# パウリ常磁性効果を持つd波超伝導体における 逐次渦糸格子相転移に関する理論的研究

## 岡山大学大学院自然科学研究科 数理物理科学専攻 鈴木 健太\*

## 目次

| 1    | 序論 534                  |
|------|-------------------------|
| 1.1  | 超伝導体における渦糸              |
| 1.2  | 渦糸格子と超伝導ギャップ・フェルミ速度の異方性 |
| 1.3  | 渦糸格子に関する実験              |
| 1.4  | パウリ常磁性効果                |
| 2    | 研究目的 538                |
| 3    | 定式化 539                 |
| 3.1  | パウリ常磁性効果を含む準古典理論        |
| 3.2  | フェルミ速度の異方性              |
| 3.3  | 渦糸格子の形                  |
| 4    | 結果とその物理量の考察 541         |
| 4.1  | 自由エネルギーの比較              |
| 4.2  | パウリ常磁性効果 µ による変化        |
| 4.3  | フェルミ速度の異方性による変化         |
| 4.4  | 低磁場領域                   |
| 5    | 総括と展望 553               |
| 6    | 謝辞 554                  |
| 付録 A | Eilenberger 方程式の導出 555  |
| A.1  | 平均場近似                   |
| A.2  | Gor'kov 方程式             |
| A.3  | 準古典 Eilenberger 方程式     |
| A.4  | 物理量など                   |

\*現在の所属と連絡先:岡山大学大学院自然科学研究科, e-mail:kenta@mp.okayama-u.ac.jp

## 1 序論

#### 1.1 超伝導体における渦糸

超伝導体へ磁場を印可すると、Meissner 効果により、ある磁場までは磁場は超伝導体内部へは侵入 しない.第1種超伝導体の場合、臨界磁場 *H*<sub>c</sub> まで磁場の侵入を許さず、*H*<sub>c</sub> で常伝導体へ転移した後 磁場が侵入する.一方、第2種超伝導体では、印可磁場が下部臨界磁場 *H*<sub>c1</sub> を超えると局所的に超伝 導状態を壊し、超伝導体内部へ磁場が侵入することができる.そして、上部臨界磁場 *H*<sub>c2</sub> において常 伝導状態へと転移する.

第2種超伝導体へ磁場が侵入する際,量子化された磁束量子  $\phi_0 = hc/2e$  (*h* は Planck 定数,*c* は 光速度,*e* は素電荷を表す.)を単位として侵入する.このとき,磁束渦糸の周りにはそれに応じた渦 糸電流が流れている.この構造を渦糸と呼び,渦糸内部を渦糸芯と呼ぶ.下部臨界磁場から上部臨界 磁場までの領域においては,第2種超伝導体の内部に多数の渦糸が侵入しており,超伝導体の種類や, 磁場領域に応じて規則的に配列した格子状態をとることがある.このように,格子状に並んだ渦糸を 渦糸格子と呼ぶ.一方で,超伝導物質や磁場領域に応じて不規則に配置したりし,渦糸固体ではなく, 渦糸液体になることもある.Abrikosov が Ginzburg-Landau 理論に基づき,渦糸格子を初めに予言 したことから,Abrikosov 格子とも呼ばれる [1].

ここで簡単のため, s 波超伝導体に磁束渦糸が1本侵入したとき, どのようなことが起きるか見る. 円筒対称な系において超伝導体の秩序変数 Δ は位相も含め次の形で書くことができる.

$$\Delta(r,\theta) = \Delta(r)e^{i\omega\theta} \tag{1.1}$$

ここで、r は動径方向の大きさ、 $\theta$  は方位角を表す.  $\omega$  は渦度を表し、波動関数の一価性の条件より  $\omega$ は整数である.  $\omega = 0$  のとき渦は存在せず、系は同じ位相を持っている. このとき、秩序変数 (エネル ギーギャップ) 以下の低励起構造は存在しない. しかし、 $\omega = 1$  のとき、渦中心周りに一周すると、系 の位相は  $2\pi$  変化する. このとき、渦中心では位相を決定できなくなるため、秩序変数の絶対値は渦 中心でゼロとなり、相関長  $\xi$  程度で回復する. また、Caroli-de Gennes-Matricon(CdGM) 状態と呼 ばれる低エネルギー束縛状態が渦芯に存在する [2,3].  $\omega \ge 2$  の渦糸については論文 [4] を参照された い. 以下、渦度は1として議論を進める. 図1は、渦度1の渦があるときの局所状態密度と秩序変数 (実線)を表している. この図より、等方的な s 波超伝導体では、低エネルギー励起が渦中心に局在し ていることが分かる. また、その広がりは等方的である.

しかし,渦糸格子を組むときも同様に等方的であるかは自明ではなく,これに関して Ichioka らにより,s波,d波の場合の計算が行われている [5]. 文献 [5]の図 16(a)にs波,同じく図 17(a)に $d_{x^2-y^2}$ 波超伝導体における渦糸が格子を組んだときの,ゼロエネルギー状態密度の空間分布が示されている. これによると,s波はほぼ等方的に広がるが, $d_{x^2-y^2}$ 波の場合,ギャップのノード方向ヘゼロエネル ギー状態密度が伸びている.この,ゼロエネルギー状態密度が伸びている方向は,渦糸格子の形や配向を考える上で重要な役割を果たすだけでなく,他の物理量にも大きな影響を与える.



図1 渦度1の渦の局所状態密度と秩序変数 ±|Δ|(実線). 横軸は渦中心からの距離を表す.



図2 中井氏によって得られた,横軸温度,縦軸磁場の渦糸格子の相図 [7].4回回転対称性のある異方的s波型の超伝導ギャップと,それを45°回転させた形をしたフェルミ速度の異方性を考慮している.図中の添字は,'v'がフェルミ速度の異方性からもたらされる配向を持った格子,'g'がギャップの異方性からもたらされる配向を持った格子,という意味である.

#### 1.2 渦糸格子と超伝導ギャップ・フェルミ速度の異方性

渦糸格子の配向や形を決める2つの要因を考える.一つは,超伝導ギャップの異方性であり,もう 一つはフェルミ速度の異方性である.Nakai らが,この2つの異なる異方性を競合させ様々な渦糸格 子の相図を得ている [6,7].2つの要因は基本的にはゼロエネルギー状態密度の分布に影響する.超 伝導ギャップの異方性では前節で見たように,そのノード方向,もしくは,ギャップの大きさが相対 的に小さい方向へゼロエネルギー状態が広がる.一方,フェルミ速度の異方性においては,状態数は フェルミ速度の逆数に比例するため,フェルミ速度が小さい方向にゼロエネルギー状態が広がろうと する.このとき渦糸は小さな励起エネルギーで準粒子をやり取りできる,ゼロエネルギー状態が伸び ている方向に並ぼうとする.よって、4回対称のあるd波超伝導体では四角格子が実現すると考えら れ、また、フェルミ速度が4回回転対称性を持つならば、それを反映した四角格子が実現する.

しかし、この2つの要因はその影響が強く表れる場所、即ち、四角格子になる磁場領域が異なる.中 井氏によって得られた図2がこのことを良く表している.これによると、渦糸格子に対し、フェルミ 速度の異方性は低磁場領域で支配的になり、超伝導ギャップの異方性は中高磁場領域で支配的になる.

#### 1.3 渦糸格子に関する実験

渦糸格子を観測する実験は、様々な超伝導物質で行われている.この節では、まず渦糸格子構造を 観測する実験手段をいくつか紹介した後に、渦糸格子を観測した実験を紹介する.

磁気装飾法 (Bitter 法)
 磁性体の粉末を超伝導表面に散布すると、磁場は常伝導領域に集中しているため、磁性体粉末はその部分に集まりモザイク状の模様をつくる.それを電子顕微鏡で観察する.

#### • 中性子小角散乱

中性子は磁気モーメントを持つため磁場と相互作用をする.このため渦糸格子状態では,固体 結晶のX線回折と同様の回折パターンが得られる.観測しているのは磁場の分布である.渦糸 格子の他に,渦糸格子による不均一磁場の分布を詳細に知ることができる.

ミューオンスピン回転・緩和法
 ボーオンスピン回転・緩和法

磁気モーメントを利用した実験. これは,スピン偏極させたミューオンを結晶に入射し,ミュー オンが結晶内で崩壊した際に放出される陽電子を計測する. ミューオンが結晶内に存在してい た時間と,陽電子のスピン方向,および偏極度を計測する. 内部磁場の分布を知ることができ る.

• 核磁気共鳴

共鳴磁場の測定により,渦糸による不均一磁場の分布が得られる.また,緩和時間の測定により,低励起構造を調べることもできる.

• STM 法

走査型トンネル顕微鏡 (STM) のプローブで試料の表面をスキャンしていく.常伝導状態と超 伝導状態それぞれの状態密度は異なるので,プローブから試料表面へのトンネル電流は,常伝 導層においては観測されるが,超伝導層では観測されないという事実を用いる.渦芯における 準粒子励起や状態密度に関する知見も同時に得られる.

• 比熱, 熱伝導度測定

印可磁場の強さを変化させて熱伝導度,および比熱を測定する.これにより,低励起構造を調 べることができる.

• Lorentz 顕微鏡法

電子線ホログラフィー技術を基礎にして開発された方法である [9]. 混合状態にある超伝導薄膜 の法線方向に対し斜め方向から平行な電子線を照射する. 渦芯を通過した電子は, Lorentz 力 により曲げられるために, この強度分布を十分遠方のところで観測すると, コントラストのつ いた斑点像が現れる. この方法には, 渦糸格子の動的振る舞いがリアルタイムで追跡可能であ るという長所もある.

次に、渦糸格子を観測した実験をいくつか挙げる、まず、単一元素からなる第2種超伝導体の Nb で ある. 単一元素からなる第2種超伝導体は少なく, Nb の渦糸格子構造はよく研究されてきた [10-12]. Nb は体心立方格子をとり、4 回対称を持つ c 軸方向へ磁場を印可した際に現れる渦糸格子を、近年、 小角中性子散乱法を用いて観測し、渦糸格子の温度磁場相図が得られた [13]. また, いくつかの種類 のボロカーバイト超伝導体においても渦糸格子の観測実験が行われている [14-19]. これらの超伝導 体は正方晶であり,異方的 s 波超伝導体であると考えられている.後の計算結果と比較する上で重要 なのが YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C の低温低磁場での振る舞いである、文献 [16] の図 5 において、ゼロ磁場から磁場を 増加させると 60 度から、50 度の方向へ角度が変化しているのが分かる. その後, 格子の配向を変化 させる一次転移を起こし、徐々に 90 度に近づいて行く。90 度に固定した後どのように変化するかは、 この物質では上部臨界磁場までのデータが無いため分からない.一方,TmNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>Cにおいては,四角 格子から徐々に開口角が閉じ、最後に、配向を変える一次転移を起こした後、三角格子へと変化する のが観測されている [14]. 低磁場での同様な振る舞いは,他にも VaSi でも観測されている (文献 [20] の図3参照) [20.21]. また,近年,d波超伝導体である CeCoIn5\*1の c 軸方向に磁場を印可した際に 現れる渦糸格子構造について、小角中性子散乱を用いて詳細な実験が行われた [23,24]. CeCoIn5 の超 伝導ギャップの対称性は d 波型であると言われているが, そのノード方向に関しては d<sub>x<sup>2</sup>-u<sup>2</sup></sub> 波型 [25] であるか, d<sub>xy</sub> 波型 [26] であるかは現在も問題となっている. この超伝導ギャップのノード方向の問 題は,超伝導発現機構の問題を考える上で非常に重要である. d<sub>x2-u2</sub> 波型であれば銅酸化物高温超伝 導体と同様に磁気揺らぎが Cooper 対形成の引力相互作用であると考えられる [27]. 一方, dxy 波型 である場合は、他の引力相互作用を考える必要がある(例えば、荷電揺らぎ [28] など).また、この 物質は ab 面内に磁場を掛けた場合においても, c 軸方向へ磁場を加えた場合においても, 低温高磁場 領域に Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov(FFLO) 状態 [29,30] が実現しているのではないかとされ, この点においても注目されている [31].

CeCoIn<sub>5</sub>の渦糸格子構造について,渦糸格子相図が得られている [23]. これによると,まず渦糸格 子は三角格子が現れる.磁場をさらに印可すると,配向を変える一次転移を起こした後,正方格子へ 固定される.そして,この逆の過程をたどり通常状態へと転移する.これは,低磁場領域はYNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C や,V<sub>3</sub>Siと同じであり,四角格子固定した後の領域は,TmNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>Cと同様の変化である.

#### 1.4 パウリ常磁性効果

一般的に,第2種超伝導体において,超伝導体に印可された磁場は2つの異なる方法で超伝導体を 破壊する\*<sup>2</sup>.一つは軌道対破壊,もう一つは常磁性対破壊である.軌道対破壊においては,印可磁場 と平行な磁束渦糸が超伝導体に侵入する.そして,渦糸周りを流れる超伝導流の運動エネルギー分だ け凝縮エネルギーを失う.軌道対破壊による上部臨界磁場は,簡単に次のように与えられる.

$$H_{c2}^{orb} = \frac{\phi_0}{2\pi\xi^2}$$
(1.2)

<sup>\*&</sup>lt;sup>1</sup> CeCoIn<sub>5</sub> の基本物性に関しては [22] や、[31] がある.

<sup>\*2</sup> この節の議論は [31] による

ここで、ξ はコヒーレンス長を表す.この磁場では,それぞれの渦糸が重なりはじめる.また,実験 的にも温度ゼロにおける軌道対破壊による上部臨界磁場は,温度-磁場相図の転移温度 *T<sub>c</sub>* における相 境界から導かれる [8].

$$H_{c2}^{orb}(T=0) = -0.7[K] \times \left. \frac{dH_{c2}}{dT} \right|_{T=T_c}$$
(1.3)

常磁性対破壊は1つの電子のエネルギー準位が Zeeman 分裂することに起因する. 磁場を正常状態に印可した際, Zeeman 効果により, アップスピンを持つ電子のフェルミ面と, ダウンスピンを持つ電子のフェルミ面とに分裂する<sup>\*3</sup>. 一方, 超伝導状態において, スピンシングレットの Cooper対は帯磁率がゼロであるためスピン分極はしない. もし, スピン分極を起こそうとするのならば, 対を破壊しなければならない. Pauli 常磁性効果による超伝導状態の破壊は, Pauli 常磁性エネルギー  $E_P = (1/2)\chi_n H^2$  が凝縮エネルギー  $E_c = (1/2)N(0)\Delta^2$  と一致したときに起こる. ここで,  $\chi_n = 2(\mu_B)^2 N(0)$ は正常状態でのスピン帯磁率であり,  $\mu_B$  は Bohr 磁子,  $\Delta$  は超伝導ギャップであり, N(0)はフェルミエネルギーでの状態密度である. パウリ常磁性効果による上部臨界磁場は,

$$H_{c2}^{Pauli} = \Delta / \sqrt{2}\mu_B \tag{1.4}$$

で見積もられる.

一般的に上部臨界磁場は軌道対破壊の効果と Pauli 常磁性対破壊の効果の両方で決定される. 超伝 導状態を減衰させる 2 つの効果の相対的な重要性は,温度ゼロでの *H*<sup>orb</sup><sub>c2</sub> と *H*<sup>Pauli</sup> の比で与えられ る, Maki パラメーター α<sub>Maki</sub> によって記述される.

$$\alpha_{Maki} = \sqrt{2} \frac{H_{c2}^{orb}}{H_{c2}^{Pauli}} \tag{1.5}$$

 $\alpha_{Maki}$ のオーダーは  $\Delta/\epsilon_F$  であるため、 $\alpha_{Maki}$  は通常1よりも遥かに小さい. ここで  $\epsilon_F$  はフェルミ エネルギーをあらわす. しかし、有効質量の大きい電子を持つ金属や、層状物質に磁場を層と平行に 掛けた場合などにおいては、 $\alpha_{Maki}$  は1よりも大きくなる.

## 2 研究目的

第1.3 節で述べたように、現在においても CeCoIn<sub>5</sub> の超伝導ギャップの対称性について議論がなさ れている.これに対し、渦糸構造、さらにその逐次構造相転移の仕方により、この問題を明らかにで きないだろうかというのが、本研究の目的の一つである.もう少し具体的には、CeCoIn<sub>5</sub> の渦糸格子 相図(文献 [23] の図 2)、中磁場にある正方格子が、超伝導ギャップを反映したものなのか、それと も、フェルミ速度の異方性を反映したものなのかを明らかにしたい.超伝導ギャップが起源であるの なら、最近接の渦糸は [110] 方向にあるため、このとき超伝導ギャップは、この方向にノードがある、  $d_{x^2-y^2}$  である.一方、フェルミ速度の異方性があれば Nakai らの計算より [6]、フェルミ速度の異方 性が起源となる正方格子がより低磁場に現れるはずである.このとき、超伝導ギャップを反映した正 方格子は、それが実現する前にパウリ常磁性効果により超伝導が破壊され、観測されていないと考え ることができる.

<sup>\*&</sup>lt;sup>3</sup> こうして, 常磁性モーメントが出現する.

また,正方格子から再び三角格子へ戻る過程については,HiasaとIkedaにより,パウリ常磁性効 果を考慮した GL 理論により説明されている [33]. これに関しては,GL 理論は H<sub>c2</sub> 線付近において 正しい理論であるため,低温低磁場領域の妥当性については議論の余地がある.よって,微視的理論 に基づいた計算により明らかにすることは意義がある.今回の研究で用いる準古典 Eilenberger 理論 は第3節で見るように,微視的理論に基づいており,また,定量的な結果を得られるという点で非常 に強力な手段である.また,Nakai らの計算がパウリ効果によりどのような変化を受けるのかも興味 があり,明らかにしたい.また,YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C や V<sub>3</sub>Si,さらに,CeCoIn<sub>5</sub>の低磁場領域での渦糸構造相 転移が共通しているのも非常に興味深く,同じ原因でこれらが実現しているのならば,CeCoIn<sub>5</sub>の低 磁場領域もフェルミ速度の異方性が起源であると言え,d<sub>xy</sub>波型の超伝導ギャップの可能性を支持す る.よって,低磁場の構造相転移に関しても可能な限り明らかにしたい.

本論文の以下の部分は次のように構成される.まず,第3章において、本研究で用いた準古典理論 について簡単に述べる.準古典 Eilenberger 方程式の詳しい導出については付録 A で論じる.第4章 において得られた結果を考察する。パウリ効果を考慮した d 波超伝導体の渦糸格子の変形,さらに、 フェルミ速度の異方性を考慮した場合の渦糸格子変形を考察し比較することで, CeCoIn<sub>5</sub>の渦糸格子 の起源を論じる。

## 3 定式化

#### 3.1 パウリ常磁性効果を含む準古典理論

本研究において、ベクトルポテンシャルによる軌道対破壊に加え、ゼーマン分裂項 µ<sub>B</sub>B(**r**) による 常磁性対破壊による効果も考慮する.よって、スピンシングレット超伝導体におけるハミルトニアン は次のように与えられる.

$$\mathcal{H} - \mu_0 \mathcal{N} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int d^3 \mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) K_{\sigma}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) - \int d^3 \mathbf{r}_1 \int d^3 \mathbf{r}_2 \{ \Delta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) + \Delta^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}_1) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}_2) \}$$
(3.1)

ただし,

$$K_{\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\mathbf{\nabla}}{i} + \frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right)^2 + \sigma \mu_B B(\mathbf{r}) - \mu_0$$
(3.2)

であり、 $\phi_0$  は磁束量子、 $\sigma = \pm 1$  は電子のアップスピンとダウンスピンを表す. この節の以下において、長さ、温度、フェルミ速度、磁場、ベクトルポテンシャルはそれぞれ、 $R_0, T_c, \bar{v}_f, B_0, B_0R_0$ でスケールする. ただし、 $R_0 = \hbar \bar{v}_F / 2\pi k_B T_c, B_0 = \hbar c / 2 |e| R_0^2$ 、であり、 $\bar{v}_F^2 = \langle v_F \rangle_k^2$ は、フェルミ面上におけるフェルミ速度の平均を表す.また、 $\langle \cdots \rangle_k$ はフェルミ面上での平均を表す.エネルギー E、対ポテンシャル Δ、 松原振動数  $\omega_l$ は  $\pi k_B T_c$ でスケールされる.

準古典グリーン関数  $g(\omega_l + i\tilde{\mu}B, \mathbf{k}, \mathbf{r}), f(\omega_l + i\tilde{\mu}B, \mathbf{k}, \mathbf{r}), f^{\dagger}(\omega_l + i\tilde{\mu}B, \mathbf{k}, \mathbf{r}),$ を使うことにより Eilenberger 方程式は次のように与えられる.

$$\{\omega_l + i\tilde{\mu}B + \mathbf{v} \cdot (\mathbf{\nabla} + i\mathbf{A})\}f = \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{k})g, \qquad (3.3a)$$

$$\{\omega_l + i\tilde{\mu}B - \mathbf{v} \cdot (\boldsymbol{\nabla} - i\mathbf{A})\}f^{\dagger} = \Delta^*(\mathbf{r}, \mathbf{k})g, \qquad (3.3b)$$

$$\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla} g = \Delta^*(\mathbf{r}, \mathbf{k}, ) f - \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{k}) f^{\dagger}$$
(3.3c)

ただし,  $g = (1 - ff^{\dagger})^{1/2}$ ,  $\operatorname{Re} g > 0$ ,  $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{r})\phi(\mathbf{k})$  であり,  $\tilde{\mu} = \mu_B B_0 / \pi k_B T_c$ , である. 方程式 (3.3) において,  $\mathbf{r}$  は  $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$  であり, Cooper 対の質量重心系である. また, 対関 数  $\phi$  を s 波対では  $\phi(\mathbf{k}) = 1$  とし, d 波対では  $\phi(\mathbf{k}) = \phi_{xy}(\mathbf{k}) = 2\sqrt{2} k_a k_b / (k_a^2 + k_b^2)$ , もしくは,  $\phi(\mathbf{k}) = \phi_{x^2 - y^2}(\mathbf{k}) = \sqrt{2} (k_a^2 - k_b^2) / (k_a^2 + k_b^2)$  とする. ベクトルポテンシャルは symmetric ゲージに おいては,  $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} + \mathbf{a}$  で与えられる. ここで,  $\mathbf{B}$  は平均磁束密度である.  $\mathbf{a}$  は内部磁場に関係し た部分であり、内部磁場  $\mathbf{B}$  は,  $\mathbf{B} = \mathbf{B} + \nabla \times \mathbf{a}$  より得られる.

対ポテンシャルは次式により自己無撞着になるように決定する.

$$\Delta(\mathbf{r}) = g_0 N_0 T \sum_{0 \le \omega_l \le \omega_{cut}} \langle \phi^*(\mathbf{k})(f + f^{\dagger *}) \rangle_{\mathbf{k}}, \qquad (3.4)$$

ここで、 $(g_0 N_0)^{-1} = \ln T + 2T \sum_{0 \le \omega_l \le \omega_{cut}} \omega_l^{-1}$ であり. 切断振動数  $\omega_{cut}$  は  $\omega_{cut} = 20k_B T_c$  とした. また、ベクトルポテンシャルは常磁性モーメントと超伝導流を用い、式 (3.5) より自己無撞着に決定 する.

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{a}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_s(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{M}_{para}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{j}(\mathbf{r})$$
(3.5)

ただし,

$$\mathbf{j}_{s}(\mathbf{r}) = -\frac{2T}{\tilde{\kappa}^{2}} \sum_{0 \le \omega_{l}} \langle \mathbf{v}_{F} \operatorname{Im}\{g\} \rangle_{\mathbf{k}}$$
(3.6)

は超伝導流であり,

$$M_{para}(\mathbf{r}) = M_0 \left( \frac{B(\mathbf{r})}{\bar{B}} - \frac{2T}{\tilde{\mu}\bar{B}} \sum_{0 \le \omega_l} \langle \operatorname{Im}\{g\} \rangle_{\mathbf{k}} \right)$$
(3.7)

は渦糸格子中の常磁性モーメントである. ここで,通常相の常磁性モーメントは  $M_0 = (\tilde{\mu}/\tilde{\kappa})^2 \bar{B}$  であり,  $\tilde{\kappa} = B_0/\pi k_B T_c \sqrt{8\pi N_0}$ は GL パラメーターに対応する. また,  $N_0$  は通常状態におけるフェルミエネルギーを持つ状態密度を表す.

電子状態を計算するとき、式 (3.3) において、 $i\omega_l \rightarrow E + i\eta$  と置き換える. 局所状態密度は各スピン状態に対し、

$$N_{\sigma}(\mathbf{r}, E) = \langle \operatorname{Re}\{g(\omega_l + i\sigma\tilde{\mu}B, \mathbf{k}, \mathbf{r}) \mid_{\omega_l \to E + i\eta}\} \rangle_{\mathbf{k}}$$
(3.8)

で与えられる. 数値計算では  $\eta = 0.01$  とした.

#### 3.2 フェルミ速度の異方性

Nakai らに倣い,フェルミ速度の異方性は,正方晶のように4回回転対称性をもつ超伝導体の場合 を考慮し,次式のように定義した [6].

$$\frac{v_F(\theta)}{v_{F,0}} = \frac{1 - \beta \cos 4\theta}{\sqrt{1 - \beta^2}} \tag{3.9}$$

これは、次の規格化条件を満足する.

$$\int_{0}^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi v(\theta)} = 1 \tag{3.10}$$

図3に $\beta = 0.5$ のときのフェルミ速度の異方性を示してある.



図3 フェルミ速度の異方性 (B=0.5)



#### 3.3 渦糸格子の形

渦糸格子の形は,実験で観測されている形を考慮して,二等辺三角形を基本とする.渦糸格子の配向については,正方格子になったときに,最近接の渦糸がある方向が [100] 方向(図4左)と,それから45°回転させ、最近接の渦糸が [110] 方向にある(図4右),2つの配向を調べた.さらに,開口角の変化については,配向を固定したまま,即ち,二等辺三角形の底辺の方向を固定したまま変化させる.基本的に60°,75°,90°の3つの角度で比較を行っている.一部のパラメーターでは,55°から90°まで5°刻みで比較を行っているものもある.

また、表記の仕方として、正三角形、正方形についてはそれぞれ  $\triangle$ 、  $\Box$  と表し、開口角が 75° の菱 形は、  $\Diamond$ 75 と表す. 配向については、開口角を頂角とする二等辺三角形を考え、その底辺の方向を記 号の右下に記す.よって、 $d_{x^2-y^2}$ 型の超伝導ギャップより期待される正方格子は  $\Box_{100}$  と表し、配向 はそのままで、開口角が 80° の場合は、 $\Diamond$ 80<sub>100</sub> と表す.また、フェルミ速度の異方性 (1 –  $\beta \cos 4\theta$ ) より期待される正方格子は  $\Box_{110}$  と表す.

#### 4 結果とその物理量の考察

数値計算を行うにあたり、フェルミ面は CeCoIn<sub>5</sub> 等を想定し球形とした.また、超伝導ギャップは 二次元 d 波であり、ラインノードである.

これから示す結果において、温度は転移温度  $T_c$  でスケールしてある。磁場については  $H/H_{c2}^{orb}$  と

書いてあるものは,  $T/T_C = 0.1$  におけるパウリ効果が無い場合の上部臨界磁場,  $H/H_{c2}^{Pauli}(T/T_c)$ は, パウリ効果を含み, 各温度での上部臨界磁場でそれぞれスケールしてあることを示している. また, 超伝導ギャップは,  $d_{x^2-y^2}$  波型として渦糸格子の配向を決めている.

CeCoIn<sub>5</sub>のフェルミ面は擬2次元の円筒型であるといわれる.しかし、今回の計算では、フェル ミ面は 3 次元球とし、GL パラメーターは,  $\tilde{\kappa} = 130$  とした.これは, [23] で得られた渦糸構造因 子の振る舞いを,(量子臨界点や磁気揺らぎを考えない)パウリ常磁性効果のみでよく再現できると いう理由からである [42].また、この物質は非常にきれいな結晶が得られ,電子の平均自由行程は  $\approx 3000nm$  [31] であるため,不純物散乱は考えない.エネルギーの切断周波数は  $\omega_c = 20$  とした.

#### 4.1 自由エネルギーの比較

各温度 T,磁束密度 B において渦糸格子の形と配向を変化させ、秩序変数とベクトルポテンシャル が自己無撞着になるように準古典 Green 関数を決定する.その後、得られた準古典 Green 関数より 自由エネルギー F を計算し、それぞれの渦糸格子の形状で比較を行い,安定な渦糸格子の形を決定す る.典型的な例として,T/T<sub>c</sub>=0.2, $\tilde{\mu} = 0.5$ での自由エネルギーの比較を見る (図 5 左).この図より 渦糸格子の角度変化,配向の変化を明らかにする.しかし,計算時間の都合上,すべての磁場,角度 を比べることができないため、各磁場間を,同じ形状の渦糸格子の自由エネルギーを直線で結び補間 する.そして,図から渦糸格子の配向と角度変化を読む (図 5 右)

#### 4.2 パウリ常磁性効果 *µ* による変化

まず,最初はフェルミ速度の異方性は考えず,  $d_{x^2-y^2}$  波超伝導体において,パウリ常磁性効果が渦 糸格子相図に与える影響を見る.

パウリ常磁性効果を考慮しない d 波超伝導体の渦糸格子相図は中井氏の博士論文に掲載されている [7].よって,パウリ常磁性効果が無い場合 (µ=0) については,これを転載する (図 6).これによると,中高磁場領域では超伝導ギャップによる正方格子が安定となるが,低磁場低温領域においては, 正方格子とは配向の異なる三角格子が安定となっている.また,低磁場高温領域については非局所項 を考慮した GL 理論により正方格子と配向が同じ三角格子が安定であると示されている [35].

まず,  $\tilde{\mu} = 0.5$ の場合 (図 5),上部臨界磁場はパウリ効果が無いときに比べ半分ほどになっており, 温度 T/T<sub>e</sub>=0.2 において通常相への転移は 2 次転移である.渦糸格子の変形は低磁場では  $\Delta_{110}$  が実現し,配向を変える一次転移を起こした後,開口角を広げて行き  $\Box_{100}$  へ固定する.この過程は,パウリ効果が無いときと同じである.

これに対し、 $\tilde{\mu} = 1$ の場合  $\tilde{\mu} = 0.5$ に比べ高磁場で変化が起こる (図 7). 中磁場領域で  $\Box_{100}$ に 固定するまでの過程は同じであるが、上部臨界磁場付近で  $\Box_{100}$  が不安定となり、開口角が閉じる. そして、最後に配向を変える一次転移を起こし最終的に  $\Box_{110}$  に変形する.また、上部臨界磁場はパ ウリ効果が無いときの 3 分の 1 程度になり、通常状態への転移は T/T<sub>c</sub>=0.2 では一次転移であり、 T/T<sub>c</sub>=0.4 では 2 次転移である.

さらに  $\tilde{\mu} = 2$  の場合 (図 8). 上部臨界磁場は、パウリ効果がない場合に比べ 6 分の 1 程度となる. このとき中磁場領域において、もはや  $\Box_{100}$  に固定することなく、85° まで開いた後に、 $\tilde{\mu} = 1$  の場合 と同様に開口角は閉じ、上部臨界磁場付近において、配向を変える一次転移を起こし、 $\Box_{110}$  ヘロック



図 5 (左) 相対エネルギーの磁場依存性 (T/T<sub>c</sub>=0.2,  $\tilde{\mu} = 0.5$ ,  $\beta=0$ ). ■, ▲ はそれぞれ正方格 子,正三角格子を表し, ◆ o o は,開口角が oo 度の菱形格子を表す.また,下付きの添字は底辺 の方向を表している. ■<sub>100</sub> の自由エネルギーを基準とする.(右) 左図より得られた渦糸格子の開 口角の磁場変化.青線は底辺が [110] 方向を向いてい,赤線は底辺が [100] 方向を向いている.



図 6 中井氏によって得られた, d 波超伝導体の渦糸格子相図. 添字の g は, 超伝導ギャップから 期待される四角格子であることを表す [7].

した後に通常状態へ一次転移で壊れる.

 $\tilde{\mu} = 1$ ,  $\tilde{\mu} = 2$  については,  $T/T_c = 0.2$ , 0.4 で計算を行い相図を得た.  $\tilde{\mu} = 1$  では, 正方格子にロッ クされる領域を確保でき, CeCoIn<sub>5</sub> の実験で得られている相図を高磁場を除き再現できているように 見える. 一方,  $\tilde{\mu} = 2$  では,  $\Box_{100}$  に固定される領域が無い. これはパウリ効果が大きすぎるためであ ると考えられる.

また,  $\hat{\mu} = 1$ 以上においては、上部臨界磁場付近において  $\Box_{110}$  が安定となっている. これに伴い、 中磁場で安定であった、 $\Box_{100}$  が不安定となり、開口角が閉じている. 一方で、 $\hat{\mu} = 0.5$  においては、 高磁場で配向を変える一次転移は起きず、従って、上部臨界磁場まで、 $\Box_{100}$  が安定となっている. こ のことから、ある程度大きなパウリ効果により  $\Box_{110}$  が上部臨界磁場付近で安定となるため、中磁場 での  $\Box_{100}$  が不安定となり、開口角が閉じるのだと考えることができる.

ここで、高磁場において□110 が安定になる理由を考える. その前にまず比較のため、□100 が安定 となる中高磁場でのデータを考察する.考察する図は、□100,□110,△100,△110 の秩序変数 (図 10)、 ゼロエネルギー状態密度 (図 11)、磁化 (図 12) の分布である. 秩序変数,磁化の分布より渦糸の収ま り方、ゼロエネルギー状態密度の分布より、隣接する渦糸間の準粒子のやり取りを見ることができる.



図7  $\tilde{\mu} = 1$ , 温度 T/T<sub>c</sub>=0.2 における (左) 相対エネルギーの磁場依存性と (右) 開口角の変化.



図8  $\tilde{\mu} = 2$ ,温度 T/T<sub>c</sub>=0.2 における (左) 相対エネルギーの磁場依存性と (右) 開口角の変化.



図 9  $\tilde{\mu} = 1$ における渦糸格子の温度磁場相図(左図)と、 $\tilde{\mu} = 2$ における渦糸格子の温度磁場相図(右図). 図中の一番上の実線は $H_{c2}$ 線を表し、相図中の2本の実線は配向を変える一次転移を表す. 点線は正方格子に固定される領域を表す.



図 10  $\tilde{\mu}$ =1, H/H<sub>c2</sub>=0.18, T/T<sub>c</sub>=0.2 における単位格子あたりの秩序変数の分布. それぞれ, (a) $\Box_{100}$ , (b) $\Delta_{100}$ , (c) $\Box_{110}$ , (d) $\Delta_{110}$ の形を取った場合の分布を表す. 自由エネルギーは  $\Box_{100} \leq \Delta_{100} = \Delta_{110} \leq \Box_{110}$ , であり, この順に安定である.

まず,秩序変数の分布を考察する.図10において,一番安定である(a)□<sub>100</sub>において渦糸は,中心 付近では丸い形をしているが,渦心から離れると[100]方向よりも,[110]方向の方が早く回復してい るのが分かる.一番外側の等高線に着目すると,これは単位格子の境界と平行になっており,隣の渦 糸との折り合いもいいように見える.一方,一番不安定である(c)□<sub>110</sub>に関しても,右図中心では丸 い形をしているが,渦心から離れると[100]方向よりも,[110]方向の方が早く回復している.しかし, □<sub>100</sub>と異なり最近接の渦糸は[100]方向にあるため,一番外側の等高線は隣の格子とつながり星形を しており,角が突き合わさったようになっている.よって不安定になっているのではないかと考えら れる.

次に,ゼロエネルギー状態密度の分布について見る (図 11). これは,すべての図において,渦中心 からノード方向である [110] 方向に大きなピークが伸びているのが分かる.よって,ゼロエネルギー 状態密度の分布からも,最近接の渦糸が [110] 方向にある □100 が安定であると考えられる.

最後に,磁化の分布を見る (図 12).磁化の分布に関しても秩序変数と同様な考察をすることができる.磁化は渦中心に局在しており, [110] 方向に比べ, [100] 方向に広がっている.よって,隣の渦糸における磁化分布との折り合いを考えると,角が突き合う□<sub>110</sub> よりも,面で隣り合う□<sub>100</sub> の方が安定であると考えることができる.

次に,□<sub>110</sub> が安定となる上部臨界磁場直下での,秩序変数 (図 13), ゼロエネルギー状態密度 (図 14), 磁化 (図 15) の分布を示す. これらについても,先ほどと同様に考察をする.

まず,秩序変数の分布 (図 13) を見る.単位渦糸格子に対し、渦糸はかなり大きくなっている.等



図 11  $\tilde{\mu}$ =1, H/H<sub>c2</sub>=0.18, T/T<sub>c</sub>=0.2 における単位格子あたりのゼロエネルギー状態密度の分 布. それぞれ, (a) $\Box_{100}$ , (b) $\Delta_{100}$ , (c) $\Box_{110}$ , (d) $\Delta_{110}$ の形を取った場合の分布を表す.



図 12  $\tilde{\mu}$ =1, H/H<sub>c2</sub>=0.18, T/T<sub>c</sub>=0.2 における単位格子あたりの磁化の分布. それぞれ, (a) $\Box_{100}$ , (b) $\Delta_{100}$ , (c) $\Box_{110}$ , (d) $\Delta_{110}$ の形を取った場合の分布を表す.



図 13  $\tilde{\mu}$ =1, H/H<sub>c2</sub>=0.3, T/T<sub>c</sub>=0.2 における単位格子あたりの秩序変数の分布. それぞれ, (a)□<sub>100</sub>, (b)△<sub>100</sub>, (c)□<sub>110</sub>, (d)△<sub>110</sub> の形を取った場合の分布を表す. 自由エネルギーは□<sub>110</sub> ≤ △<sub>100</sub> ≤ △<sub>110</sub> ≤ □<sub>100</sub>, であり, この順に安定である.

高線より、中心付近では、 $H/H_{c2}^{orb}=0.18$ のときと同様に、丸い形をしている.そして、外に広がるに つれ異方的になる.しかし、 $H/H_{c2}^{orb}=0.18$ のときほどはっきりとはしていないが、大きさ 0.15 の等 高線を見ると、[110] 方向に比べ [100] 方向に対し、秩序変数が早く回復しているように見える. これ は、 $H/H_{c2}^{orb}=0.18$ のときとは逆であり、秩序変数の分布が 45°回転したようになっている.よって、 一番外側の等高線は、 $\Box_{100}$ では、隣の渦糸につながっているが、 $\Box_{110}$ では単位格子内に収まってい る. $H/H_{c2}^{orb}=0.18$ と同様に考えるのならば、 $\Box_{110}$ が  $\Box_{100}$ に比べ安定になると考えられる.

ゼロエネルギー状態密度 (図 14) は、パウリ効果によりその形が大きく変わっている. すなわち、ゼロ磁場においては、フェルミエネルギーよりもかなり低いエネルギーにあった状態の分布が Zeemanシフトによりフェルミエネルギーまで移動してきている. このとき、*H*/*H*<sup>orb</sup>=0.18 で見られたようなノード方向に伸びる足は見られず、どの格子の形においても隣の単位格子に向かい大きな状態が伸びている. よって、上部臨界磁場付近においては、ゼロエネルギー状態密度の分布より、安定な渦糸格子は決定することができない.

最後に,磁化の分布を見る (図 15). *H*/*H*<sup>cr<sup>b</sup></sup>=0.18 に比べ全体に磁化が分布している.また,大き さ 0.9 の等高線を見ると,四角格子はどちらも単位格子の形に合わせた形をしている.□<sub>100</sub> の方が, より正方形に近く□<sub>110</sub> と比べると,隣との折り合いが良いように見える.これに関しては,磁化によ るエネルギーを計算してあり,それからも,□<sub>100</sub> が安定であることが分かっている.しかし,全自由 エネルギーに占める割合は,凝縮エネルギーによるものが大きく,磁化分布による自由エネルギーは あまり効いていないようである.



図 14  $\tilde{\mu}$ =1, H/H<sub>c2</sub>=0.3, T/T<sub>c</sub>=0.2 における単位格子あたりのゼロエネルギー状態密度の分 布. それぞれ, (a) $\Box_{100}$ , (b) $\Delta_{100}$ , (c) $\Box_{110}$ , (d) $\Delta_{110}$  の形を取った場合の分布を表す.



図 15  $\tilde{\mu}$ =1, H/H<sub>c2</sub>=0.3, T/T<sub>c</sub>=0.2 における単位格子あたりの磁化の分布. それぞれ, (a)□<sub>100</sub>, (b) $\Delta_{100}$ , (c)□<sub>110</sub>, (d) $\Delta_{110}$ の形を取った場合の分布を表す.



図 16 µ=0.5, β=0.7, T/T<sub>c</sub>=0.2 における, (左) 相対エネルギーの磁場依存性と, (右) 開口角の磁場依存性.

#### 4.3 フェルミ速度の異方性による変化

次に、フェルミ速度に異方性を、式 (3.9)の様にして与える.  $\beta$ は正とし、これにより異方性を調節 する.  $\beta$ が大きいほど異方性が大きくなる. さらに、このフェルミ速度の異方性から期待される正方 格子は  $\Box_{110}$  であり、 $d_{x^2-y^2}$  波型の超伝導ギャップより期待される正方格子とは 45° 配向が異なる. よって、二つの配向を持つ正方格子間で競合が起きる.また、この正方格子の配向は、CeCoIn<sub>5</sub> で観 測されている正方格子の配向と異なる.しかし、これに関しては超伝導ギャップを  $d_{xy}$  波型と読み替 え、それに伴い、 $\beta$ の符号も負と読み替えればよい.

T/T<sub>c</sub>,  $\tilde{\mu} = 0.5, 1, 2$  において, β を β = 0.5, 0.7 と変化させた. ただし,  $\tilde{\mu} = 0.5$  に関しては β=0.7 のみである. CeCoIn<sub>5</sub> を想定した場合, もう少し小さな β の値が妥当であると思われるが, 低 磁場で正方格子を安定にさせることを考えると, ある程度大きな β が必要である. これに関しては, β の妥当な値を与える実験は現在は無い.

まず、 $\beta$ による影響を確認する意味も含め、 $\tilde{\mu} = 0.5$ 、 $\beta = 0.7$ の場合を見る (図 16). 低磁場にお いては Nakai らの計算 [6] と同様にフェルミ速度の異方性より期待される  $\Box_{110}$  が安定となっている. さらに、中磁場領域では、 $\Box_{110}$  が不安定となり、超伝導ギャップより期待される  $\Box_{100}$  が安定となる. さらに高磁場においては、 $\Box_{100}$  が不安定となり配向はそのままで、開口角が小さくなる. ここまでの 過程はパウリ効果が無い場合と同じであると考えられる. しかし、上部臨界磁場近傍になると、再び配 向を変え 90° に向かい開口角が開いていく.フェルミ速度の異方性が無い場合と異なり、T/T<sub>c</sub>=0.2 において超伝導状態から通常状態への転移は一次転移である.

また,最低磁場において三角格子が実現していない.これに関しては,非局所項を考慮した London 模型によりて低磁場に三角格子があり,配向を変え正方格子へ変形することが,Kogan らによって示 されている [36].よって,今回の計算においてもさらに低磁場には,配向の異なる三角格子があると 考えている.

次に, μ=1 において β を変化させる.まず,相対エネルギーの磁場依存性について概観を述べる. フェルミ速度の異方性を導入すると,当然ではあるが,フェルミ速度の異方性より期待される配向 [110] を持つ格子の自由エネルギーが下がり,全体として低エネルギー側へ動く.その効果は低磁場ほ ど大きく,中高磁場では小さくなる.それは,中磁場領域では超伝導ギャップから期待される配向を 持つ正方格子が安定になりだすことや,低磁場では縮退が解けている2つの正三角形の渦糸格子が中



図 17 μ=1, β=0.5, T/T<sub>c</sub>=0.2 における, (左) 相対エネルギーの磁場依存性と, (右) 開口角の磁場依存性.



図 18 μ=1, β=0.7, T/T<sub>c</sub>=0.2 における, (左) 相対エネルギーの磁場依存性と, (右) 開口角の磁場依存性.

高磁場領域では、フェルミ速度の異方性が無い場合と同じように縮退していることからも分かる.また、これはβの値にはよらない.

次に格子の変形について述べる.低磁場においては期待された通り,フェルミ速度の異方性を反映 した四角格子 □<sub>110</sub> が安定である.この正方格子が安定な領域もβが大きいほど広がっている.中磁 場領域において,□<sub>110</sub> は不安定となり,開口角が閉じてくる.この閉じる過程はβが小さい方が緩や かに閉じる傾向が見られる.β=0.5 では,さらに配向を変える一次転移が見られる.さらに上部臨界 磁場近傍の高磁場領域では,フェルミ速度の異方性を考えないときと同様に□<sub>110</sub> が安定となる.これ に関しては,先程述べたようにフェルミ速度の異方性は高磁場ではほとんど効いていないので,フェ ルミ速度の異方性が原因ではなく,パウリ効果によるものであると考えられる.また,どちらの場合 においても通常状態への転移は一次転移である.

次に、 $\tilde{\mu}=2$ とし $\beta$ を変化させる. $\beta$ の値は $\tilde{\mu}=1$ と同様に 0.5、0.7 である. $\beta=0.5$ のとき、 $\tilde{\mu}=1$ の場合と異なり中磁場領域で配向を変える一次転移が無い.これは、パウリ効果により超伝導ギャップから期待される四角格子が安定となる前に、超伝導状態が破壊されるためであると考えられる.また、上部臨界磁場付近においても、配向の異なる二つの正三角形は縮退が解けている.これも、フェルミ速度の異方性が影響を及ぼさなくなるほどの磁場領域に入る前に、大きなパウリ効果により超伝導状態が破壊されるためであると考えられる.その他については、 $\tilde{\mu}=1$ のときと比べパウリ効果による変化は見られない. $\tilde{\mu}=1$ のときと同様に、上部臨界磁場付近において口<sub>110</sub>が安定となり、通常状態へ一次転移で破壊される.



図 19 μ=2, β=0.5, T/T<sub>c</sub>=0.2 における, (左) 相対エネルギーの磁場依存性と, (右) 開口角の磁場依存性.



図 20  $\tilde{\mu}=2$ ,  $\beta=0.7$ , T/T<sub>c</sub>=0.2 における, (左) 相対エネルギーの磁場依存性と, (右) 開口角の磁場依存性.

これらの結果から、フェルミ速度の異方性により CeCoIn<sub>5</sub> の実験結果を再現しようとした際、どの ような  $\tilde{\mu}$  の値と、 $\beta$  の値を組み合わせれば良いか考察する.まず、 $\tilde{\mu}$  が小さい場合、 $\beta$  は大きく取る 必要がある.なぜなら、 $d_{x^2-y^2}$  波型の超伝導ギャップから中高磁場において  $\Box_{100}$  が安定になろうと するからである.よって、これに対抗するため大きな  $\beta$  が必要となる.しかし、フェルミ速度の異方 性の効果は高磁場領域では効かないため、あまり小さな  $\tilde{\mu}$  では実験は再現できないと考えられる.

一方で, μ が大きな場合,フェルミ速度の異方性 β は比較的小さい値をとっても,□<sub>110</sub> が安定となる程度の大きさならば実験結果を再現できそうである.しかし,上部臨界磁場付近においても□<sub>110</sub> が安定となり,高磁場で確認されている配向を変える一次転移や,三角格子で通常状態へ転移することは現在の状況では再現できない.これに関しては何か別の考えが必要であると考える.

#### 4.4 低磁場領域

この節では、フェルミ速度の異方性は考えず、d 波超伝導体の低磁場領域における渦糸格子構造相 転移について述べる.前節で見たように、パウリ効果は低磁場領域の渦糸格子構造相転移に与える影 響は小さい.よって、低磁場での振る舞いから CeCoIn<sub>5</sub> の実験で観測されている、正方格子が超伝導 ギャップから期待されるものであるかを議論することができる.まず、図 7 の低磁場に着目すると、 実験では配向を変える前の開口角は約 55°であるのに対し、計算結果は、65°から 60°へ変化するこ とを示している.この計算では、開口角が 55°の自由エネルギーも計算をしているが、安定になる領



図 21 低磁場における自由エネルギーの開口角依存性. 各磁場において [110] 方向の底辺を持つ 格子の開口角 60° における自由エネルギーを基準とした.

域は無かった.

これに関し、パウリ効果が無い場合の低磁場においてどのような角度変化が起こるのか開口角を 60° 近傍で詳しく調べた. 図 21 より、磁場を H/H<sup>orb</sup>=0.018 から 0.054 と増加させるにつれ、自由エネル ギーを最小にする開口角が 65° から 61° へと小さくなることが分かる. 現在はこれより大きな磁場で 計算を行っていないが、実験では 60° 以上の開口角を観測していないことから、低磁場における渦糸 格子変形は d 波型の超伝導ギャップが起源ではないと考えられる. 一方、現在のところ Eilenberger 方程式を用い、フェルミ速度の異方性のみを考慮した計算において、低磁場では三角格子が実現する ことを示せていない. よって、この渦糸格子変形がフェルミ速度の異方性が起源となるものであると も言い切ることができない. これに関して、現在、計算を進めている.

次に,実験で観測されている低磁場での渦糸格子の配向を変える一次転移について述べる.これに 関しては,d波型の超伝導ギャップを考慮した計算においては.再現することができている.一方, フェルミ速度の異方性を考慮した計算では現在のところ得られていない.しかし,Miranovićにより, 超伝導ギャップでもフェルミ速度の異方性でも,4回回転対称性をもつ異方性が小さくても存在すれ ば,下部臨界磁場直上では,その異方性から期待される正方格子と配向の異なる三角格子が実現する ことが,拡張 London 模型に基いた解析で示されている [39].よって,現在は Eilenberger 理論に基 づく数値計算で,低磁場で配向を変える一次転移は得られていないが,注意深く計算をすすめれば, これは必ず得られるはずである.

低磁場の渦糸格子構造相転移に関して,拡張 London 理論を用い,フェルミ速度の異方性による効 果 [40] と, d 波型の超伝導ギャップによる効果 [41] を考慮した計算が行われている.これによると, フェルミ速度の異方性が起源の渦糸格子構造相転移は下部臨界磁場直上では 60° であり,磁場が増加 するにつれ開口角が閉じる.一方,超伝導ギャップの異方性が起源の渦糸格子構造相転移は低磁場で は温度にもよるが,60°以上の開口角を取り,磁場が上昇するにつれ開口角は閉じる.この振る舞い は,現在の計算とも一致している.これらから,実験結果はフェルミ速度の異方性を反映しているよ うに見える.

## 5 総括と展望

d 波超伝導体の c 軸方向に磁場を印可した際に現れる逐次渦糸格子構造相転移について,パウリ常 磁性効果とフェルミ速度の異方性を考慮し,準古典 Eilenberger 理論に基づき評価を行った.特に, 重い電子系である CeCoIn<sub>5</sub> を想定し,この物質の超伝導ギャップ対称性を特定する情報を得ようと試 みた.これより得られた知見は以下の通りである.

d 波型の超伝導ギャップと大きなパウリ効果で、実験で得られている相図は配向も含め定性的には 得ることが可能である.しかし、下部臨界磁場直上での開口角の振る舞い、正方格子に固定される磁 場の大きさ、上部臨界磁場近傍で、中磁場での正方格子とは配向の異なる正方格子に変形してしまう ことなど、定量的には再現することができない.上部臨界磁場近傍で  $\Box_{110}$  が安定になることは、中磁 場において安定である  $\Box_{100}$  を不安定にし、開口角を閉じる過程と結びついている.この過程が現れ るのは、今回の計算では  $\tilde{\mu} = 1$  以上である.以上より、d 波型の超伝導ギャップと大きなパウリ効果 のみで、実験を完全に再現することは難しい.

CeCoIn<sub>5</sub> は c 軸方向へ磁場を印可した際, T=0 における上部臨界磁場直上に反強磁性相への量子 臨界点があるとされ,これが影響している可能性もある.しかし,現在の枠組みでは,この量子臨界 点を取り込むことはできていない.また,FFLO 状態が影響している可能性もあるが,これに関して は,FFLO 状態の領域は c 軸に磁場を印可した際は,数%であることが,微視的理論に基づく我々の 計算により示されている [38].よってFFLO 状態が,実験で得られている高磁場領域の配向を変える 一次転移や,その後の開口角が 55° 付近から 60° へ変化する広い領域へ影響しているとは考えにくい.

次にフェルミ速度の異方性を考慮した場合について述べる.今回,フェルミ速度の異方性は,これ により期待される正方格子が,超伝導ギャップにより期待される正方格子と配向が45°異なるように した.こうすることで,低磁場に正方格子が実現し,超伝導ギャップより期待される正方格子と競合 し開口角が小さくなることも再現できた.また,パウリ効果の大きさと,フェルミ速度の異方性を調 節することで,超伝導ギャップより期待される正方格子が実現する前に通常状態へ転移させ,実験の 相図が再現できる.しかし現在,準古典 Eilenberger 方程式を用いた計算では,低磁場における三角 格子と,配向を変える一次転移が得られていない.これに関しては,拡張 London 模型により示され ており,準古典 Eilenberger 方程式を用いた計算においても,実現できると考えている.一方,高磁 場での配向を変える一次転移はフェルミ速度の異方性を考慮した計算では実現できていない.これは, フェルミ速度の異方性を考慮しない場合と同じで,大きなパウリ効果により,□110 が高磁場で安定に なるためである.

また、パウリ効果の大きさを変えることで、低磁場領域での渦糸格子構造にはパウリ効果の影響が 小さいことも確認した.すなわち、d 波型の超伝導ギャップのみを考慮した場合、正方格子にロック される磁場の大きさが、パウリ効果にほとんどよらないことを示した.これにより、実験の渦糸格子 構造相転移の起源を考えるためには、低磁場に着目すれば良いということになる.d 波型の超伝導 ギャップのみの場合、低磁場では磁場の増加に伴い開口角が 65° から、61° へと変化することを示し、 56° 程度の開口角を観測している実験とは一致しないことを示した.この結果は、拡張 London 模型 で得られている結果と一致している [41].実験結果はむしろ、フェルミ速度の異方性を考慮した拡張 London 模型に近いように見える [40].フェルミ速度の異方性を考慮した場合について、現在のとこ ろ準古典 Eilenberger 方程式に基づく数値計算では得られていない.

以上の事実より、CeCoIn<sub>5</sub>の c 軸方向へ磁場を印可した際に得られる逐次渦糸格子構造相転移,特 に中磁場での正方格子はフェルミ速度の異方性を反映したものであると考える.しかし、フェルミ速 度の異方性を考慮した場合の低磁場において、準古典 Eilenberger 理論に基づく数値計算で三角格子 が得られておらず,その振る舞いも明らかにできていない.これに関して,現在用いている数値計算 のプログラムは、渦糸格子の単位格子の大きさを磁束密度によって決定しているため、低磁場では単 位格子に占める渦糸の領域が小さくなるという問題がある.このため、低磁場での計算は単位格子を 切る格子点の数を大きくしなければ、渦糸の効果をしっかり取り込むことができず、信頼できる結果 を得るためには長い計算時間を必要とする.これに対して、プログラムの並列化を行い、計算の効率 化を図ることが求められる.実験結果を説明するためにも低磁場領域での結果は重要であり、慎重な 議論が求められる.

また、今回の計算ではフェルミ速度の異方性は、これにより期待される正方格子が、超伝導ギャッ プにより期待される正方格子と配向が 45° 異なるようにした.これは、二つの配向の異なる正方格子 が競合し、フェルミ速度の異方性から期待される正方格子が閉じて行くことを期待したためである. しかし、大きなパウリ効果においても □<sub>100</sub> が不安定になる結果が得られており、二つの正方格子を 競合させる必要は必ずしも無いのかもしれない.超伝導ギャップとフェルミ速度の異方性の効果を競 合させない場合、実験で観測されている正方格子はフェルミ速度の異方性によるものとなり、低磁場 からの変化は計算結果と矛盾しない. 高磁場での変化は現在は分からない.

以上より, CeCoIn<sub>5</sub> の c 軸方向に磁場を印可した際に現れ, 渦糸格子構造の実験から, この物質の 超伝導ギャップが d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> 波型であると言うことはできないが, 完全に否定することもできない. 他の パラメーターを含め更に詳細な計算が必要である. また, この物質の ab 面内へ磁場を印可した際に現 れる渦糸格子から, 超伝導ギャップの対称性を議論する研究もあり [43], 様々な手段でこれについて 議論する必要があると考える.

## 6 謝辞

本研究を行うにあたり,研究の方向付け,周辺の研究情報など様々な助言をしていただいた,町田 ー成教授に心より感謝いたします.本研究を行うプログラムの基幹を提供して下さり,また,適切な 助言をし研究を助けていただいた市岡優典准教授にも感謝いたします.水島健助教には,高次量子化 渦の研究を行う際,プログラムを書く指導のほか,プログラムを提供していただき,また,研究生活 においてもアドバイスや計算機の管理をしていただき,研究を行いやすい環境を提供していただき感 謝いたします.また,研究室に所属する,Tapio Simula 氏,Jukka Huhtamaki 氏,先輩,後輩は研究 の合間の議論,私生活での相談などをしていただき,楽しく研究生活を行うことができ,感謝してい ます.最後に,これまでも,これからも学生を続けることに理解を示し,応援をしてくれる両親,家 族にこの場を借りて感謝を述べたいと思います.

## 付録 A Eilenberger 方程式の導出

#### A.1 平均場近似

この節では、まず Gor'kov 方程式を導出するための準備として、第二量子化されたハミルトニアン  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{t} + \mathcal{H}_{SC}$  に平均場近似を行う.  $\mathcal{H}_{0}, \mathcal{H}_{SC}$  は、それぞれ、一粒子ハミルトニアンと対相互作用に 関する項であり、次式で与えられる.

$$\mathcal{H}_{0} = \sum_{ji\alpha\beta} \psi_{j,\alpha_{1}}^{\dagger} K_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \psi_{i\alpha_{2}}$$
(A.1)
$$\sum_{ji\alpha\beta} \psi_{j,\alpha_{1}}^{\dagger} K_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \psi_{i\alpha_{2}}$$
(A.2)

$$= \sum_{ji\alpha\beta} \psi_{j,\alpha_1}^{i} \{ K_{0,ji}(\sigma_0)_{\alpha_1,\alpha_2} + K_{x,ji}(\sigma_x)_{\alpha_1,\alpha_2} + K_{y,ji}(\sigma_y)_{\alpha_1,\alpha_2} + K_{z,ji}(\sigma_z)_{\alpha_1,\alpha_2} \} \psi_{i,\alpha_2} \quad (A.2)$$

$$=\sum_{ji} \begin{pmatrix} \psi_{j\uparrow}^{\dagger} & \psi_{j\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{0,ji} + K_{z,ji} & K_{x,ji} - iK_{y,ji} \\ K_{x,ji} + iK_{y,ji} & K_{0,ji} - K_{z,ji} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{i\uparrow} \\ \psi_{i\downarrow} \end{pmatrix}$$
(A.3)

ただし、 $\sigma_0$ は2×2の単位行列、 $\sigma_{x,y,z}$ はパウリ行列を表す.また、

$$K_{0,ji} = -t_{j,i} - \mu_j \delta_{j,i}, \quad K_{x,ji} = -\gamma h_x \quad K_{y,ji} = -\gamma h_y \quad K_{z,ji} = -\gamma h_z,$$
 (A.4)

であり、 $t_j i$ は j サイトから i サイトへのホッピング項、 $\mu_i$  は化学ポテンシャル、 $\gamma h$  はゼーマンエネ ルギーである. 対相互作用に関する項は、

$$\mathcal{H}_{SC} = \sum_{\langle ji \rangle \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4} V_{j\alpha_1 \alpha_2, i\alpha_3 \alpha_4} \psi^{\dagger}_{j\alpha_1} \psi_{j\alpha_2} \psi^{\dagger}_{i\alpha_3} \psi_{i\alpha_4} \tag{A.5}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ji\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} V_{j\alpha_1\alpha_2,i\alpha_3\alpha_4} \psi^{\dagger}_{i\alpha_3} \psi^{\dagger}_{j\alpha_1} \psi_{j\alpha_2} \psi_{i\alpha_4} \qquad (i \neq j) \qquad (A.6)$$

である. ここで,式 (A.6) において  $\psi_j \psi_i$  の積を 〈平均 〉と (平均からのずれ )の形に変形し,平均からのずれは小さいとし,その積は無視する.

$$H_{SC} = \frac{1}{2} \sum_{ji\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} V_{j\alpha_1\alpha_2,i\alpha_3\alpha_4} \{ \langle \psi_{i\alpha_3}^{\dagger} \psi_{j\alpha_1}^{\dagger} \rangle + (\psi_{i\alpha_3}^{\dagger} \psi_{j\alpha_1}^{\dagger} - \langle \psi_{i\alpha_3}^{\dagger} \psi_{j\alpha_1}^{\dagger} \rangle) \} \\ \times \{ \langle \psi_{j\alpha_2} \psi_{i\alpha_4} \rangle + (\psi_{j\alpha_2} \psi_{i\alpha_2} - \langle \psi_{j\alpha_2} \psi_{i\alpha_4} \rangle) \}$$

$$\rightarrow \frac{1}{2} \sum_{ji\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} V_{j\alpha_1\alpha_2,i\alpha_3\alpha_4} \{ \langle \psi_{i\alpha_3}^{\dagger} \psi_{j\alpha_1}^{\dagger} \rangle + \langle \psi_{j\alpha_2} \psi_{j\alpha_2} - \langle \psi_{j\alpha_2} \psi_{j\alpha_4} \rangle \} \}$$

$$(A.7)$$

$$\frac{\overline{2}}{2} \sum_{ji\alpha_{1}\alpha_{2}\alpha_{3}\alpha_{4}} V_{j\alpha_{1}\alpha_{2},i\alpha_{3}\alpha_{4}} \{ \langle \psi_{i\alpha_{3}}^{\dagger} \psi_{j\alpha_{1}}^{\dagger} \rangle \psi_{j\alpha_{2}} \psi_{i\alpha_{4}} + \psi_{i\alpha_{3}}^{\dagger} \psi_{j\alpha_{1}}^{\dagger} \langle \psi_{j\alpha_{2}} \psi_{i\alpha_{4}} \rangle - \langle \psi_{i\alpha_{3}}^{\dagger} \psi_{j\alpha_{1}}^{\dagger} \rangle \langle \psi_{j\alpha_{2}} \psi_{i\alpha_{4}} \rangle \}$$
(A.8)

$$=\frac{1}{2}\sum_{ji\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} \{V_{j\alpha_1\alpha_2,i\alpha_3\alpha_4}\langle\psi^{\dagger}_{i\alpha_3}\psi^{\dagger}_{j\alpha_1}\rangle\psi_{j\alpha_2}\psi_{i\alpha_4} + V_{j\alpha_4\alpha_3,i\alpha_2\alpha_1}\psi^{\dagger}_{i\alpha_2}\psi^{\dagger}_{j\alpha_4}\langle\psi_{j\alpha_3}\psi_{i\alpha_1}\rangle - V_{j\alpha_1\alpha_2,i\alpha_3\alpha_4}\langle\psi^{\dagger}_{i\alpha_2}\psi^{\dagger}_{j\alpha_1}\rangle\langle\psi_{j\alpha_2}\psi_{i\alpha_4}\rangle\}$$
(A.9)

$$= \frac{1}{2} \sum_{ji\alpha_2\alpha_4} \{ \Delta^{\dagger}_{j\alpha_2,i\alpha_4} \psi_{j\alpha_2} \psi_{i\alpha_4} + \Delta_{j\alpha_2,i\alpha_4} \psi^{\dagger}_{j\alpha_2} \psi^{\dagger}_{i\alpha_4} \} - \frac{1}{2} \sum_{ji\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} V_{j\alpha_1\alpha_2,i\alpha_3\alpha_4} \langle \psi^{\dagger}_{i\alpha_3} \psi^{\dagger}_{j\alpha_1} \rangle \langle \psi_{j\alpha_2} \psi_{i\alpha_4} \rangle$$
(A.10)

式 (A.8) から,式 (A.9) では,式 (A.8) の第2項の「iとj」,「 $\alpha_1$ と $\alpha_4$ 」,「 $\alpha_2$ と $\alpha_3$ 」をそれぞれ入れ 替えた.また,式 (A.10) において,対ポテンシャルを,

$$\Delta_{j\alpha_{2},i\alpha_{4}} = \sum_{\alpha_{3}\alpha_{1}} V_{i\alpha_{4}\alpha_{3},j\alpha_{2}\alpha_{1}} \langle \psi_{i\alpha_{3}}\psi_{j\alpha_{1}} \rangle,$$
  

$$\Delta_{j\alpha_{2},i\alpha_{4}}^{\dagger} = \sum_{\alpha_{3}\alpha_{1}} V_{i\alpha_{4}\alpha_{3},j\alpha_{2}\alpha_{1}} \langle \psi_{i\alpha_{3}}^{\dagger}\psi_{j\alpha_{1}}^{\dagger} \rangle$$
(A.11)

とする.

ここで、対ポテンシャルを、スピンシングレット対の成分とスピントリプレット対の成分に分解 する.

$$\Delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} = \sum_{m=0,x,y,z} d_{mji} (i\sigma_m \sigma_y)_{\alpha_1 \alpha_2} \tag{A.12}$$

$$= d_{0ji}(i\sigma_0\sigma_y)_{\alpha_1\alpha_2} + d_{xji}(i\sigma_x\sigma_y)_{\alpha_1\alpha_2} + d_{yji}(i\sigma_y\sigma_y)_{\alpha_1\alpha_2} + d_{zji}(i\sigma_z\sigma_y)_{\alpha_1\alpha_2}$$
(A.13)

$$= \begin{pmatrix} (-d_x + id_y)_{ji} & (d_0 + d_z)_{ji} \\ (-d_0 + d_z)_{ji} & (d_x + id_y)_{ji} \end{pmatrix}_{\alpha_1 \alpha_2}$$
(A.14)

同様に相互作用 V も各成分に分解する.

$$V_{j\alpha_1,\alpha_2,i\alpha_3\alpha_4} = \sum_{m=0,x,y,z} g_{mji} (i\sigma_m \sigma_y)^{\dagger}_{\alpha_3\alpha_1} (i\sigma_m \sigma_y)_{\alpha_2\alpha_4}$$
(A.15)

$$= g_{0ji}(i\sigma_0\sigma_y)^{\dagger}_{\alpha_3\alpha_1}(i\sigma_0\sigma_y)_{\alpha_2\alpha_4} + g_{xji}(i\sigma_x\sigma_y)^{\dagger}_{\alpha_3\alpha_1}(i\sigma_x\sigma_y)_{\alpha_2\alpha_4} + g_{yji}(i\sigma_y\sigma_y)^{\dagger}_{\alpha_3\alpha_1}(i\sigma_y\sigma_y)_{\alpha_2\alpha_4} + g_{zji}(i\sigma_z\sigma_y)^{\dagger}_{\alpha_3\alpha_1}(i\sigma_z\sigma_y)_{\alpha_2\alpha_4}$$
(A.16)

$$= g_{0ji}(-i\sigma_y)_{\alpha_3\alpha_1}(i\sigma_y)_{\alpha_2\alpha_4} + g_{xji}(-\sigma_z)_{\alpha_3\alpha_1}(-\sigma_z)_{\alpha_2\alpha_4} + g_{yji}(-i\sigma_0)_{\alpha_3\alpha_1}(i\sigma_0)_{\alpha_2\alpha_4} + g_{zji}(\sigma_x)_{\alpha_3\alpha_1}(\sigma_x)_{\alpha_2\alpha_4}$$
(A.17)

$$= g_{0ji}(\sigma_y)_{\alpha_3\alpha_1}(\sigma_y)_{\alpha_2\alpha_4} + g_{xji}(\sigma_z)_{\alpha_3\alpha_1}(\sigma_z)_{\alpha_2\alpha_4} + g_{yji}(\sigma_0)_{\alpha_3\alpha_1}(\sigma_0)_{\alpha_2\alpha_4} + g_{zji}(\sigma_x)_{\alpha_3\alpha_1}(\sigma_x)_{\alpha_2\alpha_4}$$
(A.18)

$$\left(=\cdots=\sum_{m=0,x,y,z}g_{mji}(i\sigma_m\sigma_y)_{\alpha_1\alpha_2}(i\sigma_m\sigma_y)_{\alpha_3\alpha_4}^{\dagger}\right)$$
(A.19)

最後に式 (A.12) の最後の項は次のようにまとめることができる.

$$\sum_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} V_{j\alpha_1\alpha_2,i\alpha_3\alpha_4} \langle \psi_{i\alpha_3}^{\dagger}\psi_{j\alpha_1}^{\dagger} \rangle \langle \psi_{j\alpha_2}\psi_{i\alpha_4} \rangle \tag{A.20}$$

$$=\sum_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} \langle \psi_{i\alpha_3}^{\dagger}\psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\rangle \left\{\sum_{m=0,x,y,z} g_{mji}(i\sigma_m\sigma_y)_{\alpha_3\alpha_1}^{\dagger}(i\sigma_m\sigma_y)_{\alpha_2\alpha_4}\right\} \langle \psi_{j\alpha_2}\psi_{i\alpha_4}\rangle$$
(A.21)

$$= \sum_{m} \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4} \langle \psi_{i\alpha_3}^{\dagger} \psi_{j\alpha_1}^{\dagger} \rangle g_{mji} (i\sigma_m \sigma_y)_{\alpha_3 \alpha_1} (i\sigma_m \sigma_y)_{\alpha_2 \alpha_4}^{\dagger} \langle \psi_{j\alpha_2} \psi_{i\alpha_4} \rangle \tag{A.22}$$

$$=\sum_{m}\sum_{\alpha_{1}\alpha_{2}\alpha_{3}\alpha_{4}}\langle\psi_{i\alpha_{3}}^{\dagger}\psi_{j\alpha_{1}}^{\dagger}\rangle g_{mji}(i\sigma_{m}\sigma_{y})_{\alpha_{3}\alpha_{1}}\frac{1}{g_{mji}}g_{mji}(i\sigma_{m}\sigma_{y})_{\alpha_{2}\alpha_{4}}^{\dagger}\langle\psi_{j\alpha_{2}}\psi_{i\alpha_{4}}\rangle\tag{A.23}$$

$$=\sum_{m} d_{mji}^{\dagger} \frac{1}{g_{mji}} d_{mji} \qquad (\because (A.11), (A.12), (A.15)) \qquad (A.24)$$

$$=\sum_{m=0,x,y,z}\frac{|d_{mji}|^2}{g_{mji}}$$
(A.25)

よって, 平均場近似されたハミルトニアンは,

$$\mathcal{H} = \sum_{ji\alpha_1\alpha_2} \left\{ \psi_{j\alpha_1}^{\dagger} K_{j\alpha_1,i\alpha_2} \psi_{1\alpha_2} + \frac{1}{2} \Delta_{j\alpha_1,i\alpha_2}^{\dagger} \psi_{j\alpha_1} \psi_{i\alpha_2} + \frac{1}{2} \Delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} \psi_{j\alpha_1}^{\dagger} \psi_{i\alpha_2}^{\dagger} \right\} - \frac{1}{2} \sum_{m=0,x,y,z} \frac{\left| d_{mji} \right|^2}{g_{mji}},$$
(A.26)

となる.

## A.2 Gor'kov 方程式

この節では,前節で得られた平均場近似したハミルトニアンから,Gor'kov方程式を導出する. Gor'kov方程式は超伝導体の電子状態を Green 関数を用いて記述する.

温度 Green 関数は次のように与えられる.

$$G_{j\alpha_1,i\alpha_2}(\tau,\tau') = -\langle T_\tau[\psi_{j\alpha_1}(\tau)\psi_{i\alpha_2}^{\dagger}(\tau')]\rangle \tag{A.27}$$

$$F_{j\alpha_1,i\alpha_2}(\tau,\tau') = -\langle T_\tau[\psi_{j\alpha_1}(\tau)\psi_{i\alpha_2}(\tau')]\rangle$$
(A.28)

$$\overline{F}_{j\alpha_1,i\alpha_2}(\tau,\tau') = -\langle T_{\tau}[\psi^{\dagger}_{j\alpha_1}(\tau)\psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau')]\rangle$$
(A.29)

$$\overline{G}_{j\alpha_1,i\alpha_2}(\tau,\tau') = -\langle T_\tau[\psi_{j\alpha_1}^{\dagger}(\tau)\psi_{i\alpha_2}(\tau')]\rangle = \langle T_\tau[\psi_{i\alpha_2}(\tau')\psi_{j\alpha_1}^{\dagger}(\tau)]\rangle = -G_{i\alpha_2,j\alpha_1}(\tau',\tau) \quad (A.30)$$

ここで、 $\langle \cdots \rangle$ は熱力学平均を表す.また、 $T_{\tau}$ は時間順序積を表し $\tau$ が小さいもの、即ち過去から未来へ、右側から並べる.具体的には式 (A.51) 等を参照.次に温度 Green 関数の虚時間発展を考えたいので、まず、波動関数  $\psi$  の虚時間発展を考える. Hisenberg 表示において、これはハミルトニアンと波動関数の交換関係で与えられる.

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{l\beta} = [\mathcal{H}, \psi_{l\beta}]$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ K_{l\alpha} \quad i \in [\psi^{\dagger}, \psi_{l\alpha}, \psi_{l\beta}] \right\}$$
(A.31)

$$\sum_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \left\{ K_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}}[\psi_{j\alpha_{1}}\psi_{i\alpha_{2}},\psi_{l\beta}] + \frac{1}{2}\Delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}}[\psi_{j\alpha_{1}}\psi_{i\alpha_{2}},\psi_{l\beta}] + \frac{1}{2}\Delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}}[\psi_{j\alpha_{1}}^{\dagger}\psi_{i\alpha_{2}}^{\dagger},\psi_{l\beta}] \right\}$$
(A.32)

$$= -\sum_{i\alpha_2} K_{l\beta,i\alpha_2} \psi_{i\alpha_2} + \frac{1}{2} \sum_{j\alpha_1} \Delta_{j\alpha_1,l\beta} \psi^{\dagger}_{j\alpha_1} - \frac{1}{2} \sum_{i\alpha_2} \Delta_{l\beta,j\alpha_2} \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}$$
(A.33)

ここで、第二項目の添字  $j\alpha_1$  を  $i\alpha_2$  に書き換えると、

$$= -\sum_{i\alpha_2} K_{l\beta,i\alpha_2} \psi_{i\alpha_2} - \frac{1}{2} \sum_{i\alpha_2} \left( \Delta_{l\beta,j\alpha_2} - \Delta_{i\alpha_2,l\beta} \right) \psi_{i\alpha_2}^{\dagger}$$
(A.34)

$$= -\sum_{i\alpha_2} K_{l\beta,i\alpha_2} \psi_{i\alpha_2} - \sum_{i\alpha_2} \Delta_{l\beta,j\alpha_2} \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}$$
(A.35)

$$= -\sum_{i\alpha_2} \psi_{i\alpha_2} K_{l\beta,i\alpha_2} + \sum_{i\alpha_2} \psi^{\dagger}_{i\alpha_2} \Delta_{j\alpha_2,l\beta}$$
(A.36)

となる.式(A.32)から式(A.33)へ変形する際に、次の交換関係に関する関係を使った.

$$[AB,C] = ABC - CAB = ABC + ACB - ACB - CAB = A[B,C] + [A,C]B$$
(A.37)

$$= A\{B, C\} - \{A, C\}B$$
 (A.38)

これにより、 $\psi$ の交換関係は、

$$[\psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\psi_{i\alpha_2},\psi_{l\beta}] = \psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\{\psi_{i\alpha_2},\psi_{l\beta}\} - \{\psi_{j\alpha_1}^{\dagger},\psi_{l\beta}\}\psi_{i\alpha_2} = -\delta_{j\alpha_1,l\beta}\psi_{i\alpha_2}$$
(A.39)

$$[\psi_{j\alpha_1}\psi_{i\alpha_2},\psi_{l\beta}] = 0 \tag{A.40}$$

$$[\psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\psi_{i\alpha_2}^{\dagger},\psi_{l\beta}] = \psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\{\psi_{i\alpha_2}^{\dagger},\psi_{l\beta}\} - \{\psi_{j\alpha_1}^{\dagger},\psi_{l\beta}\}\psi_{i\alpha_2}^{\dagger} = \psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\delta_{i\alpha_2,l\beta} - \delta_{j\alpha_1,l\beta}\psi_{i\alpha_2}^{\dagger}$$
(A.41)

である.同様に、 $\psi_{l\beta}^{\dagger}$ の虚時間発展を考える.

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi^{\dagger}_{l\beta} = \left[ \mathcal{H}, \psi^{\dagger}_{l\beta} \right]$$

$$= \sum_{j\alpha_1, i\alpha_2} \left\{ K_{j\alpha_1, i\alpha_2} [\psi^{\dagger}_{j\alpha_1} \psi_{i\alpha_2}, \psi^{\dagger}_{l\beta}] + \frac{1}{2} \Delta_{i\alpha_1} \phi^{\dagger}_{i\alpha_2} [\psi^{\dagger}_{i\alpha_1} \psi_{i\alpha_2}, \psi^{\dagger}_{l\beta}] + \frac{1}{2} \Delta_{i\alpha_1} \phi^{\dagger}_{i\alpha_2} [\psi^{\dagger}_{i\alpha_2} \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}] \right\}$$
(A.42)
$$+ \frac{1}{2} \Delta^{\dagger}_{i\alpha_1} \phi_{i\alpha_2} [\psi^{\dagger}_{i\alpha_2} \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}] + \frac{1}{2} \Delta_{i\alpha_1} \phi_{i\alpha_2} [\psi^{\dagger}_{i\alpha_2} \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}] \left\{ K_{i\alpha_1, i\alpha_2} [\psi^{\dagger}_{i\alpha_2} \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}] + \frac{1}{2} \Delta_{i\alpha_2} \phi_{i\alpha_2} \phi^{\dagger}_{i\alpha_2}] \right\}$$
(A.42)

$$+\frac{1}{2}\Delta^{\dagger}_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}}[\psi_{j\alpha_{1}}\psi_{i\alpha_{2}},\psi^{\dagger}_{l\beta}] + \frac{1}{2}\Delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}}[\psi^{\dagger}_{j\alpha_{1}}\psi^{\dagger}_{i\alpha_{2}},\psi^{\dagger}_{l\beta}]\bigg\}$$
(A.43)

$$= -\sum_{i\alpha_2} K_{l\beta,i\alpha_2} \psi_{i\alpha_2}^{\dagger} + \frac{1}{2} \sum_{j\alpha_1} \Delta_{j\alpha_1,l\beta} \psi_{j\alpha_1} - \frac{1}{2} \sum_{i\alpha_2} \Delta_{l\beta,j\alpha_2} \psi_{i\alpha_2}$$
(A.44)

ここで、第二項目の添字  $j\alpha_1 \in i\alpha_2$  に書き換えると、

$$= -\sum_{i\alpha_2} K_{l\beta,i\alpha_2} \psi_{i\alpha_2} - \frac{1}{2} \sum_{i\alpha_2} \left( \Delta^{\dagger}_{l\beta,j\alpha_2} - \Delta^{\dagger}_{i\alpha_2,l\beta} \right) \psi_{i\alpha_2} \tag{A.45}$$

$$= -\sum_{i\alpha_2} K_{l\beta,i\alpha_2} \psi_{i\alpha_2} - \sum_{i\alpha_2} \Delta_{l\beta,j\alpha_2} \psi_{i\alpha_2}^{\dagger}$$
(A.46)

$$= -\sum_{i\alpha_2} \psi_{i\alpha_2}^{\dagger} K_{l\beta,i\alpha_2} + \sum_{i\alpha_2} \psi_{i\alpha_2} \Delta_{j\alpha_2,l\beta}^{\dagger}$$
(A.47)

となる. 式 (A.43) から式 (A.44) へ変形する際に, 式 (A.38) を使い, 次を導き使用した.

$$[\psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\psi_{i\alpha_2},\psi_{l\beta}^{\dagger}] = \psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\{\psi_{i\alpha_2},\psi_{l\beta}^{\dagger}\} - \{\psi_{j\alpha_1}^{\dagger},\psi_{l\beta}^{\dagger}\}\psi_{i\alpha_2} = \psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\delta_{i\alpha_2,l\beta}$$
(A.48)

$$[\psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\psi_{i\alpha_2},\psi_{l\beta}] = \psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\{\psi_{i\alpha_2}^{\dagger},\psi_{l\beta}\} - \{\psi_{j\alpha_1}^{\dagger},\psi_{l\beta}\}\psi_{i\alpha_2}^{\dagger} = \psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\delta_{i\alpha_2,l\beta} - \delta_{j\alpha_1,l\beta}\psi_{i\alpha_2}^{\dagger}$$
(A.49)

$$[\psi_{j\alpha_1}^{\dagger}\psi_{i\alpha_2}^{\dagger},\psi_{l\beta}] = 0 \tag{A.50}$$

次に温度 Green 関数 (A.27-A.30) の虚時間発展を考え, Gor'kov 方程式を導出する. 式 (A.27) は階段関数 θ を用い次のように書くことができる.

$$G_{j\alpha_1,i\alpha_2}(\tau,\tau') = -\langle T_{\tau}[\psi_{j\alpha_1}(\tau)\psi_{i\alpha_2}^{\dagger}(\tau')]\rangle$$
  
=  $-\langle \psi_{j\alpha_1}(\tau)\psi_{i\alpha_2}^{\dagger}(\tau')\rangle\theta(\tau-\tau') + \langle \psi_{i\alpha_2}^{\dagger}(\tau')\psi_{j\alpha_1}(\tau)\rangle\theta(\tau'-\tau)$  (A.51)

よって、これの虚時間 τ の発展は、

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} G_{j\alpha_1, i\alpha_2}(\tau, \tau') = -\langle \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{j\alpha_1}(\tau) \psi_{i\alpha_2}^{\dagger}(\tau') \rangle \theta(\tau - \tau') + \langle \psi_{i\alpha_2}^{\dagger}(\tau') \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{j\alpha_1}(\tau) \rangle \theta(\tau' - \tau) - \langle \psi_{j\alpha_1}(\tau) \psi_{i\alpha_2}^{\dagger}(\tau') \rangle \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \theta(\tau - \tau') + \langle \psi_{i\alpha_2}^{\dagger}(\tau') \psi_{j\alpha_1}(\tau) \rangle \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \theta(\tau' - \tau)$$
(A.52)

$$= -\langle T_{\tau} [\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{j\alpha_1}(\tau) \psi_{i\alpha_2}^{\dagger}(\tau')] \rangle - \hbar \langle \{\psi_{j\alpha_1}(\tau), \psi_{i\alpha_2}^{\dagger}(\tau')\} \delta(\tau - \tau')$$
(A.53)

-558 -

$$= \sum_{l\beta} K_{j\alpha_1,l\beta} \langle T_{\tau}[\psi_{l\beta}(\tau)\psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau')] \rangle + \sum_{l\beta} \Delta_{j\alpha_1,l\beta} \langle T_{\tau}[\psi^{\dagger}_{l\beta}(\tau)\psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau')] \rangle - \hbar \delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} \delta(\tau - \tau')$$
(A.54)  
$$= -\sum_{l\beta} K_{l\alpha_1,l\alpha_2} \delta(\tau - \tau') - \sum_{l\beta} \Delta_{l\alpha_1,l\beta} \langle \overline{T}_{\tau}[\psi^{\dagger}_{l\beta}(\tau)\psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau')] \rangle$$
(A.55)

$$= -\sum_{l\beta} K_{j\alpha_1,l\beta} G_{l\beta,i\alpha_2}(\tau,\tau') - \sum_{l\beta} \Delta_{j\alpha_1,l\beta} \overline{F}_{l\beta,i\alpha_2}(\tau,\tau') - \hbar \delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} \delta(\tau-\tau') \quad (A.55)$$

階段関数の微分がデルタ関数になること、また、その係数に注意する.  $G_{l\beta,i\alpha_2}(\tau,\tau')$ についてまとめ、 整理をすると次式を得る.

$$\sum_{l\beta} \left\{ \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \delta_{j\alpha_1, l\beta} - K_{j\alpha_1, l\beta} \right) G_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') - \Delta_{j\alpha_1, l\beta} \overline{F}_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') \right\} = \hbar \delta_{j\alpha_1, i\alpha_2} \delta(\tau - \tau')$$
(A.56)

次に,  $G(\tau, \tau')$ の虚時間  $\tau'$ による発展を考える. これは  $\tau$  で偏微分を取るときとほぼ同じである が,  $G(\tau, \tau')$  でまとめる際に注意が必要であり,特別な書き方をする. よって,それを確認する意味 でもこの式変形を追う.

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} G_{j\alpha_1, i\alpha_2}(\tau, \tau') = -\langle \psi_{j\alpha_1}(\tau) \hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau') \rangle \theta(\tau - \tau') + \langle \hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau') \psi_{j\alpha_1}(\tau) \rangle \theta(\tau' - \tau) - \langle \psi_{j\alpha_1}(\tau) \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau') \rangle \hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} \theta(\tau - \tau') + \langle \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau') \psi_{j\alpha_1}(\tau) \rangle \hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} \theta(\tau' - \tau)$$
(A.57)

$$= -\langle T_{\tau}[\psi_{j\alpha_{1}}(\tau)\hbar\frac{\partial}{\partial\tau'}\psi_{i\alpha_{2}}^{\dagger}(\tau')]\rangle + \hbar\langle\{\psi_{j\alpha_{1}}(\tau),\psi_{i\alpha_{2}}^{\dagger}(\tau')\}\delta(\tau-\tau')$$
(A.58)  
$$= -\sum_{i} \langle T_{i}[\psi_{i},-(\tau)\psi_{i}^{\dagger}(\tau')]\rangle K_{i\alpha_{2}} = -\sum_{i} \langle T_{i}[\psi_{i},-(\tau)\psi_{i}^{\dagger}(\tau')]\rangle \Delta^{\dagger}$$

$$= -\sum_{l\beta} \langle I_{\tau}[\psi_{j\alpha_{1}}(\tau)\psi_{l\beta}(\tau)] \rangle K_{l\beta,i\alpha_{2}} - \sum_{l\beta} \langle I_{\tau}[\psi_{j\alpha_{1}}(\tau)\psi_{l\beta}(\tau)] \rangle \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}}$$
  
+  $\hbar \delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \delta(\tau - \tau')$  (A.59)  
$$= \sum_{l\beta} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') K_{l\beta,i\alpha_{2}} + \sum_{l\beta} F_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}}^{\dagger} + \hbar \delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \delta(\tau - \tau')$$

(A.60)

ここで、 $\tau$ のときと同様に  $G_{l\beta,i\alpha_2}(\tau,\tau')$  についてまとめ、整理をする. ただし、式 (A.55) とは異なり、Green 関数 G に対し左辺の偏微分演算子と右辺の K の位置が一致していない. よって偏微分を 便宜上、次のように書く.

$$\sum_{l\beta} \left\{ G_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \left( \hbar \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial \tau'} \delta_{l\beta,i\alpha_2} - K_{l\beta,i\alpha_2} \right) - F_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \Delta^{\dagger}_{l\beta,i\alpha_2} \right\} = \hbar \delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} \delta(\tau-\tau') \quad (A.61)$$

ただし, 偏微分  $\frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial \tau}$  は, 左側にある関数に対し偏微分を行うことを意味する.

同様に F の虚時間  $\tau$ ,  $\tau'$  の発展を見る.

$$F_{j\alpha_1,i\alpha_2}(\tau,\tau') = -\langle T_{\tau}[\psi_{j\alpha_1}(\tau)\psi_{i\alpha_2}(\tau')]\rangle$$
  
=  $-\langle \psi_{j\alpha_1}(\tau)\psi_{i\alpha_2}(\tau')\rangle\theta(\tau-\tau') + \langle \psi_{i\alpha_2}(\tau')\psi_{j\alpha_1}(\tau)\rangle\theta(\tau'-\tau)$  (A.62)

まず, τの偏微分を行う.

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} F_{j\alpha_1, i\alpha_2}(\tau, \tau') = -\langle T_\tau [\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi_{j\alpha_1}(\tau) \psi_{i\alpha_2}(\tau')] \rangle - \hbar \langle \{\psi_{j\alpha_1}(\tau), \psi_{i\alpha_2}(\tau')\} \delta(\tau - \tau')$$
(A.63)

$$=\sum_{l\beta} K_{j\alpha_1,l\beta} \langle T_{\tau}[\psi_{l\beta}(\tau)\psi_{i\alpha_2}(\tau')] \rangle + \sum_{l\beta} \Delta_{j\alpha_1,l\beta} \langle T_{\tau}[\psi_{l\beta}^{\dagger}(\tau)\psi_{i\alpha_2}(\tau')] \rangle \quad (A.64)$$

$$= -\sum_{l\beta} K_{j\alpha_1,l\beta} F_{l\beta,i\alpha_2}(\tau,\tau') - \sum_{l\beta} \Delta_{j\alpha_1,l\beta} \overline{G}_{l\beta,i\alpha_2}(\tau,\tau')$$
(A.65)

F についてまとめる.

$$\sum_{l\beta} \left\{ \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \delta_{j\alpha_1, l\beta} - K_{j\alpha_1, l\beta} \right) F_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') - \Delta_{j\alpha_1, l\beta} \overline{G}_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') \right\} = 0$$
(A.66)

つぎに τ' の偏微分を行う.

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} F_{j\alpha_1, i\alpha_2}(\tau, \tau') = -\langle T_\tau[\psi_{j\alpha_1}(\tau)\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} \psi_{i\alpha_2}(\tau')] \rangle + \hbar \langle \{\psi_{j\alpha_1}(\tau), \psi_{i\alpha_2}(\tau')\} \delta(\tau - \tau')$$
(A.67)

$$=\sum_{l\beta} \langle T_{\tau}[\psi_{j\alpha_{1}}(\tau)\psi_{l\beta}(\tau')]\rangle K_{i\alpha_{2},l\beta} - \sum_{l\beta} \langle T_{\tau}[\psi_{j\alpha_{1}}(\tau)\psi_{l\beta}^{\dagger}(\tau')]\rangle \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}} \quad (A.68)$$

$$= -\sum_{l\beta} F_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') K_{i\alpha_2,l\beta} + \sum_{l\beta} G_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \Delta_{l\beta,i\alpha_2}$$
(A.69)

ここで, F についてまとめる. 式 (A.61) と同様に τ' の偏微分が作用する方向に注意する.

$$\sum_{l\beta} \left\{ F_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \left( \hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} \delta_{l\beta,i\alpha_2} + K_{i\alpha_2,l\beta} \right) - G_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \Delta_{l\beta,i\alpha_2} \right\} = 0$$
(A.70)

さらに,  $\overline{G}$ ,  $\overline{F}$  についても  $\tau$ ,  $\tau'$  で偏微分を行う. しかし, これは G, F と同様であるため, 結果のみ 記す.

$$\overline{G}_{j\alpha_1,i\alpha_2}(\tau,\tau') = -\langle T_{\tau}[\psi^{\dagger}_{j\alpha_1}(\tau)\psi_{i\alpha_2}(\tau')]\rangle 
= -\langle \psi^{\dagger}_{j\alpha_1}(\tau)\psi_{i\alpha_2}(\tau')\rangle\theta(\tau-\tau') + \langle \psi_{i\alpha_2}(\tau')\psi^{\dagger}_{j\alpha_1}(\tau)\rangle\theta(\tau'-\tau)$$
(A.71)

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \overline{G}_{j\alpha_1, i\alpha_2}(\tau, \tau') = \sum_{l\beta} K_{l\beta, j\alpha_1} \overline{G}_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') - \sum_{l\beta} \Delta^{\dagger}_{j\alpha_1, l\beta} F_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') - \hbar \delta_{j\alpha_1, i\alpha_2} \delta(\tau - \tau')$$
(A.72)

$$\sum_{l\beta} \left\{ \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \delta_{j\alpha_1, l\beta} + K_{l\beta, j\alpha_1} \right) \overline{G}_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') - \Delta_{j\alpha_1, l\beta}^{\dagger} F_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') \right\} = \hbar \delta_{j\alpha_1, i\alpha_2} \delta(\tau - \tau')$$
(A.73)

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} \overline{G}_{j\alpha_1, i\alpha_2}(\tau, \tau') = -\sum_{l\beta} \overline{G}_{j\alpha_1, l\beta}(\tau, \tau') K_{i\alpha_2, l\beta} + \sum_{l\beta} \overline{F}_{j\alpha_1, l\beta}(\tau, \tau') \Delta_{l\beta, i\alpha_2} + \hbar \delta_{j\alpha_1, i\alpha_2} \delta(\tau - \tau')$$
(A.74)

$$\sum_{l\beta} \left\{ \overline{G}_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \left( \hbar \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial \tau'} \delta_{l\beta,i\alpha_2} + K_{i\alpha_2,l\beta} \right) - \overline{F}_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \Delta_{l\beta,i\alpha_2} \right\} = \hbar \delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} \delta(\tau-\tau')$$
(A.75)

$$\overline{F}_{j\alpha_1,i\alpha_2}(\tau,\tau') = -\langle T_{\tau}[\psi^{\dagger}_{j\alpha_1}(\tau)\psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau')]\rangle = -\langle \psi^{\dagger}_{j\alpha_1}(\tau)\psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau')\rangle\theta(\tau-\tau') + \langle \psi^{\dagger}_{i\alpha_2}(\tau')\psi_{j\alpha_1}(\tau)^{\dagger}\rangle\theta(\tau'-\tau)$$
(A.76)

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \overline{F}_{j\alpha_1, i\alpha_2}(\tau, \tau') = \sum_{l\beta} K_{l\beta, j\alpha_1} \overline{F}_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') - \sum_{l\beta} \Delta^{\dagger}_{j\alpha_1, l\beta} G_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau')$$
(A.77)

$$\sum_{l\beta} \left\{ \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \delta_{j\alpha_1, l\beta} + K_{l\beta, j\alpha_1} \right) \overline{F}_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') - \Delta^{\dagger}_{j\alpha_1, l\beta} G_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') \right\} = 0$$
(A.78)

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} \overline{F}_{j\alpha_1, i\alpha_2}(\tau, \tau') = \sum_{l\beta} \overline{F}_{j\alpha_1, l\beta}(\tau, \tau') K_{l\beta, i\alpha_2} + \sum_{l\beta} \overline{G}_{j\alpha_1, l\beta}(\tau, \tau') \Delta^{\dagger}_{l\beta, i\alpha_2} = 0$$
(A.79)

$$\sum_{l\beta} \left\{ \overline{F}_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \left( \hbar \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial \tau'} \delta_{l\beta,i\alpha_2} - K_{l\beta,i\alpha_2} \right) - \overline{G}_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \Delta^{\dagger}_{l\beta,i\alpha_2} \right\} = 0$$
(A.80)

こうして、すべての温度 Green 関数の虚時間発展を得ることができた. これらを、偏微分の変数  $(\tau, \tau')$  についてそれぞれまとめ、Gor'kov 方程式を得る.

τの偏微分を含む式 (A.56)(A.66)(A.73)(A.78) をまとめると,

$$\begin{cases} \sum_{l\beta} \left\{ \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \delta_{j\alpha_{1},l\beta} - K_{j\alpha_{1},l\beta} \right) G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') - \Delta_{j\alpha_{1},l\beta} \overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') \right\} = \hbar \delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \delta(\tau-\tau') \\ \sum_{l\beta} \left\{ \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \delta_{j\alpha_{1},l\beta} - K_{j\alpha_{1},l\beta} \right) F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') - \Delta_{j\alpha_{1},l\beta} \overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') \right\} = 0 \\ \left\{ \sum_{l\beta} \left\{ \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \delta_{j\alpha_{1},l\beta} + K_{l\beta,j\alpha_{1}} \right) \overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') - \Delta_{j\alpha_{1},l\beta}^{\dagger} F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') \right\} = \hbar \delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \delta(\tau-\tau') \\ \sum_{l\beta} \left\{ \left( -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \delta_{j\alpha_{1},l\beta} + K_{l\beta,j\alpha_{1}} \right) \overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') - \Delta_{j\alpha_{1},l\beta}^{\dagger} G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') \right\} = 0 \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \sum_{l\beta} \left\{ -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{j\alpha_1, l\beta} - \begin{pmatrix} K_{j\alpha_1, l\beta} & \Delta_{j\alpha_1, l\beta} \\ \Delta_{j\alpha_1, l\beta}^{\dagger} & -K_{l\beta, j\alpha_1} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} G_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') & F_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') \\ \overline{F}_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') & \overline{G}_{l\beta, i\alpha_2}(\tau, \tau') \end{pmatrix}$$
$$= \hbar \delta_{j\alpha_1, i\alpha_2} \delta(\tau - \tau') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(A.81)

となる.

また、τ'の偏微分を含む、式 (A.61)(A.70)(A.75)(A.80) をまとめると、

$$\begin{cases} \sum_{l\beta} \left\{ G_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \left( \hbar \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial \tau'} \delta_{l\beta,i\alpha_{2}} - K_{l\beta,i\alpha_{2}} \right) - F_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \Delta^{\dagger}_{l\beta,i\alpha_{2}} \right\} = \hbar \delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \delta(\tau-\tau') \\ \sum_{l\beta} \left\{ F_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \left( \hbar \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial \tau'} \delta_{l\beta,i\alpha_{2}} + K_{i\alpha_{2},l\beta} \right) - G_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}} \right\} = 0 \\ \sum_{l\beta} \left\{ \overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \left( \hbar \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial \tau'} \delta_{l\beta,i\alpha_{2}} + K_{i\alpha_{2},l\beta} \right) - \overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}} \right\} = \hbar \delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \delta(\tau-\tau') \\ \sum_{l\beta} \left\{ \overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \left( \hbar \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial \tau'} \delta_{l\beta,i\alpha_{2}} - K_{l\beta,i\alpha_{2}} \right) - \overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \Delta^{\dagger}_{l\beta,i\alpha_{2}} \right\} = 0 \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \sum_{l\beta} \begin{pmatrix} G_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') & F_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \\ \overline{F}_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') & \overline{G}_{j\alpha_1,l\beta}(\tau,\tau') \end{pmatrix} \left\{ \hbar \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial \tau'} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{l\beta,i\alpha_2} - \begin{pmatrix} K_{l\beta,i\alpha_2} & \Delta_{l\beta,i\alpha_2} \\ \Delta_{l\beta,i\alpha_2}^{\dagger} & -K_{i\alpha_2,l\beta} \end{pmatrix} \right\}$$
$$= \hbar \delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} \delta(\tau-\tau') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A.82)$$

また,式 (A.81)(A.81) においてフーリエ変換を行い,Gor'kov 方程式を松原振動数  $\omega_n$  を用い表現す

る  $(\tau \rightarrow \omega_n = (2n+1)\pi/\beta\hbar)^{*4}$ . Green 関数とデルタ関数は、次のようになる.

$$\begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') & F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') \\ \overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') & \overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\tau,\tau') \end{pmatrix} = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\omega_{n}} e^{-i\omega_{n}(\tau-\tau')} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\omega_{n}) & F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\omega_{n}) \\ \overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\omega_{n}) & \overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\omega_{n}) \end{pmatrix}$$
(A.83)

$$\delta(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n(\tau - \tau')}$$
(A.84)

これらを使うと、式 (A.81)(A.81) において  $\tau$ 、 $\tau'$  の微分をそれぞれ行うことができる.式 (A.81) は、

$$\sum_{l\beta} \left\{ i\hbar\omega_n \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{j\alpha_1,l\beta} - \begin{pmatrix} K_{j\alpha_1,l\beta} & \Delta_{j\alpha_1,l\beta}\\ \Delta_{j\alpha_1,l\beta}^{\dagger} & -K_{l\beta,j\alpha_1} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) & F_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) \\ \overline{F}_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) & \overline{G}_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) \end{pmatrix}$$

$$= \hbar\delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A.85)$$

$$\sum_{l\beta} \begin{pmatrix} i\hbar\omega_n\delta_{j\alpha_1,l\beta} - K_{j\alpha_1,l\beta} & -\Delta_{j\alpha_1,l\beta}\\ -\Delta_{j\alpha_1,l\beta}^{\dagger} & i\hbar\omega_n\delta_{j\alpha_1,l\beta} + K_{l\beta,j\alpha_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) & F_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) \\ \overline{F}_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) & \overline{G}_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) \end{pmatrix}$$

$$= \hbar\delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A.86)$$

となる. また, 式 (A.82) は,

$$\sum_{l\beta} \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \\ \overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') & \overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \end{pmatrix} \begin{cases} -i\omega_{n} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \delta_{l\beta,i\alpha_{2}} - \begin{pmatrix} K_{l\beta,i\alpha_{2}} & \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}} \\ \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}}^{\dagger} & -K_{i\alpha_{2},l\beta} \end{pmatrix} \end{cases}$$
$$= \hbar \delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(A.87)
$$-\sum_{l\beta} \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \\ \overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') & \overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\tau,\tau') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\hbar\omega_{n}\delta_{l\beta,i\alpha_{2}} + K_{l\beta,i\alpha_{2}} & \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}} \\ \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}}^{\dagger} & i\hbar\omega_{n}\delta_{l\beta,i\alpha_{2}} - K_{i\alpha_{2},l\beta} \end{pmatrix}$$
$$= \hbar \delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(A.88)

となる.

こうして, 松原振動数を用いた Gor'kov 方程式 (A.86)(A.88) を得た.

## A.3 準古典 Eilenberger 方程式

この節では,前節で導出した Gor'kov 方程式 (A.86)(A.88) を準古典近似することで Eilenberger 方程式を導出する. Eilenberger 方程式は本研究の基礎となる方程式である.

まず,次の関係を用い式 (A.86)(A.88) をユニタリー変換をする\*5.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(A.89)

<sup>\*4</sup> 時間の間隔のみに依存し, 'いつ'には依存しない

<sup>\*&</sup>lt;sup>5</sup> これにより, K の符号をそろえる.

これにより, 式 (A.86) は,

$$\sum_{l\beta} \begin{pmatrix} i\hbar\omega_n \delta_{j\alpha_1,l\beta} - K_{j\alpha_1,l\beta} & -\Delta_{j\alpha_1,l\beta} \\ -\Delta_{j\alpha_1,l\beta}^{\dagger} & i\hbar\omega_n \delta_{j\alpha_1,l\beta} + K_{l\beta,j\alpha_1} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) & F_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) \\ \overline{F}_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) & \overline{G}_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) \end{pmatrix} = \hbar\delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(A.90)  
$$\sum_{l\beta} \begin{pmatrix} i\hbar\omega_n \delta_{j\alpha_1,l\beta} - K_{j\alpha_1,l\beta} & \Delta_{j\alpha_1,l\beta} \\ -\Delta_{j\alpha_1,l\beta}^{\dagger} & -i\hbar\omega_n \delta_{j\alpha_1,l\beta} - K_{l\beta,j\alpha_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) & F_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) \\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) \end{pmatrix} = \hbar\delta_{j\alpha_1,i\alpha_2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(A.91)

### となる. また, 式 (A.88) は,

$$-\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \sum_{l\beta} \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) \\ \overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) & \overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} i\hbar\omega_{n}\delta_{l\beta,i\alpha_{2}} - K_{l\beta,i\alpha_{2}} & \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}} \\ \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}}^{\dagger} & i\hbar\omega_{n}\delta_{l\beta,i\alpha_{2}} - K_{i\alpha_{2},l\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \hbar\delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A.92)$$

$$\sum_{l\beta} \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) & -\overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i\hbar\omega_{n}\delta_{l\beta,i\alpha_{2}} - K_{l\beta,i\alpha_{2}} & \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}} \\ -\Delta_{l\beta,i\alpha_{2}}^{\dagger} & i\hbar\omega_{n}\delta_{l\beta,i\alpha_{2}} - K_{i\alpha_{2},l\beta} \end{pmatrix}$$

$$= \hbar\delta_{j\alpha_{1},i\alpha_{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A.93)$$

となる.

次に, Green 関数の変数  $r_i, r_j$  を重心座標 R と相対座標 r に書き換える.

$$\begin{cases} \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j}{2} \\ \mathbf{r} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i \end{cases}, \qquad \begin{cases} \mathbf{r}_j = \mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \\ \mathbf{r}_i = \mathbf{R} - \mathbf{r}_2 \end{cases}$$
(A.94)

重心座標 R は、相関長の長さスケールであり、相対座標 r は原子間隔程度の長さスケールである. さらに、r をフーリエ変換し、相対運動量 q で表すと次のようになる.

$$G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i) = G(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}) = \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{R}, \mathbf{q})$$
(A.95)

まず,式(A.91)のKを含む項だけ考える.

$$\sum_{l\beta} \begin{pmatrix} K_{j\alpha_1,l\beta} & 0\\ 0 & K_{l\beta,j\alpha_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) & F_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n)\\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_2}(\omega_n) \end{pmatrix}$$
(A.96)

$$\Longrightarrow \begin{pmatrix} K_{\alpha_1\beta}(\mathbf{r}_j, \frac{\mathbf{\nabla}_{\mathbf{r}_j}}{i}) & 0\\ 0 & K_{\beta\alpha_1}(\mathbf{r}_j, -\frac{\mathbf{\nabla}}{i}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_2}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, \omega_n) & F_{l\beta,i\alpha_2}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, \omega_n)\\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_2}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, \omega_n) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_2}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, \omega_n) \end{pmatrix}$$
(A.97)

$$= \begin{pmatrix} K_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, \frac{\nabla_{\mathbf{r}}}{i} + \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i}) & 0\\ 0 & K_{\beta\alpha_{1}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, -\frac{\nabla_{\mathbf{r}}}{i} - \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i}) \end{pmatrix} \times \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n})\\ -\overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix}$$
(A.98)

ここで、 $\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \approx \mathbf{R}$ と近似をする.さらに、相対座標 r の偏微分を行うと、

$$\approx \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} K_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p}+\frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i}) & 0\\ 0 & K_{\beta\alpha_{1}}(\mathbf{R},-\mathbf{p}-\frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i}) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{r}_{\mathbf{j}},\mathbf{r}_{\mathbf{i}},\omega_{n}) & F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{r}_{\mathbf{j}},\mathbf{r}_{\mathbf{i}},\omega_{n})\\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{r}_{\mathbf{j}},\mathbf{r}_{\mathbf{i}},\omega_{n}) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{r}_{\mathbf{j}},\mathbf{r}_{\mathbf{i}},\omega_{n}) \end{pmatrix}$$
(A.99)

となる. ただし,  $K_{lpha_1eta}(\mathbf{R},\mathbf{p}+rac{m{
abla}_{\mathbf{R}}}{2i})$ は,

$$K_{\alpha_1\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{p} + \frac{\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i}) = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i} + \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right)^2 - \mu + U_0 \right\} \delta_{\alpha_1\beta} + \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\alpha_1\beta}$$
(A.100)

$$\approx \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} p^2 + \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{p} \cdot \left( \frac{\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i} + \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right) - \mu + U_0 \right\} \delta_{\alpha_1 \beta} + \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\alpha_1 \beta} \quad (A.101)$$

$$= \left\{ \mathbf{v} \cdot \left( \frac{\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i} + \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right) + \tilde{U}_0 \right\} \delta_{\alpha_1 \beta} + \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\alpha_1 \beta}$$
(A.102)

であり、2 行目へ変形する際  $|\mathbf{p}| \gg \left| \frac{\mathbf{\nabla}}{2i} + \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right|$  とし、2 乗の項を無視した.また、

$$\tilde{U}_0 = \frac{\hbar^2}{2m} p^2 - \mu + U_0, \qquad \mathbf{v} = \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{p}$$
(A.103)

であり、U0 は外部ポテンシャルなどを表す. 同様に,

$$K_{\beta\alpha_{1}}(\mathbf{R}, -\mathbf{p} - \frac{\mathbf{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i}) \approx \left\{ \mathbf{v} \cdot \left( \frac{\mathbf{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i} - \frac{\pi}{\phi_{0}} \mathbf{A} \right) + \tilde{U}_{0} \right\} \delta_{\alpha_{1}\beta} + \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\beta\alpha_{1}}$$
(A.104)

である. K は Zeeman エネルギー等を含む項であり, S はパウリ行列を成分とする行列である. つぎに,式 (A.93)の K を含む項だけを考える.式 (A.96) と同様に,

$$\sum_{l\beta} \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) & -\overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{l\beta,i\alpha_{2}} & 0 \\ 0 & K_{i\alpha_{2},l\beta} \end{pmatrix}$$

$$\implies \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{r_{j}},\mathbf{r_{i}},\omega_{n}) & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{r_{j}},\mathbf{r_{i}},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{r_{j}},\mathbf{r_{i}},\omega_{n}) & -\overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{r_{j}},\mathbf{r_{i}},\omega_{n}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{l\beta,i\alpha_{2}} & 0 \\ 0 & K_{i\alpha_{2},l\beta} \end{pmatrix}$$

$$(A.105)$$

$$\implies \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{r_{j}},\mathbf{r_{i}},\omega_{n}) & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{r_{j}},\mathbf{r_{i}},\omega_{n}) \\ 0 & K_{\alpha_{2},\beta}(\mathbf{r_{i}},-\frac{\nabla_{\mathbf{r_{i}}}}{i}) \end{pmatrix}$$

$$(A.105)$$

$$=\sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} K_{\beta,\alpha_{2}}(\mathbf{R}+\frac{\mathbf{r}}{2},-\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^{-}}{i}+\frac{\nabla_{\mathbf{R}}^{-}}{2i}) & 0 \\ 0 & K_{\alpha_{2},\beta}(\mathbf{R}+\frac{\mathbf{r}}{2},\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^{-}}{i}+\frac{\nabla_{\mathbf{R}}^{-}}{2i}) \end{pmatrix} \qquad (A.107)$$

$$\approx \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} K_{\beta,\alpha_{2}}(\mathbf{R},-\mathbf{p}+\frac{\nabla_{\mathbf{R}}^{-}}{2i}) & 0 \\ 0 & K_{\alpha_{2},\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p}+\frac{\nabla_{\mathbf{R}}^{-}}{2i}) \end{pmatrix} \end{pmatrix} \qquad (A.108)$$

となる. ただし,

$$K_{\beta\alpha_2}(\mathbf{R}, -\mathbf{p} + \frac{\mathbf{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i}) = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left( -\mathbf{p} + \frac{\mathbf{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i} + \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right)^2 - \mu + U_0 \right\} \delta_{\beta\alpha_2} + \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\beta\alpha_2}$$
(A.109)

$$\approx \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} p^2 + \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{p} \left( -\frac{\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i} - \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right) - \mu + U_0 \right\} \delta_{\beta\alpha_2} + \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\beta\alpha_2} \quad (A.110)$$

$$= \left\{ \mathbf{v} \cdot \left( -\frac{\mathbf{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i} - \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right) + \tilde{U}_0 \right\} \delta_{\beta \alpha_2} + \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\beta, \alpha_2}, \tag{A.111}$$

$$K_{\alpha_{2}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p}-\frac{\mathbf{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i})\approx\left\{\mathbf{v}\cdot\left(-\frac{\mathbf{\nabla}_{\mathbf{R}}}{2i}+\frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A}\right)+\tilde{U}_{0}\right\}\delta_{\beta\alpha_{2}}+\mathbf{K}\cdot2\mathbf{S}_{\alpha_{2},\beta}$$
(A.112)

である.

次に △ を含む項を考える. 式 (A.91) において,

$$\sum_{l\beta} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{j\alpha_{1},l\beta} \\ -\Delta_{j\alpha_{1},l\beta}^{\dagger} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\omega_{n}) & F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\omega_{n}) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\omega_{n}) \end{pmatrix}$$
(A.113)  
$$= \sum_{l\beta} \sum_{\mathbf{p}\Delta,\mathbf{Q}\Delta} e^{i\mathbf{p}_{\Delta}\cdot(\mathbf{r}_{j}-\mathbf{r}_{l})+i\mathbf{Q}_{\Delta}\cdot\frac{\mathbf{r}_{j}+\mathbf{r}_{l}}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{Q}_{\Delta},\mathbf{p}_{\Delta}) \\ -\Delta_{\alpha_{1}\beta}^{\dagger}(\mathbf{Q}_{\Delta},\mathbf{p}_{\Delta}) & 0 \end{pmatrix}$$
$$\times \sum_{\mathbf{p},\mathbf{Q}} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_{l}-\mathbf{r}_{i})+i\mathbf{Q}\cdot\frac{\mathbf{r}_{l}+\mathbf{r}_{l}}{2}} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix}$$
$$= \sum_{\mathbf{p}\Delta,\mathbf{Q}\Delta,\mathbf{p},\mathbf{Q}} e^{i(\mathbf{p}_{\Delta}+\frac{\mathbf{Q}_{\Delta}}{2})\cdot\mathbf{r}_{j}-i(\mathbf{p}-\frac{\mathbf{Q}}{2})\cdot\mathbf{r}_{i}} \sum_{\beta} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{Q}_{\Delta},\mathbf{p}_{\Delta}) \\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix}$$
$$\times \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix} \sum_{l} e^{i(-\mathbf{p}_{\Delta}+\frac{\mathbf{Q}_{\Delta}}{2}+\mathbf{p}+\frac{\mathbf{Q}}{2})\cdot\mathbf{r}_{l}} \end{pmatrix}$$
(A.115)

ここで、任意の*l*に対して  $-\mathbf{p}_{\Delta} + \mathbf{Q}_{\Delta}/2 + \mathbf{p} + \mathbf{Q}/2 = 0$ である.よって、

$$=\sum_{\mathbf{Q}_{\Delta},\mathbf{p},\mathbf{Q}}e^{i(\mathbf{p}+\mathbf{Q}_{\Delta}+\frac{\mathbf{Q}}{2})\cdot\mathbf{r}_{j}-i(\mathbf{p}-\frac{\mathbf{Q}}{2})\cdot\mathbf{r}_{i}}\sum_{\beta}\begin{pmatrix}0&\Delta_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{Q}_{\Delta},\mathbf{p}+\frac{\mathbf{Q}+\mathbf{Q}_{\Delta}}{2})\\-\Delta_{\alpha_{1}\beta}^{\dagger}(\mathbf{Q}_{\Delta},\mathbf{p}+\frac{\mathbf{Q}+\mathbf{Q}_{\Delta}}{2})&0\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n})&F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n})\\-\overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n})&-\overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n})\end{pmatrix}$$
(A.116)

ここで、秩序変数  $\Delta$  の変数において、 $\mathbf{p} + (\mathbf{Q} + \mathbf{Q}_{\Delta}) \approx \mathbf{p}$  と近似する.これは、Cooper 対の重心運動量とその変化を無視することに相当する.

$$\approx \sum_{p} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_{j}-\mathbf{r}_{i})} \sum_{\beta} \sum_{\mathbf{Q}\Delta} e^{i\mathbf{Q}_{\Delta}\cdot\mathbf{r}_{j}} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{Q}_{\Delta},\mathbf{p}) \\ -\Delta_{\alpha_{1}\beta}^{\dagger}(\mathbf{Q}_{\Delta},\mathbf{p}) & 0 \end{pmatrix} \\ \times \sum_{\mathbf{Q}} e^{i\mathbf{Q}_{\Delta}\cdot\frac{\mathbf{r}_{j}+\mathbf{r}_{i}}{2}} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix}$$
(A.117)
$$= \sum_{\mathbf{Q}} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_{j}-\mathbf{r}_{i})} \sum_{\mathbf{Q}} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{r}_{j},\mathbf{p}) \\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{Q},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix}$$

$$=\sum_{p}e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_{j}-\mathbf{r}_{i})}\sum_{\beta}\begin{pmatrix}-\Delta_{\alpha_{1}\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}_{j},\mathbf{p})&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\Xi_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n})&-\Xi_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n})\\-\overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n})&-\overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n})\end{pmatrix}$$
(A.118)

$$\approx \sum_{p} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_{j}-\mathbf{r}_{i})} \sum_{\beta} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p}) \\ -\Delta_{\alpha_{1}\beta}^{\dagger}(\mathbf{R},\mathbf{p}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{l\beta,i\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix}$$
(A.119)

式 (A.93) の Δ を含む項も同様にして,

$$\sum_{l\beta} \begin{pmatrix} G_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) & F_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) & -\overline{G}_{j\alpha_{1},l\beta}(\omega_{n}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{l\beta,i\alpha_{2}} \\ -\Delta_{l\beta,i\alpha_{2}}^{\dagger} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\approx \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_{j}-\mathbf{r}_{i})} \sum_{\beta} \begin{pmatrix} G_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p}) \\ -\Delta_{\alpha_{1}\beta}^{\dagger}(\mathbf{R},\mathbf{p}) & 0 \end{pmatrix}$$
(A.120)

となる. 式 (A.104) と式 (A.119), 式 (A.112) と式 (A.120) を, それぞれまとめると,

$$(-\mathbf{v} \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i} - \tilde{U}_{0}) \begin{pmatrix} G_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) & F_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) \\ -\overline{F}_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) & -\overline{G}_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) \end{pmatrix}$$

$$+ \sum_{\beta} \begin{pmatrix} (i\hbar\omega_{n} - \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A})\delta_{\alpha_{1}\beta} - \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\alpha_{1},\beta} & \Delta_{\alpha_{1},\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{p}) \\ -\Delta_{\alpha_{1},\beta}^{\dagger}(\mathbf{R}, \mathbf{p}) & -(i\hbar\omega_{n} - \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A})\delta_{\alpha_{1}\beta} - \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\beta,\alpha_{1}} \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} G_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) & F_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) \\ -\overline{F}_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) & -\overline{G}_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) \end{pmatrix} = \hbar\delta_{\alpha_{1}\alpha_{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$(A.121)$$

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{v} \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i} - \tilde{U_{0}}\right) \begin{pmatrix} G_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) & F_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) \\ -\overline{F}_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) & -\overline{G}_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) \end{pmatrix} \\ &+ \sum_{\beta} \begin{pmatrix} G_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) & F_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) \\ -\overline{F}_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) & -\overline{G}_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{p}, \omega_{n}) \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} -(i\hbar\omega_{n} - \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A})\delta_{\beta\alpha_{2}} - \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\beta\alpha_{2}} & \Delta_{\beta\alpha_{2}}(\mathbf{R}, \mathbf{p}) \\ & -\Delta_{\beta\alpha_{2}}^{\dagger}(\mathbf{R}, \mathbf{p}) & (i\hbar\omega_{n} - \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A})\delta_{\beta\alpha_{2}} - \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\alpha_{2}\beta} \end{pmatrix} = \hbar\delta_{\alpha_{1}\alpha_{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$
(A.122)

ここで,式(A.121)から式(A.122)を引く.

$$-\mathbf{v} \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{R}}}{2i} \begin{pmatrix} G_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{\alpha_{1}\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix} \\ + \sum_{\beta} \begin{pmatrix} (i\hbar\omega_{n} - \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A})\delta_{\alpha_{1}\beta} - \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\alpha_{1},\beta} & \Delta_{\alpha_{1},\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p}) \\ -\Delta_{\alpha_{1},\beta}^{\dagger}(\mathbf{R},\mathbf{p}) & -(i\hbar\omega_{n} - \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A})\delta_{\alpha_{1}\beta} - \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\beta,\alpha_{1}} \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} G_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix} \\ -\sum_{\beta} \begin{pmatrix} G_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & F_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \\ -\overline{F}_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) & -\overline{G}_{\alpha_{1}\beta}(\mathbf{R},\mathbf{p},\omega_{n}) \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} -(i\hbar\omega_{n} - \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A})\delta_{\beta\alpha_{2}} - \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\beta\alpha_{2}} & \Delta_{\beta\alpha_{2}}(\mathbf{R},\mathbf{p}) \\ -\Delta_{\beta\alpha_{2}}^{\dagger}(\mathbf{R},\mathbf{p}) & (i\hbar\omega_{n} - \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A})\delta_{\beta\alpha_{2}} - \mathbf{K} \cdot 2\mathbf{S}_{\alpha_{2}\beta} \end{pmatrix} = 0 \end{pmatrix}$$
(A.123)

これにより、2回微分を含む  $\tilde{U}_0$  を消すことができた.

つぎに,準古典 Green 関数を変数  $\xi_k$  とともに次のように定義する.

$$\xi_{\mathbf{k}} = \frac{p^2}{2m} - \mu \tag{A.124}$$

$$\hat{g} = \hat{\tau}_3 \int d\xi_{\mathbf{k}} \hat{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \int d\xi_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} G & F \\ \overline{F} & \overline{G} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int d\xi_{\mathbf{k}} G & \int d\xi_{\mathbf{k}} F \\ -\int d\xi_{\mathbf{k}} \overline{F} & -\int d\xi_{\mathbf{k}} \overline{G} \end{pmatrix} = -i\pi \begin{pmatrix} g & if \\ -i\overline{f} & -\overline{g} \end{pmatrix} \tag{A.125}$$

また,これらは次の規格化条件を満たす.

$$\hat{g}^2 = -\pi^2 \hat{1} \implies \begin{pmatrix} g & if \\ -i\overline{f} & -\overline{g} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g & if \\ -i\overline{f} & -\overline{g} \end{pmatrix} = \hat{1}$$
 (A.126)

式 (A.123)(A.125) より, Eilenberger 方程式を得る.

$$i\mathbf{v}\cdot\mathbf{\nabla}\hat{g} + \left[i\hat{\omega}_n - \hat{\Delta}, \hat{g}\right] = 0$$
 (A.127)

$$\hat{\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ -\Delta^{\dagger} & 0 \end{pmatrix} \tag{A.128}$$

$$i\hat{\omega}_{n} = \begin{pmatrix} i\omega_{n}^{+} & 0\\ 0 & i\omega_{n}^{-} \end{pmatrix} = i\overline{\omega}_{n}\hat{\tau}_{3} + \hat{\mathbf{K}} \cdot 2\hat{\mathbf{S}}$$
$$= \begin{pmatrix} i\omega_{n} - \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A} + \mathbf{K}^{+} \cdot 2\mathbf{S} & 0\\ 0 & -(i\omega_{n} - \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_{0}}\mathbf{A} - \mathbf{K}^{-} \cdot 2\mathbf{S}) \end{pmatrix}$$
(A.129)

$$\bar{\omega}_n = \omega_n + i \mathbf{e} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} = \omega_n + i \mathbf{v} \cdot \frac{\pi}{\phi_0} \mathbf{A}$$
(A.130)

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} \mathbf{S} & 0\\ 0 & \mathbf{S}^{tr} \end{pmatrix} \tag{A.131}$$

$$\hat{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} \mathbf{K}^+ & 0\\ 0 & \mathbf{K}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{K}(\mathbf{k}) & 0\\ 0 & \mathbf{K}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_B \mathbf{H} - \alpha \overline{\mathbf{g}}(\mathbf{k}) & 0\\ 0 & \mu_B \mathbf{H} - \alpha \overline{\mathbf{g}}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$
(A.132)

Sはパウリ行列を成分に持つ行列であり、αg(k)は軌道スピン相互作用等を表す.

#### A.4 物理量など

自己無撞着条件として、対ポテンシャル Δ と、ベクトルポテンシャルは次式を満足する.

$$\frac{\Delta(\mathbf{r})}{\pi k_B T_c} \left( \ln \frac{T}{T_c} + 2\frac{T}{T_c} \sum_{l=0} \frac{\pi k_B T_c}{\omega_l} \right) = \frac{T}{T_c} \sum_{l=0} \langle \phi^*(\mathbf{k}) (f + f^{\dagger *}) \rangle_{\mathbf{k}}$$
(A.133)

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{a}(\mathbf{r}) \tag{A.134}$$

$$= -\frac{\pi\phi_0}{\kappa^2\Delta_0\xi^3} 2\pi T \sum_{\omega_n>0} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{\hat{\mathbf{k}}}{i} g(i\omega_n, \mathbf{r}\theta)$$
(A.135)

フェルミ速度の角度に依存する部分 v(θ) は次式を満たす.

$$v(\theta) = v_F(\theta)/v_{f,0}$$

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi v(\theta)} = 1$$
(A.136)

引力相互作用 V(θ,θ') は次式のように仮定する.

$$V(\theta, \theta') = V_0 \phi(\theta) \phi(\theta') \tag{A.137}$$

対ポテンシャル  $\Delta(\mathbf{r}, \theta)$  は次式のように書くことができる.

$$\Delta(\mathbf{r},\theta) = \Delta(\mathbf{r})\phi(\theta) \tag{A.138}$$

 $V_0 \ge T_c$ は次式で与えている.

$$\frac{1}{N_0 V_0} = \left\langle \frac{\phi(\theta)^2}{v(\theta)} \right\rangle_{FS} \left( \ln \frac{T}{T_c} + 2\pi T \sum_{0 < \omega_n} \frac{1}{\omega_n} \right)$$
(A.139)

$$\frac{T_c}{\Delta} = \frac{\gamma}{\pi} \exp\left[\frac{\langle |\phi(\theta)|^2 \ln |\phi(\theta)| \rangle_{FS}}{\langle |\phi(\theta)| \rangle_{FS}}\right]$$
(A.140)

 $\gamma$ は Euler の定数である.フェルミ面での平均は次式を用いる.

$$\langle \cdots \rangle_{FS} = \int_0^{2\pi} (\cdots) \frac{d\theta}{2\pi v(\theta)}$$
 (A.141)

コヒーレンス長 ξ は次式で与える.

$$\xi^{2} = \int_{0}^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi v(\theta)} \left\{ \frac{v_{F}(\theta)}{\Delta_{0}} \right\}^{2}$$
(A.142)

系の自由エネルギーFは次式で与えられる.

$$\frac{F}{(\pi k_B T_c)^2 R_0 N_0} = \int \frac{d\mathbf{r}}{R_0^3} \left\{ \tilde{\kappa}^2 \left( \frac{\mathbf{B}(\mathbf{r}) - \overline{\mathbf{B}}}{B_0} \right)^2 + \left\langle \left( \frac{|\Delta(\mathbf{r})|}{\pi k_B T_c} \right)^2 \right\rangle_{\mathbf{k}} \left( \ln \frac{T}{T_c} + 2\frac{T}{T_c} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\pi k_B T_c}{\omega_l} \right) - \frac{T}{T_c} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left\langle \frac{I}{\pi k_B T_c} \right\rangle \pm \tilde{\mu}^2 \frac{B^2}{B_0^2} \right\}$$
(A.143)

ここで、上付きの線は次の積分を行うことを表す.

$$\overline{(\cdots)} = \frac{\int (\cdots) d\mathbf{r}}{\int d\mathbf{r}}$$
(A.144)

$$\frac{I}{\pi k_B T_c} = \frac{\Delta^*}{\pi k_B T_c} f + \frac{\Delta}{\pi k_B T_c} f^{\dagger} + \left(g - \frac{\omega_l}{|\omega_l|}\right) \left\{ \frac{1}{f} \left[ \frac{\omega_l}{\pi k_B T_C} + i\tilde{\mu} \frac{B}{B_0} + \frac{\mathbf{v}_F}{v_F} \left( R_0 \nabla \mp i \frac{\mathbf{A}}{B_0 R_0} \right) \right] f + \frac{1}{f^{\dagger}} \left[ \frac{\omega_l}{\pi k_B T_C} + i\tilde{\mu} \frac{B}{B_0} - \frac{\mathbf{v}_F}{v_F} \left( R_0 \nabla \pm i \frac{\mathbf{A}}{B_0 R_0} \right) \right] f^{\dagger} \right\}$$
(A.145)

ただし,

.

$$R_0 = \hbar \bar{v}_F / 2\pi k_B T_c, \qquad B_0 = \hbar c / 2|e|R_0^2 \qquad (A.146)$$

であり、 んは次式より与える.

$$\tilde{\kappa}^2 = \frac{B_0^2}{8\pi (\pi k_B T_c)^2 N_0}$$
(A.147)

パウリ常磁性効果の大きさは,

$$\tilde{\mu} = \frac{\mu_B B_0}{\pi k_B T_c} \tag{A.148}$$

で与える.これは、Maki パラメーター  $\alpha_{Maki}$  に比例する量である<sup>\*6</sup>.

## 参考文献

- [1] A. A. Abrikosov, Sov. Phys. JETP 5, 1174 (1957).
- [2] C. Caroli, P. G. De Gennes, and J. Matricon, Phys. Lett. 9, 307 (1964).
- [3] N. Hayashi, T. Isoshima, M. Ichioka, and K. Machida, Phys. Rev. Lett. 80, 2921 (1998).
- [4] K. M. Suzuki, T. Mizushima, M. Ichioka, and K. Machida, Phys. Rev. A 77, 063617 (2008).
- [5] M. Ichioka, A. Hasegawa, and K. Machida, Phys. Rev. B 59, 8902 (1999).
- [6] N. Nakai, P. Miranović, M. Ichioka, and K. Machida, Phys. Rev. Lett. 89, 237004 (2002).
- [7] 中井宣之, 博士論文 (2002) (岡山大学).
- [8] D. Saint-Jame, G. Sarma, and E. J. Thomas, *Type II Supercunductivity* (Pergamon, New York, 1969).
- [9] K. Harada, T. Matsuda, H. Kasai, J. E. Bonevich, T. Yoshida, U. Kawabe, and A. Tonomura, Phys. Rev. Lett. 62, 214 (1989).
- [10] J. Schelten, G. Lippmann, and H. Ullmaier, J. Low Temp. Phys. 14, 213 (1974).
- [11] D. K. Christen, H. R. Kerchner, S. T. Sekula, and P. Thorel, Phys. Rev. B 21, 102 (1980).
- [12] D. K. Christen, and P. Thorel, Phys. Rev. Lett. 42, 191 (1979).
- [13] M. Laver, E. M. Forgan, S. P. Brown, D. Charalambous, D. Fort, C. Bowell, S. Ramos, R. J. Lycett, D. K. Christen, J. Kohlbrecher, C. D. Dewhurst, and R. Cubitt, Phys. Rev. Lett. 96, 167002 (2006).
- [14] M. R. Eskildsen, K. Harada, P. L. Gammel, A. B. Abrahamsen, N. H. Andersen, G. Ernst, A. P. Ramirez, D. J. Bishop, K. Mortensen, D. G. Naugle, K. D. D. Rathnayaka, and P. C. Canfield, Nature **393**, 242 (1998).
- [15] S. V. Shulga, S. L. Drechsler, G. Fuchs, K.-H. Müller, K. Winzer, M. Heinecke, and K. Krug, Phys. Rev. Lett. 80 1730 (1998).
- [16] S. J. Levett, C. D. Dewhurst, and D. McK. Paul, Phys. Rev. B 66, 014515 (2002).
- [17] C. D. Dewhurst, S. J. Levett, and D. McK. Paul, Phys. Rev. B 72, 014542 (2005).
- [18] H. Kawano-Furukawa, S. Ohira-Kawamura, H. Tsukagoshi, C. Kobayashi, T. Nagata, N. Sakiyama, H. Yoshizawa, M. Yethiraj, J. Suzuki, and H. Takeya, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 104711 (2008).
- [19] L. Ya. Vinnikov, T. L. Barkov, P. C. Canfield, S. L. Bud'kov, J. E. Ostenson, F. D. Laabs, and V. G. Kogan, Phys. Rev. B 64, 220508(R) (2001).
- [20] M. Yethiraj, D. K. Christen, A. A. Gapud, D. McK. Paul, S. J. Crowe, C. D. Dewhurst, R. Cubitt, L. Porcar, and A. Gurevich, Phys. Rev. B 72, 060504(R) (2005).

<sup>\*6</sup>  $\tilde{\mu} \approx \alpha_{Maki}/2$  である.

- [21] C. E. Sosolik, J. A. Stroscio, M. D. Stiles, E. W. Hudson, S. R. Blankenship, A. P. Fein, and R. J. Celotta Phys. Rev. B 68, 140503(R) (2003).
- [22] R. Settai, T. Takeuchi, and Y. Onuki, J. Phys. Soc. Jpn. 76, 051003 (2007).
- [23] A. D. Bianchi, M. Kenzelmann, L. DeBeer-Schmitt, J. S. White, E. M. Forgan, J. Mesot, M. Zolliker, J. Kohlbrecher, R. Movshovich, E. D. Bauer, J. L. Sarrao, Z. Fisk, C. Petrovic, M. R. Eskildsen, Science **319**, 177 (2008).
- [24] M. R. Eskildsen, C. D. Dewhurst, B. W. Hoogenboom, C. Petrovic, and P. C. Canfield, Phys. Rev. Lett. 90, 187001 (2003).
- [25] K. Izawa, H. Takahashi, H. Yamaguchi, Y. Matsuda, M. Suzuki, T. Sasaki, T. Fukase, Y. Yoshida, R. Settai, and Y. Onuki, Phys. Rev. Lett. 86, 2653 (2001).
- [26] H. Aoki, T. Sakakibara, H. Shishido, R. Settai, Y. Onuki, P. Miranović, and K. Machida, J. Phys.: Condens. Matter 16, L13 (2004).
- [27] K. Tanaka, H. Ikeda, Y. Nishikawa, and K. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. 75, 024713 (2006).
- [28] A. T. Holmes, D. Jaccard, and K. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn. 76, 051002 (2007).
- [29] P. Fulde and R. A. Ferrell, Phys. Rev. 135, A550 (1964).
- [30] A. I. Larkin and Yu. N. Ovchinnikov Zh. Eksp. Teor. Fiz. 47, 1136 (1964). [translation: Sov. Phys. JETP 20, 762 (1965).
- [31] Y. Matusda and H. Shimahara, J. Phys. Soc. Jpn. 76, 051005 (2007).
- [32] M. R. Eskildsen, private communication.
- [33] N. Hiasa and R. Ikeda, Phys. Rev. Lett. 101, 027001 (2008).
- [34] G. Eilenberger, Z. Phys. **214**, 195 (1968).
- [35] J. Shiraisi, M. Kohmoto, and K. Maki, Phys. Rev. B 59, 4497 (1999).
- [36] V. G. Kogan, P. Miranović, Lj. Dobrosavljević-Grujić, W. E. Pickett, and D. K. Christen, Phys. Rev. Lett., 79, 741 (1997).
- [37] M. R. Eskildsen, and J. S. White, private communication.
- [38] K. Machida, M. Ichioka, N. Nakai, P. Miranović, and K. M. Suzuki, unpublished.
- [39] P. Miranović, private communication.
- [40] V. G. Kogan, M. Bullock, B. Harmon, P. Miranović, Lj. Dobrosavljević-Grujić, P. L. Gammel, and D. J. Bishop, Phys. Rev. B, 55, 8693(R) (1997).
- [41] M. Franz, I. Affleck, and M. H. Amin, Phys. Rev. Lett. 79, 1555 (1997).
- [42] 市岡優典, 鈴木健太, 町田一成, 日本物理学会 2008 年秋季大会 22pQE-7.
- [43] 市岡優典, 鈴木健太, 町田一成, 日本物理学会 2009 年年次大会 30aTA-1.