわち D の振る舞いと併せると, 低温・低周波数領域を考える限り, (2.149) の右辺第一項は無視してもよいことが分かる.

2.2.8 補足

弱結合超伝導の場合, 対角項の自己エネルギー (Fock 項) は常伝導状態の Fermi エネルギーや有効質量にくりこんであるとし, 改めて超伝導状態で扱わないことが多い^{*39}. また準古典理論の枠組みで一様系を考えると, Σ の方程式は

$$\Sigma(\hat{k}) = N_0 k_B T \sum_n \left\langle U(\hat{k}, \hat{k}') \frac{-\pi \hbar \tilde{\epsilon}_n}{\sqrt{\hbar^2 \tilde{\epsilon}_n^2 + |\Delta|^2}} \right\rangle_{\hat{k}'} \quad (2.157)$$

となるが, $i\epsilon_n$ の上半面と下半面の対称性により, この項は消えるはずである. しかし準古典理論においても, 渦のような非一様な系においてこの項の影響を無視してよいかは自明ではない. また多くの場合 Σ は周波数にくりこんだ形で記述されるが, 緒論でも述べたように非一様系の場合でもくりこみがバルクと同様の形で行なえるかは自明ではない. そのため, 本論文では Coulomb 相互作用についての Fock 項を μ にくりこんであるとせず, また Fock 項を周波数に対するくりこんでない形で Eliashberg 方程式を記述した^{*40}. Coulomb 相互作用の発散についてはカットオフを明示的に取り入れることによって対処することにする.

本研究で用いる準古典理論は, Fermi 波数程度の振動をならし自由度を制限しているため, $1 \ll k_F \xi$ であるならば Gor'kov 方程式を直接扱うのに比べて必要な計算が少なく, 空間変調がある系を扱うのに当たって有利である. 一方, 後述するように渦の内部にはしばしばエネルギー差が $\Delta/(k_F \xi)$ 程度の離散準位が生じ, この離散的な状態が重要な意味を持つ状況が生じる. このような状態は準古典理論ではならされてしまっており間接的にしか見る

^{*39} 例えば第一原理計算で常伝導状態を求めたときには, Fock 項は既に取りこまれているはずである.

^{*40} 前述のように Fock 項が既に μ 等に含まれている場合にはこの扱いはできない.

ことができないため、必要がある際は Gor'kov 方程式あるいは長さの尺度が k_F^{-1} である波動関数の方程式 Bogoliubov-de Gennes 方程式を解かなければならない^{*41}.

2.3 フォノンに起因する超伝導

2.3.1 フォノンによる有効相互作用

電子と格子の相互作用によるエネルギー H_{e-ion} は、一番簡単には電子による電荷密度 ρ_e と格子イオンによる電荷密度 ρ_{ion} との間に働く Coulomb エネルギーであり

$$H_{e-ion} = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\rho_e(\mathbf{x})\rho_{ion}(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (2.158)$$

と書くことができる。また $\rho_e(\mathbf{x}) = q\bar{c}(\mathbf{x})c(\mathbf{x})$ として Fourier 変換すると

$$H_{e-ion} = \int d\mathbf{x} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\rho_{ion}(\mathbf{k})}{|k|^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \bar{c}(\mathbf{x})c(\mathbf{x}) \quad (2.159)$$

である。金属において遮蔽長 (Debye 長あるいは Thomas-Fermi 長) k_{TF}^{-1} の遮蔽が生じている場合は Coulomb エネルギーに由来する項が

$$\frac{1}{|k|^2} \rightarrow \frac{1}{|k|^2 + k_{TF}^2} \quad (2.160)$$

となる。 k_{TF} は通常の金属では原子の大きさの逆数の程度、すなわち Fermi 波数の程度である。 $\rho_{ion}(\mathbf{k})$ がフォノンによって

$$\rho_{ion}(\mathbf{k}) = q^* v_0(\mathbf{k}) \left(\bar{b}(\mathbf{k}) + b(-\mathbf{k}) \right) \quad (2.161)$$

と書けるとすれば (q^* はイオンの有効電荷), (2.11d), (2.73) より電子-格子相互作用に由来する有効相互作用 $U(i\epsilon_n - i\epsilon_{n'}, \mathbf{k} - \mathbf{k}')$ は

$$U(i\epsilon_n - i\epsilon_{n'}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{2\omega(\mathbf{k} - \mathbf{k}')/\hbar}{(\epsilon_n - \epsilon_m)^2 + \omega^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} \left(\frac{qq^*}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{v_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 + k_{TF}^2} \right)^2 \quad (2.162)$$

と書ける^{*42}.

もしフォノンの正準座標が分極 \mathbf{P} に比例するとすれば、 ρ_{ion} は分極電荷

$$-\nabla \cdot \mathbf{P} = \rho_{ion} \quad (2.163)$$

であるから

$$\rho_{ion}(\mathbf{k}) \propto q^* \frac{|k|}{\sqrt{\omega(\mathbf{k})}} \left(\bar{b}(\mathbf{k}) + b(-\mathbf{k}) \right) \quad (2.164)$$

であり^{*43}, このとき

$$U(i\nu_n, \mathbf{k}) \propto \frac{1}{v_n^2 + \omega^2(\mathbf{k})} \frac{k^2}{(|\mathbf{k}|^2 + k_{TF}^2)^2} \quad (2.165)$$

^{*41} 例えば各離散準位に対する不純物の効き方の違いを調べるには準古典 Green 関数ではなく Gor'kov Green 関数で考える必要がある [85, 86].

^{*42} 電子間 Coulomb 相互作用は一時的に省いた.

^{*43} $\nabla \cdot$ を作用させているので縦波フォノンのみを取った.

である。フォノン分散として Debye 模型を取るとフォノンの速度を v_p として $\omega(\mathbf{k}) = v_p |\mathbf{k}|$ だから、

$$U(iv_n, \mathbf{k}) \propto \frac{\omega^2(\mathbf{k})}{v_n^2 + \omega^2(\mathbf{k})} \frac{1}{|\mathbf{k}|^2 + k_{TF}^2} \quad (2.166)$$

となる。通常は $k_{TF} \sim k_F$ であるから、引数として取るほとんどの \mathbf{k} に対して $k_{TF} \gg |\mathbf{k}|$ である。また結合が弱い場合は系の特徴的な温度が小さくなり、このときほとんどの \mathbf{k} に対して $k_B T / \hbar \ll \omega(\mathbf{k})$ であるとすれば $U(iv_n, \mathbf{k})$ は引数依存性がなく、系は弱結合超伝導の(狭義の)BCS 方程式で記述できる。

2.3.2 電子-フォノン相互作用の模型

前節 (2.3.1) で述べた模型は Fröhlich が超伝導の説明を目的として考案した電子-格子相互作用模型 [87, 88] を元としている。電子フォノン相互作用には他にも様々な模型が存在する。

最もよく使用されている模型として Holstein による分子内の分極 (すなわち光学フォノン) と電子の結合を考え模型である [89, 90]。Holstein 模型は局所的な相互作用を考えより単純な模型になっている [4]。有効 Hamiltonian の形自体はほとんど同じだが、相互作用の広がり の “大きさ” の差はポーラロンを考える際には重要になる*44。

この二つとは全く異なる模型として Barišić-Labbé-Friedel (BLF) 模型もしくは Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型として知られる模型が存在する。この模型は、最初 1970 年に Barišić, Labbé, Friedel らが遷移金属超伝導の模型として提出し [92-94]、後に Su, Schrieffer, Heeger らがポリアセチレンにおけるソリトンの模型として独立に提案した [95, 96] BLF 模型では格子振動によって重なり積分の大きさ、すなわちホッピング項の大きさが変調すると考える。BLF 模型は一次元強束縛 (tight-binding) モデルにおけるフォノンの影響を調べる際によく用いられており (例えば [97])、また Fröhlich 模型, Holstein 模型とは別にポーラロンの模型として使用されている。

2.3.3 フォノンによる異方的超伝導

超流動ヘリウム 3 や銅酸化物超伝導体を始めとする現在知られている異方的超伝導の多くは、引力の機構としてスピンなどのフォノンではない機構が有力視されている。しかしフォノンによって異方的超伝導が出現しうことは理論的には禁止されておらず、その可能性自体は古くから指摘されてきた。例えば、1970 年代には超流動ヘリウム 3 の発見を契機に、遷移金属、特にパラジウムにおいてフォノン機構による異方的超伝導の可能性が指摘された [98]。パラジウムでは異方的超伝導の実現は難しいことが分かったが [99-102]、その後も銅酸化物超伝導体や Sr_2RuO_4 、プルトニウム系超伝導 [103, 104]、ドーブしたトポロジカル絶縁体 [105] などの、多くの非従来型超伝導体において、様々な新奇の対形成機構とともに、フォノンを対形成の媒介とした異方的超伝導が出現する機構の可能性が議論されている*45。

*44 例えば [91]

*45 銅酸化物に関しては [106] 等のレビュー論文が多数出ている。 Sr_2RuO_4 がフォノン機構超伝導である可能性は [107] で指摘されている。トポロジカル超伝導体候補である $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ はフォノンによる可能性

Eliashberg 方程式において Coulomb 斥力は、多くの場合周波数および波数に依存しない有効斥力 (Coulomb pseudo potential) μ^* として取り扱われる^{*46}. Hubbard 模型などの場合とは扱いが異なるが、いずれにせよ強い Coulomb 斥力は s 波チャンネルを抑制するため、 p 波や d 波のチャンネルがある程度の大きさで存在し、かつ電子間斥力が無視できない場合には、フォノンによる異方的超伝導の可能性が生じてくる^{*47}.

フォノンによる有効相互作用では、一般に s 波以外の成分は引力とは限らない. 例えば (2.165) において、フォノンを Einstein フォノン $\omega = \omega_0$ とし、 $|\mathbf{k}^2| + k_{\text{TF}}^2 \simeq k_{\text{TF}}^2$ とすれば、 p 波成分を含む相互作用が得られる. 電子の波数の大きさを k_{F} に制限し二次元 Fermi 面を仮定したとき、波数 $\mathbf{k}_1 = k_{\text{F}}(\cos \alpha_1, \sin \alpha_1)$ と波数 $\mathbf{k}_2 = k_{\text{F}}(\cos \alpha_2, \sin \alpha_2)$ の電子に働く相互作用は

$$\begin{aligned} U(i\nu_n, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) &\propto \frac{k}{v_n^2 + \omega_0^2} \frac{k}{k_{\text{TF}}^2} \\ &= \frac{k_{\text{F}}^2/k_{\text{TF}}^2}{v_n^2 + \omega_0^2} [2 - 2\cos(\alpha_1 - \alpha_2)] \end{aligned} \quad (2.167)$$

となるから ($\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$), s 波成分は引力であるが p 波成分は斥力になっていることが分かる.

十分に大きく引力的な異方的成分がある模型を得る一つの戦略は、何らかの理由で遮蔽が不十分である系、すなわち $k_{\text{TF}} \leq k_{\text{F}}$ である系を考えることである. Abrikosov は以下の模型

$$U(i\nu_n, \mathbf{k}) \propto \frac{\omega^2(\mathbf{k})}{v_n^2 + \omega^2(\mathbf{k})} \frac{1}{k^2 + k_{\text{TF}}^2} \quad (2.168)$$

を考え、遮蔽長 k_{TF}^{-1} が格子間隔よりもずっと長くなった場合には、有効相互作用が異方的になることを指摘した [111, 112]. また Shimahara と Kohmoto は二次元的層状物質に対して Abrikosov の模型を拡張し、 p 波や d 波超伝導が生じるパラメータ領域があることを示した [113, 114]. 不十分な遮蔽はフォノンによる異方的超伝導を産む唯一の模型というわけではない. 例えば Alexandrov は、銅酸化物をモデルとして二次元異方性が強い系での音響フォノンによる相互作用を用いて調べ、遮蔽が十分強い場合であっても d 波チャンネルが s 波や p 波のチャンネルに対して優位に立てる領域が存在することを示している [115, 116].

が [108] で議論されたが、フォノンによる対形成を仮定すると実験の転移温度が高すぎるという指摘もされている [109]. また有機超伝導 κ -BEDT-TTF でもフォノンによる異方的超伝導の理論が提案されている [110].

^{*46} 多くの場合 μ^* は常伝導状態では Fermi 準位にくりこまれていると考え非対角項にのみ相互作用として付け加えられる.

^{*47} 逆に、Coulomb 斥力等の何らかの斥力が無視できる場合に、フォノンのみによって異方的超伝導が生じるのは難しい [108].

第3章

渦の解析

本章では, 準古典理論を用いた渦の解析手法を, 主に解析的な手法を中心に述べる.

3.1 準古典理論による孤立渦の解析

3.1.1 Eilenberger 方程式の変形

Eilenberger 方程式は二本の Riccati 型の常微分方程式

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla\gamma = -\Delta^*\gamma^2 - 2(\hbar z - \Sigma + \mathbf{v}_F \cdot q\mathbf{A})\gamma - \Delta \quad (3.1a)$$

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla\bar{\gamma} = -\Delta\bar{\gamma}^2 + 2(\hbar z - \Sigma + \mathbf{v}_F \cdot q\mathbf{A})\bar{\gamma} - \Delta^* \quad (3.1b)$$

に書きかえることができる^{*1}[117–121]. Riccati 型常微分方程式を用いる手法は $\pm\mathbf{v}_F$ 方向の一次元の微分方程式であって数値的に取り扱いが比較的簡単であり, また境界条件 (初期値) の依存性がなく数値的に安定 [122] という利点があるため, Eilenberger 方程式を解く際に広く用いられている. 以下では射影子を用いた方法 [121, 123] で (3.1) を導出する. この方法はスピン空間を含めた 4×4 行列の Eilenberger 方程式に対しても適用可能であるが, ここでは簡単のためスピンがない 2×2 行列の Eilenberger 方程式に限定して示す.

2×2 行列 \check{P}_\pm を

$$\check{P}_\pm = \frac{1}{2} (\check{\tau}_0 \mp \check{g}/(i\pi)) \quad (3.2)$$

として定義する. $\check{g} = -\pi^2$ を用いると

$$\check{P}_\pm^2 = \check{P}_\pm \quad (3.3a)$$

$$\check{P}_+\check{P}_- = \check{P}_-\check{P}_+ = 0 \quad (3.3b)$$

が言えるため, \check{P}_\pm は射影である. 複素数^{*2} a, b を用いて

$$\check{P}_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ -b \end{pmatrix} (1 - ab)^{-1} \begin{pmatrix} 1 & a \end{pmatrix} \quad (3.4a)$$

$$\check{P}_- = \begin{pmatrix} -a \\ 1 \end{pmatrix} (1 - ba)^{-1} \begin{pmatrix} b & 1 \end{pmatrix} \quad (3.4b)$$

^{*1} しばしば Riccati-parametrization と呼ばれる.

^{*2} スピンがある場合には 2×2 行列.

とした \check{P}_\pm は (3.3) の性質および $\check{P}_- + \check{P}_+ = \check{\tau}_0$ を満たしている. \check{P}_\pm が Eilenberger 方程式 (2.99) の解となっていることに注意して, (2.99) に (3.4) を代入して展開し, (1, 2) 成分に (1, 1) 成分を, (2, 1) 成分に (2, 2) 成分を代入すると

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla a + \Delta^* a^2 + 2(\hbar z - \Sigma + \mathbf{v}_F \cdot q\mathbf{A})a + \Delta = 0 \quad (3.5a)$$

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla b - \Delta b^2 - 2(\hbar z - \Sigma + \mathbf{v}_F \cdot q\mathbf{A})b - \Delta^* = 0 \quad (3.5b)$$

が得られる. $a = \gamma$, $b = -\bar{\gamma}$ と置くと (3.1) が再現される. このとき \check{g} は

$$\begin{aligned} \check{g} &= i\pi (\check{P}_- - \check{P}_+) \\ &= \frac{i\pi}{1-ab} \begin{pmatrix} -ab-1 & -2a \\ 2b & 1+ab \end{pmatrix} \\ &= \frac{-i\pi}{1+\gamma\bar{\gamma}} \begin{pmatrix} 1-\gamma\bar{\gamma} & 2\gamma \\ 2\bar{\gamma} & -1+\gamma\bar{\gamma} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.6)$$

である. また \check{P}_\pm の定義で符号を逆にしても全く同じ議論ができるので

$$\check{g} = \frac{\mp i\pi}{1+\gamma\bar{\gamma}} \begin{pmatrix} 1-\gamma\bar{\gamma} & 2\gamma \\ 2\bar{\gamma} & -1+\gamma\bar{\gamma} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

と書くこともできる. \check{g} の符号は Green 関数の解析性 $\text{sgn } g = -\text{sgn}(\text{Im } z)$ によって決められる^{*3}.

γ と $\bar{\gamma}$ のバルク解は (3.1) で $\mathbf{v}_F \cdot \nabla = 0$ と置くことによって求められる. これらの式は二次方程式なので, γ , $\bar{\gamma}$ はそれぞれ二通りの可能性がある. また \mathbf{v}_F に沿って常微分方程式を解く際に, \mathbf{v}_F の向きに沿って解いていくか $-\mathbf{v}_F$ の向きに沿って解いていくかの自由度もある. 実際に計算するときどの選択肢を取るかは Green 関数の解析性に加えて解の安定性を議論することにより決められる^{*4}. 具体的には, $\text{Im } z > 0$ のときには γ を \mathbf{v}_F , $\bar{\gamma}$ を $-\mathbf{v}_F$ の向きに発展させ, それぞれ

$$\gamma = \frac{\Delta}{-\hbar z - i\sqrt{-(\hbar z)^2 + |\Delta|^2}}, \quad \bar{\gamma} = \frac{\Delta^*}{+\hbar z + i\sqrt{-(\hbar z)^2 + |\Delta|^2}} \quad (3.8)$$

を初期値とする. また $\text{Im } z < 0$ のときには γ を $-\mathbf{v}_F$, $\bar{\gamma}$ を \mathbf{v}_F の向きに発展させ, それぞれ

$$\gamma = \frac{\Delta}{-\hbar z + i\sqrt{-(\hbar z)^2 + |\Delta|^2}}, \quad \bar{\gamma} = \frac{\Delta^*}{+\hbar z - i\sqrt{-(\hbar z)^2 + |\Delta|^2}} \quad (3.9)$$

を初期値とし, さらに Green 関数を

$$\check{g} = \frac{-i\pi \text{sgn}(\text{Im } z)}{1+\gamma\bar{\gamma}} \begin{pmatrix} 1-\gamma\bar{\gamma} & 2\gamma \\ 2\bar{\gamma} & -1+\gamma\bar{\gamma} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

とすれば方程式は安定に解くことができ, かつ物理的に意味がある解が得られる^{*5}[120, 122, 124, 125].

^{*3} g は松原, 遅延, 先進 Green 関数のいずれかに対応しているとする.

^{*4} Riccati 型微分方程式への変換は, Eilenberger 方程式の発散する非物理的な解を組み合わせで発散しない物理的な解を作るというアイデア (“explosion trick” [72, 73, 120]) によって開発された.

^{*5} 初期値はそれほど重要ではない [122] が, 進行方向は重要である.

3.1.2 渦の角運動量

ペアポテンシャルの位相

渦に直交する面上での運動量の方向 α ($\cos \alpha = k_x/(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$, $\sin \alpha = k_y/(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$) に対して, ペアポテンシャルの位相が $e^{il\alpha}$ と変化する, すなわち Cooper 対が角運動量 l を持つ (“chirality” が l の) 超伝導を考える. 系の座標系を原点 (すなわち渦) を中心にして角度 θ 回転させると, 運動量 (の向き) は α から $\alpha - \theta$, 空間座標の角度成分は ϕ から $\phi - \theta$ に変換される. 系を回転させてもある準粒子が感じる自己エネルギーは変わらないはずであるから, 自己エネルギーの空間部分には回転に対して一定の制約がかかる. 系に円筒対称性を仮定すると, 回転による角度座標の変化から, 渦度 m (“vorticity” が l) の渦の周囲のペアポテンシャルは

$$\Delta(\alpha, r, \phi) \rightarrow \Delta(\alpha - \theta, r, \phi - \theta)e^{il\theta}e^{im\theta} \quad (3.11)$$

の対称性を持つことが分かる. Eilenberger 方程式でギャップに加える形で入る項⁶は回転に対して (3.11) と同じ変化をしなければならない.

異なる l を持つ成分のペアポテンシャルが共存しうる多成分の超伝導を考える. この場合, バルクではある l を持つ成分しか存在しなくとも, 渦近傍では空間反転対称性が破れているため, バルクには存在していない成分 l' が誘起されうる (カイラル p 波の場合 [126] は図 3.2 に示されるプロファイルを持つ.)⁷ 渦から十分遠い場所では l を持つ成分が m 巻きの渦を作っているから, 誘起された渦の位相の変化は回転に対して (3.11) と同じであることが必要である. すなわち系の θ の回転に対して

$$\Delta(\alpha, r, \phi) \rightarrow \Delta(\alpha - \theta, r, \phi - \theta)e^{il'\theta}e^{i(l+m-l')\theta} \quad (3.12)$$

と位相が変化する.

Cooper 対が角運動量 l を持つカイラル超伝導を考える. カイラル超伝導は時間反転対称性を破った基底状態が縮退しており, それぞれのペアポテンシャルは $e^{\pm il\alpha}$ の運動量依存性を持つ. バルクで $e^{+il\alpha}$ の状態が実現しているとする, 渦度 m の渦内部に誘起される $e^{-il\alpha}$ 成分のペアポテンシャルは (3.12) より回転に対し

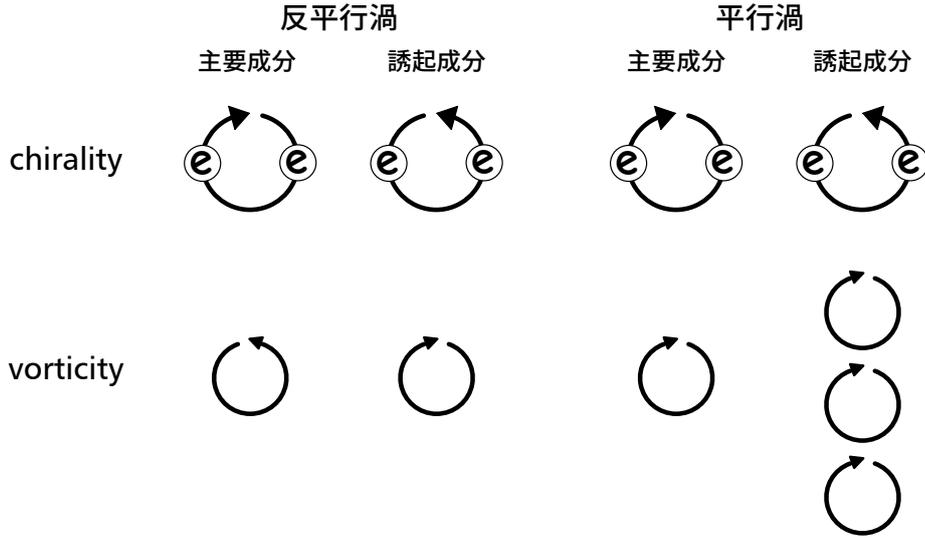
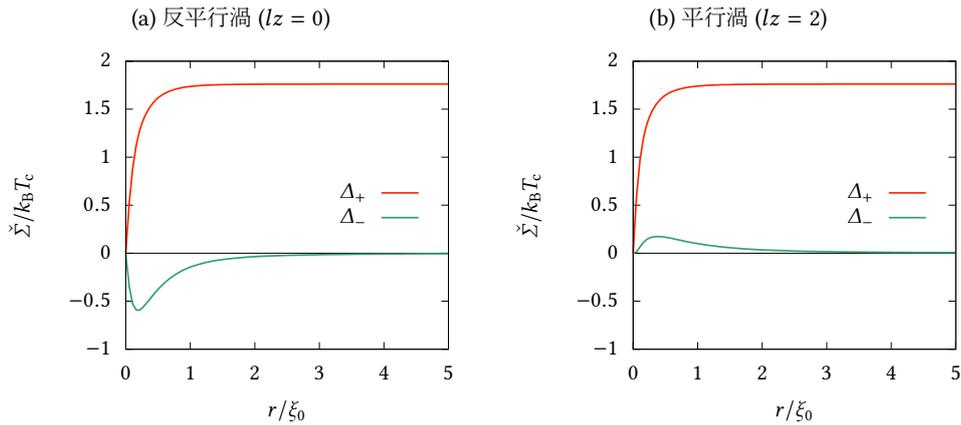
$$\Delta(\alpha, r, \phi) \rightarrow \Delta(\alpha - \theta, r, \phi - \theta)e^{-il\theta}e^{i(2l+m)\theta} \quad (3.13)$$

の位相を持つ. すなわち誘起成分は渦度 $2l + m$ の渦を形成する.

$l = 1$ の二次元カイラル p 波の場合, 渦度 1 の渦に対して $l + m = 0$ の渦と $l + m = \pm 2$ の二種類の渦が考えられる. 前者は Cooper 対の持つ角運動量と渦の持つ角運動量が反対向き (反平行) であり, 後者は同じ向き (平行) である. 以降ではそれぞれ反平行渦, 平行渦と呼ぶことにする. Ginzburg-Landau (GL) 理論の計算によって平行渦よりも反平行渦の方が安定であることが示されている [127] が, 実際の系ではドメイン境界から十分遠い場所であるならば平行渦は準安定状態として存在してもよいと考えられる. (3.13) より, 渦度 1 の反平行渦 (Cooper 対と併せた系の角運動量 $l_z = 0\hbar$) での誘起成分は渦度 -1 , 渦度 1 の平行渦 (系の角運動量 $l_z = 2\hbar$) の誘起成分は渦度 ± 3 を持つ (図 3.1)[128-130]. カイラル p 波の場合

⁶ 不純物自己エネルギーを考える場合は不純物自己エネルギー $\tilde{\Sigma}_{\text{imp}}$ の対角項.

⁷ l' は一般には一つだけとは限らない.

図 3.1: カイラル p 波の渦と角運動量.図 3.2: 準古典理論で求めた (弱結合で自己エネルギー対角成分を含めないときの) カイラル p 波超伝導の渦 (第二種極限 (磁場侵入長無限大, $\kappa^{-1} = 0$), $T/T_c = 0.3$).

合は特に, 反平行渦と平行渦は NMR[131, 132] や光学特性 [133, 134] など, 物性が大きく異なることが理論的に予想されている.

自己エネルギー対角部の位相

ギャップ方程式より, もし有限の値として存在するのならば Σ も存在しうる Δ の成分と同じ成分が存在し, また Σ は周波数 z と結合して方程式の中に入っているから, 運動量由来の位相と座標由来の位相を合計すると, 系の座標系の回転に対して余分な位相が付くことはなく, すなわち Σ は回転に対し不変になっているはずである.

s 波の場合, Σ は一成分であり回転によって運動量由来の位相は付かないから, 座標由来の位相も付かない. すなわち

$$\Sigma(\alpha, r, \phi) = \Sigma(r) \quad (\text{for } l = 0). \quad (3.14)$$

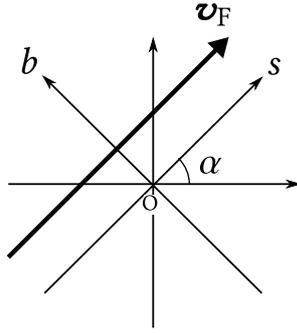


図 3.3: (s, b, α) の座標系. Eilenberger 方程式 (Riccati 型常微分方程式) は準古典経路上で解かれる.

角運動量 l のカイラル超伝導の場合, Σ には $e^{\pm il\alpha}$ の成分が存在しうするため, それぞれを Δ と同じように $\Sigma_{\pm} e^{\pm il\alpha}$ と書くことができる. よって Σ_{\pm} は系の回転に対して以下のように変換されるはずである.

$$\Sigma_+(r, \phi) \rightarrow \Sigma_+(r, \phi - \theta) e^{+il\theta}, \quad (3.15)$$

$$\Sigma_-(r, \phi) \rightarrow \Sigma_-(r, \phi - \theta) e^{-il\theta}, \quad (3.16)$$

すなわち Σ はもし有限の値を持つならば

$$\Sigma(\alpha, r, \phi) = \Sigma_+(r, \phi) e^{+il\alpha} + \Sigma_-(r, \phi) e^{-il\alpha} \quad (\text{for } l \neq 0), \quad (3.17)$$

$$\Sigma_+(r, \phi) = \Sigma_+(r) e^{-il\phi}, \quad (3.18)$$

$$\Sigma_-(r, \phi) = \Sigma_-(r) e^{+il\phi} \quad (3.19)$$

という形を持つ.

3.1.3 渦中心近傍の準古典 Green 関数

本節では, 準粒子の準古典経路の“衝突径数” b^* が渦の特徴的な長さ $\xi \sim \hbar v_F / (k_B T_c)$ に対して十分小さい場合を考え, Kramer と Pesch が提案した摂動的手法 (以下では Kramer-Pesch 近似と呼ぶ) [136] を用いて, 渦芯近傍の低エネルギー状態に対する Green 関数の解析解を求め, 議論する. 簡単のため Fermi 面は二次元的であるとする.

設定

座標系として渦を原点に取り \mathbf{v}_F と平行方向に s 軸, 垂直方向に b 軸 (衝突径数) を取り, 基準となる座標系から測った \mathbf{v}_F の角度を α とする (図 3.3)^{*9}. s 軸方向の Riccati 型微分方程式 (3.1) を考え, 磁場 \mathbf{A} は無視する. また境界条件として γ は $x = -s_c$ で, $\bar{\gamma}$ は $x = +s_c$ で一様系の解を取るとする^{*10}. $|\hbar z| \ll \Delta, \Sigma \ll \Delta, |b| \ll r = (s^2 + b^2)^{1/2} \simeq |s|$ として

$$\gamma = \gamma_0 + \gamma_1, \quad \bar{\gamma} = \bar{\gamma}_0 + \bar{\gamma}_1, \quad \Delta = \Delta_0 + \Delta_1, \quad b = 0 + b, \quad z = 0 + z, \quad \Sigma = 0 + \Sigma \quad (3.20)$$

^{*8} b は古典的な角運動量に相当する (例えば [135]).

^{*9} 三次元の場合は渦に垂直な面に射影した \mathbf{v}_F で考える [137, 138].

^{*10} 簡単のため周波数 z は上半面に取るとした.

と摂動を組む. 角運動量 $l > 0$ を持つカイラル超伝導のペアポテンシャルを考え, 渦度 m の渦近傍で b/s の一次の項まで取るとすると Δ は

$$\begin{aligned}
\Delta(\alpha, s, b) &= \Delta_\infty h(r) e^{im\phi} e^{+il\alpha} \\
&= \Delta_\infty h(r) \left(\frac{s+ib}{r} \right)^m e^{+i(l+1)\alpha} \\
&\simeq \Delta_\infty h \left(|s| + \frac{b^2}{2|s|} \right) \operatorname{sgn}(s) \left(1 + \frac{imb}{s} \right) e^{i(l+m)\alpha} \\
&\simeq \Delta_\infty \left[h(|s|) + \frac{b^2}{2|s|} h'(|s|) \right] \operatorname{sgn}(s) \left(1 + \frac{imb}{s} \right) e^{i(l+m)\alpha} \\
&\simeq \Delta_\infty \left[h(|s|) + \frac{b^2}{2|s|^2} h(|s|) \right] \operatorname{sgn}(s) \left(1 + \frac{imb}{s} \right) e^{i(l+m)\alpha} \\
&\simeq \Delta_\infty h(|s|) \left(1 + \frac{imb}{s} \right) \operatorname{sgn}(s) e^{i(l+m)\alpha} \tag{3.21}
\end{aligned}$$

である. ただし h は, $h(0) = 0$, $h(s = \pm\infty) = 1$ となる実函数で, $0 < h'(0) \ll 1$, $h'(\infty) = 0$ を満たしているとした^{*11}. また誘起成分は仮に存在しても影響は大きくないとして無視する. Δ_∞ は一様系でのペアポテンシャルの大きさである. 方程式へのペアポテンシャルの入り方に着目すると, $\gamma \rightarrow \gamma \exp[i(l+m)\alpha]$, $\bar{\gamma} \rightarrow \bar{\gamma} \exp[-i(l+m)\alpha]$ としてやれば, (3.1) を解くときに位相 α を落とすことができる. このとき

$$\check{g} = \frac{-i\pi}{1+\gamma\bar{\gamma}} \begin{pmatrix} 1-\gamma\bar{\gamma} & 2\gamma e^{+i(l+m)\alpha} \\ 2\bar{\gamma} e^{-i(l+m)\alpha} & -(1-\gamma\bar{\gamma}) \end{pmatrix} \tag{3.22}$$

であり, また

$$\Delta_0 = \operatorname{sgn}(s) \Delta_\infty h(|s|) \tag{3.23a}$$

$$\Delta_1 = \Delta_0 \frac{imb}{s} = i \operatorname{sgn}(s) \Delta_\infty h(|s|) \frac{mb}{s} \tag{3.23b}$$

である^{*12}.

$\gamma, \bar{\gamma}$ の初期値 (3.8) を摂動展開すると

$$\begin{aligned}
\gamma &= \frac{-\tilde{z} + i\sqrt{-\tilde{z}^2 + |\Delta|^2}}{\Delta^*} = -\frac{\tilde{z}}{\Delta^*} + i \frac{|\Delta|}{\Delta^*} \left(1 - \frac{\tilde{z}^2}{2|\Delta|^2} \right) \\
&= i \frac{\Delta}{|\Delta|} - \frac{\tilde{z}}{\Delta^*} + O\left(\frac{\tilde{z}^2}{|\Delta|^2} \right) \tag{3.24a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{\gamma} &= \frac{+\tilde{z} - i\sqrt{-\tilde{z}^2 + |\Delta|^2}}{\Delta} = \frac{\tilde{z}}{\Delta} - i \frac{|\Delta|}{\Delta} \left(1 - \frac{\tilde{z}^2}{2|\Delta|^2} \right) \\
&= -i \frac{\Delta^*}{|\Delta|} + \frac{\tilde{z}}{\Delta} + O\left(\frac{\tilde{z}^2}{|\Delta|^2} \right) \tag{3.24b}
\end{aligned}$$

^{*11} $0 = h'(0)$ のときは h の Taylor 展開は二次から始まるためその場合もこの項は消える.

^{*12} 式の形より $\Delta_0 \in \mathbf{R}$, $\Delta_1 \in i\mathbf{R}$ である.

であり, 十分遠方では $\Delta_0 = \text{sgn}(s)\Delta_\infty$, $\Delta_1 = 0$ であるから

$$\gamma_0 = +i \frac{\Delta_0}{|\Delta_0|} = +i \text{sgn } s, \quad (3.25a)$$

$$\bar{\gamma}_0 = -i \frac{\Delta_0^*}{|\Delta_0|} = -i \text{sgn } s, \quad (3.25b)$$

$$\gamma_1 = -\frac{\hbar\tilde{z}_\infty}{\Delta_0^*} = -\text{sgn}(s) \frac{\hbar\tilde{z}_\infty}{\Delta_\infty}, \quad (3.25c)$$

$$\bar{\gamma}_1 = +\frac{\hbar\tilde{z}_\infty}{\Delta} = +\text{sgn}(s) \frac{\hbar\tilde{z}_\infty}{\Delta_\infty} \quad (3.25d)$$

である (\tilde{z}_∞ はバルクでの \tilde{z}). よって

$$\gamma_0(s = -\infty) = \bar{\gamma}_0(s = \infty) = -i, \quad (3.26a)$$

$$\gamma_1(s = -\infty) = \bar{\gamma}_1(s = \infty) = \frac{\hbar\tilde{z}_\infty}{\Delta_\infty} \quad (3.26b)$$

である.

零次の解

零次の Riccati 方程式は

$$i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial s} \gamma_0 = -\Delta_0^* \gamma_0^2 - \Delta_0 \quad (3.27a)$$

$$i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial s} \bar{\gamma}_0 = -\Delta_0 \bar{\gamma}_0^2 - \Delta_0^* \quad (3.27b)$$

である. γ_0 の解は C' を積分定数として

$$\gamma_0(s) = i \tanh(u_0(s) + C'), \quad (3.28)$$

$$u_0(s) = \frac{1}{\hbar v_F} \int_0^s ds' \Delta_0(s') \quad (3.29)$$

で与えられる^{*13}. 今, 十分大きな有限の $s_c > 0$ に対して $\gamma_0(-s_c)$ がバルクと同じ値を持つとすると (3.26b) より $\gamma_0(-s_c) = -i$ であり, このとき $C' = -\infty$ であり^{*14}, 同様にして $\bar{\gamma}_0 = -i$ が得られる.

以上より $1 + \gamma_0 \bar{\gamma}_0 = 0$ だから, (3.22) より準古典 Green 関数は分母の項が零となり発散する. そのため Green 関数を求めるには最低でも摂動の一次の解を求める必要がある. 一方 Green 関数の分子の項は

$$\begin{pmatrix} 1 - \gamma_0 \bar{\gamma}_0 & 2\gamma_0 \\ 2\bar{\gamma}_0 & -(1 - \gamma_0 \bar{\gamma}_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -2i \\ -2i & -2 \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

より摂動の零次でも値を持つ. よって \check{g} の最低次の摂動解は

$$\mathbf{M}_{l+m} = \begin{pmatrix} 1 & -ie^{+i(l+m)\alpha} \\ -ie^{-i(l+m)\alpha} & -1 \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

として

$$\check{g} \simeq \frac{-2\pi i \mathbf{M}_{l+m}}{(1 + \gamma \bar{\gamma}) \text{ の一次の摂動}} \quad (3.32)$$

と書けることが分かる.

^{*13} $\Delta_0 \in \mathbf{R}$ に注意

^{*14} 有限の s_c を設けたのは, $s_c = \infty$ すなわち境界条件を無限遠方にとると (零次の範囲では) 任意の C' が許されてしまうための措置である.

一次の解

一次の方程式は

$$i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial s} \gamma_1 = -\Delta_1^* \gamma_0^2 - 2\Delta_0^* \gamma_0 \gamma_1 - 2\hbar \tilde{z} \gamma_0 - \Delta_1 \quad (3.33a)$$

$$i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial s} \bar{\gamma}_1 = -\Delta_1 \bar{\gamma}_0^2 - 2\Delta_0 \bar{\gamma}_0 \bar{\gamma}_1 + 2\hbar \tilde{z} \bar{\gamma}_0 - \Delta_1^* \quad (3.33b)$$

である. 定数変化法を用いるために斉次方程式

$$i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial s} \gamma_1^{(0)} = -2\Delta_0 \gamma_0 \gamma_1^{(0)}, \quad (3.34)$$

$$i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial s} \bar{\gamma}_1^{(0)} = -2\Delta_0 \bar{\gamma}_0 \bar{\gamma}_1^{(0)} \quad (3.35)$$

を考えると, この解は C'' , \bar{C}'' を定数として

$$\gamma_1^{(0)}(s) = C'' \exp\left(\frac{2}{\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' \Delta_0(s')\right) \quad (3.36)$$

$$\bar{\gamma}_1^{(0)}(s) = \bar{C}'' \exp\left(\frac{2}{\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' \Delta_0(s')\right) \quad (3.37)$$

と書くことができる^{*15}.

$$u(s) = \frac{2}{\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' \Delta_0(s') \quad (3.38)$$

と置いて (3.33) に代入すると

$$i\hbar v_F \frac{\partial C''}{\partial s} e^u = \Delta_1^* + 2i\hbar \tilde{z} - \Delta_1, \quad (3.39a)$$

$$i\hbar v_F \frac{\partial \bar{C}''}{\partial s} e^u = \Delta_1 - 2i\hbar \tilde{z} - \Delta_1^* \quad (3.39b)$$

すなわち

$$\begin{aligned} C''(s) &= \frac{1}{i\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' (\Delta_1^* - \Delta_1 + 2i\hbar \tilde{z}) e^{-u(s')} \\ &= \frac{2}{i\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' \left(i\hbar \tilde{z} - \frac{imb\Delta_0}{s'} \right) e^{-u(s')} \end{aligned} \quad (3.40a)$$

$$\begin{aligned} \bar{C}''(s) &= \frac{1}{i\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' (\Delta_1 - \Delta_1^* - 2i\hbar \tilde{z}) e^{-u(s')} \\ &= \frac{2}{i\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' \left(-i\hbar \tilde{z} + \frac{imb\Delta_0}{s'} \right) e^{-u(s')} \end{aligned} \quad (3.40b)$$

であるから

$$\gamma_1(s) = e^{u(s)} \left\{ \frac{2}{i\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' \left(i\hbar \tilde{z} - ib \frac{m\Delta_0(s')}{s'} \right) e^{-u(s')} + \frac{\hbar \tilde{z}_\infty}{\Delta_\infty} \right\}, \quad (3.41a)$$

$$\bar{\gamma}_1(s) = e^{u(s)} \left\{ \frac{2}{i\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' \left(-i\hbar \tilde{z} + ib \frac{m\Delta_0(s')}{s'} \right) e^{-u(s')} + \frac{\hbar \tilde{z}_\infty}{\Delta_\infty} \right\} \quad (3.41b)$$

となる. 積分定数は $s = -s_c$ と $s = +s_c$ で γ_1 と $\bar{\gamma}_1$ のそれぞれが一様系の解 (3.26b) を取るとして決定した^{*16}.

^{*15} $\gamma_0 = \bar{\gamma}_0 = -i$ を用いた.

^{*16} Δ_0 は奇関数であるから $u(s)$ は偶関数であり, また $u(s_c) = 0$ となる.

$\gamma\bar{\gamma}$ を一次まで取って (3.41) を代入すると

$$\begin{aligned}
\gamma\bar{\gamma} &\simeq \gamma_0\bar{\gamma}_0 + \gamma_1\bar{\gamma}_0 + \gamma_0\bar{\gamma}_1 \\
&= -1 - e^{u(s)} \left\{ \frac{2}{\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' \left(i\hbar\tilde{z} - ib \frac{m\Delta_0}{s'} \right) e^{-u(s')} + \frac{i\hbar\tilde{z}_\infty}{\Delta_\infty} \right\} \\
&\quad - e^{u(s)} \left\{ \frac{2}{\hbar v_F} \int_{s_c}^s ds' \left(-i\hbar\tilde{z} + ib \frac{m\Delta_0}{s'} \right) e^{-u(s')} + \frac{i\hbar\tilde{z}_\infty}{\Delta_\infty} \right\} \\
&= -1 - e^{u(s)} \left\{ \frac{2}{\hbar v_F} \int_{-s_c}^{s_c} ds' \left(i\hbar\tilde{z} - ib \frac{m\Delta_0}{s'} \right) e^{-u(s')} + \frac{2i\hbar\tilde{z}_\infty}{\Delta_\infty} \right\} \\
&= -1 - e^{u(s)} \left\{ iz \frac{2}{v_F} \int_{-s_c}^{s_c} ds' e^{-u(s')} - ibm\Delta_\infty \frac{2}{\hbar v_F} \int_{-s_c}^{s_c} ds' \frac{h(|s'|)}{|s'|} e^{-u(s')} \right. \\
&\quad \left. - i \frac{2}{\hbar v_F} \int_{-s_c}^{s_c} ds' \Sigma e^{-u(s')} + \frac{2i\hbar\tilde{z}_\infty}{\Delta_\infty} \right\} \\
&= -1 - iCe^{u(s)} (z - E_p(b) - \tilde{\Sigma}/\hbar + \Sigma_0/\hbar) \tag{3.42}
\end{aligned}$$

ここで

$$C = \frac{2}{v_F} \int_{-s_s}^{s_c} ds' e^{-u(s')}, \tag{3.43a}$$

$$E_p(b) = b \frac{4m\Delta_\infty}{C\hbar v_F} \int_0^{s_c} ds' \frac{h(s')}{s'} e^{-u(s')} = E'b, \tag{3.43b}$$

$$\tilde{\Sigma}(z, b, \alpha) = \frac{2}{Cv_F} \int_{-s_s}^{s_c} ds' \Sigma(z, s', b, \alpha) e^{-u(s')}, \tag{3.43c}$$

$$\Sigma_0 = \frac{2\hbar^2\tilde{z}_\infty}{C\Delta_\infty} \tag{3.43d}$$

とした. $h(s) \simeq \tanh(s/\xi)$ として規格化定数 C の大きさを見積もると

$$\begin{aligned}
u(s) &= \frac{2}{\hbar v_F} \int_{-s_c}^s ds' \Delta_\infty \tanh \frac{s'}{\xi} \\
&\simeq 2 \ln \frac{\cosh(s/\xi)}{\cosh(s_c/\xi)} \quad (\Delta_\infty \xi / (\hbar v_F) \simeq 1) \tag{3.44}
\end{aligned}$$

より

$$e^{-u(s)} = \frac{\cosh^2(s_c/\xi)}{\cosh^2(s/\xi)}, \tag{3.45a}$$

$$C \simeq \frac{4\hbar}{\Delta_\infty} \cosh^2 \frac{s_c}{\xi}, \tag{3.45b}$$

すなわち $\exp[-u(s)]/C \simeq \Delta_\infty \operatorname{sech}^2(s/\xi)/(4\hbar)$ である. また $s_c \gg \xi$ より $C\Delta_\infty/\hbar \gg 1$, すなわち $\hbar\tilde{z}_\infty \sim \Delta_0$ ならば $\Sigma_0 = 0$ である.

$1 + \gamma\bar{\gamma}$ の一次の摂動が求まったため, Green 関数の最低次の摂動解が得られる. (3.32) と (3.42) より

$$\check{g} \simeq \frac{2\pi e^{-u(s)} C^{-1} \mathbf{M}_{l+m}}{z - E_p(b) - \tilde{\Sigma}/\hbar} \tag{3.46}$$

がこの近似における渦中心近傍での Green 関数の摂動解 (Kramer-Pesch 解) である. $b = r \sin(\phi - \alpha)$ であることに注意すると (3.46) は

$$\check{g} \simeq \frac{2\pi e^{-u(r)} C^{-1} \mathbf{M}_{l+m}}{z - E'r \sin(\phi - \alpha) - \tilde{\Sigma}/\hbar} \tag{3.47}$$

とも書ける.

低エネルギー束縛状態

(3.46), (3.43) より, 渦芯近傍の準古典 Green 関数は実周波数 $z + i\eta$ に対して $\text{Re}(z - \tilde{\Sigma}) = E/b$ に極を持つ. 対角部の自己エネルギーを考えない場合は $\tilde{\Sigma} = 0$ だから, 渦内部には b に対して線形分散の準粒子が局所的に存在していることが分かる. この状態は超伝導-常伝導接合面等に出現する Andreev 束縛状態の一例になっており, 以下のような定性的な理解が可能である. 接合系においての Andreev 束縛状態を考えると, 秩序変数の大域的な位相が 180 度異なる超伝導状態が薄い常伝導状態 (秩序変数すなわちペアポテンシャルが 0 である領域) を挟んで接合しているとき, 常伝導状態の中に零エネルギー束縛状態が出現する. 単純化して渦を常伝導状態とみなせば, 渦の中心ではこの状態が実現しているとみなせるから, 渦の内部には零エネルギー束縛状態が存在していることが分かる [139, 140].

準粒子は渦の中に局所的に束縛されているから, その準位は離散的である. 渦芯束縛状態を作る離散準位は Caroli, de Gennes, Matricon らによって求められ [56], Caroli-de Gennes-Matricon 準位 (CdGM 準位) 呼ばれる. CdGM 準位の準位間のエネルギー差 δE は

$$\delta E \sim \frac{\Delta^2}{\mu_F} \sim \frac{\Delta}{k_F \xi} \quad (3.48)$$

である. 準古典理論が適用できるような多くの超伝導は $k_F \xi \gg 1$ であるため, CdGM 準位は連続スペクトルとみなせることが多い. 一方 $k_F \xi_0$ が小さい系においては走査型トンネル分光 (Scanning Tunneling Spectroscopy, STS) によって離散スペクトルが実際に観測されている [141].

s 波超伝導の (渦度 1 の) 渦の CdGM 準位の最低エネルギー準位は $\delta E/2$ である [56] が, カイラル p 波を含む一部の超伝導 (トポジカル超伝導) では最低エネルギー準位は 0 である [37–39]. この準粒子は生成演算子と消滅演算子と同じである Majorana 準粒子 [36] であるため, 非可換統計性 [39] などの新奇な物性を示すことが期待されており, このような系は現在盛んに研究されている [142–144].

図 3.4 に, ($k_F \xi \gg 1$ の場合の) 渦内準粒子の分散関係の概念図を示す. 通常の渦は円筒対称であるから, 準粒子が持つ角運動量は準粒子を記述する上でよい量子数になっている. 衝突径数 b は古典的な角運動量に相当しているから, 渦において分散関係を描く場合には状態を示す指標として b を取ることが多い. 衝突係数 b を持つ準粒子が周波数 ω を持つことは, 物理的には直径 ξ 程度の領域に束縛された角運動量 b を持つ準粒子が角周波数 ω で歳差運動していると理解できる (図 3.5)[145]. b が小さい, すなわち渦に近い準粒子は b に対して線形の分散を持ち, また b が大きい, すなわち渦から離れた準粒子は b が大きくなるにつれてバルクのバンド (ギャップ端) へと近付き, 最終的に分枝はギャップ端の状態に融合する. ギャップ内部の分散の分枝が一本なのは渦が 1 巻きであることおよびスピンの縮退していることによる. 分枝の数はトポジカルに保護されており, バルクの状態が壊れるようなことがなければ, b がよい量子数でなくなることはあっても, 分散のおおまかな形自体は変わらない^{*17}.

^{*17} 例えば [18].

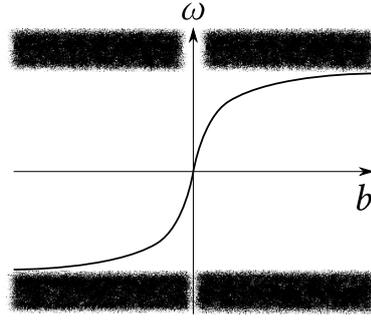


図 3.4: 渦内準粒子の分散関係の概念図. 衝突径数 b および周波数 ω の特徴的な値はコヒーレンス長 ξ とエネルギーギャップの大きさ (ペアポテンシャルの大きさあるいは転移温度 T_c) である.

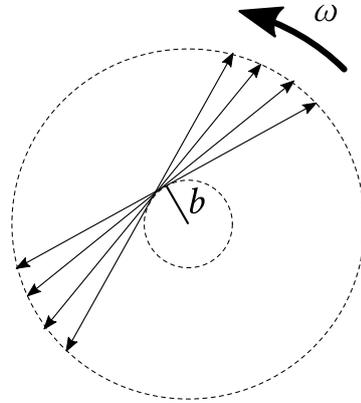


図 3.5: 準粒子束縛状態の物理的解釈.

3.1.4 Kramer-Pesch 効果

$e^{i\alpha}$ の成分を持つペアポテンシャルのギャップ方程式

$$\Delta(i\epsilon_m, \mathbf{r}) = N_0 k_B T \sum_n \langle v e^{-i\alpha} f(i\epsilon_n, \alpha, \mathbf{r}) \rangle_\alpha \quad (3.49)$$

を考える. 簡単のため $\tilde{\Sigma} = 0$ とし $m = 1$ の渦に対して (3.47) を代入すると

$$\Delta(i\epsilon_m, r, \phi) = 2\pi N_0 v k_B T \frac{e^{-u(r)}}{C} \sum_n \left\langle \frac{-ie^{i\alpha}}{i\epsilon_n - E'r \sin(\phi - \alpha)} \right\rangle_\alpha \quad (3.50)$$

となる^{*18}. 渦の中心に十分に近い ($E'r \ll k_B T / \hbar$) ときは

$$\begin{aligned} \Delta(i\epsilon_m, r, \phi) &\approx 2\pi N_0 v k_B T \frac{e^{-u(r)}}{C} \sum_n \left\langle \frac{-ie^{i\alpha}}{i\epsilon_n} \left(1 + \frac{E'r \sin(\phi - \alpha)}{i\epsilon_n} \right) \right\rangle_\alpha \\ &= \pi N_0 v k_B T \frac{e^{-u(r)}}{C} \sum_n \frac{E'r e^{i\phi}}{\epsilon_n^2} \\ &\simeq \Delta_\infty e^{i\phi} \frac{r}{\xi_1} \end{aligned} \quad (3.51)$$

^{*18} $\mathbf{r} = r(\cos \phi, \sin \phi)$ とした.

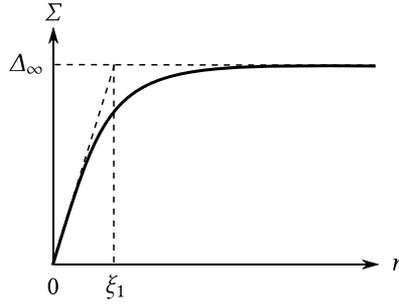


図 3.6: 渦における“回復長” ξ_1 .

となる. ここで ξ_1 は

$$\xi_1^{-1} \simeq \left(\frac{N_0 v \hbar}{4\pi} \sum_n \frac{1}{(2n+1)^2} \right) \frac{E'}{k_B T} \propto \frac{\hbar E'}{k_B T} \quad (3.52)$$

である. E' は定義より

$$E' = \frac{4\Delta_\infty}{\hbar v_F} \int_0^{s_c} ds' \frac{h(s') e^{-u(s')}}{s' C} \quad (3.53)$$

である*¹⁹. 十分低温では (3.52) より $\xi_1 \ll \xi$ となり, ペアポテンシャルは非常に早く回復するから, (3.53) の積分を

$$\int_0^{s_c} ds' \frac{e^{-u(s')} h(s')}{C s'} \propto \frac{\Delta_\infty}{\hbar} \int_{\xi_1}^{\xi} ds' \frac{1}{s'} \quad (3.54)$$

としてもよいだろう. すなわち $\hbar v_F / \Delta_\infty \simeq \xi$ と併せると

$$\hbar E' \propto \frac{\Delta_\infty}{\xi} \ln \frac{\xi}{\xi_1} \quad (3.55)$$

$$\begin{aligned} \frac{\xi_1}{\xi} &\propto \frac{k_B T}{\Delta} \frac{1}{\ln(\xi/\xi_1)} \simeq \frac{k_B T}{\Delta} \frac{1}{\ln[\Delta/(k_B T)] + \ln(\xi/\xi_1)} \\ &\simeq \frac{k_B T}{\Delta} \frac{1}{\ln[\Delta/(k_B T)]} \end{aligned} \quad (3.56)$$

が得られる. ξ_1 は渦におけるペアポテンシャルの“回復長”とみなせるから (図 3.6), (3.56) は低温で渦の半径が温度 T にほぼ比例して収縮していくことを意味している. この現象は Kramer-Pesch 効果 [136, 146, 147] と呼ばれ, 実験でも観測されている [148].

3.1.5 不純物効果

一様系の s 波超伝導では Anderson の定理 [149] が成立しており不純物の影響は小さいことが知られているが, 渦に対しては必ずしもそうではなく, 不純物が小さくない影響を与えることが知られている.

前述のようにカイラル p 波超伝導の渦は平行渦と反平行渦で物性が大きく異なることが予想されている. 不純物に対しても, 平行渦と反平行渦は大きな差異を見せる. 不純物がユニタリ的な非常に強い不純物でないならば*²⁰, 反平行渦の渦内束縛状態は不純物耐性を

*¹⁹ $m = 1$ としている.

*²⁰ 不純物がユニタリ散乱体として記述できる場合には反平行渦も耐性を失なう [150–152].

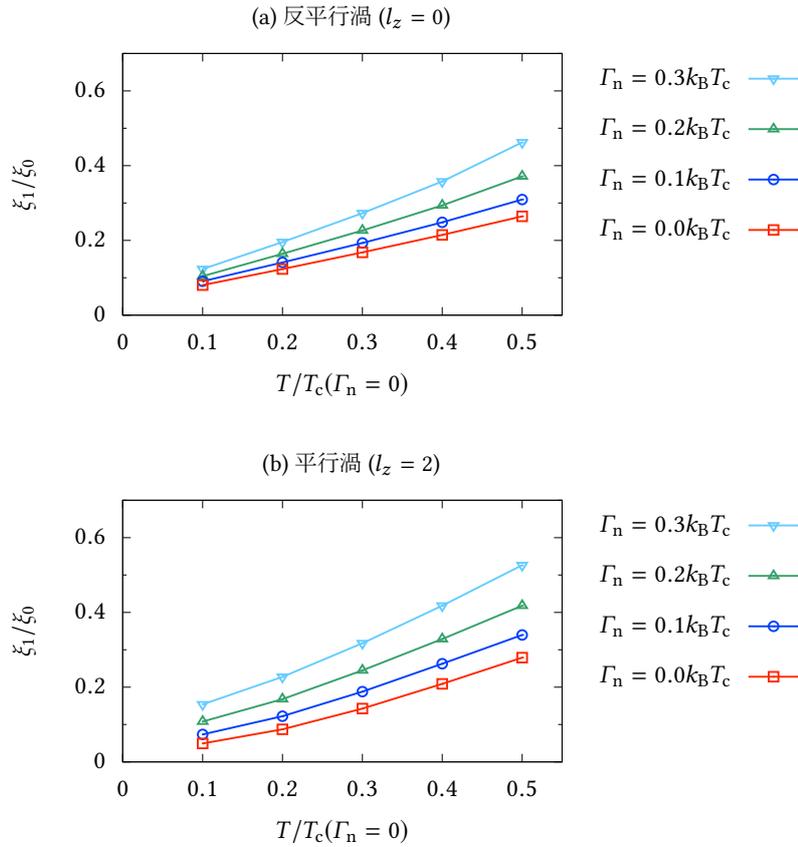


図 3.7: (弱結合) カイラル p 波超伝導の Kramer-Pesch 効果に対する不純物の影響 ($\kappa^{-1} = 0$).

持つ。その一方で平行渦はバルク、あるいは s 波の渦と同様に不純物に対して敏感である [38, 128, 129, 133, 151–156]. このことは, 3.1.3 節の議論において, 不純物自己エネルギーの項加えることにより示すことができる [152, 153]. 2.2.6 節で議論した不純物効果は非ユニタリであるから, (2.133) による自己エネルギーに対して反平行渦の渦内束縛状態は耐性を持つ。

3.1.4 節で示したように Kramer-Pesch 効果は低エネルギーの状態が重要な現象であるため, 渦の収縮の具合によって不純物の低エネルギー状態への影響の程度を見ることができる [128, 154]. 図 3.7 では (弱結合) カイラル p 波に Born 的な不純物を加えた場合の“回復長” ξ_1 の温度依存性を示している. 反平行渦では図 3.7a のように低温では不純物が効かなくなっているのに対し, 平行渦では図 3.7b と振る舞いが異なり, 不純物が多い場合に低温での渦の収縮が抑制されていることが分かる。

第4章

強結合超伝導の渦

本章では、本研究によって得られた結果について述べる。

4.1 対象とする系

本節では本研究の対象とする模型および数値計算の手法を述べる。

4.1.1 本研究で用いる模型

本研究ではフォノン機構による超伝導模型を採用した。これはギャップ方程式に周波数依存性を加えて Eliashberg 方程式で記述することが必要となる模型の中で、フォノン機構による模型が最も簡単なものと考えられるという理由による。有効相互作用として s 波超伝導に関しては一般的に使用される

$$U(i\epsilon_n, \epsilon_{n'}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{A\omega_0^2}{(\epsilon_n - \epsilon_{n'})^2 + \omega_0^2} \quad (4.1)$$

またカイラル p 波超伝導に関しては二次元等方的な Fermi 面を持つとして

$$U(i\epsilon_n, \epsilon_{n'}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{A\omega_0^2}{(\epsilon_n - \epsilon_{n'})^2 + \omega_0^2} \times 2 \cos(\alpha - \alpha') \quad (4.2)$$

の形を仮定した。ここで $\mathbf{k} = k_F(\cos \alpha, \sin \alpha)$, $\mathbf{k}' = k_F(\cos \alpha', \sin \alpha')$ とし、またフォノン (Bose 粒子) は Einstein フォノンとして ω_0 はフォノン運動量によらない定数とした。 A は結合定数であり、実際の計算では ω_0 を決めたときに T_c が 1 になるように決定した (付録 B.2)。 (4.2) の形は、 p 波引力成分が存在する有効相互作用から、ちょうど s 波引力成分がキャンセルするように有効 Coulomb 斥力 μ^* を差し引くことによって作ることができる^{*1}。 U が与えられればギャップ方程式 (2.100) より自己エネルギー $\check{\Sigma}$ は Green 函数 \check{g} から

$$\check{\Sigma}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) = k_B N_0 T \sum_{n'} \left\langle U(i\epsilon_n - i\epsilon_{n'}, \hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{k}}') \check{g}(i\epsilon_{n'}, \hat{\mathbf{k}}', \mathbf{r}) \right\rangle_{\hat{\mathbf{k}}'}, \quad (4.3)$$

で得ることができる。

本研究では超伝導機構をフォノンとしたが、有効電子間相互作用が (4.1), (4.2) の形で近似でき、準古典近似が成立する条件 $k_B T_c, \hbar \omega_0 \ll \mu_F$ を満たす系であれば、BCS 理論が電子間

^{*1} 本来は電子密度等の条件が課せられるはずだが簡単のため無視をする。

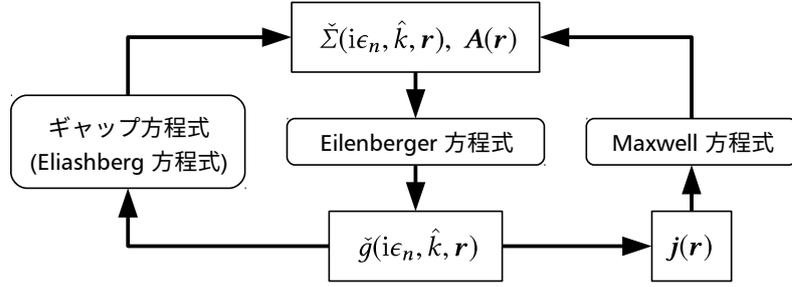


図 4.1: 自己無撞着な計算の流れ.

引力の起源を問わず適用可能であるのと同様に, 本研究の結果は引力の起源を問わず一般的に適用可能であると考えられる. またフェルミ粒子と Bose 粒子の結合が弱ければ, ω_0 の極限を取った弱結合の形が普遍性を持つと考えられるから, 少なくとも ω_0 がある程度の大きさを持っていれば, ω_0 は弱結合の極限からのずれを記述したものと考えられ, (4.1) および (4.2) の形はやはり一定の普遍性を持っていると考えられる.

本研究では準古典理論を用いて孤立渦を解析した. 系としては s 波およびカイラル p 波であるため, Eilenberger 方程式は 2×2 行列の形をしている (2.99)

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla \check{g}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) + \left[i\hbar\epsilon_n \check{\tau}_3 + q\mathbf{v}_F \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \check{\tau}_3 - \check{\Sigma}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}), \check{g}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) \right] = 0, \quad (4.4)$$

を使用することができる. 電磁場に関しては電流の式 (2.113) および Maxwell 方程式 (Ampère の式)

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= \sum_{\varsigma} \mathbf{j}(\mathbf{r}, \varsigma) \\ &= qk_B T \sum_{\epsilon_n} \left\langle N_0 \mathbf{v}_F [g(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) - \bar{g}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r})] \right\rangle_{\hat{k}} \end{aligned} \quad (4.5a)$$

$$\nabla \times [\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})] = \mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad (4.5b)$$

に従った. 電磁場に関しては三次元で考え, z 軸方向は一様であるとした. 系に不純物を加える場合は, (2.133) に従って不純物の効果を自己エネルギーを介して加えることとした.

4.1.2 数値計算

本研究の数値計算では全て特徴的な温度 (エネルギー) として T_c ($k_B T_c$), 速度として v_F , 長さとして $\xi_0 = \hbar v_F / (k_B T_c)$ を採用し, $T_c = 1$ ($k_B T_c = 1$), $v_F = 1$, $\xi_0 = 1$ の単位系で計算を行った. 電磁気的な量として Ginzburg-Landau パラメータ (に比例するパラメータ) κ を

$$\kappa^{-2} = \xi_0^2 \frac{\hbar v_F^2 q^2 N_0}{\mu_0} \quad (4.6)$$

と定義した. 渦の自由エネルギー (バルクからの自由エネルギー差) は κ の対数で発散するため (付録 A.3), 自由エネルギーを計算するためには有限の κ を設定する必要がある. また孤立渦に対する数値計算を行なう際には境界条件としてバルクを取るが, κ が小さいほどバルクが距離的に近くなるため, 実際の物理系からの要請がある場合や κ の依存性を見る必要がある場合を除けば κ が小さい方が数値計算には都合がよい. 本論文では必要がある

場合は $\kappa^{-1} = 0.4$ を取った*2.

座標系としては、渦が原点に位置する円筒座標系を用い、また自由エネルギーの空間積分の精度を高めることを目的として、動径方向の格子点として Gauss-Lobatto 則の積分点を変数変換したものをを用いた。また必要がない場合は円筒対称性を仮定して、ギャップ方程式はある角度に固定した動径方向のみ行ない、それ以外の角度は適宜空間座標に由来する位相を付けることによって求めた。

Eilenberger 方程式を変形した Riccati 型の微分方程式を解く際には、経路に沿って四次-五次の可変ステップ幅 Runge-Kutta 法 (Dormand-Prince 法)[157] を用い、初期条件は (3.8), (3.9) を使用した。実周波数での計算では収束因子として $\eta = 0.01k_B T_c$ を用い、またギャップ方程式の松原周波数のカットオフ ϵ_c は $20k_B T_c$ を取った。

系の境界条件として、Green 関数および自己エネルギーの対角部分は考えている系の外側ではバルクの値を取るとした。ただしペアポテンシャルは実空間での渦に起因する位相 $e^{\pm i\phi}$ を持つとした*3。カイラル p 波の場合、 $\mathbf{v} = v_F(\cos \alpha, \sin \alpha)$ およびバルクに存在するペアポテンシャル成分の α 依存性すなわち $e^{\pm i\alpha}$ と併せると、 $e^{\pm i\phi}$ と $e^{\pm i\alpha}$ の組み合わせによって平行渦と反平行渦が選ばれる。また考えている領域の中での磁束は磁束量子 1 個分として、領域の外側ではベクトルポテンシャル \mathbf{A} としてその漸近形の値を用いた。また Green 関数から求めた電流 \mathbf{j} から Maxwell 方程式 (4.5) を用いて、Poisson 方程式

$$-\nabla^2(q\mathbf{A}) = 2q^2\mu_0 N_0 k_B T \sum_{\epsilon_n} \langle \mathbf{v}_F g(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \rangle \quad (4.7)$$

を解くことにより、考えている計算領域内部の \mathbf{A} を求めた。Poisson 方程式を解く際には、数値計算ライブラリとして Eigen[158] を用いた。自己エネルギー $\tilde{\Sigma}$ と \mathbf{A} を用いて自由エネルギーを求める際には、式 (2.118) を用いた。s 積分は 15 点 Gauss-Kronrod 則 [159] を用いて行なった。

以上を組み合わせ、本研究では $\tilde{\Sigma}$, \mathbf{A} および \tilde{g} に関する自己無撞着な数値計算を行なった (図 4.1)。繰り返しの打ち切りは $1 \times 10^{-4} T_c$ を目安に行なった。また自己無撞着計算の繰り返し計算の際、自己エネルギーに対して加速および安定化のため Anderson 加速法 [160, 161] を用いた。

4.2 自己エネルギーの対角成分

本節では、準古典理論かつ弱結合理論の下においても、カイラル p 波超伝導の渦では自己エネルギー対角成分が Δ と同じ程度の大きさで生じることを示す。Kramer-Pesch 近似が成立する範囲ではこの結果は拡張可能であり、スピン一重項超伝導体では自己エネルギー対角成分を考慮する必要は基本的にはない*4一方で、スピン三重項超伝導体では一般に弱結合の場合でも自己エネルギー対角成分が有限の大きさで生じることが示される。本節の計算は全て渦が円筒対称性 (あるいはペアポテンシャルの対称性から要請される回転対称性*5) を持つことを仮定して行なっている。

*2 これは Sr_2RuO_4 の侵入長と同じ程度の大きさである [17].

*3 f, \tilde{f} にもペアポテンシャル由来の位相が付く。

*4 強結合 s 波の場合はバルクにおいてももともと考慮する必要がある。

*5 例えば $d_{x^2-y^2}$ 波であれば四回回転対称性

4.2.1 弱結合の場合

渦中心付近の自己エネルギーを考えるため、弱結合 s 波のギャップ方程式

$$\Sigma(\mathbf{r}) = N_0 k_B T \sum_n v \langle g(i\epsilon_n, \alpha, \mathbf{r}) \rangle_\alpha \quad (4.8)$$

に g の Kramer-Pesch 解 (3.46) を代入すると

$$\begin{aligned} \Sigma(r, \phi = 0) &= N_0 k_B T \sum_n v \left\langle \frac{2\pi e^{-u(r)}/C}{i\epsilon_n + E'r \sin \alpha} \right\rangle_\alpha \\ &= v N_0 k_B T \sum_{\epsilon_n > 0} \int d\alpha \left(\frac{1}{i\epsilon_n + E'r \sin \alpha} + \frac{1}{-i\epsilon_n + E'r \sin \alpha} \right) \frac{e^{-u(r)}}{C} \\ &= v N_0 k_B T \sum_{\epsilon_n > 0} \int_{-\pi}^{+\pi} d\alpha \frac{2E' \sin \alpha}{\epsilon_n^2 + E'^2 r^2 \sin^2 \alpha} \frac{e^{-u(r)}}{C} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (4.9)$$

となる。 Σ は円筒対称であることを用い、最終行は分子が奇関数、分母が偶関数であることから言える。バルクでも弱結合ならば Σ は値を持たないから、少なくとも渦の系においては、弱結合 s 波では自己エネルギー対角成分は非常に小さいと考えられる。

一方、カイラル p 波のギャップ方程式

$$\Sigma_\pm(\mathbf{r}) = N_0 k_B T \sum_n v \langle e^{\mp i\alpha} g(i\epsilon_n, \alpha, \mathbf{r}) \rangle_\alpha \quad (4.10)$$

に渦内部の Kramer-Pesch 解 (3.46) を代入すると

$$\begin{aligned} \Sigma_\pm(r, \phi = 0) &= N_0 k_B T \sum_n v \left\langle e^{\mp i\alpha} \frac{2\pi e^{-u(r)}/C}{i\epsilon_n + E'r \sin \alpha} \right\rangle_\alpha \\ &= N_0 k_B T \sum_{\epsilon_n > 0} \frac{4ve^{-u}}{C} \int d\alpha \frac{(\cos \alpha \mp i \sin \alpha) \sin \alpha E'r}{(E'r \sin \alpha)^2 + \epsilon_n^2} \\ &= \mp 8i\pi v \frac{e^{-u}}{CE'r} N_0 k_B T \sum_{\epsilon_n > 0} \left(1 - \frac{\epsilon_n/(E'r)}{\sqrt{\epsilon_n^2/(E'r)^2 + 1}} \right). \end{aligned} \quad (4.11)$$

よって十分に渦の中心の近く、すなわち $E'r \ll \epsilon_n$ であれば

$$\begin{aligned} (4.11) &\simeq \mp 4i\pi v \frac{e^{-u}}{C} N_0 k_B T \sum_{\epsilon_n > 0} \frac{1}{\epsilon_n} E'r \\ &= \mp \frac{i\pi \hbar^2 N_0 v e^{-u}}{2Ck_B T} E'r \end{aligned} \quad (4.12)$$

であり、 Σ は座標に依存した値を持つ。すなわちカイラル p 波の場合には s 波の場合と異なり、渦内部では自己エネルギー対角成分が値を持ってよい。

自己無撞着な数値計算によって得られた弱結合 s 波およびカイラル p 波の自己エネルギーを図 4.2, 4.3 に示す。 s 波の場合は Σ は常にほぼ 0 である一方で、 p 波の場合は中心からある程度離れた渦の内部で $\Delta \simeq k_B T_c$ と同じ程度の大きさの値を持っていることが分かる。

カイラル p 波では渦内部では Σ が値を持つが、しかし低エネルギー状態への影響は小さいと考えられる。一つ目に、(4.12) より $r \rightarrow 0$ で $\Sigma \rightarrow 0$ より渦中心にピークを持つ零エネ

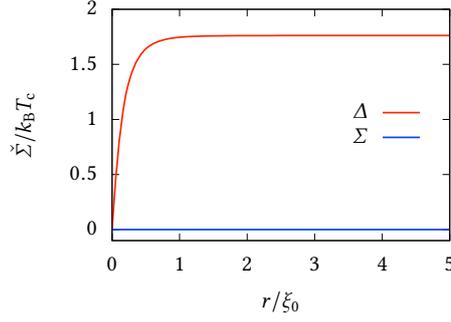


図 4.2: 弱結合 s 波の自己エネルギー ($\kappa^{-1} = 0, T/T_c = 0.3$).

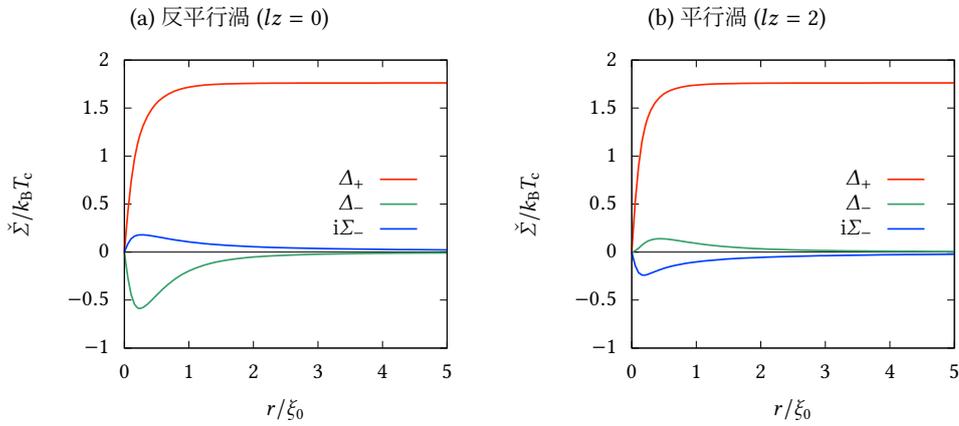


図 4.3: 弱結合だが自己エネルギー対角成分を含めたときのカイラル p 波超伝導の渦の自己エネルギー ($\kappa^{-1} = 0, T/T_c = 0.3$).

ルギー状態に対する Σ の影響は小さいであろう。ただし Green 函数には s で積分した形で入ってくるため、これだけでは影響を議論するには不十分である*6。次に (4.12) から、カイラル p 波では渦の中心近くの Σ は

$$\begin{aligned}\Sigma(\alpha, r, \phi) &\propto i \left(e^{+i\alpha - i\phi} - e^{-i\alpha + i\phi} \right) \frac{e^{-u(r)}}{C} r \\ &= 2 \sin(\phi - \alpha) \frac{e^{-u(r)}}{C} r\end{aligned}\quad (4.13)$$

であるが、渦中心を通る準粒子は $\alpha = \pm\phi$ であるから Σ は r によらず 0 である。よって渦芯に局在する 0 エネルギー状態に対しては Σ の影響は小さいと考えられる。また、このことは $\tilde{\Sigma}$ の定義からも確認できる。 Σ は $\Sigma_{\pm}(r)e^{\pm i(\alpha - \phi)}$ の ϕ 依存性を持っているから、 Δ と同様に、原点の近くではある函数 σ を用いて b に関する最低次の摂動を $\sigma(|s|)\text{sgn}(s)$ と書くことができる。よって $\tilde{\Sigma}$ を評価すると

$$\tilde{\Sigma} \propto \int_{-s_c}^{s_c} ds' \sigma(|s'|) \text{sgn}(s') \frac{e^{-u(s')}}{C} = 0\quad (4.14)$$

*6 カイラル p 波の渦に対するユニタリ散乱体の不純物効果は、 s に沿って値を積分した項で Green 函数に入ってくるのが重要な帰結を与える [152].

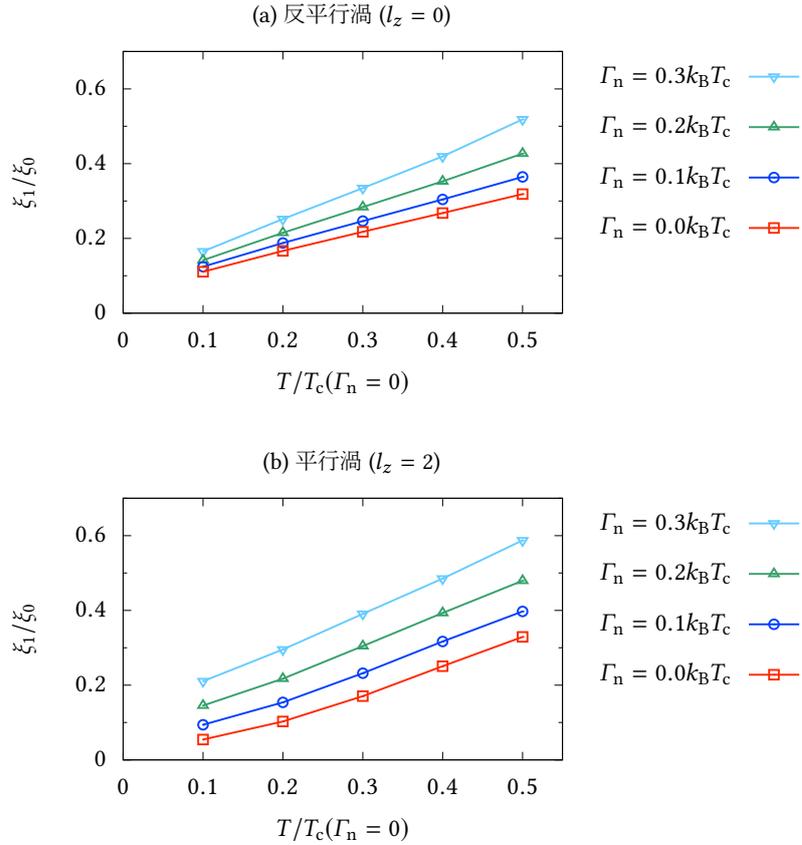


図 4.4: 弱結合カイラル p 波超伝導 (自己エネルギー対角項あり) の Kramer-Pesch 効果に対する不純物の影響 ($\kappa^{-1} = 0$).

となる. すなわち Σ のカイラル p 波の渦では低エネルギー状態への影響は大きくないと考えられる. Σ を入れて円筒対称性を課したカイラル p 波平行渦および反平行渦の“回復長” ξ_1 の温度変化を図 4.4 に示す. Σ を入れない場合と比較して, 平行渦も反平行渦も定性的な違いは生じていない.

4.2.2 一般化

三次元の系を含めて, 前小節での結果の一般化を試みる. 本小節では φ, θ を Fermi 面上での運動量の位置 (角度) すなわち $\hat{k} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$, l, m をそれぞれ角運動量の方位量子数, 磁気量子数を表わすことにする^{*7}. また簡単のため, スピン一重項あるいは三重項であっても 2×2 の Eilenberger 方程式として解ける系を考える.

三次元で等方球面である Fermi 面を仮定する. このとき弱結合ギャップ方程式は

$$\check{\Sigma}(\theta, \varphi, \mathbf{r}) = N_0 k_B T \sum_{\epsilon_n} \int_0^\pi d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' \frac{\sin \theta'}{4\pi} v(\theta, \varphi, \theta', \varphi') \check{g}(i\epsilon_n, \theta', \varphi', \mathbf{r}) \quad (4.15)$$

^{*7} s 波, 二次元カイラル p 波の結果から, 実空間の渦の渦度は間接的な寄与しかないことが分かる.

である。渦の方向を z 軸方向に取ることにして球面調和函数 Y_{lm} で v を

$$v(\theta, \varphi, \theta', \varphi') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi') \quad (4.16)$$

と展開し, (4.15) に Kramer-Pesch 解 (3.46) を代入する。球面調和函数 Y_{lm} は Legendre 陪函数 P_{lm} を用いて

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = P_{lm}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (4.17)$$

と書くことができることに注意し, カイラル p 波の場合と同様に $\Sigma(\theta, \varphi, r, \phi) = \Sigma_{\pm}(\theta, \mathbf{r}) e^{\pm i\varphi \mp i\phi}$ と書くとする。 φ 積分に着目すると⁸

$$\begin{aligned} \Sigma_{\pm}(\phi = 0) &\propto \sum_{\epsilon_n} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{e^{\mp im\varphi}}{i\epsilon_n + E'r \sin \varphi} \\ &= \sum_{\epsilon_n > 0} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{e^{\mp im\varphi} E'r (e^{+i\varphi} - e^{-i\varphi}) / i}{(E'r \sin \varphi)^2 + \epsilon_n^2} \\ &= \frac{4i}{E'r} \sum_{\epsilon_n > 0} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{e^{\mp im\varphi} (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})}{e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi} - 2 - 4\epsilon_n^2 / (E'r)^2} \end{aligned} \quad (4.18)$$

となる。 Σ_{\pm} のそれぞれに対して $z = e^{\mp i\varphi}$ と定義⁹として変数変換を行なうと積分は

$$\begin{aligned} (4.18) &= \mp \frac{4}{E'r} \sum_{\epsilon_n > 0} \oint \frac{dz}{z} \frac{z^m (z - 1/z)}{z^2 + z^{-2} - 2 - 4\epsilon_n^2 / (E'r)^2} \\ &= \mp \frac{4}{E'r} \sum_{\epsilon_n > 0} \oint dz \frac{z^m (z^2 - 1)}{z^4 - [2 + 4\epsilon_n^2 / (E'r)^2] z^2 + 1} \\ &= \mp \frac{4}{E'r} \sum_{\epsilon_n > 0} \oint dz \frac{z^m (z^2 - 1)}{(z^2 - p^2)(z^2 - q^2)} \\ &= \mp \frac{4\pi i}{E'r} \sum_{\epsilon_n > 0} \left[\frac{p^m (p^2 - 1) - (-p)^m (p^2 - 1)}{p(p^2 - q^2)} \right] \end{aligned} \quad (4.19)$$

ここで複素積分 z の経路は半径 1 の円周上であり, p, q ($0 < p < 1 < q$) を分母の四次方程式の解, すなわち

$$p^2 = 1 + 2\epsilon_n^2 / (E'r)^2 - 2\sqrt{\epsilon_n^4 / (E'r)^4 + \epsilon_n^2 / (E'r)^2} \quad (4.20a)$$

$$q^2 = 1 + 2\epsilon_n^2 / (E'r)^2 + 2\sqrt{\epsilon_n^4 / (E'r)^4 + \epsilon_n^2 / (E'r)^2} \quad (4.20b)$$

とした。 (4.19) から, Σ_{\pm} は m が奇数のときのみ有限の値を持ちうるということが分かる。 s 波から f 波まで ($0 \leq l \leq 3$) を考えることにすると, Σ_{\pm} が値を持ってよい l と m の組み合わせは

$$(l, m) = (1, \pm 1), (2, \pm 1), (3, \pm 1), (3, \pm 3)$$

である。

次に θ の積分を考える。 E' や Green 函数全体の係数の中に入っている θ の依存性は, 渦に直交する面に射影した $|\mathbf{v}_F|(|\sin \theta v_F|)$ を通したものである。 よって Jacobian の

⁸ $r > 0$ とする。

⁹ 複合同順

表 4.1: (規格化されていない) Legendre 陪函数 $P_{lm}(\cos \theta)$ の具体形 [162] ($-m$ での形は m のそれと同じ).

l	m	$P_{lm}(\cos \theta)$
0	0	1
1	0	$\cos \theta$
1	1	$\sin \theta$
2	0	$(1 + \cos 2\theta)$
2	1	$\sin 2\theta$
2	2	$(1 - \cos 2\theta)$
3	0	$(-\cos \theta + 5 \cos 3\theta)$
3	1	$(\sin \theta + 5 \sin 3\theta)$
3	2	$(\cos \theta - \cos 3\theta)$
3	3	$(3 \sin \theta - \sin 3\theta)$

表 4.2: スピン三重項超伝導のペアポテンシャル対称性と渦内の自己エネルギー対角項.

(l, m)	d ベクトル	対角項
(1, 0)	$k_z \mathbf{e}_x, k_z \mathbf{e}_y, k_z \mathbf{e}_z$	✗
(1, 1)	$k_x \mathbf{e}_x, k_x \mathbf{e}_y, k_y \mathbf{e}_x, k_y \mathbf{e}_y, (k_x \pm ik_y) \mathbf{e}_z$	✓
(3, 0)	$k_z^3 \mathbf{e}_x, k_z^3 \mathbf{e}_y, k_z^3 \mathbf{e}_z$	✗
(3, 1)	$k_z^2 (k_x \pm ik_y) \mathbf{e}_z$, など	✓
(3, 2)	$k_z (k_x \pm ik_y)^2 \mathbf{e}_z$, など	✗
(3, 3)	$(k_x \pm ik_y)^3 \mathbf{e}_z$, など	✓

$\sin \theta$ と $P_{lm}(\cos \theta)$ を除いた被積分函数は $\theta - \pi/2$ の偶函数である. このことに注意すれば $P_{lm}(\cos \theta)$ の具体形 (表 4.1) より, ただちに $(l, m) = (2, \pm 1)$ の場合は積分が消え^{*10}, $(l, m) = (1, \pm 1), (3, \pm 1), (3, \pm 3)$ の場合は積分が消えず値が残ることが分かる.

以上より Kramer-Pesch 近似による Green 函数の近似が妥当と考えられるときには, 以下が言える. まずパリティが偶の超伝導すなわち s 波, d 波の場合は自己エネルギー対角項は少なくとも弱結合の場合には生じない. パリティが奇の超伝導すなわち p 波, f 波の場合には, 渦の向きに直交する平面上でパリティが奇の成分があればその成分が Σ として出現する. 具体的には $(l, m) = (1, \pm 1), (3, \pm 1), (3, \pm 3)$, およびこれらの線形結合で表わされる成分が含まれる場合に, 準古典理論かつ弱結合の場合であっても Σ が出現する.

表 4.2 に, 上記の議論から得られる自己エネルギー対角部分を考慮しなければならないペアポテンシャルの対称性をまとめた. ただしこれら以外でもペアポテンシャルと Fermi 面の対称性が異なるような特殊な場合には考慮する必要があると考えられる. また本小節での議論は全ての場合について成立はしていない. 例えばヘリウム 3-B 相の対称性 $\mathbf{d} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z$ およびそれに類する対称性を持つ超流動・超伝導においては, 後述のように円筒対称性を自発的に破る分裂した渦が安定に出現することが知られており,

^{*10} $(l, m) = (2, \pm 1)$ は赤道にノードがあるため, 二次元系は考えにくい.

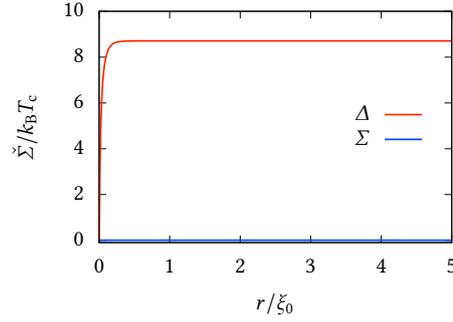


図 4.5: 強結合 s 波の自己エネルギー ($\hbar\omega_0 = 3k_B T_c$, $\kappa^{-1} = 0$, $T/T_c = 0.3$).

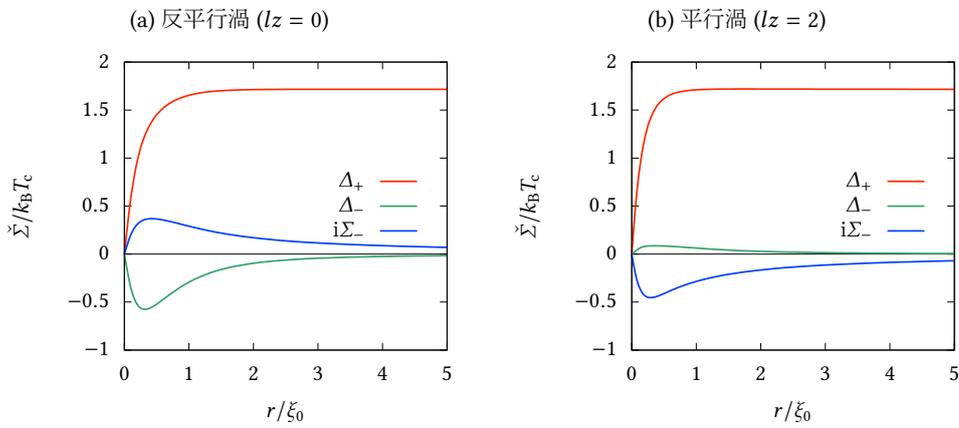


図 4.6: 強結合カイラル p 波超伝導の渦の自己エネルギー ($\hbar\omega_0 = 3k_B T_c$, $\kappa^{-1} = 0$, $T/T_c = 0.3$).

その場合には本小節の議論は直接適用できない。またノードがある場合にノード近傍で Kramer-Pesch 近似が成立しているかは自明ではない^{*11}。これらの場合に、自己エネルギー対角項の具体的な振る舞いは今後の課題であろう。

4.2.3 強結合の場合

図 4.5 に強結合 s 波 ($\omega_0 = 3$) の零エネルギーでの自己エネルギー $\Delta(\omega = 0)$, $\Sigma(\omega = 0)$ を示す。 Δ は強結合性の影響で T_c に比べて大きくなっているが、一方で Σ は 0 のままである。バルクでは $i\epsilon_n \leftrightarrow -i\epsilon_n$ の対称性より $\Sigma(\omega = 0) = 3k_B T_c$ であるが、渦内部でもこの対称性は保たれている。すなわち強結合性として自己エネルギーに周波数依存性を導入した場合でも、それによる渦内低エネルギー状態への影響は小さい。

カイラル p 波の場合も、運動量に対する依存性が変わらないため、弱結合の場合と同じく中心を通る準古典経路に対しては自己エネルギー対角成分は効かない (存在しない) と考えられる。図 4.7 に強結合 p 波 ($\omega_0 = 3k_B T_c$) の自己エネルギーを描いた。対角部の自己エネ

^{*11} このことは d 波超伝導の場合にも考えなければならない。ただし $d_{x^2-y^2}$ 超伝導の場合にも Kramer-Pesch 近似を用いた解析が上手くいくことが知られており [163–165], 多くの場合 Kramer-Pesch 近似の適用は可能であると思われる。

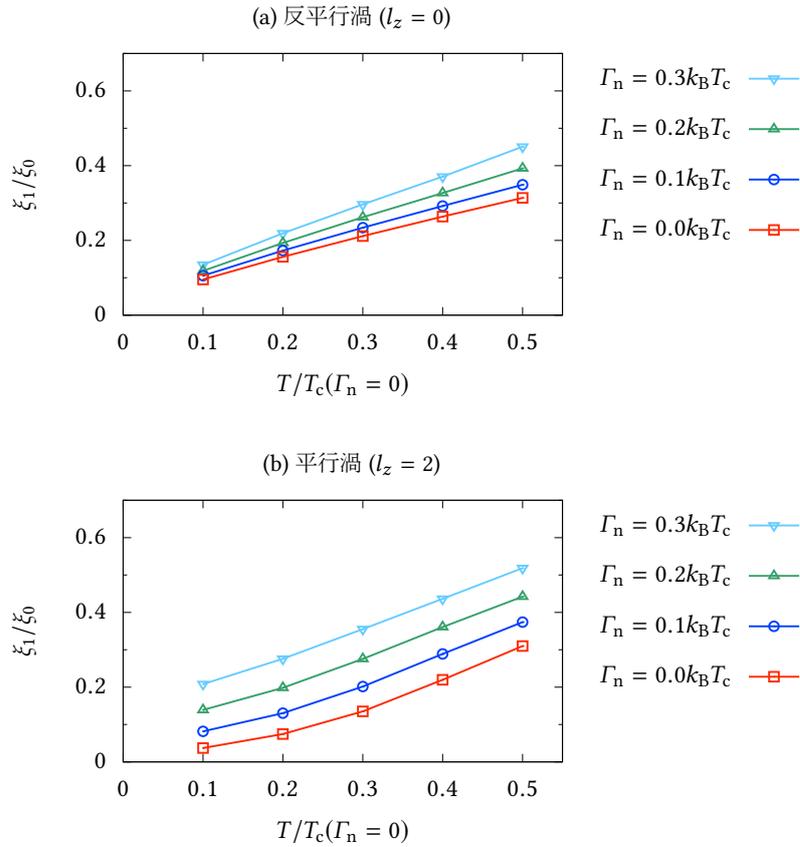


図 4.7: 強結合カイラル p 波超伝導の Kramer-Pesch 効果に対する不純物の影響 ($\hbar\omega_0 = 5k_B T_c$, $\kappa^{-1} = 0$).

ルギーは弱結合のそれよりも増大しているが、この場合でもやはり定性的な差異は見られない。カイラル p 波平行渦および反平行渦の“回復長” ξ_1 の温度変化を図 4.7 に示す^{*12}。周波数依存性を加えた場合でも、定性的には弱結合の場合 (図 3.7 および図 4.4) と変わらないことが分かる。すなわち強結合効果は渦内部の低エネルギー状態に定性的な影響は与えていないと考えられる。

4.3 円筒対称性を破る渦

前節では円筒対称な渦に対して、自己エネルギー対角部分を導入した場合に、特に渦内部の低エネルギー状態がどのような変更を受けるかを考察し、一般にスピン三重項超伝導の渦においては自己エネルギー対角成分 (Fock) 項が生じうることを得た。その一方で s 波およびカイラル p 波に関しては、少なくとも不純物効果に対しては、自己エネルギー対角成分の導入による質的な変化を見出せなかった。

本節では円筒対称性を仮定せずに数値計算を行なうことにより見出された、円筒対称性を自発的に破る渦について述べる。

^{*12} 周波数 $\epsilon_{n=1} = \pi k_B T / \hbar$ のペアポテンシャルで計算した。

4.3.1 誘起成分の分裂

カイラル p 波超伝導の平行渦において、渦内部の誘起成分は対称性より渦度 3 を持つ (図 3.1). 通常, 渦度が大きな量子渦は渦度が 1 の渦と比較して不安定であり, 渦度 3 の渦はすみやかに分裂して 3 本の渦度が 1 の渦になることが期待される. ただしこの系では, 渦度 3 を持つ渦の成分は渦度 1 を持つ主要成分の渦に付随して生じる誘起成分である. 誘起成分はバルクには存在せず, また渦内での大きさも主要成分に比較して小さい (図 3.2). そのため, この系では誘起成分の渦が渦度 3 のままであること不安定性は小さく, 系は円筒対称性を保ったままであってもよいとも考えられる. 実際に円筒対称性を仮定せずに準古典理論の計算を行なった先行研究 [130] が存在するが, そこでは分裂は見出されていない.

本研究でも, 自己エネルギー対角項を導入しなかった場合には, 先行研究 [130] と同じく平行渦における誘起成分の有意な分裂は見出されなかった. 一方, 本研究においては, これまでの研究とは異なり, 自己エネルギー対角項を導入した場合, あるいは強結合効果を導入した場合の計算も行なった. 本研究ではその結果として, 初期状態に対する依存性はあるものの, 自己エネルギー対角項の存在下では平行渦の誘起成分が分裂すること, すなわち円筒対称性が自発的に破れた渦が安定な解として存在することを見出した.

図 4.8 に, $T = 0.3T_c$, $\kappa^{-1} = 0.4$ で自己無撞着に計算して得られた, 自発的に円筒対称性を破る平行渦の自己エネルギーを表示した. 図 4.8c, 4.8d から, 系の三回回転対称性は誘起成分の分裂に由来しており, 自己エネルギー対角成分が存在する場合には渦度 3 の渦が一本あることよりも渦度 1 の渦が三本ある方が, 誘起成分にとって有利であることが示唆される. また図 4.8e, 4.8f には自己エネルギー対角成分 Σ を示した. 円筒対象の場合と同様に Σ は渦の近辺で一定の大きさを持っていることが分かる.

原理的に測定可能な物理量の例として図 4.9 に磁場, 4.10 に電流を示した. どちらも円筒対称性を破り三回対称の形を取っており, この系が確かに円筒対称性を破っていることが分かる.

分裂した渦の安定性を議論するために, (2.118) を用いて系の自由エネルギーを計算した. 図 4.11 に, 強結合 p 波 ($\hbar\omega_0 = 3k_B T_c$, $\kappa^{-1} = 0.4$) の反平行渦, 円筒対称な平行渦, 円筒対称性を破った平行渦の, それぞれの自由エネルギー (バルクの自由エネルギーからの差) の温度変化を示した. 高温 ($T/T_c = 0.5$) では円筒対称性を破る渦を安定に得ることはできなかった. これは高温では円筒対称でない渦が円筒対称な渦に比べて不安定化していることを意味していると考えられる. このことは, この系に対応する Ginzburg-Landau 方程式のパラメータ^{*13}の下では円筒対称の渦が生じるという先行研究 [166] の結果と矛盾しない. 低温では平行渦に関しては円筒対称性を破った方が自由エネルギーが低くなり, 円筒対称な渦に比べて安定化していることが分かる. すなわち, 十分に低温では平行渦は円筒対称性を破ることが分かる. また初期値への依存性は円筒対称性のある渦とない渦がともに準安定であり, これらの間の転移が一次相転移的に振る舞うことを示唆している. ただし円筒対称性を破った平行渦が円筒対称な渦より安定になった場合でも, 反平行渦の方が自由エネルギーが低いため, 平行渦は引き続き反平行渦に対して準安定状態である. そのため, この転移を一次転移と呼ぶことはできない.

*13 付録 A.1.A.2.

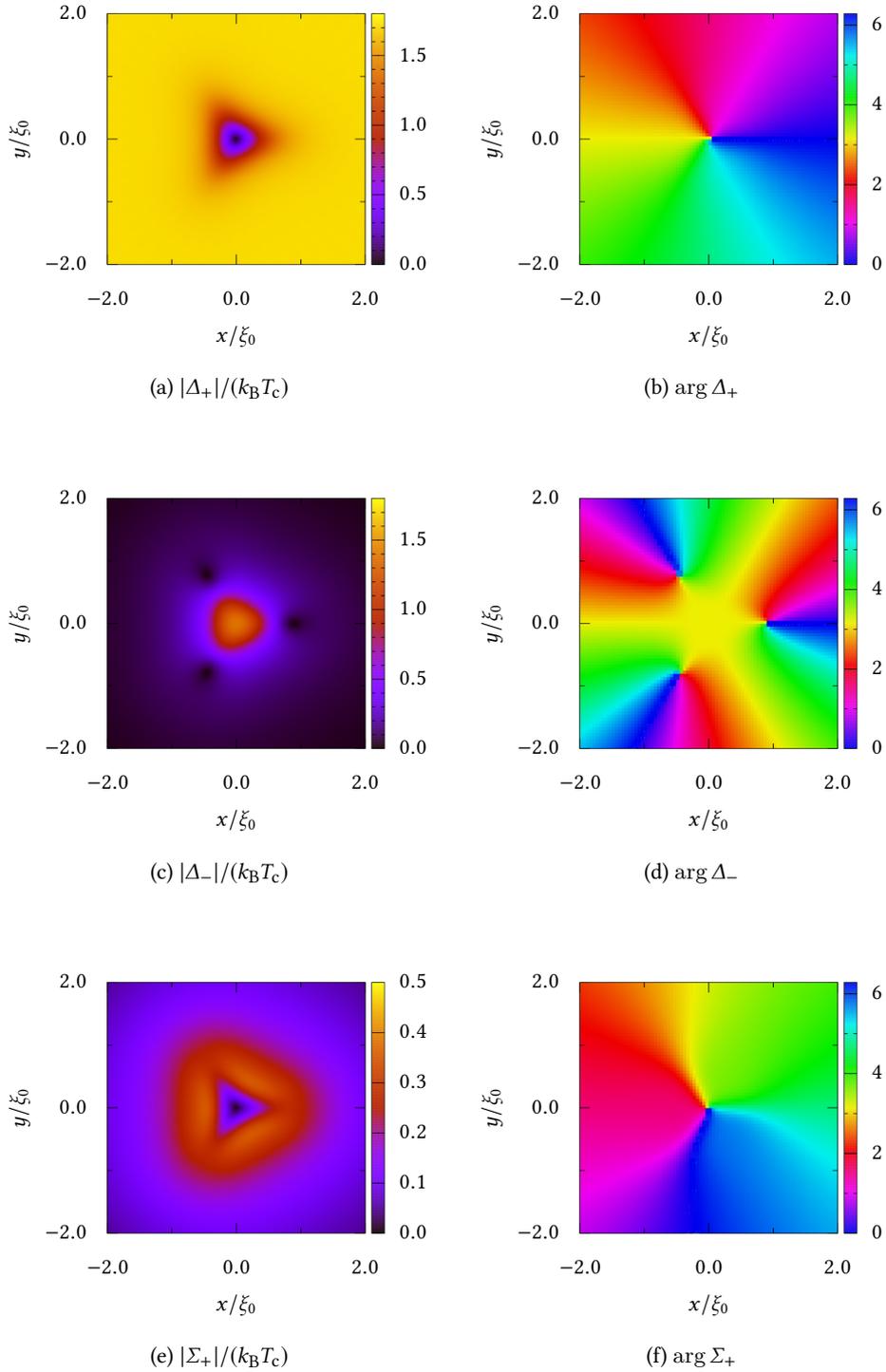


図 4.8: 円筒対称性が破れた平行渦の自己エネルギー. Σ_- は Σ_+ の位相を反転させると得られる. ($\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3$, $T/T_c = 0.3$, $\hbar\omega/(k_B T_c) = 0.0 + i\eta$).

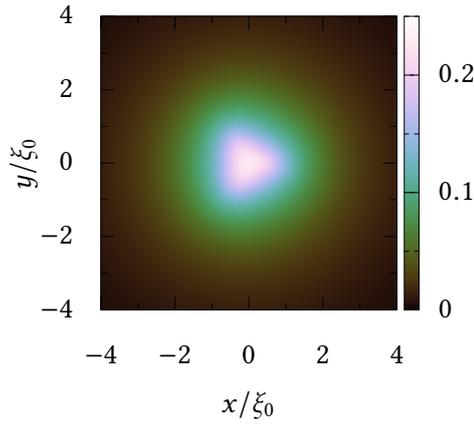


図 4.9: 円筒対称性が破れた渦の磁場

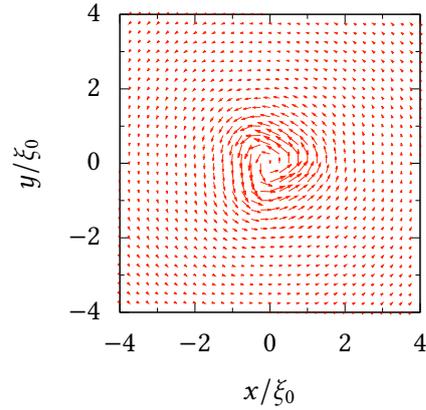


図 4.10: 円筒対称性が破れた渦の電流

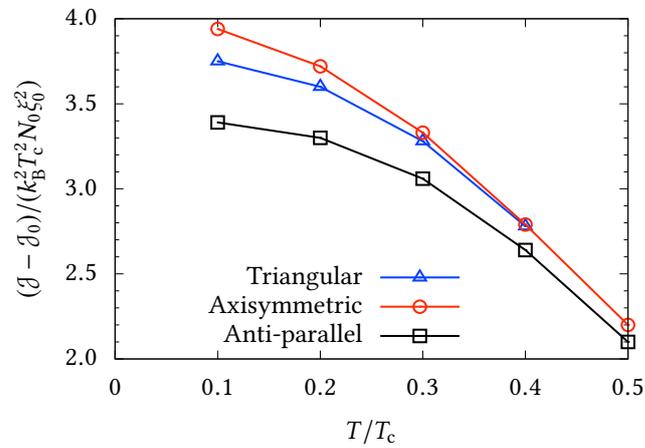


図 4.11: 強結合 p 波 ($\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3, \kappa^{-1} = 0.4$) の渦の自由エネルギーの温度依存性. 円筒対称な平行渦: 赤い丸, 円筒対称性を破った平行渦: 青い三角, 反平行渦: 黒い四角.

図 4.12 に, T_c を固定して, Bose 粒子の周波数 ω_0 を変化させたときの, 渦の自由エネルギーの ω_0 依存性を示した. 図 4.12 より, この温度と ω_0 の範囲では ω_0 によらず常に円筒対称性を破った方が安定であり, 依存性を入れない場合 ($1/\omega_0 = 0$, i.e., 弱結合の場合) でも分裂した渦が安定に存在できていることが分かる (図 4.13 に, 自己エネルギー対角項を含めて計算したときの弱結合における自己エネルギーを示した.). このことによっても, 回転対称性が破れた原因としては自己エネルギー対角項の導入が最も重要であると考えられる.

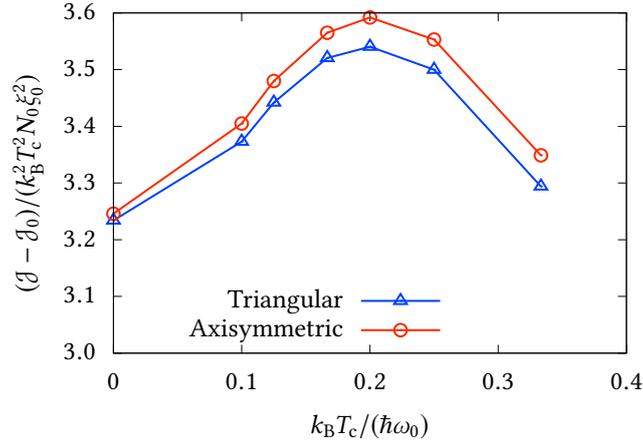


図 4.12: 強結合 p 波 ($\kappa^{-1} = 0.4$) の $T = 0.3T_c$ での渦の自由エネルギーの ω_0 依存性. 円筒対称な平行渦: 赤い丸, 円筒対称性を破った平行渦: 青い三角.

またこの渦は円筒対称性を破っているため b がよい量子数になっていない. 図 4.14 に幾つかの角度 α を固定したときの分散関係を描いた. 円筒対称性の破れを反映し, 低エネルギーでは b だけでは準粒子のエネルギー ω が明確に定まらず “ぼやけて” しまうことが分かる.

4.3.2 局所状態密度

図 4.15 に零エネルギーの局所状態密度 (Local Density Of States, LDOS)

$$N(\omega + i\eta, \mathbf{r})/N_0 = \langle N(\omega + i\eta, \alpha, \mathbf{r}) \rangle_\alpha / N_0 \quad (4.21)$$

を示す. LDOS のピークはペアポテンシャルの主要成分, 誘起成分のどちらの中心でもない場所に存在しており特徴的な空間構造をしている. この構造は零エネルギー束縛状態を作る準古典経路の包絡線を考えることにより解釈ができる [137, 138].

渦内部の低エネルギー状態は, 定性的には渦を “反転で位相が 180 度変わる” “常伝導の領域” とみなすことによって, Andreev 束縛状態の観点から理解可能である (3.1.3 節). 通常の渦は円筒対称であり, また秩序変数が複数成分ある場合でもその中心では全ての秩序変数が消えているため, “常伝導とみなせる部分” である渦の中心の位置は渦の運動量 (速度あるいは準古典経路) の方向によらず一点であり, 零エネルギー状態は渦の中心に局在している. すなわち, “渦” のほぼ中心を通り, 位相がほぼ 180 度変わっている場所を通る準古典経路は零エネルギー束縛状態を作る.

図 4.16 に零エネルギー束縛状態を作る準古典経路を描いた. 通常は零エネルギーに極を持つ準古典経路は渦の中心を通るのに対して, この系では図 4.16 で示されるように原点から離れた場所を走り, その包絡線上で LDOS が大きくなっている.

なぜこのような場所を束縛状態を作る準古典経路が通るかを考えるため, 運動量 (の方向) α を持つ準粒子にとって自己エネルギーがどのように見えるかを考える. 図 4.17 および図 4.18 では幾つかの α について主要成分と誘起成分を加えた全自己エネルギー Δ および Σ を示した. この系では渦の内部で誘起成分が主要成分よりも大きな値を持っているため, Δ の零点は必ずしも主要成分の零点とは一致せず, 各運動量 α から見た “渦” すなわち

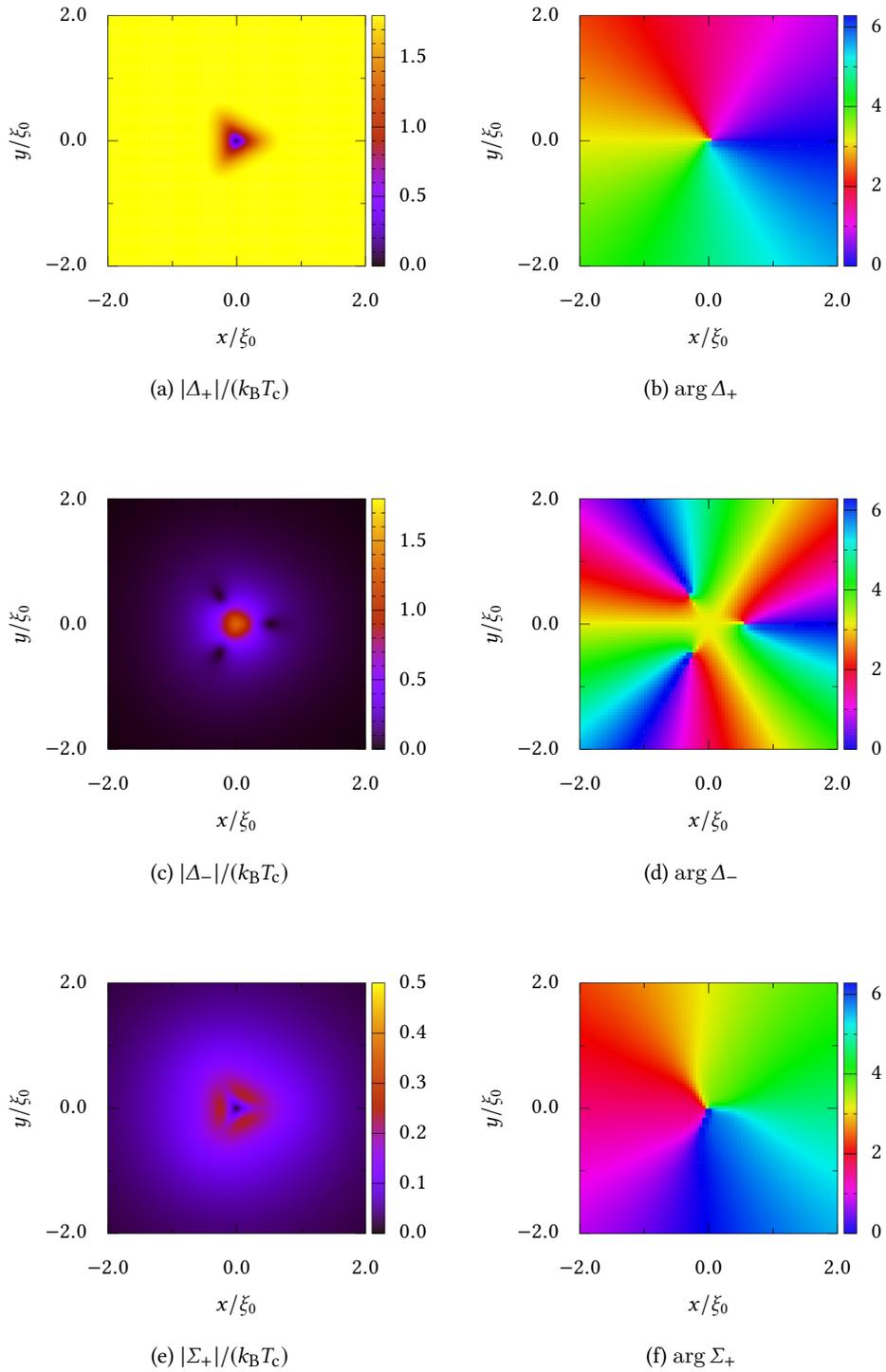


図 4.13: 円筒対称性が破れた平行渦 (弱結合だが自己エネルギー対角項あり) の自己エネルギー. Σ_- は Σ_+ の位相を反転させると得られる. ($\hbar\omega_0/(k_B T_c) = \infty$, $T/T_c = 0.3$, $\hbar\omega/(k_B T_c) = 0.0 + i\eta$).

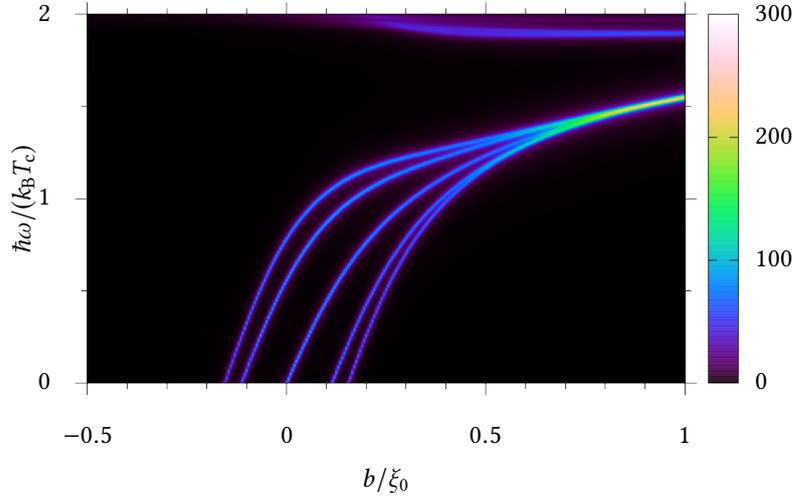


図 4.14: $T/T_c = 0.3$ における弱結合の円筒対称性を破った渦での、運動量 α を固定したときの準粒子の b と ω の分散関係. それぞれ左から順に $\alpha = \pi/6, \pi/4, \pi/3, 5\pi/12, \pi/2$.

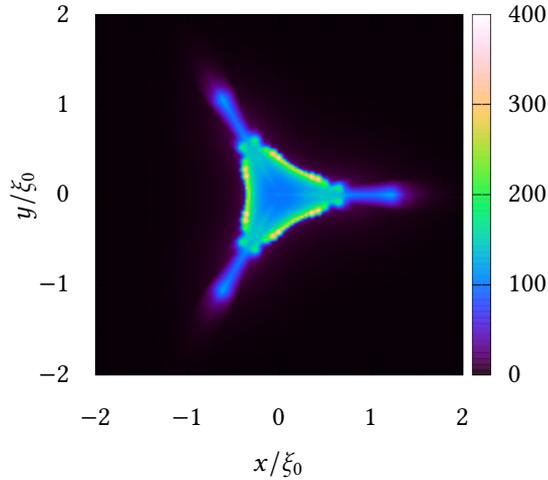


図 4.15: 円筒対称性が破れた平行渦の局所状態密度 (LDOS) $N(\mathbf{r}, \hbar\omega/(k_B T_c) = 0.0 + i\eta)/N_0$, ($\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3, T/T_c = 0.3$).

位相特異点の位置は一致していない. (3.46) より零エネルギーにピークを持つ準古典経路は $b = 0$ の経路だから, この系では各々の α に応じた“渦の”中心を通る準古典経路の上に零エネルギー束縛状態が実現していると考えられる. 図 4.17 には零エネルギーにピークを持つ準古典経路を重ねて描いた. 実際には Σ が有限であったり Δ が必ずしも対称性のよい形をしていないためこのような経路は必ずしも“渦”の中心を通るとは限らないが, 図 4.17 よりおおむね渦の中心を通っているとみなしてもよいと考えられる. すなわち, Andreev 束縛状態の観点から, 図 4.15 の空間的に広がった構造は, 各運動量によって見えている“渦”

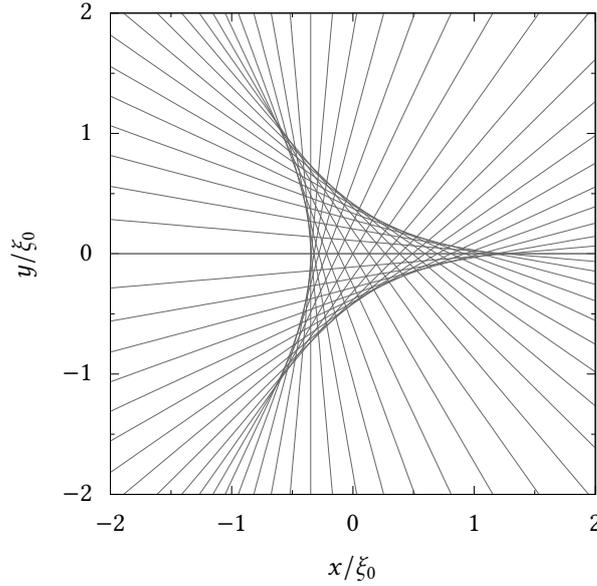


図 4.16: $\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3$, $T/T_c = 0.3$ における零エネルギー束縛状態を作る準古典経路の集合.

の場所が異なることに由来していると解釈できる.

図 4.18 より, 零エネルギー束縛状態が通る準古典経路の上では自己エネルギーの対角成分はほとんど値を持っていないことが分かる. すなわち, 分裂した渦の場合でも, 零エネルギー束縛状態に対する自己エネルギーの対角成分の影響は間接的である.

図 4.19, 4.20 に有限の低エネルギーにおける LDOS と束縛状態を作っている準古典経路の集合を書いた. 状態密度はやはり三角形の特徴的な形を取るが, これも各運動量によって見えている“渦”の場所が異なることに由来していると解釈できる. 図 4.21 に $\hbar\omega/(k_B T_c) = 0.3 + i\eta$ での幾つかの各運動量におけるペアポテンシャルの絶対値および位相を表示した. それぞれの運動量においては, 変形によるずれはあるものの, 通常円筒対称で秩序変数の位相の特異点を持つ渦と同じく, 有限のエネルギー ω に対応して, “渦”の中心から有限の衝突径数 b を持つ位置を走る準古典経路上に, 準粒子の束縛状態ができると解釈することができる.

4.3.3 実験による検出

本小節では, 前小節までで得られた円筒対称性を破った渦の, 実験における観測の可能性について議論する.

まず, この渦は準安定な平行渦の相において出現する. そのため, 熱力学的安定な基底状態の単一ドメインに至る前の, ドメイン構造が保たれた渦糸相を測定する必要がある. 本研究では単一渦を対象としており, これは巨視的な系の記述においては H_{c1} 近傍を調べていることに相当している. 本研究では渦糸格子を組んだ状態の計算を行っていないため, 高磁場においてどこまで自発的に円筒対称性を破る平行渦が存在するかは分からない. また本研究の計算では温度を上げると平行渦の円筒対称性が回復し. このことは GL 理論によっても支持されている. よって本研究で得られた円筒対称性を破る渦の測定には, できる

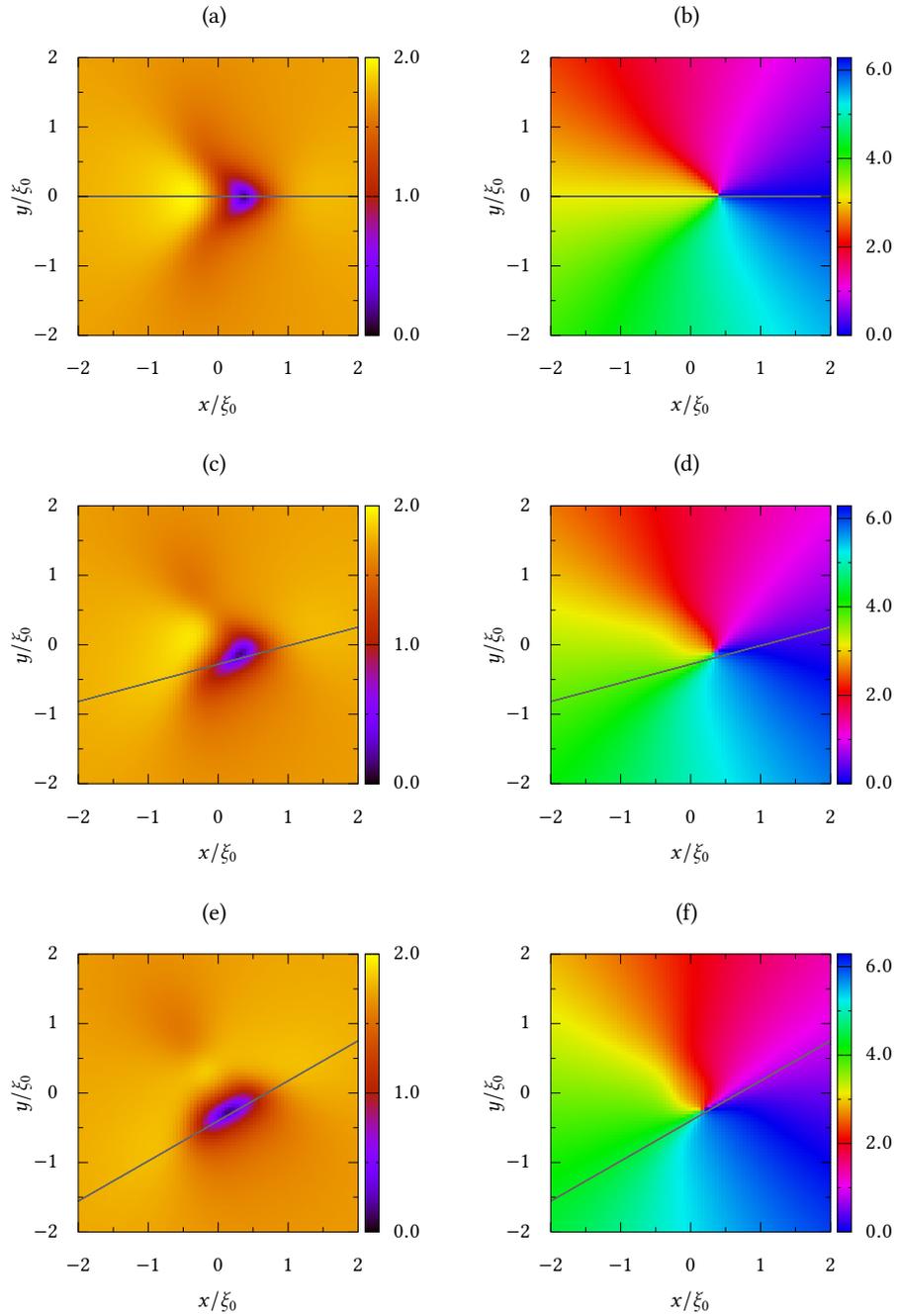


図 4.17: $\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3$, $T/T_c = 0.3$ における各準古典経路 (方向 α) に対する自己エネルギー-非対角部分 $\Delta(\omega = 0, \alpha, \mathbf{r}) = \Delta_+(0, \mathbf{r})e^{+i\alpha} + \Delta_-(0, \mathbf{r})e^{-i\alpha}$. 灰色の線は零エネルギーで束縛状態を作る α 方向の準古典経路. (a), (b): $\alpha = 0.0\pi$ での Δ の絶対値 (a) と位相 (b). (c), (d): $\alpha = \pi/12$ の Δ の絶対値 (c) と位相 (d). (e), (f): $\alpha = \pi/6$ での Δ の絶対値 (e) と位相 (f). ($\hbar\omega_0/(k_B T_c = 3)$, $T/T_c = 0.3$).

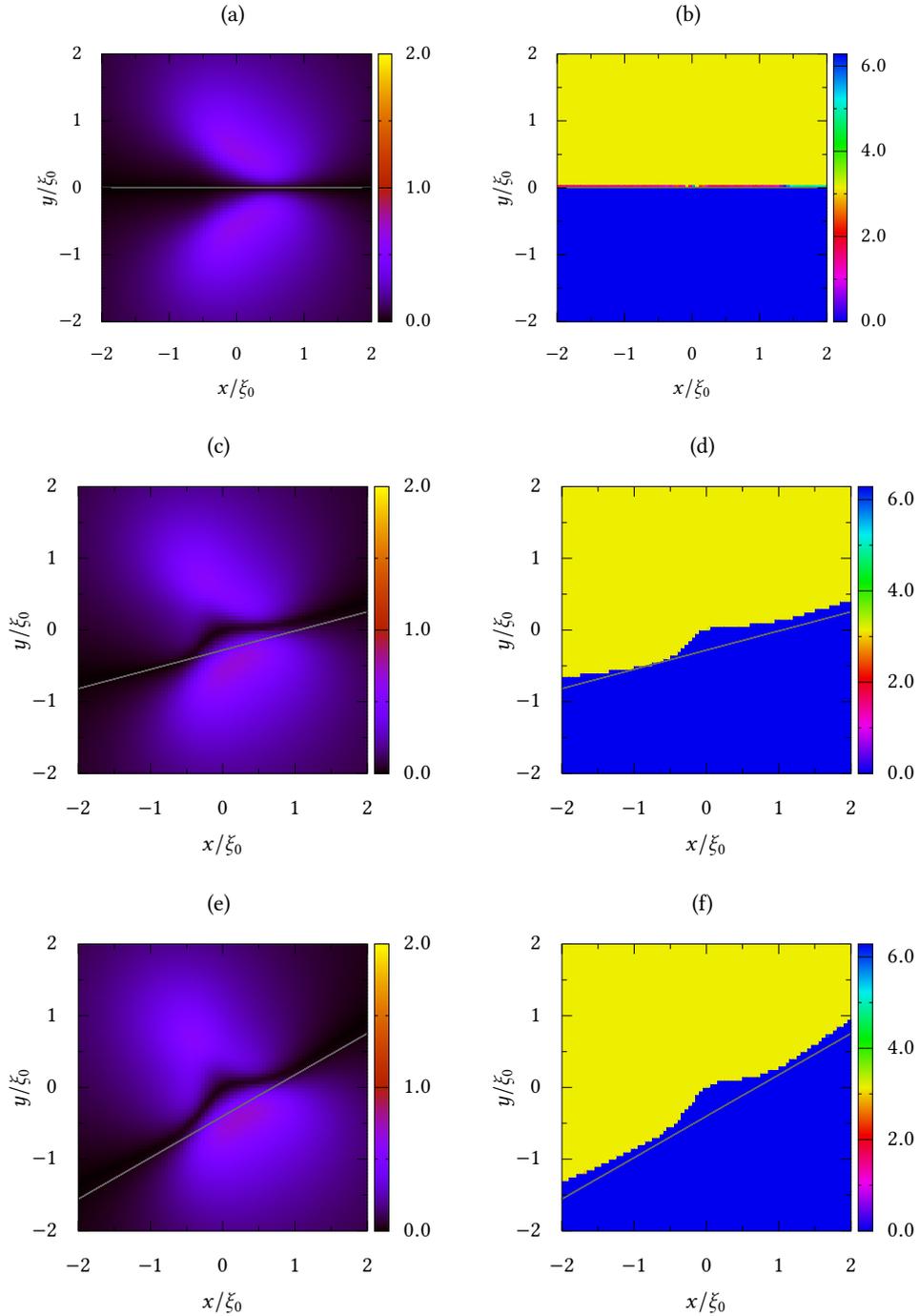


図 4.18: $\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3$, $T/T_c = 0.3$ における各準古典経路 (方向 α) に対する自己エネルギー対角部分 $\Sigma(\omega = 0, \alpha, \mathbf{r}) = \Delta_+(0, \mathbf{r})e^{+i\alpha} + \Sigma_-(0, \mathbf{r})e^{-i\alpha}$. 灰色の線は零エネルギーで束縛状態を作る α 方向の準古典経路. (a), (b): $\alpha = 0.0\pi$ での Σ の絶対値 (a) と位相 (b). (c), (d): $\alpha = \pi/12$ の Σ の絶対値 (c) と位相 (d). (e), (f): $\alpha = \pi/6$ での Σ の絶対値 (e) と位相 (f). ($\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3$, $T/T_c = 0.3$).

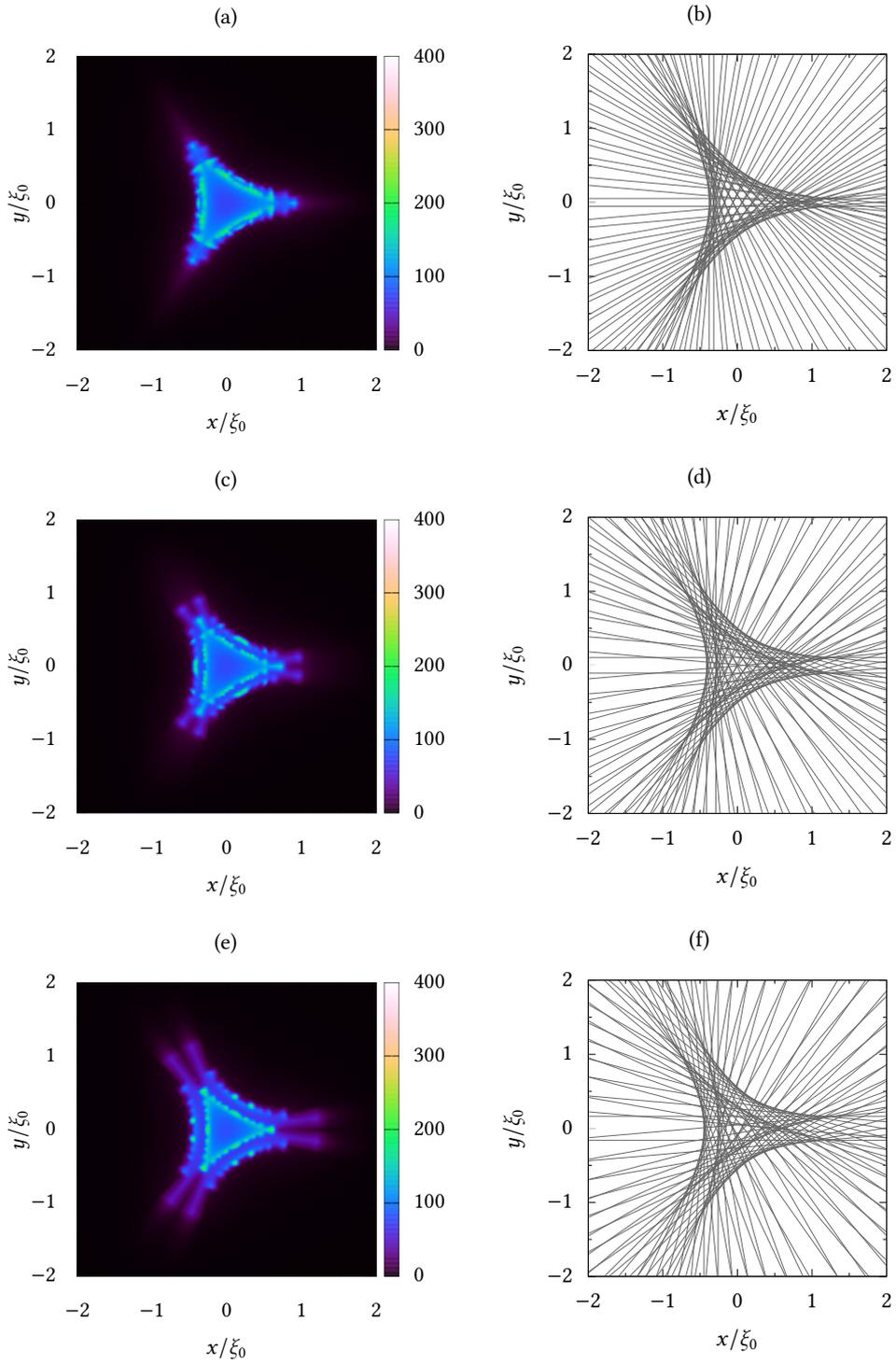


図 4.19: $\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3$, $T/T_c = 0.3$ における各エネルギーでの LDOS とエネルギー束縛状態を作る準古典経路の集合. (a), (b): $\hbar\omega/(k_B T_c) = 0.1 + i\eta$ での LDOS (a) と準古典経路 (b). (c), (d): $\hbar\omega/(k_B T_c) = 0.2 + i\eta$ での LDOS (c) と準古典経路 (d). (e), (f): $\hbar\omega/(k_B T_c) = 0.3 + i\eta$ での LDOS (e) と準古典経路 (f).

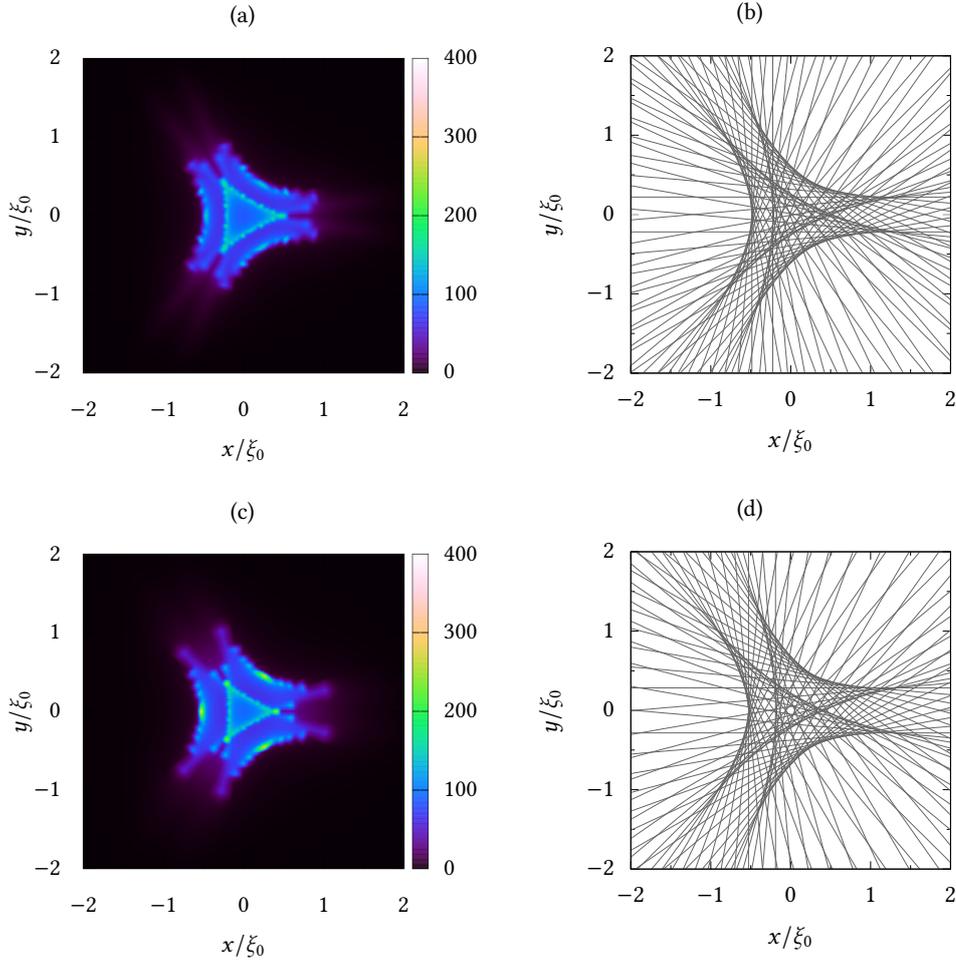


図 4.20: $\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3, T/T_c = 0.3$ における各エネルギーでの LDOS とエネルギー束縛状態を作る準古典経路の集合. (a), (b): $\hbar\omega/(k_B T_c) = 0.4 + i\eta$ での LDOS (a) と準古典経路 (b). (c), (d): $\hbar\omega/(k_B T_c) = 0.5 + i\eta$ での LDOS (c) と準古典経路 (d).

だけ低温・低磁場の渦糸相を対象とする必要がある.

具体的な検出方法として幾つかの手段が考えられる. Sr_2RuO_4 のような二次元電子系においては, 走査型トンネル顕微鏡 (Scanning Tunneling Microscope, STM)/走査型トンネル分光 (Scanning Tunneling Spectroscopy, STS)^{*14}によって LDOS を測定するのが有望であると考えられる. 対称性の破れは ξ_0 の長さのスケールで生じているから, 空間分解能の面からは十分に測定可能である. また図 4.22 で示されているように, バルクのエネルギーギャップが十分に見える程度のエネルギー分解能があれば (転移温度 T_c が低すぎる事がなければ) 三角形, 少なくとも状態密度の三回回転対称性は見えると考えられる. Sr_2RuO_4 は正方晶であり四回回転対称な系であるため, 渦において三回回転対称性が検出

^{*14} STM/STS は細い針を物質表面に近付けることによって流れるトンネル電流によって系を測定する装置であり, 空間, 時間双方に関して非常に高い分解能を持つ重要な測定手法である. 超伝導の渦の測定に限っても, Hess らによる NbSe_2 の渦の測定 [167] を皮切りに, 銅酸化物超伝導体 [168–170] や鉄系超伝導体 [148, 171], $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ [141] などの様々な系で重要な役割を果たしている.

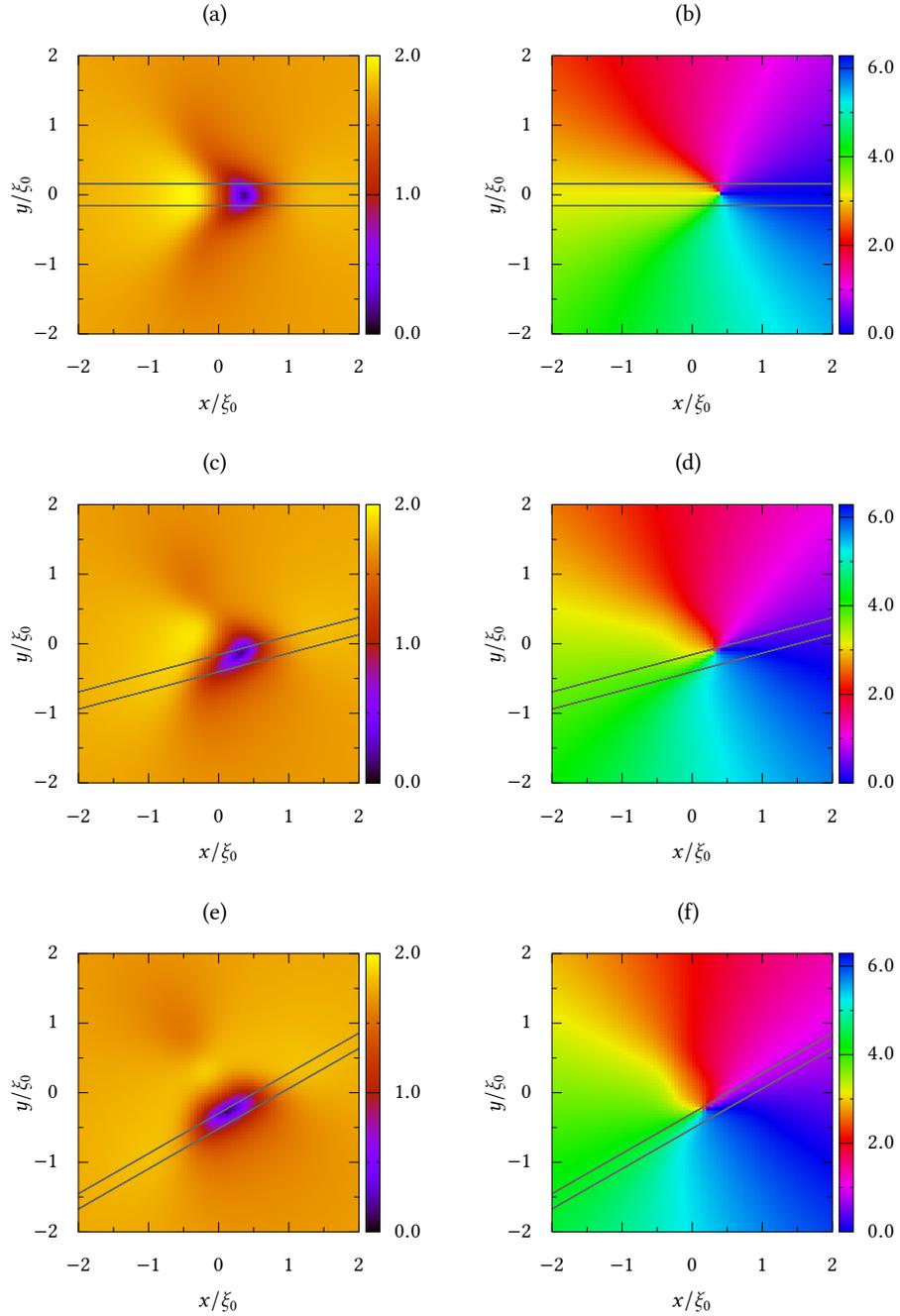


図 4.21: $\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3, T/T_c = 0.3$ における各準古典経路 (方向 $\alpha, \alpha + \pi$) に対する自己エネルギー非対角部分 $\Delta(\hbar\omega/(k_B T_c) = 0.3 + i\eta, \alpha, \mathbf{r}) = \Delta_+(0.3 + i\eta, \mathbf{r})e^{+i\alpha} + \Delta_-(0.3 + i\eta, \mathbf{r})e^{-i\alpha}$. 灰色の線は束縛状態を作る $\alpha, \alpha + \pi$ 方向の準古典経路. (a), (b): $\alpha = 0.0\pi$ での Δ の絶対値 (a) と位相 (b). (c), (d): $\alpha = \pi/12$ の Δ の絶対値 (c) と位相 (d). (e), (f): $\alpha = \pi/6$ での Δ の絶対値 (e) と位相 (f).

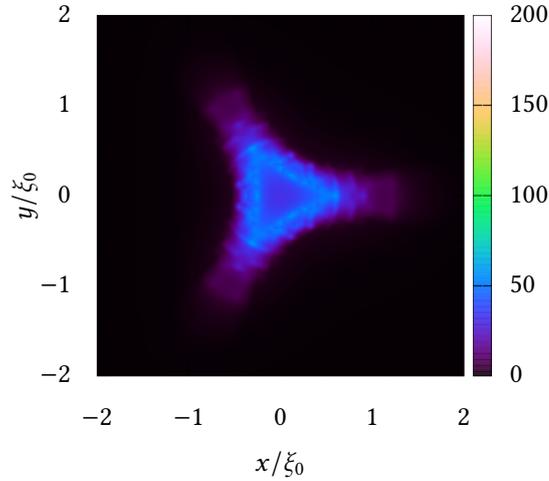


図 4.22: 円筒対称性が破れた平行渦の, 積分によってエネルギーについて粗視化した局所状態密度 (LDOS) $\int_0^{0.4} d[\hbar\omega/(k_B T_c)] N(\mathbf{r}, \hbar\omega + i\eta)/N_0$, $(\hbar\omega_0/(k_B T_c) = 3, T/T_c = 0.3)$.

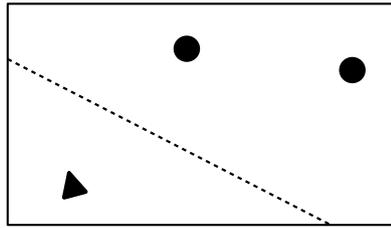


図 4.23: 渦によって検出されるカイラルドメイン構造.

されれば, 本研究での円筒対称性が破れた渦の直接的な証拠になると考えられる. カイラル p 波超伝導と考えられている Sr_2RuO_4 では今のところドメイン構造を直接検出できてはおらず, ドメイン構造の観測は重要な課題とされている. 上記を用いれば, STM/STS を用いて渦を直接観測することによってドメインの検出ができることが期待される (図 4.23). また MFM (磁気力顕微鏡, Magnetic Force Microscopy) [172] によって磁場を観測するのも有望であると考えられる. MFM の分解能は 10 nm 程度までなら可能とされているため, $\xi = 60$ nm である Sr_2RuO_4 の渦の三回回転対称性の検出は可能であろうと考えられる.

またこの系は渦の構造がある温度で変化するため, ドメインが存在する場合には, 温度を変化させることによって系に何らかの巨視的な異常が生じる可能性がある. ただしカイラル p 波超伝導の渦は, 比較的高磁場の条件下では反平行渦も不安定となり, 渦度が 2 の渦が最安定となることが, 準古典理論 [173] および GL 理論 [174] によって示唆されている. そのため, 巨視的な系の異常が渦の構造の変化によるものであったとしても, ただちに本研究において見出された転移に結び付けることはできない. カイラル p 波超伝導において生じうる多様な渦の相図の解明は, 今後の課題である.

カイラル p 波以外の系でも, 本研究で得られた円筒対称性を破る渦が生じる系の候補は存在する. LaNiC_2 [175], LaNiGa_2 [176], $\text{Lu}_5\text{Rh}_6\text{Sn}_{18}$ [177] は, 超伝導状態において時間反転

対称性の破れが生じていることが、極 Kerr 効果によって観測されている物質である。これらの物質の超伝導秩序は、系の対称性と併せて、ヘリウム 3-A1 相に似た、スピン偏極した非ユニタリなスピン三重項秩序である可能性が示唆されている。この秩序状態は上向きスピンのペアあるいは下向きスピンのみがペアを組んで存在しており、存在する方のペアはカイラル p 波のように振る舞う秩序である。この系は非ユニタリな系ではあるものの一成分のみの系であるため、スピンの向きを変える相互作用がなければ一成分のユニタリな場合と同じ方程式に従う。そのため自発磁化の存在や Fermi 面上の (ペアとはスピンが逆の成分の) 状態密度などの大きく異なる点はあるものの、カイラル p 波の物理のうち自己エネルギー対角成分のようにペアポテンシャルの位相の対称性のみからくるものは、十分に見える可能性があると考えられる。

4.3.4 他の系との比較

非従来型超伝導の渦は、たとえペアポテンシャルが等方的であったとしても、しばしば自発的に円筒対称性 (一般には結晶や Fermi 面が持つ対称性) を破ることが知られている。有名な例として超流動ヘリウム 3 が挙げられる。

超流動ヘリウム 3 は不純物¹⁵および磁場がない三次元系では A 相と B 相の二つの相を取る (図 1.1)。A 相では一般に対の軌道角運動 l が空間変調し織目構造 (テキスチャ) を作る。ヘリウム 3-A 相は自発的に円筒対称性を破る渦を作ることが知られているが、その破れは織目構造によるものであるため、金属電子の超伝導の系と直接の比較はできない。一方でヘリウム 3-B 相ではコアに A 相が生じる渦と、自発的に円筒対称性を破り分裂する “double-core vortex” [182–188] の二種類の渦が生じることが知られている。前者は高圧高温領域で実現し、後者はそれ以外の領域で実現する。B 相におけるこれらの渦は Ginzburg-Landau 理論によって円筒対称で秩序変数の位相の特異点を持つ通常の渦よりも安定であることが確かめられており、実験的にも存在が確認されている [188]。

ヘリウム 3 以外で分裂する渦の可能性が議論されている系として、 $U\text{Pt}_3$ が挙げられる。この系は f 波超伝導でヘリウム 3-B 相とよく似た対称性を持つと考えられており、この対称性を仮定した場合にはヘリウム 3-B 相とよく似た分裂した渦が生じることが準古典理論による数値計算によって予想されている [189]。カイラル p 波超伝導においても、Ginzburg-Landau 理論を用いて渦の分裂を議論した先行研究が存在している [166]。この先行研究は、GL 自由エネルギーの各項の係数の値が、BCS の弱結合に対応する係数からある程度ずれたときに、渦の円筒対称性が自発的に破れうると報告している。また全く別の系として、 $d_{x^2-y^2}$ 波超伝導である銅酸化物超伝導体でも、走査型トンネル顕微鏡 (Scanning Tunneling Microscope, STM) による実験により、渦が分裂している可能性が示唆されており [190]、その説明を試みた理論 [191] も提出されている。

本研究で得られた円筒対称性を破る渦は、既に知られているこれらの渦とは以下の意味で “異なった” 種類の円筒対称性の破り方をしていると言える。

まず、銅酸化物超伝導体での理論 [191] は銅酸化物超伝導体のコヒーレンス長が非常に

¹⁵ ヘリウム 3 が超流動化する極低温ではほとんどの物質が固相となってしまう、またヘリウム 4 は絶対零度でも低圧ならば固体化しないがヘリウム 3 と相分離してしまうため、不純物の導入は通常の方法では難しい。しかし現在はシリカエアロジェロ中でヘリウム 3 を超流動化させることにより実験が可能になっている [178–181]。

短いことを用いた非標準的な手法を用いている。本研究で用いた準古典理論はコヒーレンス長が k_F^{-1} に比べて非常に長い場合に適した理論であるため、この両者の物理は明らかに異なる。次にヘリウム 3 を始めとするスピン三重項超伝導での円筒対称性を破る渦は、Ginzburg-Landau 理論によって議論が可能であった。一方で、本研究で対象とした系で通常の秩序変数の四次の範囲までの Ginzburg-Landau 自由エネルギー汎函数を考えると、たとえ Bose 粒子の周波数が有限であっても自己エネルギー対角部分が消え、自己エネルギー対角部分がない弱結合の場合のそれと同じ形になる (付録 A.1, A.2)。すなわち自己エネルギー対角部分の考慮の有無は Ginzburg-Landau 理論に含めることはできない。本研究で得られた渦は自己エネルギー対角部分の有無が重要であると考えられるから、本研究で得られた渦は Ginzburg-Landau 理論では記述できないと言える。また本研究では完全に丸い Fermi 面を用い、また二次元の極座標で数値計算を行なっているため、系にもともと三回対称性は存在していない。

以上より、本研究で得られた円筒対称性を自発的に破る渦は、

1. Fermi 面や結晶の対称性によるものではなく、
2. 準古典理論という標準的な理論を用い、
3. Ginzburg-Landau 理論によって記述できない、

という点で、これまでに報告されていない“新しい”種類の円筒対称性を破った渦であると言える。

第5章

結論

本研究では準古典理論の枠組みの下, 強結合性の導入が低エネルギーに与える影響という観点から超伝導における渦を調べた. 強結合性の導入は

- (a). 自己エネルギーの対角成分の明示的な導入
- (b). 周波数依存性の導入

の二つの段階に分けることができる. これを念頭に本研究の結果を整理すると以下のようなになる. まず s 波超伝導に関しては以下が得られた.

- (1a). 周波数依存性がない場合, s 波超伝導は準古典理論の下では自己エネルギー対角成分が渦においても値を持たず, (a) の効果はない.
- (1b). 周波数依存性を含めた場合でも, 周波数のくりこみは座標に依存して変化するが, 渦に定性的な変化は生じない.

すなわち, s 波超伝導に関しては, 本研究で調べた範囲では, 渦に対する強結合性の効果は限定的であった. よって定量性を問題にするのでなければ, 自己エネルギー対角成分を無視した渦の理論解析の結果を, 強結合性が強い超伝導の渦にそのまま適用することの問題は, 大きくないと思われる. 一方, カイラル p 波超伝導においては以下が得られた.

- (2a). (a) の効果として, バルクには存在しない自己エネルギー対角成分が渦の周囲には出現する.
- (3a). 上記にともない, 平行渦が自発的に円筒対称性を破るという, (a) を行なわない場合との大きな差異が生じる.
- (3b). この効果は (b) により強まるように見える.

すなわち, カイラル p 波超伝導の渦においては, 通常無視されている自己エネルギー対角成分 (Fock 項) が, 弱結合極限 (BCS 極限) においても重要な役割を果たしうることを示した. このことは本研究で始めて指摘されたことであり, 異方的超伝導における低エネルギー励起を研究するに当たって重要な知見となることが期待される. 例えば接合系において低エネルギー励起状態のスペクトルの形を議論することはよく行なわれるが, その際にも自己エネルギー対角成分が無視できない可能性がある.

本研究の成果は, カイラル p 波超伝導のドメイン検出の実験に用いることができるという点においても重要であると考えられる. カイラル p 波である超流動ヘリウム 3-A 相においては実験でドメイン構造が観測されている [20, 32] が, 一方で Sr_2RuO_4 に関しては今のところドメインの構造は直接観測されていない. 平行渦と反平行渦は様々な物性が大きく

異なるためそれに応じた様々な検出方法が考えられるが, 本研究の結果は渦の形自体が大幅に変わることを示しており, STM/STS で渦を見ることによる直接的なドメイン検出が可能であることを示している.

また本研究の重要な点は, Ginzburg-Landau 理論では見出せない量子渦の分裂機構を発見した点にもある. 本研究で使用したモデルは Ginzburg-Landau 理論の本来の適用範囲である転移点近傍では円筒対称性を破る渦は準安定状態としても見いだされず, 準古典理論で低温, 低磁場を対象とすることにより始めて円筒対称性を破る渦が見出された. その点において本研究で見いだされた渦は, ヘリウム 3 等におけるこれまで知られていた円筒対称性を破る渦とは別種のものである. このことは, これまで Ginzburg-Landau 理論によって調べられてきた系においても, Ginzburg-Landau 理論では扱えていなかったタイプの量子渦が別に存在する可能性があることを意味している. この点においても, 本研究の意義は大きいと考えられる.

本研究を発展させる課題としては以下のものが考えられる. まず, 渦が対称性を破ることにより, どのように動力学に影響が生じるかは実験にも繋がる重要な課題であると考えられる. また動力学を考える際に保存則として系に対するエネルギーの収支を考えることになるが, これは対称性を破る物理的な理由・解釈を与える可能性もある. 次に, 本研究で考えた超伝導は, Ginzburg-Landau 理論の極限では弱結合極限と同じ形になる. そのため, カイラル p 波の Ginzburg-Landau 理論における係数をパラメータとした相図 [166] が, 転移温度よりも十分低温・低磁場でどう変化するのか, また準古典理論でどのように解釈できるのかは未知のままである. 最後に, 本論文ではカイラル p 波に限らずスピン三重項超伝導における渦ではペアポテンシャルに一定の対称性が満たされれば自己エネルギー対角項が値を持ちうることを示したが, 非ユニタリの場合を含め, それぞれペアポテンシャルの下で具体的にどのように自己エネルギー対角項の (あるいは強結合の) 効果が生じるかは, 興味深く重要な課題であろう.

付録 A

巨視的理論

A.1 弱結合での Ginzburg-Landau 方程式

本節では二次元カイラル p 波超伝導における Ginzburg-Landau 自由エネルギー汎関数 (GL 自由エネルギー)[127, 166] を準古典理論の方程式から導出する. 基本方針としては, 教科書 [80] にあるように, Eilenberger 方程式を自己エネルギーが小さいとして摂動展開し, ギャップ方程式あるいは自由エネルギーの式に摂動解を代入することにより, 汎関数を自己エネルギーの展開の形で導出する. Ginzburg-Landau 方程式 (GL 方程式) は GL エネルギーを秩序変数で変分することによって得られる. 強結合性を含めた議論は次節で行なうこととし, 本節ではまず弱結合で対角項の自己エネルギーを無視する場合を議論する. 以下 Fermi 面は等方的とする.

A.1.1 Eilenberger 方程式の摂動解

ペアポテンシャルを

$$\check{\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ -\Delta^* & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

としたとき, Eilenberger 方程式は

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla g + \Delta \bar{f} - f \Delta^* = 0 \quad (\text{A.2a})$$

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla_- f + 2i\hbar\epsilon_n f + 2\Delta g = 0 \quad (\text{A.2b})$$

$$-i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+ \bar{f} + 2i\hbar\epsilon_n \bar{f} + 2\Delta^* g = 0 \quad (\text{A.2c})$$

であり, g, f, \bar{f} は規格化条件

$$g^2 - f\bar{f} = -\pi^2 \quad (\text{A.3})$$

を満たす. 表記の簡単のため ∇_{\mp} を

$$\nabla_{\mp} = \nabla \mp 2iq\mathbf{A}/\hbar \quad (\text{A.4})$$

と定義した. $T \simeq T_c$ では $\nabla \ll \xi_0^{-1}$ かつ $|\Delta| \ll 2\pi k_B T$ が期待されるため, $\mathbf{v}_F \cdot (-i\hbar\nabla \mp 2q\mathbf{A})$ および Δ を展開パラメータとして摂動を行なう. Green 関数を

$$g = g_0 + g_1 + \dots, \quad (\text{A.5a})$$

$$f = f_0 + f_1 + \dots, \quad (\text{A.5b})$$

$$\bar{f} = \bar{f}_0 + \bar{f}_1 + \dots \quad (\text{A.5c})$$

と展開したとき, 零次の Eilenberger 方程式は

$$2i\hbar\epsilon_n f_0 = 2i\hbar\epsilon_n \bar{f}_0 = 0 \quad (\text{A.6})$$

また規格化条件は

$$g_0^2 - f_0 \bar{f}_0 = -\pi^2 \quad (\text{A.7})$$

であるから, 零次の解は

$$g_0 = -i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n, \quad (\text{A.8a})$$

$$f_0 = \bar{f}_0 = 0 \quad (\text{A.8b})$$

となる*1. 一次のオーダーの展開は

$$2i\hbar\epsilon_n f_1 + 2\Delta g_0 = 0, \quad (\text{A.9a})$$

$$2i\hbar\epsilon_n \bar{f}_1 + 2\Delta^* g_0 = 0 \quad (\text{A.9b})$$

だから

$$f_1 = \frac{\pi\Delta}{|\hbar\epsilon_n|}, \quad (\text{A.10a})$$

$$\bar{f}_1 = \frac{\pi\Delta^*}{|\hbar\epsilon_n|}, \quad (\text{A.10b})$$

また一次の規格化条件は $2g_0 g_1 = 0$ だから

$$g_1 = 0 \quad (\text{A.11})$$

である. 二次の Eilenberger 方程式および規格化条件は

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla_- f_1 + 2i\hbar\epsilon_n f_2 = 0, \quad (\text{A.12a})$$

$$-i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+ \bar{f}_1 + 2i\hbar\epsilon_n \bar{f}_2 = 0, \quad (\text{A.12b})$$

$$g_1^2 + 2g_0 g_2 - f_1 \bar{f}_1 = 0 \quad (\text{A.12c})$$

であるから

$$g_2 = \frac{i\pi|\Delta|^2}{2\hbar^2\epsilon_n|\epsilon_n|}, \quad (\text{A.13a})$$

$$f_2 = -\frac{\pi\hbar(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)\Delta}{2\hbar^2\epsilon_n|\epsilon_n|}, \quad (\text{A.13b})$$

$$\bar{f}_2 = \frac{\pi\hbar(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)\Delta^*}{2\hbar^2\epsilon_n|\epsilon_n|} \quad (\text{A.13c})$$

である. 三次の式は

$$i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla_- f_2 + 2i\hbar\epsilon_n f_3 + 2\Delta g_2 = 0, \quad (\text{A.14a})$$

$$-i\hbar\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+ \bar{f}_2 + 2i\hbar\epsilon_n \bar{f}_3 + 2\Delta^* g_2 = 0, \quad (\text{A.14b})$$

$$2g_0 g_3 + 2g_1 g_2 - f_2 \bar{f}_1 - f_1 \bar{f}_2 = 0 \quad (\text{A.14c})$$

*1 g_0 の符号は常伝導状態の Green 関数から決定する.

であるから

$$g_3 = \frac{i\pi\hbar}{4|\hbar\epsilon_n|^3} [-\Delta^*(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)\Delta + \Delta(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)\Delta^*], \quad (\text{A.15a})$$

$$f_3 = -\frac{\pi\Delta|\Delta|^2}{2|\hbar\epsilon_n|^3} + \frac{\pi\hbar^2(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)^2\Delta}{4|\hbar\epsilon_n|^3}, \quad (\text{A.15b})$$

$$\bar{f}_3 = -\frac{\pi\Delta^*|\Delta|^2}{2|\hbar\epsilon_n|^3} + \frac{\pi\hbar^2(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)^2\Delta^*}{4|\hbar\epsilon_n|^3} \quad (\text{A.15c})$$

である。よって三次の摂動まで取り入れた Green 関数は

$$g \simeq -i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n + \frac{i\pi|\Delta|^2}{2\hbar^2\epsilon_n|\epsilon_n|} + \frac{i\pi\hbar}{4|\hbar\epsilon_n|^3} [-\Delta^*(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)\Delta + \Delta(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)\Delta^*], \quad (\text{A.16a})$$

$$f \simeq \frac{\pi\Delta}{|\hbar\epsilon_n|} - \frac{\pi\hbar(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)\Delta}{2\hbar^2\epsilon_n|\epsilon_n|} - \frac{\pi\Delta|\Delta|^2}{2|\hbar\epsilon_n|^3} + \frac{\pi\hbar^2(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)^2\Delta}{4|\hbar\epsilon_n|^3}, \quad (\text{A.16b})$$

$$\bar{f} \simeq \frac{\pi\Delta^*}{|\hbar\epsilon_n|} + \frac{\pi\hbar(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)\Delta^*}{2\hbar^2\epsilon_n|\epsilon_n|} - \frac{\pi\Delta^*|\Delta|^2}{2|\hbar\epsilon_n|^3} + \frac{\pi\hbar^2(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)^2\Delta^*}{4|\hbar\epsilon_n|^3} \quad (\text{A.16c})$$

である。

A.1.2 s 波超伝導の GL 方程式

GL 自由エネルギーは (A.16) を自由エネルギーの式に代入することにより導出できる。 g_s, f_s, \bar{f}_s は $0 \leq s \leq 1$ として $\Delta \rightarrow s\Delta$ とすれば

$$g_s \simeq -i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n + \frac{i\pi s^2|\Delta|^2}{2\hbar^2\epsilon_n|\epsilon_n|} + \frac{i\pi\hbar s^2}{4|\hbar\epsilon_n|^3} [-\Delta^*(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)\Delta + \Delta(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)\Delta^*], \quad (\text{A.17a})$$

$$f_s \simeq \frac{\pi s\Delta}{|\hbar\epsilon_n|} - \frac{\pi\hbar s(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)\Delta}{2\hbar^2\epsilon_n|\epsilon_n|} - \frac{\pi s^3\Delta|\Delta|^2}{2|\hbar\epsilon_n|^3} + \frac{\pi\hbar^2 s(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)^2\Delta}{4|\hbar\epsilon_n|^3}, \quad (\text{A.17b})$$

$$\bar{f}_s \simeq \frac{\pi s\Delta^*}{|\hbar\epsilon_n|} + \frac{\pi\hbar s(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)\Delta^*}{2\hbar^2\epsilon_n|\epsilon_n|} - \frac{\pi s^3\Delta^*|\Delta|^2}{2|\hbar\epsilon_n|^3} + \frac{\pi\hbar^2 s(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)^2\Delta^*}{4|\hbar\epsilon_n|^3} \quad (\text{A.17c})$$

として得られるから、

$$\begin{aligned} N_0 k_B T \sum_n \int_0^1 ds [\langle f_s \Delta^* \rangle + \langle \bar{f}_s \Delta \rangle] \\ = \frac{|\Delta|^2}{v} + N_0 |\Delta|^2 \ln \frac{T_c}{T} - \frac{7\zeta(3)N_0|\Delta|^4}{16\pi^2 k_B^2 T^2} + \frac{7\zeta(3)N_0\hbar^2 v_F^2}{32\pi^2 k_B^2 T^2} [\Delta \nabla_+^2 \Delta^* + \Delta^* \nabla_-^2 \Delta] \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

である*2。ここで、松原周波数の和に関して公式

$$2\pi k_B T \sum_{0 < \epsilon_n \leq \epsilon_c} \frac{1}{\hbar\epsilon_n} = \frac{1}{vN_0} + \ln \frac{T_c}{T} \quad (\text{A.19a})$$

$$2\pi k_B T \sum_{0 < \epsilon_n < \infty} \frac{1}{\hbar^3 \epsilon_n^3} = \frac{7\zeta(3)}{4\pi^2 k_B^2 T^2} \quad (\text{A.19b})$$

を用い (付録 B.2), $\nabla_{\mp}^2 = \sum_i (\partial_i \mp 2iqA_i)^2$ とした*3。 $\langle \tilde{g} \tilde{\Sigma} \rangle / 2$ の項を $\langle |\Delta|^2 \rangle / v$ に戻して代入すると GL 自由エネルギー

$$\mathcal{J} - \mathcal{J}_0 = N_0 \int d\mathbf{r} \left[-\ln \frac{T_c}{T} |\Delta|^2 + \frac{7\zeta(3)|\Delta|^4}{16\pi^2 k_B^2 T^2} + \frac{7\zeta(3)\hbar^2 v_F^2 (\nabla_- \Delta) \cdot (\nabla_+ \Delta^*)}{16\pi^2 k_B^2 T^2} + \frac{\mathbf{B}^2 - \mathbf{B}_0^2}{2\mu_0 N_0} \right] \quad (\text{A.20})$$

*2 ζ は Riemann ゼータ関数。

*3 i は x, y, z 。

が得られる. ただし $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ とし, 微分項に関しては境界項を 0 として*4部分積分を行なった. $\ln(T_c/T)$ を $1 - T/T_c$ で置き換え, Δ^* で変分することにより GL 方程式

$$0 = -(1 - T/T_c)\Delta + \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 k_B^2 T^2} \Delta |\Delta|^2 - \frac{7\zeta(3)\hbar^2 v_F^2}{16\pi^2 k_B^2 T^2} \nabla^2 \Delta \quad (\text{A.21})$$

が得られる. また \mathbf{A} で変分することにより

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \frac{7\zeta(3)N_0 v_F^2}{8\pi^2 k_B^2 T^2} \left[q \frac{\hbar}{i} (\Delta^* \nabla \Delta - \Delta \nabla \Delta^*) - 4q^2 |\Delta|^2 \mathbf{A} \right] \quad (\text{A.22})$$

すなわち Maxwell 方程式より

$$\mathbf{j} = \frac{7\zeta(3)N_0 v_F^2}{8\pi^2 k_B^2 T^2} \left[q \frac{\hbar}{i} (\Delta^* \nabla \Delta - \Delta \nabla \Delta^*) \right] \quad (\text{A.23})$$

が得られる.

$$\tilde{\Delta} = \sqrt{\frac{7\zeta(3)}{8(1 - T/T_c)}} \frac{\Delta}{\pi k_B T} \quad (\text{A.24a})$$

$$\tilde{\nabla} = \sqrt{\frac{7\zeta(3)}{8(1 - T/T_c)}} \frac{\hbar v_F}{\pi k_B T} \nabla \quad (\text{A.24b})$$

$$\tilde{\mathbf{A}} = \sqrt{\frac{7\zeta(3)}{8(1 - T/T_c)}} \frac{v_F}{\pi k_B T} q \mathbf{A} \quad (\text{A.24c})$$

$$\kappa = \frac{2\pi k_B T}{\hbar v_F^2 q \sqrt{7\zeta(3)N_0 \mu_0}} \quad (\text{A.24d})$$

$$\tilde{\mathbf{B}}_0 = \frac{7\zeta(3)}{1 - T/T_c} \frac{\hbar v_F^2 q}{8\pi^2 k_B^2 T^2} \mathbf{B}_0 \quad (\text{A.24e})$$

および $\tilde{\mathbf{B}} = \tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{A}}$ とすると, 無次元化した GL 自由エネルギー密度

$$\tilde{\mathcal{J}}_1 = -|\tilde{\Delta}|^2 + \frac{1}{2} |\tilde{\Delta}|^4 + \frac{1}{2} [(\tilde{\nabla} - 2i\tilde{\mathbf{A}})\tilde{\Delta}] \cdot [(\tilde{\nabla} + 2i\tilde{\mathbf{A}})\tilde{\Delta}^*] + \kappa^2 (\tilde{\mathbf{B}}^2 - \tilde{\mathbf{B}}_0^2) \quad (\text{A.25})$$

および GL 方程式

$$0 = -\tilde{\Delta} + \tilde{\Delta} |\tilde{\Delta}|^2 - \frac{1}{2} (\tilde{\nabla} - 2i\tilde{\mathbf{A}})^2 \tilde{\Delta} \quad (\text{A.26a})$$

$$\tilde{\nabla} \times (\tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{A}}) = \frac{1}{2\kappa^2} \left(\frac{1}{i} (\tilde{\Delta}^* \tilde{\nabla} \tilde{\Delta} - \tilde{\Delta} \tilde{\nabla} \tilde{\Delta}^*) - 4|\tilde{\Delta}|^2 \tilde{\mathbf{A}} \right) \quad (\text{A.26b})$$

が得られる.

A.1.3 二次元カイラル p 波超伝導の自由エネルギー

二次元カイラル p 波のペアポテンシャルは $\hat{k} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$ としたとき

$$\Delta(\hat{k}, \mathbf{r}) = \Delta_+(\mathbf{r})e^{i\alpha} + \Delta_-(\mathbf{r})e^{-i\alpha} \quad (\text{A.27})$$

と書くことができ, またギャップ方程式は

$$\Delta_{\pm}(\mathbf{r}) = v N_0 k_B T \sum_{|\epsilon_n| < \epsilon_c} \langle f(i\epsilon_n, \alpha, \mathbf{r}) e^{\mp i\alpha} \rangle_{\alpha} \quad (\text{A.28})$$

4 例えば $\Delta = \Delta^ = 0$ ならば成立する.

で与えられる. このとき

$$\partial_{\pm}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\partial_x \pm 2iqA_x/\hbar) + i(\partial_y \pm 2iqA_y/\hbar)] \quad (\text{A.29a})$$

$$\partial_{\pm}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\partial_x \pm 2iqA_x/\hbar) - i(\partial_y \pm 2iqA_y/\hbar)] \quad (\text{A.29b})$$

として

$$\langle |\Delta|^2 \rangle = |\Delta_+|^2 + |\Delta_-|^2 \quad (\text{A.30a})$$

$$\langle |\Delta|^4 \rangle = |\Delta_+|^4 + |\Delta_-|^4 + 4|\Delta_+|^2|\Delta_-|^2 \quad (\text{A.30b})$$

$$\langle \Delta^* (\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)^2 \Delta \rangle = \frac{v_F^2}{2} \left[\Delta_+^* \nabla_-^2 \Delta_+ + \Delta_-^* \nabla_-^2 \Delta_- + \Delta_+^* (\partial_-^-)^2 \Delta_- + \Delta_-^* (\partial_-^+)^2 \Delta_+ \right] \quad (\text{A.30c})$$

$$\langle \Delta (\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)^2 \Delta^* \rangle = \frac{v_F^2}{2} \left[\Delta_+ \nabla_+^2 \Delta_+^* + \Delta_- \nabla_+^2 \Delta_-^* + \Delta_- (\partial_+^-)^2 \Delta_+^* + \Delta_+ (\partial_+^+)^2 \Delta_-^* \right] \quad (\text{A.30d})$$

であるから

$$\begin{aligned} & N_0 k_B T \sum_n \int_0^1 ds [\langle f_s \Delta^* \rangle + \langle \bar{f}_s \Delta \rangle] \\ &= \left(\frac{1}{v} + N_0 \ln \frac{T_c}{T} \right) (|\Delta_+|^2 + |\Delta_-|^2) - \frac{7\zeta(3)N_0}{16\pi^2 k_B^2 T^2} (|\Delta_+|^4 + |\Delta_-|^4 + 4|\Delta_+|^2|\Delta_-|^2) \\ &+ \frac{7\zeta(3)N_0 \hbar^2 v_F^2}{64\pi^2 k_B^2 T^2} [\Delta_+^* \nabla_-^2 \Delta_+ + \Delta_-^* \nabla_-^2 \Delta_- + \Delta_+ \nabla_+^2 \Delta_+^* + \Delta_- \nabla_+^2 \Delta_-^*] \\ &+ \frac{7\zeta(3)N_0 \hbar^2 v_F^2}{64\pi^2 k_B^2 T^2} [\Delta_+^* (\partial_-^-)^2 \Delta_- + \Delta_-^* (\partial_-^+)^2 \Delta_+ + \Delta_- (\partial_+^-)^2 \Delta_+^* + \Delta_+ (\partial_+^+)^2 \Delta_-^*] \quad (\text{A.31}) \end{aligned}$$

であり, 部分積分すると

$$\begin{aligned} \mathcal{J} - \mathcal{J}_0 &= N_0 \int d\mathbf{r} \left\{ -\ln \frac{T_c}{T} (|\Delta_+|^2 + |\Delta_-|^2) + \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2 k_B^2 T^2} (|\Delta_+|^4 + |\Delta_-|^4 + 4|\Delta_+|^2|\Delta_-|^2) \right. \\ &+ \frac{7\zeta(3)\hbar^2 v_F^2}{32\pi^2 k_B^2 T^2} [(\nabla_+ \Delta_+^*) \cdot (\nabla_- \Delta_+) + (\nabla_+ \Delta_-^*) \cdot (\nabla_- \Delta_-)] \\ &+ \left. \frac{7\zeta(3)\hbar^2 v_F^2}{32\pi^2 k_B^2 T^2} [(\partial_+^- \Delta_+^*)(\partial_-^- \Delta_-) + (\partial_+^+ \Delta_-^*)(\partial_-^+ \Delta_+)] + \frac{\mathbf{B}^2 - \mathbf{B}_0^2}{2\mu_0 N_0} \right\} \quad (\text{A.32}) \end{aligned}$$

が得られる. s 波のときと同様の無次元化を行なうと

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{J}}_1 &= -|\tilde{\Delta}_+|^2 - |\tilde{\Delta}_-|^2 + \frac{1}{2} [|\tilde{\Delta}_+|^4 + |\tilde{\Delta}_-|^4 + 4|\tilde{\Delta}_+|^2|\tilde{\Delta}_-|^2] \\ &+ \frac{1}{4} \{ [(\tilde{\nabla} + 2i\tilde{\mathbf{A}})\tilde{\Delta}_+^*][(\tilde{\nabla} - 2i\tilde{\mathbf{A}})\tilde{\Delta}_+] + [(\tilde{\nabla} + 2i\tilde{\mathbf{A}})\tilde{\Delta}_-^*][(\tilde{\nabla} - 2i\tilde{\mathbf{A}})\tilde{\Delta}_-] \} \\ &+ \frac{1}{4} [(\tilde{\partial}_+^- \tilde{\Delta}_+^*)(\tilde{\partial}_-^- \tilde{\Delta}_-) + (\tilde{\partial}_+^+ \tilde{\Delta}_-^*)(\tilde{\partial}_-^+ \tilde{\Delta}_+)] + \kappa^2 (\tilde{\mathbf{B}}^2 - \tilde{\mathbf{B}}_0^2) \quad (\text{A.33}) \end{aligned}$$

であり, 無次元化した GL 方程式は

$$0 = -\tilde{\Delta}_+ + (\tilde{\Delta}_+ |\tilde{\Delta}_+|^2 + 2\tilde{\Delta}_+ |\tilde{\Delta}_-|^2) - \frac{1}{4} (\tilde{\nabla}_-^2 \tilde{\Delta}_+ + (\tilde{\partial}_+^-)^2 \tilde{\Delta}_-) \quad (\text{A.34})$$

$$0 = -\tilde{\Delta}_- + (\tilde{\Delta}_- |\tilde{\Delta}_-|^2 + 2\tilde{\Delta}_- |\tilde{\Delta}_+|^2) - \frac{1}{4} (\tilde{\nabla}_+^2 \tilde{\Delta}_- + (\tilde{\partial}_-^+)^2 \tilde{\Delta}_+) \quad (\text{A.35})$$

$$\begin{aligned} \tilde{\nabla} \times (\tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{A}}) &= \frac{1}{4\kappa^2} \left(\frac{1}{i} (\tilde{\Delta}_+^* \tilde{\nabla}_- \tilde{\Delta}_+ - \tilde{\Delta}_+ \tilde{\nabla}_- \tilde{\Delta}_+^* + \tilde{\Delta}_-^* \tilde{\nabla}_+ \tilde{\Delta}_- - \tilde{\Delta}_- \tilde{\nabla}_+ \tilde{\Delta}_-^*) \right. \\ &+ 2 \text{Im}(\Delta_-^* \partial_-^+ \Delta_+ + \Delta_+^* \partial_-^- \Delta_-) \mathbf{e}_x + 2 \text{Re}(\Delta_-^* \partial_-^+ \Delta_+ - \Delta_+^* \partial_-^- \Delta_-) \mathbf{e}_y \\ &\left. - 4|\tilde{\Delta}_+|^2 \tilde{\mathbf{A}} - 4|\tilde{\Delta}_-|^2 \tilde{\mathbf{A}} \right) \quad (\text{A.36}) \end{aligned}$$

となる ($\mathbf{e}_x = (1, 0, 0)$, $\mathbf{e}_y = (0, 1, 0)$ は単位ベクトル).

A.2 強結合カイラル p 波超伝導の Ginzburg-Landau 方程式

二次元カイラル p 波のギャップ方程式を

$$\Delta_{\pm}(i\epsilon_m, \mathbf{r}) = N_0 k_B T \sum_{|\epsilon_n| < \epsilon_c} v(\epsilon_m, \epsilon_n) \langle f(i\epsilon_n, \alpha, \mathbf{r}) e^{\mp i\alpha} \rangle_{\alpha} \quad (\text{A.37a})$$

$$\Sigma_{\pm}(i\epsilon_m, \mathbf{r}) = N_0 k_B T \sum_{|\epsilon_n| < \epsilon_c} v(\epsilon_m, \epsilon_n) \langle f(i\epsilon_n, \alpha, \mathbf{r}) e^{\mp i\alpha} \rangle_{\alpha} \quad (\text{A.37b})$$

$$\Sigma = \Sigma_+ e^{+i\alpha} + \Sigma_- e^{-i\alpha} \quad (\text{A.37c})$$

として強結合性を取り入れることを考える. Eilenberger 方程式への変更としては自己エネルギー対角部分 Σ を加えればよい. Green 関数の摂動解は分母の $\hbar\epsilon_n$ を $\hbar\tilde{\epsilon}_n = \hbar\epsilon_n + i\Sigma$ に置き換えてやればよい. このとき, Σ に関するギャップ方程式に注目すると, $e^{i\alpha}$ をかけて積分したときに摂動の零次, 一次, 二次の項は消えるから, Σ の大きさは摂動の三次かそれ以上の次数である. よって f の摂動解に対する Σ の影響を考えると

$$\frac{\Delta}{|\hbar\tilde{\epsilon}_n|} \sim \left(1 - \left|\frac{i\Sigma}{\hbar\epsilon_n}\right|\right) \frac{\Delta}{|\hbar\epsilon_n|} = \frac{\Delta}{|\hbar\epsilon_n|} + O((\Delta/\hbar\epsilon_n)^4) \quad (\text{A.38a})$$

$$\frac{\Delta^* \hbar^2 v_F^2 \nabla_-^2 \Delta}{|\hbar\tilde{\epsilon}_n|^3} \sim \left(1 - 3 \left|\frac{i\Sigma}{\hbar\epsilon_n}\right|\right) \frac{\Delta^* \hbar^2 v_F^2 \nabla_-^2 \Delta}{|\hbar\epsilon_n|^3} = \frac{\Delta^* \hbar^2 v_F^2 \nabla_-^2 \Delta}{|\hbar\epsilon_n|^3} + O((\Delta/\hbar\epsilon_n)^7) \quad (\text{A.38b})$$

であるから, f に関しては摂動の三次まででは Σ は効いてこない. 同様に \bar{f} についても摂動の三次まででは Σ は無視できる.

次に $\mathcal{J} - \mathcal{J}_0$ における Σ の影響を考える. $\Sigma v^{-1} \Sigma$ の項は $\Sigma^2 = O((\Delta/\hbar\epsilon_n)^6)$ であるから無視できる^{*5}. 一方 $g_s \Sigma$ の項に関しては g の摂動の零次項 g_0 が存在するため Σ の四次まで考える必要がある. Σ の三次項は $N_0 k_B T \sum_n v(\epsilon_m, \epsilon_n) \langle e^{\pm i\alpha} g_3 \rangle$ で得られるが, ∇ の一次であり $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ で符号が反転するため, 対称性より $\mathcal{J} - \mathcal{J}_0$ を計算する際に $\int d\mathbf{r}$ によって消えるため無視できる. Σ の四次の項に関して g_4 を考える. 規格化の四次の摂動の式は

$$2g_0 g_4 + g_2^2 - f_1 \bar{f}_3 - f_2 \bar{f}_2 - f_3 \bar{f}_1 = 0 \quad (\text{A.39})$$

だから

$$g_4 = \frac{\pi^2}{8g_0 |\hbar\epsilon_n|^4} \left\{ -3|\Delta|^4 + \hbar^2 [\Delta(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+)^2 \Delta^* + \Delta^*(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-)^2 \Delta - (\mathbf{v}_F \cdot \nabla_- \Delta)(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+ \Delta^*)] \right\} \quad (\text{A.40})$$

である. よって $\langle e^{\pm i\alpha} g_4 \rangle = 0$ であり, Σ の四次項は 0 である. よって $\mathcal{J} - \mathcal{J}_0$ において $g_s \Sigma$ は四次までの範囲では考える必要はない.

今, ギャップ方程式が (A.37a) の形で書けるとしているから Δ において α 依存性と $i\epsilon_n$ 依存性は完全に分離できている. Δ の空間, 周波数依存性を考えるため, f_1, f_2, \dots に対応する Δ の摂動 $\Delta_1, \Delta_2, \dots$ を考える. Δ の一次の式は

$$\Delta_1^{\pm}(i\epsilon_m) = N_0 k_B T \sum_n v_{mn} \left\langle \frac{\pi \Delta_1(i\epsilon_n)}{|\hbar\epsilon_n|} e^{\mp i\alpha} \right\rangle \quad (\text{A.41})$$

だから, Δ_1 は空間依存部分と周波数依存部分の積として書くことができる. Δ_2 は消えるため, Δ_3 を考える. $\Delta_3 g_0$ の項を Δ_1 の項へくりこんでしまうことにすれば f_3 の式には Δ の展

^{*5} v^{-1} は松原周波数の添字を足とする行列として考える必要があるがオーダーには関係ない.

開項として Δ_1 しか登場しない。 f_3 は空間微分の項と周波数に依存する部分が混在するため、 Δ_3 は Δ_1 のように積の形で分けて書くことはできない。しかし f の三次までの摂動展開の式の中には Δ_3 は入ってこないため、ギャップ方程式による自己無撞着計算を考えた場合でも、三次までの範囲では f_3 に由来する空間の依存性と周波数依存性が混ざった項は効いてこないと考えられ、 $\Delta(i\epsilon_n, \mathbf{r})$ は周波数依存部分 ψ と空間座標依存部分 Ψ の積で

$$\Delta^\pm(i\epsilon_n, \mathbf{r}) = \psi^\pm(i\epsilon_n)\Psi^\pm(\mathbf{r}) \quad (\text{A.42})$$

と書ける [192]。このとき、自由エネルギーの式において $\Psi(i\epsilon_n)$ の部分を取り出してしまえば ψ の部分は v と併せて足し合わせてしまえるので、自由エネルギーは $\Psi^2, \Psi^4, (\nabla\Psi)^2$ の関数の積分になり ϵ_n に関する部分は足し合わせられて定数とみなすことができるようになる。同じ次数での Ψ^+ と Ψ^- の係数の比は運動量積分に由来しているため弱結合の場合と同じであり、また他の次数との係数は無次元化のための規格化を変えることによって吸収可能である。よってこの模型においては、ギャップ方程式に強結合性があり Δ に周波数依存性がある場合であっても、空間依存性を表わす Ψ に関する Ginzburg-Landau 方程式は、弱結合のそれと同じ形となるため、GL 方程式の範囲では強結合性は効かないことが分かる。

A.3 London 理論での自由エネルギー

孤立渦の自由エネルギーは、 ξ をコヒーレンス長 (秩序変数の回復長)、 λ を London 磁場侵入長としたとき、 $\lambda \ll \xi$ では $\ln(\lambda/\xi)$ に比例するため、例えば GL 理論や準古典理論で孤立渦の自由エネルギーを求める計算を実行する際には、有限の λ を持つ系が対象である必要がある*6。本節では de Gennes の教科書 [193] の方法に従い、London 理論*7によって渦の自由エネルギーを求める。

超流動密度を n_s 、粒子質量を m^* 、粒子速度を \mathbf{v} としたとき、渦まわりの超伝導のエネルギー E は

$$E = E_0 + \int d\mathbf{r} \frac{B^2}{2\mu_0} + \int d\mathbf{r} \frac{n_s m^* \mathbf{v}^2}{2} \quad (\text{A.43})$$

と書くことができるだろう。このとき E_0 は凝縮エネルギーであり三項目は系の運動エネルギーである。粒子の電荷を q^* 、超伝導電流 \mathbf{j}_s を $\mathbf{j}_s = n_s q^* \mathbf{v}$ とし、Maxwell 方程式 $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}_s$ に代入すると

$$E = E_0 + \frac{1}{2\mu_0} \int d\mathbf{r} [B^2 + \lambda^2 (\nabla \times B)^2] \quad (\text{A.44a})$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{m^*}{\mu_0 q^{*2} n_s}} \quad (\text{A.44b})$$

となる。十分低温ではエネルギーと自由エネルギーの差は無視でき、また $\xi \ll \lambda$ では λ の長さスケールで見たとき渦の半径は無視できるとみなせるから、一様系と渦の自由エネルギー

*6 ただし系の境界条件としてバルクを用いる場合の話である。明示的に超伝導体の端を設ける場合や渦格子の場合はその限りではない。

*7 Maxwell 方程式に London 方程式 (A.46) を加えた超伝導の巨視的な理論。

ギ-差 ΔE は

$$\Delta E = \frac{1}{2\mu_0} \int d\mathbf{r} [\mathbf{B}^2 + \lambda^2(\nabla \times \mathbf{B})^2] \quad (\text{A.45})$$

である. 一方, London 方程式

$$\mathbf{j} = \frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \mathbf{A} \quad (\text{A.46})$$

に $\nabla \times \mathbf{B} = \mu \mathbf{j}$ および $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ を代入し, さらに \mathbf{B} が z 軸方向を向いていて大きさ B が円筒対称である*⁸ことを用いると,

$$\lambda^2 r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} B + \lambda^2 r \frac{\partial}{\partial r} B - r^2 B = 0 \quad (\text{A.47})$$

である. B は原点 (渦中心) から十分遠くでは 0 になるはずだから (A.47) の解は K_0 を第二種変形 Bessel 函数, C を定数として

$$B(r) = CK_0(r/\lambda) \quad (\text{A.48})$$

である. 原点を中心とする半径 $R \gg \lambda$ の円の内部を積分領域として積分を作用させると, (A.48) の左辺は磁束量子 $\Phi_0 = 2\pi\hbar/q^*$ となる*⁹. 一方 (A.48) の右辺は

$$2\pi \int_0^R dr r CK_0(r/\lambda) \simeq 2\pi C \lambda^2 \int_0^\infty dt t K_0(t) = 2\pi C \lambda^2 \quad (\text{A.49})$$

であるから, $C = \Phi_0/(2\pi\lambda^2)$ すなわち $r \gg \lambda$ では

$$B(r) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0(r/\lambda) \quad (\text{A.50})$$

である. よって (A.45) に代入すると渦に沿って単位長さ l あたりの自由エネルギー (差) は

$$\begin{aligned} \Delta E/l &\simeq \frac{1}{2\mu_0} \int_\xi^\infty dr 2\pi r [B^2 + \lambda^2(\partial_r B)^2] \\ &= \frac{\pi}{2\mu_0} \left(\frac{\Phi_0}{2\pi\lambda} \right)^2 \left[t^2 K_0^2(t) + 2t^2 K_1^2(t) - t^2 K_0(t) K_2(t) \right]_{t=\xi/\lambda}^\infty \\ &\simeq \frac{\pi}{\mu_0} \left(\frac{\Phi_0}{2\pi\lambda} \right)^2 \ln \frac{\lambda}{\xi} \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

であり, 渦の自由エネルギーは λ/ξ に対して対数発散することが分かる.

*⁸ 考える微分方程式の長さの程度は λ であるから, $\xi \ll \lambda$ ならば ξ のスケールでは円筒対称性が破れていてもよい.

*⁹ 1 巻きの渦を仮定する.

付録 B

準古典理論

B.1 Wigner 変換と積

B.1.1 Moyal 積

積分

$$Z(1, 3) = \int_2 X(1, 2)Y(2, 3) \quad (\text{B.1})$$

の Wigner 変換 $Z(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r})$ を, Wigner 変換を行なった函数 $X(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r})$ および $Y(i\epsilon_n, \mathbf{k}, \mathbf{r})$ で表わすことを考える (X, Y は一般には (正方) 行列であり非可換とする). X, Y, Z は時間の重心座標については依存しないとすると, 周波数に関しては Z は X と Y の単純な積になる. 空間座標について考えるため, X と Y を Wigner 変換すると^{*1}

$$Z(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3) = \int d\mathbf{x}_2 \int \frac{d\mathbf{k}d\mathbf{k}'}{(2\pi)^{2d}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3)} X(\mathbf{k}, (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/2) Y(\mathbf{k}', (\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3)/2) \quad (\text{B.2})$$

である^{*2}. 函数 X, Y の重心座標に対する変化は相対座標に対する変化よりも十分にゆっくりだとして, $\mathbf{r} = (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_3)/2$ に対する勾配展開を考えると

$$\begin{aligned} X(\mathbf{k}, (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/2) &= X(\mathbf{k}, \mathbf{r} + (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3)/2) \\ &= X(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \frac{\partial X(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3}{2} \right) + O((\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3)^2 \partial_{\mathbf{r}}^2 X) \end{aligned} \quad (\text{B.3a})$$

$$\begin{aligned} Y(\mathbf{k}', (\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3)/2) &= Y(\mathbf{k}', \mathbf{r} + (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)/2) \\ &= Y(\mathbf{k}', \mathbf{r}) + \frac{\partial Y(\mathbf{k}', \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1}{2} \right) + O((\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)^2 \partial_{\mathbf{r}}^2 Y) \end{aligned} \quad (\text{B.3b})$$

である.

$$\left(\frac{\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3}{2} \right)^n e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3)} = \left(\frac{1}{2i} \right)^n \frac{\partial^n}{\partial \mathbf{k}'^n} e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3)} \quad (\text{B.4a})$$

$$\left(\frac{\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1}{2} \right)^n e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} = \left(-\frac{1}{2i} \right)^n \frac{\partial^n}{\partial \mathbf{k}^n} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \quad (\text{B.4b})$$

^{*1} 簡単のためゲージ不変性は考えない.

^{*2} 簡単のため周波数の引数 $i\epsilon_n$ は省略した.

を用いて書き直すと

$$\begin{aligned}
Z(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3) &= \int d\mathbf{x}_2 \int \frac{d\mathbf{k}d\mathbf{k}'}{(2\pi)^{2d}} \left[\left(X(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \frac{1}{2i} \frac{\partial X(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}'} + O\left(\partial_{\mathbf{k}'}^2 \partial_{\mathbf{r}}^2 X\right) \right) e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3)} \right] \\
&\quad \left[\left(Y(\mathbf{k}', \mathbf{r}) - \frac{1}{2i} \frac{\partial Y(\mathbf{k}', \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + O\left(\partial_{\mathbf{k}}^2 \partial_{\mathbf{r}}^2 Y\right) \right) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \right] \\
&= \int d\mathbf{x}_2 \int \frac{d\mathbf{k}d\mathbf{k}'}{(2\pi)^{2d}} e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3)} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \left[X(\mathbf{k}, \mathbf{r}) Y(\mathbf{k}', \mathbf{r}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2i} \frac{\partial X(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial Y(\mathbf{k}', \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{2i} \frac{\partial X(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial Y(\mathbf{k}', \mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}'} + O\left(\partial_{\mathbf{k}}^2 \partial_{\mathbf{r}}^2, \dots\right) \right] \\
&= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3)} \left[1 + \frac{i}{2} (\partial_{\mathbf{r}} \partial_{\mathbf{k}'} - \partial_{\mathbf{k}} \partial_{\mathbf{r}'}) + O\left(\partial_{\mathbf{r}}^2 \partial_{\mathbf{k}}^2, \dots\right) \right] X(\mathbf{k}, \mathbf{r}) Y(\mathbf{k}', \mathbf{r}') \Big|_{\substack{\mathbf{r}'=\mathbf{r} \\ \mathbf{k}'=\mathbf{k}}} \quad (\text{B.5})
\end{aligned}$$

すなわち

$$\begin{aligned}
Z(\mathbf{k}, \mathbf{r}) &= X(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \star Y(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \\
&= X(\mathbf{k}, \mathbf{r}) Y(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \frac{i}{2} [\partial_{\mathbf{r}} X(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \partial_{\mathbf{k}} Y(\mathbf{k}, \mathbf{r}) - \partial_{\mathbf{k}} X(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \partial_{\mathbf{r}} Y(\mathbf{k}, \mathbf{r})] \\
&\quad + O\left(\partial_{\mathbf{k}}^2 \partial_{\mathbf{r}}^2\right) X(\mathbf{k}, \mathbf{r}) Y(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (\text{B.6})
\end{aligned}$$

となる. 積 \star は Moyal 積や Groenewold 積と呼ばれ, もともとは量子-古典対応を考えるために導入された [194, 195]^{*3}. 文献では $X \circ Y$ と表記されることも多く, しばしば “dot-product” [198] や “circle-product” [199] とも呼ばれる. 超伝導における準古典理論の場合, $\partial_{\mathbf{k}}$ の特徴的な大きさは Fermi 波長の逆数 k_F^{-1} であり, $\partial_{\mathbf{r}}$ の特徴的な大きさはコヒーレンス長の逆数 ξ_0^{-1} だから, Moyal 積の最低次のみを取り高次の項を無視することは $k_F \xi_0 \gg 1$ であることを意味している.

B.1.2 跡

積の跡

$$\text{tr}(XY) = \iint_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 \iint d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 X(\tau_1, \mathbf{x}_1, \tau_2, \mathbf{x}_2) Y(\tau_2, \mathbf{x}_2, \tau_1, \mathbf{x}_1) \quad (\text{B.7})$$

の Wigner 変換を考えると ($\tau = (\tau_1 + \tau_2)/2$, $\bar{\tau} = \tau_1 - \tau_2$, $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$, $\bar{\mathbf{r}} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$)

$$\begin{aligned}
\text{tr}(XY) &= \iiint d\tau d\bar{\tau} d\mathbf{r} d\bar{\mathbf{r}} X(\bar{\tau}, \mathbf{r} + \bar{\mathbf{r}}/2, \mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}/2) Y(-\bar{\tau}, \mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}/2, \mathbf{r} + \bar{\mathbf{r}}/2) \\
&= \iiint d\tau d\bar{\tau} d\mathbf{r} d\bar{\mathbf{r}} \frac{k_B^2 T^2}{\hbar^2} \sum_{n,m} \iint \frac{d\mathbf{k}d\mathbf{k}'}{(2\pi)^{2d}} X(i\epsilon_n, \mathbf{r}, \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\bar{\mathbf{r}} - i\epsilon_n \bar{\tau}} Y(i\epsilon_m, \mathbf{r}, \mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}'\bar{\mathbf{r}} + i\epsilon_m \bar{\tau}} \\
&= \sum_n \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} X(i\epsilon_n, \mathbf{r}, \mathbf{k}) Y(i\epsilon_n, \mathbf{r}, \mathbf{k}) \quad (\text{B.8})
\end{aligned}$$

である. よってゲージ不変性を考慮しない場合は積の跡の Wigner 変換は Wigner 変換した関数の積の波数, 重心座標で積分し松原周波数の和を取ったものとなる.

^{*3} ここでの導出は [196, 197] に従った.

B.2 結合定数と転移温度

B.2.1 弱結合の場合

弱結合 BCS 理論ではペアポテンシャルは周波数によらず一定であると仮定するため、高周波数においても常伝導に自然には繋がれず、計算に当たっては周波数カットオフを導入する必要が生じる。カットオフとして実周波数の場合は Debye 周波数 ω_D を用いられる^{*4}が、一方で松原周波数のカットオフをどのように設定するかは自明ではない。

準古典理論を用いて超伝導状態を解析する際には、超伝導の“発現機構”ではなく“超伝導状態”に興味があり、特徴的なエネルギーの程度として T_c (あるいは絶対零度でのペアポテンシャルの大きさ) を取る場合が多い。この場合には、結合定数は T_c が転移温度であるという条件を満たせば計算上問題を生じないため、簡単な扱いが可能となる。

簡単のため s 波超伝導を考える。まず、十分大きなカットオフ ϵ_c を取る。 ϵ_c は典型的には Debye 周波数が取られるが、考えたい温度 T において十分多くの松原周波数が取れば^{*5}Debye 周波数である必要はない。ギャップ方程式

$$\Delta = vN_0k_B T \sum_{|\epsilon_n| < \epsilon_c} \langle f(i\epsilon_n) \rangle \quad (\text{B.9})$$

を考え、バルク解 $f(i\epsilon_n) = \pi\Delta/\sqrt{\hbar^2\epsilon_n^2 + |\Delta|^2}$ を代入すると

$$\frac{1}{vN_0} = \pi k_B T \sum_{|\epsilon_n| < \epsilon_c} \frac{1}{\sqrt{\hbar^2\epsilon_n^2 + |\Delta|^2}} \quad (\text{B.10})$$

が得られる。 $T = T_c$ では $|\Delta| = 0$ だから

$$\frac{1}{vN_0} = 2\pi k_B T_c \sum_{0 < \epsilon_n < \epsilon_c} \frac{1}{\hbar\epsilon_n} = \sum_{n=0}^{n_c(T_c)} \frac{1}{n + 1/2} \quad (\text{B.11})$$

である。ここで $n_c(T)$ は温度 T において $\epsilon_c \geq \epsilon_n = (2n + 1)\pi k_B T/\hbar$ を満たす最大の n とした。 $n_c(T_c)$ が十分に大きい場合

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{n_c(T_c)} \frac{1}{n + 1/2} &= 2 \sum_{n=0}^{2n_c(T_c)} \frac{1}{n} - \sum_{n=0}^{n_c(T_c)} \frac{1}{n} \\ &\simeq \ln n_c(T_c) + \gamma + 2 \ln 2 \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

である^{*6}。同様に温度 $0 < T < T_c$ の場合も $n_c(T)$ が十分に大きい場合は

$$\begin{aligned} 2\pi k_B T \sum_{0 < \epsilon_n < \epsilon_c} \frac{1}{\hbar\epsilon_n} &= \sum_{n=0}^{n_c(T)} \frac{1}{n + 1/2} \\ &\simeq \ln n_c(T) + \gamma + 2 \ln 2 \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

と書けるから、(B.11), (B.12), (B.13) を比較すれば

$$\begin{aligned} \frac{1}{vN_0} &\simeq \sum_{n=0}^{n_c(T)} \frac{1}{n + 1/2} + \ln \frac{n_c(T_c)}{n_c(T)} \\ &\simeq 2\pi k_B T \sum_{0 < \epsilon_n \leq \epsilon_c} \frac{1}{\hbar\epsilon_n} + \ln \frac{T}{T_c} \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

^{*4} 物理的にはフォノンによる相互作用が引力ではなくなる周波数と考えられる。

^{*5} ϵ_n として 10 個程度取れば十分なことが多い。

^{*6} γ は Euler 定数。

が得られる*7.

B.2.2 強結合の場合

本論文では Eliashberg 方程式

$$\Delta_{\pm}(i\epsilon_m, \alpha, \mathbf{r}) = N_0 k_B T \sum_n \frac{v_0 \omega_0^2}{\omega_0^2 + (\epsilon_m - \epsilon_n)^2} \langle f(i\epsilon_n, \alpha', \mathbf{r}) e^{\mp i l \alpha'} \rangle_{\alpha'} \quad (\text{B.15})$$

に従う超伝導の結合定数 v_0 を, 与えられた ω_0 に対して $k_B T_c = 1$ となるように決定した. v_0 を求めるため, バルクの異常 Green 関数

$$f(i\epsilon_n, \hat{k}) = \frac{\pi \Delta(i\epsilon_n, \hat{k})}{\sqrt{\epsilon_n^2 + |\Delta(i\epsilon_n, \hat{k})|^2}} \quad (\text{B.16})$$

を考え*8, $T \simeq T_c$ すなわち $|\Delta| \ll |\epsilon_n|$ として Eliashberg 方程式を線形化すると

$$\Delta(i\epsilon_m) = N_0 k_B T \sum_n \frac{v_0 \omega_0^2}{\omega_0^2 + (\epsilon_m - \epsilon_n)^2} \frac{\pi}{|\epsilon_n|} \Delta(i\epsilon_n) \quad (\text{B.17})$$

となる. すなわち $\Delta(i\epsilon_n)$ を n を足とするベクトル $\vec{\Delta}$, M を (m, n) 要素が

$$M_{mn} = \frac{\pi N_0 k_B T v_0 \omega_0^2}{[\omega_0^2 + (\epsilon_m - \epsilon_n)^2] |\epsilon_n|} \quad (\text{B.18})$$

である行列とみなせば Eliashberg 方程式は $\vec{\Delta} = M \vec{\Delta}$ と書くことができる. 固有値問題

$$\lambda \vec{\Delta} = M \vec{\Delta} \quad (\text{B.19})$$

を考えたとき, 最大固有値 $\lambda_{\max} \geq 1$ のとなる温度 T のときに系は超伝導に転移する. よって本論文での設定を満たすようにするためには, $k_B T = k_B T_c = 1$ として固有値問題 (B.19) を解き, M の最大固有値が 1 となるように, 二分探索等で v_0 を求めてやればよい.

B.3 Eilenberger の自由エネルギー汎関数

準古典理論を用いて求められた Green 関数と自己エネルギーから自由エネルギー \mathcal{J} を求める式として, 本論文で用いた Luttinger-Ward 汎関数あるいは経路積分を使用して導出される (2.118) の他に, Eilenberger が準古典理論の原論文 [74] で天下りの的に与えた式が存在している. この式では自由エネルギーは異常 Green 関数と自己エネルギーの汎関数として与えられており, 自由エネルギーの変分が Eilenberger 方程式を与えるように構成されている. 境界条件に注意すれば, この方法によって二つ目の方法と数値的に同じ値が得られることが経験的に知られている [200]*9. 一方で, その証明は現在のところ存在していない. 本研究では有限の磁場侵入長 λ_L に対して十分に大きな半径を実空間のカットオフとして境界を取った場合に, 全ての計算で両者の自由エネルギーが一致することを確認している.

*7 変形の途中で $n_c(T_c)$ が十分に大きいことを仮定したが, 実際に (B.14) を使用して計算するには前述のようにある程度の松原周波数が取れる大きさと十分である.

*8 バルクでは $e^{\pm i \alpha}$ の片方の成分しか考えなくてよいため, \pm の添字は省略する.

*9 ただし積分した値は同じになる一方で, 二つの方法によって (数値的に) 得られた空間座標の各点での値は必ずしも一致しない. そのためこれらの方法で得られた各点での値が, その点での自由エネルギー密度とみなせ物理的意味を持っているかどうかは, 定かではない.

ギャップ方程式

$$\Delta(\mathbf{r}) = v N_0 k_B T \sum_{\epsilon_n < \epsilon_c} \langle f(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \rangle_{\hat{\mathbf{k}}} \quad (\text{B.20})$$

に従う結合定数 v で Σ を考えない弱結合 s 波超伝導に対して, Eilenberger が原論文で与えた汎関数 $\mathcal{J}_E[f, \bar{f}]$ は

$$\mathcal{J}_E[f, \bar{f}, \Delta, \Delta^*] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{|\Delta|^2}{v} - N_0 k_B T \sum_{\epsilon_n} \langle I(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \rangle_{\hat{\mathbf{k}}} + \frac{B^2 - B_0^2}{2\mu_0} \right] \quad (\text{B.21a})$$

$$\begin{aligned} I(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) = & \Delta^*(\mathbf{r}) f(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) + \bar{f}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}) + 2i\hbar\epsilon_n \left(g(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) + i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n \right) \\ & + i\hbar g(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \left[\frac{(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-) f(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r})}{2f(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r})} - \frac{(\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+) \bar{f}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r})}{2\bar{f}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r})} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.21b})$$

で与えられる. ただし上式で g は $(-\pi^2 + f\bar{f})^{1/2}$ の別名として扱うこととする*¹⁰. \mathcal{J}_E を \bar{f} で変分することにより Eilenberger 方程式の f の微分方程式が, f で変分することにより \bar{f} の微分方程式が得られ*¹¹, また Δ^* で変分することによりギャップ方程式が得られる. 一様系での解を代入すると

$$\mathcal{J}_E = \int d\mathbf{r} \left[\frac{|\Delta|^2}{v} + 2\pi N_0 k_B T \sum_n \left(\hbar |\epsilon_n| - \sqrt{\hbar^2 \epsilon_n^2 + |\Delta|^2} \right) \right] \quad (\text{B.22})$$

となり, これは (2.119) で s 波弱結合を取ったものと一致する.

しかし, 渦において汎関数 \mathcal{J}_E の式をそのまま適用しようとすると, 渦の中心で汎関数が非物理的な値を取るという問題が生じる. このことは以下のようにして示すことができる. Eilenberger 方程式を用いて ∇f および $\nabla \bar{f}$ を微分を含まない項で置き換えると (B.21) は

$$I(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) = -2\pi\hbar |\epsilon_n| + \pi^2 \left(\frac{\Delta}{f} + \frac{\Delta^*}{\bar{f}} \right) \quad (\text{B.23})$$

となる. 渦芯において $f(i\epsilon_n)$, $\bar{f}(i\epsilon_n)$ は一般には有限であり, 一方で Δ が 0 であることを考えると $-\Sigma \langle I \rangle$ は渦芯近傍で $\Sigma |\epsilon_n|$ に比例する非常に大きな値を取ることになり, \mathcal{J}_E は自由エネルギーとして非物理的であろうと考えられる.

この問題は微分項に修正を加えることによって解決される [199, 200]. 具体的には, 微分項を修正し

$$\begin{aligned} I(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) = & \Delta^*(\mathbf{r}) f(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) + \bar{f}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}) + 2i\hbar\epsilon_n \left(g(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) + i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n \right) \\ & + i\hbar \left(\frac{\bar{f}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) (\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-) f(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r})}{2 \left(g(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) - i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n \right)} - \frac{f(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) (\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+) \bar{f}(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r})}{2 \left(g(i\epsilon_n, \hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) - i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n \right)} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

とする. 微分項を消去すると

$$I = -i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n \frac{\bar{f}\Delta + \Delta^* f}{g - i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n} = -i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n (g + i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n) \left(\frac{\Delta}{f} + \frac{\Delta^*}{\bar{f}} \right) \quad (\text{B.25})$$

*¹⁰ GL 方程式を考えるとときと同様 $\nabla_{\pm} = \nabla \pm 2i\mathbf{q}\mathbf{A}/\hbar$ とする.

*¹¹ g は規格化条件から得られる.

となる. この項は渦中心では 0 となり, また $|\Delta|^2 = 0$ でもあるから, 修正された汎函数を用いた場合は渦中心では常伝導状態と自由エネルギー密度が変わらない. これは渦の中心は常伝導に近い状態とみなせるという描像と整合している.

Eilenberger 汎函数は不純物自己エネルギーがある場合や異方的な場合への拡張が可能であり [199], さらに Eliashberg 方程式に従う超伝導に対しても拡張可能である. 以下の Eliashberg 方程式

$$\check{\Sigma}(i\epsilon_m, \hat{k}, \mathbf{r}) = N_0 k_B T \sum_n v_{mn} \langle \varphi(\hat{k}, \hat{k}') \check{g}(i\epsilon_n, \hat{k}', \mathbf{r}) \rangle_{\hat{k}}, \quad (\text{B.26})$$

に従う異方的な超伝導に拡張した汎函数は

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{E'}[f, \bar{f}, \Delta, \Delta^*, \Sigma, \mathbf{A}] = \int d\mathbf{r} \left[\sum_{m,n} \langle \Delta^*(i\epsilon_m, \hat{k}, \mathbf{r}) (v^{-1})_{mn} \Delta(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) \rangle_{\hat{k}} \right. \\ \left. - \sum_{m,n} \langle \Sigma(i\epsilon_m, \hat{k}, \mathbf{r}) (v^{-1})_{mn} \Sigma(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) \rangle_{\hat{k}} \right. \\ \left. - N_0 k_B T \sum_n \langle I(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{R}) \rangle_{\hat{k}} + \frac{\mathbf{B}^2 - \mathbf{B}_0^2}{2\mu_0} \right] \quad (\text{B.27}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) = \Delta^*(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) \langle \varphi(\hat{k}, \hat{k}') f(i\epsilon_n, \hat{k}', \mathbf{r}) \rangle_{\hat{k}'} + \bar{f}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) \langle \varphi(\hat{k}, \hat{k}') \Delta(i\epsilon_n, \hat{k}', \mathbf{r}) \rangle_{\hat{k}'} \\ + 2i\hbar \epsilon_n \langle g(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) + i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n \rangle - 2\Sigma(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) \langle \varphi(\hat{k}, \hat{k}') g(i\epsilon_n, \hat{k}', \mathbf{r}) \rangle_{\hat{k}'} \\ + i\hbar \left(\frac{\bar{f}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) (\mathbf{v}_F \cdot \nabla_-) f(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r})}{2(g(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) - i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n)} - \frac{f(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) (\mathbf{v}_F \cdot \nabla_+) \bar{f}(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r})}{2(g(i\epsilon_n, \hat{k}, \mathbf{r}) - i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n)} \right) \quad (\text{B.28}) \end{aligned}$$

と書くことができる. Eilenberger 方程式, Eliashberg 方程式および $\langle \varphi(\hat{k}, \hat{k}') \Delta(\hat{k}') \rangle_{\hat{k}'} = \Delta(\hat{k})$ を使って微分項, 角度積分を消すと s 波と同様

$$I = -i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n \frac{\bar{f} \Delta + \Delta^* f}{g - i\pi \operatorname{sgn} \epsilon_n} \quad (\text{B.29})$$

と書くことができる. いずれの場合でも, London 侵入長 λ よりも十分大きな系において単一渦を計算した場合には, 汎函数の値は本研究で用いた経路積分から導出した自由エネルギーと数値的に一致している.

Eilenberger の汎函数は, 上記いずれの場合でも汎函数を変分し Eilenberger 方程式等を求める際に規格化条件 $g^2 - f\bar{f} = -\pi^2$ を用いている. Eilenberger の汎函数は変分してギャップ方程式および Eilenberger 方程式が与えられる汎函数を探し出して得られているため, 規格化条件が成立していない場合への拡張は直接行なうことができず, またアドホックに求めることも困難である.

Dyson 方程式 (Gor'kov 方程式) から Eilenberger 方程式を求める際に, Moyal 積の一次の項まで取ることによって, 拡張された Eilenberger 方程式が得られる [77]. 拡張された Eilenberger 方程式は Hall 項や電場項を含んでおり, Eilenberger 方程式では議論ができなかった Hall 効果やチャージ効果を準古典理論の枠組みで議論することを可能にしている [201–204]. しかし拡張された Eilenberger 方程式においては規格化条件が満たされないため, Eilenberger の自由エネルギー汎函数を使用することはできない^{*12}. 一方で 2.2 節で求

^{*12} 拡張された Eilenberger 方程式の解は規格化条件が満たされないため, 拡張された Eilenberger 方程式は Riccati 型の常微分方程式への変換ができない. そのため拡張された Eilenberger 方程式は数値計算の面でも難しくなっている.

めた自由エネルギーの式は導出において規格化条件を要求していないため, 拡張された Eilenberger 方程式にも拡張が可能であると考えられる. これは (2.55) あるいは (2.118) の, Eilenberger の汎関数 (B.28) に対する利点と考えられる.

参考文献

- [1] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [2] D. J. Scalapino, “The electron-phonon interaction and strong-coupling superconductors”, in *Superconductivity*, edited by R. D. Parks (Marcel Dekker, New York, 1969) Chap. 10, pp. 449–560.
- [3] J. P. Carbotte, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 1027 (1990).
- [4] F. Marsiglio and J. P. Carbotte, “Electron-phonon superconductivity”, in *Superconductivity: conventional and unconventional superconductors*, edited by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson (Springer, Berlin, Heidelberg, 2008), pp. 73–162.
- [5] P. W. Anderson and P. Morel, *Phys. Rev.* **123**, 1911 (1961).
- [6] P. Morel and P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **125**, 1263 (1962).
- [7] A. B. Migdal, *Sov. Phys. JETP* **7**, 996 (1958).
- [8] G. M. Eliashberg, *Sov. Phys. JETP* **11**, 696 (1960).
- [9] V. L. Berezinskii, *JETP Letters* **20**, 287 (1974).
- [10] Y. Tanaka, M. Sato, and N. Nagaosa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 011013 (2012).
- [11] H. Kusunose, Y. Fuseya, and K. Miyake, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 044711 (2011).
- [12] J. C. Wheatley, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 415 (1975).
- [13] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 331 (1975).
- [14] Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J. G. Bednorz, and F. Lichtenberg, *Nature* **372**, 532 (1994).
- [15] A. P. Mackenzie and Y. Maeno, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 657 (2003).
- [16] M. Sigrist, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **160**, 1 (2005).
- [17] Y. Maeno, S. Kittaka, T. Nomura, S. Yonezawa, and K. Ishida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 011009 (2012).
- [18] V. G. E., *The university in a helium droplet* (Oxford University Press, Oxford, 2008).
- [19] A. B. Vorontsov and J. A. Sauls, *Phys. Rev. B* **68**, 064508 (2003).
- [20] J. Kasai, Y. Okamoto, K. Nishioka, T. Takagi, and Y. Sasaki, *Visualizing textural domain wall in superfluid ^3He by magnetic resonance imaging*, Presented in International Conference on Quantum Fluids and Solids 2016 at Prague, Czech Republic, 2016.
- [21] D. A. Young, *Phase diagrams of the elements* (1975).
- [22] A. P. Mackenzie, R. K. W. Haselwimmer, A. W. Tyler, G. G. Lonzarich, Y. Mori, S. Nishizaki, and Y. Maeno, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 161 (1998).

- [23] K. Ishida, H. Mukuda, Y. Kitaoka, K. Asayama, Z. Q. Mao, Y. Mori, and Y. Maeno, *Nature* **396**, 658 (1998).
- [24] G. M. Luke, Y. Fudamoto, K. M. Kojima, M. I. Larkin, J. Merrin, B. Nachumi, Y. J. Uemura, Y. Maeno, Z. Q. Mao, Y. Mori, H. Nakamura, and M. Sgrist, *Nature* **394**, 558 (1998).
- [25] J. Xia, Y. Maeno, P. T. Beyersdorf, M. M. Fejer, and A. Kapitulnik, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 167002 (2006).
- [26] H. Murakawa, K. Ishida, K. Kitagawa, H. Ikeda, Z. Q. Mao, and Y. Maeno, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 024716 (2007).
- [27] J. R. Kirtley, C. Kallin, C. W. Hicks, E.-A. Kim, Y. Liu, K. A. Moler, Y. Maeno, and K. D. Nelson, *Phys. Rev. B* **76**, 014526 (2007).
- [28] C. Kallin and A. J. Berlinsky, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 164210 (2009).
- [29] C. Kallin, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 042501 (2012).
- [30] R. H. Salmelin, M. M. Salomaa, and V. P. Mineev, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 868 (1989).
- [31] R. H. Salmelin and M. M. Salomaa, *Phys. Rev. B* **41**, 4142 (1990).
- [32] H. Ikegami, Y. Tsutsumi, and K. Kono, *Science* **341**, 59 (2013).
- [33] H. Ikegami, Y. Tsutsumi, and K. Kono, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 044602 (2015).
- [34] M. Matsumoto and M. Sgrist, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 994 (1999).
- [35] M. Matsumoto and M. Sgrist, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3120 (1999).
- [36] N. D. E. Majorana, *Il Nuovo Cimento* **14**, 171 (1937).
- [37] N. B. Kopnin and M. M. Salomaa, *Phys. Rev. B* **44**, 9667 (1991).
- [38] G. E. Volovik, *JETP Lett.* **70**, 609 (1999).
- [39] N. Read and D. Green, *Phys. Rev. B* **61**, 10267 (2000).
- [40] V. Gurarie, L. Radzihovsky, and A. V. Andreev, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005).
- [41] J. Levinsen, N. R. Cooper, and V. Gurarie, *Phys. Rev. A* **78**, 063616 (2008).
- [42] C. Zhang, S. Tewari, R. M. Lutchyn, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 160401 (2008).
- [43] A. Bühler, N. Lang, C. V. Kraus, G. Möller, S. D. Huber, and H. P. Büchler, *Nat. Commun.* **5**, 4504 (2014).
- [44] B. Wang, Z. Zheng, H. Pu, X. Zou, and G. Guo, *Phys. Rev. A* **93** (2016).
- [45] A. K. Fedorov, S. I. Matveenko, V. I. Yudson, and G. V. Shlyapnikov, *Sci. Rep.* **6**, 27448 (2016).
- [46] H. Müller-Buschbaum and J. Wilkens, *Z. anorg. allg. Chem.* **591**, 161 (1990).
- [47] K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.* **44**, 1272 (2011).
- [48] D. Van der Marel, *Physica C* **165**, 35 (1990).
- [49] D. I. Khomskii and F. V. Kusmartsev, *Phys. Rev. B* **46**, 14245 (1992).
- [50] D. I. Khomskii and A. Freimuth, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1384 (1995).
- [51] L. J. Buchholtz and G. Zwicknagl, *Phys. Rev. B* **23**, 5788 (1981).
- [52] G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **25**, 4515 (1982).
- [53] Y. Tanaka and S. Kashiwaya, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3451 (1995).
- [54] S. Kashiwaya and Y. Tanaka, *Rep. Prog. Phys.* **63**, 1641 (2000).
- [55] 浅野泰寛, 田仲由喜夫, *物性研究* **95**, 113 (2010).

- [56] C. Caroli, P. G. De Gennes, and J. Matricon, *Phys. Lett.* **9**, 307 (1964).
- [57] 恒藤敏彦, *超伝導・超流動*, 岩波講座 現代の物理学 **17** (岩波書店, 東京, 1993).
- [58] 永長直人, *物性論における場の量子論* (岩波書店, 東京, 1995).
- [59] J. W. Negele and H. Orland, *Quantum many-particle systems*, Revised ed. (Westview Press, Boulder, Colorado, 1998).
- [60] A. Altland and B. D. Simons, *Condensed matter field theory*, 2nd. ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
- [61] N. E. Bickers and D. J. Scalapino, *Ann. Phys.* **193**, 206 (1989).
- [62] Y. V. Fominov, Y. Tanaka, Y. Asano, and M. Eschrig, *Phys. Rev. B* **91**, 144514 (2015).
- [63] 高橋康, *物性研究者のための場の量子論 II*, 新物理学シリーズ **17** (培風館, 東京, 1976).
- [64] D. Solenov, I. Martin, and D. Mozyrsky, *Phys. Rev. B* **79** (2009).
- [65] N. Kumar and K. P. Sinha, *Nuovo Cimento B (1965-1970)* **51**, 547 (1967).
- [66] R. L. Stratonovich, *Sov. Phys. Dokl.* **2**, 416 (1957).
- [67] J. Hubbard, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 77 (1959).
- [68] J. M. Luttinger and J. C. Ward, *Phys. Rev.* **118**, 1417 (1960).
- [69] G. M. Eliashberg, *Sov. Phys. JETP* **16**, 780 (1963).
- [70] J. Bardeen and M. Stephen, *Phys. Rev.* **136**, A1485 (1964).
- [71] J. W. Serene and D. Rainer, *Phys. Rep.* **101**, 221 (1983).
- [72] E. V. Thuneberg, J. Kurkijärvi, and D. Rainer, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1853 (1982).
- [73] E. V. Thuneberg, J. Kurkijärvi, and D. Rainer, *Phys. Rev. B* **29**, 3913 (1984).
- [74] G. Eilenberger, *Z. Phys.* **214**, 195 (1968).
- [75] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, *Sov. Phys. JETP* **28**, 1200 (1969).
- [76] E. Wigner, *Phys. Rev.* **40**, 749 (1932).
- [77] T. Kita, *Phys. Rev. B* **64**, 054503 (2001).
- [78] 北孝文, *統計力学から理解する超伝導* (サイエンス社, 東京, 2013).
- [79] 北孝文, *物性研究* **90**, 1 (2008).
- [80] N. B. Kopnin, *Theory of nonequilibrium superconductivity* (Oxford University Press, Oxford, 2001).
- [81] H. J. Vidberg and J. W. Serene, *J. Low Temp. Phys.* **29**, 179 (1977).
- [82] M. Jarrell and J. E. Gubernatis, *Phys. Rep.* **269**, 133 (1996).
- [83] F. Marsiglio, M. Schossmann, and J. P. Carbotte, *Phys. Rev. B* **37**, 4965 (1988).
- [84] 森口繁一, 宇田川銈久, 一松信, *岩波数学公式 II 級数・フーリエ解析* (岩波書店, 東京, 1987).
- [85] Y. Masaki and Y. Kato, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 094701 (2015).
- [86] Y. Masaki and Y. Kato, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 014705 (2016).
- [87] H. Fröhlich, *Phys. Rev.* **79**, 845 (1950).
- [88] H. Fröhlich, *Proc. R. Soc. Lond. A* **215**, 291 (1952).
- [89] T. Holstein, *Ann. Phys.* **8**, 325 (1959).
- [90] T. Holstein, *Ann. Phys.* **8**, 343 (1959).
- [91] A. S. Alexandrov and N. F. Mott, *Rep. Prog. Phys.* **57**, 1197 (1994).
- [92] S. Barišić, J. Labbé, and J. Friedel, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 919 (1970).

- [93] S. Barišić, *Phys. Rev. B* **5**, 932 (1972).
- [94] S. Barišić, *Phys. Rev. B* **5**, 941 (1972).
- [95] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698 (1979).
- [96] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Phys. Rev. B* **22**, 2099 (1980).
- [97] L. Pietronero, S. Strässler, H. R. Zeller, and M. J. Rice, *Phys. Rev. B* **22**, 904 (1980).
- [98] I. F. Foulkes and B. L. Gyorffy, *Phys. Rev. B* **15**, 1395 (1977).
- [99] R. A. Webb, J. B. Ketterson, W. P. Halperin, J. J. Vuillemin, and N. B. Sandesara, *J. Low Temp. Phys.* **32**, 659 (1978).
- [100] F. J. Pinski, P. B. Allen, and W. H. Butler, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 431 (1978).
- [101] M. Grodzicki and J. Appel, *Phys. Rev. B* **20**, 3659 (1979).
- [102] A. M. Gabovich, *Philos. Mag. B* **76**, 107 (1997).
- [103] J. L. Sarrao, L. A. Morales, J. D. Thompson, B. L. Scott, G. R. Stewart, F. Wastin, J. Rebizant, P. Boulet, E. Colineau, and G. H. Lander, *Nature* **420**, 297 (2002).
- [104] J. L. Sarrao, E. D. Bauer, J. N. Mitchell, P. H. Tobash, and J. D. Thompson, *Physica C* **514**, 184 (2015).
- [105] L. Fu and E. Berg, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 097001 (2010).
- [106] M. L. Kulić, *Phys. Rep.* **338**, 1 (2000).
- [107] I. Schnell, I. I. Mazin, and A. Y. Liu, *Phys. Rev. B* **74**, 184503 (2006).
- [108] P. M. R. Brydon, S. Das Sarma, H.-Y. Hui, and J. D. Sau, *Phys. Rev. B* **90**, 184512 (2014).
- [109] X.-L. Zhang and W.-M. Liu, *Sci. Rep.* **5**, 8964 (2015).
- [110] G. Varelogiannis, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 117005 (2002).
- [111] A. A. Abrikosov, *Physica C* **222**, 191 (1994).
- [112] A. A. Abrikosov, *Phys. Rev. B* **52**, R15738 (1995).
- [113] H. Shimahara and M. Kohmoto, *Europhys. Lett.* **57**, 247 (2002).
- [114] H. Shimahara and M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* **65**, 174502 (2002).
- [115] A. S. Alexandrov, *Phys. Rev. B* **77**, 094502 (2008).
- [116] A. S. Alexandrov, *J. Supercond. Nov. Magn.* **22**, 103 (2009).
- [117] Y. Nagato, K. Nagai, and J. Hara, *J. Low Temp. Phys.* **93**, 33 (1993).
- [118] N. Schopohl and K. Maki, *Phys. Rev. B* **52**, 490 (1995).
- [119] Y. Nagato, S. Higashitani, K. Yamada, and K. Nagai, *J. Low Temp. Phys.* **103**, 1 (1996).
- [120] N. Schopohl, arXiv:cond-mat/9804064 (1998).
- [121] M. Eschrig, *Phys. Rev. B* **61**, 9061 (2000).
- [122] Y. Nagai, K. Tanaka, and N. Hayashi, *Phys. Rev. B* **86**, 094526 (2012).
- [123] 永井佑紀, “鉄系超伝導体の超伝導対称性に関する理論的研究”, 博士論文 (東京大学, 2009).
- [124] N. Hayashi, Y. Higashi, N. Nakai, and H. Suematsu, *Physica C* **484**, 69 (2013).
- [125] 黒澤範行, “カイラル p 波超伝導体の渦芯における局所状態密度に対する不純物効果”, 修士論文 (東京大学, 2013).
- [126] M. Matsumoto and R. Heeb, *Phys. Rev. B* **65**, 014504 (2001).
- [127] R. Heeb and D. F. Agterberg, *Phys. Rev. B* **59**, 7076 (1999).
- [128] N. Hayashi, Y. Kato, and M. Sigrist, *J. Low Temp. Phys.* **139**, 79 (2005).

- [129] Y. Tanuma, N. Hayashi, Y. Tanaka, and A. A. Golubov, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 117003 (2009).
- [130] J. A. Sauls and M. Eschrig, *New J. Phys.* **11**, 075008 (2009).
- [131] N. Hayashi and Y. Kato, *Physica C* **388** – **389**, 513 (2003).
- [132] K. K. Tanaka, M. Ichioka, S. Onari, N. Nakai, and K. Machida, *Phys. Rev. B* **91**, 014509 (2015).
- [133] M. Matsumoto and M. Sigrist, *Physica B* **281** – **282**, 973 (2000).
- [134] M. Matsumoto and M. Sigrist, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 724 (1999).
- [135] 砂川重信, *散乱の量子論* (岩波書店, 東京, 1977).
- [136] L. Kramer and W. Pesch, *Z. Phys.* **269**, 59 (1974).
- [137] 永井佑紀, “超伝導量子渦糸系における局所電子状態密度に関する解析的理論”, 修士論文 (東京大学, 2006).
- [138] Y. Nagai, Y. Ueno, Y. Kato, and N. Hayashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 104701 (2006).
- [139] 加藤雄介, *固体物理* **49**, 67 (2014).
- [140] 加藤雄介, *固体物理* **49**, 359 (2014).
- [141] S. Kaneko, K. Matsuba, M. Hafiz, K. Yamasaki, E. Kakizaki, N. Nishida, H. Takeya, K. Hirata, T. Kawakami, T. Mizushima, and K. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 063701 (2012).
- [142] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- [143] M. Sato and S. Fujimoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 072001 (2016).
- [144] M. Sato and Y. Ando, arXiv:1608.03395 [cond-mat] (2016).
- [145] M. Stone, *Phys. Rev. B* **54**, 13222 (1996).
- [146] F. Gygi and M. Schlüter, *Phys. Rev. B* **43**, 7609 (1991).
- [147] S. G. Doettinger, R. P. Huebener, and S. Kittelberger, *Phys. Rev. B* **55**, 6044 (1997).
- [148] T. Hanaguri, K. Kitagawa, K. Matsubayashi, Y. Mazaki, Y. Uwatoko, and H. Takagi, *Phys. Rev. B* **85**, 214505 (2012).
- [149] P. W. Anderson, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **11**, 26 (1959).
- [150] N. Hayashi, N. Kurosawa, E. Arahata, Y. Kato, Y. Tanuma, Y. Tanaka, and A. A. Golubov, *Physica C* **494**, 131 (2013).
- [151] N. Kurosawa, N. Hayashi, E. Arahata, and Y. Kato, *J. Low Temp. Phys.* **175**, 365 (2013).
- [152] N. Kurosawa, N. Hayashi, and Y. Kato, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 114710 (2015).
- [153] Y. Kato, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 3378 (2000).
- [154] Y. Kato and N. Hayashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **70**, 3368 (2001).
- [155] Y. Kato and N. Hayashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71**, 1721 (2002).
- [156] N. Hayashi and Y. Kato, *J. Low Temp. Phys.* **130**, 193 (2003).
- [157] L. F. Shampine, *Math. Comp.* **46**, 135 (1986).
- [158] G. Guennebaud, B. Jacob, *et al.*, “Eigen v3”, (2010) <http://eigen.tuxfamily.org>.
- [159] D. Kahaner, C. Moler, and S. Nash, *Numerical methods and software* (Prentice-Hall, Inc., Upper Saddle River, NJ, USA, 1989) Chap. 5.
- [160] D. G. Anderson, *J. Assoc. Comput. Mach.* **12**, 547 (1965).
- [161] V. Eyert, *J. Comput. Phys.* **124**, 271 (1996).
- [162] 森口繁一, 宇田川銚久, 一松信, *岩波数学公式 III 特殊函数* (岩波書店, 東京, 1987).

- [163] Y. Nagai and N. Hayashi, *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008).
- [164] Y. Higashi, Y. Nagai, M. Machida, and N. Hayashi, *Physica C* **471**, 828 (2011).
- [165] Y. Higashi, Y. Nagai, M. Machida, and N. Hayashi, *Phys. Rev. B* **88** (2013).
- [166] T. A. Tokuyasu, D. W. Hess, and J. A. Sauls, *Phys. Rev. B* **41**, 8891 (1990).
- [167] H. F. Hess, R. B. Robinson, R. C. Dynes, J. M. Valles, and J. V. Waszczak, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 214 (1989).
- [168] I. Maggio-Aprile, C. Renner, A. Erb, E. Walker, and Ø. Fischer, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2754 (1995).
- [169] K. Matsuba, S. Yoshizawa, Y. Mochizuki, T. Mochiku, K. Hirata, and N. Nishida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 063704 (2007).
- [170] S. Yoshizawa, T. Koseki, K. Matsuba, T. Mochiku, K. Hirata, and N. Nishida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 083706 (2013).
- [171] Y. Yin, M. Zech, T. L. Williams, X. F. Wang, G. Wu, X. H. Chen, and J. E. Hoffman, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009).
- [172] Y. Martin and H. K. Wickramasinghe, *Appl. Phys. Lett.* **50**, 1455 (1987).
- [173] M. Ichioka, K. Machida, and J. A. Sauls, *J. Phys.: Conf. Ser.* **400**, 022031 (2012).
- [174] J. Garaud, E. Babaev, T. A. Bojesen, and A. Sudbø, *Phys. Rev. B* **94** (2016).
- [175] A. D. Hillier, J. Quintanilla, and R. Cywinski, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009).
- [176] A. D. Hillier, J. Quintanilla, B. Mazidian, J. F. Annett, and R. Cywinski, *Phys. Rev. Lett.* **109** (2012).
- [177] A. Bhattacharyya, D. T. Adroja, J. Quintanilla, A. D. Hillier, N. Kase, A. M. Strydom, and J. Akimitsu, *Phys. Rev. B* **91**, 060503 (2015).
- [178] J. V. Porto and J. M. Parpia, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4667 (1995).
- [179] D. T. Sprague, T. M. Haard, J. B. Kycia, M. R. Rand, Y. Lee, P. J. Hamot, and W. P. Halperin, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 661 (1995).
- [180] D. T. Sprague, T. M. Haard, J. B. Kycia, M. R. Rand, Y. Lee, P. J. Hamot, and W. P. Halperin, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4568 (1996).
- [181] W. P. Halperin, H. Choi, J. P. Davis, and J. Pollanen, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 111002 (2008).
- [182] E. V. Thuneberg, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 359 (1986).
- [183] E. V. Thuneberg, *Phys. Rev. B* **36**, 3583 (1987).
- [184] M. M. Salomaa and G. E. Volovik, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 363 (1986).
- [185] M. Fogelström and J. Kurkijärvi, *J. Low Temp. Phys.* **98**, 195 (1995).
- [186] Y. Tsutsumi, T. Kawakami, K. Shiozaki, M. Sato, and K. Machida, *Phys. Rev. B* **91**, 144504 (2015).
- [187] M. A. Silaev, E. V. Thuneberg, and M. Fogelström, *Phys. Rev. Lett.* **115** (2015).
- [188] Y. Kondo, J. S. Korhonen, M. Krusius, V. V. Dmitriev, Y. M. Mukharsky, E. B. Sonin, and G. E. Volovik, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 81 (1991).
- [189] Y. Tsutsumi, K. Machida, T. Ohmi, and M.-a. Ozaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 074717 (2012).
- [190] B. W. Hoogenboom, M. Kugler, B. Revaz, I. Maggio-Aprile, Ø. Fischer, and C. Renner, *Phys. Rev. B* **62**, 9179 (2000).

- [191] R. Hlubina, Phys. Rev. B **77**, 094503 (2008).
- [192] N. Menyhárd, Nuov Cim B **44**, 213 (1966).
- [193] P. G. De Gennes, *Superconductivity of metals and alloys* (Westview Press, Boulder, Colorado, 1999).
- [194] H. J. Groenewold, Physica **12**, 405 (1946).
- [195] J. E. Moyal, Math. Proc. Cambridge **45**, 99 (1949).
- [196] 麦倉雅敏, “PrOs₄Sb₁₂ に対する多バンド超伝導の理論”, 博士論文 (東北大学, 2007).
- [197] 永井佑紀, “Wigner 表示を使った Eilenberger 方程式の導出”, (2013) http://park.itc.u-tokyo.ac.jp/kato-yusuke-lab/nagai/note_130710_newEilen.pdf.
- [198] U. Eckern and A. Schmid, J. Low Temp. Phys. **45**, 137 (1981).
- [199] H. Kusunose, Phys. Rev. B **70**, 054509 (2004).
- [200] T. Kita, Phys. Rev. B **68**, 184503 (2003).
- [201] T. Kita, Phys. Rev. B **79**, 024521 (2009).
- [202] E. Arahata and Y. Kato, J. Low Temp. Phys. **175**, 346 (2014).
- [203] H. Ueki, W. Kohno, and T. Kita, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 064702 (2016).
- [204] W. Kohno, H. Ueki, and T. Kita, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 083705 (2016).

謝辞

まずは加藤雄介先生に感謝いたします。好き勝手無軌道無計画に研究を進めていたのを見守り支えてくださってありがとうございます。秘書の豊田久子さんには事務や手続き関係で大変にお世話になりました。林伸彦先生、市岡優典先生には学会や研究会でお会いしたときを中心に貴重なアドバイスをいただきました。高橋大介さん、國見昌哉さん、穴釜剛さんの各先輩方には研究室に入りたてのころからいろいろ教えていただきお世話になりました。永井佑紀さん、荒畑恵美子さん、星野晋太郎さん、堤康雅さんには学問のを中心にいろいろと相談にのっていただきました。特に堤康雅さんには博士論文の内容に関する貴重な意見を多くいただきました。ありがとうございます。修士のころからを思い返してみると、同期の藤井宏之さんや岡田達典さんの他にも福島研、吉岡研、清水研、国場研の方々とそれなりに楽しくやれてよかったなと思います。鐘俊傑 (Chung Chun-Kit) さんには共同研究をやろうと誘われたのに放置していて申し訳ありません。正木祐輔さん、宋秋登さん、越田真史さん、篠崎美沙子さん、久恒浩平さん、寒川崇生さん、須貝駿貴さん、福井毅勇さんに対しては反面教師の頼れないダメな先輩で申し訳なかったと思っています。特に篠崎美沙子さんには計算機の管理を押しつけてしまったみたいになってしまってすみません。また正木祐輔さんを中心に議論に付き合ってくくださったことはありがたく思っています。内田さやか先生には研究の楽しさを教えていただいたことを感謝します。東京大学教養学部基礎科学科の同期・先輩の皆様、また第58回物性若手夏の学校のスタッフの皆様には、学部から大学院時代にかけて楽しく愉快的思い出を作らせてもらったことを感謝します。

思えばいと疾しこの年月には大勢の方々に迷惑をかけ、後悔多く懲らしまつてばかりでした。なって始めて三十にして立つことの難しさを知るといった具合ですし、世界の全てに感謝できる陶冶された人格にはまだ長い道程が必要そうです。とはいえ人は急には変わりません。そう言い訳をしながら、今後も懲りずに自分ができることを自分なりに探していきたいと思っています。

最後に、これまで支えてくださった家族に感謝いたします。