

強相関電子系における多軌道超伝導の理論

Theory of multi-orbital superconductivity in strongly
correlated electron systems

2013年10月

早稲田大学大学院 先進理工学研究科
物理学及応用物理学専攻 低温量子物性研究

増田 啓介

Keisuke MASUDA

目次

第 1 章	はじめに	3
第 2 章	BCS 理論とその応用	7
2.1	BCS 理論の概説	7
2.2	コヒーレンス効果	12
第 3 章	鉄系超伝導体におけるコヒーレンス効果	19
3.1	鉄系超伝導体	19
3.1.1	多バンド構造	19
3.1.2	ペアリング対称性に関する先行研究 (理論編)	22
3.1.3	ペアリング対称性に関する先行研究 (実験編)	25
3.2	鉄系超伝導体におけるコヒーレンス効果	28
3.2.1	2 バンド BCS 模型	29
3.2.2	応答関数の計算	31
3.2.3	数値計算の結果	34
3.2.4	ペアリング対称性を決定する実験の提案	36
第 4 章	重い電子系における非従来型 s 波超伝導	41
4.1	重い電子系	41
4.2	重い電子系における超伝導	46
4.3	重い電子系における非従来型 s 波超伝導 (平均場近似による解析)	49
4.3.1	基本的なアイデアと有効ハミルトニアン	49
4.3.2	平均場解析	52
4.3.3	計算結果	54
4.4	重い電子系における非従来型 s 波超伝導 (変分クラスタ法解析)	60
4.4.1	変分クラスタ法 (VCA)	60
4.4.2	計算結果	64
第 5 章	おわりに	67
	謝辞	69
付録 A	2 バンド BCS 模型における Green 関数 (3.12) の導出	69
付録 B	式 (3.17), (3.18) の導出	72
付録 C	重い電子系の導入に関する Green 関数 (4.3), (4.4) の導出	77

付録 D	平均場ハミルトニアン (4.25) の導出	80
付録 E	Green 関数を用いた自己無撞着方程式 (4.32)-(4.35) の導出	84
付録 F	Cooper 対の重心運動量を決定する方程式の導出	88
付録 G	VCA Green 関数の極を求める方法	90
参考文献		94
研究業績		100

第1章 はじめに

2008年2月、鉄とニクトゲン¹を含む新たな高温超伝導体(以下では、鉄系超伝導体と呼ぶ)が発見された [1]. 磁性と超伝導はしばしば水と油に例えられる関係にあるため、磁性物質の典型である鉄の化合物が比較的高温で超伝導転移を示したという事実に多くの物理学者が驚嘆した. また、1986年の銅酸化物高温超伝導体 [2] 以来約20年ぶりの大発見に、我々物性物理学に携わる者の多くが室温超伝導への期待をより一層強くしたことは言うまでもない. 発見から今日まで約5年半の月日が経過したが、これまでに理論、実験の両側面からこの系に対する様々な研究が行われ、多くの事実が明らかにされてきた.

鉄系超伝導体の特徴としてまず第一に挙げられるのは、本論文のタイトルにもある通り、この超伝導体が「多軌道性を有している」ということである. “多軌道性を有する”とは、この系を記述する際に“複数の原子軌道を考慮に入れる必要がある”ということの意味している. 鉄系超伝導体に特有の“多バンド構造”や“非連結 Fermi 面”は、この「多軌道性」に由来している. 通常、単元素金属で発現する単純な超伝導では、このような多軌道性が重要となることは少ない. というのも、このような単純な超伝導体では、結晶場の効果によって各軌道のエネルギー準位が分裂しており、Fermi 準位近傍の電子状態は主に1つの原子軌道のみによって決定されることが多いからである. 一方の鉄系超伝導体では、鉄原子を取り囲むニクトゲンが正四面体構造を取っているため、先の結晶場分裂の大きさが極めて小さい. その結果、鉄の3d軌道全て²が Fermi 準位近傍の電子状態に寄与を及ぼしているのである.

しかし、このような多軌道性が重要になるのは鉄系超伝導体だけではない. 鉄系超伝導体と同じく強相関電子系に属する「重い電子系」もまた、多軌道性が重要になる物質群である. 重い電子系は、伝導軌道³に属し遍歴性が高い電子(伝導電子)と、f軌道に属し局在性が高い電子(f電子)の混成によって特徴付けられる. これら2種類の電子が相互作用することで、Kondo効果や磁気秩序をはじめとした非常に多彩な物理現象が発現する. 多種多様な超伝導もその1つであり、1979年のCeCu₂Si₂を皮切りに、これまでに30種類を超える物質において超伝導転移が観測されてきた. これらの重い電子系超伝導体に対して理解を深めることは、多軌道性と超伝導性の関係を明らかにする上で非常に重要なプロセスであると言える.

本博士論文では、上に述べたような強相関電子系の多軌道超伝導について理論的考察を行う. 我々は、本論文を通じて、超伝導発現機構と関係の深いペアリング対称性に着目して議論を進めていく.

¹周期表の第15族に属する元素. N(窒素), P(リン), As(砒素), Sb(アンチモン), Bi(ビスマス)がある.

² $d_{x^2-y^2}, d_{z^2}, d_{xz}, d_{yz}, d_{xy}$ の5つの3d軌道.

³f軌道に比べて局在性が低いs, p, d軌道などのことを指す. 具体的にどの軌道であるかは物質によって異なる.

まず第2章では、超伝導の基礎理論であるBCS理論について概説を行う。本論文の対象は多軌道系の超伝導であるが、最初に1軌道系の超伝導について述べておくことで、その後の議論が円滑に進むものと思われる。そこで本章では1軌道超伝導の基礎理論であるBCS理論の要点を簡潔に説明する。その際、後の議論で重要になる「超伝導ギャップ」や「ペアリング対称性」といった概念についても説明を行う。またBCS理論の応用として、「コヒーレンス効果」と呼ばれる現象についても議論する。これは後の第3章で、1軌道の場合のコヒーレンス効果を多軌道の場合に拡張する準備である。

第3章では、鉄系超伝導体の“ペアリング対称性を決定する実験”について議論する。先に「非連結 Fermi 面」という形で述べたように、この系の Fermi 面は、多軌道性のために、ホール面と電子面という2つの Fermi 面によって構成されている。そして超伝導転移した際には、これらの Fermi 面それぞれに超伝導ギャップが開く。この系に関して発見当初から議論となっている点は、このような複数の超伝導ギャップが波数空間でどのような対称性(ペアリング対称性)を持っているかという問題である。特に、ホール面に開く超伝導ギャップと電子面に開く超伝導ギャップの位相差がその争点とされてきた。鉄系超伝導体の発見当初、Mazin および Kuroki らによって発表された理論では、“ホール面に開くギャップと電子面に開くギャップの符号が反転している”いわゆる s_{+-} 波対称性が有望視された。この s_{+-} 波対称性は、「核磁気緩和実験で Hebel-Slichter ピークが観測されないこと」、また「非弾性中性子散乱実験で共鳴的ピークが観測されること」と矛盾しないため、一躍、この物質のペアリング対称性の最有力候補となった。しかし、この系が発見されてから1年後の2009年、Onari と Kontani によって s_{+-} 波対称性とは異なるペアリング対称性が提唱された。それが、“ホール面と電子面のギャップが符号反転していない”いわゆる s_{++} 波対称性と呼ばれる対称性である。ギャップに符号反転がある s_{+-} 波対称性に比べると、この s_{++} 波対称性は極めて不純物に強い。鉄系超伝導体のいくつかの系では超伝導が不純物に対して強いことが確認されており、このような性質が s_{++} 波対称性と符合していると彼らは主張した。また上に述べた核磁気緩和および中性子散乱の実験結果も、 s_{++} 波対称性に準粒子寿命の延長効果を取り入れることで説明可能であることが示された。理論研究がこのように発展してきた一方で、超伝導ギャップの位相を実験的に決定することは極めて難しく、発見から5年半が経った現在でも、この系のペアリング対称性は同定されていない。我々はこのような経緯を踏まえ、鉄系超伝導体のペアリング対称性を同定する実験を理論の立場から提案する。我々はBCS理論において知られるコヒーレンス効果に着目し、両ペアリング対称性に関して応答関数の計算を行う。その結果、 s_{+-} 波対称性と s_{++} 波対称性では応答関数が定性的に異なる温度依存性を示すことが明らかになった。このことは、応答関数を非弾性 X 線散乱実験および非弾性中性子散乱実験で測定することによって、鉄系超伝導体のペアリング対称性が決定されうることを意味している。

続く第4章では、重い電子系における非従来型 s 波超伝導について議論する。従来、重い電子系では、 f 電子間に強い Coulomb 斥力が働くため、電子が隣り合うサイト間で Cooper 対を組む d 波超伝導が発現しやすいものと考えられてきた。実際、多くの重い電子系物質で d 波超伝導を示唆す

る実験結果が得られている。その一方、重い電子系には、1つのサイト内で電子が Cooper 対を組む s 波超伝導を示す物質も存在する。CeRu₂ や CeCo₂ はそのような物質であり、核磁気緩和および光電子分光の実験結果は s 波超伝導の発現を明確に示唆している。通常、このような s 波超伝導は、BCS 理論のように電子格子相互作用に基づいて説明される。しかし、これらの物質では、電子格子相互作用の存在を示唆する明確な実験結果は存在しない。このような経緯を受け、我々は「 f 電子間の Coulomb 斥力のみから s 波超伝導が発現しうるか」という問いに焦点を当てる。我々のアイデアは、これまでほとんどの先行研究で考慮されてこなかった伝導電子と f 電子によって形成される軌道間 Cooper 対 (c - f Cooper 対) を考慮する点にある。周期 Anderson 模型に基づく平均場解析の結果、我々は重い電子系の広いパラメタ領域で s 波超伝導が可能であることを明らかにした。我々が提唱するこのような s 波超伝導は、従来の電子格子相互作用ではなく、重い電子系の“多軌道性”と“ f 電子間斥力”によって誘起されるという意味で「非従来型の s 波超伝導」であると結論付けられる。我々はさらに、変分クラスタ法を用いて、重い電子系の s 波超伝導について再考察を行った。そしてその結果、軌道間混成が存在する影響で、「 c - f 電子間の s 波 Cooper 対だけでなく、 f - f 電子間の s 波 Cooper 対や c - c 電子間の s 波 Cooper 対も誘起されうる」という新たな事実を明らかにした。

最終章である第5章では、本論文のまとめを行い、今後の展開、展望について述べる。また、本博士論文中では $\hbar = k_B = 1$ の単位系を採用している。

第2章 BCS理論とその応用

本章では、超伝導の基礎理論であるBCS理論¹を概説した後、その応用であるコヒーレンス効果について説明する。本博士論文は多軌道超伝導体の解析に主眼を置いているが、その議論に入る前に、まず、シンプルな1軌道超伝導体に対するBCS理論を復習しておきたい。特に、超伝導ギャップやペアリング対称性といった本論文での議論に極めて重要となる事柄について説明を行うことで、次章以降の議論への導入としたい。また、BCS理論の応用として説明するコヒーレンス効果は、超伝導状態に特有の準粒子振幅の干渉効果である。このコヒーレンス効果のアイデアを鉄系超伝導体に適用するため、ここでその基礎理論について述べておく。BCS理論を説明する際に導入するBogoliubov変換を利用することでコヒーレンス効果の標準的な説明を行う。

2.1 BCS理論の概説

超伝導とは、固体中の電子がCooper対を組み“一種の Bose 凝縮”²を起こすことによって現れる巨視的量子現象である。この超伝導現象を記述するBCS理論では、「電子格子相互作用により2電子間に実効的な引力が働く」として議論が進められる。我々もこのような仮定に従い、次のハミルトニアンから議論を始めることにする。

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma, \sigma'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma, \sigma'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma'}. \quad (2.1)$$

ここで $\xi_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/2m - \mu$ は化学ポテンシャル μ から測った電子の運動エネルギー、 $c_{\mathbf{k}\sigma}$ は波数 \mathbf{k} 、スピン σ の電子の消滅演算子である。また $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma, \sigma'}$ は電子が2体散乱される際の電子間相互作用を特徴づけている。ここで電子が2体散乱される様子を模式的に描いた図2.1を見てみよう。この図を見ると、(a)の $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = 0$ の場合は散乱後の電子が薄灰色に塗られたDebye殻に収まっている一方で、(b)の $\mathbf{k} + \mathbf{k}' \neq 0$ の場合は散乱後の電子がDebye殻からはみ出してしまっていることがわかる。Debye殻は電子格子相互作用が実効的に効く領域を示しており、(b)の $\mathbf{k} + \mathbf{k}' \neq 0$ の場合は(a)の $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = 0$ の場合に比べて、極めて寄与が小さいと考えられる。そこで $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = 0$ の場合のみを残し、次の簡約BCSハミルトニアンに至る。ここで2体散乱される \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ の電子対がスピ

¹原論文 [3] の発表から50年以上が経過した現在、BCS理論に関しては多くの書籍が出版されている。本論文でもいくつかの書籍を参考にさせて頂いた [4-9]。

²Cooper対は正確にはボソンの統計性を持たないためこのように表現した。

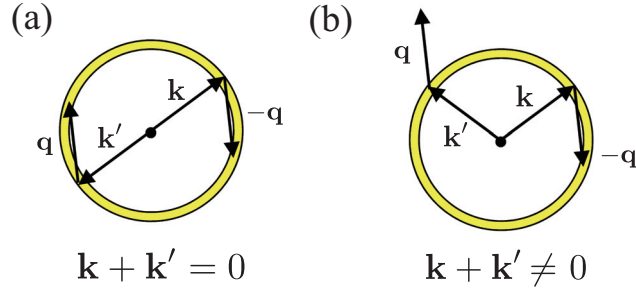


図 2.1: 波数空間での電子の 2 体散乱と電子格子相互作用の有効領域. (a) $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = 0$ の場合. (b) $\mathbf{k} + \mathbf{k}' \neq 0$ の場合. 薄灰色に塗られている領域が電子格子相互作用が実効的に効く Debye 殻と呼ばれる領域である.

ン 1 重項状態にあることも仮定した.

$$\mathcal{H}_{\text{red}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}. \quad (2.2)$$

続いて、この簡約ハミルトニアン第 2 項 (多体項) に対して次の平均場近似 (Gor'kov 近似) を行う.

$$c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \cong \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle. \quad (2.3)$$

その結果、次の平均場ハミルトニアンを得る.

$$\mathcal{H}_{\text{mf}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - B_{\mathbf{k}}). \quad (2.4)$$

ただし、 $B_{\mathbf{k}'}$ と超伝導ギャップ $\Delta_{\mathbf{k}}$ を次のように定義し、これを実であると仮定した.

$$B_{\mathbf{k}'} \equiv \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle, \quad (2.5)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} B_{\mathbf{k}'}. \quad (2.6)$$

続いて、この平均場ハミルトニアンを Bogoliubov 変換を用い対角化する. 我々は Bogoliubov 粒子 (ボゴロン) の消滅生成演算子 $\alpha_{\mathbf{k}0}, \alpha_{-\mathbf{k}1}^\dagger$ を次のように導入する.³

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}1}^\dagger, \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= -v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}1}^\dagger. \end{aligned} \quad (2.7)$$

³ $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ は一般的には複素数であるが、ここでは簡単のため実数であると仮定する.

ここで, 0, 1 はボゴロンの擬スピンを表している. ボゴロンがフェルミオンの統計性 $\{\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger, \alpha_{\mathbf{k}0}\} = 1$ を満たすことを要請すると,

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1 \quad (2.8)$$

が得られる.

さて, ボゴロンの演算子を用いて平均場ハミルトニアンを書き換えていくことにしよう. 少々計算を行うと次の式が導かれる.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{mf}} &= \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3, \\ \mathcal{H}_1 &= \sum_{\mathbf{k}} [\xi_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) + 2\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}] (\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}0} + \alpha_{-\mathbf{k}1}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}1}), \\ \mathcal{H}_2 &= \sum_{\mathbf{k}} [2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2)] (\alpha_{-\mathbf{k}1} \alpha_{\mathbf{k}0} + \alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}1}^\dagger), \\ \mathcal{H}_3 &= \sum_{\mathbf{k}} [2\xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 - 2\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}]. \end{aligned} \quad (2.9)$$

ここで, 異常項を含む \mathcal{H}_2 が 0 となることを要請すると,

$$2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) = 0 \quad (2.10)$$

が得られる. 次に, 今得られた式 (2.10) と式 (2.8) を用いて $u_{\mathbf{k}}$ と $v_{\mathbf{k}}$ を求めることにしよう. 式 (2.10) に $\Delta_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}^2$ をかけ, $\Delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}$ を x と置くと,

$$x^2 + 2\xi_{\mathbf{k}} x - \Delta_{\mathbf{k}}^2 = 0 \quad (2.11)$$

が得られ, これを解くと

$$\frac{\Delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = -\xi_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}} \quad (2.12)$$

となる.⁴ ただし, $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$ とした. この式 (2.12) と式 (2.8) を組み合わせると, 次のように $u_{\mathbf{k}}^2$, $v_{\mathbf{k}}^2$, $u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}$ が求まる.

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \\ v_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \\ u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

これらを用いることによって, 対角化された平均場ハミルトニアンを次のように書き下すことがで

⁴ $\frac{\Delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = -\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}$ も解となるが基底状態のエネルギーがより低くなるプラスの根を採用する.

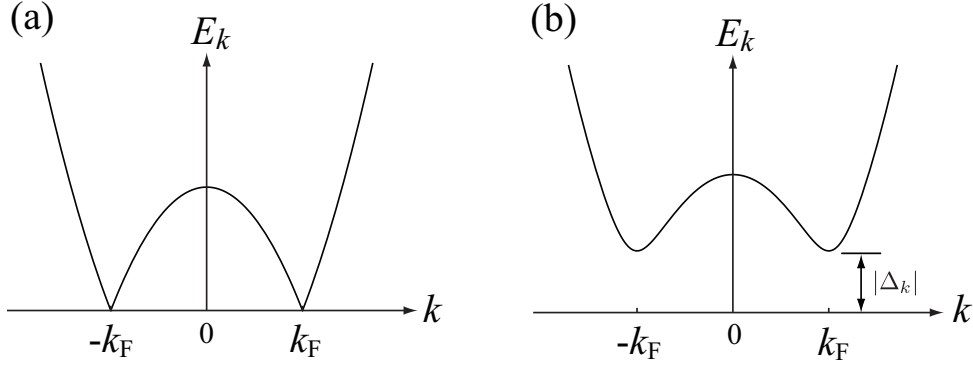


図 2.2: (a) 常伝導状態におけるボゴロンのエネルギースペクトル. (b) 超伝導状態におけるボゴロンのエネルギースペクトル. k_F は Fermi 波数を表している.

きる.

$$\mathcal{H}_{\text{mf}} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}0} + \alpha_{-\mathbf{k}1}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}1} \right) + \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}). \quad (2.14)$$

ここで着目したいのは、準粒子 (ボゴロン) のエネルギーが $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$ という形を取っている点である. 図 2.2(a) に常伝導状態の, (b) に超伝導状態のボゴロンのエネルギースペクトルをそれぞれ示す. 常伝導状態ではボゴロンはエネルギーが 0 の状態を取れる. すなわち, 零エネルギーの励起が可能である. 一方の超伝導状態では, ボゴロンのスペクトルに $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ のエネルギーギャップが開いており, 1 つの準粒子を作る際に最低でも $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ のエネルギーが必要となることがわかる. このように, 式 (2.6) で定義した $\Delta_{\mathbf{k}}$ は, その絶対値が超伝導転移によって生じるギャップの幅に対応しており, 超伝導転移を特徴づける秩序変数になっている. ここで「超伝導ギャップ」という用語の本論文中での定義を明確にしておこう. $\Delta_{\mathbf{k}}$ は, 絶対値のみならず, 符号 (位相) の自由度を有している. この節の終わりに紹介する d 波対称性や次章以降で登場する s_{+-} 波対称性では, この位相の自由度が肝要となる. 「超伝導ギャップ」と述べてしまうとスペクトルに開くギャップの「幅,」すなわち正の量を表すように感じられてしまうが, 本論文中では符号の自由度まで含めた $\Delta_{\mathbf{k}}$ を「超伝導ギャップ」と呼ぶことにする.

さて, その超伝導ギャップ $\Delta_{\mathbf{k}}$ を決定する方程式 (ギャップ方程式) を導出しておこう. 式 (2.5) と式 (2.7) より,

$$\begin{aligned} B_{\mathbf{k}'} &= -u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \left(\langle \alpha_{\mathbf{k}'0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'0} \rangle - \langle \alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}'1} \rangle \right) \\ &= u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - 2f(E_{\mathbf{k}'})) \\ &= \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh \frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

ここで温度を T として $\beta = 1/T$ であり, $f(E) = 1/(e^{\beta E} + 1)$ は Fermi 分布関数である. 2 つ目の等号に, ボゴロンが自由フェルミオンであること, 3 つ目の等号に, 式 (2.13) を用いている. こうして

得た式 (2.15) を超伝導ギャップの定義式 (2.6) に代入することで、次のギャップ方程式が得られる。

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh \frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}. \quad (2.16)$$

BCS 理論では、波数空間において等方的な相互作用と超伝導ギャップを仮定する。

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -V \quad (V > 0), \quad (2.17)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta. \quad (2.18)$$

すると、ギャップ方程式は最終的に次のようになる。

$$\Delta = V \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh \frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}. \quad (2.19)$$

このような、波数空間において等方的な超伝導ギャップの対称性 (ペアリング対称性) は s 波対称性と呼ばれている。このような s 波対称性におけるギャップを 2 次元系を想定し模式的に描くと、図 2.3(a) のようになる。もちろん s 波対称性以外のペアリング対称性も存在する。その一例が d 波対称性である。 d 波対称性における超伝導ギャップの模式図を図 2.3(b) に示すが、⁵ この対称性においては、超伝導ギャップの大きさが波数に依存して変化する。また、ギャップが 0 になるノード (節) と呼ばれる点が $\pm 45^\circ$ と $\pm 135^\circ$ の 4 箇所が存在し、この点を境にして超伝導ギャップの符号が変化する。このような d 波対称性は銅酸化物高温超伝導体等で実現していることが知られている。

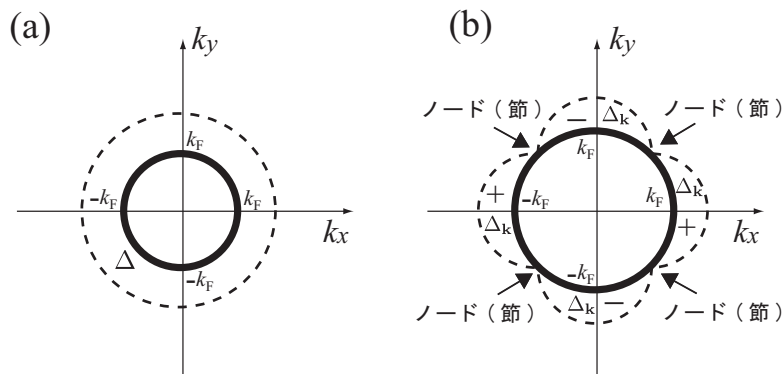


図 2.3: (a) s 波対称性における超伝導ギャップの模式図. (b) $d_{x^2-y^2}$ 波対称性における超伝導ギャップの模式図. 太線は Fermi 面, 点線は Fermi 面に開く超伝導ギャップを表している. また, k_F は Fermi 波数である.

⁵ 正確には $d_{x^2-y^2}$ 波対称性のギャップの模式図である.

2.2 コヒーレンス効果

コヒーレンス効果とは、超伝導体に外場を加えた際に、超伝導体の応答に現れる準粒子振幅の干渉効果である。ここでは、このコヒーレンス効果を一般的な立場から分類、考察していくことにしよう。また、本節では s 波対称性を持つ超伝導体を仮定して議論を進めていく。

我々は、次の式で表される外場を超伝導体にかけることを想定する。

$$\mathcal{H}_{\text{ext}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} A_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} \quad (2.20)$$

ここで、 $A_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'}$ は超伝導体内の電子を (\mathbf{k}', σ') の状態から (\mathbf{k}, σ) の状態へと遷移させる外場の係数を表している。この係数は、外場の時間反転対称性に応じて次のように分類することができる。

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} &= +\theta_{\sigma\sigma'} A_{-\mathbf{k}'-\sigma', -\mathbf{k}-\sigma} & (\text{場合 I}), \\ A_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} &= -\theta_{\sigma\sigma'} A_{-\mathbf{k}'-\sigma', -\mathbf{k}-\sigma} & (\text{場合 II}). \end{aligned} \quad (2.21)$$

ただし、 $\sigma = \pm\sigma'$ に対して $\theta_{\sigma\sigma'} = \pm 1$ である。場合 I は、外場が時間反転操作に対して偶パリティを持っている場合に、場合 II は、外場が時間反転操作に対して奇パリティを持っている場合に対応している。物理的には、系の密度を揺動させる外場が場合 I に、系のスピンを揺動させる外場が場合 II に対応する。以下では、超音波吸収と核磁気緩和を例として取り上げるが、前者は $\sigma = \sigma'$ の場合 I に、後者は $\sigma = -\sigma'$ の場合 II に属する。⁶ さて、前節で超伝導体における励起がボゴロンという準粒子で特徴づけられることを述べたが、このボゴロンで外場 (2.20) を書き直すことによってコヒーレンス効果の本質を理解することができる。まず、スピン反転のない $\sigma = \sigma'$ の場合を扱う。 $c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}$, $c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}$ を式 (2.7) を用い、ボゴロンの演算子で書き直すと次のようになる。

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} &= u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'0} - v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} \alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}1} \\ &\quad + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger + v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} \alpha_{-\mathbf{k}1} \alpha_{\mathbf{k}'0}, \\ c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} &= -v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'0} + u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} \alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}1} \\ &\quad + v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} \alpha_{-\mathbf{k}1} \alpha_{\mathbf{k}'0}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

ここで、 $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ が実であることを用いた。これらの表式を見ると、 $c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}$ と $c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}$ はどちらも、 $\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'0}$, $\alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}1}$, $\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger$, $\alpha_{-\mathbf{k}1} \alpha_{\mathbf{k}'0}$ に関する項の線形結合となっていることがわかる。言い換えれば、時間反転の関係にある $A_{\mathbf{k}\uparrow, \mathbf{k}'\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}$ と $A_{-\mathbf{k}'\downarrow, -\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}$ は、互いに干渉成分を持っているのである。したがって、この外場による遷移確率を計算する際には、両項の干渉成分 (例えば、 $c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}$ における $\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'0}$ の係数と $c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}$ における $\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'0}$ の係数など⁷) をあらかじめ足し

⁶核スピンの昇降演算子を I_+ , I_- として核磁気緩和のプロセスが $I_+ c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} + I_- c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}$ と書き表されることからもおわかり頂けよう。

⁷ $\alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}1}$, $\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger$, $\alpha_{-\mathbf{k}1} \alpha_{\mathbf{k}'0}$ についても同様。

ておく必要がある。干渉成分を足し上げると、 $\sigma = \sigma'$ の場合、外場 (2.20) は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{ext}} &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(A_{\mathbf{k}\uparrow, \mathbf{k}'\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} + A_{-\mathbf{k}'\downarrow, -\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} + \text{H.c.} \right) \\
&= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}\uparrow, \mathbf{k}'\uparrow} \left[(u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} \mp v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'}) \left(\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'0} \pm \alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}1} \right) + \text{H.c.} \right] \\
&\quad + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}\uparrow, \mathbf{k}'\uparrow} \left[(u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} \pm v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'}) \left(\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}'1}^\dagger \pm \alpha_{-\mathbf{k}1} \alpha_{\mathbf{k}'0} \right) + \text{H.c.} \right]. \quad (2.23)
\end{aligned}$$

ここで、上の符号は場合 I を、下の符号は場合 II を表している。本章では以後も、複合はこの意味で用いる。続いてスピンが反転する場合 $\sigma = -\sigma'$ の計算であるが、上と全く同様に計算を進めると、次の結果が得られる。

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{ext}} &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(A_{\mathbf{k}\uparrow, \mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} + A_{-\mathbf{k}'\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} + \text{H.c.} \right) \\
&= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}\uparrow, \mathbf{k}'\downarrow} \left[(u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} \mp v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'}) \left(\alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'1} \mp \alpha_{-\mathbf{k}'0}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}1} \right) + \text{H.c.} \right] \\
&\quad + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}\uparrow, \mathbf{k}'\downarrow} \left[(u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} \pm v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'}) \left(\alpha_{-\mathbf{k}'0}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}0}^\dagger \mp \alpha_{\mathbf{k}'1} \alpha_{-\mathbf{k}1} \right) + \text{H.c.} \right]. \quad (2.24)
\end{aligned}$$

ここで、 $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ が実であることに加え、 $u_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}, v_{-\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}$ を用いた。式 (2.23), (2.24) を見ると、外場は 2 つの寄与からなっていることがわかる。1 つは $\alpha^\dagger \alpha$ のタイプの項を含む第 1 項目からの寄与であり、もう 1 つは $\alpha^\dagger \alpha^\dagger$ および $\alpha \alpha$ のタイプの項を含む第 2 項目からの寄与である。前者は準粒子が散乱される励起過程に対応しており、後者は準粒子が対生成・対消滅する励起過程に対応している。後者の、準粒子が対生成される過程は、クーパー対が破壊されて準粒子が 2 つ生成されることを意味しており、 $2|\Delta|$ 以上の励起エネルギーを必要とする。さて、これより、これらの外場による遷移確率について考察していくが、その際は、 $\alpha^\dagger \alpha$ や $\alpha^\dagger \alpha^\dagger$ ($\alpha \alpha$) の前についた係数の 2 乗が重要になる。⁸

準粒子散乱による励起過程については、次の因子が遷移確率に特に重要な寄与を及ぼす。

$$(u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} \mp v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'})^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}} \mp \frac{\Delta^2}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}} \right). \quad (2.25)$$

一方、準粒子の対生成・対消滅過程においては、次の因子が重要になる。

$$(u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} \pm v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'})^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}} \pm \frac{\Delta^2}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}} \right). \quad (2.26)$$

先にも述べたが、上の符号が場合 I, 下の符号が場合 II に対応することをもう一度注意しておく。これらの因子 (2.25), (2.26) はコヒーレンス因子と呼ばれており、遷移確率の振る舞い (特に温度依存

⁸後に見るように、Fermi の黄金律を用いるため。

性)に大きな影響を及ぼす因子である。また本節では、スピン反転を伴わない場合 (2.23) と伴う場合 (2.24) の両方を計算したが、コヒーレンス因子に関しては、両者は一致することがわかる。

コヒーレンス因子が遷移確率に及ぼす影響を見るべく、以下で超音波吸収率、核磁気緩和率を計算していこう。超音波吸収と核磁気緩和は、ともに超伝導ギャップの絶対値 $|\Delta|$ に比べて十分小さなエネルギーを与える実験であるため、⁹ 準粒子が対生成・対破壊されるプロセスは起きえない。したがって、コヒーレンス因子としては式 (2.25) のみを考えればよい。超音波吸収と核磁気緩和とで異なるのは、コヒーレンス因子内の符号のみである。したがって、コヒーレンス因子を一般的に $C_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ と書けば、両現象における遷移確率 W_s は、Fermi の黄金律により次のように書ける。¹⁰

$$W_s \propto |A|^2 \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} [f(E_{\mathbf{k}'}) - f(E_{\mathbf{k}})] \delta(E_{\mathbf{k}'} + \omega - E_{\mathbf{k}}). \quad (2.27)$$

ここで、外場の係数の波数・スピン依存性を無視して A とし、かけた外場のエネルギーを ω とした。式 (2.27) にコヒーレンス因子の具体形 (2.25) を代入し、変数変換をした後に式を整理すると、次のようになる。

$$W_s \propto |A|^2 N(0)^2 \int d\xi_{\mathbf{k}} d\xi_{\mathbf{k}'} \left(1 \mp \frac{\Delta^2}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}}\right) [f(E_{\mathbf{k}'}) - f(E_{\mathbf{k}})] \delta(E_{\mathbf{k}'} + \omega - E_{\mathbf{k}}) \quad (2.28)$$

$$= |A|^2 N(0)^2 \int_{\Delta}^{\infty} dE \int_{\Delta}^{\infty} dE' \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \frac{E'}{\sqrt{E'^2 - \Delta^2}} \\ \times \left(1 \mp \frac{\Delta^2}{EE'}\right) [f(E') - f(E)] \delta(E' + \omega - E) \quad (2.29)$$

$$= |A|^2 N(0)^2 \int_{\Delta}^{\infty} dE' \frac{E' + \omega}{\sqrt{(E' + \omega)^2 - \Delta^2}} \frac{E'}{\sqrt{E'^2 - \Delta^2}} \\ \times \left(1 \mp \frac{\Delta^2}{(E' + \omega)E'}\right) [f(E') - f(E' + \omega)] \quad (2.30)$$

$$= |A|^2 N(0)^2 \int_{\Delta}^{\infty} dE' \frac{[E'(E' + \omega) \mp \Delta^2] [f(E') - f(E' + \omega)]}{\sqrt{E'^2 - \Delta^2} \sqrt{(E' + \omega)^2 - \Delta^2}}. \quad (2.31)$$

ここで、常伝導状態の状態密度を $N(0)$ とした。式 (2.28) においてコヒーレンス因子内の $\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}'}/E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'}$ という項が消えていることに注意されたい。これはこの項が $\xi_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}'}$ の奇関数であることに由来する。この式 (2.31) を用いて超音波吸収、核磁気緩和それぞれの遷移確率を求めていく。

まず、超音波吸収の場合であるが、超音波吸収は系の密度を揺動させる外場 (場合 I) に対する応答 (密度応答) であるので、式 (2.31) の上の符号を取ればよい。すると、遷移確率は次のようになる。

$$W_s \approx -|A|^2 N(0)^2 \int_{\Delta}^{\infty} dE' \frac{\partial f(E')}{\partial E'} \omega \\ = |A|^2 N(0)^2 f(\Delta) \omega. \quad (2.32)$$

⁹BCS 超伝導体の典型的なエネルギーギャップが数 meV であるのに対し、超音波の周波数は約 100 MHz ($\sim 10^{-3}$ meV)、核磁気緩和の共鳴周波数は約 10 MHz ($\sim 10^{-4}$ meV) である。

¹⁰Fermi 分布の差は、逆過程の遷移確率を引くことから得られる。

ここで、一段目の式を導く際に、 $\omega \ll |\Delta|$ であるという事実を用いたことを注意しておく。常伝導状態の遷移確率 W_n は、式 (2.32) において $\Delta = 0$ と置けばよいので、 $W_n = |A|^2 N(0)^2 \omega / 2$ となる。したがって、常伝導状態の値との比として、次のように遷移確率 (超音波吸収率) が求まる。

$$\frac{W_s}{W_n} = \frac{2}{1 + e^{\beta\Delta}}. \quad (2.33)$$

図 2.4(a) に、超音波吸収率の温度依存性を示す。ここで、BCS 理論でしばしば用いられる、次の式を使用した。

$$2\Delta(0)/T_c = 3.52, \quad (2.34)$$

$$\Delta = \Delta(0) \tanh \left(1.74 \sqrt{\frac{T_c}{T} - 1} \right). \quad (2.35)$$

$\Delta(0)$ は絶対零度における超伝導ギャップ、 T_c は超伝導転移温度である。図 2.4(a) を見るとわかるように、超音波吸収率は転移温度以下で単調に減少する。そして、このような振る舞いは、式 (2.31) より次のように理解できる。式 (2.31) には、超伝導状態の状態密度 $E'/\sqrt{E'^2 - \Delta^2}$ に由来する $1/\sqrt{E'^2 - \Delta^2}$ という因子が含まれている。この因子は $E' = \Delta$ で発散するが、この発散を抑制しているのがコヒーレンス因子に由来する $E'(E' + \omega) - \Delta^2$ という因子である。今、 ω は $|\Delta|$ に比べて十分に小さいため、この因子は実効的に $E'^2 - \Delta^2$ となっており $E' = \Delta$ で 0 となる。したがって、 $E' = \Delta$ でこの因子が分母の発散を打ち消し、図のような単調減少の振舞いが得られるのである。

続いて、核磁気緩和についてであるが、核磁気緩和は系のスピンを揺動させる外場 (場合 II) に対する応答 (スピン応答) であるため、式 (2.31) の下の符号を取ればよい。すると、遷移確率は次のようになる。

$$W_s \approx -|A|^2 N(0)^2 \int_{\Delta}^{\infty} dE' \frac{E'(E' + \omega) + \Delta^2}{\sqrt{E'^2 - \Delta^2} \sqrt{(E' + \omega)^2 - \Delta^2}} \frac{\partial f(E')}{\partial E'} \omega. \quad (2.36)$$

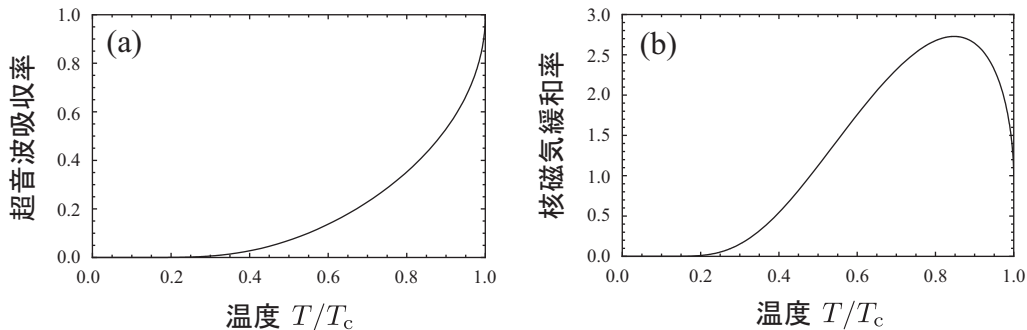


図 2.4: コヒーレンス効果の例. (a) 超音波吸収率の温度依存性. (b) 核磁気緩和率の温度依存性. 横軸は転移温度 T_c で規格化し、縦軸は転移温度における各遷移確率の値で規格化している。

この場合も、常伝導状態での遷移確率は $W_n = |A|^2 N(0)^2 \omega / 2$ となるので、常伝導状態での値との比として次のように遷移確率 (核磁気緩和率) が求まる。

$$\frac{W_s}{W_n} = 2 \int_{\Delta}^{\infty} dE' \frac{E'(E' + \omega) + \Delta^2}{\sqrt{E'^2 - \Delta^2} \sqrt{(E' + \omega)^2 - \Delta^2}} \frac{\partial f(E')}{\partial E'}. \quad (2.37)$$

ここでも、 $\omega \ll |\Delta|$ であるという事実を用いた。このように求めた核磁気緩和率の温度依存性を図 2.4(b) に示す。このグラフでは、式 (2.34) と式 (2.35) の他に、超伝導ギャップより十分小さな外場のエネルギー $\omega/T_c = 0.01$ を用いた。核磁気緩和率は、転移温度直下でピークを示すことがわかる。このピークは、発見者の名を取って Hebel-Slichter ピークと呼ばれている [10]。この温度依存性も、式 (2.31)、あるいは式 (2.37) から容易に理解することができる。先程と同様に、式 (2.37) にも超伝導状態の状態密度に由来する $1/\sqrt{E'^2 - \Delta^2}$ という因子が含まれており、 $E' = \Delta$ で発散する。しかし、このケースでは超音波のケースとは異なって、コヒーレンス因子に由来する因子 $E'(E' + \omega) + \Delta^2$ がその内部の正符号のために $E' = \Delta$ で 0 とならず、有限な値を持つ。したがって、状態密度の発散が打ち消されず、図のようなピークが現れるのである。

ここで、コヒーレンス効果についてまとめておこう。超伝導体に $\omega \ll |\Delta_{\mathbf{k}}|$ である外場をかけた場合の遷移確率 (応答関数) の温度依存性は、次の実効的なコヒーレンス因子によって決定される。¹¹

$$\frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}'}} \right). \quad (2.38)$$

超音波吸収のように系の密度を揺動させる外場をかける場合 (場合 I) には、式 (2.38) の負符号を持つコヒーレンス因子が状態密度の発散を打ち消すため、密度応答関数としての遷移確率はピークを持たずに温度とともに単調減少する。一方、核磁気緩和のように系のスピンを揺動させる外場がかける場合 (場合 II) には、式 (2.38) の正符号を持つコヒーレンス因子が状態密度の発散を打ち消さ

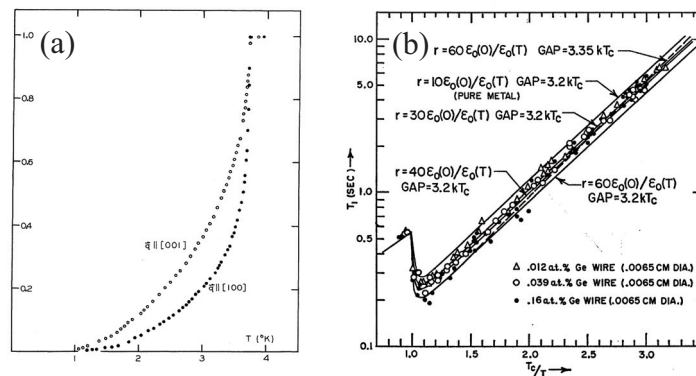


図 2.5: コヒーレンス効果に関する実験結果. (a) Morse らによって測られた超音波吸収率の温度依存性 [11]. (b) Masuda によって測られた核磁気緩和時間 (核磁気緩和率の逆数) の温度依存性 [12].

¹¹ここでは後の議論の都合上、超伝導ギャップの波数依存性を復活させて書いている。

ないため、スピン応答関数としての遷移確率はピークを示してから温度とともに減少する。このような密度応答関数とスピン応答関数の異なる温度依存性は、従来から知られていた2流体理論では説明できないものであった。2流体理論によると、密度・スピン応答関数はともに温度に対して単調減少するという結論になり、スピン応答のピーク構造を説明できなかったのである。したがって、両応答関数に関して実験と理論の一致が確認されたことは、BCS理論の正当性を裏付ける大きな証拠となった(図2.5参照)。

さて、再びコヒーレンス因子(2.38)を見てみよう。コヒーレンス因子の中にはギャップの積 $\Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}'}$ が含まれている。通常のシングルバンドs波超伝導体においては超伝導ギャップが波数に依存しないため、この積は Δ^2 という正の値を取る。しかし、波数 \mathbf{k} と波数 \mathbf{k}' で超伝導ギャップの符号が反転($\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}'}$)していたらどういったことになるであろうか。この場合、ギャップの積 $\Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}'}$ は負の値を取るため、コヒーレンス因子(2.38)内の符号が実効的に反転してしまう。その結果、場合Iの密度応答関数ではピーク構造が見られ、場合IIのスピン応答関数ではピークが見られないという、従来のs波対称性とは全く反対のコヒーレンス効果が期待される。このことを利用すれば、コヒーレンス効果の実験から「ギャップに符号反転があるか否か」を判定することができるだろう。次の第3章で述べるように、鉄系超伝導体では「異なるバンドの超伝導ギャップ間に符号反転があるか否か」という点が、発見当初からの争点となっている。我々は、上述のアイデアを用い、この点を解決する実験を提案する。この点については、第3章で詳しい議論を展開する。

第3章 鉄系超伝導体におけるコヒーレンス効果

前章の後半で、BCS理論の応用であるコヒーレンス効果について述べた。本章では、このコヒーレンス効果を鉄系超伝導体の場合、すなわち、多軌道超伝導体の場合に拡張する。そして、コヒーレンス効果を利用することで鉄系超伝導体のペアリング対称性を決定できることを示す。まず、第3.1節で、鉄系超伝導体の性質、および、これまでに行われてきた先行研究について概説する。そして、続く第3.2節では、鉄系超伝導体におけるコヒーレンス効果について述べた後で、この系のペアリング対称性を決定する実験を提案する。

3.1 鉄系超伝導体

3.1.1 多バンド構造

第1章でも述べたように、高い転移温度を有する鉄系超伝導体は、2008年2月にHosonoグループによって初めて発見された [1].¹ このとき発見された物質は、後に1111系と呼ばれる系に属することとなるLaFeAsOである。この物質の結晶構造は、図3.1のようになっている。LaとOでできた電子供給層に挟まれる形でFeとAsで形成された電子伝導面、鉄ニクトゲン面²が存在することがわかる。この鉄ニクトゲン面の存在は、1111系だけでなく、122系、11系など全ての鉄系超伝導体に共通している。それでは、鉄ニクトゲン面が存在することは、この系にどのような特徴をも

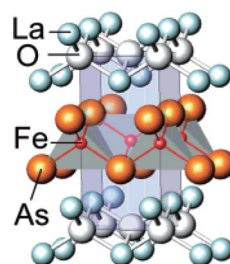


図 3.1: Kamihara らによって発見された LaFeAsO の結晶構造 [1].

¹既に2006年7月に、Hosonoグループによって、鉄化合物 LaFePO [13] が超伝導になることが報告されている。しかし、この超伝導体の転移温度は低く ($T_c = 4$ K), LaFeAsO ($T_c = 26$ K) ほどには話題にならなかった。本論文で用いる「鉄系超伝導体」は「鉄系“高温”超伝導体」を意味しているため、LaFeAsO で超伝導が報告された2008年2月を鉄系超伝導体発見の時とした。

²11系の場合は鉄カルコゲン面となる。

たらずのであろうか。結論から述べると、鉄ニクトゲン面が存在することによって、この系を多バンド超伝導体として考察する必要があるとことがわかる。そのことについて、以下でしばし議論することにしよう。

高温超伝導体の伝導電子について理論的考察を行う際、Fermi 準位に主要な寄与を与える原子軌道に着目して強束縛模型を作ることが、通常よく行われる手続きである。鉄系超伝導体に対してこの手続きを踏む際、多バンド性を考慮せざるを得ないことがわかるが、ここではこの点をより明確に示すために、銅酸化物高温超伝導体の場合と対比して議論を行うことにしよう。

銅酸化物高温超伝導体においては、Fermi 準位近傍を CuO_2 面内の Cu が担っており、その Cu 原子は+2 価を有している。したがって、Cu 原子の $3d$ 軌道に 9 個の電子が存在するという状況となっている。ここで重要なのが、Cu の $3d$ 軌道の配位子場分裂である。銅酸化物高温超伝導体では、O 原子が Cu 原子を正八面体的に囲んでいるため、Cu 原子から出る $3d$ 軌道の波動関数が Coulomb エネルギーの高い e_g 軌道 ($d_{x^2-y^2}$, d_{z^2} 軌道の 2 つ) と Coulomb エネルギーの低い t_{2g} 軌道 (d_{xz} , d_{yz} , d_{xy} 軌道の 3 つ) に分裂する。さらに、正八面体の歪みも考慮に入れると、 t_{2g} 軌道の 2 つも分裂し、 $d_{x^2-y^2}$ が一番エネルギーが高い軌道となる。このような配位子場分裂が生じるため、 $3d$ 軌道に存在する 9 個の電子のうち Fermi 準位を形成する最外殻電子は、一番エネルギーが高い $d_{x^2-y^2}$ 軌道の性質を持つこととなる。このような事情があるため、銅酸化物高温超伝導体の強束縛模型を構築する際には、 $d_{x^2-y^2}$ 軌道の 1 軌道のみが考慮される。そして、波数空間に Fourier 変換すると、単一の Bloch バンドを持つシングルバンド模型が得られ、この模型がこれまでの銅酸化物系の研究で広く使用されてきた。

一方、今回主題となる鉄系超伝導体においては、いずれの物質群においても鉄原子の $3d$ 軌道が Fermi 準位近傍に位置することが角度分解光電子分光 (ARPES) や第一原理計算から明らかになっている。ここで、鉄系超伝導体に特有の事情を考慮しなければならない。それは、この系における「配位子場分裂が極めて小さい」という事情である。銅酸化物系の場合とは異なり、この系ではニクトゲン³が鉄を正四面体的に囲んでいる。この特殊な物質構造のために、配位子場分裂自体は起きるが⁴、その分裂エネルギーが小さいのである。また、鉄系超伝導体においては、鉄の価数が+2 価、すなわち $3d$ 軌道に電子が 6 個詰まった状態となっている。このように、この系では結晶場分裂が小さい上に $3d$ 軌道に中途半端な数の電子が詰まっているため、Fermi 準位近傍を考える際に鉄の $3d$ 軌道 5 つ全てを考えざるを得ないのである。したがって、Wannier 関数を基底とした強束縛模型を作る際にも、5 つの軌道間の電子の跳び移りを考慮に入れた多軌道強束縛模型を作る必要がある。これを波数空間に Fourier 変換し、対角化を行うと、5 つの Bloch バンドによって構成される 5 バンド模型が得られる。ここで、このような多バンド模型の代表的な例として、Kuroki らの模型 [14] を見ていくことにしよう。図 3.2(a) が Bloch バンドの Brillouin ゾーンにおけるバンド分散を、図 3.2(b) がそれを Fermi 準位で見た Fermi 面を示している。(a) より、Fermi 準位近傍に絡ま

³11 系の場合はカルコゲンである。

⁴正四面体の場合には、 t_{2g} 軌道の方が e_g 軌道に比べて Coulomb エネルギーが高くなる。また、分裂エネルギーは正八面体の場合の約半分 (4/9 倍) である。

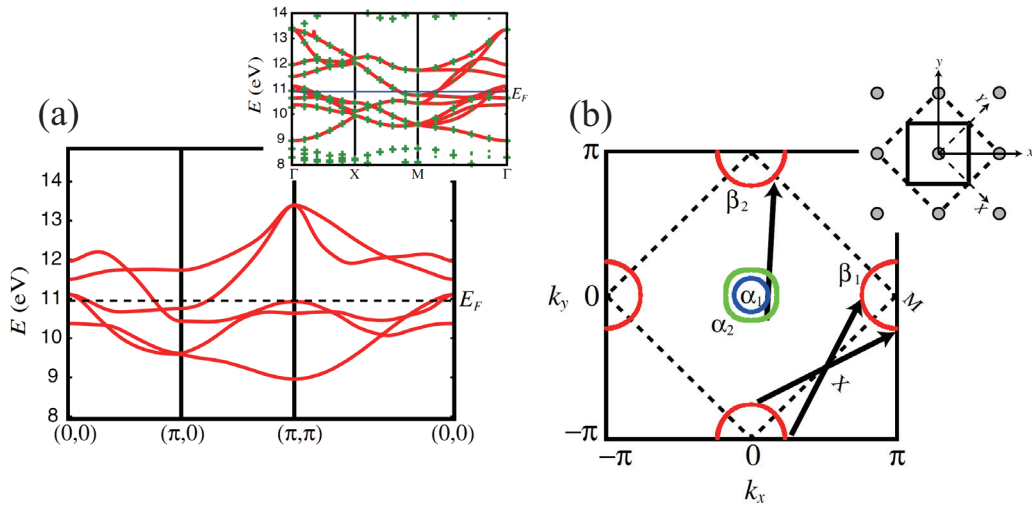


図 3.2: Kuroki らによって提案された 5 バンド模型 [14]. (a) 拡張 Brillouin ゾーンに対する 5 バンド模型. 右上の挿入図は, もとものの 10 バンド模型 (実線, 本文参照) と第一原理計算によって求められたバンド (点線) を比較したもの. (b) 拡張 Brillouin ゾーンにおける非連結 Fermi 面. 矢印は, 可能なネスティングベクトルを表している. また, 右上の挿入図は, ニクトゲンを考慮した場合 (点線) としない場合 (実線) それぞれの単位格子を表している. 丸で示されているのは鉄原子である.

りあった 5 本のバンドが存在すること, また (b) より, 非連結な 4 枚の Fermi 面 ($\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$) が存在すること⁵が確認できる. ここで, 1 つ注意しておきたいのは, 鉄ニクトゲン面の単位格子に関する点である. 鉄ニクトゲン面における単位格子は, 鉄平面の上に位置するニクトゲンと鉄平面の下に位置するニクトゲンの両方を含める必要があるため, 図 3.2(b) の挿入図の点線のようになる. この本来の単位格子はこの挿入図からわかるように鉄原子を 2 つ含んでいる. したがって, この単位格子を用いて模型を構築すると, 図 3.2(a) の挿入図のように 10 バンド模型となり, これに対応する Brillouin ゾーンは (b) の Brillouin ゾーンを点線で折りたたんだものになる. 本来は, このように構築した 10 バンド模型を用いることが正しいのだが, Kuroki らは結晶の対称性を利用することによって 10 バンド模型を 5 バンド模型に単純化している. これは, (b) で折りたたまれた本来の Brillouin ゾーンを点線で開く操作に対応し, (a) で挿入図の 10 バンド模型を開いて大きい図で表わされている 5 バンド模型にするという操作に対応している. このような単純化を行うことで, ペアリング対称性に関する数値計算の計算コストが大幅に軽減されている. Kuroki らは, このようにして構築した模型を用い, この系において期待されるペアリング対称性の検証も行っている. その検証に関しても Kuroki らの研究は先駆的で主要な研究として知られているため, 次の第 3.1.2 節においても, 引き続きこの研究を取り上げていくことにする.

⁵(a) と照らし合わせると, (π, π) 点にも Fermi 面が存在しそうだが, これは Fermi 準位の下に微妙に隠れている.

3.1.2 ペアリング対称性に関する先行研究 (理論編)

超伝導ギャップの波数空間における対称性“ペアリング対称性”は, Cooper 対の形成機構に通ずる極めて重要な超伝導体の性質である. 本小節では, 鉄系超伝導体のペアリング対称性に関してこれまでに行われてきた理論的アプローチについて概説する.

まずは, 先の小節 3.1.1 に引き続き, Kuroki らの研究 [14] を取り上げる. 彼らは, 5 バンド有効模型に基づき, この系で発現するペアリング対称性の検証を行った. 彼らが用いた方法は, 超伝導ギャップに関して線形化したギャップ方程式を数値的に解き, 超伝導ギャップの対称性を決定するというものである. ペアリング対称性に関する説明を行うためには, この系のバンド構造に特有のネスティングについて議論しておく必要がある.

再び図 3.2 をご覧頂きたい. この系では (b) のような非連結な Fermi 面が得られることを説明したが, これらの Fermi 面は 2 つの種類に分類される. Brillouin ゾーンの中央 $(0, 0)$ 点付近に位置する 2 枚の Fermi 面 (α_1, α_2) は (a) のバンド分散の図と照らし合わせると, 上に凸なホールの分散を持っていることがわかる. したがって, これらの Fermi 面は「ホール面」と呼ばれている. 一方, ゾーン境界付近に位置している 2 枚の Fermi 面 (β_1, β_2) は電子的分散を持っており, 「電子面」と呼ばれている. また, これらホール面と電子面はほぼ円形をしており, その円の半径が比較的似通っているということにも注意されたい. さて, このように半径が近く, 逆の曲率を持つ円形 Fermi 面が存在するときには, どのようなことが起こるのであろうか. 詳細は紙面の都合上割愛させて頂くが, このような状況においては一方の Fermi 面からもう一方の Fermi 面への (すなわち, ホール面—電子面間の) 電子散乱が非常に起こりやすくなる.⁶ このような状況は磁気感受率に反映されている. 図 3.3 の Kuroki らによって計算された 5 バンド模型の磁気感受率をご覧頂きたい. これを見ると

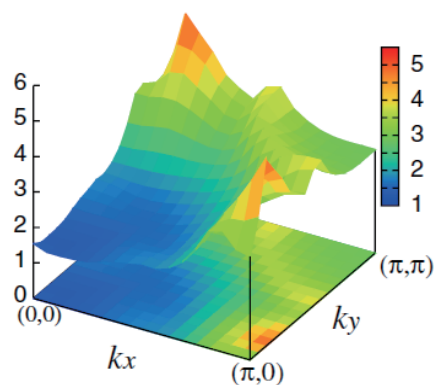


図 3.3: Kuroki らによって計算された 5 バンド模型の磁気感受率 [14]. 縦軸が各波数ごとの磁気感受率の強度を表す.

⁶このような状況はしばしば, 「ネスティングが起きている」と呼ばれる.

わかるように、波数が $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ のところで感受率が非常に大きな値を示している。これはそのような波数を与えたときに系の応答が大きい、つまり、そのような波数の電子散乱が非常に起こりやすいということを意味している。 $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ はホール面と電子面を差し渡す波数ベクトルであるから、確かにホール面—電子面間での電子散乱が起こりやすい状況になっていることがわかる。また、この鉄系超伝導体では、ホール面と電子面を差し渡すベクトル $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$, $(0, \pi)$ はネスティングベクトルと呼ばれる。

さて、本系ではこのようなネスティングが起こりやすいという事情を踏まえた上でペアリング対称性に関する Kuroki らの計算結果を見ていくことにしよう。Kuroki らが解析したギャップ方程式は、細かな事情を考慮せずに書き下すと、次のような形を取っている。

$$\Delta(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{\tanh[\beta E(\mathbf{k}')/2]}{2E(\mathbf{k}')} \Delta(\mathbf{k}'). \quad (3.1)$$

これは、第2章で紹介したギャップ方程式 (2.16) と全く同じ形になっている。ここで、 $\Delta(\mathbf{k})$ は波数 \mathbf{k} における超伝導ギャップ、 $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ は電子間の有効相互作用、 $E(\mathbf{k})$ は波数 \mathbf{k} における準粒子のエネルギーを表している。このギャップ方程式を用いて超伝導ギャップの計算を行うとホール面に開く超伝導ギャップと電子面に開く超伝導ギャップが逆の符号を持った s 波対称性「 s_{+-} 波対称性」が最も安定であることがわかる。この対称性の模式図を図 3.4 に示す。⁷ ここで、なぜこのような対称性が安定なのかということについて述べておくことにしよう。先ほどから述べてきたように、この系においてはネスティングが起こりやすいという事情がある。この点は、式 (3.1) のギャップ方程式中の有効相互作用 $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ に反映される。Kuroki らが行った乱雑位相近似を用いた弱相関側からのアプローチでは、有効相互作用 $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ の中に先に述べた磁気感受率が入っている。そのため、有効相互作用 $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ は $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{Q}$ (\mathbf{Q} はネスティングベクトル) において大きな値を取り、符号としては電子間 Coulomb 斥力を反映して正符号となっている。そこで式 (3.1) のギャップ

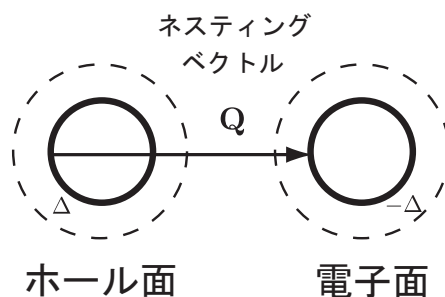


図 3.4: s_{+-} 波対称性の模式図。太線は Fermi 面を表しており、それを囲む点線は各 Fermi 面に開く超伝導ギャップを表す。ネスティングベクトル \mathbf{Q} は、ホール面と電子面を差し渡す波数ベクトルである。

⁷ここでは、ホール面と電子面それぞれ1つずつを含む簡略化した図を示すが、もちろん他の Fermi 面においても超伝導ギャップが開いている。

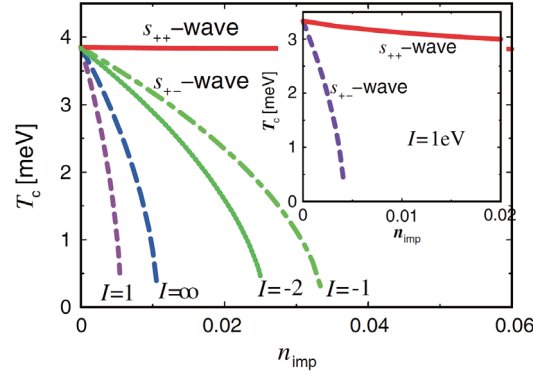


図 3.5: Onari と Kontani によって計算された超伝導転移温度の不純物濃度依存性 [20]. ほぼ平坦な濃度依存性を示している線が s_{++} 波対称性に関するものであり, 残りの線はすべて s_{+-} 波対称性に関するものである. s_{++} 波対称性における不純物強度は $I = 1 \text{ eV}$ である. 挿入図は, 等しい不純物強度における拡大図である.

方程式を見ると, このような状況においては波数 \mathbf{k} における超伝導ギャップ $\Delta(\mathbf{k})$ と波数 $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ における超伝導ギャップ $\Delta(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ を異符号にすることでギャップ方程式の両辺の符号が揃い,⁸ 方程式が閉じることがわかる. このような理由で, ホール面に開くギャップと電子面に開くギャップが異符号を取る s_{+-} 波対称性が安定となるのである. このようにして提案された s_{+-} 波対称性はほぼ同時期に Mazin ら [15] によっても提案され,⁹ 一躍注目を集めるようになった. その後, 鉄の $3d$ 軌道にニクトゲンの $4p$ 軌道も加えた 16 バンド $d-p$ 模型について行われた乱雑位相近似による計算 [16], 5 軌道模型について行われた摂動論による計算 [17], 汎関数線り込み群法を用いた計算 [18, 19] においても s_{+-} 波対称性が最有力であるという報告がなされ, s_{+-} 波対称性が確固たる地位を築きつつあるように見えた.

しかしながら, Mazin ら [15] や Kuroki ら [14] の論文が出版されてから約 1 年後, Onari と Kontani によって s_{+-} 波対称性に関する問題点が指摘された [20]. 彼らは, 一部の置換効果の実験が s_{+-} 波対称性と矛盾するのではないかと主張したのである. 図 3.5 に Onari と Kontani によって計算された超伝導転移温度の不純物濃度依存性を示す. これを見ると, s_{+-} 波対称性は数パーセントの不純物で転移温度が消失してしまう (つまり, この対称性では, 少し不純物が入っただけで超伝導になることができない) ということがわかる. 鉄系超伝導体の不純物に対して強いということが鉄サイトへの置換効果の実験で指摘されているため [21], これは s_{+-} 波対称性と矛盾するということである. そして彼らは, s_{+-} 波対称性よりも有望なペアリング対称性の候補として, ホール面に開くギャップと電子面に開くギャップが同じ符号を持つ s_{++} 波対称性を提案した (図 3.6 参照). 図 3.5 により, この対称性は s_{+-} 波対称性と比較して不純物に対して極めて強いことがわかる. 彼らはこの提案を補足する形で, どのような機構でこの s_{++} 波対称性が安定化するのかということについて

⁸ $E(\mathbf{k}) > 0$ であることに注意.

⁹ 正確には Mazin らの論文の方が Kuroki らの論文より少し早く出版されているが, 今回は有効模型についての記述, ペアリング対称性に関する計算がより詳細であるという理由で Kuroki らの論文を中心に据え紹介させて頂いた.

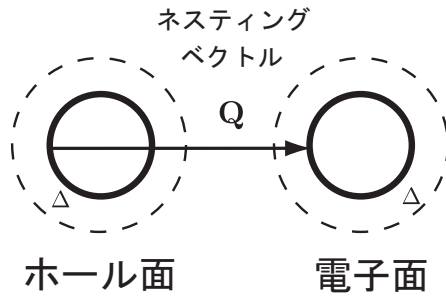


図 3.6: s_{++} 波対称性の模式図. 太線は Fermi 面を表しており, それを囲んでいる点線は各 Fermi 面に開く超伝導ギャップを表している. ネスティングベクトル \mathbf{Q} はホール面と電子面を差し渡す波数ベクトルである.

でも解析を行った [22]. その結果, 鉄原子の振動に由来する電子格子相互作用によって $3d$ 軌道の軌道揺らぎが誘発され, s_{++} 波対称性が安定化するという結論を導いた.

ここまで, 鉄系超伝導体のペアリング対称性に関する先行研究のうちで, s_{+-} 波対称性, s_{++} 波対称性に関するものを中心に説明してきた. 弱相関側からのアプローチにおいては, ドープ量を変えたときにノードを含む s_{+-} 波対称性が得られるということも指摘されているが, その詳細についてはここでは割愛させて頂く.

3.1.3 ペアリング対称性に関する先行研究 (実験編)

前小節 3.1.2 においては, 鉄系超伝導体のペアリング対称性の 2 つの候補 (s_{+-} 波対称性と s_{++} 波対称性) について言及した. しかしながら, これら 2 つの対称性のうち, どちらが現実の鉄系超伝導体で実現しているのかという点は, 未だに明らかにされていない. 本小節では, これまでにペアリング対称性を同定するために行われてきた実験的アプローチについて述べる.

最初に議論された点は, 超伝導ギャップにノードがあるか否かという点である.¹⁰ 発見当初はノードが存在すると主張する実験グループも数多く存在したが, 発見から時間が経過し, より純良で大きな単結晶が作成可能になったことにより, ノードの有無について見解が定まってきた. そこで大きな役目を果たした実験は, ARPES [23–25] と磁場侵入長測定実験 [26] である. ARPES に関して Ding らによって行われた $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ に対する実験結果 [23] を見ていく (図 3.7 参照). このデータを見ると, ホール面と電子面の両方を含む全ての Fermi 面においてノードがないほぼ等方的な超伝導ギャップが開いていること (s 波対称性) がわかる. さらに, 挿入図に示された各超伝導ギャップの温度依存性を見ると, 低温で平坦な温度依存性を確認することができる. これは, ノードがない s 波対称性に特有の温度依存性であり, この系の超伝導ギャップが s 波対称性であることを強く示唆しているように思われる. 続いて, 図 3.8 に示した Hashimoto らの PrFeAsO_{1-y} に対する

¹⁰ここでは P (リン) をドープした 122 系を除いて議論する. この $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ という物質においてはノードの存在が強く示唆されている.

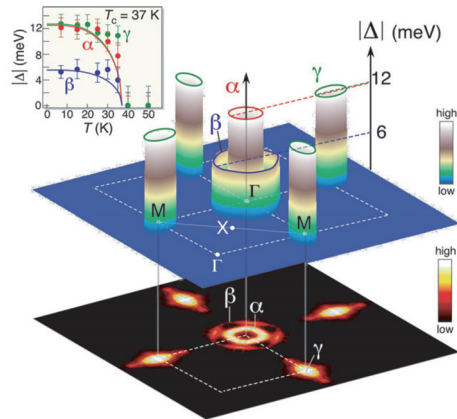


図 3.7: Ding らによる ARPES の結果 [23]. 縦軸が各 Fermi 面に開いたギャップの大きさを示している. また, 挿入図は超伝導ギャップの温度依存性である.

磁場侵入長測定の結果 [26] をご覧頂きたい. このデータは磁場侵入長の温度依存性を示しており, 低温になるにつれて磁場侵入長が指数関数的に減少していく様子が見て取れる. 挿入図は低温領域のデータを拡大したものであるが, 拡大しても実線で示された $\exp(-\beta\Delta)$ という曲線に実によくフィットすることがわかる. 磁場侵入長におけるこのような指数関数的な減少も s 波対称性に特有の振舞いであり, このデータも s 波対称性の有力な証拠であると考えられる.

ここまでは s 波か否か, すなわち, ノードの有無に関する実験結果について述べてきたが, ペアリング対称性に関してもう 1 つの重要な事項は, 超伝導ギャップの符号 (位相) の決定である. この点に関しては第 1 章でも触れたように, 未だに報告が少ない. ノードがない s 波であることが判明し

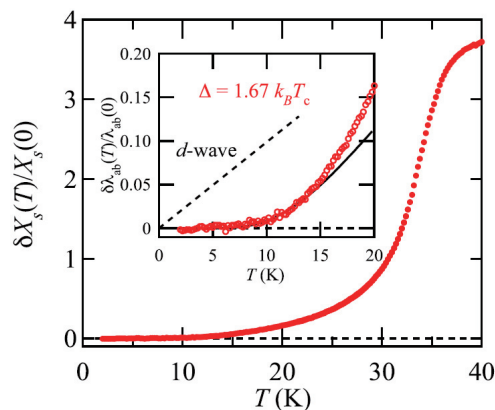


図 3.8: Hashimoto らによって測定された磁場侵入長の温度依存性 [26]. 挿入図は低温領域の拡大図. 挿入図中の点線はノードを持つ d 波対称性に特有の線形な温度依存性, 実線はノードを持たない s 波対称性に特有の指数関数的な温度依存性である.

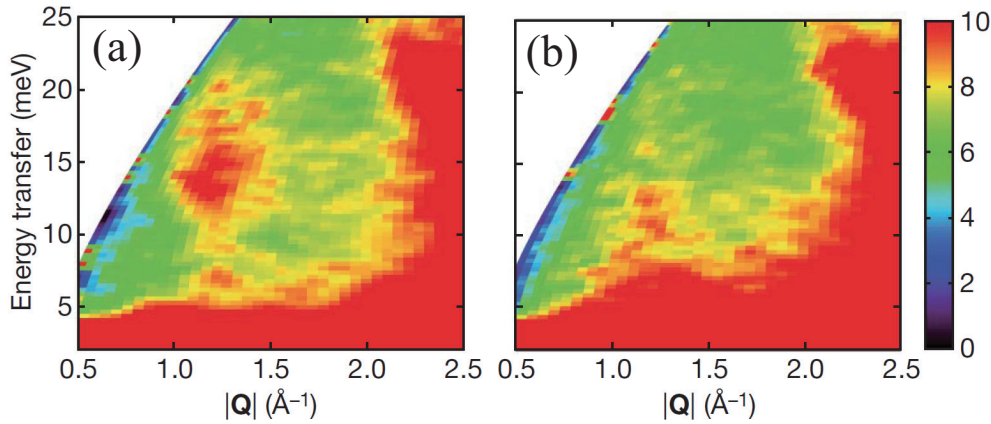


図 3.9: Christianson らによって測定された磁気感受率の温度・エネルギー依存性 [27]. 色の濃さで感受率の大きさを表している. (a) 7 K (超伝導転移温度以下) におけるデータ. (b) 50 K (超伝導転移温度以上) におけるデータ.

てきたのであるから, s_{+-} 波か s_{++} 波かを実験的に見分けられればよいのであるが, 超伝導ギャップの絶対値に比べて位相を測定することは極めて難しく, 未だその判定には至っていない. しかしながら, いくつかのグループが超伝導ギャップの位相の決定を念頭に置いた実験を行っており, 一定の成果が得られている. ここでは, その結果について紹介する. まず1つ目として, 中性子散乱を用いたペアリング対称性判定実験 [27] について述べる. この実験は, Korshunov ら [28] や Maier ら [29] による理論的な提案を受けて行われたものである. これらの理論研究では, もし s_{+-} 波対称性が実現しているならば, 中性子散乱実験で測られる磁気感受率に共鳴ピークが存在することが示されていた.¹¹ Christianson らの実験結果を図 3.9 に示す. (a) と (b) を比べると, 超伝導転移温度以下の場合に, 確かに共鳴ピークに対応すると思われるスポットがグラフの中央やや左に現れていることがわかる. この実験結果は s_{+-} 波対称性の有力な証拠ではないかと言われているものの, 共鳴ピークが s_{++} 波対称性でも再現可能であると主張しているグループもあり [30], s_{+-} 波の証拠であると断言することは難しいように思われる.

中性子散乱実験の他に, ギャップの位相を含めたペアリング対称性を検証する実験がもう1つ行われている. それは, 走査型トンネル分光測定 (STS) を用いた方法 [31] である. この実験は, 超伝導体に磁場をかけて渦を入れ, 渦が入る前後の磁気散乱因子の強度変化を観測するというものである. ここではその原理についての説明は省略するが, 渦が入ったことによってネスティングベクトル近傍の磁気散乱因子が減少していれば s_{+-} 波対称性を支持するデータと言える. その実験結果

¹¹この理論は, 我々の研究と密接な関係があるので, 後の第 3.2.2 節で再び言及する. なお, 後の第 3.2.4 節で我々が提案する中性子散乱実験とこの実験とは同じ中性子散乱でも着目しているエネルギー・温度領域が全く異なることに注意して頂きたい. この点については, 第 3.2.2 節で詳細な説明を行う.

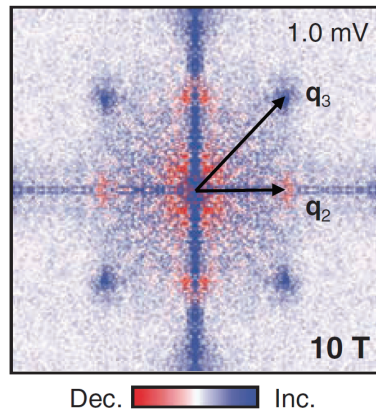


図 3.10: Hanaguri らによって測定された, 渦導入前後の磁気散乱因子の強度比 [31]. q_2 がネスティングベクトルに対応している.

を見ていくことにしよう. 図 3.10 に, 渦導入前後の磁気散乱因子の強度比を示す. q_2 がネスティングベクトルに対応しているが, このベクトルの近傍で磁気散乱強度が減少していることがわかる.¹² したがって, この実験は s_{+-} 波対称性の 1 つの証拠となりうると言えよう. しかしながら, この STS という実験手法は物質の表面状態に敏感な実験であり, 結果がバルクの性質をきちんと反映しているかということについては, 今後の追試によって確かめられる必要がある.

このように, 超伝導ギャップの位相の決定も含めたペアリング対称性検証実験は数えるほどしかない. したがって, 今後様々な実験手段を利用し, この点を明らかにしていく必要がある. 我々はこのような経緯を受け, 次の第 3.2 節でペアリング対称性検証実験の理論的提案を行う.

3.2 鉄系超伝導体におけるコヒーレンス効果

本節では, ペアリング対称性決定実験の提案を行う. 我々は, 第 2.2 節の最後に述べたアイデアに基づき, s_{+-} 波対称性, s_{++} 波対称性のそれぞれの場合で, 密度・スピン両応答関数の温度依存性を計算する. まず小節 3.2.1 では, 応答関数の計算に用いる 2 バンド BCS 模型を構築する. 小節 3.1.1 で述べたように, 鉄系超伝導体に対する模型を作る際, 正確には鉄の $3d$ 軌道 5 つ全てを考慮に入れ, 5 バンド模型を構築する必要がある. しかしながら, 今回のように応答関数におけるコヒーレンス効果のみを論じる場合には, 2 バンド模型を用いて計算をしても, 定性的な結果は変化しないであろうことが予測される. したがって, 本研究では 2 バンド BCS 模型を採用する. 続く小節 3.2.2 では, 前小節で構築した模型を用い, 応答関数を解析的に計算する. 被積分関数が複雑であるために最後の波数に関する積分は解析的に実行できないが, 解析的に得られた表式の範囲内で考察可能なことを述べる. 期待していたコヒーレンス効果が起きうるであろうことは, その解析的表式

¹²白黒印刷の本紙面だとわかりづらいが, 原論文ではカラープリントなので減少していることがはっきりわかる.

から十分に考察可能である。続く小節 3.2.3 では、応答関数に残された波数積分を数値的に実行した結果を示す。その結果、確かに第 2.2 節で予想したコヒーレンス効果が得られることを確認することができる。最終小節 3.2.4 では、前小節までの結果を踏まえ、具体的にどのような実験を行えば鉄系超伝導体のペアリング対称性を決定できるかという点について述べる。最後に、鉄系超伝導体に不純物が含まれる場合の考察も行う。

3.2.1 2 バンド BCS 模型

出発点として、我々は Raghun らによって提案された 2 バンド強束縛模型 [32] を採用する。この模型は、鉄の 5 つの 3d 軌道のうち 2 つ (d_{xz} と d_{yz}) を考慮している。強束縛ハミルトニアン \mathcal{H}_0 は次のように与えられる。

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) [(\epsilon_{+}(\mathbf{k}) - \mu) 1 + \epsilon_{-}(\mathbf{k})\tau_3 + \epsilon_{xy}(\mathbf{k})\tau_1] \psi_{\sigma}(\mathbf{k}), \quad (3.2)$$

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} d_{x\sigma}(\mathbf{k}) \\ d_{y\sigma}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

ここで、 $d_{x\sigma}(\mathbf{k})$ [$d_{y\sigma}(\mathbf{k})$] は d_{xz} (d_{yz}) 軌道に属し、スピン σ 、波数 \mathbf{k} を持つ電子の消滅演算子、 τ_i は Pauli 行列、 μ は化学ポテンシャルを表している。また、1 体エネルギーの定義は次のようになっている。

$$\begin{aligned} \epsilon_{\pm}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} [\epsilon_x(\mathbf{k}) \pm \epsilon_y(\mathbf{k})], \\ \epsilon_x(\mathbf{k}) &= -2t_1 \cos k_x - 2t_2 \cos k_y - 4t_3 \cos k_x \cos k_y, \\ \epsilon_y(\mathbf{k}) &= -2t_2 \cos k_x - 2t_1 \cos k_y - 4t_3 \cos k_x \cos k_y, \\ \epsilon_{xy}(\mathbf{k}) &= -4t_4 \sin k_x \sin k_y. \end{aligned} \quad (3.4)$$

ここで、 t_1 と t_2 (t_3 と t_4) は次近接サイト (第 2 近接サイト) への跳び移り積分である。

このように導入した強束縛模型を対角化することで、次のように 2 バンド模型が得られる。

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \nu = \pm} \xi_{\nu}(\mathbf{k}) \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}). \quad (3.5)$$

ここで、

$$\xi_{\pm}(\mathbf{k}) = \epsilon_{+}(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\epsilon_{-}^2(\mathbf{k}) + \epsilon_{xy}^2(\mathbf{k})} - \mu \quad (3.6)$$

は各バンドのエネルギー固有値であり、 $\gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k})$ はバンド ν に属しスピン σ 、波数 \mathbf{k} を持つ Bloch 電子の消滅演算子である。またこの際、先に導入した軌道に属する電子の消滅演算子 $d_{r\sigma}(\mathbf{k})$ とバン

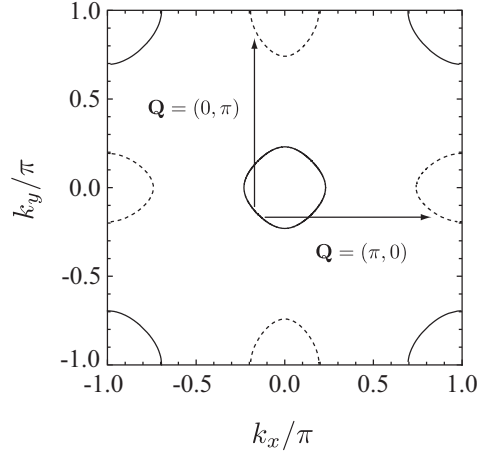


図 3.11: Raghu らによって提案された 2 バンド模型の Fermi 面 [32]. 実線 (破線) はホール面 (電子面), 矢印はネスティングベクトルを表している.

ドに属する Bloch 電子の消滅演算子 $\gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k})$ は次のように関係づけられる.

$$d_{r\sigma}(\mathbf{k}) = \sum_{\nu=\pm} a_{\nu}^r(\mathbf{k})\gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}), \quad (3.7)$$

$$a_{+}^x(\mathbf{k}) = a_{-}^y(\mathbf{k}) = \text{sgn}[\epsilon_{xy}(\mathbf{k})] \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{\epsilon_{-}(\mathbf{k})}{2\sqrt{\epsilon_{-}^2(\mathbf{k}) + \epsilon_{xy}^2(\mathbf{k})}}}, \quad (3.8)$$

$$a_{+}^y(\mathbf{k}) = -a_{-}^x(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_{-}(\mathbf{k})}{2\sqrt{\epsilon_{-}^2(\mathbf{k}) + \epsilon_{xy}^2(\mathbf{k})}}}. \quad (3.9)$$

図 3.11 に, この 2 バンド模型の Fermi 面を示す. ベクトル $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ は, ホール面と電子面をつなぐネスティングベクトルである. 本論文を通じて, 跳び移り積分, 化学ポテンシャルの値は, Raghu ら [32] によって使用されている次の値を用いる: $t_1 = -1.0$, $t_2/|t_1| = 1.3$, $t_3/|t_1| = t_4/|t_1| = -0.85$, $\mu/|t_1| = 1.45$. このようにして求められた 2 バンド模型に, 平均場近似された BCS 型の相互作用項 \mathcal{H}' を次のように付け加え 2 バンド BCS 模型とする.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}', \quad (3.10)$$

$$\mathcal{H}' = -\sum_{\mathbf{k}, \nu=\pm} \left[\Delta_{\nu}\gamma_{\nu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k})\gamma_{\nu\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) + \Delta_{\nu}\gamma_{\nu\downarrow}(-\mathbf{k})\gamma_{\nu\uparrow}(\mathbf{k}) \right]. \quad (3.11)$$

ここで, Δ_{ν} はバンド ν の超伝導ギャップである. このモデルにおいて, $\Delta_{+} = -\Delta_{-}$ ($\Delta_{+} = \Delta_{-}$) という条件がそれぞれ s_{+-} (s_{++}) 波対称性の場合に対応する. このハミルトニアン (3.10) を用いる

と, 次のように正常, 異常 Green 関数が求まる (定義, 導出については付録 A を参照).

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_\nu(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \frac{i\omega_n + \xi_\nu(\mathbf{k})}{(i\omega_n)^2 - E_\nu^2(\mathbf{k})}, \\ \mathcal{F}_{\nu, \sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= F_{\nu, \sigma\bar{\sigma}}^\dagger(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\sigma\Delta_\nu}{(i\omega_n)^2 - E_\nu^2(\mathbf{k})}.\end{aligned}\quad (3.12)$$

ここで, ω_n はフェルミオンに対する Matsubara 周波数, $E_\nu(\mathbf{k}) = \sqrt{\xi_\nu^2(\mathbf{k}) + \Delta_\nu^2}$, $\sigma = \uparrow, \downarrow = 1, -1$ である. また, この後の節では応答関数の温度依存性を計算する. その際, 数値計算をより簡単に行うために, 次のような超伝導ギャップの温度依存性を仮定する.

$$\Delta_\nu \simeq \Delta_\nu^{(0)} \tanh\left(1.74\sqrt{\frac{T_c}{T} - 1}\right).\quad (3.13)$$

3.2.2 応答関数の計算

本小節では, 前小節で導入した 2 バンド BCS 模型を用い, 密度およびスピン応答関数を計算する.¹³ 計算の手順はどちらも同様なので, ここでは密度応答関数の計算のみを詳しく解説する. 密度応答関数は, 系の密度を揺動させる外場が加えられた際に系に生じる応答を表す. この密度応答関数 $D(\mathbf{q}, i\omega_m)$ は, Kubo 公式に従うと, 密度密度相関関数によって次のように与えられることが知られている.

$$D(\mathbf{q}, i\omega_m) = - \sum_{rt} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau} \langle T_\tau \rho_r(\mathbf{q}, \tau) \rho_t(-\mathbf{q}, 0) \rangle.\quad (3.14)$$

ここで, ω_m はボソンの Matsubara 周波数,¹⁴ T_τ は虚時間 τ に関する時間順序演算子, また r, t は軌道を指定する添え字であり, $\rho_r(\mathbf{q}, \tau)$ は次のように定義される.

$$\rho_r(\mathbf{q}, \tau) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} d_{r\sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) d_{r\sigma}(\mathbf{k}, \tau).\quad (3.15)$$

式 (3.7) と式 (3.15) を用い, 式 (3.14) をバンド表示で表すと次のようになる.

$$\begin{aligned}D(\mathbf{q}, i\omega_m) &= - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{rt} \sum_{\nu_1, \dots, \nu_4} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau} \\ &\quad \times a_{\nu_1}^r(\mathbf{k} + \mathbf{q}) a_{\nu_2}^r(\mathbf{k}) a_{\nu_3}^t(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) a_{\nu_4}^t(\mathbf{k}') \\ &\quad \times \langle T_\tau \gamma_{\nu_1\sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \gamma_{\nu_2\sigma}(\mathbf{k}, \tau) \gamma_{\nu_3\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, 0) \gamma_{\nu_4\sigma'}(\mathbf{k}', 0) \rangle.\end{aligned}\quad (3.16)$$

¹³第 2.2 節では系の密度・スピンを揺動させる外場がかかった際の遷移確率を計算したが, ここで計算する密度・スピン応答関数はそれらと等価なものである.

¹⁴最終的には $i\omega_m \rightarrow \omega + i\delta$ と解析接続するため, ボソンの Matsubara 周波数を直接計算に利用することはない.

ここで、この応答関数をワnlループ近似¹⁵する。ワnlループ近似は、応答関数等の2粒子 Green 関数を1粒子 Green 関数の積の和として表現する近似法である。その結果、次の表式が得られる(計算の詳細は付録 B を参照)。

$$\begin{aligned}
D(\mathbf{q}, i\omega_m) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{rt} \sum_{\nu\nu'} \\
&\times a_{\nu}^r(\mathbf{k} + \mathbf{q}) a_{\nu'}^r(\mathbf{k}) a_{\nu'}^t(\mathbf{k}) a_{\nu}^t(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
&\times [\mathcal{G}_{\nu'}(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n - i\omega_m) \\
&- \mathcal{F}_{\nu', \bar{\sigma}\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{F}_{\nu, \sigma\bar{\sigma}}^{\dagger}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + i\omega_m)]. \tag{3.17}
\end{aligned}$$

ここで、平均場ハミルトニアンに対して求めた Green 関数 (3.12) を代入する。さらに、フェルミオンに対する Matsubara 周波数 ω_n について和をとり、¹⁶ 解析接続 $i\omega_m \rightarrow \omega + i\delta$ を実行する。すると、最終的に次の表式が導出される(計算の詳細は付録 B を参照)。

$$\begin{aligned}
D(\mathbf{q}, \omega + i\delta) &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{rt} \sum_{\nu\nu'} a_{\nu}^r(\mathbf{k} + \mathbf{q}) a_{\nu'}^r(\mathbf{k}) a_{\nu'}^t(\mathbf{k}) a_{\nu}^t(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
&\times \left[\frac{1 - f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 - \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) + \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu}}{E_{\nu'}(\mathbf{k}) E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \right. \\
&- \frac{1 - f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 - \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) + \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu}}{E_{\nu'}(\mathbf{k}) E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \\
&- \frac{f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) - \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu}}{E_{\nu'}(\mathbf{k}) E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \\
&\left. + \frac{f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega + E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 - \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 - \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) - \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu}}{E_{\nu'}(\mathbf{k}) E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \right]. \tag{3.18}
\end{aligned}$$

式 (3.18) の大括弧内の第1項と第2項は Cooper ペアの対生成・対消滅に関する励起過程に対応しており、第3項と第4項は熱励起された準粒子が散乱される励起過程に対応している。また、 $1/2 \{ \dots \}$ がコヒーレンス因子であり、計4つのコヒーレンス因子が式 (3.18) に含まれている。

続いて、スピン応答関数について述べる。スピン応答関数は、系のスピンを揺動させる外場が加えられた際に系に生じる応答を表す。Kubo 公式より、スピン応答関数もスピンスピン相関関数と次のように関係づけられる。

$$\chi^{+-}(\mathbf{q}, i\omega_m) = - \sum_{rt} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_m \tau} \langle T_{\tau} S_r^+(\mathbf{q}, \tau) S_t^-(\mathbf{-q}, 0) \rangle. \tag{3.19}$$

¹⁵ 今回のハミルトニアンは平均場近似されているので、応答関数を厳密に計算することが可能である。その結果は本論文で計算したワnlループ近似の結果に一致する。したがって、近似とはいっても、今回の平均場ハミルトニアンに対する厳密な応答関数を計算していることと等価である。

¹⁶ Matsubara 周波数の和の取り方については、Zagoskin の教科書 [33] および Fetter の教科書 [34] が参考になる。

ここで, r, t はやはり軌道を指定する添え字であり, $S_r^+(\mathbf{q}, \tau)$ と $S_r^-(\mathbf{q}, \tau)$ は次のように定義される.

$$S_r^+(\mathbf{q}, \tau) = (S_r^-(\mathbf{q}, \tau))^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} d_{r\uparrow}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) d_{r\downarrow}(\mathbf{k}, \tau). \quad (3.20)$$

先の密度応答の場合と同様に計算すると, 最終的に次の表式を得る.

$$\begin{aligned} \chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega + i\delta) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{rt} \sum_{\nu\nu'} a_{\nu'}^r(\mathbf{k} + \mathbf{q}) a_{\nu'}^r(\mathbf{k}) a_{\nu'}^t(\mathbf{k}) a_{\nu}^t(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\ &\times \left[\frac{1 - f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})}\right) \left(1 - \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}\right) - \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu}}{E_{\nu'}(\mathbf{k}) E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \right. \\ &\quad - \frac{1 - f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 - \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})}\right) \left(1 + \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}\right) - \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu}}{E_{\nu'}(\mathbf{k}) E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \\ &\quad - \frac{f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})}\right) \left(1 + \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}\right) + \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu}}{E_{\nu'}(\mathbf{k}) E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \\ &\quad \left. + \frac{f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega + E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 - \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})}\right) \left(1 - \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}\right) + \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu}}{E_{\nu'}(\mathbf{k}) E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \right]. \quad (3.21) \end{aligned}$$

ここで, 応答関数に含まれるコヒーレンス因子について説明する. 特に, 次の2つのパラメタ領域に着目して議論する.

- (i) $\omega \approx |\Delta_{\nu'}^{(0)}| + |\Delta_{\nu}^{(0)}|, T \ll T_c.$
- (ii) $\omega \ll |\Delta_{\nu'}^{(0)}| + |\Delta_{\nu}^{(0)}|, 0 \leq T \leq T_c.$

まず, 領域 (i) についてであるが, この領域では両応答関数の大括弧中の第1, 2項が主要な寄与を与える. $T \ll T_c$ では $f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \approx 0$ であり, 第3, 4項の寄与が極めて小さいことがその理由である. したがって, Cooper 対の対生成・対消滅に関する次のコヒーレンス因子に着目すればよい.

$$\frac{1}{2} \left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})}\right) \left(1 - \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}\right) \pm \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu}}{E_{\nu'}(\mathbf{k}) E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\}. \quad (3.22)$$

式(3.22)の上(下)の符号は密度(スピン)応答関数の場合に対応する. s_{+-} 波対称性の場合 ($\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu} < 0$) には, $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ (ネスティングベクトル) においてコヒーレンス因子中の $\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu} / E_{\nu'} E_{\nu}$ の前の符号が実効的に反転する. すでに Korshunov ら [28] や Maier ら [29, 35] によって指摘されているように, この符号反転は中性子散乱実験における共鳴ピークを生むことが期待される. 実際, Christianson らによってこのような共鳴ピークが観測されたという報告がなされており, s_{+-} 波対称性の有力な証拠の1つとなっている [27].

続いて, 本研究において着目する領域 (ii) について言及する. この領域では $\omega \ll |\Delta_{\nu'}^{(0)}| + |\Delta_{\nu}^{(0)}|$ なので, 応答関数の大括弧内, 第1, 2項中の $\delta(\omega - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))$ と $\delta(\omega + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))$

が0となり, 第3, 4項が主要な寄与を与える. したがって, 次のコヒーレンス因子に着目する.

$$\frac{1}{2} \left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \mp \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu}}{E_{\nu'}(\mathbf{k}) E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\}. \quad (3.23)$$

式 (3.23) の上 (下) の符号は密度 (スピン) 応答関数の場合に対応する. ここで, 領域 (ii) における $\Delta_{\nu'} \Delta_{\nu} / E_{\nu'} E_{\nu}$ の前の符号は領域 (i) のそれと全く反対であることに注意する. 領域 (ii) において, このようなコヒーレンス因子の符号は応答関数の温度依存性に影響を及ぼす. 例として, s_{++} 波対称性の場合を考えてみよう. このとき, 密度応答においては状態密度の発散をコヒーレンス因子が打ち消す. したがって, 密度応答関数は超伝導転移温度 T_c 以下で単調に減少する. 一方, スピン応答においてはコヒーレンス因子が状態密度の発散を打ち消さないため, スピン応答関数は T_c 直下にピーク (コヒーレンスピーク) を持つ. つまり, コヒーレンス因子は状態密度の発散から来る寄与を制御する一種の “スイッチ” のような役割をしている. 先の第2章でも述べたように, この点がコヒーレンス効果の要点であった.

3.2.3 数値計算の結果

前小節では波数に関する積分を残して, 応答関数を解析的に計算した. 本小節では, 残された波数に関する積分を数値的に実行した結果を示す.

図 3.12 に密度応答関数の温度依存性を示す. s_{+-} 波対称性の場合には, 密度応答は T_c 直下においてピークを示す. 一方, s_{++} 波対称性においては, 密度応答関数は単調減少する. s_{+-} 波の場合, ν バンドの超伝導ギャップと ν' バンドの超伝導ギャップはネスティングベクトル \mathbf{Q} (ホールバンドと電子バンドを差し渡す波数ベクトル) で異符号を取る. したがって, $\Delta_{\nu} \Delta_{\nu'}$ という超伝導ギャップの積は負符号を取り, コヒーレンス因子 (3.23) 内の上符号 “-” が実効的に反転することになる.

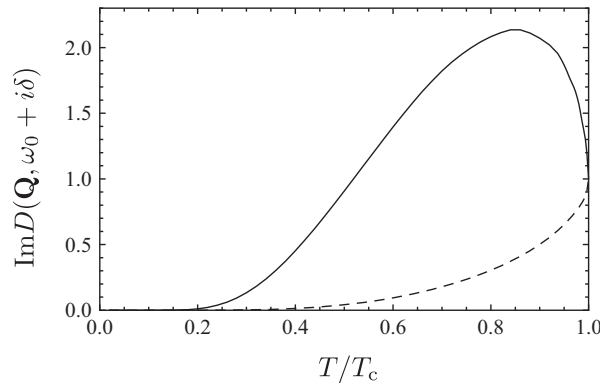


図 3.12: T_c で の値で規格化された密度応答関数の温度依存性. パラメタとして次の値を使用した. $|\Delta_+^{(0)}|/|t_1| = |\Delta_-^{(0)}|/|t_1| = 0.05$, $T_c/|t_1| = 0.03$, $\omega_0/|t_1| = 0.001$, $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$, $\delta/|t_1| = 0.0001$. 実線は s_{+-} 波対称性の場合, 破線は s_{++} 波対称性の場合を表す.

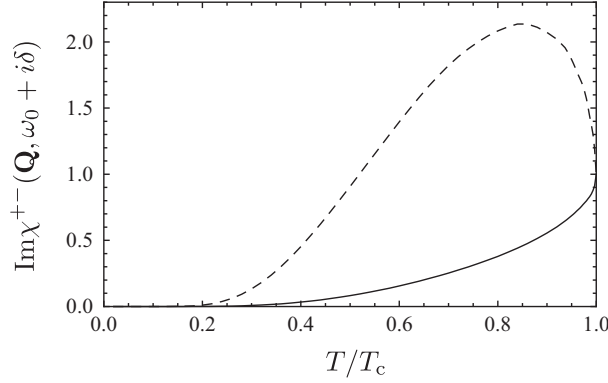


図 3.13: T_c での値で規格化されたスピン応答関数の温度依存性. パラメタとして次の値を使用した. $|\Delta_+^{(0)}|/|t_1| = |\Delta_-^{(0)}|/|t_1| = 0.05$, $T_c/|t_1| = 0.03$, $\omega_0/|t_1| = 0.001$, $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$, $\delta/|t_1| = 0.0001$. 実線は s_{+-} 波対称性の場合, 破線は s_{++} 波対称性の場合を表す.

その結果, コヒーレンス因子は状態密度の発散を打ち消さず, コヒーレンスピークが現れる. もう一方の s_{++} 波の場合には, ν バンドの超伝導ギャップと ν' バンドの超伝導ギャップはネスティングベクトル \mathbf{Q} で同符号を取り, 超伝導ギャップの積 $\Delta_\nu \Delta_{\nu'}$ は正符号となる. したがって, コヒーレンス因子 (3.23) 内の上符号 “-” は反転せず, コヒーレンス因子が状態密度の発散を打ち消す. 故に, s_{+-} 波の場合とは対照的に密度応答関数が単調減少するのである.

図 3.13 に, スピン応答関数の温度依存性を示す. s_{+-} 波対称性の場合, スピン応答関数は T_c 以下で単調に減少する. 一方, s_{++} 波対称性の場合には T_c 直下にコヒーレンスピークを持つ. s_{+-} 波対称性の場合, コヒーレンス因子 (3.23) 内の下の符号 “+” は実効的に反転してコヒーレンスピークは現れない. 反対に s_{++} 波対称性の場合には, コヒーレンス因子 (3.23) 内の下の符号 “+” は反転せずスピン応答は単調減少する.

ここで, 2 バンド超伝導体のコヒーレンス効果についてまとめる. 上述のように, コヒーレンス効果において最も重要なのはコヒーレンス因子内の符号である. シングルバンド超伝導体の場合, コヒーレンス因子の符号は外場の時間反転対称性で決定される. 一方, 2 バンド超伝導体では, 実効的なコヒーレンス因子の符号は外場の時間反転対称性と超伝導ギャップの対称性両方によって決定される (表 3.1 参照). 実効的に “+” の符号を持つコヒーレンス因子はコヒーレンスピークをも

表 3.1: パラメタ領域 (ii) における主要なコヒーレンス因子. コヒーレンス因子は外場の時間反転対称性とペ어링対称性の両方に依存する. $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, 0)$ におけるコヒーレンス因子を示す.

	偶パリティ (密度応答関数)		奇パリティ (スピン応答関数)	
s_{+-} 波	$\frac{1}{2}$	$\left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}{E_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \right) + \frac{ \Delta_{\nu'} \Delta_\nu }{E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \right\}$	$\frac{1}{2}$	$\left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}{E_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \right) - \frac{ \Delta_{\nu'} \Delta_\nu }{E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \right\}$
s_{++} 波	$\frac{1}{2}$	$\left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}{E_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \right) - \frac{ \Delta_{\nu'} \Delta_\nu }{E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \right\}$	$\frac{1}{2}$	$\left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}{E_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \right) + \frac{ \Delta_{\nu'} \Delta_\nu }{E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \right\}$

たらし、実効的に“−”の符号を持つコヒーレンス因子は状態密度の発散を打ち消す。また、ここで次のことを強調しておく。それは、いずれのペアリング対称性の場合でも密度応答関数とスピン応答関数の振る舞いが正反対になることである。この点は、実験の提案を行う次節でも重要になる。

本研究では、(i) 議論を明確にし、かつ (ii) 数値計算のコストを抑えるため、2バンド模型を採用した。しかし、この2バンド模型は、Fermi エネルギー付近での3d軌道依存性等、より詳細な5バンド模型と異なるところが複数存在し、鉄ニクタイト系高温超伝導体のFermi面を再現することができない。その結果、この単純な2バンド模型と5バンド模型では計算結果が異なるというケースも報告されている。Nomuraは摂動論による超伝導秩序変数の計算を、5バンド模型と2バンド模型の両方について行った[17]。そして、5バンド模型が s_{+-} 波対称性を支持する一方で、2バンド模型は p 波対称性を支持するという結果を得た。超伝導ギャップの対称性に関する計算はFermi面のネスティング構造に強く依存することが知られており、採用する模型に応じて結果が大きく変わることが予想される。しかしながら、我々が今回計算した応答関数の振る舞いは、上述のように状態密度の発散とコヒーレンス因子によるものであり、バンド構造の詳細には左右されにくいと思われる。したがって、仮に5バンドBCS模型を構築し同様の計算を行ったとしても、2バンドBCS模型の場合と定性的に同じ結果が得られるものと考えている。

3.2.4 ペアリング対称性を決定する実験の提案

本小節では、上述のアイデアに基づき、ペアリング対称性を決定する実験を提案する。そのためには、先に計算した応答関数と実験的に観測可能な物理量を関係づける必要がある。

応答関数の虚部は、散乱実験で観測できる散乱断面積と関係づけられることが知られている。具体的には、散乱断面積と比例関係にある構造因子が、応答関数を用いて次のように表現される。

$$S_D(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{1 - e^{-\beta\omega}} \text{Im}D(\mathbf{q}, \omega + i\delta), \quad (3.24)$$

$$S_\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{1 - e^{-\beta\omega}} \text{Im}\chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega + i\delta). \quad (3.25)$$

ここで、 $S_D(\mathbf{q}, \omega + i\delta)$ と $S_\chi(\mathbf{q}, \omega + i\delta)$ はそれぞれ密度およびスピン構造因子であり、 $D(\mathbf{q}, \omega + i\delta)$ と $\chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega + i\delta)$ は先に計算した密度およびスピン応答関数である。

密度(スピン)構造因子の温度依存性を図3.14(図3.15)に示す。構造因子は、温度に依存する因子 $1/(1 - e^{-\beta\omega})$ を応答関数に掛けたものであるが、定性的な振る舞いは応答関数と変わらないことがわかる。また、応答関数の場合との細かな差としては、コヒーレンスピークがよりシャープになっていることが挙げられる。構造因子の振る舞いに関する説明は、前節の応答関数の際と全く同様なのでここでは省略する。

我々は、ペアリング対称性(s_{+-} 波対称性と s_{++} 波対称性のどちらが実現しているか)を判定する実験として、非弾性散乱実験を利用し、密度およびスピン構造因子の温度依存性を測定する方法を提案する。より具体的には、非弾性X線散乱で密度構造因子を、非弾性中性子散乱でスピン構造

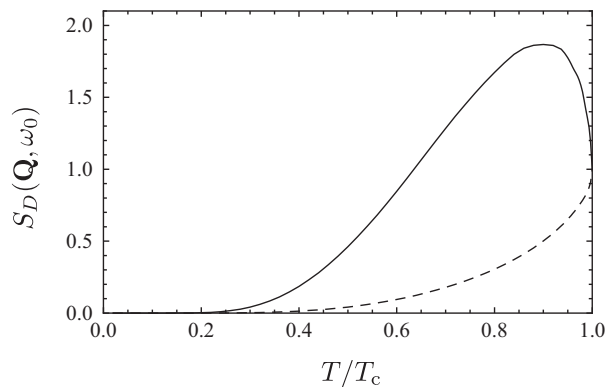


図 3.14: T_c での値で規格化された密度構造因子の温度依存性. パラメタとして次の値を使用した. $|\Delta_+^{(0)}|/|t_1| = |\Delta_-^{(0)}|/|t_1| = 0.05$, $T_c/|t_1| = 0.03$, $\omega_0/|t_1| = 0.001$, $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$, $\delta/|t_1| = 0.0001$. 実線は s_{+-} 波対称性の場合, 破線は s_{++} 波対称性の場合を表す.

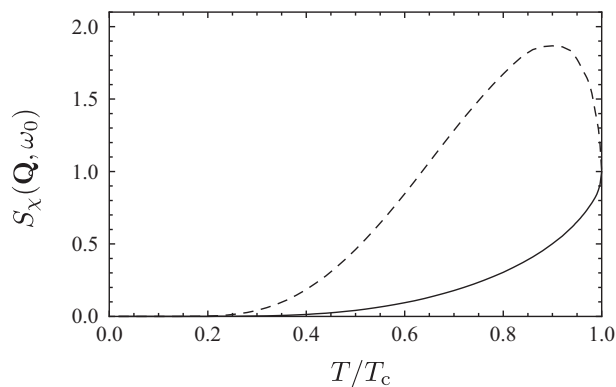


図 3.15: T_c での値で規格化されたスピン構造因子の温度依存性. パラメタとして次の値を使用した. $|\Delta_+^{(0)}|/|t_1| = |\Delta_-^{(0)}|/|t_1| = 0.05$, $T_c/|t_1| = 0.03$, $\omega_0/|t_1| = 0.001$, $\mathbf{Q} = (\pi, 0)$, $\delta/|t_1| = 0.0001$. 実線は s_{+-} 波対称性の場合, 破線は s_{++} 波対称性の場合を表す.

因子を測定することを提案する.¹⁷ その際、密度とスピン両方の構造因子を測定し、相異なる振る舞いが確認されることが重要である。この特徴は、先にも注意したように、いずれの対称性の場合でも見られるべきものであり、コヒーレンス効果が実験結果に表れていることの証拠になる。このような実験を行った際、得られる実験結果としては、次の2つの可能性がある。

- (i) 密度構造因子にコヒーレンスピークが見られ、スピン構造因子は単調減少する。
- (ii) スピン応答関数にコヒーレンスピークが見られ、密度構造因子は単調減少する。

前者の結果が得られた場合は s_{+-} 波対称性が実現していると判定でき、後者が得られた場合には s_{++} 波対称性が実現していると判定できる。

本節で密度構造因子とスピン構造因子の振る舞いの差が重要であることを強調してきた。乱れないクリーンな多バンド超伝導体であるならば、このような振る舞いの差が必ず見られるはずであるが、鉄ニクタイド系高温超伝導体ではどうであろうか。鉄ニクタイド系高温超伝導体はシングルバンドのBCS理論で議論されてきた単純な金属の超伝導とは異なり、超伝導状態になるために圧力や化学ドーピングといった外部からの刺激を必要とする。したがって、鉄ニクタイド系高温超伝導体には、不純物や構造破壊等、ある程度の“乱れ”が生じていると考えるのが妥当であろう。このような乱れを含んだ超伝導体においては、これまでに議論してきた“絵に描いたような”コヒーレンス効果の変更を受ける。ここで、そのことについて言及しておこう。

これまでに述べてきたように、コヒーレンス効果は状態密度の発散とコヒーレンス因子に強く依存する。超伝導体に不純物が含まれる場合、これら2つの要素のうち状態密度がその影響を受ける。2バンド超伝導体における状態密度を図3.16に示す。この図から、 s_{++} 波の場合には状態密度のピークが不純物によってほとんど影響を受けない一方、 s_{+-} 波の場合には比較的弱い不純物ポテンシャルでピークが壊されてしまうことがわかる。これまで行ってきた考察から容易にわかるように、状態密度のピークが破壊された際にはコヒーレンス因子の符号に関わらずコヒーレンスピークは現れない。したがって、不純物がある程度含まれた s_{+-} 波対称性においては密度、スピンの両構造因子がともに単調減少すると結論付けられる。また、当然のことながら、 s_{++} 波対称性における両構造因子は、不純物が含まれていないときのそれとほとんど違いがないと結論付けられる。これらの不純物に対する考察から先に我々が提案した実験方法は次のように変更を受ける。

非弾性散乱実験の結果としては、次の3つの可能性がある。

- (i) 密度構造因子にコヒーレンスピークが見られ、スピン構造因子は単調減少する。
- (ii) スピン応答関数にコヒーレンスピークが見られ、密度構造因子は単調減少する。
- (iii) 両構造因子がともに単調減少する。

(i) の結果が得られた場合は極めて不純物が少ない s_{+-} 波対称性が実現していると判定でき、(ii) が得られた場合には s_{++} 波対称性が実現しているのだと判定できる。また、(iii) が得られた場合に

¹⁷ 以前に発表した論文 [K. Masuda and S. Kurihara, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 074710 (2010)] の中では、非弾性中性子散乱実験で両構造因子が測定可能であると述べた。しかし、その後の調査の結果、密度構造因子に関しては非弾性中性子散乱実験での測定が難しいことがわかった。そこで、密度構造因子に関しては、非弾性 X 線散乱実験で測定することを改めて提案する。

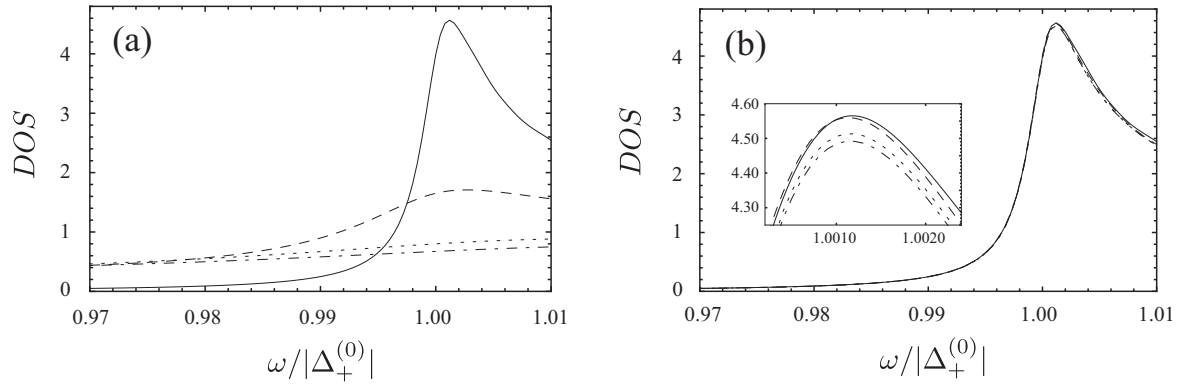


図 3.16: (a) s_{+-} 波対称性, (b) s_{++} 波対称性における絶対零度での状態密度. 使用したパラメタは不純物濃度 $n_{\text{imp}} = 0.01$, $|\Delta_+^{(0)}|/|t_1| = |\Delta_-^{(0)}|/|t_1| = 0.05$, $T_c/|t_1| = 0.03$, $\delta/|t_1| = 0.0001$ である. 不純物ポテンシャルのエネルギー強度を I として, 実線は $I/|t_1| = 0$, 破線は $I/|t_1| = 0.5$, 点線は $I/|t_1| = 4.5$, 破点線は $I = \infty$ の場合を表している. 数値的に波数積分を行う際, Brillouin ゾーンを 1024×1024 個の細胞に分けて Riemann 和を取った.

は不純物がある程度含まれた s_{+-} 波対称性が実現していると判断できる. このように, 鉄系超伝導体に仮に不純物が含まれていたとしても, 我々が提案する実験によってペアリング対称性が決定可能であると言える.

第4章 重い電子系における非従来型 s 波超伝導

本章では、重い電子系における非従来型 s 波超伝導について議論する。重い電子系は f 電子系とも呼ばれるように、 f 軌道に電子を有する系である。これらの系ではしばしば、電子の有効質量が極めて大きい「重い準粒子状態」が形成されるため、重い電子系という名が充てられている。まず第 4.1 節では、このような重い電子系への導入を行う。特に、「この系ではなぜ重い準粒子状態が形成されるのか」という点について詳細な解説をする。続く第 4.2 節では、先行研究において報告されている重い電子系超伝導体の性質について述べる。ここでは、重い電子系超伝導体の大半が超伝導ギャップにノードを有すること、またその一方で、一部の物質は超伝導ギャップにノードが存在しない s 波超伝導を示すことについて言及する。通常、重い電子系をはじめとする斥力電子系では、このような s 波超伝導は発現しづらい。こうした経緯を受け、第 4.3 節では、重い電子系でも非従来型の s 波超伝導が発現しうることを提案する。我々が提案するこのような非従来型 s 波超伝導は、これまでの理論研究でほとんど着目されてこなかった「軌道間 Cooper 対」という考え方に基づいている。我々はこの非従来型 s 波超伝導によって、第 4.2 節に述べる重い電子系の s 波超伝導が説明可能なのではないかと期待している。最終節である第 4.4 節では、変分クラスタ法 (VCA) を用いて、このような非従来型 s 波超伝導について再考察する。

4.1 重い電子系

上述のように、重い電子系は f 電子系とも呼ばれ、 f 軌道に電子を有する (f 電子を有する) 物質によって構成される。より正確に言えば、重い電子系に属する物質は、 f 電子を有する原子を含む化合物である。 f 電子を持つ原子はランタノイド¹と呼ばれる原子群とアクチノイド²と呼ばれる原子群に存在する。³ 前者のランタノイドにおける f 電子は $4f$ 軌道に存在し、後者のアクチノイドにおける f 電子は $5f$ 軌道に存在する。ランタノイドに属する Ce (セリウム) やアクチノイドに属する U (ウラン) は重い電子物質に含まれる典型的な原子であり、これらの原子を含む重い電子系はそれぞれ“セリウム系”や“ウラン系”などと呼ばれる。

このような f 電子は、重い電子系の物性にどのような影響を及ぼすであろうか。この点について述べる際に重要となるのが次の 2 つの点である。

¹原子番号が 57 の La (ランタン) から 71 の Lu (ルテチウム) までで構成される。

²原子番号が 90 の Th (トリウム) から 103 の Lr (ローレンシウム) までで構成される。

³他にも f 軌道に電子を持つ原子は存在するが、 f 軌道が閉核になっているため、 f 電子の影響が物性にあまり効いてこない。

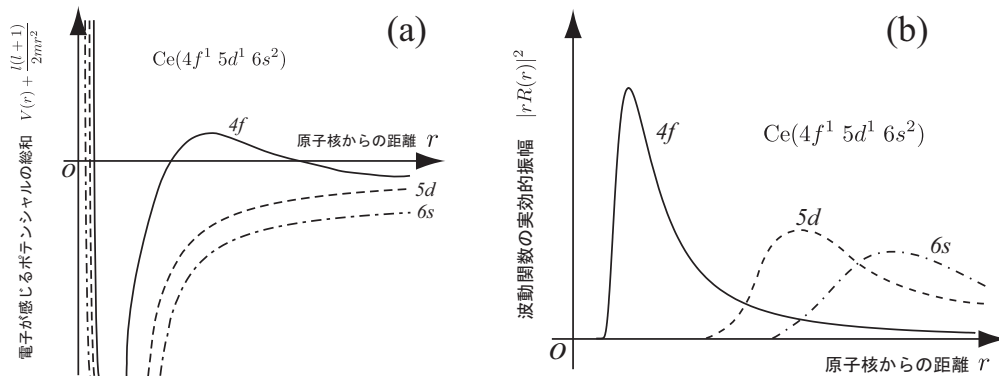


図 4.1: (a) Ce (セリウム) 中の各原子軌道において、電子が感じる有効ポテンシャル (模式図). (b) Ce (セリウム) 中の各原子軌道における、電子の実効的波動関数 (模式図).

- (1) f 軌道の局在性が高い点
- (2) f 電子と伝導電子が混成を起こす点

まず (1) の f 軌道の局在性の高さであるが、これは f 軌道における遠心力ポテンシャルの大きさに起因している。図 4.1(a) に示した Ce (セリウム) 中の電子が感じるポテンシャルの模式図をご覧頂きたい。遠心力ポテンシャルは $l(l+1)/2mr^2$ (l は軌道角運動量, m は電子の質量, r は原子核中心からの距離) という表式で与えられる。したがって、 $5d$ 軌道 ($l=2$) や $6s$ 軌道 ($l=0$) に比べ、 $4f$ 軌道 ($l=3$) に属する電子はより大きな遠心力ポテンシャルを感じる。電子が感じる全ポテンシャルはこの遠心力ポテンシャルと原子核からのポテンシャル⁴、そしてその他の電子からのポテンシャルの総和で与えられる。図 4.1(a) に示したように、 $4f$ 軌道では遠心力ポテンシャルが大きいため、全ポテンシャルが原子中心に向かって切り立つような形状を取る。このようなポテンシャル形状は $4f$ 軌道に存在する電子の視点に立つと、「波動関数が原子内部に大きな重みを持つ」、すなわち、「波動関数が原子内部に局在している」ことを意味している [図 4.1(b)]. したがって、 $4f$ 軌道をアップスピンの電子とダウンスピンの電子が 2 重占有したとすると、それらの電子間には非常に大きな Coulomb 斥力が働くこととなる。⁵ このような事情は、すぐ後に述べるように、重い電子系の典型的な模型、周期 Anderson 模型に反映されている。

そして (2) として述べたように、このような f 電子がその他の伝導軌道⁶に属する電子 (伝導電子) と相関することで“重い準粒子状態、”すなわち“重い電子状態”が形成される。以下では数式を用い、このような重い準粒子状態の形成について解説する。議論の大筋は Hewson の教科書 [37] に従っている。我々は説明の出発点として、重い電子系の典型的な模型「周期 Anderson 模型」を

⁴原子核からの Coulomb 引力に関するポテンシャル。

⁵クーロン斥力は大雑把に見積ると 2 電子間の距離に反比例するため、局在した波動関数を持つ f 軌道では他の軌道に比べて 2 電子間に大きな Coulomb 斥力が働くと考えられる [36].

⁶伝導軌道は f 軌道よりも軌道角運動量の大きさが小さい s, p, d 軌道のいずれかであり、詳細は個々の物質により異なる。

用いる. この模型のハミルトニアンは次の式で与えられる.

$$H_{\text{PAM}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \epsilon_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + V \sum_{\mathbf{k}\sigma} (f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f. \quad (4.1)$$

ここで, $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ および $f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ は, 波数 \mathbf{k} , スピン σ の電子を, 伝導軌道 (c 軌道) および f 軌道に生成する演算子であり, $f_{i\sigma}^\dagger$ はスピン σ の電子をサイト i 上の f 軌道に生成する演算子である. また, ϵ_f , V , U はそれぞれ, f 電子の 1 体エネルギー, c - f 軌道間混成の大きさ, f 軌道におけるオンサイト Coulomb 斥力を表している. そして, $\epsilon_{\mathbf{k}}$ は波数 \mathbf{k} を持つ伝導電子 (c 電子) の 1 体エネルギーであり, 例えば 2 次元正方格子系では $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$ となる.⁷ 周期 Anderson 模型は, 局在性が強い f 軌道と 1 つの c 軌道を含んだ 2 軌道模型である.⁸ この模型では, 先に述べた f 軌道の局在性の良さを反映して, 「(1) f 電子は直接隣のサイトに飛び移れないこと (第 2 項)」, 「(2) f 軌道内では大きな Coulomb 斥力が働くこと⁹(最終項)」が仮定されている. また, 1 つのサイト内での f 電子と伝導電子 (c 電子) の混成が考慮されている (第 3 項).

この系における準粒子の分散関係を調べるため, 以下でこの系の Green 関数を計算する. Green 関数としては, 多体電子論で通常用いられる, 2 時間反交換 Green 関数を使用する.¹⁰ 例えば, 演算子 A, B からなる Green 関数を $\langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega$ のように表記する. 我々がこのように表記する Green 関数は, 全て周波数空間に Fourier 変換されたものであり, 周波数 ω の関数となっている. また, このような反交換 Green 関数 $\langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega$ は次の運動方程式を満たす [38].

$$\omega \langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega = \langle\{A, B\}\rangle + \langle\langle [A, H]; B \rangle\rangle_\omega. \quad (4.2)$$

ここで $\{A, B\}$ は A と B の反交換関係であり, $[A, H]$ は A とハミルトニアン H の交換関係である. また以下では, Green 関数の添え字 ω は省略する. このような運動方程式を用いて, f 電子の Green 関数 $G_{\mathbf{k}}^{ff} \equiv \langle\langle f_{\mathbf{k}\sigma}; f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle$ を計算してみよう. 最終的には相互作用項 $U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f$ の影響を見たいのであるが, まずは, H_{PAM} がこの相互作用項を含まない場合の Green 関数 $G_{\mathbf{k},0}^{ff}$ を求めてみる. 結果は,

$$G_{\mathbf{k},0}^{ff} = \frac{1}{\omega - \epsilon_f - \frac{V^2}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}}} \quad (4.3)$$

となる (計算の詳細は付録 C を参照). 続いて, 相互作用項 $U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f$ がハミルトニアンに付け加えられた場合の Green 関数 $G_{\mathbf{k}}^{ff}$ を求めることにしよう. しかし, このような相互作用項が付け加わった場合, 系の厳密な Green 関数を求めることは困難であり, 何らかの近似を行う必要がある. ここでは, 相互作用項が f 電子 Green 関数の自己エネルギー $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ を生じさせるとし, この自己エネルギー $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ を Fermi 準位近傍に着目して Taylor 展開する. このような手続きを踏むと, 次

⁷ t は隣接サイト間の跳び移り積分である.

⁸問題によっては, f 軌道の軌道縮退を考慮した周期 Anderson 模型が使用されることもある.

⁹現実の物質では, c 電子間, c - f 電子間にも Coulomb 斥力が働くが, これらは f 電子間 Coulomb 斥力に比べ十分小さいとして無視している.

¹⁰Green 関数の定義等は文献 [38] を参照されたい.

のような f 電子 Green 関数の表式が得られる (計算の詳細は付録 C を参照).

$$G_{\mathbf{k}}^{ff} \approx z_{\mathbf{k}_F} \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon}_{f,\mathbf{k}} - \frac{\tilde{V}^2}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}}}. \quad (4.4)$$

この式に関して, 次のような量を定義した.

$$z_{\mathbf{k}_F} \equiv \frac{1}{1 - \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}_F, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega = \epsilon_F}}, \quad (4.5)$$

$$\tilde{\epsilon}_{f,\mathbf{k}} \equiv z_{\mathbf{k}_F} \left[\epsilon_f + \Sigma(\mathbf{k}_F, \epsilon_F) + \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}, \epsilon_F)}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_F) - \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}_F, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega = \epsilon_F} \cdot \epsilon_F \right], \quad (4.6)$$

$$\tilde{V}^2 \equiv z_{\mathbf{k}_F} V^2. \quad (4.7)$$

ここで, \mathbf{k}_F , ϵ_F はそれぞれ, Fermi 波数と Fermi エネルギーを表している. また $z_{\mathbf{k}_F}$ は「繰り込み因子」と呼ばれ, $\tilde{\epsilon}_{f,\mathbf{k}}$, \tilde{V} はそれぞれ, 繰り込まれた後の f 電子の 1 体エネルギーと c - f 軌道間混成である. このように呼ばれる理由は以下の記述で明らかになる.

Green 関数の極はその系の固有モードを与えている. したがって, 式 (4.4) の「分母 = 0」を ω について解くと, 求めるべき準粒子の分散関係を得ることができる. 計算の結果, 次の 2 つの分散関係が得られる.

$$\omega = \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{\pm} \equiv \frac{1}{2} \left[(\tilde{\epsilon}_{f,\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}}) \pm \sqrt{(\tilde{\epsilon}_{f,\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}})^2 + 4\tilde{V}^2} \right]. \quad (4.8)$$

このようにして得た準粒子バンドを図 4.2(a) に示す. 準粒子バンドは実効的 f 準位 $\tilde{\epsilon}_f^{11}$ と c バンド $\epsilon_{\mathbf{k}}$ の混成バンドになっており, 2 つ準粒子バンド間には実効的混成 \tilde{V} に比例したギャップが開

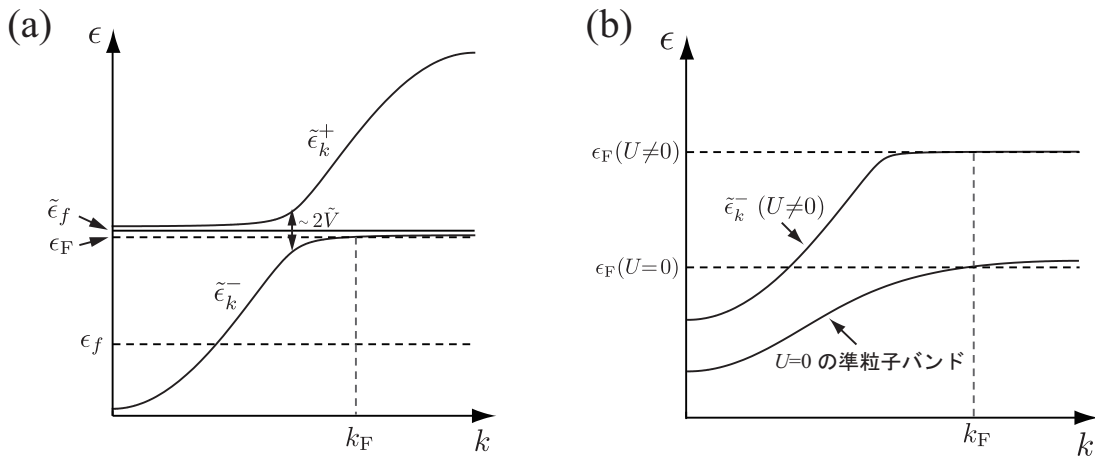


図 4.2: (a) 重い電子系における準粒子の分散関係 $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{\pm}$ の模式図. (b) クーロン斥力 U が 0 の場合と有限な場合の下側の準粒子バンドの模式図.

¹¹式 (4.6) にある \mathbf{k} 依存性を無視した. このような仮定が正当化されることが知られている. [36]

いている。今、1つの典型的な場合として、「 f 電子間 Coulomb 斥力 U が強く、系の f 電子数密度 n_f がハーフフィリング ($n_f = 1$) より少し小さい場合、すなわち $n_f = 1 - \delta$ (δ は小) の場合」を考えてみよう。もし仮に、Fermi 準位 ϵ_F が実効的 f 準位 $\tilde{\epsilon}_f$ の上部に存在すると仮定すると、系の f 電子密度は $n_f = 1$ を上回ってしまう。したがって、 f 電子数密度 $n_f = 1 - \delta$ を守るためには、図のように、Fermi 準位 ϵ_F が実効的 f 準位 $\tilde{\epsilon}_f$ の下部に位置する必要がある。このような Fermi 準位 ϵ_F では、図からも明らかなように、準粒子バンド $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^-$ が極めて小さな傾きを持っている。これはすなわち、準粒子の有効質量 m^* が極めて大きくなっていることを意味しており、¹² この系で「重い準粒子状態」が形成されていることを示唆している。これが f 電子系が「重い電子系」と呼ばれる所以である。

f 電子間斥力 U が重い準粒子状態の形成に果たす役割をもう少し詳しく見てみよう。図 4.2(b) に、 f 電子間斥力 U が 0 の場合と有限な場合の下側の準粒子バンドを示す。 U の効果はまず、軌道間混成 V が繰り込まれて小さくなっていること ($V \rightarrow \tilde{V}$) に現れる。 \tilde{V} は先に述べたように、2つの準粒子バンド ($\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^-$ と $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^+$) 間のギャップに比例している。したがって、軌道間混成が小さな値 \tilde{V} を取ることで、2つの準粒子バンド間のギャップが非常に小さなものとなり、Fermi 準位近傍で準粒子バンドが極めて小さな傾きを持つようになる。そして斥力 U の効果としてもう1つ述べなければならぬことは、図にも明示したように、「 U が入っても Fermi 波数 k_F は変化しない」¹³ という点である [36]。この性質があるため、Fermi 波数における準粒子バンドの傾きは、 U が入る前より入った後のほうが必ず小さくなるのである (すなわち、有効質量は U が入った方が必ず大きくなる)。

上で説明してきた重い準粒子状態 (重い電子状態) は、多くの物質で実験的に確認されている。Fermi 液体論によると、低温比熱は温度に比例する ($C = \gamma T$)。この比熱係数 γ は準粒子の有効質量に比例するため、¹⁴ 実験的にこの係数を測定することで、準粒子の有効質量を見積もることができる。 f 電子系の物質においては、表 4.1 に示したような比熱係数 γ が得られている [37]。通常の金属における比熱係数 γ は 1 (mJ/K²mol) 程度であるため、表に挙げた f 電子系は通常金属の 100 倍から 1000 倍程度の有効質量を持っていることがわかる。

表 4.1: f 電子系における比熱係数 γ

物質名	比熱係数 γ (mJ/K ² mol)	物質名	比熱係数 γ (mJ/K ² mol)
CeAl ₃	~1620	UPt ₃	~420
CeCu ₂ Si ₂	~1100	U ₂ Zn ₁₇	~400
CeCu ₆	~1600	UBe ₁₃	~1100

¹² 準粒子の分散関係が実効的に $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}^2}{2m^*} + \text{const.}$ と書けるとすると、バンドの傾きが小さいことは有効質量 m^* が大きいことを意味する。

¹³ これは「Luttinger の定理 (Landau-Luttinger の定理)」として知られており、Fermi 液体が持つ極めて重要な性質である。

¹⁴ $\gamma = \frac{m^* k_F}{3}$ で与えられる。 [39]

4.2 重い電子系における超伝導

1979年, Steglich らは, 重い電子系物質 CeCu_2Si_2 が超伝導になることを報告した [40]. 表 4.1 に示したように, CeCu_2Si_2 は通常金属の約 1000 倍の有効質量を有している. そのため, この物質が (電子の伝導性が極めて高い) 超伝導性を示すという事実は多くの物性研究者を驚かせた. それ以後, 今日までに, 重い電子系に属する数多くの物質で超伝導転移が観測されてきた. その数は 2010 年までに 30 種を超えており [41], 今後ますます増加していくものと予想される. 重い電子系超伝導体には, 大別すると, 超伝導ギャップがノード (節) を持つと考えられているものと, ノードを持たないと考えられているものが存在する. 以下, 順を追ってそれらの性質について説明する.

まず, 超伝導ギャップがノードを持つと期待されている物質群についてであるが, この物質群はさらにいくつかの種類に分類される. 例えば,

- (i) 強磁性相の近傍で超伝導が発現し, ペアリング対称性として p 波対称性が期待される物質群 (UGe_2 , URhGe 等が属する).
- (ii) 反強磁性相の近傍で超伝導が発現し, ペアリング対称性として d 波対称性が期待される物質群 (CeCu_2Si_2 , CeRhIn_5 等が属する).

などがあるが,¹⁵ ここでは, 属する物質が特に多い, 後者の物質群 (ii) について述べる. この物質群における典型的な電子相図を図 4.3 に示す. この物質群では, 図からもわかるように, 超伝導相が反強磁性相の近傍に存在している. このことから, これらの物質では, 超伝導の発現に反強磁性秩序が何らかの寄与を及ぼしていることが予測される.

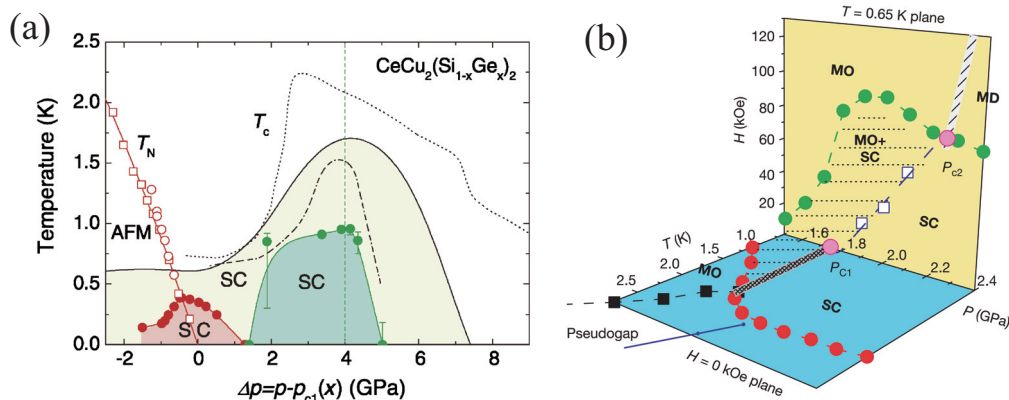


図 4.3: (ii) の物質群 (本文参照) に属する物質の相図. (a) は $\text{CeCu}_2(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_2$ の相図 [42] であり, SC は超伝導相, AFM は反強磁性相を表している. また, (b) は CeRhIn_5 の相図 [43] であり, SC は (a) と同じく超伝導相を, そして MO が反強磁性相を表している.

¹⁵この他にも, 結晶の空間反転対称性が無く, パリティ混成状態 (例えば, s 波と p 波など, 異なるパリティを持つ状態の混成状態) が生じていると期待される物質群等, 様々な種類が存在する. より詳細な分類は論文 [41] を参照されたい.

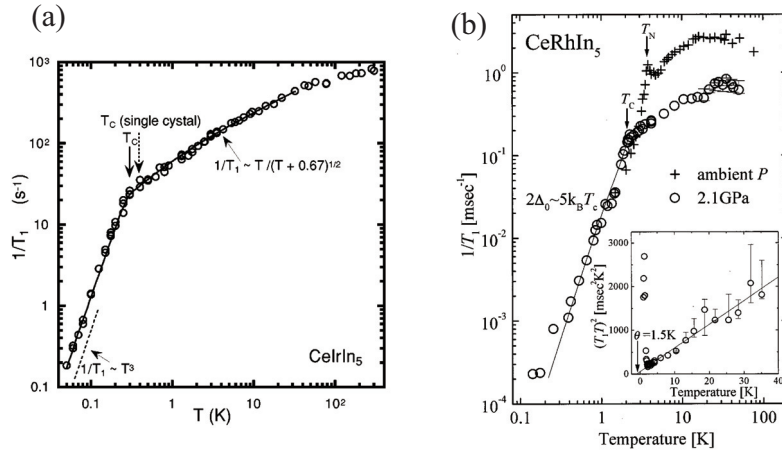


図 4.4: 重い電子系物質における核磁気緩和率 $1/T_1$ の温度依存性. (a) が CeIrIn_5 に対する結果 [54] であり, (b) は CeRhIn_5 に対する結果 [55] である.

これまで, このような反強磁性相近傍における超伝導の発現については, スレーブボソン平均場近似 [44, 45], 乱雑位相近似 [46, 47], 揺らぎ交換近似 [48], 3次摂動論 [49–51] をはじめとして, 数多くの理論研究が展開されてきた. そして, これらの研究の結果, 「反強磁性秩序に伴う“反強磁性スピン揺らぎ”が d 波超伝導を誘起しうる」という事実が明らかにされ,¹⁶ 多くの賛同を集めてきた. d 波超伝導状態とは, 第 2.1 節の図 2.3(b) に示したように, 超伝導ギャップが Fermi 面上でノード(節)を有している状態である. このような超伝導状態においては, 先の第 2.2 節で述べた核磁気緩和率に, その影響が現れるものと期待される. 第 2.2 節で述べたように, ギャップがノードを持たない s 波超伝導状態の場合には, 核磁気緩和率は転移温度直下に Hebel-Slichter ピークを持ち, 低温で温度に対して指数関数的に振る舞う. その一方で, ギャップにノードが存在する d 波超伝導状態の場合には, 核磁気緩和率は Hebel-Slichter ピークを持たず, 低温で温度のべき乗に比例する振る舞いを示すことが知られている [53].¹⁷ 実際, このような核磁気緩和率の振る舞いは, CeIrIn_5 や CeRhIn_5 をはじめ, 多くの重い電子系超伝導体で観測されている (図 4.4 参照). したがって, 実験的な見地からも, この物質群においては d 波超伝導が発現しているものと考えられている.

ノードを有すると考えられている系が大半を占める一方, 重い電子系には, ノードを持たない s 波超伝導を示すことが確定的になっている物質も存在する. CeRu_2 や CeCo_2 はそのような物質の代表例であり, これらの物質では図 4.5 に示す核磁気緩和率が観測されている. 図 4.5(a), (b) の場合とも, フルギャップ¹⁸の s 波超伝導状態に典型的な振る舞い, すなわち, (1) Hebel-Slichter ピークと (2) 低温での指数関数的な振る舞いを確認できる. 通常, このようなフルギャップの s 波超伝

¹⁶ CeCu_2Si_2 においては, 図 4.3(a) に示したように, 超伝導相が 2 つの山を持つ構造を取っている. これまでの研究では, より反強磁性相に近い左側の山が, 反強磁性揺らぎによって誘起される超伝導相であると考えられている. また, 右の山は, c - f 軌道間の電荷揺らぎ (価数揺らぎ) によって誘起される超伝導相であると考えられている [52].

¹⁷ このような Hebel-Slichter ピークの消失は, 第 2.2 節において強調したように, 超伝導ギャップの符号反転によってコヒーレンス因子 (2.38) 内の符号が実効的に反転することによって由来する.

¹⁸ Fermi 面の全ての部分でギャップが有限であるという意味である.

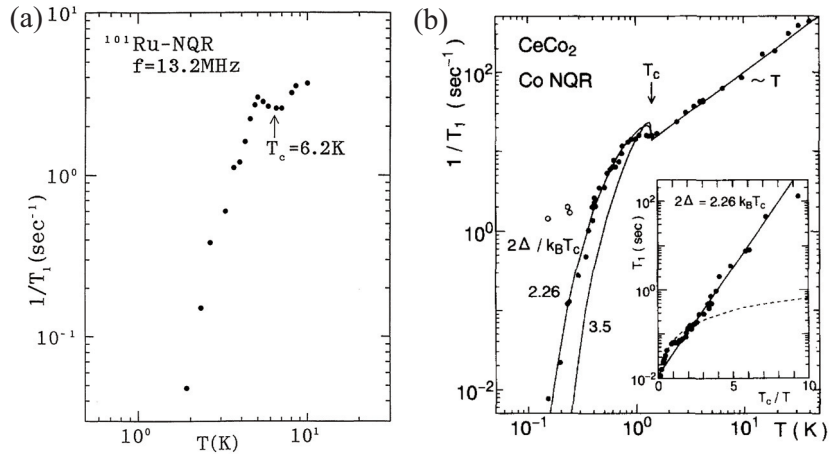


図 4.5: 重い電子系物質における核磁気緩和率 $1/T_1$ の温度依存性. (a) が ^{101}Ru に対する結果 [56] であり, (b) は CeCo_2 に対する結果 [57] である.

導状態は, BCS 理論で用いられる電子格子相互作用によって説明可能である. そして, もし CeRu_2 や CeCo_2 の s 波超伝導が電子格子相互作用によって誘起されているならば, その証拠である同位体効果が観測されるはずである. 同位体効果とは, 超伝導体を構成する元素をその同位体で置き換えたとき, 超伝導転移温度 T_c が同位体の質量 M を用いて $T_c \propto M^{-\alpha}$ と表される現象である. しかし, CeRu_2 や CeCo_2 においては, 我々の知る限り, このような同位体効果は報告されていない.

これらの事実を鑑みると, 重い電子系の s 波超伝導を理解するためには, 電子格子相互作用以外のメカニズムを考える必要があるように思われる. 我々は, 次の第 4.3 節で, 重い電子系が持つ「多軌道性」と「 f 電子間斥力」によって, 非従来型の s 波超伝導が発現しうることを明らかにする.

4.3 重い電子系における非従来型 s 波超伝導 (平均場近似による解析)

先の第 4.2 節で述べたように、重い電子系物質である CeRu_2 と CeCo_2 は、フルギャップの s 波超伝導を示す。通常、このような s 波超伝導は BCS 理論で用いられる電子格子相互作用によって説明される。しかしながら、これらの系では電子格子相互作用の存在を示唆する「同位体効果」といった現象は確認されていない。そこで本節では、電子格子相互作用に代わる重い電子系 s 波超伝導の新たなメカニズムを提唱する。我々は、重い電子系の特徴である「多軌道性」および「 f 電子間斥力」から、非従来型 s 波超伝導が発現しうることを明らかにする。

4.3.1 基本的なアイデアと有効ハミルトニアン

“重い電子系において s 波超伝導が誘起されるシナリオ”としてどのようなものが考えられるだろうか。我々は、これまでの先行研究ではほとんど考慮されてこなかった、伝導電子 (c 電子) と f 電子によって形成される軌道間 Cooper 対 (c - f Cooper 対) [図 4.6(a) 参照] を仮定する。まず、このような Cooper 対を仮定する理由を説明しよう。図 4.6(b)¹⁹ に示したように、重い電子系には軌道間の混成要素 V が存在し、電子が伝導バンド (c バンド) と f 準位の間を行き来することができる。この混成要素 V による 2 次摂動過程として、電子が、「① c バンド $\rightarrow f$ 準位」、「② f 準位 $\rightarrow c$ バンド」の順に移動する過程を考えてみる。図のように、もともと f 準位に電子が 1 つ存在していたとすると、このような 2 次摂動過程に関するエネルギー利得は $E_2 = V^2 / (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_f - U)$ となる。この表式を見ると、混成 V が有限であり、かつ $\epsilon_{\mathbf{k}}$ に比べて $\epsilon_f + U$ が大きければ $E_2 < 0$ となり、 c 電子

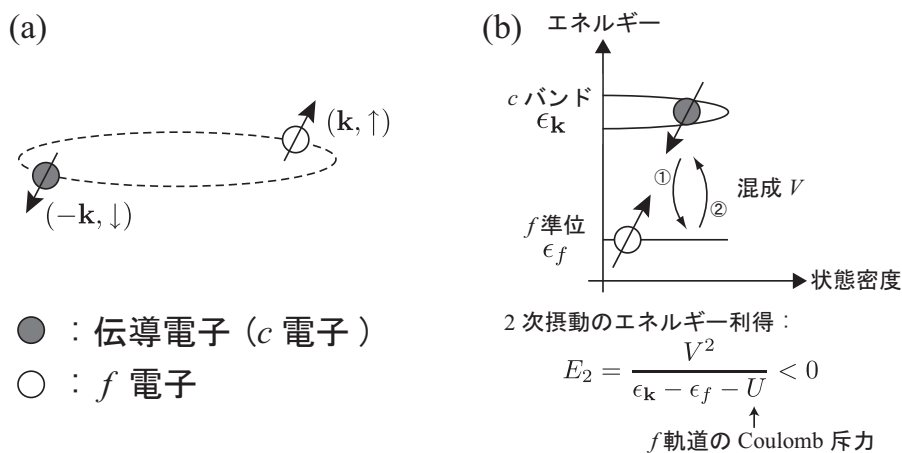


図 4.6: (a) c - f 軌道間ペアリングの模式図. (b) 伝導電子 (c 電子) と f 電子の間に実効的な引力が働く理由を説明する模式図.

¹⁹ 本来の重い電子系の状態密度図では、後に述べるように、 f 電子間 Coulomb 斥力の効果が極めて重要となる。ここに示した状態密度図には、このような Coulomb 斥力の効果が入っていないため、厳密に言えば、正確ではない状態密度図となっている。しかし、こちらの図の方が我々のアイデアのイメージは伝わりやすいと思われるので、あえてこの図を掲載している。後の考察において、Coulomb 斥力の効果が入った重い電子系の状態密度図についてコメントする。

と f 電子の間に引力が働くことになる。しかも、混成 V はサイト内の成分が最も大きいと考えられるため、²⁰ 上のように形成される c - f Cooper 対はサイト内ペアリングが主要となり、 s 波超伝導が誘起されると期待される。²¹ 我々はこのような c - f Cooper 対の形成による超伝導を「 c - f ペアリング超伝導」と称し、以下でこれを議論する。特に、「 c - f ペアリング超伝導は本当にフルギャップの s 波対称性を有するか」、また、「 c - f ペアリング超伝導はどのようなパラメタ領域において発現するか」という点について詳しい解析を行っていく。

まず、 c - f ペアリング超伝導を記述する有効ハミルトニアンを導出する。その出発点として、先の第 4.1 節でも紹介した重い電子系の標準的な模型「周期 Anderson 模型」を採用する。後の式変形の便宜上、この模型のハミルトニアン H_{PAM} を $H_{\text{PAM}} = H_0 + H_V$ と分割しよう。 H_0 と H_V はそれぞれ次の式で与えられる。

$$H_0 = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + \epsilon_f \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^f + U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f - \mu \sum_{i\sigma} (n_{i\sigma}^c + n_{i\sigma}^f), \quad (4.9)$$

$$H_V = V \sum_{i\sigma} (f_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + \text{H.c.}). \quad (4.10)$$

ここで、 $c_{i\sigma}^{\dagger}$ ($f_{i\sigma}^{\dagger}$) は、サイト i 上の c 軌道 (f 軌道) に、スピン σ を持つ電子を生成する演算子である。また、 $n_{i\sigma}^c = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$ 、および、 $n_{i\sigma}^f = f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma}$ である。そして、 t 、 ϵ_f 、 U 、 μ 、 V はそれぞれ、 c 軌道における隣接サイト間の跳び移り積分、 f 軌道の 1 体エネルギー、 f 軌道内での Coulomb 斥力、化学ポテンシャル、 c - f 軌道間のサイト内混成要素を表している。また、 $\langle ij \rangle$ に関する和は、「隣接サイト間ペアを重複しないように数える和」であることを意味している。本研究では、シンプルな例として

²⁰ c 電子は遍歴的、すなわち、その波動関数は空間的な広がりを持っているため、厳密には、混成要素は c 電子のサイト i と f 電子のサイト j という、2 つの独立なサイトに依存する (混成要素 V_{ij})。しかし、最も単純に考えると、このような混成要素 V_{ij} のうち、主要成分はサイト内混成 V_{ii} であると予想される。以下でも、軌道間混成はサイト内でのみ生じると近似して議論を進める。

²¹ BCS 理論で仮定されている単純な s 波の秩序変数は、実空間の言葉に直すと、オンサイトペアリングに関する秩序変数と言える。また d 波の秩序変数は、隣接サイト間ペアリングに関する秩序変数である。これらのことは、実空間で定義した秩序変数を Fourier 変換してみるとわかる。以下、簡単のため、2 次元正方格子上の 1 軌道系を考え、サイト i におけるスピン σ の電子の消滅演算子を $c_{i\sigma}$ と書く。 s 波の秩序変数は実空間で

$$\langle c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i+\eta\downarrow}^{\dagger} \rangle = \Phi \delta_{\eta,0}$$

と定義されるが、これをペアの間の相対位置ベクトル η に関して Fourier 変換すると

$$\sum_{\eta} \langle c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i+\eta\downarrow}^{\dagger} \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\eta} = \Phi$$

となり、波数空間で定数となることがわかる。一方、 $d_{x^2-y^2}$ 波の秩序変数は実空間で

$$\langle c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i+\eta\downarrow}^{\dagger} \rangle = \begin{cases} \Phi/2 & \text{if } \eta = \pm(1,0) \\ -\Phi/2 & \text{if } \eta = \pm(0,1) \end{cases}$$

と定義される。ここで、 $+(1,0)$ 、 $+(0,1)$ はそれぞれ、 $+x$ 、 $+y$ 方向の隣接サイトへと伸びるベクトルである (格子定数 a を 1 としている)。これを先と同様に相対位置ベクトル η に関して Fourier 変換すると

$$\sum_{\eta} \langle c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i+\eta\downarrow}^{\dagger} \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\eta} = \Phi (\cos k_x - \cos k_y)$$

となり、波数空間において、第 2.1 節で紹介した波数依存性を持つことがわかる。

2次元正方格子を選び、以下の解析を進めていく。

有効ハミルトニアンを得るため、上のハミルトニアン H_{PAM} に Schrieffer-Wolff 変換 $\bar{H} = e^S H_{\text{PAM}} e^{-S}$ [58] を施す。ここで S は、変換後のハミルトニアン \bar{H} が V の 1 次の項を含まないように選ぶ。すると、 S は $[S, H_0] = -H_V$ を満たさなければならないことがわかり、結果として次の式が導かれる。

$$S = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}i\sigma} \left[\frac{V e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_f - U} n_{i\bar{\sigma}}^f c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{V e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_f} \left(1 - n_{i\bar{\sigma}}^f\right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{i\sigma} - \text{H.c.} \right]. \quad (4.11)$$

ここで、 $\bar{\sigma}$ は σ と反平行なスピンを、 N は格子の全サイト数を表している。また、 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ は波数空間における伝導電子の運動エネルギーであり、今回の 2次元正方格子の系では $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$ となる。以上の表式において、格子定数を $a = 1$ とした。

$|\epsilon_f|$ および $\epsilon_f + U$ が f 電子の実効的運動エネルギー ρV^2 (ρ は伝導電子の Fermi レベルにおける状態密度) に比べて大きいとき、変換後のハミルトニアン \bar{H} は V の 2 次までの項でよく近似される。これを $\bar{H} \approx H_0 + H_2 \equiv \bar{H}_{\text{eff}}$ と書くと、 H_2 は次の式で与えられる。

$$H_2 = \frac{1}{2} [S, H_V] = H_{\text{dir}} + H_{\text{ex}} + H_{\text{ch}} + H_{\text{ph}}. \quad (4.12)$$

ただし、 H_{dir} , H_{ex} , H_{ch} , H_{ph} はそれぞれ

$$H_{\text{dir}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}i\sigma} \left(W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} - \frac{1}{4} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} (n_{i\uparrow}^f + n_{i\downarrow}^f) \right) e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (4.13)$$

$$H_{\text{ex}} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}i} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} \left(S_i^+ c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + S_i^- c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} + S_i^z (c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}) \right), \quad (4.14)$$

$$H_{\text{ch}} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}i\sigma} \left(W_{\mathbf{k}\mathbf{k}} - \frac{1}{4} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} (n_{i\bar{\sigma}}^f + n_{j\bar{\sigma}}^f) \right) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma}, \quad (4.15)$$

$$H_{\text{ph}} = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}i\sigma} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \left(e^{-i(\mathbf{k}'+\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{i\sigma} f_{i\bar{\sigma}} + \text{H.c.} \right) \quad (4.16)$$

である。ここで、 $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma'\sigma} f_{i\sigma'}^\dagger \boldsymbol{\tau}_{\sigma'\sigma} f_{i\sigma}$ は f 電子のスピン演算子であり、 $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \tau_3)$ は通常の Pauli 行列である。また、結合エネルギー $J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$, $W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ はそれぞれ次式で与えられる。

$$J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -\frac{V^2}{U} (L_{\mathbf{k}'} + L_{\mathbf{k}}), \quad (4.17)$$

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{V^2}{2U} (M_{\mathbf{k}'} + M_{\mathbf{k}}). \quad (4.18)$$

ここで $L_{\mathbf{k}}$ および $M_{\mathbf{k}}$ を、 $L_{\mathbf{k}} \equiv U^2 (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_f)^{-1} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_f - U)^{-1}$, $M_{\mathbf{k}} \equiv U (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_f)^{-1}$ と定義した。 H_2 に含まれる 4 つの項 H_{dir} , H_{ex} , H_{ch} , H_{ph} は、それぞれ c - f 電子間の直接相互作用項、 c - f スピン間の交換相互作用項、 f 電子の相関ホッピング項、 c - f 軌道間のペアホッピング項となっている。これらの項の中で c - f ペアリング超伝導に重要なのは、第 1, 第 2 項目の H_{dir} と H_{ex} である。以下で、こうして得られた有効ハミルトニアン \bar{H}_{eff} を用いて、この系の c - f ペアリング超伝導を議論し

よう.

4.3.2 平均場解析

我々は, 前小節 4.3.1 で導出した有効ハミルトニアン \bar{H}_{eff} に平均場近似を施すことで c - f ペアリング超伝導の解析を行う. まず, c - f ペアリング超伝導の秩序変数として次のものを仮定する.

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}'}. \quad (4.19)$$

ここで, $B_{\mathbf{k}'}$ は

$$B_{\mathbf{k}'} \equiv \langle f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger - f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle \quad (4.20)$$

であり, \mathbf{q} は c - f Cooper 対の重心運動量を表している. このような秩序変数は, \bar{H}_{eff} 中の H_{dir} , H_{ex} を平均場分離することで引き出すことができる. したがって, 先に述べたように, これら 2 つの項が c - f ペアリング超伝導の発現に重要な役割を果たしている.

c 電子の有効質量は f 電子の有効質量に比べて極めて小さい. このような質量が異なる粒子間のペアリングは, これまでに何度か取り上げられてきた. 最近では, Liu と Wilczek [59] によって, 冷却中性原子系におけるこのようなペアリングの可能性が議論されている. 彼らは, 異なる質量を持つフェルミオン間に引力相互作用を仮定し, 超流動秩序に関する平均場相図を導出した. そして, 彼らはその相図において, 通常の s 波超流動相に加え, 2 つの新奇な質量インバランス超流動相が存在することを明らかにした. そのうちの 1 つは Fulde-Ferrell 相 (FF 相) と呼ばれるものであり, この相の特徴は Cooper 対が有限の重心運動量を有することにある. もう 1 つの相は breached-pairing 相 (BP 相) と呼ばれるものであり, この相では Cooper 対の重心運動量は 0 であるが, 超流動体の励起を表す Bogoliubov スペクトルがノード (節) を有する. “breached-pairing” という名称は, 「超流動成分がノードにおいて常流動成分に壊されている (breach されている)」ということに由来する. 我々は, これら 2 つの新奇な超伝導相の可能性も考慮に入れて, c - f ペアリング超伝導の解析を行う. 上の式 (4.20) で Cooper 対の重心運動量 \mathbf{q} を考慮したのは FF 相の解析を可能にするためである. また, 一般性を失うことなく超伝導秩序変数 $\Delta_{\mathbf{k}}$ を実にとることができるため, 以下そのようにする.

我々は, 超伝導秩序変数に加え, 次の Hartree 型の平均場を仮定する.

$$\frac{n_c}{2} \equiv \langle n_{i\sigma}^c \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow, \quad (4.21)$$

$$\frac{n_f}{2} \equiv \langle n_{i\sigma}^f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow, \quad (4.22)$$

$$\phi^c \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow, \quad (4.23)$$

$$\phi^f \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \langle f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow. \quad (4.24)$$

ここで, $n \equiv n_c + n_f$ は系全体の粒子数密度である. H_0 に含まれる Hubbard 型相互作用項, および, H_2 に含まれる全ての項を平均場分離することにより, 我々は次の平均場ハミルトニアン \bar{H}_{MF} を得る (導出の詳細は付録 D を参照).

$$\begin{aligned} \bar{H}_{\text{MF}} &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \bar{\xi}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} + \text{H.c.} \right) \\ &\quad - \frac{1}{4} N U n_f^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} N n_f \phi. \end{aligned} \quad (4.25)$$

ここで,

$$\bar{\xi}_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + W_{\mathbf{k}\mathbf{k}} - n_f J_{\mathbf{k}\mathbf{k}}/4, \quad (4.26)$$

$$\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f \equiv \epsilon_f - \mu + U n_f/2 - \phi/2 - W_{\mathbf{k}\mathbf{k}} + n_f J_{\mathbf{k}\mathbf{k}}/4, \quad (4.27)$$

$$\phi \equiv \phi^c - \phi^f \quad (4.28)$$

を定義した. 式 (4.27) において f 電子の 1 体エネルギー $\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f$ が波数 \mathbf{k} に依存していることに注意されたい. これは, c 電子と f 電子の相関効果が f 軌道に有限のバンド幅を与えたことを意味する. さて, 式 (4.25) から, 容易に次の熱力学ポテンシャル Ω を導くことができる.

$$\Omega = \sum_{\mathbf{k}} \left[\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f - \frac{1}{4} U n_f^2 + \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} n_f \phi \right] - \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \alpha=\pm} \ln \left(2 \cosh \frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\alpha}{2} \right). \quad (4.29)$$

ここで,

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}, \quad (4.30)$$

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\pm = \frac{1}{2} \left(-\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f \pm E_{\mathbf{k}} \right) \quad (4.31)$$

であり, β は逆温度である ($\beta = 1/T$). 上部 Bogoliubov バンド ($\omega_{\mathbf{k}}^+$), および, 下部 Bogoliubov バン

ド ($\omega_{\mathbf{k}}^-$) は, $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^\pm$ と $\omega_{\mathbf{k}}^+ = \max(|\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+|, |\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-|)$ および $\omega_{\mathbf{k}}^- = \min(|\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+|, |\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-|)$ で関係付けられる.

変分条件 $\frac{\partial \Omega}{\partial B_{\mathbf{k}}} = 0$, $n = -\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu}$, $\frac{\partial \Omega}{\partial \phi} = 0$, $\frac{\partial \Omega}{\partial n_f} = 0$ から, $\Delta_{\mathbf{k}}$, μ , n_f , ϕ に対する次の自己無撞着方程式が得られる.²²

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}'} \frac{f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^+) - f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^-)}{E_{\mathbf{k}'}} \quad (4.32)$$

$$n = 2 + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \left(\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f \right) \frac{f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^+) - f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^-)}{E_{\mathbf{k}'}} \quad (4.33)$$

$$n_f = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \left[\left(1 + \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^+) + \left(1 - \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^-) \right] \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} \phi = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} & \left[(J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + J_{\mathbf{k}'}) (f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^+) + f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^-)) \right. \\ & \left. + \frac{(J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - J_{\mathbf{k}'}) (\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f)}{E_{\mathbf{k}'}} \times (f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^+) - f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^-)) \right]. \end{aligned} \quad (4.35)$$

ここで, $J_{\mathbf{k}} = J_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ という表記を用いた. また, $f(E) = 1/(e^{\beta E} + 1)$ は Fermi 分布関数である. さて, 式 (4.17) から, 秩序変数 $\Delta_{\mathbf{k}}$ は $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0 + \Delta_1 L_{\mathbf{k}}$ の形を取ることがわかる. この表式を式 (4.32) に代入することで, 式 (4.32) の代わりに Δ_0 と Δ_1 に関する次の自己無撞着方程式を得る.

$$\Delta_0 = \frac{V^2}{UN} \sum_{\mathbf{k}'} L_{\mathbf{k}'} (\Delta_0 + \Delta_1 L_{\mathbf{k}'}) \frac{f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^+) - f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^-)}{E_{\mathbf{k}'}} \quad (4.36)$$

$$\Delta_1 = \frac{V^2}{UN} \sum_{\mathbf{k}'} (\Delta_0 + \Delta_1 L_{\mathbf{k}'}) \frac{f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^+) - f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^-)}{E_{\mathbf{k}'}} \quad (4.37)$$

粒子数密度 n を与えて, 式 (4.33)-(4.37) を数値的に解くことで, Δ_0 , Δ_1 , μ , n_f , ϕ を決定する. また同時に, 自由エネルギー $F = \Omega + \mu n N$ を重心運動量 \mathbf{q} に関して最小化することで, 系に最適な \mathbf{q} を決定する (詳細は付録 F を参照). 本研究では, 重心運動量 \mathbf{q} の方向を $\mathbf{q} = (q/\sqrt{2}, q/\sqrt{2})$ と仮定し, Coulomb 斥力 U を $U/t = 12$ に固定する. 以下で, この設定の下で行った数値計算の結果を見ていくことにしよう.

4.3.3 計算結果

我々の計算結果を示す前に, 本研究と関係の深い Hanzawa と Yosida による先行研究 [60] について述べておく. 彼らは, 我々と同様の周期 Anderson 模型を, Coulomb 斥力が無限大の極限で解析した. すなわち, 彼らの計算では Hilbert 空間から f 軌道が 2 重占有される自由度が排除されている. 彼らはこのような状況の下, c - f ペアリング超伝導のギャップ方程式を導出し, 超伝導転移温度のオーダーを見積もっている. 一方, 本論文で述べる我々の解析には, c - f ペアリング超伝導に関する

²²Green 関数を用いても同様の自己無撞着方程式を導くことができる. 導出の詳細については付録 E を参照されたい.

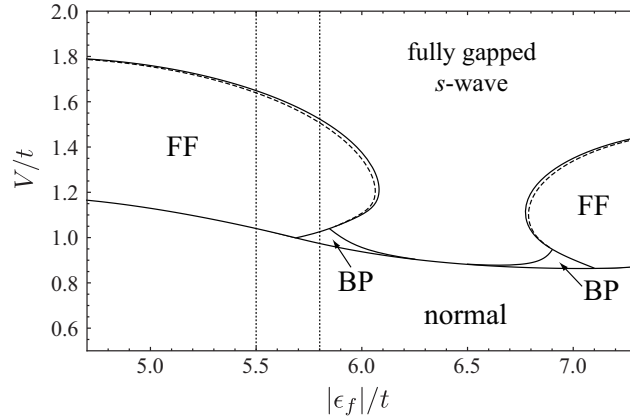


図 4.7: $n = 2.2$, $T/t = 0.005$ における $(|\epsilon_f|/t, V/t)$ 平面の相図. 実線は, フルギャップ s 波相, FF 相, BP 相, 常伝導 (normal) 相の相境界 (いずれも 2 次相転移) を表している. 点線は, FF 相における Bogoliubov バンド $\omega_{\mathbf{k}}^-$ のギャップ $\tilde{\Delta}$ が 0 となる位置を示している. また, 2 本の垂直な破線は, それぞれ $|\epsilon_f|/t = 5.5$ と $|\epsilon_f|/t = 5.8$ に引かれている.

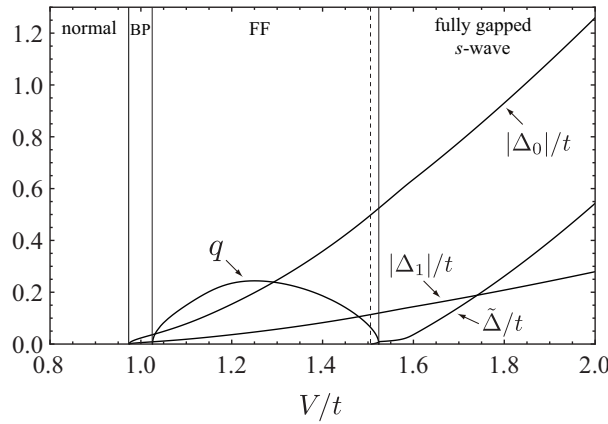


図 4.8: $n = 2.2$, $T/t = 0.005$ における $|\Delta_0|/t$, $|\Delta_1|/t$, q , $\tilde{\Delta}/t$ の V/t 依存性. 垂直な実線は各相の間の 2 次相転移点を示している. また垂直な点線は FF 相の Bogoliubov バンド $\omega_{\mathbf{k}}^-$ のギャップ $\tilde{\Delta}$ が消失する位置を指し示している.

る秩序変数の他, Hartree 型の平均場まで含まれている. さらに本研究では, 有限の重心運動量を持つ超伝導状態 (FF 状態) も考慮できるようになっている. また, 我々の計算における Coulomb 斥力は大きい有限なため, 先の 2 重占有の自由度が Hilbert 空間から排除される心配もない. 以下に詳しく述べるように, 今回, 我々のこのような解析において, Hanzawa と Yosida が議論したシンプルな s 波超伝導相に加え, 2 つの新奇な c - f ペアリング超伝導相が存在することが明らかになった.

図 4.7 は, $n = 2.2$ における $|\epsilon_f|$ - V 相図である. この相図は, フルギャップ s 波相, FF 相, BP 相, 常伝導相の 4 つの相を含んでいる. 破線で示された $|\epsilon_f|/t = 5.8$ に沿って, これらの相の間の相転移を議論していくことにしよう. 相転移の状況をわかりやすくするため, 図 4.8 に, $|\epsilon_f|/t = 5.8$ に

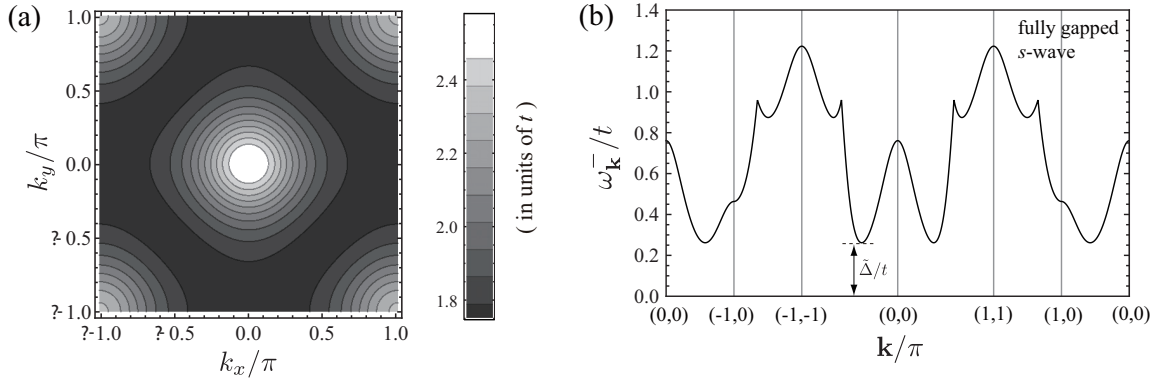


図 4.9: (a) 第 1 Brillouin ゾーンにおける超伝導秩序変数の絶対値 $|\Delta_{\mathbf{k}}|$. (b) $n = 2.2$, $T/t = 0.005$, $|\epsilon_f|/t = 5.8$, $V/t = 1.8$ (フルギャップ s 波相) における下部 Bogoliubov バンド $\omega_{\mathbf{k}}^-$ の振る舞い.

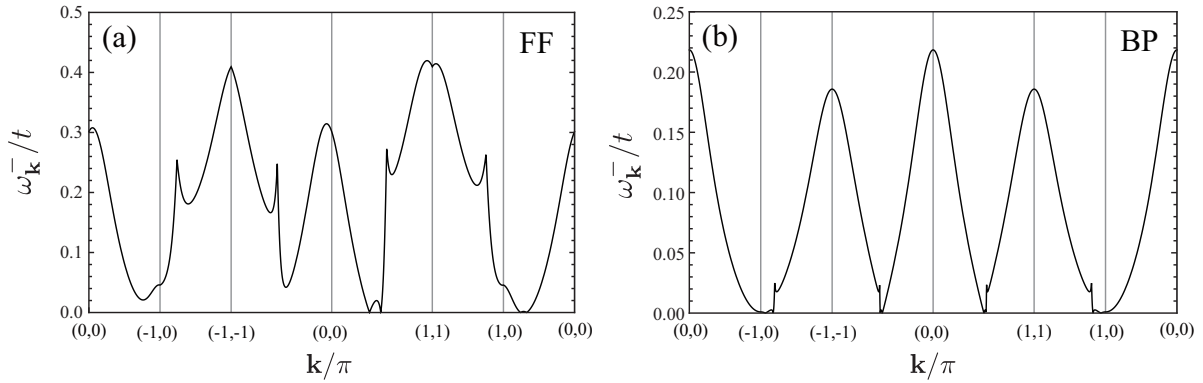


図 4.10: (a) $V/t = 1.3$ (FF 相), (b) $V/t = 1$ (BP 相) における下部 Bogoliubov バンド $\omega_{\mathbf{k}}^-$ の振る舞い. その他のパラメータは、いずれの図においても $n = 2.2$, $T/t = 0.005$, $|\epsilon_f|/t = 5.8$.

における Δ_0 , Δ_1 , q の V/t 依存性を示す.²³ またこの図に、Bogoliubov バンドの実際のギャップ値 $\tilde{\Delta} \equiv \min_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}}^-)$ も合わせてプロットしている. まず、 V が大きい領域においては、フルギャップの s 波相が発現する. この超伝導相がフルギャップの s 波対称性を持つことは、図 4.9(a) に見られるように秩序変数 $\Delta_{\mathbf{k}}$ が非等方的な s 波対称性を有すること、また、図 4.9(b) に見られるように下部 Bogoliubov バンド $\omega_{\mathbf{k}}^-$ が Brillouin ゾーンで常に有限のギャップを有していることから明らかである. 続いて、 V を小さくしていくと、やがて FF 相が発現する. この FF 相では、有限の重心運動量 q の存在のために、下部 Bogoliubov バンド $\omega_{\mathbf{k}}^-$ が Brillouin ゾーンに対して非対称な振る舞いを見せる [図 4.10(a) 参照]. また、このような FF 相のほとんどのパラメータ領域で、 $\tilde{\Delta} = 0$, すなわち、下部 Bogoliubov バンドがギャップレスとなっていることがわかる (図 4.8 参照). ちなみに、FF 相がフルギャップになるのは、図 4.8 に見られるように、 $1.508 \lesssim V/t \lesssim 1.524$ という非常に狭い

²³ 図 4.7 のパラメータ領域においては Δ_0 と Δ_1 が常に逆符号となるため、我々はその絶対値 $|\Delta_0|$ および $|\Delta_1|$ をプロットしている.

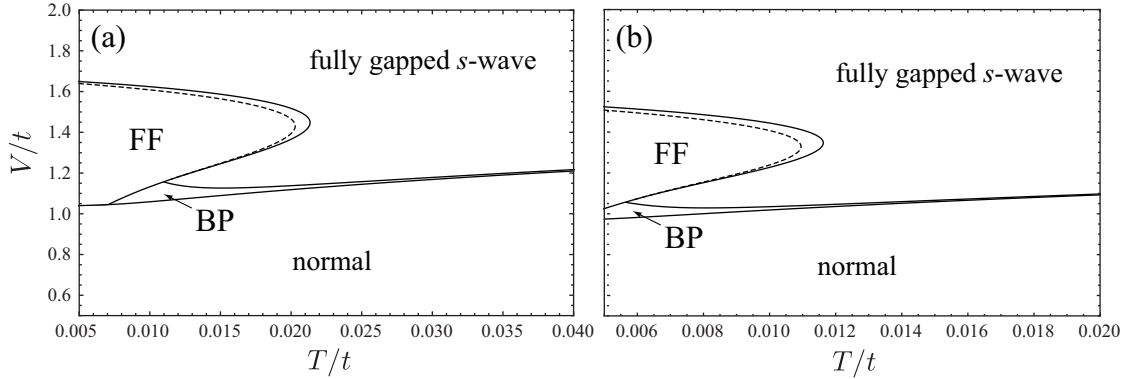


図 4.11: $n = 2.2$ における T - V 相図. (a) は $|\epsilon_f|/t = 5.5$ のとき, (b) は $|\epsilon_f|/t = 5.8$ のときである. 実線は, フルギャップ s 波相, FF 相, BP 相の相境界 (いずれも 2 次相転移) を表している. 点線は, FF 相における Bogoliubov バンド $\omega_{\mathbf{k}}$ のギャップ $\tilde{\Delta}$ が 0 となる位置を示している.

パラメタ領域のみである. さて, V をさらに小さくすると, BP 相が発現する. この相の特徴は, 先にも述べたように, Cooper 対の重心運動量が 0 である (つまり下部 Bogoliubov バンドが Brillouin ゾーン中心に関して対称である) にもかかわらず, 下部 Bogoliubov バンドのギャップが 0 となることにある [図 4.10(b) 参照]. V の値をさらに下げていくと, 最後は超伝導秩序変数が消失し, 系は常伝導状態になる. c - f ペアリング超伝導の実効的引力は $J_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ [式 (4.17) 参照] であり, これは V^2 に比例する. したがって, V が小さくなると常伝導状態に転移するのは妥当であると考えられる.

$|\epsilon_f|$ - V 相図に関して最後に述べておかなければならないことは, この相図に電子正孔対称性が存在することである. 具体的に述べると, $n = 2 + \delta$ の相図と $n = 2 - \delta$ の相図は, $|\epsilon_f| = U/2 = 6t$ に対して左右対称の関係になっている. 例えば, $U/t = 12$, $n = 1.8$ の $|\epsilon_f|$ - V 相図を得たければ, 図 4.7 の相図を $|\epsilon_f| = U/2 = 6t$ に関して左右反転させればよい. このような性質は, 当然ながら, 周期 Anderson 模型のよく知られた電子正孔対称性に由来している. このような電子正孔対称性は, 今回用いたようなバイパートイト格子²⁴の場合にのみ存在することに注意されたい.

次に, 「上に述べた 3 種の c - f ペアリング相が, 温度を上げた際にどのように振る舞うか」という点について調べる. 図 4.11(a), (b) は, それぞれ, 先の相図 (図 4.7) に破線で示した $|\epsilon_f|/t = 5.5$, $|\epsilon_f|/t = 5.8$ における T - V 相図である. これらの相図から, フルギャップ s 波相は FF 相や BP 相に比べると温度の上昇に対して強固であることがわかる. 一方, FF 相は, 温度を上げると完全に消失してしまうのが見て取れる. このような敏感な温度依存性は別の系における FF 相の先行研究 [61, 62] でも確認されている. BP 相の面積も温度の上昇に伴い顕著に減少するが, 図 4.11(a), (b) の範囲では完全に消失することはない. 結果として, 温度が高い領域では, フルギャップ s 波相が相図上の大きな面積を占めている.

本節ではここまで, c 電子と f 電子による c - f Cooper 対を考慮することで, 重い電子系の s 波超伝導が理解可能であることを述べてきた. ここで改めて, c - f Cooper 対の形成過程について考え

²⁴格子点全体が 2 つの副格子に分けられ, かつ, 異なる副格子間だけに跳び移り積分が存在する格子を指す.

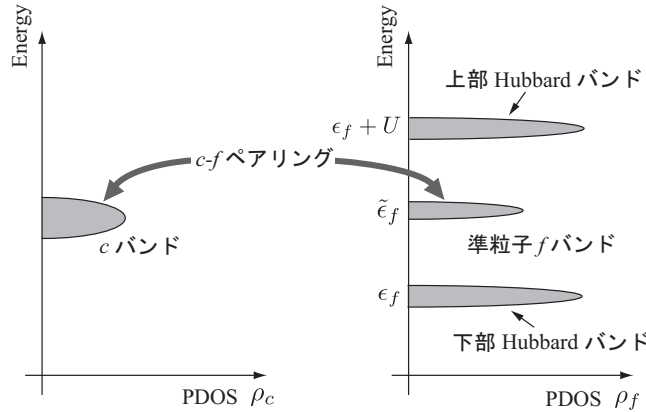


図 4.12: 周期 Anderson 模型における部分状態密度 (PDOS) の模式図. ρ_c は c 電子の部分状態密度, ρ_f は f 電子の部分状態密度を表す.

てみたい. 特に, 第 4.1 節で述べた重い準粒子状態が, c - f Cooper 対とどのような関係にあるのかという点について述べていきたい. このような考察を行うためには, まず, f 電子間 Coulomb 斥力 U を考慮した場合の電子状態について, 正確な描像を得る必要がある. 我々はこの議論の出発点として, もとものの周期 Anderson 模型 H_{PAM} [式 (4.1) を参照] を採用する. まず, Coulomb 斥力 U が混成 V に比べて大きい極限²⁵ を考えてみると, f 軌道と c 軌道の自由度は分離し, それによって, f 軌道の自由度は各サイトごとに分離する.²⁶ そして f 電子の部分状態密度 (PDOS) には, ϵ_f と $\epsilon_f + U$ に鋭いピークが見られるはずである. 続いて, Coulomb 斥力 U が小さい, 低エネルギー領域に着目しよう. この領域では, 第 4.1 節で述べたように, U の効果を摂動的に取り扱うことが許される. つまり, f 電子の PDOS は Fermi 準位付近の $\tilde{\epsilon}_f$ に強度を持ち, この $\tilde{\epsilon}_f$ に属する f 電子と c 電子が混成要素 \tilde{V} で混成することで「重い準粒子状態」が形成されるのであった. これらの描像を重ね合わせることで, Coulomb 斥力が中間的な値を持つ場合の電子状態を次のように予想することができる. すなわち, f 電子の PDOS は, ϵ_f と $\epsilon_f + U$ 付近に強相関描像に由来する下部 Hubbard バンドと上部 Hubbard バンドを持ち, さらにこれらの中央 $\tilde{\epsilon}_f$ 付近に弱相関描像に由来する幅の狭い準粒子 f バンドを有すると予想される (図 4.12 の右図を参照).²⁷ 我々は, このような準粒子 f バンドに属する f 電子と c 電子が c - f Cooper 対を形成していると考えている. これはつまり, 重い準粒子状態を形成している c 電子と f 電子が Cooper 対を形成しているという描像と等価である.

今回の我々の研究では, f 電子間の Coulomb 斥力 U は単純な平均場近似の範囲内で取り扱われている. したがって, 上で述べた下部 Hubbard バンドや上部 Hubbard バンドは記述することができない. その一方で準粒子 f バンドは, “あくまで近似的” にはあるが, Hartree シフト $\tilde{\epsilon}_f = \epsilon_f + U n_f / 2$ という形で表現することができている. 図 4.13(a), (b) は, フルギャップ s 波相における c 電子, f

²⁵原子極限と呼ばれる.

²⁶式 (4.1) から混成 V の項を除いて考えてみると容易に理解されよう.

²⁷下部および上部 Hubbard バンド, そして準粒子 f バンドの形成は動的平均場近似に基づく先行研究 [63–67] によって確認されている.

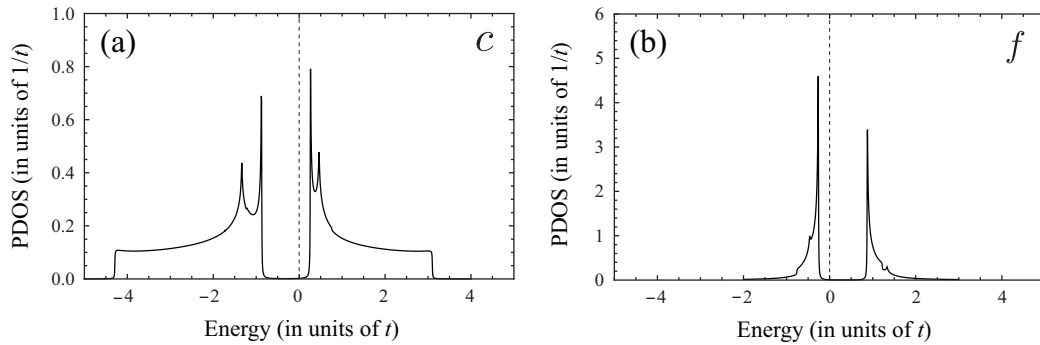


図 4.13: フルギャップ s 波相における (a) c バンド, (b) f バンドの部分状態密度 (PDOS). 使用したパラメータは $n = 2.2$, $T/t = 0.005$, $|\epsilon_f|/t = 5.8$, $V/t = 1.8$ である. 垂直な点線は Fermi 準位を示している.

電子それぞれの PDOS である.²⁸ これを見ると, f 電子も Fermi 準位近傍に大きな重みを持ち, 両 PDOS の Fermi 準位に超伝導ギャップが開いていることがわかる. このような PDOS の振る舞いは上に述べた我々のシナリオを支持しているものと考えられる.

周期 Anderson 模型のハーフフィリングにおける基底状態は, 「Kondo 絶縁体状態」 [68–70] と呼ばれる絶縁体状態である. そして Coulomb 斥力 U を大きくしていくと, このような絶縁体状態は反強磁性秩序を有するようになる [71–73]. 一方, 系の粒子数をハーフフィリングからずらした場合, 周期 Anderson 模型は基底状態として金属状態を有することが Mutou による解析 [74] で明らかにされている. しかし, この Mutou の研究では, c - f ペアリング超伝導は考慮されていない. 我々はこのようなドーピングされた周期 Anderson 模型において c - f ペアリング超伝導が発現するのではないかと考えている. ドーピングによって誘起されるこのような絶縁体-超伝導転移を議論するためには, 多体相関をより適切に記述できる動的平均場近似等を用いた解析が不可欠となる. このような動的平均場近似による解析は今後の課題であるが, 我々は次節にて, 動的平均場法に比べると手軽な変分クラスタ法を用いた解析結果について紹介する. この手法は, 次節の冒頭で述べるように, 単純な平均場近似に比べると多体相関をより適切に考慮できることが知られている.

²⁸PDOS は c 電子, f 電子の各正常 Green 関数を波数積分することによって得られる (定義は通常よく用いられるものである)ので適当な論文を参照して頂きたい. この PDOS の計算に使用した Green 関数の詳細については, 付録 E を参照して頂きたい.

4.4 重い電子系における非従来型 s 波超伝導 (変分クラスタ法解析)

前第 4.3 節では、有効ハミルトニアンに平均場近似を適用することで、重い電子系の非従来型 s 波超伝導を議論した。そして、このような超伝導の発現には、Fermi 準位付近に形成される準粒子 f バンドの存在が重要であることが示された。しかし、前節で用いた平均場解析には、以下のような弱点が存在する。まず第 1 点目として、平均場ハミルトニアン \bar{H}_{MF} [式 (4.25)] において、 c 電子と f 電子の混成項²⁹が存在しないことが挙げられる。もともとの周期 Anderson 模型が持つ混成項の効果は、 f 電子の 1 体エネルギーの中には取り込まれているものの³⁰、その効果が十分に考慮されているとは言い難い。そして、第 2 点目として、第 1 点目の事実からも当然ではあるが、混成 V における繰り込み効果 (V が斥力 U によって \tilde{V} に繰り込まれること) が十分に考慮されていない点が挙げられる。この点は、第 4.1 節でも述べたように、重い準粒子状態の形成に重要な役割を果たすため、適切に考慮される必要がある。そして、第 3 点目として、前節でも述べたが、平均場解析では下部および上部 Hubbard バンドが記述されないことが挙げられる。

本節では、上記の弱点を持たない変分クラスタ法 [75, 76] を周期 Anderson 模型に適用することで、重い電子系の非従来型 s 波超伝導について再考察する。

4.4.1 変分クラスタ法 (VCA)

変分クラスタ法 (VCA) [75, 76] は、Potthoff によって提案された自己エネルギー汎関数理論 (SFT) [77] に基づいている。まず、始めに SFT について説明を行った後、VCA について解説する。

一般的なハミルトニアン $H = H_0(\mathbf{t}) + H_1(\mathbf{U})$ によって記述される系を考えよう。ここで、 $H_0(\mathbf{t})$ は跳び移り積分 \mathbf{t} を持った 1 体項、 $H_1(\mathbf{U})$ は Coulomb 相互作用 \mathbf{U} を持った多体項を表している。³¹ このとき、系のグランドポテンシャルを次のように自己エネルギー Σ の汎関数として表すことができる [77]。

$$\Omega_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}[\Sigma] = \text{Tr} \ln [-(\mathbf{G}_{0, \mathbf{t}}^{-1} - \Sigma)^{-1}] + F_{\mathbf{U}}[\Sigma]. \quad (4.38)$$

ここで、 $\mathbf{G}_{0, \mathbf{t}} = (\omega + \mu - \mathbf{t})^{-1}$ は自由粒子の Green 関数である。また、 $\text{Tr} \equiv \beta^{-1} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n 0^+} \text{tr}$ は、逆温度 $\beta = 1/T$ 、Matsubara 周波数 $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ に関する和、そして通常の対角和 tr を含んだ“拡張された対角和”を表している。そして、末尾の項 $F_{\mathbf{U}}[\Sigma]$ は、Luttinger-Ward 汎関数 $\Phi_{\mathbf{U}}[\mathbf{G}]$ ³² を Legendre 変換したものである。このような汎関数 $F_{\mathbf{U}}[\Sigma]$ は関係式 $\mathbf{G} = -\beta \delta F_{\mathbf{U}}[\Sigma] / \delta \Sigma$ を満たすので、変分条件 $\delta \Omega_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}[\Sigma] / \delta \Sigma = 0$ によって、Green 関数の Dyson 方程式 $\mathbf{G}^{-1} = \mathbf{G}_{0, \mathbf{t}}^{-1} - \Sigma$ が導かれる。ここで、汎関数 $F_{\mathbf{U}}[\Sigma]$ の関数形が、自己エネルギー Σ のみに依存し、跳び移り積分 \mathbf{t} には陽

²⁹ $V \sum_{\mathbf{k}\sigma} (f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.})$ という形の項。

³⁰ 式 (4.27) を見るとわかるように、 f 準位 $\epsilon_{\mathbf{k}}^f$ は波数 \mathbf{k} に依存しており、有限のバンド幅を持つ。この点に、間接的にはあるが、混成項の効果が現れている。

³¹ 跳び移り積分 \mathbf{t} と Coulomb 相互作用 \mathbf{U} が太字 (すなわちベクトル) になっているのは、これらが複数のパラメータを表すこともあるためである。つまり、ここでは、 $\mathbf{t} = (t_1, t_2, \dots, t_n)$ や $\mathbf{U} = (U_1, U_2, \dots, U_n)$ などとなる場合 (多軌道系等の場合) も含めた定式化となっている。

³² \mathbf{G} は相互作用の効果も入った、系の厳密な Green 関数。

に依存しないことに注意する. この性質のために, ハミルトニアン $H' = H_0(\mathbf{t}') + H_1(\mathbf{U})$ によって記述される代理系のグランドポテンシャル $\Omega_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}]$ は次の式で与えられる.

$$\Omega_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}] = \text{Tr} \ln [-(\mathbf{G}_{0, \mathbf{t}'}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma})^{-1}] + F_{\mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}]. \quad (4.39)$$

代理系という言葉がいささか抽象的であるため, ここでその定義を簡単に述べる. 代理系とは, 元の系と同じ相互作用 \mathbf{U} を持った代理的な系である. 例えば, この後に述べる VCA では, 元の系を分割してできた等価なクラスタ (少数多体系) の集合体を代理系として採用する. 代理系内での跳び移り積分は, 元の系と同じである必要はなく, 一般に異なる値 \mathbf{t}' としておく. この値はすぐ後で述べるように変分条件により決定される. SFT では, 議論したい問題, そして, 取り扱う系の形状に応じて適切な代理系を選択する必要がある. さて, 式 (4.39) を $F_{\mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}]$ について解き, 式 (4.38) に代入することで, 次の $F_{\mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}]$ を含まない元の系のグランドポテンシャルが得られる.

$$\Omega_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}] = \Omega_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}] - \text{Tr} \ln [-(\mathbf{G}_{0, \mathbf{t}'}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma})^{-1}] + \text{Tr} \ln [-(\mathbf{G}_{0, \mathbf{t}}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma})^{-1}]. \quad (4.40)$$

我々はここで, 元の系の自己エネルギー $\boldsymbol{\Sigma}$ を代理系の自己エネルギー $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}$ で置き換える近似を行う. このような近似は自己エネルギーの短距離成分が重要となる強相関電子系において有効であると考えられている. その結果, 次の表式を得る.

$$\Omega_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}] = \Omega' - \text{Tr} \ln [-\mathbf{G}'_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}] + \text{Tr} \ln [-(\mathbf{G}_{0, \mathbf{t}}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}})^{-1}]. \quad (4.41)$$

ここで, $\Omega' \equiv \Omega_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}]$, および, $\mathbf{G}'_{\mathbf{t}', \mathbf{U}} \equiv (\mathbf{G}_{0, \mathbf{t}'}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}})^{-1}$ である. 変分条件 $\delta \Omega_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}] / \delta \mathbf{t}' = 0$ から最適な代理系の跳び移り積分 \mathbf{t}' を決定し, この値を用いて系の Green 関数 $\mathbf{G} = (\mathbf{G}_{0, \mathbf{t}}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}})^{-1}$ および物理量を求める. 以上が SFT の概略である.

それでは, このような SFT に基づく VCA を周期 Anderson 模型に適用していくことにしよう. ハミルトニアンは次の式で与えられる.

$$\begin{aligned} H_{\text{PAM}} = & -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + \epsilon_f \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^f + V \sum_{i\sigma} (f_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + \text{H.c.}) \\ & + U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f - \mu \sum_{i\sigma} (n_{i\sigma}^c + n_{i\sigma}^f). \end{aligned} \quad (4.42)$$

各項の説明は, 式 (4.9), (4.10) のところで述べてあるのでここでは省略する. 先の平均場解析と同様に, 2次元正方格子の場合について解析する.

先に述べたように, VCA では元の系を分割してできた等価なクラスタの集合体を代理系として採用する. 個々のクラスタのハミルトニアン H'_{Γ} は次のように与えられる.

$$H'_{\Gamma} = H'_{\text{PAM1}} + H'_{\text{PAM2}} + H'_{cf} + H'_{ff} + H'_{cc} + H'_{\text{AF}}, \quad (4.43)$$

ここで,

$$H'_{\text{PAM1}} = -t' \sum_{\langle ij \rangle \in \Gamma, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + \epsilon'_f \sum_{i \in \Gamma, \sigma} n_{i\sigma}^f - V' \sum_{i \in \Gamma, \sigma} (f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \text{H.c.}) - \mu' \sum_{i \in \Gamma, \sigma} (n_{i\sigma}^c + n_{i\sigma}^f), \quad (4.44)$$

$$H'_{\text{PAM2}} = U \sum_{i \in \Gamma} n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f, \quad (4.45)$$

$$H'_{cf} = h'_{cf} \sum_{i \in \Gamma} (c_{i\uparrow} f_{i\downarrow} - c_{i\downarrow} f_{i\uparrow} + \text{H.c.}), \quad (4.46)$$

$$H'_{ff} = h'_{ff} \sum_{i \in \Gamma} (f_{i\uparrow} f_{i\downarrow} + \text{H.c.}), \quad (4.47)$$

$$H'_{cc} = h'_{cc} \sum_{i \in \Gamma} (c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} + \text{H.c.}), \quad (4.48)$$

$$H'_{\text{AF}} = h'_{\text{AF}} \sum_{i \in \Gamma} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i} (n_{i\uparrow}^f - n_{i\downarrow}^f) \quad (4.49)$$

であり, Γ は代理系内の 1 つのクラスタ, \mathbf{Q} は整合波数ベクトル (π, π) を表している. 注目すべきは, 周期 Anderson 模型に含まれていない項, すなわち, 式 (4.46)-(4.49) が含まれている点である. このような「Weiss 場項」と呼ばれる項を仮定することで, VCA では, 超伝導や磁性といった長距離秩序を考慮することができる. 今回の計算では s 波超伝導の可能性について調べたいので, c - f ペアリングによる s 波超伝導の Weiss 場項 H'_{cf} , f - f ペアリングによる s 波超伝導の Weiss 場項 H'_{ff} , c - c ペアリングによる s 波超伝導の Weiss 場項 H'_{cc} を仮定する. さらに, 重い電子系のような強相関係では反強磁性が発現しやすいので, f 軌道内反強磁性を表現する Weiss 場項 H'_{AF} も仮定する. 先に述べた SFT の表式との対応を示すと, $H_0(\mathbf{t}') = H'_{\text{PAM1}} + H'_{cf} + H'_{ff} + H'_{cc} + H'_{\text{AF}}$, $H_1(\mathbf{U}) = H'_{\text{PAM2}}$ となっており, すなわち, $\mathbf{t}' = (t', \epsilon'_f, V', \mu', h'_{cf}, h'_{ff}, h'_{cc}, h'_{\text{AF}})$ である. SFT の説明の際には, \mathbf{t}' を跳び移り積分と述べたが, このように 1 体項すべてを含めることが可能である.

クラスタハミルトニアン H'_Γ を用いてグランドポテンシャル (4.41) を評価しよう. まず, 超伝導状態を取り扱いやすくするため, クラスタに関して次のような Nambu スピノルを導入する.

$$\Psi = (c_{1\uparrow}, \dots, c_{L\uparrow}, f_{1\uparrow}, \dots, f_{L\uparrow}, c_{1\downarrow}^\dagger, \dots, c_{L\downarrow}^\dagger, f_{1\downarrow}^\dagger, \dots, f_{L\downarrow}^\dagger)^\text{T}. \quad (4.50)$$

ここで, T はベクトルの転置操作を表し, L は 1 つのクラスタに含まれるサイトの数を表している. このスピノルを用いると, クラスタの Green 関数 $\mathbf{G}'_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}$ は $\mathbf{G}'_{\mathbf{t}', \mathbf{U}} = \langle \langle \Psi; \Psi^\dagger \rangle \rangle_\omega$ によって与えられる.³³ これ以後, 我々は絶対零度の場合のみを議論する. このとき, グランドポテンシャル (4.41) の第 2 項は次のように表される.

$$\text{Tr} \ln [-\mathbf{G}'_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}] = \sum_m \omega'_m \Theta(-\omega'_m) - R[\Sigma_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}]. \quad (4.51)$$

³³Green 関数 $\langle \langle A; B \rangle \rangle_\omega$ は, 本章の前半と同様に 2 時間反交換 Green 関数を表す.

ここで、 ω'_m はクラスタ Green 関数 $\mathbf{G}'_{\mathbf{t}',\mathbf{U}}$ の極、 $R[\Sigma_{\mathbf{t}',\mathbf{U}}]$ は自己エネルギー $\Sigma_{\mathbf{t}',\mathbf{U}}$ の極である。また、 $\Theta(x)$ は Heaviside 関数を表している。この式の右辺第 1 項 $\sum_m \omega'_m \Theta(-\omega'_m)$ は、さらに次のように単純化されることに注意する。

$$\sum_m \omega'_m \Theta(-\omega'_m) = \sum_m (E_0 - E_m). \quad (4.52)$$

ここで、 E_0 と E_m は、クラスタハミルトニアン H'_1 の基底状態および第 m 励起状態のエネルギーである。式 (4.51) と同様に、グラントポテンシャル (4.41) の第 3 項は次のように評価される。

$$\text{Tr} \ln [-(\mathbf{G}_{0,\mathbf{t}}^{-1} - \Sigma_{\mathbf{t}',\mathbf{U}})^{-1}] = \frac{L}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_m \omega_m(\tilde{\mathbf{k}}) \Theta(-\omega_m(\tilde{\mathbf{k}})) - R[\Sigma_{\mathbf{t}',\mathbf{U}}]. \quad (4.53)$$

ここで、 N は元の系の総サイト数、 $\omega_m(\tilde{\mathbf{k}})$ は VCA Green 関数 $\mathbf{G}_{\text{VCA}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \equiv (\mathbf{G}_{0,\mathbf{t}}^{-1} - \Sigma_{\mathbf{t}',\mathbf{U}})^{-1}$ の極である。³⁴ また $\tilde{\mathbf{k}}$ は“クラスタという超格子”を単位格子として Fourier 変換を行った際の波数ベクトルである。さて、式 (4.51)-(4.53) を用いることによって、グラントポテンシャルの最終表式が次のように得られる。

$$\Omega = E_0 - \sum_m (E_0 - E_m) + \frac{L}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_m \omega_m(\tilde{\mathbf{k}}) \Theta(-\omega_m(\tilde{\mathbf{k}})) - 2L(\mu - \mu') + L(\epsilon_f - \epsilon'_f). \quad (4.54)$$

ここで、末尾の 2 つの項、すなわち $-2L(\mu - \mu')$ と $L(\epsilon_f - \epsilon'_f)$ は、Nambu 表示を行う際にフェルミオンの反交換関係から現れる項である。以下で結果を示す実際の計算においては、グラントポテンシャル Ω を数値的に評価する。式 (4.53) は、このような数値計算において威力を発揮する便利な公式となっている。粒子数密度 n を与え、変分条件 $\frac{\partial \Omega}{\partial \alpha} = 0$ ($\alpha = t', \epsilon'_f, V', \mu', h'_{cf}, h'_{ff}, h'_{cc}, h'_{\text{AF}}$) と粒子数方程式 $n = \frac{1}{N} \sum_{i\sigma} \langle n_{i\sigma}^f + n_{i\sigma}^c \rangle$ を数値的に解くことで、³⁵ 変分パラメタ $\mathbf{t}' = (t', \epsilon'_f, V', \mu', h'_{cf}, h'_{ff}, h'_{cc}, h'_{\text{AF}})$ と化学ポテンシャル μ を決定する。そして、このようにして求めたパラメタを VCA Green 関数 $\mathbf{G}_{\text{VCA}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = (\mathbf{G}_{0,\mathbf{t}}^{-1} - \Sigma_{\mathbf{t}',\mathbf{U}})^{-1}$ に代入し、次の秩序変数を計算する。

$$\Delta_{cf} = -\frac{1}{2N} \sum_i \langle f_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger - f_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger \rangle, \quad (4.55)$$

$$\Delta_{ff} = \frac{1}{N} \sum_i \langle f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}^\dagger \rangle, \quad (4.56)$$

$$\Delta_{cc} = \frac{1}{N} \sum_i \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle, \quad (4.57)$$

$$m_f = \frac{1}{2N} \sum_i e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} \langle n_{i\uparrow}^f - n_{i\downarrow}^f \rangle. \quad (4.58)$$

³⁴VCA Green 関数の極 $\omega_m(\tilde{\mathbf{k}})$ を求める数値的な方法については付録 G を参照されたい。

³⁵Newton 法等を用いて、これら 9 つの連立自己無撞着方程式を数値的に解く。粒子数方程式の右辺に存在する期待値は、その時点の (収束値ではない) パラメタ $t', \epsilon'_f, V', \mu', h'_{cf}, h'_{ff}, h'_{cc}, h'_{\text{AF}}, \mu$ を代入した VCA Green 関数 $\mathbf{G}_{\text{VCA}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ を用いて評価する。

本研究では、これらすべての計算を2サイトクラスタ³⁶を用いて行う。このクラスタを用いた計算では、式(4.54)に含まれる波数の和 $\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}}$ は積分 $\int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\tilde{k}_x \int_{-\pi}^{\pi} d\tilde{k}_y$ に置き換えられる。また本研究では、簡単のため、変分パラメタ t', ϵ'_f, V' については元の系のもと同じとする ($t' = t, \epsilon'_f = \epsilon_f, V' = V$)。³⁷

4.4.2 計算結果

図4.14に各秩序変数の n 依存性を示す。 n がハーフフィリング ($n = 2$) に近い領域では、 f 軌道磁化 m_f と s 波超伝導の秩序変数 ($\Delta_{ff}, \Delta_{cf}, \Delta_{cc}$) が共に有限であることがわかる。すなわち、この領域では、反強磁性と s 波超伝導が共存している。このような共存状態は極めて珍しいものである。というのも、反強磁性秩序は、 d 波超伝導と相性が良い一方、 s 波超伝導とは相性が悪いことが知られているからである。このような共存状態の起源を明らかにすることは今後の課題であるが、我々は、従来の研究であまり考慮されてこなかった c - f 軌道間ペアリング (Δ_{cf}) の存在が重要な役割を果たしているものと予想している。続いて、 n をハーフフィリングから大きくしていくと、 f 軌道磁化 m_f は段々と小さくなり、臨界点 $n_c \sim 2.07$ で0となる。そして、この臨界点より n が大きい領域では、(共存状態ではない) 単一の s 波超伝導状態が現れる。

ここで、 s 波超伝導の秩序変数の大きさについて議論しよう。図4.14を見るとわかるように、いずれの n においても、 s 波超伝導の秩序変数は $\Delta_{ff} > \Delta_{cf} > \Delta_{cc} > 0$ となっている。我々は、このVCAによる解析を行う前、 $\Delta_{cf} \gg \Delta_{ff}, \Delta_{cc}$ かつ $\Delta_{ff} \sim \Delta_{cc} \sim 0$ になるであろうと予想していた。というのも、 c - f 電子間には引力が期待される一方、 f - f 電子間には Coulomb 斥力 U が働き、 c - c 電子間には引力の働く理由がないからである。ここでは、VCAによる計算結果が $\Delta_{ff} > \Delta_{cf} > \Delta_{cc} > 0$ となる理由を考えよう。先の平均場解析の結果から、 c - f 電子間には引力が働き、 c - f Cooper 対がで

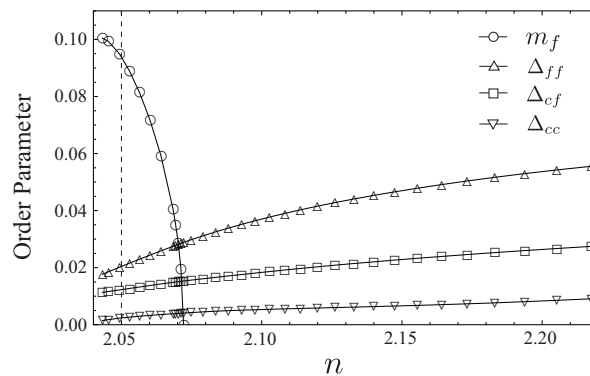


図 4.14: 秩序変数 $m_f, \Delta_{ff}, \Delta_{cf}, \Delta_{cc}$ の n 依存性。 $U/t = 2.3, V/t = 1$ である。点線は $n = 2.05$ に引かれている。

³⁶ 1×2 サイトクラスタ。

³⁷ このように仮定すると、解くべき方程式の数を9つから6つに減らすことができる。

きると期待される。つまり、 c - f ペアリングに関する秩序変数 Δ_{cf} は有限になると考えられる。我々はここを議論の出発点としよう。本研究で仮定した c - f ペアリング状態は、 c 電子と f 電子がスピン 1 重項を形成している状態である。しかし、量子力学的に考えると、このような純粋な c - f ペアリング状態はハミルトニアン固有状態にはなり得ない。なぜならば、周期 Anderson 模型のハミルトニアンには軌道間混成項が含まれているからである。つまり、ハミルトニアン固有状態とするためには、純粋な c - f ペアリング状態ではなく、この状態に f - f ペアリング状態と c - c ペアリング状態の両方 (c - f ペアリング状態にハミルトニアンを作用させたときに生じる状態) を足しておく必要がある。これが、 f - f ペアリング秩序変数 (Δ_{ff}) と c - c ペアリング秩序変数 (Δ_{cc}) が有限になる理由である。また、このことを Green 関数の言葉で表現すると、ハミルトニアンに混成項が存在するために、 c - f ペアリング、 f - f ペアリング、 c - c ペアリングに対応する各 Green 関数が、Dyson 方程式において分離せず絡んでいるということになる。以上が、3つの超伝導秩序変数 (Δ_{cf} , Δ_{ff} , Δ_{cc}) が同時に有限値を取る理由である。続いて、秩序変数の大きさについて論じるために、重い電子状態の準粒子バンド [図 4.2(a)] を再び見てみよう。先に強調したように、準粒子バンドは Fermi 準位近傍で非常に小さな傾きを持つ。つまり、Fermi 準位近傍の準粒子は、 f 電子を主成分としてできており、 c 電子の含まれる割合は極めて小さい [36]。このことから、超伝導の秩序変数に関して、 f 電子の含まれる割合が大きいものほど大きい値を取ることが予想される。このように考えると、 $\Delta_{ff} > \Delta_{cf} > \Delta_{cc}$ となることが理解できる。確かに、Coulomb 斥力 U が存在することで、 f 電子間で Cooper 対が組みづらくなることは事実である。実際、 f 電子間ペアリングの秩序変数 Δ_{ff} は U が大きくなると小さくなる [図 4.15(b) 参照]、しかし、3種ペアリングの混合状態である今回の超伝導状態では、 f 電子間斥力によるエネルギーの損を c - f ペアリングによる引力の得が上回ることで超伝導状態が発現しているものと考えられる。

粒子数密度 n を固定した場合 ($n = 2.05$) の秩序変数の振る舞いを見ていこう。図 4.15(a) に各秩序変数の V/t 依存性を示す。 V/t が小さい領域では反強磁性と s 波超伝導が共存するが、 V/t を大きくすると反強磁性秩序が消失し、純粋な s 波超伝導相に 2 次転移することがわかる。また、いずれ

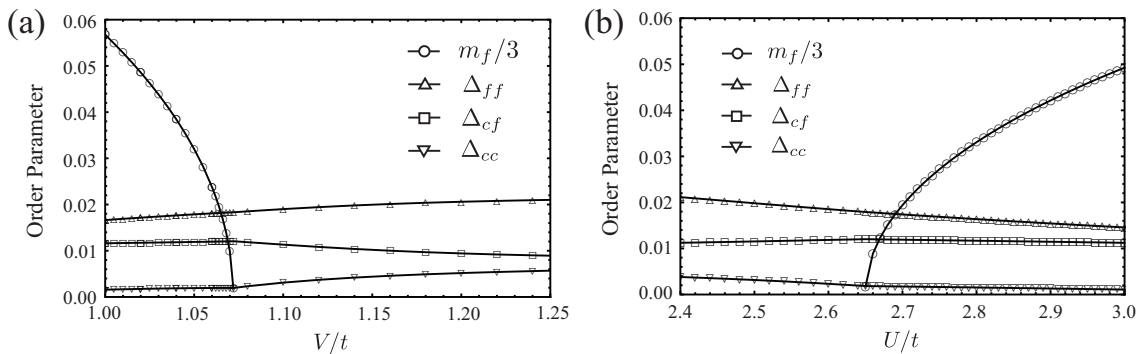


図 4.15: (a) $n = 2.05$, $U/t = 2.6$ における秩序変数 m_f , Δ_{ff} , Δ_{cf} , Δ_{cc} の V/t 依存性. (b) $n = 2.05$, $V/t = 1.08$ における秩序変数 m_f , Δ_{ff} , Δ_{cf} , Δ_{cc} の U/t 依存性.

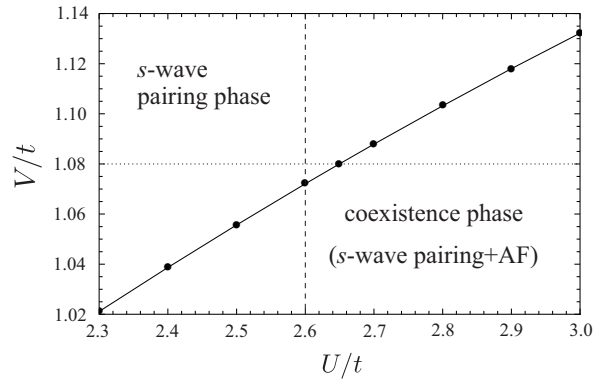


図 4.16: $n = 2.05$ における U - V 相図. 下部に存在する共存相は s 波超伝導と反強磁性の共存相である. 実線は単相の s 波超伝導相と共存相の相境界を示している (転移は 2 次である). 点線と破線はそれぞれ, $U/t = 2.6$ と $V/t = 1.08$ に引かれている.

の V/t においても, 先に述べた $\Delta_{ff} > \Delta_{cf} > \Delta_{cc}$ という関係は保たれている. 続いて, 図 4.15(b) に各秩序変数の U/t 依存性を示す. U/t を小さくすると共存相から s 波超伝導相への 2 次転移が起こることがわかる. そして, この図のパラメタ領域でも, やはり $\Delta_{ff} > \Delta_{cf} > \Delta_{cc}$ となっている. 以上を相図としてまとめると図 4.16 となる. この相図から, U/V が大きい領域には s 波超伝導と反強磁性の共存相が, U/V が小さい領域には単一の s 波超伝導相が現れることがわかる.

第5章 おわりに

本研究では、多軌道性を有する強相関電子系に着目し、これらの系で発現する超伝導について理論的解析を行った。重い電子系や近年発見された鉄系超伝導体など、強相関電子系には多軌道性を有する物質群が数多く存在する。これらの物質群ではしばしば超伝導が観測されるため、「多軌道性が超伝導の発現にどのような影響を与えているか」という点を明らかにすることは非常に重要な課題である。

まず、第2章では、多軌道系の超伝導を議論するための基礎として、BCS理論について概説した。このようなBCS理論は1軌道超伝導の基礎理論であり、これまで多くの超伝導体の物性を理解するのに役立ってきた。このBCS理論について解説する際、「超伝導ギャップ」や「ペアリング対称性」といった、後の章で重要となる概念について詳細に説明した。そしてBCS理論の応用として、コヒーレンス効果について解説した。このコヒーレンス効果は、外場の時間反転対称性によって系の応答関数の振る舞いが定性的に大きく異なる現象である。このコヒーレンス効果が超伝導ギャップの位相(符号)に強く依存する現象であることを強調した。

続く第3章にて、鉄系超伝導体のペアリング対称性を決定する実験の提案を行った。鉄系超伝導体ではこれまでに2つのペアリング対称性(s_{+-} 波対称性と s_{++} 波対称性)が提案されているものの、未だにどちらが実現しているかは実験的に明らかにされていない。我々は、この鉄系超伝導体のペアリング対称性を早急に同定させるべく、この研究に着手した。我々のアイデアは、第2章で述べたコヒーレンス効果を利用するというものである。コヒーレンス効果は超伝導ギャップの位相に強く依存するため、 s_{+-} 波対称性と s_{++} 波対称性では異なるコヒーレンス効果が得られるだろうと期待したのである。実際に応答関数の温度依存性を計算した結果、確かに s_{+-} 波対称性と s_{++} 波対称性では、応答関数が定性的に異なる振る舞いを示すことが明らかとなった。我々は、この結果を基に、非弾性X線散乱実験および非弾性中性子散乱実験で密度・スピン応答関数の温度依存性を測定することによって、鉄系超伝導体のペアリング対称性が同定されうることを提案した。

第4章では、重い電子系において s 波超伝導の発現可能性を議論した。このような視点に至ったのは、重い電子系のいくつかの実験で s 波超伝導の発現が実際に確認されているからである。重い電子系では通常、 f 電子間の強いCoulomb斥力が支配的であるため、電子が隣接サイト間でCooper対を組む d 波超伝導が発現しやすいと考えられている。「通常発現しづらいはずの s 波超伝導が如何にして発現するのか」という点を明らかにすべく、この研究に着手した。この研究に関する我々のアイデアは、重い電子系が持つ多軌道性に着目し、これまでほとんどの研究で考慮されてこなかった伝導電子(c 電子)と f 電子によるCooperペアリング(c - f ペアリング)を考えた点にある。

2次摂動論の観点に立つと、 c - f 電子間には実効的な引力が働くことが期待され、先に述べた f 電子間斥力もこの引力の一部になりうると考えられる。このような予想の下、我々は周期 Anderson 模型に Schrieffer-Wolff 変換と平均場近似を適用することで、微視的な計算を行った。その結果、重い電子系の広いパラメタ領域で s 波超伝導が発現しうると明らかにした。このような s 波超伝導は、従来良く知られている電子格子相互作用ではなく、重い電子系の“多軌道性”と“電子間斥力”によって発現するものである。したがって、我々はこの s 波超伝導を「非従来型 s 波超伝導」であると結論付けた。しかし、この解析で用いた平均場近似には、“電子相関の効果を十分に考慮することが難しいこと”など、いくつかの弱点が存在する。そこで我々は、周期 Anderson 模型に変分クラスタ法 (VCA) を適用することで、重い電子系の s 波超伝導について再考察した。そしてその結果、「 c - f 電子間の引力によって c - f 電子間の s 波 Cooper 対が形成され、さらに軌道間混成の影響で、 f - f 電子間の s 波 Cooper 対や c - c 電子間の s 波 Cooper 対も誘起される」という新たな描像を明らかにした。

以上のように、我々は強相関電子系の多軌道超伝導について議論した。最後に、これらの研究を踏まえ、今後の研究の展開、展望について述べる。まず第一に挙げられるのは、重い電子系における非従来型 s 波超伝導と d 波超伝導の競合問題である。先に述べたように、重い電子系超伝導体には d 波対称性を持つ物質と s 波対称性を持つ物質が存在する。これら 2つの対称性を 1つの理論の枠内で説明できればこれに勝ることはない。我々は、非従来型 s 波超伝導と d 波超伝導の両方を考慮できる手法を用いてこれらの競合問題を議論したいと考えている。我々の予想としては、Coulomb 斥力がさほど強くない領域では非従来型 s 波超伝導が、Coulomb 斥力が強い領域では d 波超伝導が優勢になるのではないかと考えている。また、我々が提案した軌道間ペアリング超伝導は、重い電子系に限らず多軌道性が重要となる強相関電子系一般に発現しうる現象である。我々は、鉄系超伝導体をはじめとした他の強相関電子系においても、このような軌道間ペアリングの可能性を模索していきたいと考えている。

謝辞

本研究を進めるに当たり、多くの方に御指導頂きました。この場をお借りし、皆様に感謝の意を述べたいと思います。指導教官である栗原進教授には、本研究に関し多くのアドバイスを頂きました。また、論文の共著者として、内容に関する議論から英文の吟味に至るまで様々な側面でお世話になりました。

そして、本博士論文の副査をして頂いた勝藤拓郎教授、山崎義弘教授、湯浅一哉教授に感謝致します。勝藤教授には、実験家としての視点から、研究内容に関する重要なコメントを数多く頂きました。また山崎教授には、本論文の公聴会において、示唆に富む多くの質問をして頂きました。そして湯浅教授には、本論文を通読の上、計算の詳細から文章の一字一句に至るまで、非常に極め細やかなアドバイスとコメントをして頂きました。先生方に論文審査をして頂いたおかげで、本論文の内容を洗練させることができたことと感謝致しております。

そして、栗原研究室の皆様には、日頃の議論やセミナー等で大変お世話になりました。山本大輔博士には研究室の先輩、そして論文の共著者として、様々な点でアドバイスを頂きました。山本博士のご協力がなければ、本論文は今日のような形で仕上がっていなかったものと思っております。本当にありがとうございました。土屋俊二博士には、研究室の先輩として、研究生活や研究内容に関し、多くのアドバイスを頂きました。上出健仁博士には、研究室の先輩、そして助教として、研究に関する多くの基礎知識を教えて頂きました。また上出博士が、私の隣の机でFeynmanダイアグラムと日夜向き合う姿は、今も私の目に焼きついています。このような上出博士の姿は、私に、研究に立ち向かう勇気を与えてくれました。余越伸彦博士と段下一平博士には、研究室の先輩、そして早稲田大学高等学院の先輩として、研究生活に関する相談に快く応じて頂きました。お二人のユーモア溢れる発言に何度励まされたか知れません。学部4年生、修士課程時代には、研究室の先輩である大澤賢太郎氏、中林淳氏、市原遼子氏、湯前慶大氏、西井淳氏、そして、同期生である野村隆夫氏、足立原慎吾氏、村山大河氏、工藤航氏に、公私にわたり大変お世話になりました。また、研究室の後輩である八木庭涼平氏、山村宏樹氏、後藤慎平氏、東大徳氏、久保百合香氏、中村直人氏には、修士論文や卒業論文に関する議論の中で、多くのことを学ばせて頂きました。また、山村宏樹氏には、本論文を通読してもらい、有益なコメントを数多く頂きました。ここに感謝したいと思います。

最後になりますが、ここまで私を育ててくれた両親に心から感謝したいと思います。また、博士課程進学を喜んで応援してくれた祖父母をはじめとした親族、そして、幼い頃から大変お世話になってきた川崎慎一、川崎由美子ご夫妻にも心から感謝したいと思います。

付録 A

2バンド BCS 模型における Green 関数 (3.12) の導出

式 (3.10) の 2 バンド BCS 模型

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \nu = \pm} \xi_{\nu}(\mathbf{k}) \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}, \nu = \pm} \left[\Delta_{\nu} \gamma_{\nu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) \gamma_{\nu\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) + \Delta_{\nu} \gamma_{\nu\downarrow}(-\mathbf{k}) \gamma_{\nu\uparrow}(\mathbf{k}) \right]$$

に対して, 正常, 異常 Green 関数を求める. 正常 Green 関数は

$$\mathcal{G}_{\nu}(\mathbf{k}, -\tau) = -\langle T_{\tau} \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}, 0) \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau) \rangle \quad (\text{A.1})$$

$$= -\langle \theta(-\tau) \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}, 0) \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau) - \theta(\tau) \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau) \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}, 0) \rangle \quad (\text{A.2})$$

と定義される. ここで τ は虚時間を表す. この Green 関数の虚時間微分は

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{\nu}(\mathbf{k}, -\tau) &= -\langle -\delta(\tau) \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}, 0) \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}, 0) + \theta(-\tau) \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}, 0) \frac{\partial \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau)}{\partial \tau} \\ &\quad - \delta(\tau) \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}, 0) \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}, 0) - \theta(\tau) \frac{\partial \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}, 0)}{\partial \tau} \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}, 0) \rangle \\ &= \delta(\tau) - \langle T_{\tau} \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}, 0) \frac{\partial \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau)}{\partial \tau} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

となるので, Heisenberg の運動方程式を用いると Green 関数の時間発展は

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{\nu}(\mathbf{k}, -\tau) = \delta(\tau) + \langle T_{\tau} \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}, 0) [\gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau), \mathcal{H}] \rangle \quad (\text{A.4})$$

となる. 式 (A.4) に含まれる交換関係は, $\sigma = \uparrow, \downarrow = 1, -1$ として

$$[\gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}, \tau), \mathcal{H}] = -\xi_{\nu}(\mathbf{k}) \gamma_{\nu\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) + \sigma \Delta_{\nu} \gamma_{\nu\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}) \quad (\text{A.5})$$

となるので, 式 (A.4) は

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{\nu}(\mathbf{k}, -\tau) = \delta(\tau) + \xi_{\nu}(\mathbf{k}) \mathcal{G}_{\nu}(\mathbf{k}, -\tau) + \sigma \Delta_{\nu} \mathcal{F}_{\nu, \sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, -\tau) \quad (\text{A.6})$$

となる. ここで, $\mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, -\tau)$ は

$$\mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, -\tau) = \langle T_\tau \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k}, 0) \gamma_{\nu\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, \tau) \rangle \quad (\text{A.7})$$

である. $\mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, -\tau)$ に対しても, 式 (A.6) と同様の方程式を立てると,

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, -\tau) = -\xi_\nu(\mathbf{k}) \mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, -\tau) + \sigma \Delta_\nu \mathcal{G}_\nu(\mathbf{k}, -\tau) \quad (\text{A.8})$$

が得られる. 正常 Green 関数と異常 Green 関数の Fourier 変換は

$$\mathcal{G}_\nu(\mathbf{k}, -\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}_\nu(\mathbf{k}, i\omega_n), \quad (\text{A.9})$$

$$\mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, -\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n \tau} \mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (\text{A.10})$$

なので, Matsubara 周波数空間では両 Green 関数に対する次の連立方程式が成立する.

$$i\omega_n \mathcal{G}_\nu(\mathbf{k}, i\omega_n) = 1 + \xi_\nu(\mathbf{k}) \mathcal{G}_\nu(\mathbf{k}, i\omega_n) + \sigma \Delta_\nu \mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, i\omega_n), \quad (\text{A.11})$$

$$i\omega_n \mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, i\omega_n) = \sigma \Delta_\nu \mathcal{G}_\nu(\mathbf{k}, i\omega_n) - \xi_\nu(\mathbf{k}) \mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, i\omega_n). \quad (\text{A.12})$$

これを解くと, 次のように両 Green 関数が求まる.

$$\mathcal{G}_\nu(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n + \xi_\nu(\mathbf{k})}{(i\omega_n)^2 - E_\nu^2(\mathbf{k})}, \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\sigma \Delta_\nu}{(i\omega_n)^2 - E_\nu^2(\mathbf{k})}. \quad (\text{A.14})$$

ここで, $E_\nu(\mathbf{k}) = \sqrt{\xi_\nu^2(\mathbf{k}) + \Delta_\nu^2}$ である. また, ここでは割愛するが, $\mathcal{F}_{\nu,\bar{\sigma}\sigma}^\dagger(\mathbf{k}, i\omega_n)$ も全く同様に求めることができる.

付録 B

式 (3.17), (3.18) の導出

式 (3.16) から式 (3.17), (3.18) を導出する. まず, 式 (3.16) 中の統計平均のついた因子を次のようにワングループ近似する.

$$\begin{aligned}
& \langle T_\tau \gamma_{\nu_1 \sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \gamma_{\nu_2 \sigma}(\mathbf{k}, \tau) \gamma_{\nu_3 \sigma'}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, 0) \gamma_{\nu_4 \sigma'}(\mathbf{k}', 0) \rangle \\
& \approx - \langle T_\tau \gamma_{\nu_2 \sigma}(\mathbf{k}, \tau) \gamma_{\nu_3 \sigma'}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu_4 \sigma'}(\mathbf{k}', 0) \gamma_{\nu_1 \sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \rangle \\
& \quad + \langle T_\tau \gamma_{\nu_1 \sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \gamma_{\nu_3 \sigma'}^\dagger(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu_4 \sigma'}(\mathbf{k}', 0) \gamma_{\nu_2 \sigma}(\mathbf{k}, \tau) \rangle \\
& = - \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}} \delta_{\nu_2, \nu_3} \delta_{\nu_1, \nu_4} \delta_{\sigma', \sigma} \langle T_\tau \gamma_{\nu_2 \sigma}(\mathbf{k}, \tau) \gamma_{\nu_2 \sigma}^\dagger(\mathbf{k}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu_1 \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, 0) \gamma_{\nu_1 \sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \rangle \\
& \quad + \delta_{\mathbf{k}', -\mathbf{k}} \delta_{\nu_1, \nu_3} \delta_{\nu_2, \nu_4} \delta_{\sigma', \bar{\sigma}} \langle T_\tau \gamma_{\nu_1 \sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \gamma_{\nu_1 \bar{\sigma}}^\dagger(-\mathbf{k} - \mathbf{q}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu_2 \bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, 0) \gamma_{\nu_2 \sigma}(\mathbf{k}, \tau) \rangle.
\end{aligned} \tag{B.1}$$

式 (B.1) を用いると式 (3.16) を次のように変形していくことができる.

$$\begin{aligned}
D(\mathbf{q}, i\omega_m) &= \sum_{rt} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \sum_{\nu_1 \nu_2} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m \tau} \\
& \times \left[a_{\nu_1}^r(\mathbf{k} + \mathbf{q}) a_{\nu_2}^r(\mathbf{k}) a_{\nu_2}^t(\mathbf{k}) a_{\nu_1}^t(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \langle T_\tau \gamma_{\nu_2 \sigma}(\mathbf{k}, \tau) \gamma_{\nu_2 \sigma}^\dagger(\mathbf{k}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu_1 \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, 0) \gamma_{\nu_1 \sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \rangle \right. \\
& \quad \left. - a_{\nu_1}^r(\mathbf{k} + \mathbf{q}) a_{\nu_2}^r(\mathbf{k}) a_{\nu_1}^t(-\mathbf{k} - \mathbf{q}) a_{\nu_2}^t(-\mathbf{k}) \langle T_\tau \gamma_{\nu_1 \sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \gamma_{\nu_1 \bar{\sigma}}^\dagger(-\mathbf{k} - \mathbf{q}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu_2 \bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, 0) \gamma_{\nu_2 \sigma}(\mathbf{k}, \tau) \rangle \right] \\
& = \sum_{rt} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\nu\nu'} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m \tau} a_{\nu'}^r(\mathbf{k} + \mathbf{q}) a_{\nu'}^r(\mathbf{k}) a_{\nu'}^t(\mathbf{k}) a_{\nu}^t(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
& \quad \times \left[\langle T_\tau \gamma_{\nu' \sigma}(\mathbf{k}, \tau) \gamma_{\nu' \sigma}^\dagger(\mathbf{k}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, 0) \gamma_{\nu \sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \rangle \right. \\
& \quad \left. - \langle T_\tau \gamma_{\nu \sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \gamma_{\nu \bar{\sigma}}^\dagger(-\mathbf{k} - \mathbf{q}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu' \bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, 0) \gamma_{\nu' \sigma}(\mathbf{k}, \tau) \rangle \right].
\end{aligned} \tag{B.2}$$

ここで, 2つ目の等号において, $a_{\nu_1}^t(-\mathbf{k} - \mathbf{q}) = a_{\nu_1}^t(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ と $a_{\nu_2}^t(-\mathbf{k}) = a_{\nu_2}^t(\mathbf{k})$ を用いた. さて, Green 関数の定義 (A.1) より, 式 (B.2) の大括弧内の第 1 項は次のように書ける.

$$\begin{aligned}
& \langle T_\tau \gamma_{\nu' \sigma}(\mathbf{k}, \tau) \gamma_{\nu' \sigma}^\dagger(\mathbf{k}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, 0) \gamma_{\nu \sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \rangle \\
& = \mathcal{G}_{\nu'}(\mathbf{k}, \tau) \cdot \mathcal{G}_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, -\tau) \\
& = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}_{\nu'}(\mathbf{k}, i\omega_n) \cdot \frac{1}{\beta} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'} \tau} \mathcal{G}_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_{n'}).
\end{aligned} \tag{B.3}$$

よって、虚時間 τ に関する積分を先に実行すると次のようになる。

$$\begin{aligned}
& \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau} \langle T_\tau \gamma_{\nu'\sigma}(\mathbf{k}, \tau) \gamma_{\nu'\sigma}^\dagger(\mathbf{k}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu\sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, 0) \gamma_{\nu\sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \rangle \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_{nn'} \mathcal{G}_{\nu'}(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_{n'}) \cdot \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_m - \omega_n + \omega_{n'})\tau} \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_{\nu'}(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n - i\omega_m). \tag{B.4}
\end{aligned}$$

式 (B.2) の大括弧内の第 2 項についても同様に処理する。すなわち、Green 関数の定義 (??) を使
うと、

$$\begin{aligned}
& -\langle T_\tau \gamma_{\nu\sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \gamma_{\nu\bar{\sigma}}^\dagger(-\mathbf{k} - \mathbf{q}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu'\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, 0) \gamma_{\nu'\sigma}(\mathbf{k}, \tau) \rangle \\
&= -\mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \cdot \mathcal{F}_{\nu',\bar{\sigma}\sigma}(\mathbf{k}, -\tau) \\
&= -\frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n\tau} \mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n) \cdot \frac{1}{\beta} \sum_{n'} e^{i\omega_{n'}\tau} \mathcal{F}_{\nu',\bar{\sigma}\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_{n'}) \tag{B.5}
\end{aligned}$$

となるので、虚時間 τ に関する積分を実行し、次の式を得る。

$$\begin{aligned}
& -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau} \langle T_\tau \gamma_{\nu\sigma}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) \gamma_{\nu\bar{\sigma}}^\dagger(-\mathbf{k} - \mathbf{q}, 0) \rangle \langle T_\tau \gamma_{\nu'\bar{\sigma}}(-\mathbf{k}, 0) \gamma_{\nu'\sigma}(\mathbf{k}, \tau) \rangle \\
&= -\frac{1}{\beta} \sum_{nn'} \mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n) \mathcal{F}_{\nu',\bar{\sigma}\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_{n'}) \cdot \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_m - \omega_n + \omega_{n'})\tau} \\
&= -\frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{F}_{\nu',\bar{\sigma}\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + i\omega_m). \tag{B.6}
\end{aligned}$$

式 (B.5), (B.6) を式 (B.2) に用いると、次の式 [第 3 章中の式 (3.17)] が得られる。

$$\begin{aligned}
D(\mathbf{q}, i\omega_m) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{r\bar{t}} \sum_{\nu\nu'} \\
&\quad \times a_\nu^r(\mathbf{k} + \mathbf{q}) a_{\nu'}^r(\mathbf{k}) a_{\nu'}^{\bar{t}}(\mathbf{k}) a_\nu^{\bar{t}}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
&\quad \times [\mathcal{G}_{\nu'}(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n - i\omega_m) \\
&\quad - \mathcal{F}_{\nu',\bar{\sigma}\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{F}_{\nu,\sigma\bar{\sigma}}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + i\omega_m)]. \tag{B.7}
\end{aligned}$$

最後に式 (B.7) に含まれる Matsubara 周波数の和を解析的に実行する。用いる公式の導出等
は Zagoskin の教科書 [33] および Fetter & Walecka の教科書 [34] を参照して頂きたい。ここでは
Zagoskin の教科書 [33] にある方法に従って計算を行う。まず、式 (B.7) の大括弧中の第 1 項 (正常

Green 関数の積) について Matsubara 周波数の和を取る. 計算の詳細は次のようになる.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_{\nu'}(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n - i\omega_m) \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{i\omega_n + \xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{(i\omega_n)^2 - E_{\nu'}^2(\mathbf{k})} \cdot \frac{(i\omega_n - i\omega_m) + \xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{(i\omega_n - i\omega_m)^2 - E_{\nu}^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_s \tanh \frac{\beta z_s}{2} \operatorname{Res}_{z=z_s} \left[\frac{z + \xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{z^2 - E_{\nu'}^2(\mathbf{k})} \cdot \frac{(z - i\omega_m) + \xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{(z - i\omega_m)^2 - E_{\nu}^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right] \\
&= -\frac{1}{2} \left[\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} \cdot \frac{E_{\nu'}(\mathbf{k}) + \xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \cdot \frac{-i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + \xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{(i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}))^2 - E_{\nu}^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right. \\
&\quad - \tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} \cdot \frac{-E_{\nu'}(\mathbf{k}) + \xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{-2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \cdot \frac{-i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + \xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{(i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}))^2 - E_{\nu}^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\
&\quad + \tanh \frac{\beta E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \cdot \frac{i\omega_m + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{(i\omega_m + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))^2 - E_{\nu'}^2(\mathbf{k})} \cdot \frac{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\
&\quad \left. - \tanh \frac{\beta E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \cdot \frac{i\omega_m - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{(i\omega_m - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))^2 - E_{\nu'}^2(\mathbf{k})} \cdot \frac{-E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{-2E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right] \\
&= -\frac{1}{2} \left[\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} \cdot \frac{E_{\nu'}(\mathbf{k}) + \xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right. \\
&\quad \times \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} + \frac{1}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \left(\frac{1}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} - \frac{1}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \right\} \\
&\quad - \tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} \cdot \frac{E_{\nu'}(\mathbf{k}) - \xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \\
&\quad \times \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} + \frac{1}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \left(\frac{1}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} - \frac{1}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \right\} \\
&\quad + \tanh \frac{\beta E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \cdot \frac{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\
&\quad \times \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{i\omega_m + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\nu'}(\mathbf{k})} + \frac{1}{i\omega_m + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \left(\frac{1}{i\omega_m + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\nu'}(\mathbf{k})} - \frac{1}{i\omega_m + E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \right\} \\
&\quad - \tanh \frac{\beta E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \cdot \frac{E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \xi_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\
&\quad \times \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{i\omega_m - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\nu'}(\mathbf{k})} + \frac{1}{i\omega_m - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \left(\frac{1}{i\omega_m - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\nu'}(\mathbf{k})} - \frac{1}{i\omega_m - E_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \right\} \left. \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4} \left[\frac{1}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 - \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \left(\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} + \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \right) \right. \\
&\quad - \frac{1}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \left(\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} + \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \right) \\
&\quad + \frac{1}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \left(\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} - \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \right) \\
&\quad \left. - \frac{1}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 - \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \left(\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} - \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \right) \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[\frac{1 - f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 - \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \right. \\
&\quad - \frac{1 - f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \\
&\quad - \frac{f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \\
&\quad \left. + \frac{f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 - \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \right]. \tag{B.8}
\end{aligned}$$

ここで、2つ目の等号においては留数定理が使用されている。また、最後の等号において、恒等式 $\tanh \frac{\beta E}{2} = 1 - 2f(E)$ を用いた。続いて、式 (B.7) の大括弧中の第2項 (異常 Green 関数の積) について、同様に Matsubara 周波数の和を取る。計算の詳細は次のようになる。

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{F}_{\nu', \bar{\sigma}\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{F}_{\nu, \sigma\bar{\sigma}}^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + i\omega_m) \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{\bar{\sigma} \Delta_{\nu'}}{(i\omega_n)^2 - E_{\nu'}^2(\mathbf{k})} \cdot \frac{\bar{\sigma} \Delta_\nu}{(i\omega_n + i\omega_m)^2 - E_\nu^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_s \tanh \frac{\beta z_s}{2} \operatorname{Res}_{z=z_s} \left[\frac{\Delta_{\nu'}}{z^2 - E_{\nu'}^2(\mathbf{k})} \cdot \frac{\Delta_\nu}{(z + i\omega_m)^2 - E_\nu^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right] \\
&= -\frac{1}{2} \left[\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} \cdot \frac{\Delta_{\nu'}}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \cdot \frac{\Delta_\nu}{(i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}))^2 - E_\nu^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right. \\
&\quad - \tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} \cdot \frac{\Delta_{\nu'}}{-2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \cdot \frac{\Delta_\nu}{(i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}))^2 - E_\nu^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\
&\quad + \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \cdot \frac{\Delta_{\nu'}}{(i\omega_m - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))^2 - E_{\nu'}^2(\mathbf{k})} \cdot \frac{\Delta_\nu}{2E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\
&\quad \left. - \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \cdot \frac{\Delta_{\nu'}}{(i\omega_m + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))^2 - E_{\nu'}^2(\mathbf{k})} \cdot \frac{\Delta_\nu}{-2E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right] \\
&= -\frac{1}{2} \left[\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} \cdot \frac{\Delta_{\nu'}}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \cdot \frac{\Delta_\nu}{2E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \left(\frac{1}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} - \frac{1}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \right. \\
&\quad + \tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} \cdot \frac{\Delta_{\nu'}}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \cdot \frac{\Delta_\nu}{2E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \left(\frac{1}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} - \frac{1}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) \\
&\quad + \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \cdot \frac{\Delta_\nu}{2E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \frac{\Delta_{\nu'}}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \cdot \left(\frac{1}{i\omega_m - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\nu'}(\mathbf{k})} - \frac{1}{i\omega_m - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \\
&\quad \left. + \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \cdot \frac{\Delta_\nu}{2E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \frac{\Delta_{\nu'}}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})} \cdot \left(\frac{1}{i\omega_m + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\nu'}(\mathbf{k})} - \frac{1}{i\omega_m + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{4} \left[\frac{1}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \left(\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} + \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \right) \right. \\
&\quad - \frac{1}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \left(\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} + \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \right) \\
&\quad - \frac{1}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \left(\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} - \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \right) \\
&\quad \left. + \frac{1}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \left(\tanh \frac{\beta E_{\nu'}(\mathbf{k})}{2} - \tanh \frac{\beta E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{2} \right) \right] \\
&= -\frac{1}{2} \left[\frac{1 - f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right. \\
&\quad - \frac{1 - f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\
&\quad + \frac{f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{i\omega_m - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\
&\quad \left. - \frac{f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{i\omega_m + E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \cdot \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{2E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right]. \tag{B.9}
\end{aligned}$$

ここでも、2つ目の等号においては留数定理が使用されている。また、先と同様に、最後の等号において、恒等式 $\tanh \frac{\beta E}{2} = 1 - 2f(E)$ を用いた。

式 (B.8) と (B.9) を用いて式 (B.7) を変形した後、ボソンの Matsubara 周波数 $i\omega_m$ を $\omega + i\delta$ に置き換えると、最終的に次の式 [第3章中の式 (3.18)] が得られる。

$$\begin{aligned}
D(\mathbf{q}, \omega + i\delta) &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{rt} \sum_{\nu\nu'} a_\nu^r(\mathbf{k} + \mathbf{q}) a_{\nu'}^r(\mathbf{k}) a_{\nu'}^t(\mathbf{k}) a_\nu^t(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
&\times \left[\frac{1 - f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega - E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 - \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) + \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \right. \\
&\quad - \frac{1 - f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega + E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 - \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) + \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \\
&\quad - \frac{f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega - E_{\nu'}(\mathbf{k}) + E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 + \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 + \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) - \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \\
&\quad \left. + \frac{f(E_{\nu'}(\mathbf{k})) - f(E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega + E_{\nu'}(\mathbf{k}) - E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\delta} \frac{1}{2} \left\{ \left(1 - \frac{\xi_{\nu'}(\mathbf{k})}{E_{\nu'}(\mathbf{k})} \right) \left(1 - \frac{\xi_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right) - \frac{\Delta_{\nu'} \Delta_\nu}{E_{\nu'}(\mathbf{k})E_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right\} \right]. \tag{B.10}
\end{aligned}$$

付録 C

重い電子系の導入に関する Green 関数 (4.3), (4.4) の導出

まず f 電子間の Coulomb 相互作用がない場合の Green 関数を計算する. この場合のハミルトニアンは,

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \epsilon_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + V \sum_{\mathbf{k}\sigma} (f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.}) \quad (\text{C.1})$$

である. Green 関数ベクトルを

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} G_{\mathbf{k}}^{ff} \\ G_{\mathbf{k}}^{cf} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \langle\langle f_{\mathbf{k}\sigma}; f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle \\ \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}; f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{C.2})$$

と定義すると, 交換関係

$$[f_{\mathbf{k}\sigma}, H_0] = \epsilon_f f_{\mathbf{k}\sigma} + V c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (\text{C.3})$$

$$[c_{\mathbf{k}\sigma}, H_0] = \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} + V f_{\mathbf{k}\sigma} \quad (\text{C.4})$$

から, Green 関数ベクトルは次の運動方程式を満たす.

$$\omega \mathbf{G}_{\mathbf{k}} = \mathbf{\Lambda} + \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{k}} \mathbf{G}_{\mathbf{k}}. \quad (\text{C.5})$$

ここで, $\mathbf{\Lambda}$, $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{k}}$ は次の式で与えられる.

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \epsilon_f & V \\ V & \epsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.6})$$

式 (C.5) を $\mathbf{G}_{\mathbf{k}}$ について解くと, 次の f 電子 Green 関数 [第 4 章中の式 (4.3)] が得られる.

$$G_{\mathbf{k},0}^{ff} = \frac{1}{\omega - \epsilon_f - \frac{V^2}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}}}. \quad (\text{C.7})$$

ここで, 添え字 “0” は, 相互作用が入っていない Green 関数であることを示している. 続いて, この “自由 f 電子の” Green 関数に相互作用項 $U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f$ の影響を考慮していくことにしよう. この

影響を議論するためには、ハミルトニアン (C.1) に相互作用項 $U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f$ を加え、この相互作用入りハミルトニアンについて Green 関数 $\mathbf{G}_{\mathbf{k}}$ の運動方程式を解けばよい。しかし、相互作用項がある際には運動方程式が簡単には閉じず、運動方程式を閉じさせるために何らかの切断近似が必要となる。そこで、ここでは現象論的に、 f 電子間斥力 U が f 電子 Green 関数の自己エネルギーのみを与えると仮定する。すると、斥力 U の効果が入った f 電子 Green 関数 $G_{\mathbf{k}}^{ff}$ は次の式で与えられる。

$$G_{\mathbf{k}}^{ff} = \frac{1}{\omega - \epsilon_f - \frac{V^2}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}. \quad (\text{C.8})$$

ここで、 $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ が斥力 U の効果によって生じた自己エネルギーを表している。さて、相互作用項によって与えられる物理的影響を見るためには、このような自己エネルギーを、Fermi 波数 k_F 、Fermi エネルギー ϵ_F の周りで Taylor 展開してみるのが良い。Taylor 展開すると、 $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_F)$ 及び $(\omega - \epsilon_F)$ の 1 次までで次の表式が得られる。

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) \approx \Sigma(\mathbf{k}_F, \epsilon_F) + \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}, \epsilon_F)}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_F) + \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}_F, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\epsilon_F} (\omega - \epsilon_F). \quad (\text{C.9})$$

この Taylor 展開の結果 (C.9) を式 (C.8) に代入し、式を整理すると、我々は次の表式 [第 4 章中の式 (4.4)] を得る。

$$G_{\mathbf{k}}^{ff} = z_{\mathbf{k}_F} \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon}_{f,\mathbf{k}} - \frac{\tilde{V}^2}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}}}. \quad (\text{C.10})$$

ここで我々は、 $z_{\mathbf{k}_F}$ 、 $\tilde{\epsilon}_{f,\mathbf{k}}$ 、 \tilde{V}^2 を次のように定義した。

$$z_{\mathbf{k}_F} \equiv \frac{1}{1 - \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}_F, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\epsilon_F}}, \quad (\text{C.11})$$

$$\tilde{\epsilon}_{f,\mathbf{k}} \equiv z_{\mathbf{k}_F} \left[\epsilon_f + \Sigma(\mathbf{k}_F, \epsilon_F) + \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}, \epsilon_F)}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_F) - \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}_F, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\epsilon_F} \cdot \epsilon_F \right], \quad (\text{C.12})$$

$$\tilde{V}^2 \equiv z_{\mathbf{k}_F} V^2. \quad (\text{C.13})$$

付録 D

平均場ハミルトニアン (4.25) の導出

$\bar{H}_{\text{eff}} = H_0 + H_{\text{dir}} + H_{\text{ex}} + H_{\text{ch}} + H_{\text{ph}}$ を平均場近似することで, 平均場ハミルトニアン (4.25) を導出する. まず, 直接相互作用項 H_{dir} (4.13) を $H_{\text{dir}} = H_{\text{dir1}} + H_{\text{dir2}}$ と分解する. ここで

$$H_{\text{dir1}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}i\sigma} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (\text{D.1})$$

$$H_{\text{dir2}} = -\frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}i\sigma} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} (n_{i\uparrow}^f + n_{i\downarrow}^f) c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (\text{D.2})$$

である. 交換相互作用項 H_{ex} (4.14) と H_{dir2} を合わせると次のようになる.

$$H_{\text{ex}} + H_{\text{dir2}} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}i} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} \left(S_i^+ c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + S_i^- c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} - n_{i\uparrow}^f c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} - n_{i\downarrow}^f c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \right). \quad (\text{D.3})$$

ここで, $H_{\text{ex}} + H_{\text{dir2}}$ を平均場近似する. 平均場近似法とは, 演算子の積 AB を揺らぎの 1 次までで, $AB \approx \langle A \rangle B + \langle B \rangle A - \langle A \rangle \langle B \rangle$ と近似する方法である. $S_i^+ = f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}$, $S_i^- = f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\uparrow}$, $n_{i\sigma}^f = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$ であることに注意すると, $H_{\text{ex}} + H_{\text{dir2}}$ は次のように近似される.

$$\begin{aligned} H_{\text{ex}} + H_{\text{dir2}} \approx & \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}i} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} \\ & \times \left[\langle f_{i\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{i\downarrow} + \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{i\downarrow} \rangle f_{i\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger - \langle f_{i\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{i\downarrow} \rangle \right. \\ & + \langle f_{i\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle c_{\mathbf{k}\downarrow} f_{i\uparrow} + \langle c_{\mathbf{k}\downarrow} f_{i\uparrow} \rangle f_{i\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger - \langle f_{i\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle \langle c_{\mathbf{k}\downarrow} f_{i\uparrow} \rangle \\ & - \langle n_{i\uparrow}^f \rangle c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} - \langle c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle n_{i\uparrow}^f + \langle n_{i\uparrow}^f \rangle \langle c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \\ & - \langle f_{i\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle c_{\mathbf{k}\downarrow} f_{i\uparrow} - \langle c_{\mathbf{k}\downarrow} f_{i\uparrow} \rangle f_{i\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger + \langle f_{i\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{\mathbf{k}\downarrow} f_{i\uparrow} \rangle \\ & - \langle n_{i\downarrow}^f \rangle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle n_{i\downarrow}^f + \langle n_{i\downarrow}^f \rangle \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\ & \left. - \langle f_{i\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{i\downarrow} - \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{i\downarrow} \rangle f_{i\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger + \langle f_{i\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{i\downarrow} \rangle \right]. \quad (\text{D.4}) \end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned}
\sum_i e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} \langle f_{i\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{i\downarrow} &= \sum_i \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{R}_i} \langle f_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{\mathbf{k}_2\downarrow} \\
&= \sum_{\mathbf{k}_1} \langle f_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}+\mathbf{k}_1\downarrow} \\
&\approx \langle f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}
\end{aligned} \tag{D.5}$$

であることや,¹

$$\begin{aligned}
\langle c_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \\
&= \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\
&= \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}
\end{aligned} \tag{D.6}$$

であること²などを用いると, 式 (D.4) は次のように変形される.

$$\begin{aligned}
H_{\text{ex}} + H_{\text{dir2}} &\approx \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \left[\left(\langle f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle - \langle f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle \right) c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \right. \\
&\quad + \left(\langle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}\downarrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \rangle \right) f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \\
&\quad + \left(\langle f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle - \langle f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle \right) c_{\mathbf{k}\downarrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \\
&\quad + \left(\langle c_{\mathbf{k}\downarrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \rangle \right) f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \\
&\quad + \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \rangle \left(\langle f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle - \langle f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle \right) \\
&\quad \left. + \langle c_{\mathbf{k}\downarrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \rangle \left(\langle f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle - \langle f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle \right) \right] \\
&\quad - \frac{n_f}{4} \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{1}{2N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\bar{\sigma}}^\dagger c_{\mathbf{k}\bar{\sigma}} \rangle \sum_i f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{n_f}{4} \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle.
\end{aligned} \tag{D.7}$$

これらの式において, 磁化は0であるとし, $\langle n_\uparrow^f \rangle = \langle n_\downarrow^f \rangle = n_f/2$ という平均場を仮定したことに注意されたい. さらに, 平均場

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}'}, \tag{D.8}$$

$$B_{\mathbf{k}'} \equiv \langle f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger - f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle \tag{D.9}$$

¹ \mathbf{q} は Cooper 対の重心運動量を表す.

²2 つ目の等号は並進対称性による.

と

$$\phi^c \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow \quad (\text{D.10})$$

を仮定する ($B_{\mathbf{k}}$ と $\Delta_{\mathbf{k}}$ は実と仮定する). すると, 式 (D.7) は次のようになる.

$$\begin{aligned} H_{\text{ex}} + H_{\text{dir2}} &\approx \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - c_{-\mathbf{k}\downarrow} f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} + f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \right) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}} - \frac{n_f}{4} \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{\phi^c}{2} \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{N n_f \phi^c}{2}. \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

また, H_{dir} の残りの項である H_{dir1} は次のようになる.

$$H_{\text{dir1}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (\text{D.12})$$

続いて, 相関ホッピング項 H_{ch} [式 (4.15)] を取り扱う. まず, この項を $H_{\text{ch}} = H_{\text{ch1}} + H_{\text{ch2}}$ と分解する. H_{ch1} と H_{ch2} はそれぞれ,

$$H_{\text{ch1}} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}ij\sigma} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma}, \quad (\text{D.13})$$

$$H_{\text{ch2}} = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}ij\sigma} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} (n_{i\bar{\sigma}}^f + n_{j\bar{\sigma}}^f) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \quad (\text{D.14})$$

である. H_{ch2} は次のように平均場近似される.

$$H_{\text{ch2}} \approx 2 \times \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}ij\sigma} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left[\langle n_{i\bar{\sigma}}^f \rangle f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \langle f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle n_{i\bar{\sigma}}^f - \langle n_{i\bar{\sigma}}^f \rangle \langle f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle \right]. \quad (\text{D.15})$$

ここで, 平均場

$$\phi^f \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \langle f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow \quad (\text{D.16})$$

を定義すると,

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle = \phi^f \quad (\text{D.17})$$

であることに注意する. これは,

$$\begin{aligned} \langle f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \langle f_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}_2\sigma} \rangle e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_i} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \langle f_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma} \rangle e^{-i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

であり,³ 故に

$$\begin{aligned}\sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)} \langle f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle &= \sum_{\mathbf{k}'} \langle f_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}'\sigma} \rangle \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\ &= \langle f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \rangle\end{aligned}\quad (\text{D.19})$$

となることからわかる. 式 (D.17) と $\langle n_{i\bar{\sigma}}^f \rangle = n_f/2$ であることを用いると, 式 (D.15) は次のようになる.

$$\begin{aligned}H_{\text{ch2}} &\approx \frac{n_f}{4} \sum_{\mathbf{k}\sigma} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{\phi^f}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}^f - \frac{Nn_f\phi^f}{2} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\frac{\phi^f}{2} + \frac{n_f}{4} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \right) f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{Nn_f\phi^f}{2}.\end{aligned}\quad (\text{D.20})$$

また, H_{ch1} は次のようになる.

$$H_{\text{ch1}} = - \sum_{\mathbf{k}\sigma} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma}.\quad (\text{D.21})$$

最後に, $n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f \approx \frac{n_f}{2}(n_{i\uparrow}^f + n_{i\downarrow}^f) - \frac{n_f^2}{4}$ と平均場近似されることから, 式 (4.9) の H_0 は次のようになる.

$$H_0 \approx \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \left(\epsilon_f + \frac{Un_f}{2} - \mu \right) \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{NU n_f^2}{4}.\quad (\text{D.22})$$

以上の式 (D.11), (D.12), (D.20), (D.21), (D.22) から, 我々は \bar{H}_{eff} の平均場ハミルトニアンとして次の \bar{H}_{MF} [第 4 章中の式 (4.25)] を得る.

$$\begin{aligned}\bar{H}_{\text{MF}} &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \bar{\xi}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} + \text{H.c.} \right) \\ &\quad - \frac{1}{4} NU n_f^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} N n_f \phi.\end{aligned}\quad (\text{D.23})$$

ここで,

$$\bar{\xi}_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + W_{\mathbf{k}\mathbf{k}} - n_f J_{\mathbf{k}\mathbf{k}}/4,\quad (\text{D.24})$$

$$\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f \equiv \epsilon_f - \mu + Un_f/2 - \phi/2 - W_{\mathbf{k}\mathbf{k}} + n_f J_{\mathbf{k}\mathbf{k}}/4,\quad (\text{D.25})$$

$$\phi \equiv \phi^c - \phi^f\quad (\text{D.26})$$

を定義した.

³2 つ目の等号は並進対称性による.

付録 E

Green関数を用いた自己無撞着方程式 (4.32)-(4.35)の導出

第 4.3.2 節では, 平均場ハミルトニアン \bar{H}_{MF} に関する熱力学ポテンシャル Ω を微分することで, 自己無撞着方程式 (4.32)-(4.35) を導出した. ここでは, Green 関数を用いた自己無撞着方程式の導出法について述べる. Green 関数としては, 2 時間反交換 Green 関数を用いる. 先にも述べたが, Green 関数の定義, 性質に関しては文献 [38] を参照されたい.

まず, Green 関数ベクトル $\mathbf{G}_{1,\mathbf{k}}$ を

$$\mathbf{G}_{1,\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}; c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle \\ \langle\langle f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger; c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{E.1})$$

と定義する. 続いて, Green 関数の運動方程式に現れる交換関係を計算する. その結果, 次の式が得られる.

$$[c_{\mathbf{k}\uparrow}, \bar{H}_{\text{MF}}] = \bar{\xi}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2} f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger, \quad (\text{E.2})$$

$$[f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger, \bar{H}_{\text{MF}}] = -\bar{e}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2} c_{\mathbf{k}\uparrow}. \quad (\text{E.3})$$

式 (E.2), (E.3) を用いると, Green 関数ベクトル $\mathbf{G}_{1,\mathbf{k}}$ に関する運動方程式を次のように書き下すことができる.

$$\omega \mathbf{G}_{1,\mathbf{k}} = \mathbf{\Lambda}_1 + \mathbf{\Gamma}_{1,\mathbf{k}} \mathbf{G}_{1,\mathbf{k}}. \quad (\text{E.4})$$

ここで $\mathbf{\Lambda}_1$ と $\mathbf{\Gamma}_{1,\mathbf{k}}$ は次の式で与えられる.

$$\mathbf{\Lambda}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Gamma}_{1,\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \bar{\xi}_{\mathbf{k}} & -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2} \\ -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2} & -\bar{e}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f \end{pmatrix}. \quad (\text{E.5})$$

運動方程式 (E.4) を解くと、次のように Green 関数が得られる。

$$\langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}; c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle = \frac{1}{E_{1,\mathbf{k}}} \left[\left(\bar{\epsilon}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f + \mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^+ \right) \frac{1}{\omega - \mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^+} - \left(\bar{\epsilon}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f + \mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^- \right) \frac{1}{\omega - \mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^-} \right], \quad (\text{E.6})$$

$$\langle\langle f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger; c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{1,\mathbf{k}}} \left[\frac{1}{\omega - \mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^+} - \frac{1}{\omega - \mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^-} \right]. \quad (\text{E.7})$$

ここで、

$$E_{1,\mathbf{k}} = \sqrt{(\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \bar{\epsilon}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}, \quad (\text{E.8})$$

$$\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^\pm = \frac{1}{2} \left(\bar{\xi}_{\mathbf{k}} - \bar{\epsilon}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f \pm E_{1,\mathbf{k}} \right) \quad (\text{E.9})$$

である。Green 関数に関するスペクトル定理 (文献 [38] を参照) を用いると、式 (E.6), (E.7) から次の平均値に関する式を得る。

$$\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \frac{1}{E_{1,\mathbf{k}}} \left[\left(\bar{\epsilon}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f + \mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^+ \right) f(\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^+) - \left(\bar{\epsilon}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f + \mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^- \right) f(\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^-) \right], \quad (\text{E.10})$$

$$\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger \rangle = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{1,\mathbf{k}}} \left[f(\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^+) - f(\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}}^-) \right]. \quad (\text{E.11})$$

ここで、 $f(E) = 1/(e^{\beta E} + 1)$ は逆温度 $\beta = 1/T$ を持つ Fermi 分布関数である。

続いて、同様の手順で別の Green 関数、平均値の計算を行う。Green 関数ベクトル $\mathbf{G}_{2,\mathbf{k}}$ を

$$\mathbf{G}_{2,\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} \langle\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle \\ \langle\langle f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger; f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{E.12})$$

と定義すると、交換関係

$$[c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \bar{H}_{\text{MF}}] = -\bar{\xi}_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2} f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}, \quad (\text{E.13})$$

$$[f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger, \bar{H}_{\text{MF}}] = \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (\text{E.14})$$

から、次の運動方程式が得られる。

$$\omega \mathbf{G}_{2,\mathbf{k}} = \mathbf{\Lambda}_2 + \mathbf{\Gamma}_{2,\mathbf{k}} \mathbf{G}_{2,\mathbf{k}}. \quad (\text{E.15})$$

ここで $\mathbf{\Lambda}_2$ と $\mathbf{\Gamma}_{2,\mathbf{k}}$ は次の式で与えられる。

$$\mathbf{\Lambda}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Gamma}_{2,\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} -\bar{\xi}_{\mathbf{k}} & -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2} \\ -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2} & \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f \end{pmatrix}. \quad (\text{E.16})$$

式 (E.15) を解くと、次のように Green 関数が求まる。

$$\langle\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{2,\mathbf{k}}} \left[\frac{1}{\omega - \mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^+} - \frac{1}{\omega - \mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^-} \right], \quad (\text{E.17})$$

$$\langle\langle f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}; f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle = \frac{1}{E_{2,\mathbf{k}}} \left[\left(\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^+ \right) \frac{1}{\omega - \mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^+} - \left(\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^- \right) \frac{1}{\omega - \mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^-} \right]. \quad (\text{E.18})$$

ここで、

$$E_{2,\mathbf{k}} = \sqrt{(\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}, \quad (\text{E.19})$$

$$\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^\pm = \frac{1}{2} \left(-\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f \pm E_{2,\mathbf{k}} \right) \quad (\text{E.20})$$

である。そして、先と同様にスペクトル定理を用いると、式 (E.17), (E.18) から次の平均値に関する式を得る。

$$\langle f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{2,\mathbf{k}}} \left[f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^+) - f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^-) \right], \quad (\text{E.21})$$

$$\langle f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \rangle = \frac{1}{E_{2,\mathbf{k}}} \left[\left(\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^+ \right) f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^+) - \left(\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^- \right) f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}}^-) \right]. \quad (\text{E.22})$$

以上で求めた式を用いて、自己無撞着方程式を導いていこう。まず、 $\Delta_{\mathbf{k}}$ についての自己無撞着方程式 [式 (4.32)] は次のように求められる。

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \langle f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - f_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle \\ &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}'} \left[\frac{f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^+) - f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^-)}{2E_{2,\mathbf{k}'}} + \frac{f(\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}'}^+) - f(\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}'}^-)}{2E_{1,\mathbf{k}'}} \right] \\ &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}'} \frac{f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^+) - f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^-)}{E_{2,\mathbf{k}'}}. \end{aligned} \quad (\text{E.23})$$

ここでは、2つ目の等号において式 (E.11), (E.21) を使い、3つ目の等号において

$$E_{1,-\mathbf{k}'} = E_{2,\mathbf{k}'}, \quad \mathcal{E}_{1,-\mathbf{k}'}^\pm = -\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^\mp \quad (\text{E.24})$$

であることを用いた。また、本付録で用いている $E_{2,\mathbf{k}'}, \mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^\pm$ が本論文中の $E_{\mathbf{k}'}, \mathcal{E}_{\mathbf{k}'}^\pm$ に対応している。便宜上、本付録 E 中では、以後も $E_{2,\mathbf{k}'}, \mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^\pm$ を用いる。続いて、密度 n に関する自己無撞着方程式

[式 (4.33)] は次のように導かれる.

$$\begin{aligned}
n &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \left(\langle f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \left[\left(1 + \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{2,\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^+) + \left(1 - \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{2,\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^-) \right. \\
&\quad \left. + \left(1 + \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{1,\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}'}^+) + \left(1 - \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{1,\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}'}^-) \right] \\
&= 2 + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \left(\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f \right) \frac{f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^+) - f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^-)}{E_{2,\mathbf{k}'}}. \tag{E.25}
\end{aligned}$$

続いて, f 電子密度 n_f に関する自己無撞着方程式 [式 (4.34)] は次のように導かれる.

$$\begin{aligned}
n_f &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \langle f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \left[\left(1 + \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{2,\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^+) + \left(1 - \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{2,\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^-) \right]. \tag{E.26}
\end{aligned}$$

最後に, ϕ に対する自己無撞着方程式 [式 (4.35)] は次のように導かれる.

$$\begin{aligned}
\phi &= \phi_c - \phi_f \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \left(J_{\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle - J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \langle f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow} \rangle \right) \\
&= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} \left[J_{\mathbf{k}'} \left(1 + \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{1,\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}'}^+) + J_{\mathbf{k}'} \left(1 - \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{1,\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{1,\mathbf{k}'}^-) \right. \\
&\quad \left. - J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \left(1 + \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{2,\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^+) - J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \left(1 - \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f}{E_{2,\mathbf{k}'}} \right) f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^-) \right] \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} \left[f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^+) \left(J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + J_{\mathbf{k}'} + \frac{(\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f)(J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - J_{\mathbf{k}'})}{E_{2,\mathbf{k}'}} \right) \right. \\
&\quad \left. + f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^-) \left(J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + J_{\mathbf{k}'} - \frac{(\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f)(J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - J_{\mathbf{k}'})}{E_{2,\mathbf{k}'}} \right) \right] \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'} - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} \left[(J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + J_{\mathbf{k}'}) \left(f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^+) + f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^-) \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{(J_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - J_{\mathbf{k}'}) (\bar{\xi}_{\mathbf{k}'} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^f)}{E_{2,\mathbf{k}'}} \times \left(f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^+) - f(\mathcal{E}_{2,\mathbf{k}'}^-) \right) \right]. \tag{E.27}
\end{aligned}$$

ここで, $J_{\mathbf{k}} = J_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ という表記を用いた.

付録 F

Cooper 対の重心運動量を決定する方程式の導出

第 4.3.2 節で述べた Cooper 対の重心運動量 \mathbf{q} を決定する方程式を導こう。まず, 自由エネルギー $F = \Omega + \mu n N$ を \mathbf{q} で微分しやすい形に変形しておく。熱力学ポテンシャル (4.29) の第 2 項に着目し, 次のような変形を行う。

$$\begin{aligned}
 \sum_{\alpha=\pm} \ln \left(2 \cosh \frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\alpha}}{2} \right) &= \ln \left[\left(2 \cosh \frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{+}}{2} \right) \left(2 \cosh \frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{-}}{2} \right) \right] \\
 &= \ln \left[\left(e^{\frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{+}}{2}} + e^{-\frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{+}}{2}} \right) \left(e^{\frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{-}}{2}} + e^{-\frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{-}}{2}} \right) \right] \\
 &= -\frac{\beta}{2} \left(\bar{\xi}_{\mathbf{k}} - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f \right) + \ln \left[\left(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{+}} \right) \left(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{-}} \right) \right]. \quad (\text{F.1})
 \end{aligned}$$

この式を用いると, 熱力学ポテンシャル (4.29) の第 2 項は次のように変形される。

$$-\frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \alpha=\pm} \ln \left(2 \cosh \frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\alpha}}{2} \right) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\bar{\xi}_{\mathbf{k}} - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^f \right) - \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left[\left(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{+}} \right) \left(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{-}} \right) \right]. \quad (\text{F.2})$$

このようにして求めた式 (F.2) を用いると, 自由エネルギー $F = \Omega + \mu n N$ は次のようになる。

$$F = \sum_{\mathbf{k}} \left[2\bar{\xi}_{\mathbf{k}} - \frac{1}{4} U n_f^2 + \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} n_f \phi \right] - \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left[\left(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{+}} \right) \left(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{-}} \right) \right] + \mu n N. \quad (\text{F.3})$$

本研究では重心運動量 \mathbf{q} を $\mathbf{q} = (q/\sqrt{2}, q/\sqrt{2})$ と仮定している。したがって, 上の自由エネルギー (F.3) を q で偏微分することで得られる式

$$\frac{\partial F}{\partial q} = 0 \quad (\text{F.4})$$

が重心運動量 \mathbf{q} の決定方程式となる。以下で $\frac{\partial F}{\partial q}$ を計算していく。自由エネルギー (F.3) の \mathbf{q} 依存性は第2項の対数項にしか含まれていないため、 $\frac{\partial F}{\partial q}$ は次のように計算される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial q} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\left(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+}\right) \left(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-}\right)} \\ &\quad \times \left[\left(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+}\right) e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-} \frac{\partial \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-}{\partial q} + \left(1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-}\right) e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+} \frac{\partial \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+}{\partial q} \right] \\ &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \left[f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-) \frac{\partial \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^-}{\partial q} + f(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+) \frac{\partial \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^+}{\partial q} \right]. \end{aligned} \quad (\text{F.5})$$

ここで、 $f(E) = 1/(e^{\beta E} + 1)$ は逆温度 $\beta = 1/T$ を持つ Fermi 分布関数である。式 (F.5) に現れる偏微分 $\frac{\partial \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\pm}}{\partial q}$ の詳細も計算しておこう。次の式が得られる。

$$\frac{\partial \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^{\pm}}{\partial q} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\bar{\xi}_{\mathbf{k}} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f}{E_{\mathbf{k}}} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f}{\partial q}. \quad (\text{F.6})$$

そして、式 (F.6) に現れる $\frac{\partial \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f}{\partial q}$ は

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^f}{\partial q} = -\frac{\partial W_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial q} + \frac{n_f}{4} \frac{\partial J_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial q} \quad (\text{F.7})$$

と計算される。ここで、 $J_{\mathbf{k}} = J_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ および $W_{\mathbf{k}} = W_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ という表記を用いた。最後に、念のため、式 (F.7) 中の $\frac{\partial W_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial q}$ と $\frac{\partial J_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial q}$ の計算も示しておこう。次のようになる。

$$\frac{\partial W_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial q} = -2V^2 (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_f)^{-2} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial q}, \quad (\text{F.8})$$

$$\frac{\partial J_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial q} = 2UV^2 (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_f)^{-2} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_f - U)^{-2} (2\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - 2\epsilon_f - U) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial q}. \quad (\text{F.9})$$

ここで、 $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = -2t \{ \cos(k_x + q/\sqrt{2}) + \cos(k_y + q/\sqrt{2}) \}$ であることから、

$$\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial q} = \sqrt{2}t \left\{ \sin(k_x + q/\sqrt{2}) + \sin(k_y + q/\sqrt{2}) \right\} \quad (\text{F.10})$$

である。

式 (F.5)-(F.10) を代入した式 (F.4) を数値的に解くことで重心運動量 \mathbf{q} (今回の計算では q) が決定される。実際の計算では、式 (F.5)-(F.10) を代入した式 (F.4) を、その他の自己無撞着方程式 (4.33)-(4.37) と同時に数値的に解くことになる。

付録 G

VCA Green関数の極を求める方法

VCA Green 関数 $\mathbf{G}_{\text{VCA}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ の極を求める方法について述べる. 先行研究 [78] に従い, 「 Q 行列の方法」を用いて求める. まず, 行列 $\mathbf{Q}^{(e)}$ および $\mathbf{Q}^{(h)}$ の m 行 n 列成分を次式のように定義する.

$$Q_{m,n}^{(e)} = \langle \Omega | \Psi_m | n \rangle, \quad Q_{m,n}^{(h)} = \langle n | \Psi_m | \Omega \rangle. \quad (\text{G.1})$$

ここで, $|\Omega\rangle$ および $|n\rangle$ は, クラスタハミルトニアン H_{Γ}^{\prime} の基底状態および第 n 励起状態を表している. また, Ψ_m は Nambu スピノル Ψ の第 m 成分である. Q 行列 \mathbf{Q} は, 行列 $\mathbf{Q}^{(e)}$ と行列 $\mathbf{Q}^{(h)}$ 横に並べることで定義される. すなわち $\mathbf{Q} \equiv (\mathbf{Q}^{(e)}, \mathbf{Q}^{(h)})$ である. このような Q 行列 \mathbf{Q} は, クラスタの総サイト数を L , クラスタハミルトニアン H_{Γ}^{\prime} の励起状態数を N_e とすると, $4L \times 2N_e$ 行列である. さらに, 対角的な $2N_e \times 2N_e$ 行列 $\mathbf{\Lambda}$ を導入する. この行列の (i, i) 成分は次の式で与えられる.

$$\Lambda_{i,i} = \begin{cases} E_i - E_0 & (1 \leq i \leq N_e) \\ -E_{i-N_e} + E_0 & (N_e + 1 \leq i \leq 2N_e). \end{cases} \quad (\text{G.2})$$

ここで, E_0 および E_i は, クラスタハミルトニアン H_{Γ}^{\prime} の基底状態および第 i 励起状態のエネルギーである. 以上のように定義した行列 \mathbf{Q} と行列 $\mathbf{\Lambda}$ を用いると, Lehmann 表示でのクラスタ Green 関数 $\mathbf{G}'_{\mathbf{t},\mathbf{U}}$ は次のように与えられる.

$$\mathbf{G}'_{\mathbf{t},\mathbf{U}} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{g}(\omega) \cdot \mathbf{Q}^{\dagger}. \quad (\text{G.3})$$

ここで, $\mathbf{g}(\omega)$ を $\mathbf{g}(\omega) \equiv (\omega - \mathbf{\Lambda})^{-1}$ によって定義した. そして, VCA Green 関数 $\mathbf{G}_{\text{VCA}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ は次式のように計算される.

$$\mathbf{G}_{\text{VCA}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \equiv \frac{1}{\mathbf{G}_{0,\mathbf{t}}^{-1} - \mathbf{\Sigma}_{\mathbf{t}',\mathbf{U}}} \quad (\text{G.4})$$

$$= \frac{1}{\mathbf{G}_{0,\mathbf{t}}^{-1} - (\mathbf{G}'_{0,\mathbf{t}'}^{-1} - \mathbf{G}'_{\mathbf{t}',\mathbf{U}}^{-1})} \quad (\text{G.5})$$

$$= \frac{1}{\mathbf{G}'_{\mathbf{t}',\mathbf{U}}^{-1} - (\mathbf{G}'_{0,\mathbf{t}'}^{-1} - \mathbf{G}_{0,\mathbf{t}}^{-1})} \quad (\text{G.6})$$

$$= \frac{1}{\mathbf{G}'_{\mathbf{t}',\mathbf{U}}^{-1} - \left\{ (\omega - \mathbf{t}') - (\omega - \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}})) \right\}} \quad (\text{G.7})$$

$$= \frac{1}{\mathbf{G}'_{\mathbf{t}',\mathbf{U}}^{-1} - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}})}. \quad (\text{G.8})$$

ここで, $\mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}})$ と \mathbf{t}' は, 元の系およびクラスタにおける 1 体項行列である. また, クラスタ間の跳び移り積分行列として, $\mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}) \equiv \mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}}) - \mathbf{t}'$ を定義した. 本研究における「 1×2 サイトクラスタを用いた s 波超伝導の計算」では, $\mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}})$ と \mathbf{t}' は 8×8 行列となり, 次のように与えられる.

$$\mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}}) = \begin{pmatrix} \mathbf{A}(\tilde{\mathbf{k}}) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{A}(\tilde{\mathbf{k}}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{t}' = \begin{pmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C} & -\mathbf{B} \end{pmatrix}. \quad (\text{G.9})$$

ここで, $\mathbf{A}(\tilde{\mathbf{k}})$ は

$$\mathbf{A}(\tilde{\mathbf{k}}) = \begin{pmatrix} -\mu & \epsilon(\tilde{\mathbf{k}}) & -V & 0 \\ \epsilon^*(\tilde{\mathbf{k}}) & -\mu & 0 & -V \\ -V & 0 & \epsilon_f - \mu & 0 \\ 0 & -V & 0 & \epsilon_f - \mu \end{pmatrix} \quad (\text{G.10})$$

であり, $\epsilon(\tilde{\mathbf{k}})$ は $\epsilon(\tilde{\mathbf{k}}) = -t(1 + e^{-i2\tilde{k}_x} + e^{-i(\tilde{k}_x - \tilde{k}_y)} + e^{-i(\tilde{k}_x + \tilde{k}_y)})$ である. また, \mathbf{B} および \mathbf{C} は次のように与えられる.

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} -\mu' & -t' & -V' & 0 \\ -t' & -\mu' & 0 & -V' \\ -V' & 0 & \epsilon'_f - \mu' + h'_{\text{AF}} & 0 \\ 0 & -V' & 0 & \epsilon'_f - \mu' - h'_{\text{AF}} \end{pmatrix}, \quad (\text{G.11})$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} -h'_{cc} & 0 & -h'_{cf} & 0 \\ 0 & -h'_{cc} & 0 & -h'_{cf} \\ -h'_{cf} & 0 & -h'_{ff} & 0 \\ 0 & -h'_{cf} & 0 & -h'_{ff} \end{pmatrix}. \quad (\text{G.12})$$

さて、式 (G.8) に式 (G.3) を代入すると、VCA Green 関数 $\mathbf{G}_{\text{VCA}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ は次のように変形される。

$$\mathbf{G}_{\text{VCA}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \frac{1}{(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{g}(\omega) \cdot \mathbf{Q}^\dagger)^{-1} - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}})} \quad (\text{G.13})$$

$$= \mathbf{Q} \frac{1}{\mathbf{g}(\omega)^{-1} - \mathbf{Q}^\dagger \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}) \mathbf{Q}} \mathbf{Q}^\dagger \quad (\text{G.14})$$

$$= \mathbf{Q} \frac{1}{\omega - (\boldsymbol{\Lambda} + \mathbf{Q}^\dagger \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}) \mathbf{Q})} \mathbf{Q}^\dagger \quad (\text{G.15})$$

式 (G.15) から VCA Green 関数 $\mathbf{G}_{\text{VCA}}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ の極は行列 $\mathbf{L}(\tilde{\mathbf{k}}) \equiv \boldsymbol{\Lambda} + \mathbf{Q}^\dagger \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}) \mathbf{Q}$ の固有値として与えられることがわかる。

参考文献

- [1] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 3296 (2008).
- [2] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [3] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [4] J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity* (Perseus, Massachusetts, 1999).
- [5] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity Second Edition* (Dover, New York, 2004).
- [6] L. N. Cooper, in *Nobel Lectures in Physics 1971-1980*, edited by S. Lundqvist (World Scientific, Singapore, 1992).
- [7] 内野倉國光, 前田京剛, 寺崎一郎, *高温超伝導体の物性* (培風館, 1995).
- [8] 伊達宗行, 福山秀敏, 山田耕作, 安藤恒也, *大学院物性物理学 2* (講談社サイエンティフィック, 1997).
- [9] 家泰弘, *超伝導* (朝倉書店, 2005).
- [10] L. C. Hebel and C. P. Slichter, *Phys. Rev.* **113**, 1504 (1959).
- [11] R. W. Morse, T. Olsen and J. D. Gavenda, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 15 (1959).
- [12] Y. Masuda, *Phys. Rev.* **126**, 1271 (1962).
- [13] Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, and H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 10012 (2006).
- [14] K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka, H. Kontani, and H. Aoki, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 087004 (2008).
- [15] I. I. Mazin, D. J. Singh, M. D. Johannes, and M. H. Du, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 057003 (2008).
- [16] Y. Yanagi, Y. Yamakawa, and Y. Ono, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 123701 (2008).

- [17] T. Nomura, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 034716 (2009).
- [18] A. V. Chubukov, D. V. Efremov, and I. Eremin, Phys. Rev. B **78**, 134512 (2008).
- [19] F. Wang, H. Zhai, Y. Ran, A. Vishwanath, and D.-H. Lee, Phys. Rev. Lett. **102**, 047005 (2009).
- [20] S. Onari and H. Kontani, Phys. Rev. Lett. **103**, 177001 (2009).
- [21] 例えば, N. Ni, A. N. Thaler, A. Kracher, J. Q. Yan, S. L. Bud'ko, and P. C. Canfield, Phys. Rev. B **80**, 024511 (2009); L. Fang, H. Luo, P. Cheng, Z. Wang, Y. Jia, G. Mu, B. Shen, I. I. Mazin, L. Shan, C. Ren, and H.-H. Wen, Phys. Rev. B **80**, 140508(R) (2009). この他にも Fe サイトを Rh, Ni, Zn, Ru で置換した実験に関する報告がある (詳しくは [20] を参照されたい).
- [22] H. Kontani and S. Onari, Phys. Rev. Lett. **104**, 157001 (2010).
- [23] H. Ding, P. Richard, K. Nakayama, K. Sugawara, T. Arakane, Y. Sekiba, A. Takayama, S. Souma, T. Sato, T. Takahashi, Z. Wang, X. Dai, Z. Fang, G. F. Chen, J. L. Luo, and N. L. Wang, Europhys. Lett. **83**, 47001 (2008).
- [24] K. Nakayama, T. Sato, P. Richard, Y.-M. Xu, Y. Sekiba, S. Souma, G. F. Chen, J. L. Luo, N. L. Wang, H. Ding, and T. Takahashi, Europhys. Lett. **85**, 67002 (2009).
- [25] K. Terashima, Y. Sekiba, J. H. Bowen, K. Nakayama, T. Kawahara, T. Sato, P. Richard, Y.-M. Xu, L. J. Li, G. H. Cao, Z.-A. Xu, H. Ding, and T. Takahashi, Proc. Natl. Acad. Sci. (USA) **106**, 7330 (2009).
- [26] K. Hashimoto, T. Shibauchi, T. Kato, K. Ikada, R. Okazaki, H. Shishido, M. Ishikado, H. Kito, A. Iyo, H. Eisaki, S. Shamoto, and Y. Matsuda, Phys. Rev. Lett. **102**, 017002 (2009).
- [27] A. D. Christianson, E. A. Goremychkin, R. Osborn, S. Rosenkranz, M. D. Lumsden, C. D. Malliakas, I. S. Todorov, H. Claus, D. Y. Chung, M. G. Kanatzidis, R. I. Bewley, and T. Guidi, Nature (London) **456**, 930 (2008).
- [28] M. M. Korshunov and I. Eremin, Phys. Rev. B **78**, 140509(R) (2008).
- [29] T. A. Maier and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **78**, 020514(R) (2008).
- [30] S. Onari, H. Kontani, and M. Sato, Phys. Rev. B **81**, 060504(R) (2010).
- [31] T. Hanaguri, S. Nittaka, K. Kuroki, and H. Takagi, Science **328**, 474 (2010).

- [32] S. Raghu, X. L. Qi, C.-X. Liu, D. J. Scalapino, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **77**, 220503(R) (2008).
- [33] A. M. Zagoskin, *Quantum Theory of Many-Body Systems* (Springer Verlag, New York, 1998).
- [34] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications, New York, 2003).
- [35] T. A. Maier, S. Graser, D. J. Scalapino, and P. Hirschfeld, *Phys. Rev. B* **79**, 134520 (2009).
- [36] 佐藤憲昭, 三宅和正, 磁性と超伝導の物理 (名古屋大学出版会, 2013).
- [37] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).
- [38] P. Fröbrich and P. J. Kuntz, *Phys. Rep.* **432**, 223 (2006).
- [39] 上田和夫, 大貫惇睦, 重い電子系の物理 (裳華房, 1998).
- [40] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Meschede, W. Franz, and H. Schäfer, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1892 (1979).
- [41] C. Pfleiderer, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 1551 (2009).
- [42] H. Q. Yuan, F. M. Grosche, M. Deppe, C. Geibel, G. Sparn, and F. Steglich, *Science* **302**, 2104 (2003).
- [43] T. Park, F. Ronning, H. Q. Yuan, M. B. Salamon, R. Movshovich, J. L. Sarrao, and J. D. Thompson, *Nature (London)* **440**, 65 (2006).
- [44] M. Lavagna, A. J. Millis, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 266 (1987).
- [45] A. Houghton, N. Read, and H. Won, *Phys. Rev. B* **37**, 3782 (1988).
- [46] D. J. Scalapino, E. Loh, and J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **34**, 8190 (1986).
- [47] K. Miyake, S. Schmitt-Rink, and C. M. Varma, *Phys. Rev. B* **34**, 6554 (1986).
- [48] R. Arita, K. Kuroki, and H. Aoki, *Phys. Rev. B* **60**, 14585 (1999).
- [49] H. Ikeda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71**, 1126 (2002).
- [50] Y. Nishikawa, H. Ikeda, and K. Yamada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71**, 1140 (2002).
- [51] H. Fukazawa and K. Yamada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **72**, 2449 (2003).

- [52] K. Miyake, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 125201 (2007).
- [53] 朝山邦輔, 遍歴電子系の核磁気共鳴 —金属磁性と超伝導— (裳華房, 2002).
- [54] Y. Kohori, Y. Yamato, Y. Iwamoto, T. Kohara, E. D. Bauer, M. B. Maple, and J. L. Sarrao, *Phys. Rev. B* **64**, 134526 (2001).
- [55] T. Mito, S. Kawasaki, G.-q. Zheng, Y. Kawasaki, K. Ishida, Y. Kitaoka, D. Aoki, Y. Haga, and Y. Ōnuki, *Phys. Rev. B* **63**, 220507(R) (2001).
- [56] K. Matsuda, Y. Kohori, and T. Kohara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 2750 (1995).
- [57] K. Ishida, H. Mukuda, Y. Kitaoka, K. Asayama, H. Sugawara, Y. Aoki, and H. Sato, *Physica B* **237**, 304 (1997).
- [58] P. Sinjukow and W. Nolting, *Phys. Rev. B* **65**, 212303 (2002).
- [59] W. V. Liu and F. Wilczek, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047002 (2003).
- [60] K. Hanzawa and K. Yosida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 3440 (1987).
- [61] T. K. Koponen, T. Paananen, J.-P. Martikainen, and P. Törmä, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 120403 (2007).
- [62] T. K. Koponen, T. Paananen, J.-P. Martikainen, M. R. Bakhtiari, and P. Törmä, *New J. Phys.* **10**, 045014 (2008).
- [63] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [64] Y. Shimizu, O. Sakai, and A. C. Hewson, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 1777 (2000).
- [65] L. de' Medici, A. Georges, G. Kotliar, and S. Biermann, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 066402 (2005).
- [66] G. Sordi, A. Amaricci, and M. J. Rozenberg, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 196403 (2007).
- [67] A. Amaricci, G. Sordi, and M. J. Rozenberg, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 146403 (2008).
- [68] M. Jarrell, H. Akhlaghpour, and Th. Pruschke, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1670 (1993).
- [69] T. Mutou and D. S. Hirashima, *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 4475 (1994).
- [70] T. Pruschke, R. Bulla, and M. Jarrell, *Phys. Rev. B* **61**, 12799 (2000).
- [71] M. J. Rozenberg, *Phys. Rev. B* **52**, 7369 (1995).

- [72] M. Vekić, J. W. Cannon, D. J. Scalapino, R. T. Scalettar, and R. L. Sugar, Phys. Rev. Lett. **74**, 2367 (1995).
- [73] S. Horiuchi, S. Kudo, T. Shirakawa, and Y. Ohta, Phys. Rev. B **78**, 155128 (2008).
- [74] T. Mutou, Phys. Rev. B **62**, 15 589 (2000).
- [75] M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken, Phys. Rev. Lett. **91**, 206402 (2003).
- [76] C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke, E. Arrigoni, and M. Potthoff, Phys. Rev. B **70**, 245110 (2004).
- [77] M. Potthoff, Eur. Phys. J. B **32**, 429 (2003); M. Potthoff, Eur. Phys. J. B **36**, 335 (2003).
- [78] M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, and W. Hanke, Phys. Rev. B **74**, 235117 (2006).

研究業績

論文 (国際学術誌)

- Keisuke Masuda and Susumu Kurihara
Coherence effect in a two-band superconductor: Application to iron pnictides
J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 074710 (2010).
- Keisuke Masuda and Daisuke Yamamoto
Formation of Cooper pairs between conduction and localized electrons in heavy-fermion superconductors
Phys. Rev. B **87**, 014516 (2013).

論文 (国内学術誌)

- 増田 啓介
多バンド超伝導体におけるコヒーレンス効果
「物性研究」, 96 巻 6 号, pp. 716-752 (2011).

論文 (査読付プロシーディングス)

- Keisuke Masuda and Susumu Kurihara
Coherence effect in multiband superconductors: A suggestion of an experiment to determine the correct symmetry of the order parameter
J. Phys.: Conf. Ser. **273**, 012099 (2011).
- Keisuke Masuda and Daisuke Yamamoto
Cooper pairing of fermions with unequal masses in heavy-fermion systems
J. Phys. Soc. Jpn. **81**, SB010 (2012).
- Keisuke Masuda and Daisuke Yamamoto
Cooper pairing between conduction and localized electrons in heavy-fermion systems
J. Korean Phys. Soc. **63**, 459 (2013).

講演 (国際会議, 口頭発表)

- Keisuke Masuda and Daisuke Yamamoto

Cooper pairing of fermions with unequal masses in heavy-fermion systems

International workshop on heavy fermions (TOKIMEKI 2011), Osaka, Japan, November 2011.

講演 (国際会議, ポスター発表)

- Keisuke Masuda and Susumu Kurihara

Coherence effect in multiband systems

Ultracold fermi gas: Superfluidity and strong correlation (USS-2010), Tokyo, Japan, May 2010.

- Keisuke Masuda and Susumu Kurihara

Coherence effect in multiband superconductors: A suggestion of an experiment to determine the correct symmetry of the order parameter

International conference on strongly correlated electron systems (SCES 2010), Santa Fe, New Mexico, USA, June 2010.

- Keisuke Masuda and Daisuke Yamamoto

Cooper pairing between conduction and localized electrons in heavy-fermion systems

International conference on magnetism (ICM2012), Busan, Korea, July 2012.

- Keisuke Masuda and Daisuke Yamamoto

Interorbital Cooper pairing with *s*-wave symmetry in heavy-fermion systems

International conference on strongly correlated electron systems (SCES 2013), Tokyo, Japan, July 2013.

講演 (国内会議, 口頭発表)

- 増田 啓介, 栗原 進

マルチバンド超伝導体のコヒーレンス効果：超伝導ギャップの対称性を決定する実験の提案
日本物理学会 第 65 回年次大会, 岡山大学, 2010 年 3 月.

- 増田 啓介, 栗原 進

f 電子系における軌道間ペアリング超伝導

日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.

- 増田 啓介, 山本 大輔

重い電子系における s 波超伝導

日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学, 2012 年 9 月.

- 増田 啓介, 山本 大輔

周期アンダーソン模型における軌道間ペアリング超伝導と反強磁性

日本物理学会 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月.

講演 (国内会議, ポスター発表)

- 増田 啓介, 栗原 進

2 バンド超伝導体におけるコヒーレンス効果

鉄系高温超伝導体研究の最前線～メカニズムおよび物性のレビューと展望～, 日本原子力機構システム計算科学センター (東京), 2009 年 11 月.

- 増田 啓介, 山本 大輔

異種フェルミオン間クーパー対による s 波超流動

Ultracold fermi gas: Superfluidity and strong-correlation (USS2012), Tokyo, Japan, January 2012.

