

平成26年度 博士論文

局所的な空間反転対称性が欠如した系における
エキゾチック超伝導の理論研究

新潟大学大学院自然科学研究科 博士後期課程
数理物質科学専攻

F12J010A

吉田 智大

目次

1	序論	3
1.1	空間反転対称性の欠如と反対称スピン軌道相互作用	3
1.2	反対称スピン軌道相互作用が誘起する現象	4
1.3	反対称スピン軌道相互作用の微視的起源	14
1.4	局所的な空間反転対称性が破れた系における反対称スピン軌道相互作用	16
1.5	研究目的	18
2	モデルと計算手法	21
2.1	多層系モデル	21
2.2	平均場近似とギャップ方程式	23
2.3	線形化ギャップ方程式	29
3	面内磁場の場合～複素ストライプ相～	31
3.1	序論～複素ストライプ相のメカニズム～	31
3.2	二層系 s 波超伝導体	32
3.3	三層系 s 波超伝導体	38
3.4	d 波超伝導体	39
3.5	まとめ	42
4	面直磁場の場合～ペア密度波相～	44
4.1	序論～ペア密度波相のメカニズム～	44
4.2	二層系 s 波超伝導体	47
4.3	三層系 s 波超伝導体	51
4.4	S+p 波超伝導体	53
4.5	d 波超伝導体	61
4.6	D+p 波超伝導体	63
4.7	まとめ	68
5	多層系超伝導体におけるトポロジカル結晶超伝導	70
5.1	序論	70
5.2	多層系超伝導体におけるミラー対称性とミラー Chern 数	72
5.3	二層系 s+p 波超伝導体	73
5.4	三層系 s+p 波超伝導体	77
5.5	d 波超伝導体	84
5.6	まとめ	91

6	総括	94
付録 A	T -行列近似の元での超伝導感受率の導出	98
付録 B	Supercell の方法	99
	謝辞	101
	論文リスト	102
	参考文献	103

1 序論

1.1 空間反転対称性の欠如と反対称スピン軌道相互作用

1911年にKamerlingh Onnesによって発見された超伝導現象は、1957年に発表されたBardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) 理論によりほぼ完全に理解された。それにもかかわらずいまだ興味を惹きつけている理由は、BCS理論では考慮されていない新しい超伝導状態が数多く存在するためである。超伝導は、二つの電子が束縛状態を形成し (Cooper 対と呼ばれる) 量子凝縮することにより起こる。Cooper 対は内部自由度を持つことができるが、BCS理論ではそれは考慮されていない。しかし、実際には有限の内部自由度を持つ超伝導状態が存在する。例えば、強相関電子系で実現するCooper 対が有限の相対角運動量を持つ異方的超伝導 [1]、Pauli 極限の超伝導体で実現する有限の重心運動量を持つFulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) 超伝導 [2–4] などが挙げられる。これらの内部自由度の顕在化は、系の対称性の破れに起因している。

物性物理学における重要な対称性の一つに、空間反転対称性がある。Edelsteinによる先駆的な研究 [5] はあったが、空間反転対称性が破れた超伝導の研究が盛んに行われるようになった契機は、Bauerらによる空間反転対称性が破れた重い電子系超伝導体 CePt_3Si の発見である [6]。図 1.1 にその結晶構造を示す。図 1.1 から明らかなように、 CePt_3Si は空間反転対称性が欠如した結晶構造を持つ。 CePt_3Si の発見以降、空間反転対称性が破れた超伝導体として、 UIr [7]、 CeRhSi_3 [8]、 CeIrSi_3 [9]、 $\text{LiPd}_x\text{Pt}_{3-x}\text{B}$ [10] などが見つかっている [11]。

空間反転対称性の破れはどのように電子状態に影響を及ぼすだろうか。すぐに分かることは、空間反転対称性が保存する場合、エネルギー $E(\mathbf{k})$ を持つ状態と $E(-\mathbf{k})$ を持つ状態は縮退しているため、それが破れるとこの縮退が解けることである。これを引き起こすのが反対称スピン軌道相互作用と呼ばれるもので、第二量子化表現で

$$H_{\text{SOC}} = \alpha \sum_{\mathbf{k}, s, s'} \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s'} \quad (1.1)$$

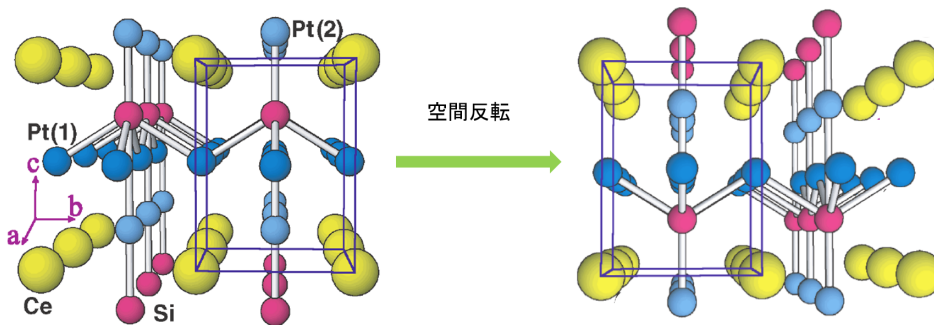


図 1.1 CePt_3Si の結晶構造 [6]。右の図は空間反転した場合の結晶構造。

と書くことができる。ここで c_{ks} は波数 k , スピン s を持つ電子に対する消滅演算子であり、 σ は Pauli 行列のベクトル表示 $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ である。ベクトル量 $g(k)$ は g -ベクトルとよばれるもので、反対称スピン相互作用を特徴づけるものである。時間反転対称性が保存するため、 g -ベクトルは波数に関して奇関数となる。これが、反対称スピン軌道相互作用と呼ばれる所以である。 g -ベクトルの代表的なものとして、Rashba 型 [12]

$$g(k) = (-\sin k_y, \sin k_x, 0) \quad (1.2)$$

や Dresselhaus 型 [13]

$$g(k) = [k_x(k_y^2 - k_z^2), k_y(k_z^2 - k_x^2), k_z(k_x^2 - k_y^2)] \quad (1.3)$$

がある。

反対称スピン軌道相互作用により、超伝導状態において様々な興味深い現象が引き起こされる。その最たるものの一つが、スピナー重項超伝導とスピン三重項超伝導の混成である [5]。空間反転対称性が保存する場合、偶パリティスピナー重項超伝導と奇パリティスピン三重項超伝導は明確に区別されるが、空間反転対称性が破れるとこれらは区別できず、結果として両者が混成した超伝導状態が実現される。また、Pauli 極限を大きく越える上部臨界磁場が実験的に観測されているが [14,15]、これも反対称スピン軌道相互作用が原因である [5,16–24]。その他にも、ヘリカル超伝導状態 [24–30]、磁気電気効果 [31–34]、異常 Hall 効果、異常熱 Hall 効果、スピン Hall 効果などの輸送現象 [34,35]、トポロジカル超伝導 [36–39] などが理論的に提案されている。以下でこれらの現象を簡単に説明する。なお、トポロジカル超伝導については第 5 章で議論する。

1.2 反対称スピン軌道相互作用が誘起する現象

ここでは、反対称スピン軌道相互作用が誘起する様々な現象についてレビューする。

1.2.1 反対称スピン軌道相互作用による電子状態の変化

大局的な空間反転対称性が破れた系に現れる反対称スピン軌道相互作用による電子状態の変化について、Rashba 型の反対称スピン軌道相互作用を例にとり説明する [40,41]。 xy 平面でのミラー対称性が破れた二次元電子系を考える。この系のハミルトニアンは、以下で与えられる。

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{ks} \xi(k) c_{ks}^\dagger c_{ks} + \alpha \sum_{kss'} g(k) \cdot \sigma_{ss'} c_{ks}^\dagger c_{ks'} \quad (1.4)$$

右辺第一項が運動エネルギー項、第二項が反対称スピン軌道相互作用項である。ここでは Rashba 型の g -ベクトル (1.2) を仮定する。反対称スピン軌道相互作用はその形から、波数に依存した Zeeman 磁場とみなすこともできる。このハミルトニアンを行列表示すると

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \begin{pmatrix} \xi(\mathbf{k}) & -\alpha k_+ \\ -\alpha k_- & \xi(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

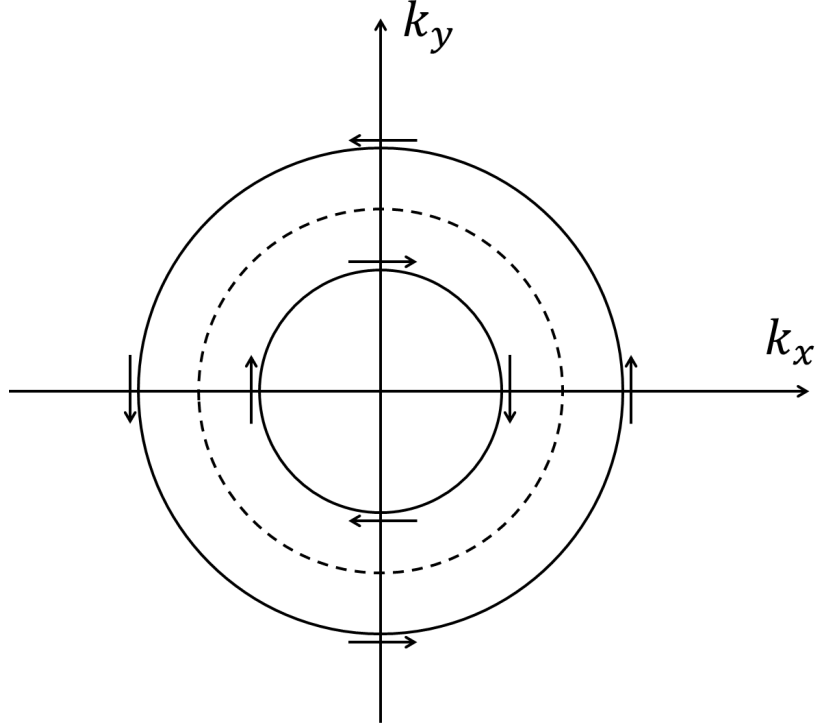


図 1.2 Rashba 型の反対称スピン軌道相互作用によるバンド分裂。点線が $\alpha = 0$ の Fermi 面、実線が $\alpha \neq 0$ の Fermi 面である。Fermi 面上の矢印は、その点でのスピンの量子化軸を表している。

となる。ここで $k_{\pm} = \sin k_y \pm i \sin k_x$ である。行列表示したハミルトニアンは容易に対角化できる。ユニタリー行列

$$U_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -k_+ / |g(\mathbf{k})| \\ \bar{k}_- / |g(\mathbf{k})| & 1 \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

を用いてユニタリー変換すると、固有値

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \xi(\mathbf{k}) \pm \alpha |g(\mathbf{k})| \quad (1.7)$$

が得られる。 α により縮退が解け、バンドが分裂する。なお、時間反転対称性が保存するため、 $\mathbf{k} = 0$ での縮退は残る。反対称スピン軌道相互作用によるスピン分裂が Zeemann 磁場によるスピン分裂と決定的に異なる点は、ユニタリー行列 (1.6) がスピンを回転させる演算子である点である。そのため、スピンの量子化軸は波数ごとに異なることとなる。この様子を図 1.2 に示す。

次に、磁場中での結果について紹介する。磁場中ではハミルトニアン (1.4) に以下の Zeeman 項が加わることになる。

$$\mathcal{H}_{\text{Zeeman}} = -\mu_B \sum_{\mathbf{k}, s, s'} \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}s'} \quad (1.8)$$

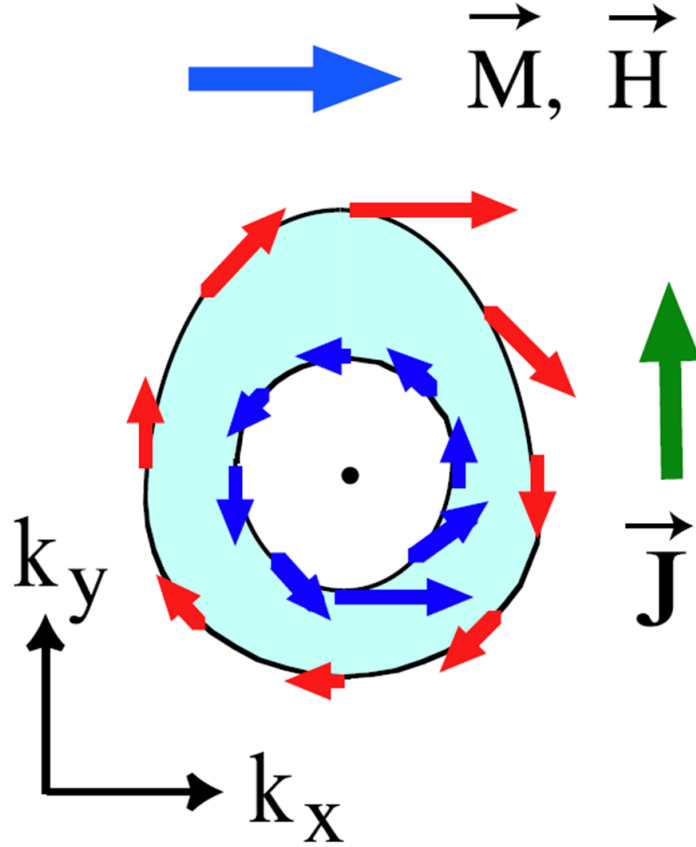


図 1.3 x 軸方向の磁場中での Fermi 面 [35]。

Zeeman 項が加わることにより、系のエネルギーは以下のように変化する。

$$E_{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{H}) = \xi(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\alpha^2 |\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 - 2\alpha \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \mu_B \mathbf{H} + (\mu_B \mathbf{H})^2} \quad (1.9)$$

反対称スピン軌道相互作用によるバンド分裂の大きさ E_{ASOC} は、典型的には数百 K~数千 K であり [11]、一般的な磁場のエネルギースケールよりはるかに大きい。そのため、以下では $\alpha \gg \mu_B H$ を仮定する。磁場による Fermi 面の変化は、印加磁場の方向により異なる。 z 軸方向の磁場 $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$ の場合、エネルギー (1.9) に磁場の一次の項は現れない。そのため、 z 軸方向の磁場により Fermi 面は変化を受けない。一方、面内磁場、例えば x 方向の磁場 $\mathbf{H} = (H_x, 0, 0)$ の場合、磁場により Fermi 面は非対称に歪むこととなる。この様子を図 1.3 に示す。

既約表現	基底関数
A_{1g}	1
A_{2g}	$k_x k_y (k_x^2 - k_y^2)$
B_{1g}	$k_x^2 - k_y^2$
B_{2g}	$k_x k_y$
E_g	$k_z k_x, k_z k_y$
A_{1u}	$\sin k_x x + \sin k_x y$
A_{2u}	$\sin k_y x - \sin k_x y$
B_{1u}	$\sin k_x x - \sin k_y y$
B_{2u}	$\sin k_y x + \sin k_x y$
E_u	$(\sin k_x \pm i \sin k_y)z$

表 1.1 対称群 D_{4h} の既約表現の基底関数 [42]。

既約表現	基底関数
A_1	$1, \sin k_y x - \sin k_x y$
A_2	$k_x k_y (k_x^2 - k_y^2), \sin k_x x + \sin k_y y$
B_1	$k_x^2 - k_y^2, \sin k_y x + \sin k_y y$
B_2	$k_x k_y, \sin k_x x - \sin k_y y$
E	$k_z k_x, k_z k_y, (\sin k_x \pm i \sin k_y)z$

表 1.2 対称群 C_{4v} の既約表現の基底関数。

1.2.2 超伝導状態

ここでは、超伝導状態の性質について議論する。超伝導状態へ空間反転対称性の欠如が与える最も重要な特徴の一つは、偶パリティスピン一重項超伝導と奇パリティスピン三重項超伝導の混成である。では、どのような混成が許されるか、 xy 平面でのミラー対称性が破れた系を例にとり考えてみる。まず、 xy 平面に対するミラー対称性が保存する場合から出発する。超伝導状態は結晶点群の既約表現により分類される。対称群 D_{4h} の場合の結果を表 1.1 にまとめる [42]。空間反転対称性が保存するため、偶パリティスピン一重項超伝導と奇パリティスピン三重項超伝導は異なる既約表現に属し、混成することはできない。次に、 c 軸方向のミラー対称性が破れ、系の対称性が D_{4h} から C_{4v} に落ちた場合の結果を表 1.2 に示す。パリティが破れたため、偶パリティスピン一重項超伝導と奇パリティスピン三重項超伝導は同じ既約表現に属することができる。結果として、表 1.2 において同じ既約表現に属するスピン一重項超伝導と三重項超伝導の混成が許されることとなる。実際に混成する超伝導秩序変数の波数依存性は、系の詳細による。CePt₃Si では p 波超伝導と拡張 s 波超伝導の混成 (p 波超伝導が支配的) [23] が、CeRh(Ir)Si₃ では拡張 s 波と p 波超伝導の混成 (s

波超伝導が支配的) [43] が提案されている。

次に、スピン一重項超伝導と三重項超伝導がどのように混成するか考察する。例として、 A_1 対称性を考える。この場合 s 波のスピン一重項超伝導 $\psi(\mathbf{k}) = \Delta^s$ と p 波のスピン三重項超伝導 $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \Delta^p(-\sin k_y, \sin k_x, 0) = \Delta^p \mathbf{g}(\mathbf{k})$ の混成が許されるが、自由度として両者の間の相対位相 ϕ がある。この相対位相 ϕ は反対称スピン軌道相互作用 α の符号により決定される。以下でこの点について説明する。正常状態のハミルトニアン (1.4) に平均場近似したペアリング相互作用項

$$\mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, s, s'} [\Delta_{ss'}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger + \text{H.c.}] \quad (1.10)$$

を付け加えたものを考える。ここで $\Delta_{ss'}(\mathbf{k})$ は超伝導秩序変数

$$\Delta(\mathbf{k}) = i[e^{i\phi} \Delta^s \sigma_0 + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] \sigma_y \quad (1.11)$$

である。なお、一般性を失うことなく Δ^s, Δ^p を実数ととることができる。超伝導状態のハミルトニアン $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF}}$ を基底 $\Psi^\dagger(\mathbf{k}) = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow})$ で行列表示すると

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \xi(\mathbf{k}) & -\alpha k_+ & \Delta^p k_+ & \Delta^s e^{i\phi} \\ -\alpha k_- & \xi(\mathbf{k}) & -\Delta^s e^{i\phi} & -\Delta^p k_- \\ \Delta^{p*} k_- & -\Delta^{s*} e^{-i\phi} & -\xi(\mathbf{k}) & -\alpha k_- \\ \Delta^{s*} e^{-i\phi} & -\Delta^{p*} k_+ & -\alpha k_+ & -\xi(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \Psi(\mathbf{k}) \quad (1.12)$$

を得る。行列表示したハミルトニアンをユニタリー行列

$$U(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} U_0(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & U_0^T(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

でユニタリー変換すると、以下のバンド表示したハミルトニアンが得られる。

$$\mathcal{H}_{\text{band}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} E_-(\mathbf{k}) & 0 & \Delta_-(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & E_+(\mathbf{k}) & 0 & \Delta_+(\mathbf{k}) \\ \Delta_-^*(\mathbf{k}) & 0 & -E_-(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \Delta_+^*(\mathbf{k}) & 0 & -E_+(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

$\Delta_+(\mathbf{k}), \Delta_-(\mathbf{k})$ はそれぞれバンド $E_+(\mathbf{k}), E_-(\mathbf{k})$ の超伝導秩序変数で、

$$\Delta_+(\mathbf{k}) = -\frac{k_-}{|\mathbf{g}(\mathbf{k})|} [\Delta^s e^{i\phi} + \Delta^p |\mathbf{g}(\mathbf{k})|] \quad (1.15)$$

$$\Delta_-(\mathbf{k}) = -\frac{k_+}{|\mathbf{g}(\mathbf{k})|} [\Delta^s e^{i\phi} - \Delta^p |\mathbf{g}(\mathbf{k})|] \quad (1.16)$$

である。行列 (1.14) は容易に対角化でき、結果として固有値

$$E_{\pm}^+(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{E_+^2(\mathbf{k}) + |\Delta_+(\mathbf{k})|^2} \quad (1.17)$$

$$E_{\pm}^-(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{E_-^2(\mathbf{k}) + |\Delta_-(\mathbf{k})|^2} \quad (1.18)$$

を得る。反対称スピン軌道相互作用により分裂したバンド $E_+(\mathbf{k})$, $E_-(\mathbf{k})$ はそれぞれは超伝導ギャップ

$$|\Delta_+(\mathbf{k})| = \sqrt{|\Delta^s|^2 + 2\Delta^s\Delta^p|\mathbf{g}(\mathbf{k})|\cos\phi + |\Delta^p\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2} \quad (1.19)$$

$$|\Delta_-(\mathbf{k})| = \sqrt{|\Delta^s|^2 - 2\Delta^s\Delta^p|\mathbf{g}(\mathbf{k})|\cos\phi + |\Delta^p\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2} \quad (1.20)$$

を持つこととなる。ここで、バンド $E_+(\mathbf{k})$ の方がバンド $E_-(\mathbf{k})$ よりも Fermi 面での状態密度が大きいと仮定する。その場合、バンド $E_+(\mathbf{k})$ の超伝導ギャップを最大化するような ϕ が最も安定な状態を与えることになる。式 (1.19) から明らかのように、 $\phi = 0$ の時バンド $E_+(\mathbf{k})$ は最大の超伝導ギャップを持つため、 $\phi = 0$ を得る。同様の議論を $\alpha \rightarrow -\alpha$ とした場合に行うと、エネルギー固有値として

$$E_{\pm}^+(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{E_+^2(\mathbf{k}) + |\Delta_-(\mathbf{k})|^2} \quad (1.21)$$

$$E_{\pm}^-(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{E_-^2(\mathbf{k}) + |\Delta_+(\mathbf{k})|^2} \quad (1.22)$$

を得る。そのため、バンド $E_+(\mathbf{k})$ の超伝導ギャップを最大化する ϕ は $\phi = \pi$ となる。つまり、 $\alpha > 0$ の場合 $\phi = 0$ ならば、 $\alpha < 0$ の時は $\phi = \pi$ となる。以上のように、スピン一重項超伝導と三重項超伝導の相対位相は、反対称スピン軌道相互作用の符号により決定される。

1.2.3 反対称スピン軌道相互作用による d -ベクトルの決定

ここでは、反対称スピン軌道相互作用が与える d -ベクトルの異方性について考察する [18]。空間反転対称性が保存する場合、表 1.1 に示したスピン三重項超伝導状態はすべて縮退している。この縮退は、空間反転対称性が破れると解けることとなる。以下でこれを示す。なお、スピン一重項超伝導との混成は無視する。

スピン三重項超伝導のみを考慮した場合、行列表示したハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \xi(\mathbf{k}) & -\alpha k_+ & -d_-^l(\mathbf{k}) & 0 \\ -\alpha k_- & \xi(\mathbf{k}) & 0 & d_+^l(\mathbf{k}) \\ -d_-^{l*}(\mathbf{k}) & 0 & -\xi(\mathbf{k}) & -\alpha k_- \\ 0 & d_+^{l*}(\mathbf{k}) & -\alpha k_+ & -\xi(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \Psi(\mathbf{k}) \quad (1.23)$$

となる。ここで $d_{\pm}^l(\mathbf{k}) = d_x^l(\mathbf{k}) \pm id_y^l(\mathbf{k})$, $\mathbf{d}^{1,2}(\mathbf{k}) = \Delta^p(\sin k_x, \pm \sin k_y, 0)$, $\mathbf{d}^{3,4}(\mathbf{k}) = \Delta^p(\sin k_y, \pm i \sin k_x, 0)$, $\mathbf{d}^{5,6}(\mathbf{k}) = \Delta^p(0, 0, \sin k_x \pm \sin k_y)$ である。バンド表示したハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{band}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} E_-(\mathbf{k}) & 0 & \Delta_-^l(\mathbf{k}) & \Delta_{+-}^l(\mathbf{k}) \\ 0 & E_+(\mathbf{k}) & \Delta_{-+}^l(\mathbf{k}) & \Delta_+^l(\mathbf{k}) \\ \Delta_-^{l*}(\mathbf{k}) & \Delta_{-+}^{l*}(\mathbf{k}) & -E_-(\mathbf{k}) & 0 \\ \Delta_{+-}^{l*}(\mathbf{k}) & \Delta_+^{l*}(\mathbf{k}) & 0 & -E_+(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

となる。ここで $\Delta_{+-}^l(\mathbf{k})$, $\Delta_{-+}^l(\mathbf{k})$ はバンド間の Cooper 対を表す。以下に、各超伝導状態に対する $\Delta_{\pm}^l(\mathbf{k})$, $\Delta_{+-}^l(\mathbf{k})$, $\Delta_{-+}^l(\mathbf{k})$ およびエネルギー固有値を示す。

$$\cdot \mathbf{d}^l(\mathbf{k}) = \Delta^P(\sin k_x, \sin k_y, 0)$$

$l = 1$ (A_2 対称性) の場合、バンド内、バンド間の秩序変数は

$$\Delta_{\pm\pm}^{A_2}(\mathbf{k}) = 0 \quad (1.25)$$

$$\Delta_{+-}^{A_2}(\mathbf{k}) = -\Delta_{-+}^{A_2}(\mathbf{k}) = -i\Delta^P|\mathbf{g}(\mathbf{k})| \quad (1.26)$$

となり、バンド間の Cooper 対のみが現れる。エネルギー固有値は

$$E_{\pm}^{A_2}(\mathbf{k}) = \pm\{E_{\pm}(\mathbf{k}) + |\Delta^P\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 - 2\alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})|[\sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta^P\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2} \mp \xi(\mathbf{k})]\}^{\frac{1}{2}} \quad (1.27)$$

である。

$$\cdot \mathbf{d}(\mathbf{k}) = \Delta^P(\sin k_x, -\sin k_y, 0)$$

$l = 2$ (B_2 対称性) の場合、バンド内、バンド間の秩序変数は

$$\Delta_{+}^{B_2}(\mathbf{k}) = -\Delta_{-}^{B_2*}(\mathbf{k}) = -i\frac{\Delta^P}{2}|\mathbf{g}(\mathbf{k})|\left[\frac{k_+}{|\mathbf{g}(\mathbf{k})|} - \frac{k_-^3}{|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^3}\right] \quad (1.28)$$

$$\Delta_{+-}^{B_2}(\mathbf{k}) = -\Delta_{-+}^{B_2}(\mathbf{k}) = i\frac{\Delta^P}{2}|\mathbf{g}(\mathbf{k})|\left[\frac{k_+^2}{|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2} + \frac{k_-^2}{|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2}\right] \quad (1.29)$$

である。エネルギー固有値は

$$E_{\pm}^{B_2}(\mathbf{k}) = \pm\{E_{\pm}(\mathbf{k}) + |\Delta^P\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 - 2\alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})|[\sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{+-}^{B_2}(\mathbf{k})|^2} \mp \xi(\mathbf{k})]\}^{\frac{1}{2}} \quad (1.30)$$

である。

$$\cdot \mathbf{d}(\mathbf{k}) = \Delta^P(\sin k_y, \sin k_x, 0)$$

$l = 3$ (B_1 対称性) の場合、バンド内、バンド間の秩序変数は

$$\Delta_{+}^{B_1}(\mathbf{k}) = -\Delta_{-}^{B_1*}(\mathbf{k}) = \frac{\Delta^P}{2}|\mathbf{g}(\mathbf{k})|\left[\frac{k_+}{|\mathbf{g}(\mathbf{k})|} + \frac{k_-^3}{|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^3}\right] \quad (1.31)$$

$$\Delta_{+-}^{B_1}(\mathbf{k}) = -\Delta_{-+}^{B_1}(\mathbf{k}) = \frac{\Delta^P}{2}|\mathbf{g}(\mathbf{k})|\left[-\frac{k_+^2}{|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2} + \frac{k_-^2}{|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2}\right] \quad (1.32)$$

である。エネルギー固有値は

$$E_{\pm}^{B_1}(\mathbf{k}) = \pm\{E_{\pm}(\mathbf{k}) + |\Delta^P\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 - 2\alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})|[\sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{+-}^{B_1}(\mathbf{k})|^2} \mp \xi(\mathbf{k})]\}^{\frac{1}{2}} \quad (1.33)$$

である。

$$\cdot \mathbf{d}(\mathbf{k}) = \Delta^P(\sin k_y, -\sin k_x, 0)$$

$l = 4$ (A_1 対称性) の場合、バンド内、バンド間の秩序変数は

$$\Delta_{+}^{A_1}(\mathbf{k}) = -\Delta_{-}^{A_1*}(\mathbf{k}) = \Delta^P k_- \quad (1.34)$$

$$\Delta_{+-}^{A_1}(\mathbf{k}) = \Delta_{-+}^{A_1}(\mathbf{k}) = 0 \quad (1.35)$$

であり、バンド間の Cooper 対は存在しない。エネルギー固有値は

$$E_{\pm}^{A_1}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{E_{\pm}^2 + |\Delta^p \mathbf{g}(\mathbf{k})|^2} \quad (1.36)$$

である。

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \Delta^p(0, 0, \sin k_x \pm i \sin k_y)$$

$l=5, 6$ (E 対称性) の場合、バンド内、バンド間の秩序変数は

$$\Delta_{\pm}^{E(l=5)}(\mathbf{k}) = \Delta_{\pm}^{E(l=6)}(\mathbf{k}) = 0 \quad (1.37)$$

$$\Delta_{+-}^{E(l=5)}(\mathbf{k}) = \Delta_{-+}^{E(l=5)}(\mathbf{k}) = -\Delta_{+-}^{E(l=6)*}(\mathbf{k}) = -\Delta_{-+}^{E(l=6)*}(\mathbf{k}) = i\Delta^p k_- \quad (1.38)$$

であり、バンド内の Cooper 対は存在しない。エネルギー固有値は $l=5, 6$ どちらも式 (1.27) と等しい。

以上より、反対称スピン軌道相互作用により安定化される状態を判断することが可能である。まず、 A_1 対称性の結果 (1.36) について注目すると、バンド $E_{\pm}(\mathbf{k})$ はともに超伝導ギャップ $|\Delta^p \mathbf{g}(\mathbf{k})|^2$ を持つ。反対称スピン軌道相互作用により、 $\xi(\mathbf{k}) \rightarrow E_{\pm}(\mathbf{k})$ と変更を受けるが、 $\alpha \ll E_F$ の場合 α による状態密度の変化は非常に小さい。そのため、 $d(\mathbf{k})/g(\mathbf{k})$ の場合反対称スピン軌道相互作用による超伝導転移温度の変化は無視できるほど小さい。一方、その他の対称性の場合バンド $E_{\pm}(\mathbf{k})$ はともに $|\Delta^p \mathbf{g}(\mathbf{k})|^2$ よりも小さい超伝導ギャップを持ち、 α が増大するに連れ超伝導ギャップが潰れていく。そのため、反対称スピン軌道相互作用により超伝導転移温度が低くなる。これは、バンド間の Cooper 対が存在するためである。

図 1.4 に各超伝導状態に対する超伝導転移温度の α 依存性を示す。現実的なパラメーター領域

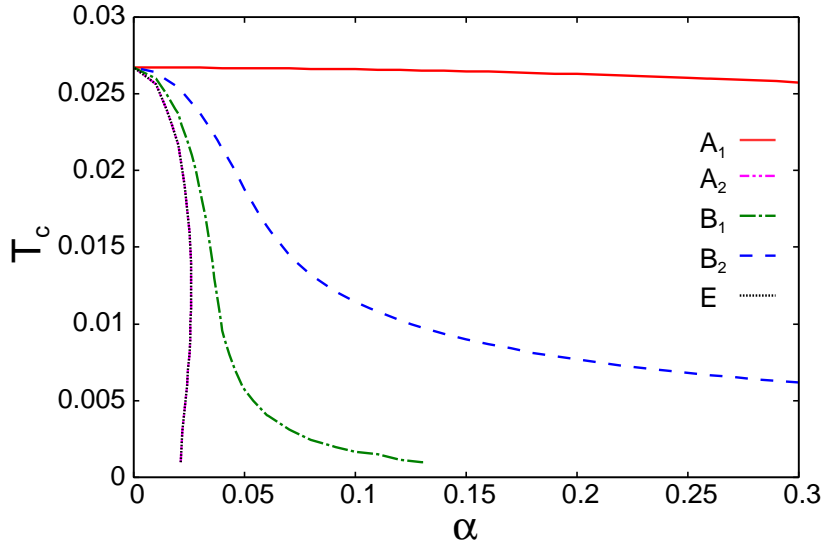


図 1.4 超伝導転移温度の α 依存性。第 2 章で述べる線形化ギャップ方程式を用いて計算した。計算に用いたパラメーターは $\mu = -2$, $V_p = 0.75$ である。

$\alpha \gg T_c$ [11] において $d(\mathbf{k})//g(\mathbf{k})$ 以外の転移温度が $\alpha = 0$ の時の転移温度と比べ低くなっているのが確認できる。一方 $d(\mathbf{k})//g(\mathbf{k})$ の場合の転移温度は α によらずほぼ一定値をとる。

以上をまとめると、反対称スピン軌道相互作用は d -ベクトルの縮退を解き、 $\alpha \gg T_c$ の場合 $d(\mathbf{k})//g(\mathbf{k})$ の状態のみが安定となる。

1.2.4 磁場中の超伝導状態

ここでは、磁場中の超伝導状態について説明する。磁場中では式 (1.8) の Zeeman 項が加わることになる。空間反転対称性が保存する場合、十分大きな磁場によりスピン一重項超伝導は破壊される (Pauli 対破壊効果)。これは Zeeman 項によりバンドのスピン縮退が解け、上向きスピンと下向きスピンの対が同一バンド内で形成できなくなるためである。同様の理由により、 d -ベクトルが磁場と平行なスピン三重項超伝導も磁場により破壊される。一方、空間反転対称性が破れた場合、反対称スピン軌道相互作用により既にスピン縮退は解けているため、様相が異なってくる。

まず初めに、 z 軸方向の磁場の場合を考える。この場合、既に示したように Fermi 面は磁場による変更を受けない。そのため、常に同一バンド内の Fermi 面近傍で k と $-k$ の対形成が可能である。結果として、空間反転対称性が破れた Rashba 型超伝導体において、 z 軸方向の磁場における Pauli 対破壊効果は抑制される。したがって、上部臨界磁場は軌道対破壊効果により決定される。なお、CeRh(Ir)Si₃ などは反強磁性量子臨界点近傍に位置する強結合超伝導体であり、それを反映して軌道対破壊効果で決定される上部臨界磁場は巨大なものとなる [44, 45]。実際に超伝導転移温度に比べ巨大な上部臨界磁場が実験的に観測されている [14, 15]。

次に、面内磁場の場合の結果を考える。この場合 Fermi 面は図 1.3 に示したように非対称に歪むこととなる。そのため、同一バンド内の Fermi 面近傍で k と $-k$ の対形成ができなくなり、磁場により超伝導が破壊される。しかし、重心運動量 q を持つ対 ($k+q$ と $-k$) が新たに可能となる。バンド $E_+(k)$ と $E_-(k)$ では Fermi 面のシフトが逆となるため、Cooper 対の重心運動量として q と $-q$ のふたつが考えられるが、Fermi 面での状態密度が大きい方のバンドのシフトに対応する q が選ばれることとなる。空間反転対称性が破れた系に現れる Cooper 対が有限の重心運動量を持つ超伝導状態は、ヘリカル超伝導状態と呼ばれる [24–30]。その秩序変数は実空間表示で

$$\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.39)$$

と書くことができる。

面内磁場中のヘリカル超伝導の安定性については、Agterberg と Kaur により得られている [29]。図 1.5 に彼らにより計算された温度・磁場相図を示す。バンド $E_+(k)$ と $E_-(k)$ の間の状態密度の差 δN 大きくなると、ヘリカル状態の占める領域が広がっていることが分かる。また、図 1.5 には、重心運動量 q を持つ対と $-q$ を持つ対どちらも超伝導になっている状態「Stripe 状態」が安定な領域も示されているが、Stripe 状態は δN の増大とともに不安定になっていることが分かる。

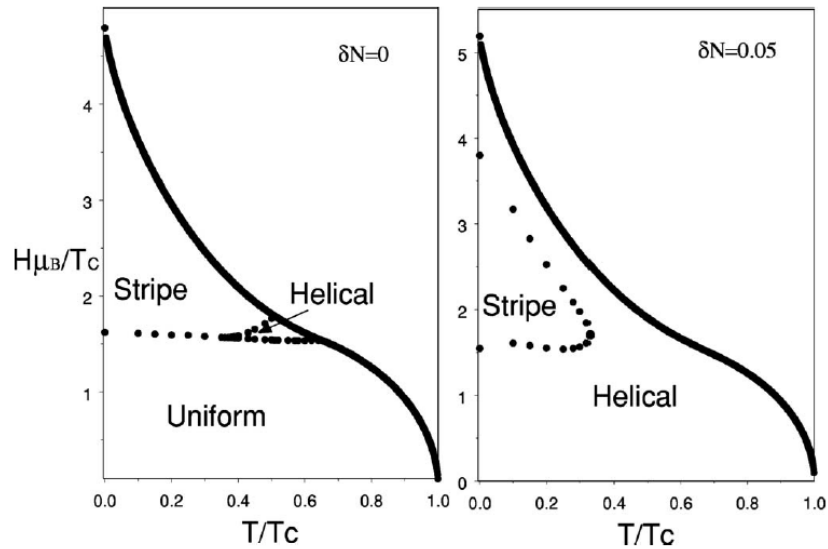


図 1.5 Agterberg と Kaur により計算された、空間反転対称性が破れた Rashba 型超伝導体の面内磁場中超伝導相図 [29]。左の図がバンド $E_+(k)$ と $E_-(k)$ の間の状態密度の差 δN がゼロの場合、右の図が $\delta N = 0.05$ の場合の結果である。「Uniform」は空間的に一様な状態、「Helical」はヘリカル状態、「Stripe」は重心運動量 q を持つ対と $-q$ を持つ対どちらも超伝導になっている状態を表している。

1.2.5 磁気電気効果

反対称スピン軌道相互作用の影響は輸送現象にも現れる。例として、磁気電気効果が挙げられる [31–34]。磁気電気効果とは、磁場により電流が、もしくは電場によりスピン分極が誘起される現象である。反対称スピン軌道相互作用による磁気電気効果は以下のように理解することができる。 x 軸方向に磁場を印加した場合を考える。この時、Fermi 面は図 1.3 のように歪み、結果として y 軸方向の電流 J が誘起されることとなる。この逆も同様に考えることができ、印加電場によりスピン分極が誘起されることとなる。

1.2.6 異常 Hall 効果、異常熱 Hall 効果、スピン Hall 効果

反対称スピン軌道相互作用が誘起する輸送現象として、他には異常 Hall 効果、異常熱 Hall 効果、スピン Hall 効果がある [34, 35]。Hall 効果が電子に働く Lorentz 力に由来するのに対し、異常 Hall 効果はスピン軌道相互作用により引き起こされる。反対称スピン軌道相互作用による異常 Hall 効果は、以下のように理解することができる。まず初めに、 y 軸方向に電場を印加した場合を考える。この時、Fermi 面は図 1.6(a) に示したように非対称に変形する。次に、 z 軸方向に磁場を印加すると、スピン量子化軸が xy 平面で回転する [図 1.6(b)]。反対称スピン軌道相互作用により、Fermi 面とスピン量子化軸は垂直となるため、Fermi 面も xy 平面で回転する。結果として、 x 軸方向に電流が流れる [図 1.6(c)]。以上が反対称スピン軌道相互作用による異常 Hall 効果の直

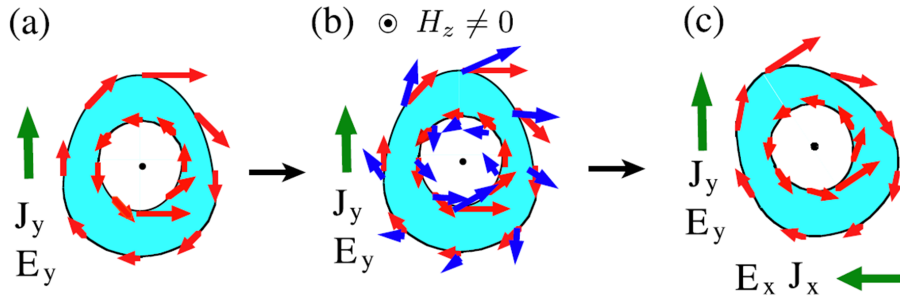


図 1.6 異常 Hall 効果のメカニズム [35]。(a) y 軸方向に電場を印加した場合の Fermi 面。(b) z 軸方向に磁場を印加した場合。スピンの z 軸回りに回転する。(c) Fermi 面がスピンと垂直になるように回転し、結果として x 軸方向の電流が誘起される。

感的な説明である。なお、重い電子系においては、電子相関効果により異常 Hall 効果の Hall 伝導度 σ_{xy}^{AHE} は通常の Hall 伝導度 σ_{xy}^{NHE} に比べ約 40 倍程度大きくなるのが理論的に指摘されている [34, 35]。同様のメカニズムにより、異常熱 Hall 効果が誘起される。

スピン Hall 効果は、Hall 効果のスピン版とも言える現象であり、電流ではなくスピン流が誘起される現象である。空間反転対称性が欠如した系のスピン Hall 効果は異常 Hall 効果と深く結びついている。前述した通り、 x 軸方向の電場 E_x と z 軸方向の磁場 H_z は異常 Hall 電流 $J^{\text{AHE}}/e = (n_{\uparrow}v_{\uparrow} + n_{\downarrow}v_{\downarrow}) = \frac{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}}{2}(v_{\uparrow} + v_{\downarrow}) + \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{2}(v_{\uparrow} - v_{\downarrow})$ を誘起する。ここで、 n_{\uparrow} (n_{\downarrow}) は上向きスピン(下向きスピン)の電子密度、 v_{\uparrow} (v_{\downarrow}) は上向きスピン(下向きスピン)の電子の速度である。 z 軸方向の磁場が存在しない限り、 J^{AHE} , $n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ はゼロであり、これより $H_z = 0$ の場合 $v_{\uparrow} + v_{\downarrow} = 0$ を得る。その結果、 $E_x \neq 0$, $H_z = 0$ の場合、スピン流 $J^{\text{SHE}}/\mu_B = n_{\uparrow}v_{\uparrow} - n_{\downarrow}v_{\downarrow} = \frac{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}}{2}(v_{\uparrow} - v_{\downarrow})$ が誘起される。なお、異常 Hall 伝導 σ^{AHE} とは異なり、スピン Hall 伝導度は電子相関効果による変化はなく系のバンド構造により決定される。

1.3 反対称スピン軌道相互作用の微視的起源

ここまで、反対称スピン軌道相互作用が生み出す様々な興味深い現象について述べた。この節では、反対称スピン軌道相互作用の微視的起源について議論する。

反対称スピン軌道相互作用の微視的起源はよく分かっている [46]、それは

- (1) パリティの異なる電子軌道の局所的な混成
- (2) 原子内部の LS 結合

である。以下、簡単な例を用いて説明する。

反対称スピン軌道相互作用を生み出す最も簡単なモデルは、 xy 平面でのミラー対称性が破れた sp 電子系である。まず、(1) の効果を考えてみる。s 軌道と p_z 軌道の局所的な混成を記述するのは

$$t_{\text{odd}} = \int dr R_{20}(r)\phi_s^*(\mathbf{r})\mathcal{H}(r)R_{21}(r)\phi_{p_z}(\mathbf{r}) \quad (1.40)$$

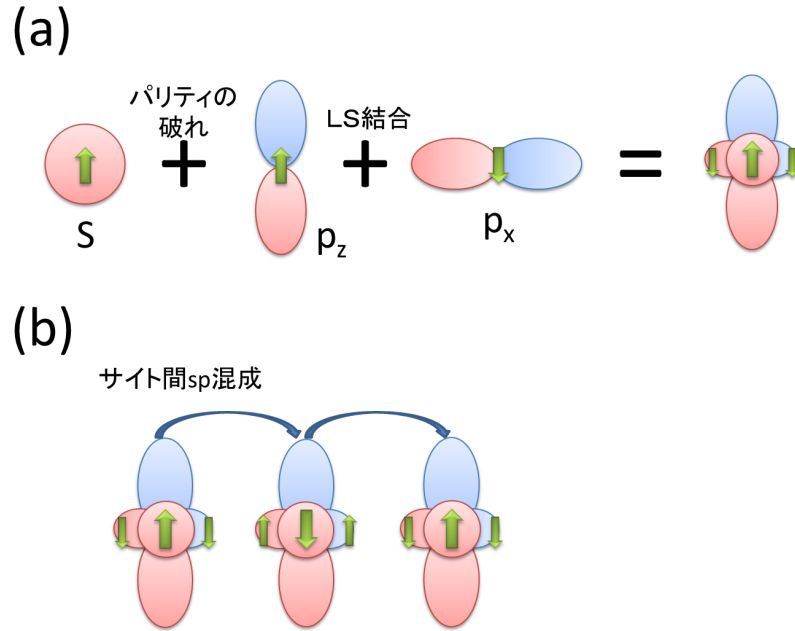


図 1.7 反対称スピン軌道相互作用の微視的起源。(a) 空間反転対称性の破れと LS 結合により構成される局所混成軌道の模式図。矢印はスピンの向きを表している。(b) 局所混成軌道のサイト間ホッピング。

である。ここで $R_{nm}(r)$ は Laguerre の陪多項式、 $\phi_s(\mathbf{r}) \propto 1$ 、 $\phi_{p_z}(\mathbf{r}) \propto z/r$ であり、 $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ は系のハミルトニアンである。 $\phi_s(\mathbf{r})$ は z に関して偶関数、 $\phi_{p_z}(\mathbf{r})$ は奇関数である。 xy に関するミラー対称性が保存する場合、 $\mathcal{H}(x, y, z) = \mathcal{H}(x, y, -z)$ となり、被積分関数は z に関して奇関数となる。したがって、 xy 平面に対するミラー対称性が保存する場合、 $t_{\text{odd}} = 0$ となり s 軌道と p_z 軌道は局所的に混成することはできない。一方、 xy 平面に対するミラー対称性が破れると、 $\mathcal{H}(x, y, z) \neq \mathcal{H}(x, y, -z)$ となるため、式 (1.40) は有限の値を持つことができる。これが空間反転対称性の欠如によるパリティの異なる電子軌道の局所的混成である。次に、(2) の LS 結合について考える。 p_z 軌道は LS 結合

$$\mathcal{H}_{\text{LS}} = \zeta \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (1.41)$$

により p_x, p_y 軌道と局所的に混成することができる。結果として、(1), (2) により図 1.7(a) に示した局所混成軌道が構成されることとなる。この局所混成軌道はサイト間の sp 混成により隣のサイトへ飛び移ることが可能であるが、この時局所混成軌道のスピンの向きが反転することになる。このようなスピンの反転を伴うサイト間ホッピングを Fourier 変換すると、正しく式 (1.2) にあげた Rashba 型の反対称スピン軌道相互作用が現れるのである。

ここまで、反対称スピン軌道相互作用の微視的起源について述べてきたが、その起源 (1), (2) はありふれたものである。(2) の LS 結合は s 軌道以外の電子に働き、空間反転対称性が保存していても破れていても存在する。また、(1) のパリティの異なる軌道間の局所的な混成も珍しいもので

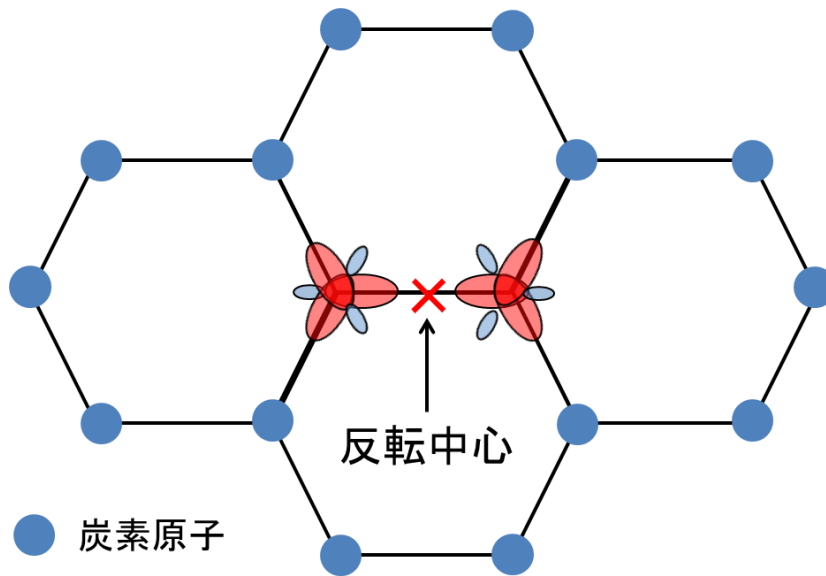


図 1.8 グラフェンにおける sp^2 混成軌道。

はない。よく知られた例として、グラフェンの sp^2 混成軌道がある。グラフェンでは s 軌道と p_x , p_y 軌道が混成して各炭素サイト方向に腕を伸ばした混成軌道を構成することが知られている (図 1.8 参照)。ここで注意したい点は、グラフェンでは空間反転対称性が保たれている点である。図 1.8 に示したように、グラフェンには空間反転中心が炭素原子間に存在する。空間反転対称性が保存するにもかかわらず、パリティの異なる電子軌道が混成出来るのは、炭素原子が空間反転中心に位置しないためである。つまり反対称スピン軌道相互作用の起源 (2) は、必ずしも大局的な空間反転対称性の欠如を必要としない。

以上をまとめると、反対称スピン軌道相互作用の微視的起源 (1), (2) はどちらもありふれたものであり、系が大局的な空間反転対称性を破らない場合でも存在しうる。

1.4 局所的な空間反転対称性が破れた系における反対称スピン軌道相互作用

第 1.3 章で、反対称スピン軌道相互作用は大局的な空間反転対称性の欠如を必要せず、空間反転中心に位置しない原子には現れることを示した。そのため、大局的な空間反転対称性が保たれているが、局所的には破れている系 (以下、局所的な空間反転対称性が破れた系と呼ぶ) にも反対称スピン軌道相互作用が現れると考えられる。局所的な空間反転対称性の破れた系の例として、多層系、ジグザグ格子系、ハニカム格子が挙げられる。興味ある研究対象として、多層系は $CeCoIn_5$ の人工超格子 [47–49]、ジグザグ格子系は $UCoGe$ などのウラン化合物 [50, 51]、ハニカム格子は $SrPtAs$ [52, 53] がある。この章では、多層系を例にとり、そこに現れる反対称スピン軌道相互作用について考察する。

一般に多層系は図 1.9 に示したように二つ以上の異なる物質が一方向に周期的に並んだ構造を持

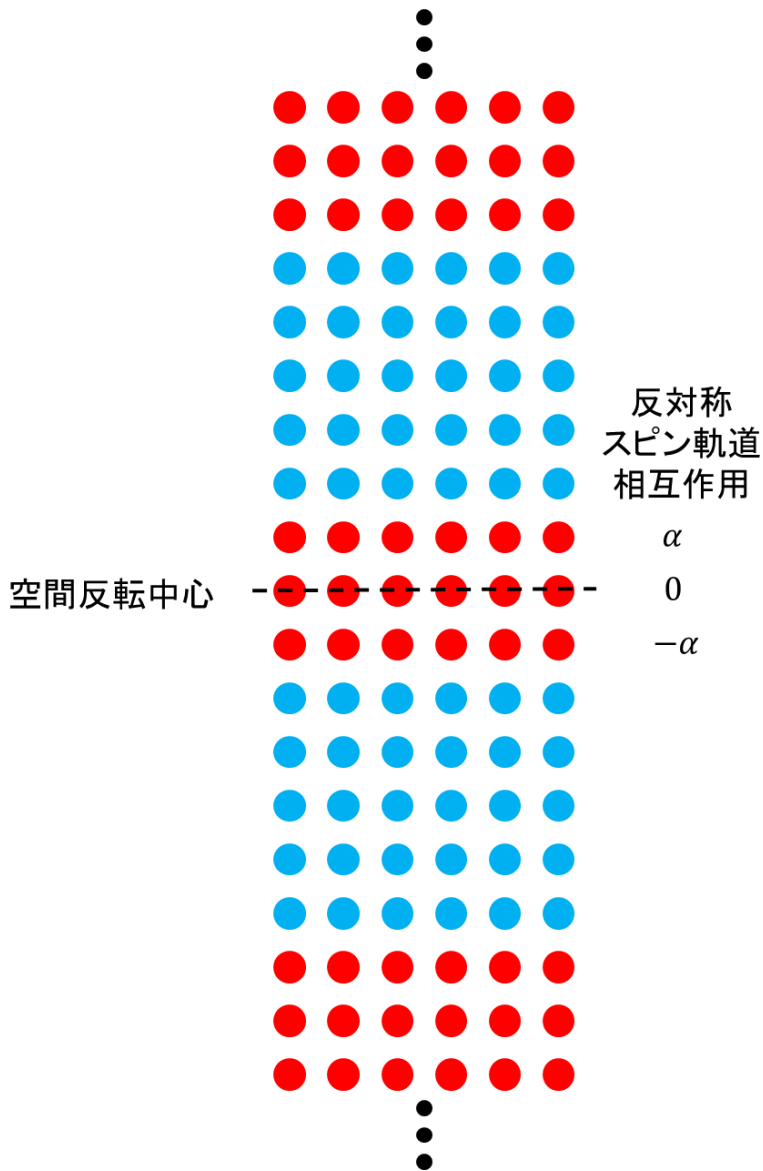


図 1.9 多層系の模式図。赤丸と青丸は異なる物質を表している。多層系に現れる反対称スピ軌道相互作用の層依存性も示した。

つ。ここでは二種類の物質からなる多層系を例にとる。明らかに、多層系では空間反転対称性は保存している。図 1.9 において、赤丸の物質が物性を支配していると仮定する。赤丸の物質が構成する三層において、外側の二層は空間反転中心に位置しない。そのため、異なるパリティを持つ電子軌道の局所的混成が可能となる。実際、空間反転中心を原点にとり、上層に関してそれを計算すると

$$\begin{aligned}
 t_{\text{odd},1} = & \int d\mathbf{r} R_{20}(\sqrt{x^2 + y^2 + (z - c)^2}) \phi_s^*(x, y, z - c) \\
 & \times \mathcal{H}(x, y, z) R_{21}(\sqrt{x^2 + y^2 + (z - c)^2}) \phi_{p_z}(x, y, z - c)
 \end{aligned} \tag{1.42}$$

となり、有限の値を持つことが分かる。ここで c は c 軸方向 (z 方向) の格子定数、 $\mathcal{H}(x, y, z)$ は系全体のハミルトニアンである。下層に関しても同様に計算でき

$$t_{\text{odd},2} = \int d\mathbf{r} R_{20}(\sqrt{x^2 + y^2 + (z+c)^2}) \phi_s^*(x, y, z+c) \\ \times \mathcal{H}(x, y, z) R_{21}(\sqrt{x^2 + y^2 + (z+c)^2}) \phi_{p_z}(x, y, z+c) \quad (1.43)$$

を得る。ここで重要な点は、空間反転対称性の破れかたが、上層と下層で逆である点である。実際、式 (1.43) の右辺において $z \rightarrow -z$ と変換すると

$$t_{\text{odd},2} = \int d\mathbf{r} R_{20}(\sqrt{x^2 + y^2 + (-z+c)^2}) \phi_s^*(x, y, -z+c) \\ \times \mathcal{H}(x, y, -z) R_{21}(\sqrt{x^2 + y^2 + (-z+c)^2}) \phi_{p_z}(x, y, -z+c) \\ = - \int d\mathbf{r} R_{20}(\sqrt{x^2 + y^2 + (z-c)^2}) \phi_s^*(x, y, z-c) \\ \times \mathcal{H}(x, y, z) R_{21}(\sqrt{x^2 + y^2 + (z-c)^2}) \phi_{p_z}(x, y, z-c) \\ = -t_{\text{odd},1} \quad (1.44)$$

を得る。ここで、 $\mathcal{H}(x, y, z) = \mathcal{H}(x, y, -z)$ 、 $\phi_{p_z}(x, y, z) = -\phi_{p_z}(x, y, -z)$ を用いた。これを反映して、反対称スピン軌道相互作用の符号が上層と下層で異なることとなる (図 1.9 参照)。

まとめると、局所的な空間反転対称性の破れた多層系には、ユニットセル内で非一様な反対称スピン軌道相互作用が現れる。

1.5 研究目的

これまでの議論をまとめる。空間反転対称性が破れた系に現れる反対称スピン軌道相互作用は、(1) パリティの異なる電子軌道の局所的混成と、(2) 原子内部の LS 結合、により誘起される。どちらも空間反転中心に位置しない原子には存在するため、局所的な空間反転対称性が欠如した系にも反対称スピン軌道相互作用は現れる。しかし、大局的な空間反転対称性が保存するため、それはユニットセル内で非一様となる。

では、局所的な空間反転対称性の欠如が物性に現れるのはどのような場合であろうか。この点に関して、Maruyama らにより非常に重要な結果が得られているため、以下に紹介する。

Maruyama らは、局所的な空間反転対称性が破れている多層系超伝導体において、絶対零度での超伝導状態におけるスピン感受率を計算した [54]。図 1.10 に、二層系超伝導体における超伝導状態と正常状態のスピン感受率の比 χ_s/χ_n を示す。まず初めに、 $\alpha = 0$ の結果に注目する。この時、スピン一重項超伝導のスピン感受率は 0 であり、スピン三重項超伝導のスピン感受率は正常状態の値と変わらない。これは、空間反転対称性が保存する場合に期待される振る舞いである。一方、スピン軌道相互作用を徐々に大きくしていくと、両者の差は小さくなり、 $\alpha \gg t_\perp$ の極限でどちらも正常状態のスピン感受率と等しい値をとる。このようなユニバーサルなスピン感受率は、大局的な空間反転対称性が欠如した系で得られる。これも反対称スピン軌道相互作用が原因である [5, 16–24]。図 1.10 は、スピン感受率が α の値を変化させることにより空間反転対称性が保存した系の値から

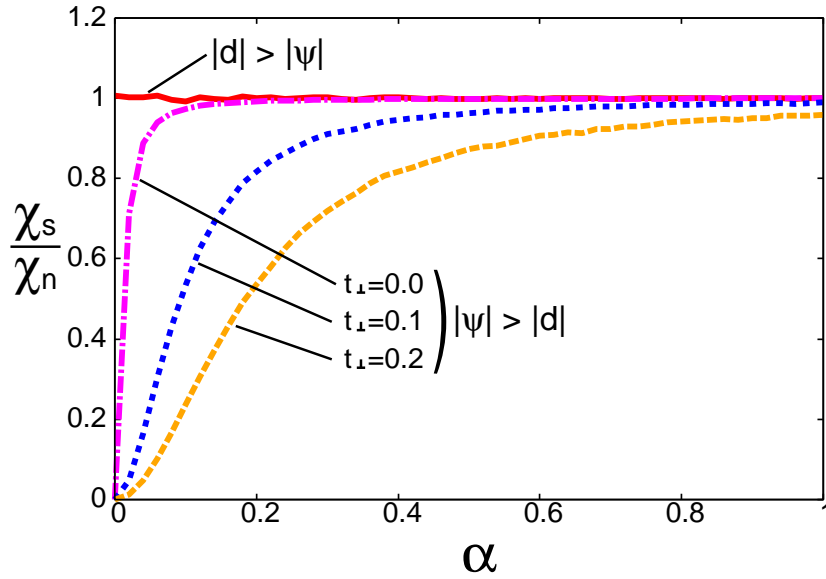


図 1.10 Maruyama らにより計算された絶対零度における超伝導状態と正常状態のスピンス感受率の比 χ_s/χ_n の α 依存性。 $|\psi| > |d|$ がスピン一重項超伝導の結果、 $|d| > |\psi|$ がスピン三重項超伝導の結果である。パラメーター t_\perp は層間遷移である。

破れた系の値へとクロスオーバーすることを示している。この中間の領域 $\alpha \sim t_\perp$ が局所的な空間反転対称性が破れた系特有の領域となる。そのため、 $\alpha \sim t_\perp$ の場合局所的な空間反転対称性の破れが顕在化し、物性に影響を与えることとなる。

Maruyama らによる先行研究より、局所的な空間反転対称性の破れは物性に現れ得ることが明らかとなった。大局的な空間反転対称性が破れた系に現れる反対称スピン軌道相互作用が様々な興味深い現象を誘起することを考えれば、局所的な空間反転対称性が破れた系に現れるユニットセル内で非一様な反対称スピン軌道相互作用もまた、様々な現象を引き起こすと期待される。しかし、いまだこの観点からの研究は行われてはいない。そこで、我々は局所的な空間反転対称性が破れた多層系超伝導体における新奇超伝導状態の実現可能性に焦点を当て研究を行った [55–59]。その後、局所的な空間反転対称性が破れた系に関する研究が盛んに行われ初め、様々な興味深い結果が得られている [60–66]。ハミカム格子の二層系 SrPtAs において、Maruyama らにより得られた多層系の結果と同様の結果が Youn らにより得られており [61]、またカイラル d 波超伝導状態の実現が理論的に指摘されている [63]。また、多層系銅酸化物超伝導体において局所的な空間反転対称性の破れの重要性が最近指摘されている [65]。超伝導以外にも、ジグザグ格子系、多層系における奇パリティ多極子も議論されている [64, 66]。

本論文では多層系超伝導体における磁場中超伝導状態の解明を目的として行った研究の結果について示す [55–59]。本論文の構成は以下のものである。第 2 章で本論文で用いたモデルと計算手法について説明する。第 3 章で面内磁場中で実現する複素ストライプ状態について議論し、第 4 章で面直磁場中で安定となるペア密度波状態について説明する。ペア密度波状態はトポロジカル結晶超

伝導状態であることを第 5 章で示す。最後に、まとめと議論を第 6 章で行う。

2 モデルと計算手法

この章では、本研究で用いた局所的な空間反転対称性が欠如した多層超伝導体のモデルと計算手法について説明する。

2.1 多層系モデル

本研究では、 CeCoIn_5 の人工超格子を念頭において、スピン-重項超伝導が支配的な多層系超伝導体を研究対象とする。多層系超伝導体は、伝導層とブロック層が交互に積層した構造を持つ（図 2.1 の左側を参照）。本論文では、この多層構造のうちユニットセル内の伝導層のみを抜きだし、それを擬二次元超伝導体とみなしてモデル化する（図 2.1 の右側を参照）。第二量子化表現で、モデ

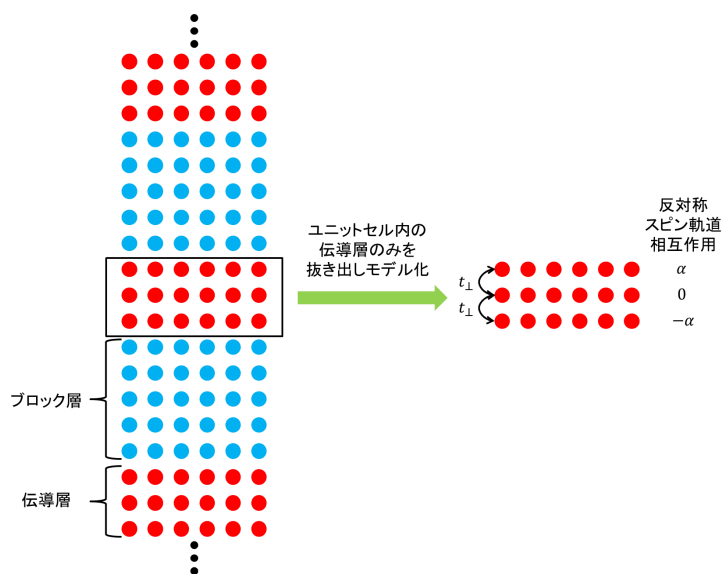


図 2.1 多層系超伝導体のモデル化。左側の図が実際の多層系超伝導体の結晶構造、右側の図はユニットセル内の伝導層のみを抜きだし、モデル化したものをそれぞれ示している。

ルハミルトニアンは以下のように書ける。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{SOC}} + \mathcal{H}_{\perp} + \mathcal{H}_{\text{Zeeman}} + \mathcal{H}_{\text{pair}} \quad (2.1)$$

$$\mathcal{H}_{\text{kin}} = \sum_{\mathbf{k}, s, m} \xi(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}sm}^{\dagger} c_{\mathbf{k}sm} \quad (2.2)$$

$$\mathcal{H}_{\text{SOC}} = \sum_{\mathbf{k}, s, s', m} \alpha_m \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{\mathbf{k}sm}^{\dagger} c_{\mathbf{k}s'm} \quad (2.3)$$

$$\mathcal{H}_{\perp} = t_{\perp} \sum_{\mathbf{k}, s, \langle m, m' \rangle} c_{\mathbf{k}sm}^{\dagger} c_{\mathbf{k}s'm'} \quad (2.4)$$

$$\mathcal{H}_{\text{Zeeman}} = -\mu_B \sum_{\mathbf{k}, s, s', m} \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{\mathbf{k}sm}^{\dagger} c_{\mathbf{k}s'm} \quad (2.5)$$

$$\mathcal{H}_{\text{pair}} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, s, s', m} V_{ss'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}sm}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}s'm}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'s'm} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}sm} \quad (2.6)$$

ここで、 $c_{\mathbf{k}sm}$ ($c_{\mathbf{k}sm}^{\dagger}$) は波数 \mathbf{k} , スピン s を持つ層 m の電子に対する消滅 (生成) 演算子である。以下各項について説明する。

第一項の \mathcal{H}_{kin} は運動エネルギー項で、正方格子上の最近接ホッピングのみを考慮して、 $\xi(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu$ (μ は化学ポテンシャル) である。以下では、ホッピングパラメータ t をエネルギーの単位として使い、特に断らない限り本論文を通して $\mu = -2$ とする。なお、本論文で示す結果は粒子数を一定とした場合の結果とほぼ変わらない。

第二項の \mathcal{H}_{SOC} は局所的な空間反転対称性の欠如に起因する反対称スピン軌道相互作用を表す項である。 α_m は結合定数で、例えば二層系では $(\alpha_1, \alpha_2) = (\alpha, -\alpha)$ 、三層系では $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (\alpha, 0, -\alpha)$ である (特に、三層系については図 2.1 の右側を参照)。大局的な空間反転対称性が破れた超伝導体において、スピン軌道相互作用の大きさは $E_F \gg \alpha \gg T_c$ である [11] ため、本論文でもこの関係を仮定する。第 1 章で述べたとおり、反対称スピン軌道相互作用は本質的に多軌道効果により誘起される。その結果得られる g -ベクトルは、多くの文献で用いられている Rashba 型の g -ベクトル $\mathbf{g}(\mathbf{k}) = (-\sin k_y, \sin k_x, 0)$ とは異なった構造を持つ [23, 46, 66–68]。しかし、局所的な空間反転対称性が破れた系においては、Rashba 型の反対称スピン軌道相互作用でさえ考慮されたことはなく、それがどのような影響を及ぼすかわかっていない。そのため、本研究では Rashba 型の g -ベクトルを採用し、それが誘起するエキゾチック超伝導を調べる。なお、多軌道モデルから導出された g -ベクトルを用いたとしても、以下の章で示す新奇超伝導状態の安定性には大きな影響はないと考えられる。

第三項は層間遷移を記述する項である。 t_{\perp} が層間遷移の遷移積分であり、 $\langle m, m' \rangle$ は最近接の層でのみ和をとることを表している。本論文を通して $t_{\perp} = 0.1$ とする。

第四項は磁場の効果を表す Zeeman 項である。 $\mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z)$ が印加磁場を表している。超伝導体における磁場の効果として、軌道対破壊効果も重要であるが、本論文では CeCoIn₅ のような大きな Maki パラメータを持つ超伝導体を想定し、軌道対破壊効果を無視することにする。

第五項は超伝導のペアリング相互作用である。本論文では、これを現象論的に導入した。擬二次元超伝導体において、層間の Cooper 対は無視できると考えられるため、層内の Cooper 対のみを

考慮する。局所的な空間反転対称性の破れに起因して、スピン一重項超伝導とスピン三重項超伝導の局所的な混成が起こる。本研究ではペアリング相互作用として最も対称性の高い S+p 波超伝導及び、CeCoIn₅ の人工超格子で実現していると期待される D+p 波超伝導に焦点を当てる。大文字、小文字の区別は、大文字の対称性の超伝導が支配的であることを意味している。ペアリング相互作用は、S+p 波超伝導の場合

$$V_{ss'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_s \delta_{s,-s'} - V_p [(\sqrt{2} \sin k_x)(\sqrt{2} \sin k'_x) + (\sqrt{2} \sin k_y)(\sqrt{2} \sin k'_y)] \quad (2.7)$$

である。右辺第一項が s 波の引力相互作用、第二項がスピン空間で等方的な p 波の引力相互作用である。D+p 波超伝導の場合は

$$V_{ss'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_d (\cos k_x - \cos k_y)(\cos k'_x - \cos k'_y) \delta_{s,-s'} - V_p [(\sqrt{2} \sin k_x)(\sqrt{2} \sin k'_x) + (\sqrt{2} \sin k_y)(\sqrt{2} \sin k'_y)] \quad (2.8)$$

である。ここで、 V_s , V_d , V_p はそれぞれ s 波、d 波、p 波の引力相互作用の大きさを表している。 N は全格子点数で、 x, y 方向の格子点数 N_x, N_y を用いて $N = N_x \times N_y$ である。

2.2 平均場近似とギャップ方程式

ハミルトニアン (2.1) は二体の相互作用を含むため、解析のためには何らかの近似を用いる必要がある。本研究では、超伝導体の解析によく用いられる平均場近似を採用した。BCS 理論に従って、ペアリング相互作用項を以下のように平均場近似する。

$$\mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF}} \simeq \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, s, s', m} V_{ss'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [\langle c_{-\mathbf{k}'s'm} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}sm} \rangle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}sm}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'm}^\dagger + \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}sm}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'm}^\dagger \rangle c_{-\mathbf{k}'s'm} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}sm} - \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}sm}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'm}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'s'm} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}sm} \rangle] \quad (2.9)$$

ここで、 $\langle \dots \rangle$ は平均場近似を行ったハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{MF}} = \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{SOC}} + \mathcal{H}_{\perp} + \mathcal{H}_{\text{Zeeman}} + \mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF}}$ に対する統計平均

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Tr}[\dots e^{-\mathcal{H}_{\text{MF}}/T}]}{\text{Tr} e^{-\mathcal{H}_{\text{MF}}/T}} \quad (2.10)$$

である。ここで、超伝導の秩序変数として

$$\Delta_{ss'm}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_{ss'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle c_{-\mathbf{k}'s'm} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}sm} \rangle \quad (2.11)$$

を定義する。 $\mathbf{q} = 0$ の場合が空間的に一様な超伝導状態であり、有限の重心運動量 \mathbf{q} を持つ場合が空間的に非一様な超伝導状態 (FFLO 状態 [2-4]) である。以下に、各超伝導対称性に対する平均場近似したペアリング相互作用項の具体的な表式を示す。s 波超伝導に対しては、

$$\mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF},s} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, m} [\Delta_m^s(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow m}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow m}^\dagger + \text{H.c.}] + \frac{N}{V_s} \sum_{\mathbf{q}, m} |\Delta_m^s(\mathbf{q})|^2 \quad (2.12)$$

となる。ここで、

$$\Delta_m^s(\mathbf{q}) \equiv -\frac{V_s}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow m} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow m} \rangle \quad (2.13)$$

は s 波超伝導に対する超伝導秩序変数である。同様に、p 波超伝導に対しては

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF,p}} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, s, s', m} \{ [\Delta_{ss'm,x}^p(\mathbf{q}) \sin k_x + \Delta_{ss'm,y}^p(\mathbf{q}) \sin k_y] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}sm}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'm}^\dagger + \text{H.c.} \} \\ & + \frac{N}{4V_p} \sum_{\mathbf{q}, s, s', m} [|\Delta_{ss'm,x}^p(\mathbf{q})|^2 + |\Delta_{ss'm,y}^p(\mathbf{q})|^2] \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\Delta_{ss'm,x}^p(\mathbf{q}) \equiv -\frac{2V_p}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \sin k'_x \langle c_{-\mathbf{k}'s'm} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}sm} \rangle \quad (2.15)$$

$$\Delta_{ss'm,y}^p(\mathbf{q}) \equiv -\frac{2V_p}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \sin k'_y \langle c_{-\mathbf{k}'s'm} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}sm} \rangle \quad (2.16)$$

であり、d 波超伝導に対しては

$$\mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF,d}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, m} [\Delta_m^d(\mathbf{q})(\cos k_x - \cos k_y) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow m}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow m}^\dagger + \text{H.c.}] + \frac{N}{V_s} \sum_{\mathbf{q}, m} |\Delta_m^d(\mathbf{q})|^2 \quad (2.17)$$

$$\Delta_m^d(\mathbf{q}) = -\frac{V_d}{N} \sum_{\mathbf{k}'} (\cos k'_x - \cos k'_y) \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow m} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow m} \rangle \quad (2.18)$$

となる。

超伝導秩序変数 (2.11) は、例えば s+p 波超伝導の場合、

$$\Delta_{ss'm}^s(\mathbf{k}) = \Delta_m^s(\mathbf{q})(i\sigma_y)_{ss'} + \Delta_{ss'm,x}^p(\mathbf{q}) \sin k_x + \Delta_{ss'm,y}^p(\mathbf{q}) \sin k_y \quad (2.19)$$

と書ける。ここで、

$$\Delta_{ss'm}^p(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \equiv \Delta_{ss'm,x}^p(\mathbf{q}) \sin k_x + \Delta_{ss'm,y}^p(\mathbf{q}) \sin k_y \quad (2.20)$$

とし、さらに

$$d_{m,x}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = -\frac{\Delta_{\uparrow\uparrow m}^p(\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \Delta_{\downarrow\downarrow m}^p(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{2} \quad (2.21)$$

$$d_{m,y}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{\Delta_{\uparrow\uparrow m}^p(\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \Delta_{\downarrow\downarrow m}^p(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{2i} \quad (2.22)$$

$$d_{m,z}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \Delta_{\uparrow\downarrow m}^p(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \quad (2.23)$$

で定義される d -ベクトルを用いると、最終的に式 (2.19) は

$$\Delta_m(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = i[\Delta_m^s(\mathbf{q})\sigma_0 + \mathbf{d}_m(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y \quad (2.24)$$

とスピン空間で行列表示される。d+p 波超伝導の場合も同様の解析が行え、結果として式 (2.24) にて $\Delta_m^s(\mathbf{q}) \rightarrow \Delta_m^d(\mathbf{q})(\cos k_x - \cos k_y)$ とすればよい。以下、一般的な表式として

$$\Delta_m(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = i[\psi_m(\mathbf{k}, \mathbf{q})\sigma_0 + \mathbf{d}_m(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y \quad (2.25)$$

を用いることにする。ここで、 $\psi_m(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ はスピン一重項超伝導の秩序変数で、s 波超伝導の場合

$$\psi_m(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \Delta_m^s(\mathbf{q}) \quad (2.26)$$

であり、d 波超伝導の場合

$$\psi_m(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \Delta_m^d(\mathbf{q})(\cos k_x - \cos k_y) \quad (2.27)$$

である。

超伝導秩序変数の計算は、空間的に一様な場合 ($\mathbf{q} = \mathbf{0}$) と非一様な場合 ($\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$) で用いる解析手法が異なる。まず初めに、空間的に一様な場合の手法について述べる。後の計算のため、平均場ハミルトニアン \mathcal{H}_{MF} を行列表示 [しばしば、Bogoliubov-de Gennes (BdG) 形式と呼ばれる] しておくことと便利である。基底

$$\Psi^\dagger(\mathbf{k}) = (c_{\mathbf{k}\uparrow 1}^\dagger, c_{\mathbf{k}\downarrow 1}^\dagger, c_{\mathbf{k}\uparrow 2}^\dagger, c_{\mathbf{k}\downarrow 2}^\dagger, \dots, c_{\mathbf{k}\uparrow M}^\dagger, c_{\mathbf{k}\downarrow M}^\dagger, c_{-\mathbf{k}\uparrow 1}, c_{-\mathbf{k}\downarrow 1}, c_{-\mathbf{k}\uparrow 2}, c_{-\mathbf{k}\downarrow 2}, \dots, c_{-\mathbf{k}\uparrow M}, c_{-\mathbf{k}\downarrow M}) \quad (2.28)$$

を用いると、

$$\mathcal{H}_{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\mathbf{k}) \mathcal{H}(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}) + E_c, \quad (2.29)$$

$$E_c = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', s, s', m} V_{ss'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle c_{\mathbf{k}sm}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'm}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'s'm} c_{\mathbf{k}'sm} \rangle \quad (2.30)$$

と書くことができる。定数項は無視した。

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_0(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^\dagger(\mathbf{k}) & -\mathcal{H}_0^T(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

は BdG ハミルトニアンと呼ばれる。 $\mathcal{H}_0(\mathbf{k})$ は正常状態に対するハミルトニアンの行列表示で M を層の総数として $2M \times 2M$ 行列である。例えば二層系では

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_1(\mathbf{k}) & t_\perp \sigma_0 \\ t_\perp \sigma_0 & \mathcal{H}_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

であり、三層系では

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_1(\mathbf{k}) & t_\perp \sigma_0 & 0 \\ t_\perp \sigma_0 & \mathcal{H}_2(\mathbf{k}) & t_\perp \sigma_0 \\ 0 & t_\perp \sigma_0 & \mathcal{H}_3(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

である。ここで、 $\mathcal{H}_m(\mathbf{k}) = \xi(\mathbf{k})\sigma_0 - \mu_B \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \alpha_m \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ である。 $\Delta(\mathbf{k})$ は超伝導秩序変数に対応する $2M \times 2M$ 行列で、 $\Delta(\mathbf{k}) = \text{diag}[\Delta_1(\mathbf{k}), \Delta_2(\mathbf{k}), \dots, \Delta_M(\mathbf{k})]$ と書ける。

超伝導秩序変数 $\Delta_{ss'm}(\mathbf{k})$ は、式 (2.11) を用いて計算することができる。BdG ハミルトニアン $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ を対角化するユニタリー行列を $U(\mathbf{k})$ とし、ユニタリー変換

$$\Psi^\dagger(\mathbf{k}) \mathcal{H}(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}) \rightarrow \Psi^\dagger(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) U^\dagger(\mathbf{k}) \mathcal{H}(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) U^\dagger(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}) \quad (2.34)$$

を行うと、新しい基底 $\Gamma^\dagger(\mathbf{k}) = \Psi^\dagger(\mathbf{k})U(\mathbf{k}) = [\gamma_1^\dagger(\mathbf{k}), \gamma_2^\dagger(\mathbf{k}), \dots, \gamma_{4M}^\dagger(\mathbf{k})]$ の元で BdG ハミルトニアンは対角的となる。つまり、BdG ハミルトニアンの固有値を $E_\nu(\mathbf{k})$ として $U^\dagger(\mathbf{k})\mathcal{H}(\mathbf{k})U(\mathbf{k}) = \text{diag}[E_1(\mathbf{k}), E_2(\mathbf{k}), \dots, E_{4M}(\mathbf{k})]$ である。一方、基底 $\Psi(\mathbf{k})$ と $\Gamma(\mathbf{k})$ は

$$c_{ksm} = \sum_{\nu} u_{sm}^{\nu}(\mathbf{k})\gamma_{\nu}(\mathbf{k}), \quad c_{-ksm}^{\dagger} = \sum_{\nu} v_{sm}^{\nu}(\mathbf{k})\gamma_{\nu}(\mathbf{k}) \quad (2.35)$$

で結ばれる。この新しい基底の元で、式 (2.11) は

$$\begin{aligned} \Delta_{ss'm}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_{ss'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left\langle \left[\sum_{\nu} v_{s'm}^{\nu*}(\mathbf{k})\gamma_{\nu}^{\dagger}(\mathbf{k}) \right] \left[\sum_{\nu'} u_{sm}^{\nu'}(\mathbf{k})\gamma_{\nu'}(\mathbf{k}) \right] \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_{ss'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \sum_{\nu} v_{s'm}^{\nu*}(\mathbf{k}) u_{sm}^{\nu}(\mathbf{k}) f[E_{\nu}(\mathbf{k})] \end{aligned} \quad (2.36)$$

となる。ここで、 $f[E_{\nu}(\mathbf{k})]$ は Fermi 分布関数である。一行目から二行目への変換では、トレースが基底によらないこと、また基底 $\Gamma^\dagger(\mathbf{k})$ が BdG ハミルトニアンの固有状態であるので $\langle \gamma_{\nu}^{\dagger}(\mathbf{k})\gamma_{\nu'}(\mathbf{k}) \rangle = f[E_{\nu}(\mathbf{k})]\delta_{\nu\nu'}$ であることを用いた。式 (2.36) が解くべき方程式、ギャップ方程式である。ギャップ方程式を用いて超伝導秩序変数は自己無撞着に決定される。つまり、初期値としてある $\Delta_{ss'm}^{\text{Old}}(\mathbf{k})$ を仮定し、BdG ハミルトニアンを構築する。その固有ベクトルを式 (2.36) に代入して新たな秩序変数 $\Delta_{ss'm}^{\text{New}}(\mathbf{k})$ を計算する。これを $\Delta_{ss'm}^{\text{Old}}(\mathbf{k})$ とし、再び BdG ハミルトニアンを構築、 $\Delta_{ss'm}^{\text{New}}(\mathbf{k})$ を計算する。この手順を $\Delta_{ss'm}^{\text{Old}}(\mathbf{k}) = \Delta_{ss'm}^{\text{New}}(\mathbf{k})$ となるまで繰り返す。いくつかの安定な解が得られた場合、自由エネルギーを計算して真に安定な解を決定する。自由エネルギー F は

$$F = \langle H_{\text{MF}} \rangle - TS \quad (2.37)$$

で計算される。 T は温度、 S はエントロピーである。基底 $\Gamma^\dagger(\mathbf{k})$ が BdG ハミルトニアンの固有状態であることに注意すると、自由エネルギーは

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \nu} E_{\nu}(\mathbf{k}) f[E_{\nu}(\mathbf{k})] + E_c + \frac{1}{2} T \sum_{\mathbf{k}, s, \nu} f[sE_{\nu}(\mathbf{k})] \ln f[sE_{\nu}(\mathbf{k})] \quad (2.38)$$

と書ける。いくつかの準安定状態の自由エネルギーを比較することにより、温度・磁場相図を決定した。

上で述べた手法は空間的に一様な場合に用いた方法である。次に、空間的に非一様な場合、つまり $q \neq 0$ の場合に用いた手法について述べる。空間的に非一様な場合、波数はよい量子数とならないため、波数空間で書いた平均場ハミルトニアンを実空間表示にする必要がある。Fourier 変換

$$c_{ksm} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}} c_{ism} \quad (2.39)$$

を用いると、ペアリング相互作用以外の項は以下のように実空間表示される。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{kin}} = & -t \sum_{i,s,m} (c_{ism}^\dagger c_{i+\hat{x}sm} + c_{ism}^\dagger c_{i-\hat{x}sm} + c_{ism}^\dagger c_{i+\hat{y}sm} + c_{ism}^\dagger c_{i-\hat{y}sm}) \\ & -\mu \sum_{i,s,m} c_{ism}^\dagger c_{ism} \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\mathcal{H}_{\text{SOC}} = \frac{i}{2} \sum_{i,j,m} \alpha_m (i c_{i\uparrow m}^\dagger c_{i+\hat{x}\downarrow m} - i c_{i\uparrow m}^\dagger c_{i-\hat{x}\downarrow m} + c_{i\uparrow m}^\dagger c_{i+\hat{y}\downarrow m} - c_{i\uparrow m}^\dagger c_{i-\hat{y}\downarrow m} + \text{H.c.}) \quad (2.41)$$

$$\mathcal{H}_\perp = t_\perp \sum_{i,s,\langle m,m' \rangle} c_{ism}^\dagger c_{ism'} \quad (2.42)$$

$$\mathcal{H}_{\text{Zeeman}} = -\mu_B \sum_{i,s,s',m} \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{ism}^\dagger c_{is'm} \quad (2.43)$$

ここで、 \hat{x} 、 \hat{y} はそれぞれ x 方向、 y 方向の単位ベクトルである。次に、平均場近似したペアリング相互作用項 (2.9) を、超伝導対称性ごとに実空間表示した結果を示す。s 波超伝導に対するペアリング相互作用項 (2.12) は Fourier 変換を行うと

$$\mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF},s} = \sum_{i,m} [\Delta_m^s(i) c_{i\uparrow m}^\dagger c_{i\downarrow m} + \text{H.c.}] + \frac{1}{V_s} \sum_{i,m} |\Delta_m^s(i)|^2 \quad (2.44)$$

となる。ここで、 $\Delta_m^s(i)$ は $\Delta_m^s(\mathbf{q})$ の Fourier 変換

$$\Delta_m^s(i) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} \Delta_m^s(\mathbf{q}) = -V_s \langle c_{i\downarrow m} c_{i\uparrow m} \rangle \quad (2.45)$$

である。同様に、p 波超伝導の場合は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF},p} = & \sum_{i,s,s',m} \left[\Delta_{ss'm,x}^p(i) \frac{1}{2i} (c_{ism}^\dagger c_{i+\hat{x}s'm}^\dagger - c_{ism}^\dagger c_{i-\hat{x}s'm}^\dagger) + \text{H.c.} \right] \\ & + \sum_{i,s,s',m} \left[\Delta_{ss'm,y}^p(i) \frac{1}{2i} (c_{ism}^\dagger c_{i+\hat{y}s'm}^\dagger - c_{ism}^\dagger c_{i-\hat{y}s'm}^\dagger) + \text{H.c.} \right] \\ & + \frac{1}{4V_p} \sum_{i,s,s',m} [|\Delta_{ss'm,x}^p(i)|^2 + |\Delta_{ss'm,y}^p(i)|^2] \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\Delta_{ss'm,x}^p(i) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} \Delta_{ss'm,x}^p(\mathbf{q}) = -iV_p [\langle c_{i+\hat{x}s'm} c_{is} \rangle - \langle c_{i-\hat{x}s'm} c_{is} \rangle] \quad (2.47)$$

$$\Delta_{ss'm,y}^p(i) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} \Delta_{ss'm,y}^p(\mathbf{q}) = -iV_p [\langle c_{i+\hat{y}s'm} c_{is} \rangle - \langle c_{i-\hat{y}s'm} c_{is} \rangle] \quad (2.48)$$

であり、 d 波超伝導の場合は

$$\mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF},d} = \sum_{i,m} \left[\Delta_m^d(i) \frac{1}{2} (c_{i\uparrow m}^\dagger c_{i+\hat{x}\downarrow m}^\dagger + c_{i\uparrow m}^\dagger c_{i-\hat{x}\downarrow m}^\dagger - c_{i\uparrow m}^\dagger c_{i+\hat{y}\downarrow m}^\dagger - c_{i\uparrow m}^\dagger c_{i-\hat{y}\downarrow m}^\dagger) + \text{H.c.} \right] + \frac{1}{V_d} \sum_{i,m} |\Delta_m^d(i)|^2 \quad (2.49)$$

$$\Delta_m^d(i) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} \Delta_m^d(\mathbf{q}) = -\frac{V_d}{2} [\langle c_{i+\hat{x}\downarrow m} c_{i\uparrow m} \rangle + \langle c_{i-\hat{x}\downarrow m} c_{i\uparrow m} \rangle - \langle c_{i+\hat{y}\downarrow m} c_{i\uparrow m} \rangle - \langle c_{i-\hat{y}\downarrow m} c_{i\uparrow m} \rangle] \quad (2.50)$$

と変換される。

実空間表示した超伝導秩序変数 (2.45)、(2.47)、(2.48)、(2.50) を計算するためには、波数空間で説明した計算方法を実空間表示で行えばよい。実空間表示した平均場ハミルトニアンを、基底

$$\Psi^\dagger = (c_{i\uparrow 1}^\dagger, c_{i\downarrow 1}^\dagger, c_{i\uparrow 2}^\dagger, c_{i\downarrow 2}^\dagger, \dots, c_{i\uparrow M}^\dagger, c_{i\downarrow M}^\dagger, c_{i\uparrow 1}, c_{i\downarrow 1}, c_{i\uparrow 2}, c_{i\downarrow 2}, \dots, c_{i\uparrow M}, c_{i\downarrow M}) \quad (2.51)$$

で行列表示する。

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \Psi^\dagger \begin{pmatrix} \mathcal{H}_0(i) & \Delta(i) \\ \Delta^\dagger(i) & -\mathcal{H}_0^T(i) \end{pmatrix} \Psi + E_c \quad (2.52)$$

$\mathcal{H}_0(i)$ は正常状態のハミルトニアンであり、 $\Delta(i)$ が実空間表示の秩序変数の行列表示である。どちらも $2MN^2 \times 2MN^2$ 行列である。波数空間での議論と同様に、実空間表示した BdG ハミルトニアンを対角化するようユニタリー変換を施す。このユニタリー変換により、 c_{ism} は

$$c_{ism} = \sum_{\nu} (u_{ism,\nu} \gamma_{\nu} + v_{ism,\nu} \gamma_{\nu}^\dagger) \quad (2.53)$$

と変換される。超伝導秩序変数は、 s 波超伝導の場合

$$\Delta_m^s(i) = -V_s \sum_{\nu} [u_{i\uparrow m,\nu} v_{i\downarrow m,\nu} f(E_{\nu}) + u_{i\downarrow m,\nu} v_{i\uparrow m,\nu} f(-E_{\nu})] \quad (2.54)$$

となる。これが実空間表示でのギャップ方程式である。実空間表示のギャップ方程式は特に BdG 方程式と呼ばれている。同様に p 波超伝導の BdG 方程式は

$$\Delta_{ss'm,x}^p = -iV_p \sum_{\nu} [u_{i+\hat{x}s'm,\nu} v_{ism,\nu} f(-E_{\nu}) + v_{i+\hat{x}s'm,\nu} u_{ism,\nu} f(E_{\nu}) - u_{i-\hat{x}s'm,\nu} v_{ism,\nu} f(-E_{\nu}) - v_{i-\hat{x}s'm,\nu} u_{ism,\nu} f(E_{\nu})] \quad (2.55)$$

$$\Delta_{ss'm,y}^p = -iV_p \sum_{\nu} [u_{i+\hat{y}s'm,\nu} v_{ism,\nu} f(-E_{\nu}) + v_{i+\hat{y}s'm,\nu} u_{ism,\nu} f(E_{\nu}) - u_{i-\hat{y}s'm,\nu} v_{ism,\nu} f(-E_{\nu}) - v_{i-\hat{y}s'm,\nu} u_{ism,\nu} f(E_{\nu})] \quad (2.56)$$

となり、d 波超伝導に対しては

$$\begin{aligned} \Delta_m^d(\mathbf{i}) = & -\frac{V_d}{2} \sum_{\nu} [u_{\mathbf{i}+\hat{x}\downarrow m, \nu} v_{\mathbf{i}\uparrow m, \nu} f(-E_{\nu}) + v_{\mathbf{i}+\hat{x}\downarrow m, \nu} u_{\mathbf{i}\uparrow m, \nu} f(E_{\nu}) \\ & + u_{\mathbf{i}-\hat{x}\downarrow m, \nu} v_{\mathbf{i}\uparrow m, \nu} f(-E_{\nu}) + v_{\mathbf{i}-\hat{x}\downarrow m, \nu} u_{\mathbf{i}\uparrow m, \nu} f(E_{\nu}) \\ & - u_{\mathbf{i}+\hat{y}\downarrow m, \nu} v_{\mathbf{i}\uparrow m, \nu} f(-E_{\nu}) - v_{\mathbf{i}+\hat{y}\downarrow m, \nu} u_{\mathbf{i}\uparrow m, \nu} f(E_{\nu}) \\ & - u_{\mathbf{i}-\hat{y}\downarrow m, \nu} v_{\mathbf{i}\uparrow m, \nu} f(-E_{\nu}) - v_{\mathbf{i}-\hat{y}\downarrow m, \nu} u_{\mathbf{i}\uparrow m, \nu} f(E_{\nu})] \end{aligned} \quad (2.57)$$

を得る。いくつかの準安定状態が得られたならば、自由エネルギーを比較して真に安定な状態を決定する。自由エネルギー F は

$$F = \frac{1}{2} \sum_{s, \nu} s E_{\nu} f(s E_{\nu}) + E_c + T \sum_{s, \nu} f(s E_{\nu}) \ln f(s E_{\nu}) \quad (2.58)$$

で計算される。ここで、 $E_{\nu+2MN^2} = -E_{\nu}$ を用いた。

2.3 線形化ギャップ方程式

前のセクションで述べた手法を用いて温度・磁場相図の計算を行えばよいが、二次相転移近傍ではギャップ方程式の収束が著しく悪くなる。そのため、超伝導転移が二次相転移の場合は、ギャップ方程式を用いた解析よりも、線形化ギャップ方程式を用いた解析の方がはるかに楽である。ここでは、超伝導転移を決定するのに用いた線形化ギャップ方程式について述べる。

スピン感受率の超伝導版ともいえる超伝導感受率 χ を以下の式で定義する。

$$\chi_{lm, l'm'}(q) = \int_0^{1/T} d\tau e^{i\Omega_n \tau} \langle B_{lm}(\mathbf{q}, \tau) B_{l'm'}^{\dagger}(\mathbf{q}, 0) \rangle \quad (2.59)$$

ここで、 $q = (\mathbf{q}, i\Omega_n)$ であり、 $\Omega_n = 2nT, \omega_n = (2n+1)T$ はそれぞれボソン、フェルミオンに対する松原振動数である。また、 $B_{\lambda m}(\mathbf{q}, \tau) = e^{\mathcal{H}\tau} B_{\lambda m}(\mathbf{q}) e^{-\mathcal{H}\tau}$ であり

$$B_{lm}^{\dagger}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', s, s', \mu} d_l^{\mu}(\mathbf{k}) (\sigma_{\mu} i\sigma_y)_{ss'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}sm}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}s'm}^{\dagger} \quad (2.60)$$

は層 m に重心運動量 \mathbf{q} を持つ Cooper 対を加える演算子である。つまり、超伝導感受率は、Cooper 対を一つ加えたときの系の応答関数である。スピン-重項超伝導も含むよう一般化された d -ベクトル $d_l(\mathbf{k}) = [\psi_l(\mathbf{k}), d_{lx}(\mathbf{k}), d_{ly}(\mathbf{k}), d_{lz}(\mathbf{k})]$ は、S+p 波の場合 $d_1(\mathbf{k}) = (1, 0, 0, 0)$, $d_{2,3}(\mathbf{k}) = (0, \sin k_x, \pm \sin k_y, 0)$, $d_{4,5}(\mathbf{k}) = (0, \pm \sin k_y, \sin k_x, 0)$, $d_{6,7}(\mathbf{k}) = (0, 0, 0, \sin k_x \pm \sin k_y)$ である。D+p 波の場合は、上記において $d_1(\mathbf{k}) = (\cos k_x - \cos k_y, 0, 0, 0)$ としたものである。また、 $B_{lm}(\mathbf{q})$ を用いると、ペアリング相互作用項 (2.6) は

$$\mathcal{H}_{\text{pair}} = - \sum_{\mathbf{q}, l, m} V_l B_{lm}^{\dagger}(\mathbf{q}) B_{lm}(\mathbf{q}) \quad (2.61)$$

と書き直すことができる。ここで V_l は $V_1 = V_s, V_d, V_{2\sim 7} = V_p$ の関係がある。

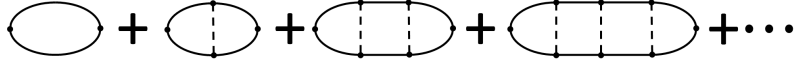


図 2.2 T -行列近似において考慮するダイアグラム。

超伝導感受率の計算には何らかの近似を行う必要がある。本研究では、スピン感受率の計算で用いられる乱雑位相近似の超伝導感受率版とも言える T -行列近似を採用した。乱雑位相近似と同様に T -行列近似は平均場近似と等価な近似である。 T -行列近似において、図 2.2 に示したダイアグラムのみ考慮する。結果として

$$\chi(q) = \frac{\chi^{(0)}}{1 - V\chi^{(0)}} \quad (2.62)$$

を得る。ここで、 $7M \times 7M$ 行列である V は

$$V = \text{diag}(V_1, V_2, V_3, V_4, V_5, V_6, V_7, \dots, V_1, V_2, V_3, V_4, V_5, V_6, V_7) \quad (2.63)$$

であり、

$$\chi_{lm, l'm'}^{(0)} = \int_0^{1/T} d\tau e^{i\Omega_n \tau} \langle B_{lm}(\mathbf{q}, \tau) B_{l'm'}^\dagger(\mathbf{q}, 0) \rangle_0 \quad (2.64)$$

はペアリング相互作用を無視した場合の超伝導感受率である。計算の詳細については、付録 A を参照。超伝導転移温度 T_c は超伝導感受率が発散する点として決定する。実際の計算では、 $V\chi^0$ を対角化し、その最大固有値が 1 となる点を T_c とした。

3 面内磁場の場合～複素ストライプ相～

この章では、面内磁場中のエキゾチック超伝導状態、複素ストライプ相について述べる [56]。まず初めに、複素ストライプ相のメカニズムについて簡単に説明し、その後二層系 s 波超伝導体、三層系 s 波超伝導体、d 波超伝導体の結果を示す。なお、この章を通じて $V_p = 0$, $\mathbf{H} = (H_x, 0, 0)$ とする。

3.1 序論～複素ストライプ相のメカニズム～

ここでは、層に平行な磁場 $\mathbf{H} = (H_x, 0, 0)$ が印加されている状況で実現する超伝導状態について考察する。例として二層系スピン一重項超伝導体を取り上げる。初めに、層間遷移が 0 の場合実現する超伝導状態について考えてみる (図 3.1 の左側参照)。この場合、第 1 章で示したようにヘリカル超伝導状態 $\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$ が実現することが知られている [24-30]。ヘリカル超伝導状態は Cooper 対が有限の重心運動量 \mathbf{q} を持つ状態であり、秩序変数の位相が実空間で変化する。ここで注意すべき点は、反対称スピン軌道相互作用の符号が層間で異なるため、Cooper 対の重心運動量も層間で符号を変える点である。この状態に層間遷移 t_{\perp} を導入すると、各層の秩序変数が適度に混じり合い、秩序変数が

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \psi_0(e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + \delta e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}) \quad (3.1)$$

$$\psi_2(\mathbf{r}) = \psi_0(\delta e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}) \quad (3.2)$$

で記述される超伝導状態になると考えられる (図 3.1 の右側)。この超伝導状態の秩序変数は、ストライプ構造に位相因子が掛かった構造を持つため、複素ストライプ状態と呼ぶことにする。以上が複素ストライプ状態を安定化するメカニズムの直感的な理解である。複素ストライプ状態は、大局的な空間反転対称性が破れた系で実現するヘリカル状態 ($\delta = 0$) と、空間反転対称性が保存する系で安定となる Larkin-Ovchinnikov (LO) 状態 ($\delta = 1$) $\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$ の中間の状態とみな

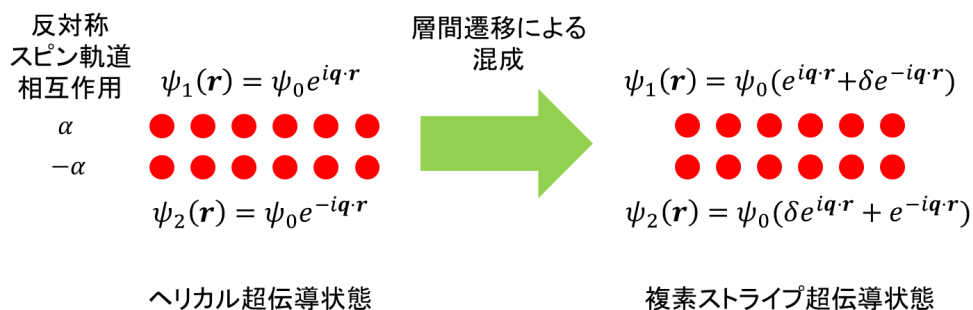


図 3.1 複素ストライプ状態のメカニズム。左が層間遷移がない場合実現が期待されるヘリカル超伝導状態。右が層間遷移により各層の秩序変数が混成した複素ストライプ超伝導状態。

すこともできる。

以下、複素ストライプ状態の熱力学的安定性について議論する。

3.2 二層系 s 波超伝導体

この章では、二層系 s 波超伝導体の結果を示す。まず初めに、BdG 方程式及び線形化ギャップ方程式を用いて決定した温度・磁場相図を示す。その後、局所状態密度の計算結果も紹介する。

3.2.1 温度・磁場相図

スピン軌道相互作用による上部臨界磁場の変化を、線形化ギャップ方程式を用いて解析した。p 波超伝導との混成を考慮しない場合、超伝導感受率 χ は $M \times M$ 行列となり、s 波超伝導の場合その定義は

$$\chi_{m,m'}(\mathbf{q}) = \int_0^{1/T} d\tau e^{i\Omega_n \tau} \langle B_m(\mathbf{q}, \tau) B_{m'}^\dagger(\mathbf{q}, 0) \rangle \quad (3.3)$$

$$B_m^\dagger(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow m}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow m}^\dagger \quad (3.4)$$

となる。各磁場 H_x での超伝導転移温度 $T_c(H_x)$ は

$$1_{M \times M} - V_s \chi(\mathbf{q}, 0) = 0 \quad (3.5)$$

を満たす温度である。ここで $1_{M \times M}$ は $M \times M$ の単位行列である。線形化ギャップ方程式 (3.5) を用いて解析した温度・磁場相図を図 3.2 に示す。スピン軌道相互作用 α が大きくなるにつれ、上部臨界磁場が上昇しているのが分かる。また、 $\alpha = 0.3$ と $\alpha = 0.5$ の結果を比べると、 $\mathbf{q} = 0$ の状態から $\mathbf{q} \neq 0$ の状態への転移が低磁場側へシフトしている。よって、 α が増大すると、空間的に非一様な状態が相図の広い領域を占めることとなる。この結果は $E_F \gg \alpha \gg T_c$ の関係が成り立っている限り、定性的には変わらない。

線形化ギャップ方程式では超伝導転移温度以下で実現している状態についての情報は得られないため、BdG 方程式を用いて温度・磁場相図を決定した。複素ストライプ状態では、 $\mathbf{H} = (H_x, 0, 0)$ の時 Cooper 対の重心運動量は $\mathbf{q} = (0, \pm q)$ である。つまり秩序変数は y 方向にのみ変調し、 x 方向には一様である。そのため、第 2 章で述べた実空間における解析手法を、 x 方向に Fourier 逆変換して計算を行った。 x 方向への Fourier 逆変換

$$c_{ism} = \frac{1}{\sqrt{N_x}} \sum_{k_x} e^{ik_x i_x} c_{i_y sm}(k_x) \quad (3.6)$$

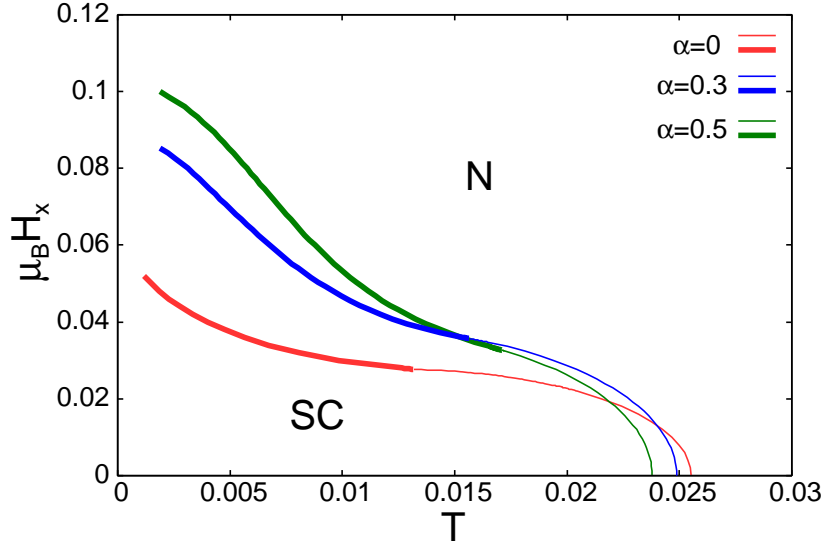


図 3.2 二層系 s 波超伝導体における上部臨界磁場。 $V_s = 1.7$ の結果である。「SC」は超伝導状態が安定な領域、「N」は正常状態の領域を表している。赤の線が $\alpha = 0$ 、青の線が $\alpha = 0.3$ 、緑の線が $\alpha = 0.5$ の結果である。細線は最大固有値を持つ状態が空間的に一様な状態 (つまり、 $q = 0$)、太線はそれが空間的に非一様な状態 ($q \neq 0$) を表している。

を行うと、平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{MF}} = & \sum_{k_x, i_y, j_y, s, m} [-t(\delta_{i_y+1, j_y} + \delta_{i_y-1, j_y}) + (-2t \cos k_x - \mu)\delta_{i_y, j_y}] c_{i_y, sm}^\dagger(k_x) c_{j_y, sm}(k_x) \\
& + \sum_{k_x, i_y, j_y, m} \left[-i \frac{\alpha_m}{2} (-\delta_{i_y+1, j_y} + \delta_{i_y-1, j_y} + 2 \sin k_x \delta_{i_y, j_y}) c_{i_y, \uparrow m}^\dagger(k_x) c_{j_y, \downarrow m}(k_x) + \text{H.c.} \right] \\
& + t_\perp \sum_{k_x, i_y, s, \langle m, m' \rangle} c_{i_y, sm}^\dagger(k_x) c_{i_y, sm'}(k_x) \\
& - \mu_B H_x \sum_{k_x, i_y, s, m} c_{i_y, sm}^\dagger(k_x) c_{i_y, \bar{s}m}(k_x) \\
& + \sum_{k_x, i_y, m} [\Delta_m^s(i_y) c_{i_y, \uparrow m}^\dagger(k_x) c_{i_y, \downarrow m}^\dagger(-k_x) + \text{H.c.}] + \frac{N_x}{V_s} \sum_{i_y, m} |\Delta_m^s(i_y)|^2, \tag{3.7}
\end{aligned}$$

となり、BdG 方程式は

$$\Delta_m^s(i_y) = -\frac{V_s}{N_x} \sum_{k_x} \langle c_{i_y, \downarrow m}(-k_x) c_{i_y, \uparrow m}(k_x) \rangle \tag{3.8}$$

と変換される。BdG 方程式を数値的に解くために、平均場ハミルトニアンを基底

$$\begin{aligned}
\Psi^\dagger(k_x) = & [c_{i_y, \uparrow 1}^\dagger(k_x), c_{i_y, \downarrow 1}^\dagger(k_x), \dots, c_{i_y, \uparrow M}^\dagger(k_x), c_{i_y, \downarrow M}^\dagger(k_x), \\
& c_{i_y, \uparrow 1}^\dagger(-k_x), c_{i_y, \downarrow 1}^\dagger(-k_x), \dots, c_{i_y, \uparrow M}^\dagger(-k_x), c_{i_y, \downarrow M}^\dagger(-k_x)] \tag{3.9}
\end{aligned}$$

で行列表示する。すると、

$$\mathcal{H}_{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_{k_x} \Psi^\dagger(k_x) \begin{bmatrix} \mathcal{H}_0(k_x) & \Delta^s \\ \Delta^{s\dagger} & -\mathcal{H}_0^T(-k_x) \end{bmatrix} \Psi(k_x) + \frac{N_x}{V_s} \sum_{i_y, m} |\Delta_m^s(i_y)|^2 \quad (3.10)$$

を得る。 $\mathcal{H}_0(k_x)$, Δ^s はどちらも $2N_y M \times 2N_y M$ 行列であり、二層系では

$$\mathcal{H}_0(k_x) = \begin{bmatrix} \mathcal{H}_{\text{kin}}(k_x) & \mathcal{H}_{\text{SOC},1}(k_x) & t_\perp \mathbf{1}_{N_y \times N_y} & 0 \\ \mathcal{H}_{\text{SOC},1}^\dagger(k_x) & \mathcal{H}_{\text{kin}}(k_x) & 0 & t_\perp \mathbf{1}_{N_y \times N_y} \\ t_\perp \mathbf{1}_{N_y \times N_y} & 0 & \mathcal{H}_{\text{kin}}(k_x) & \mathcal{H}_{\text{SOC},2}(k_x) \\ 0 & t_\perp \mathbf{1}_{N_y \times N_y} & \mathcal{H}_{\text{SOC},2}^\dagger(k_x) & \mathcal{H}_{\text{kin}}(k_x) \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

となる。 $\mathbf{1}_{N_y \times N_y}$ は $N_y \times N_y$ の単位行列である。 $\mathcal{H}_{\text{kin}}(k_x)$, $\mathcal{H}_{\text{SOC},m}(k_x)$ を顕に書くと、 $\xi(k_x) = -2t \cos k_x - \mu$, $g_y(k_x) = -i \sin k_x - \mu_B H_x$ として

$$\mathcal{H}_{\text{kin}}(k_x) = \begin{bmatrix} \xi(k_x) & -t & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -t \\ -t & \xi(k_x) & -t & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -t & \xi(k_x) & -t & 0 & \cdots & 0 \\ & & & \vdots & & & \\ -t & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -t & \xi(k_x) \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

$$\mathcal{H}_{\text{SOC},m}(k_x) = \begin{bmatrix} g_y(k_x) & i\alpha_m/2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -i\alpha_m/2 \\ -i\alpha_m/2 & g_y(k_x) & i\alpha_m/2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -i\alpha_m/2 & g_y(k_x) & i\alpha_m/2 & 0 & \cdots & 0 \\ & & & \vdots & & & \\ i\alpha_m/2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -i\alpha_m/2 & g_y(k_x) \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

となる。ここで、周期境界条件 $N_y + 1 = N_y$ を課した。秩序変数も具体的に書くと、以下のようになる。

$$\Delta^s = \begin{bmatrix} \Delta_1^s & 0 \\ 0 & \Delta_2^s \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

$$\Delta_m^s = \text{diag}[\Delta_m^s(1), \Delta_m^s(2), \dots, \Delta_m^s(N_y - 1), \Delta_m^s(N_y)] \quad (3.15)$$

行列表示したハミルトニアンを対角化するユニタリー変換

$$c_{i_y s m}(k_x) = \sum_\nu u_{i_y s m, \nu}(k_x) \gamma_\nu(k_x), \quad c_{i_y s m}^\dagger(-k_x) = \sum_\nu v_{i_y s m, \nu}(-k_x) \gamma_\nu(k_x) \quad (3.16)$$

を施すと、BdG 方程式 (3.8) は

$$\Delta_m^s(i_y) = -\frac{V_s}{N_x} \sum_{k_x, \nu} v_{i_y \downarrow m, \nu}^*(-k_x) u_{i_y \uparrow m, \nu}(k_x) f[E_\nu(k_x)] \quad (3.17)$$

となる。固有ベクトル $u_{i_y s m, \nu}(k_x)$, $v_{i_y s m, \nu}$, 固有値 $E_\nu(k_x)$ はハミルトニアンを数値的に対角化することにより得られる。秩序変数を自己無撞着に決定し、得られた準安定状態の自由エネルギー

$$F = \frac{1}{2} \sum_{k_x, \nu} E_\nu(k_x) f[E_\nu(k_x)] + \frac{N_x}{V_s} \sum_{i_y, m} |\Delta_m^s(i_y)|^2 + \frac{1}{2} \sum_{k_x, s, \nu} f[sE_\nu(k_x)] \ln f[sE_\nu(k_x)] \quad (3.18)$$

を比較して、真に安定な状態を決定した。

図 3.3(a) に BdG 方程式を解いて決定した温度・磁場相図を示す。なお、数値計算の都合上、大きな引力相互作用を仮定しているが、 $E_F \gg \alpha \gg T_c$ の関係が成立している限り、結果は定性的に等しい。低磁場領域では秩序変数が空間的に一様な状態（以下 BCS 状態と呼ぶ）が安定であるが、高磁場領域では確かに複素ストライプ状態が安定となっていることが分かった。図 3.3(a) では、BCS 状態から複素ストライプ状態への相転移は BdG 方程式を $N = 120 \times 120$ のサイズで解き決定した。その結果、BCS 状態から複素ストライプ状態への相転移は一次相転移となったが、この結果には注意が必要である。なぜなら、計算に用いた系のサイズ $N = 120 \times 120$ は相転移の

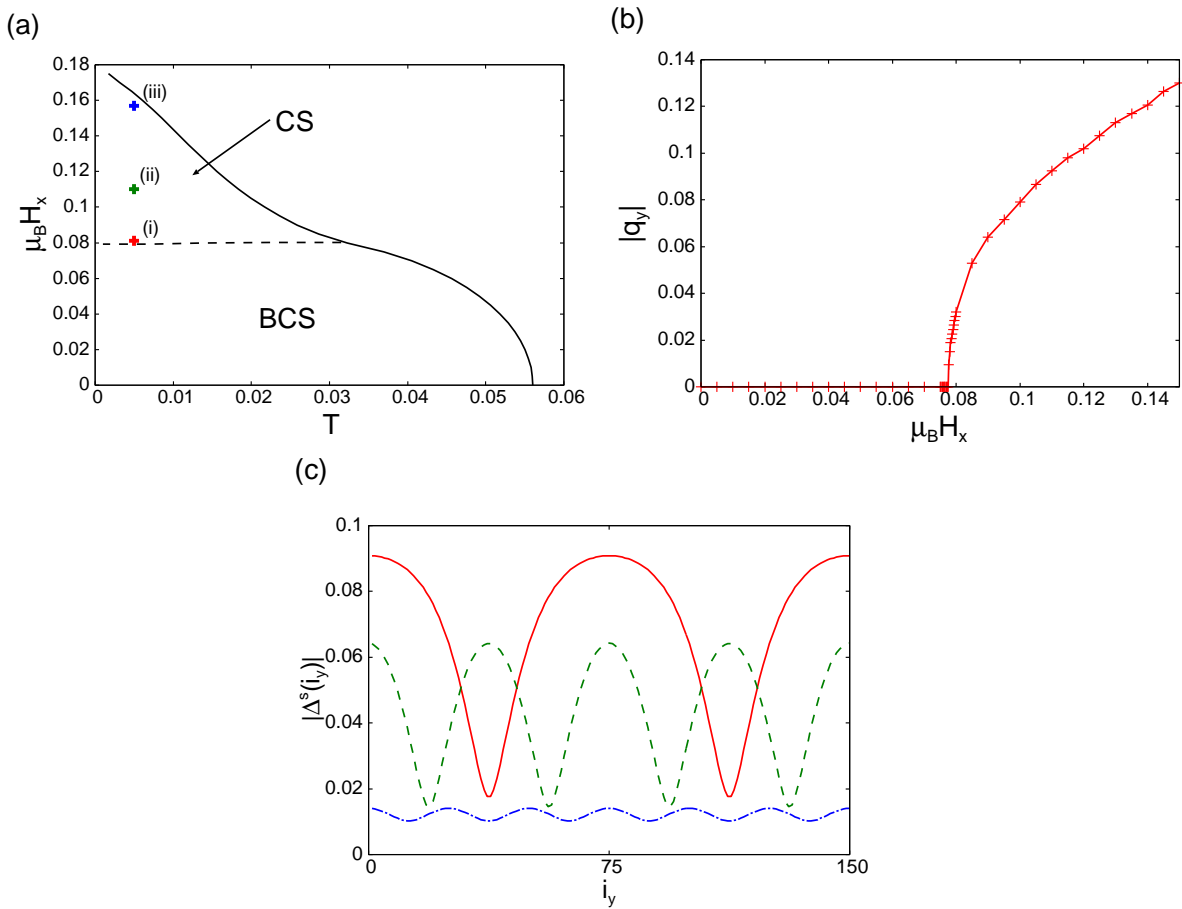


図 3.3 (a) 面内磁場中二層系 s 波超伝導体における温度・磁場相図。 $V_s = 2$, $\alpha = 0.3$ の結果である。点線は BCS 状態から複素ストライプ状態への二次相転移、実線は超伝導転移を表している。「BCS」は BCS 状態、「CS」は複素ストライプ状態を表している。点線は BdG 方程式を $N = 120 \times 120$ のサイズで解き決定し、実線は線形化ギャップ方程式を $N = 500 \times 500$ のサイズで解き決定した。(b) Cooper 対の重心運動量 q_y の磁場依存性。(c) 超伝導秩序変数の絶対値 $|\Delta^s(i_y)| = |\Delta_1^s(i_y)| = |\Delta_2^s(i_y)|$ の空間依存性。赤の実線が $(T, \mu_B H_x) = (0.005, 0.081)$ 、緑の点線が $(T, \mu_B H_x) = (0.005, 0.11)$ 、青の鎖線が $(T, \mu_B H_x) = (0.005, 0.16)$ での結果である。計算に用いた系のサイズは $N = 150 \times 150$ である。

次数を決定するには不十分だからである。BdG 方程式を解くためには莫大な計算コストが必要となるため、これ以上のサイズでの計算は困難である。そのため、線形化ギャップ方程式から相転移の次数を考察する。図 3.3(b) に Cooper 対の重心運動量 q_y の超伝導転移温度 $T_c(H_x)$ での振る舞いを示す。これは、線形化ギャップ方程式を $N = 500 \times 500$ のサイズで解き、最大の転移温度 $T_c(H_x, q_y)$ を持つ q_y をプロットしたものである。 q_y は BCS 状態 ($q_y = 0$) から複素ストライプ状態 ($q_y \neq 0$) へ転移するとき、0 から連続的に増大していることが見て取れる。そのため、実際には BCS 状態から複素ストライプ状態への相転移は二次相転移であると考えられる。

図 3.3(c) には超伝導秩序変数の絶対値 $|\Delta^s(i_y)| = |\Delta_1^s(i_y)| = |\Delta_2^s(i_y)|$ の空間依存性を示した。BCS 状態から複素ストライプ状態への相転移直上 [図 3.3(a) の点 (i)] では、秩序変数の振幅は大きく振動し、LO 状態に近い。温度を固定して磁場を増大させると、振動回数が増える。さらに磁場を印加していき、超伝導状態から正常状態への二次相転移近傍では、秩序変数の振幅はほぼ一定の値をとる。つまり、ヘリカル状態に近い振る舞いである。この様に、温度を固定して磁場を増加させることにより、LO 状態からヘリカル状態へのクロスオーバーが起こる。

複素ストライプ状態と同じ形の秩序変数で記述される状態が、実際には大局的な空間反転対称性が破れた超伝導体でも実現しうる (文献 [29] における Stripe 状態がそれに当たる)。しかし、Stripe 状態はスピン軌道相互作用が大きくなるにつれて不安定となる [29]。一方、図 3.2 に示したように、複素ストライプ状態はスピン軌道相互作用の増大とともに温度・磁場相図の広い領域を占めるようになる。

3.2.2 局所状態密度

複素ストライプ状態では、超伝導秩序変数が実空間で変調するため、局所状態密度にその特徴が現れると期待される。局所状態密度は STM により実験的に検証可能である。局所状態密度 $\rho_{i_y, m}(\omega)$ は次式で計算される。

$$\rho_m(i_y, \omega) = \frac{1}{N_x} \sum_{k_x, s, \nu} |u_{i_y s m, \nu}(k_x)|^2 \delta[\omega - E_\nu(k_x)] \quad (3.19)$$

デルタ関数 $\delta(\omega)$ は Lorentz 型

$$\delta(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\omega^2 + \varepsilon^2} \quad (3.20)$$

に近似し、無限小パラメーター $\varepsilon = 10^{-2}$ とした。系のサイズは $N = 1050 \times 1050$ とし、計算には Supercell の方法を用いた。Supercell の方法に関しては、付録 B を参照されたい。

BdG 方程式で得られた秩序変数を用いて計算された局所状態密度を示す前に、秩序変数の空間変化を仮定して、局所状態密度の変化を調べると今後の理解の助けになる。そのため、

$$\Delta_1^s(i_y) = \Delta_2^{s*}(i_y) = \Delta_{\max} [\exp(i2\pi i_y/N_y) + \delta \exp(-i2\pi i_y/N_y)] \quad (3.21)$$

と仮定したときの局所状態密度の計算結果を、図 3.4 に示す。 $\Delta_{\max} = 0.0909$ とし、ある磁場での

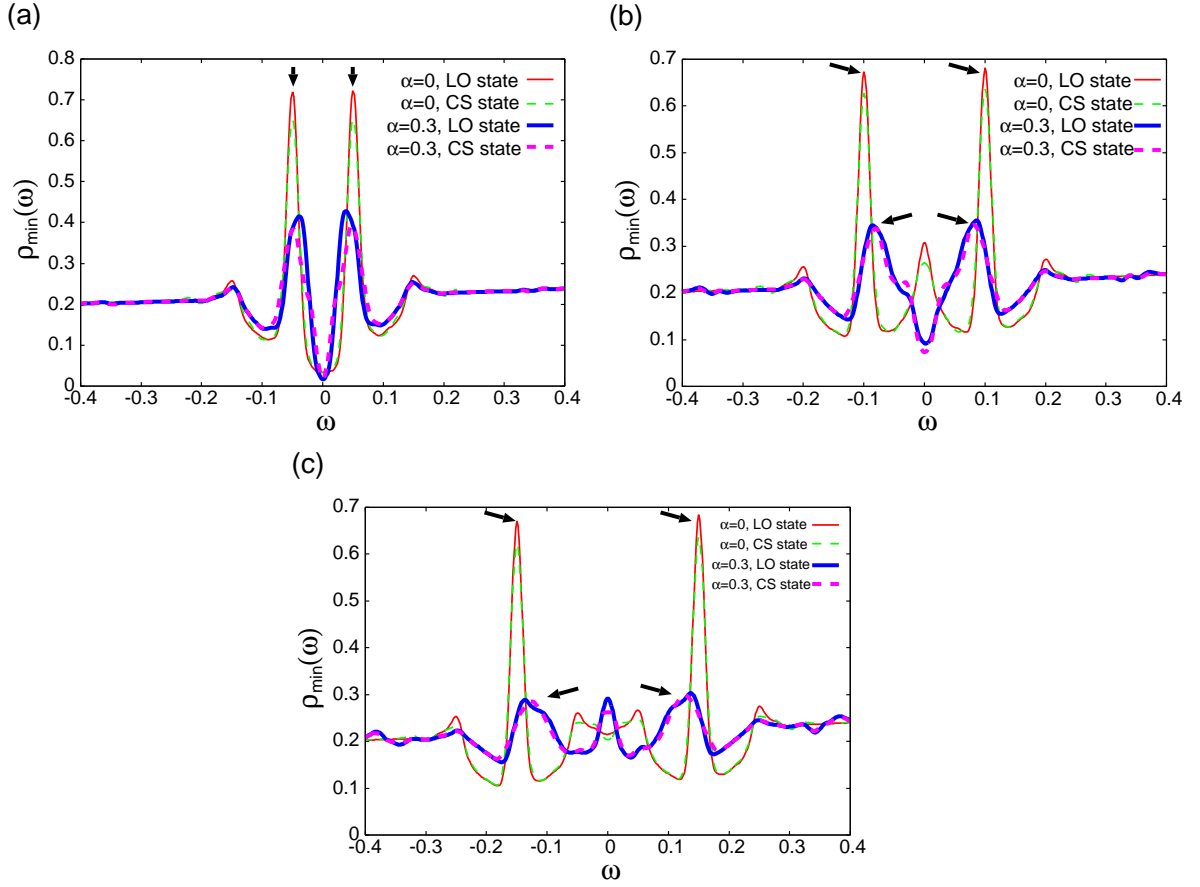


図 3.4 秩序変数を式 (3.21) で仮定した場合の局所状態密度。 $N_y = 150$ とし、 $i_y = 37$ の状態密度 $\rho_{\min}(\omega) = \rho_1(37, \omega) = \rho_2(37, \omega)$ を示した。実線が $\delta = 1$ の LO 状態、点線が $\delta = 0.7$ の LO 状態に近い複素ストライプ状態を仮定したときの結果を示している。細線が $\alpha = 0$ 、太線が $\alpha = 0.3$ の結果である。磁場の値は (a) $\mu_B H_x = 0.05$, (b) $\mu_B H_x = 0.1$, (c) $\mu_B H_x = 0.15$ である。

$\delta = 1$ (LO 状態) と $\delta = 0.7$ (LO 状態に近い複素ストライプ状態) の結果を示した。図 3.4 から明らかなように、LO 状態と複素ストライプ状態の局所状態密度はほぼ同じ値をとる。しかし、 $\alpha = 0$ の結果と $\alpha = 0.3$ の結果は大きく異なっている。 $\alpha = 0$ の場合、 $\omega = \pm\mu_B H_x$ のところに状態密度のピークが現れるが、これは超伝導秩序変数の節に局在する Andreev 束縛状態によるものである [69]。一方、 $\alpha = 0.3$ の場合、低磁場領域では $\omega \sim \pm\mu_B H_x$ にピークが現れてはいるが、 $\alpha = 0$ の場合と比べるとブロードになっている [図 3.4(a)]。磁場が増大するにつれて、このピークはさらに広がっていく [図 3.4(b), (c)]。つまり、スピン軌道相互作用と磁場により、Andreev 束縛状態は破壊される。

以上の議論を念頭に起き、図 3.5 に BdG 方程式を解いて決定した秩序変数を用いて計算された局所状態密度を示す。図 3.4 での議論と同様に、低磁場領域では局所状態密度にピークが見取れる [図 3.5(a)]。複素ストライプ状態では、超伝導秩序変数は節を持たないため、これは「擬」

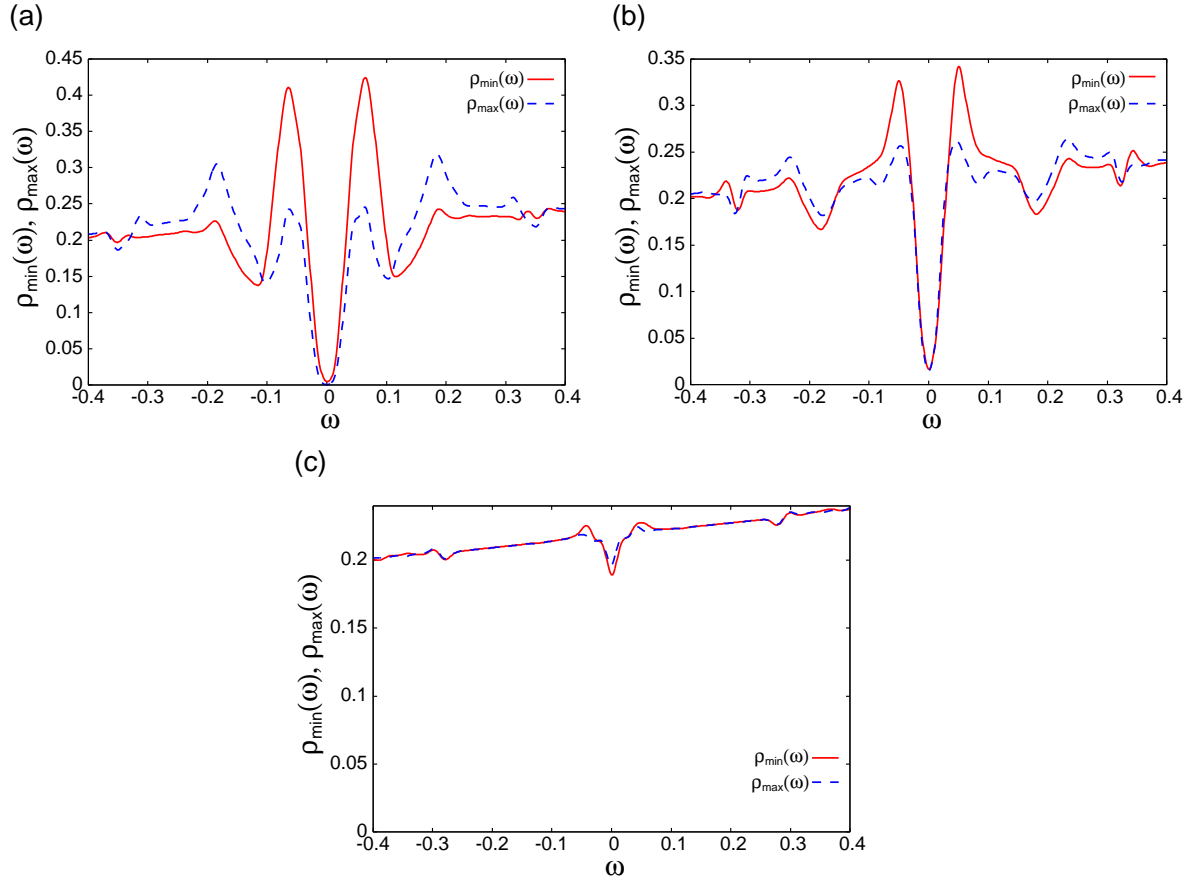


図 3.5 BdG 方程式から得られた秩序変数を用いて計算された局所状態密度。赤の実線が秩序変数の絶対値が最小となる点での状態密度 $\rho_{\min}(\omega)$ であり、青の点線が最大となる点での状態密度 $\rho_{\max}(\omega)$ を表している。層による違いはないので、インデックス m は落としてある。(a) $(T, \mu_B H_x) = (0.005, 0.081)$ [図 3.3(a) の点 (i)] (b) $(T, \mu_B H_x) = (0.005, 0.11)$ [図 3.3(a) の点 (ii)] (c) $(T, \mu_B H_x) = (0.005, 0.157)$ [図 3.3(a) の点 (iii)] での結果である。

Andreev 束縛状態に由来するものである。このピークは、前述したように磁場の増大とともにブロードとなる。LO 状態の場合、状態密度は常に $\omega = \pm \mu_B H_x$ にピークを持つため、局所状態密度の観測により複素ストライプ状態の同定が可能である。さらに磁場を印加し二次相転移近傍になると、秩序変数の空間変化がほぼ存在しないため、局所状態密度も空間的にほぼ一様となる [図 3.5(c)]。

3.3 三層系 s 波超伝導体

次に、三層系 s 波超伝導体について考える。三層系では、外側の二層は空間反転中心に位置しないため、スピン軌道相互作用が現れる。そのため、面内磁場中で外側の二層は複素ストライプ状態となる。一方内側の層は空間反転中心に位置するため、スピン軌道相互作用はゼロである。従っ

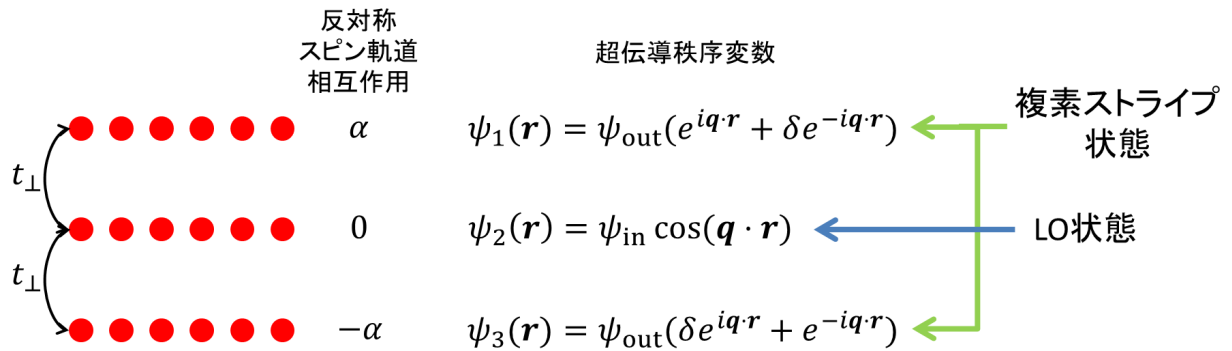


図 3.6 面内磁場中三層系スピン一重項超伝導体で期待される超伝導状態。

て、内側の層では複素ストライプ状態ではなく LO 状態となる (図 3.6)。

図 3.7(a) に BdG 方程式を解いて決定した温度・磁場相図を示す。温度・磁場相図は二層系の場合とほぼ等価である。ここでも、大きな引力相互作用を仮定しているが、 $E_F \gg \alpha \gg T_c$ の関係が成立している限り、結果は定性的に等しい。ここでも BCS 状態から複素ストライプ状態への相転移は一次相転移としたが、十分大きなサイズで計算すれば二次相転移になると考えられる。図 3.7(b) には BCS 状態から複素ストライプ状態への相転移近傍での超伝導秩序変数の空間依存性を示した。外側の層の秩序変数は大きく振動しているが、節を持たないため LO 状態に近い複素ストライプ状態が実現している。一方、内側の層では秩序変数は節を持つため、LO 状態となっている。図 3.7(b) では内側の層の秩序変数が節を持たない様に見えるが、これは計算に用いたサイズが $N = 150 \times 150$ であり、4 で割れないからである。4 で割れるサイズ (例えば、 $N = 120 \times 120$) で計算すると内側の層では $i_y = 30, 90$ で秩序変数の絶対値が 0 となる。磁場をさらに印加して二次転移近傍になると、外側の層の秩序変数はヘリカル相に近い振る舞いをする [図 3.7(c)] が、内側の層は依然として LO 状態のままである。内側の層の秩序変数が大きき抑制されているのは、内側の層の方が外側の層に比べ Pauli 対破壊効果の影響を受けやすいためである (文献 [54] 及び図 4.8 の議論参照)。

3.4 d 波超伝導体

これまで、面内磁場中の多層系 s 波超伝導体について議論してきた。前述した複素ストライプ状態の安定化のメカニズムは超伝導対称性に依存しないため、多層系 d 波超伝導体においても複素ストライプ状態が安定となると期待される。そのため、この章では面内磁場中の多層系 d 波超伝導について考える。

d 波超伝導体においても、磁場を x 方向に印加した場合秩序変数は y 方向にのみ変調する。その

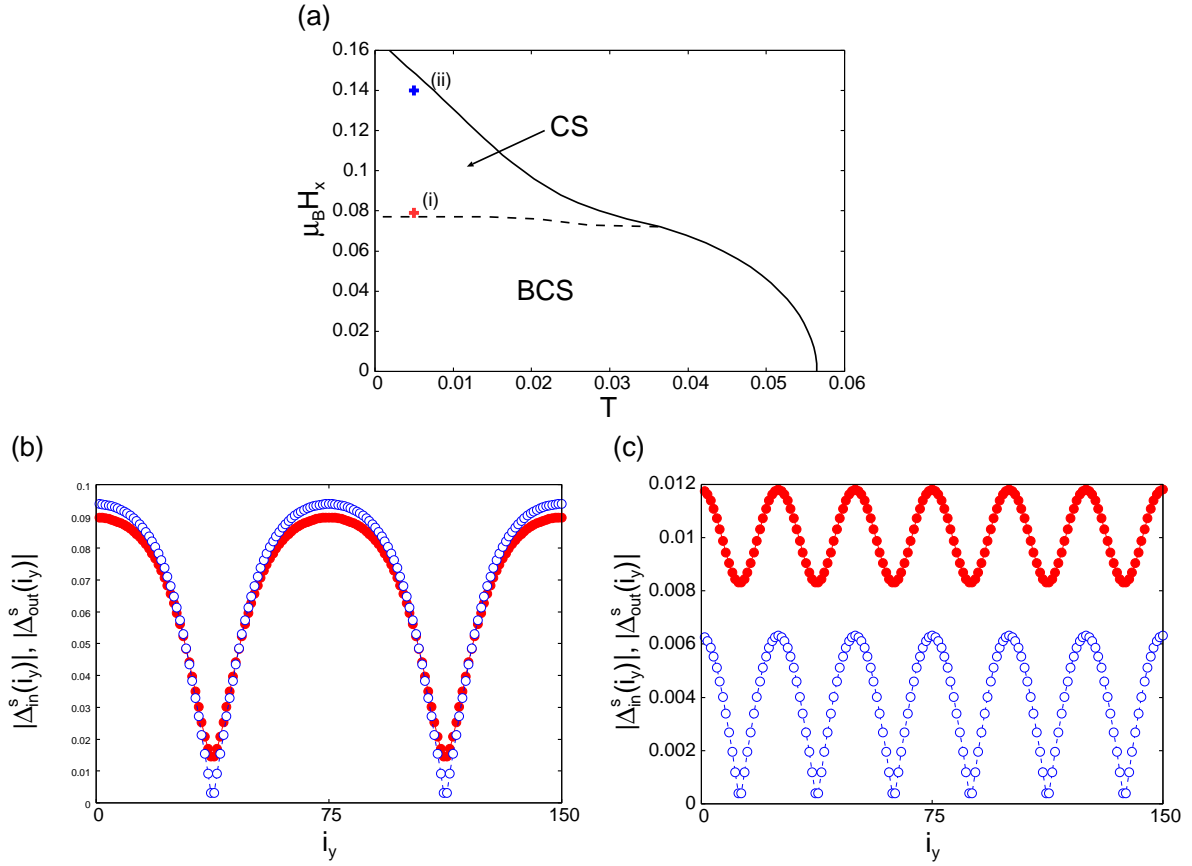


図 3.7 (a) 面内磁場中三層系 s 波超伝導体における温度・磁場相図。 $V_s = 2$, $\alpha = 0.3$ の結果である。点線は BCS 状態から複素ストライプ状態への二次相転移、実線は超伝導転移を表している。「BCS」は BCS 状態、「CS」は複素ストライプ状態を表している。点線は BdG 方程式を $N = 120 \times 120$ のサイズで解き決定し、実線は線形化ギャップ方程式を $N = 500 \times 500$ のサイズで解き決定した。(b) $(T, \mu_B H_x) = (0.005, 0.079)$ [図 3.7(a) の点 (i)] (c) $(T, \mu_B H_x) = (0.005, 0.14)$ [図 3.7(a) の点 (ii)] での超伝導秩序変数の絶対値 $|\Delta_{in}^s(i_y)| = |\Delta_2^s(i_y)|$, $|\Delta_{out}^s(i_y)| = |\Delta_1^s(i_y)| = |\Delta_3^s(i_y)|$ の空間依存性。赤丸が $|\Delta_{in}^s(i_y)|$ 、青丸が $|\Delta_{out}^s(i_y)|$ を表している。計算に用いた系のサイズは $N = 150 \times 150$ である。

ため、d 波超伝導のペアリング相互作用項を x 方向に Fourier 逆変換する。結果として、

$$\mathcal{H}_{\text{pair}}^{\text{MF,d}} = \sum_{k_x, i_y, m} \left\{ \Delta_m^d(i_y) \left[\cos k_x \delta_{i_y, j_y} - \frac{1}{2} (\delta_{i_y+1, j_y} + \delta_{i_y-1, j_y}) \right] c_{i_y \uparrow m}^\dagger(k_x) c_{i_y \downarrow m}^\dagger(-k_x) + \text{H.c.} \right\} + \frac{N_x}{V_d} \sum_{i_y, m} |\Delta_m^d(i_y)|^2 \quad (3.22)$$

を得る。後の計算は、s 波超伝導体で行った手順を繰り返せばよい。異なる点は、超伝導秩序変数

が s 波超伝導から d 波超伝導

$$\Delta^d = \begin{pmatrix} \Delta_1^d & 0 \\ 0 & \Delta_2^d \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

$$\Delta_m^d = \begin{bmatrix} \Delta_m^d(1) \cos k_x & \Delta_m^d(1)/2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \Delta_m^d(1)/2 \\ \Delta_m^d(2)/2 & \Delta_m^d(2) \cos k_x & \Delta_m^d(2)/2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \Delta_m^d(3)/2 & \Delta_m^d(3) \cos k_x & \Delta_m^d(3)/2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \Delta_m^d(N_y)/2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \Delta_m^d(N_y)/2 & \Delta_m^d(N_y) \cos k_x \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

に変わる点である。BdG 方程式は、

$$\Delta_m^d(i_y) = -\frac{V_d}{N_x} \sum_{k_x, j_y \nu} \left[\cos k_x \delta_{i_y, j_y} - \frac{1}{2} (\delta_{j_y+1, i_y} + \delta_{j_y-1, i_y}) \right] \times v_{j_y \downarrow m, \nu}^*(-k_x) u_{i_y \uparrow m, \nu}(k_x) f[E_\nu(k_x)] \quad (3.25)$$

となる。

超伝導転移を決定するのに用いた線形化ギャップ方程式は、式 (3.3) において

$$B_m^\dagger(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} (\cos k_x - \cos k_y) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q} \uparrow m}^\dagger c_{-\mathbf{k} \downarrow m}^\dagger \quad (3.26)$$

とし、超伝導転移温度は

$$1_{M \times M} - V_d \chi^{(0)}(\mathbf{q}, 0) = 0 \quad (3.27)$$

を満たす点である。

3.4.1 二層系

図 3.8(a) に線形化ギャップ方程式及び BdG 方程式を解いて決定した温度・磁場相図を示す。ここでも、大きな引力相互作用を仮定しているが、 $E_F \gg \alpha \gg T_c$ の関係が成立している限り、結果は定性的に等しい。若干複素ストライプ状態が安定な領域が s 波超伝導体と比べると広いが、定性的には s 波超伝導体と d 波超伝導体の結果は等しい。図 3.8(b) には秩序変数の空間依存性を示した。低温低磁場領域では秩序変数の絶対値は振動しているが、s 波超伝導の場合と比較して振動幅が小さくなっている。これは d 波超伝導の特徴である。一方、上部臨界磁場近傍ではほぼ一定となっている。秩序変数のこのような振る舞いも、s 波超伝導の結果と定性的に等しい。

3.4.2 三層系

この章の最後に、三層系 d 波超伝導体の結果を図 3.9 示す。 $E_F \gg \alpha \gg T_c$ の関係が成立している限り、結果は定性的に等しい。三層系 s 波超伝導体と比べ、三層系 d 波超伝導体において、複素ストライプ状態が相図の広い領域で安定となる [図 3.9(a)]。低温低磁場領域において、外側の層の秩序変数は LO 状態であり、内側の層では複素ストライプ状態の振る舞いを示す [図 3.9(b)]。内側の層の秩序変数の振幅は、s 波超伝導体と比べ小さくなっている。

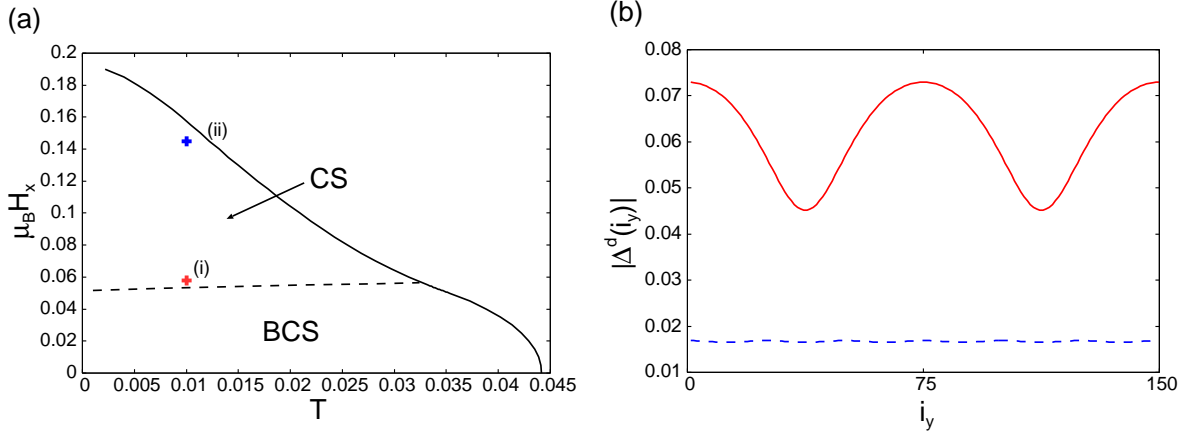


図 3.8 (a) 面内磁場中二層系 d 波超伝導体における温度・磁場相図。 $V_d = 2.4$, $\alpha = 0.3$ の結果である。点線は BCS 状態から複素ストライプ状態への二次相転移、実線は超伝導転移を表している。「BCS」は BCS 状態、「CS」は複素ストライプ状態を表している。点線は BdG 方程式を $N = 120 \times 120$ のサイズで解き決定し、実線は線形化ギャップ方程式を $N = 500 \times 500$ のサイズで解き決定した。(b) 超伝導秩序変数の絶対値 $|\Delta^d(i_y)| = |\Delta_1^d(i_y)| = |\Delta_2^d(i_y)|$ の空間依存性。赤の実線が $(T, \mu_B H) = (0.01, 0.058)$ [図 3.8(a) における点 (i)]、青の点線が $(T, \mu_B H) = (0.01, 0.145)$ [図 3.8(a) における点 (ii)] での結果である。

3.5 まとめ

この章では、面内磁場中の多層系 s 波及び d 波超伝導体で実現する新奇超伝導状態について議論した。得られた結果は、s 波超伝導体、d 波超伝導体どちらも定性的には等しく、高磁場領域で複素ストライプ状態が安定となった。

ここで、複素ストライプ状態の特徴についてまとめる。図 3.2 に示したように、複素ストライプ状態は温度・磁場相図の広い領域を占める。これは、LO 状態が温度・磁場相図の非常に狭い領域でしか安定とならない [70] こととは対照的である。また、ヘリカル状態と複素ストライプ状態は、実験的に観測可能かという視点で考えると、決定的に異なっている。空間反転対称性が破れた超伝導体で実現するヘリカル状態は、実は渦糸状態と区別することができないことが分かっている [30]。これは、Cooper 対の重心運動量 \mathbf{q} がゲージ不変な量ではないからである。一方、複素ストライプ状態に現れる Cooper 対の重心運動量 \mathbf{q} は秩序変数の絶対値（これはゲージ不変な量である）

$$|\psi(\mathbf{r})| = |\psi_0| [1 + 2\delta \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) + \delta^2]^{\frac{1}{2}} \quad (3.28)$$

に現れるため、実験的に観測可能である。実際、複素ストライプ状態の特徴が局所状態密度に現れることを示した。STM による局所状態密度の観測により複素ストライプ状態を検出できると考えられる。

本論文では、磁場の効果として Pauli 対破壊効果のみを考慮している。これは、大きな Maki パ

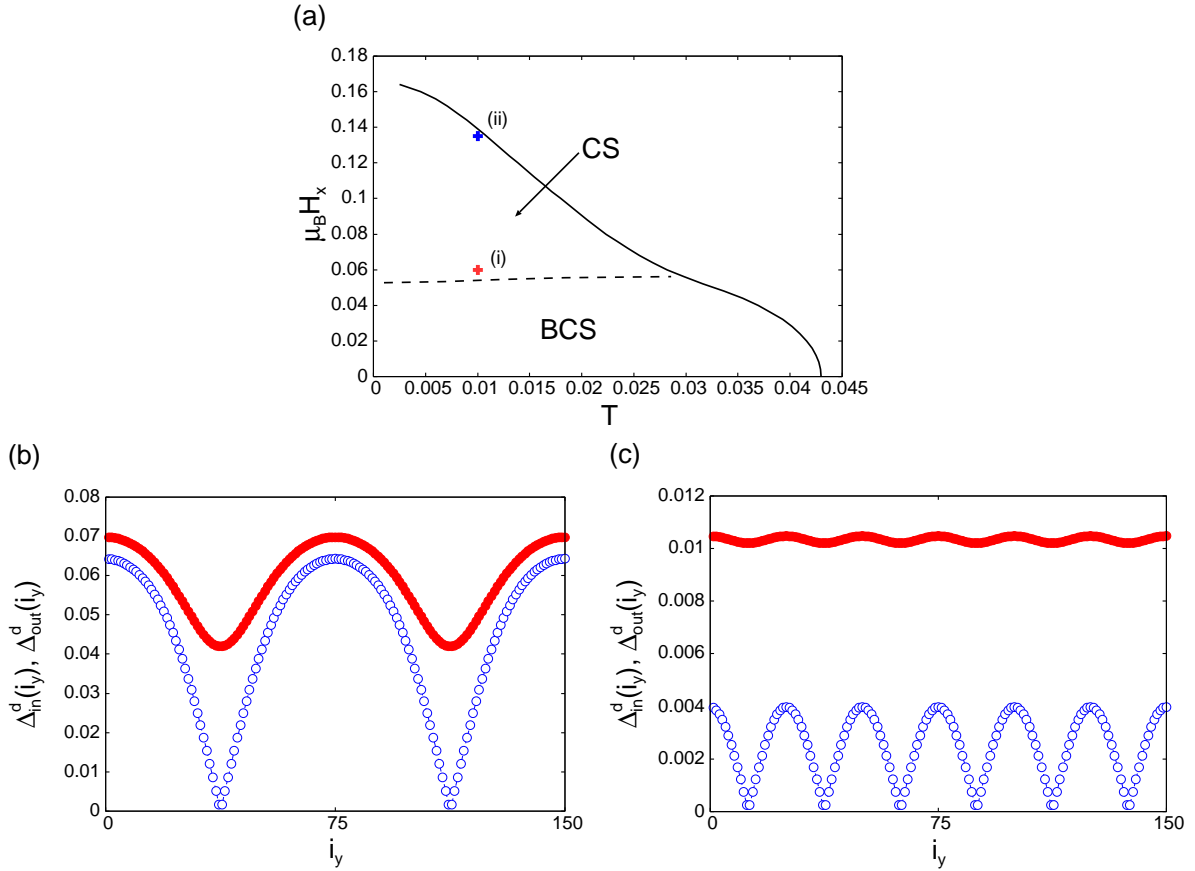


図 3.9 (a) 面内磁場中三層系 d 波超伝導体における温度・磁場相図。 $V_d = 2.4$, $\alpha = 0.3$ の結果である。点線は BCS 状態から複素ストライプ状態への二次相転移、実線は超伝導転移を表している。「BCS」は BCS 状態、「CS」は複素ストライプ状態を表している。点線は BdG 方程式を $N = 120 \times 120$ のサイズで解き決定し、実線は線形化ギャップ方程式を $N = 500 \times 500$ のサイズで解き決定した。(b), (c) 超伝導秩序変数の絶対値 $|\Delta_{out}^d(i_y)| = |\Delta_1^d(i_y)| = |\Delta_3^d(i_y)|$ (赤丸) と $|\Delta_{in}^d(i_y)| = |\Delta_2^d(i_y)|$ (青丸) の空間依存性。(b) $(T, \mu_B H_x) = (0.01, 0.06)$ [図 3.9(a) における点 (i)]、(c) $(T, \mu_B H_x) = (0.01, 0.135)$ [図 3.9(a) における点 (ii)] での結果である。

ラメーターを持つ超伝導体に対して正当化される近似である。仮に軌道対破壊効果を考慮した場合、それは層の間に渦糸が侵入する Josephson 渦を生み出す。Josephson 渦も複素ストライプ状態と同様の秩序変数を与えるが、その変調スケール l_J は、 $l_J \sim \xi_{ab} H_{c2}^{orb} / H_x$ (ξ_{ab} は面内のコヒーレンス長、 H_{c2}^{orb} 軌道対破壊効果のみを考慮した場合の上部臨界磁場) 程度である。大きな Maki パラメーターを持つ超伝導体では $H_{c2}^{orb} \gg H_x$ であるため、 l_J は複素ストライプ状態の変調スケール $l_{CS} \sim \xi_{ab}$ に比べ非常に長い。そのため、Josephson 渦と複素ストライプ状態は定量的に区別することができる。一方、層の間隔を広げていくと軌道対破壊効果が無視できなくなってくる。複素ストライプ状態と渦糸状態が競合する場合、次章で議論するペア密度波状態が安定となることが最近 Watanabe 等により示されている [71]。

4 面直磁場の場合～ペア密度波相～

この章では、伝導面に垂直な磁場中で実現するペア密度波状態について述べる。まず初めに、超伝導秩序変数の層依存性について考察し、ペア密度波状態の安定性について定性的に議論する。その後、二層系 s 波及び三層系 s 波超伝導体における計算結果について紹介する。面直磁場中では、スピン軌道相互作用により誘起されるスピン三重項成分は定量的にも定性的にも重要な役割を果たすため、S+p 波超伝導体の結果について述べる。その後、d 波超伝導体、D+p 波超伝導体に対する計算結果を示す。

4.1 序論～ペア密度波相のメカニズム～

二層系超伝導体を例にとって、ゼロ磁場中での超伝導秩序変数の層依存性について考察してみる。文献 [60] に対称性による分類がなされているが、ここではより直感的な議論を行う。初めに、層間遷移 t_{\perp} が 0 の極限を考えてみる。この場合、各層はそれぞれ空間反転対称性が破れた二次元超伝導体とみなすことができる。注意すべき点は、反対称スピン軌道相互作用の符号が層間で異なる点である。今考えるべきことは、各層におけるスピン一重項超伝導とスピン三重項超伝導の相対位相 ϕ である。第 1 章で示したように、これは 0 か π をとる。また、例えば $\alpha > 0$ の時 $\phi = 0$ であったならば、 $\alpha < 0$ の場合は $\phi = \pi$ となる。そのため、例えば上層において秩序変数が $\Delta_1 = i[\psi(\mathbf{k})\sigma_0 + d(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]_{\sigma_y}$ で記述されたとき、下層では $\Delta_2 = i[\psi(\mathbf{k})\sigma_0 - d(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]_{\sigma_y}$ が最も安定な状態となる。そして、各層は独立しているため、秩序変数の層間の位相差 θ は自由な値をとることができる。結果として、 $t_{\perp} = 0$ の場合、図 4.1(a) に示した層依存性を示すことになる。

次に、 $t_{\perp} \neq 0$ の場合を考える。この場合、層間の Josephson 結合により、超伝導秩序変数の支配的な成分を層間で揃えた状態が安定な状態となる。つまり、スピン一重項超伝導が支配的な場合、図 4.1(b) に示した構造となり、スピン三重項超伝導が支配的な場合は、図 4.1(c) のような層依存性となる。

同様の議論は、三層系超伝導体についても行うことが可能である。 $t_{\perp} = 0$ の場合、外側の層は二層系と同様に取り扱うことができる。一方、内側の層は、空間反転中心に位置するため、スピン一重項超伝導と三重項超伝導の混成が起こらない。そのため、スピン一重項超伝導、スピン三重項超伝導のうち、支配的な成分のみが内側の層で現れる [図 4.2(a)]。層間遷移が有限の場合は、二層系と同様に層間の Josephson 結合により、支配的な超伝導成分が層間で位相を揃えることになる。つまり、スピン一重項超伝導が支配的な場合、 $\theta_1 = \theta_2 = 0$ であり [図 4.2(b)]、スピン三重項超伝導が支配的な場合は $\theta_1 = 0, \theta_2 = \pi$ となる [図 4.2(c)]。

ここまでの議論から、CeCoIn₅ 人工超格子のようにスピン一重項超伝導が支配的な場合、図 4.1(b)、4.2(b) に示した超伝導状態が安定になると予想される。しかし、面に垂直な磁場中では事情は異なってくる。次に、磁場中での超伝導状態の安定性について考察する。

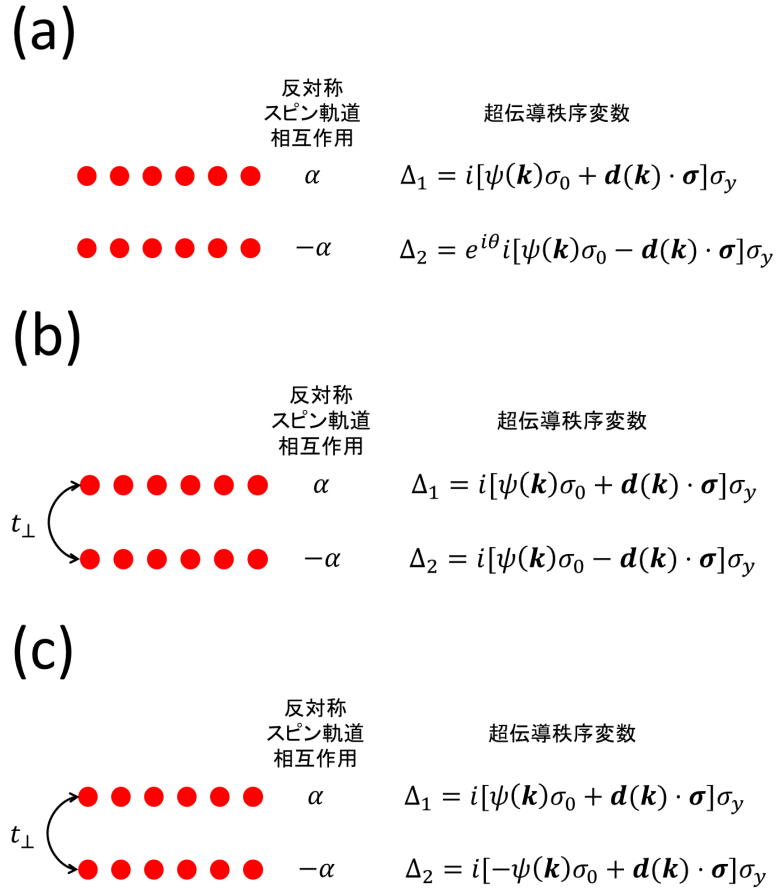


図 4.1 二層系超伝導体における超伝導秩序変数の層依存性。(a) $t_\perp = 0$ の場合。(b)、(c) $t_\perp \neq 0$ の場合。(b) はスピン一重項成分が支配的な場合で、(c) はスピン三重項成分が支配的な場合である。

磁場中では、超伝導体の凝縮エネルギーに次の項が加わることとなる。

$$\begin{aligned} \Delta F_H &= - \int_0^H dH' [M_n(H') - M_s(H')] \\ &= - \int_0^H dH' [\chi_n(H') - \chi_s(H')] H' \end{aligned} \quad (4.1)$$

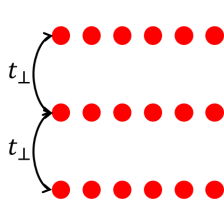
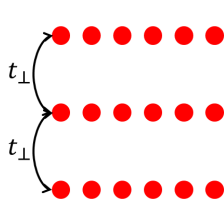
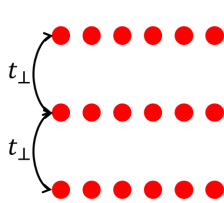
ここで、 $M_n(H)[\chi_n(H)]$, $M_s(H)[\chi_s(H)]$ は正常状態、超伝導状態における磁化 (スピン感受率) である。式 (4.1) から明らかなように、正常状態と超伝導状態のスピン感受率の差が小さいほど、凝縮エネルギーの減少が小さい。

局所的な空間反転対称性が欠如した多層系超伝導体におけるスピン感受率は、Maruyama らによって計算されている。既に図 1.10 にその結果を紹介した。スピン一重項超伝導が支配的な場合 [図 4.1(b)] χ_s/χ_n はスピン軌道相互作用の大きさにより 0 から 1 の間の値をとる。一方、スピン三重項超伝導が支配的な場合 [図 4.1(c)] χ_s/χ_n はスピン軌道相互作用の大きさに依存せず 1 をとる。

(a)

反対称 スピン軌道 相互作用	超伝導秩序変数: スピン一重項超伝導が 支配的な場合	超伝導秩序変数: スピン三重項超伝導が 支配的な場合
● ● ● ● ● ● α	$\Delta_1 = i[\psi_{\text{out}}(\mathbf{k})\sigma_0 + \mathbf{d}_{\text{out}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y$	$\Delta_1 = i[\psi_{\text{out}}(\mathbf{k})\sigma_0 + \mathbf{d}_{\text{out}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y$
● ● ● ● ● ● 0	$\Delta_2 = e^{i\theta_1} i\psi_{\text{in}}(\mathbf{k})\sigma_y$	$\Delta_2 = e^{i\theta_1} i\mathbf{d}_{\text{in}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}\sigma_y$
● ● ● ● ● ● $-\alpha$	$\Delta_3 = e^{i\theta_2} i[\psi_{\text{out}}(\mathbf{k})\sigma_0 - \mathbf{d}_{\text{out}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y$	$\Delta_3 = e^{i\theta_2} i[\psi_{\text{out}}(\mathbf{k})\sigma_0 - \mathbf{d}_{\text{out}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y$

(b)

反対称 スピン軌道 相互作用	超伝導秩序変数
t_{\perp}  α	$\Delta_1 = i[\psi_{\text{out}}(\mathbf{k})\sigma_0 + \mathbf{d}_{\text{out}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y$
t_{\perp}  0	$\Delta_2 = i\psi_{\text{in}}(\mathbf{k})\sigma_y$
t_{\perp}  $-\alpha$	$\Delta_3 = i[\psi_{\text{out}}(\mathbf{k})\sigma_0 - \mathbf{d}_{\text{out}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y$

(c)

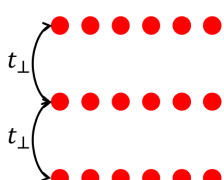
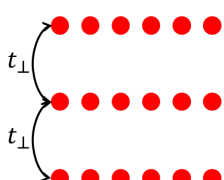
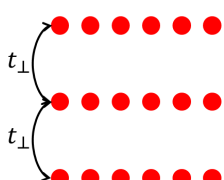
反対称 スピン軌道 相互作用	超伝導秩序変数
t_{\perp}  α	$\Delta_1 = i[\psi_{\text{out}}(\mathbf{k})\sigma_0 + \mathbf{d}_{\text{out}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y$
t_{\perp}  0	$\Delta_2 = i\mathbf{d}_{\text{in}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}\sigma_y$
t_{\perp}  $-\alpha$	$\Delta_3 = i[-\psi_{\text{out}}(\mathbf{k})\sigma_0 + \mathbf{d}_{\text{out}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y$

図 4.2 三層系超伝導体における超伝導秩序変数の層依存性。(a) $t_{\perp} = 0$ の場合。(b)、(c) $t_{\perp} \neq 0$ の場合。(b) はスピン一重項成分が支配的な場合、(c) はスピン三重項成分が支配的な場合である。

本論文で注目する局所的な空間反転対称性の破れが顕在化するパラメーター領域 $\alpha \sim t_{\perp}$ において、スピン一重項超伝導が支配的な場合は $\chi_s < \chi_n$ となるため磁場により超伝導が破壊されるが、スピン三重項超伝導が支配的な場合は $\chi_s = \chi_n$ となるため磁場により超伝導は全く破壊されない。ここで重要な点は、この結果がスピン一重項超伝導とスピン三重項超伝導の混成度合いによらず、超伝導秩序変数の層依存性で決まっている点である [54]。よって、スピン一重項超伝導が支配的な場合、ゼロ磁場では図 4.1(b) に示した状態が安定となるが、磁場中では図 4.1(c) に示した状態が実現すると期待される。後者の状態は、スピン一重項超伝導に注目すると秩序変数が原子スケールで変調しているようにみなすことができる。その様な超伝導状態はペア密度波状態と呼ばれてい

る [72, 73]。ペア密度波状態は、元々バルクの CeCoIn_5 の低温・高磁場相 [74, 75] を説明するために考えられた状態である。しかし、これは対称性の議論から導入されたものであり、その微視的起源はいまだ確立していない。一方、局所的な空間反転対称性が破れた多層系超伝導体では、前述したメカニズムによりペア密度波状態が安定になると期待される。今後、図 4.1(c) の状態をペア密度波状態、図 4.1(b) の状態を BCS 状態（第 3 章の BCS 状態と等価である）と呼ぶことにする。

以下では、面直磁場中における超伝導相図の計算結果とペア密度波状態の安定性について議論する。まず s 波対称性の結果を紹介する。その後 d 波対称性の場合も同様の結果が得られることを示す。

4.2 二層系 s 波超伝導体

この節では、二層系 s 波超伝導体の結果を示す。この節を通して、 $V_s = 1.7$, $V_p = 0$ とする。

4.2.1 温度・磁場相図

線形化ギャップ方程式及びギャップ方程式を解いて得られた温度・磁場相図を図 4.3 に示す。まず初めに、スピン軌道相互作用が 0 の場合の結果について述べる。この場合、BCS 状態のみが実現し、Pauli 極限のよく知られた相図 [4] が得られた。予想に反して、磁場中においてペア密度波状態は安定とならない。この理由は、超伝導秩序変数をバンド表示すれば理解することができる。超伝導秩序変数のバンド表示は、正常状態におけるハミルトニアン $\mathcal{H}_0(\mathbf{k})$ を対角化するユニタリー行列 $U_0(\mathbf{k})$ で BdG ハミルトニアンをユニタリー変換することにより得られる。その結果、 $H = 0$ の時

$$U_0^\dagger(\mathbf{k})\mathcal{H}(\mathbf{k})U_0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} E_+ & 0 & 0 & 0 & \Delta_{\text{band1}} & 0 & \Delta_{\text{band13}} & 0 \\ 0 & E_+ & 0 & 0 & 0 & \Delta_{\text{band2}} & 0 & \Delta_{\text{band24}} \\ 0 & 0 & E_- & 0 & \Delta_{\text{band31}} & 0 & \Delta_{\text{band3}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_- & 0 & \Delta_{\text{band42}} & 0 & \Delta_{\text{band4}} \\ \Delta_{\text{band1}}^* & 0 & \Delta_{\text{band31}}^* & 0 & -E_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{\text{band2}}^* & 0 & \Delta_{\text{band42}}^* & 0 & -E_+ & 0 & 0 \\ \Delta_{\text{band13}}^* & 0 & \Delta_{\text{band3}}^* & 0 & 0 & 0 & -E_- & 0 \\ 0 & \Delta_{\text{band24}}^* & 0 & \Delta_{\text{band4}}^* & 0 & 0 & 0 & -E_- \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

が得られる [54]。ここで $E_\pm(\mathbf{k}) = \xi(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\alpha^2|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 + t_\perp^2}$ である。 Δ_{band1} , Δ_{band2} , Δ_{band3} , Δ_{band4} がバンド内での Cooper 対に対応し、 Δ_{band13} , Δ_{band24} , Δ_{band31} , Δ_{band42} がバンド間の

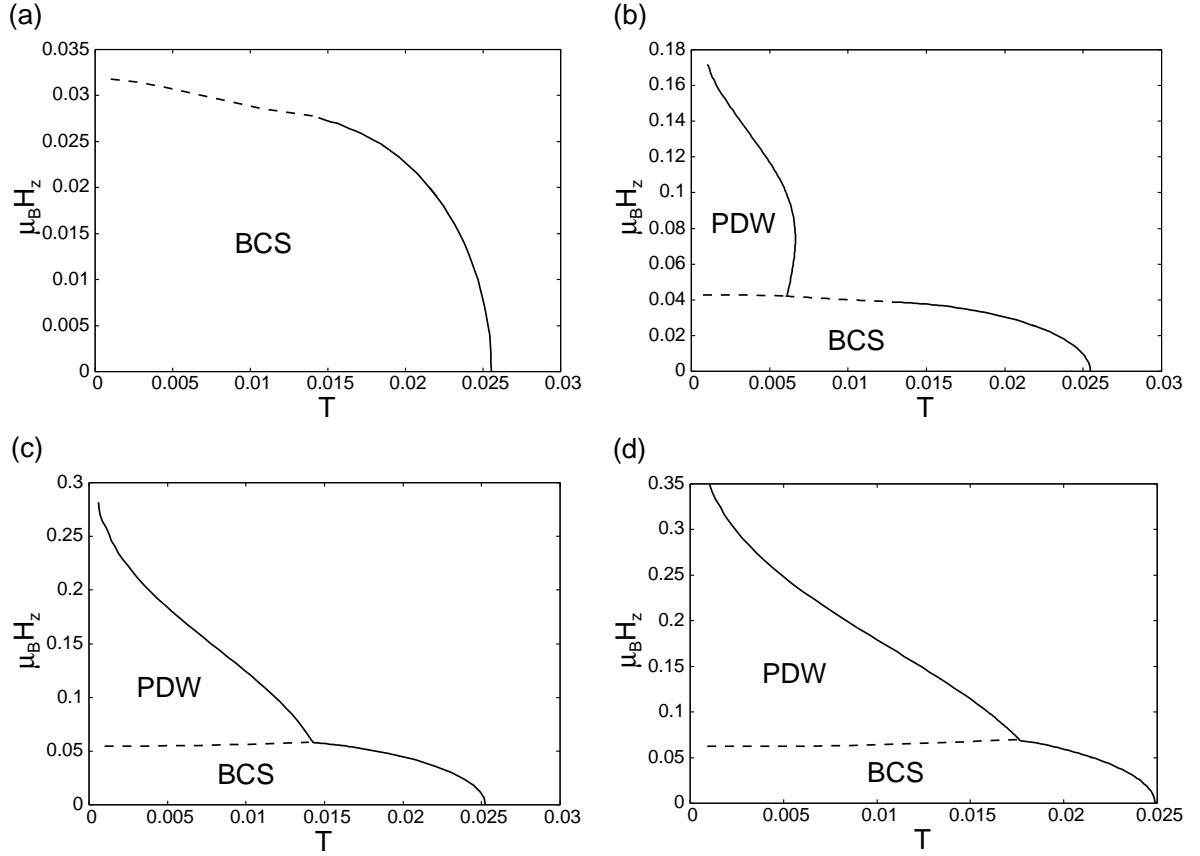


図 4.3 二層系 s 波超伝導体の面直磁場中超伝導相図。(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = 0.1$ (c) $\alpha = 0.2$ (d) $\alpha = 0.3$ の結果である。点線は一次相転移、実線は二次相転移を表している。「BCS」は BCS 状態、「PDW」はペア密度波状態を表している。

Cooper 対を示している。バンド内の秩序変数は、BCS 状態では

$$\Delta_{\text{band1}}(\mathbf{k}) = \Delta^s + \frac{\alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})|}{\sqrt{\alpha^2|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 + t_{\perp}^2}} \Delta^p |\mathbf{g}(\mathbf{k})| \quad (4.3)$$

$$\Delta_{\text{band2}}(\mathbf{k}) = -\Delta_{\text{band1}}(\mathbf{k}) \quad (4.4)$$

$$\Delta_{\text{band3}}(\mathbf{k}) = \Delta^s - \frac{\alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})|}{\sqrt{\alpha^2|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 + t_{\perp}^2}} \Delta^p |\mathbf{g}(\mathbf{k})| \quad (4.5)$$

$$\Delta_{\text{band4}}(\mathbf{k}) = -\Delta_{\text{band3}}(\mathbf{k}) \quad (4.6)$$

であり、ペア密度波状態では

$$\Delta_{\text{band1}}(\mathbf{k}) = \Delta^p |\mathbf{g}(\mathbf{k})| + \frac{\alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})|}{\sqrt{\alpha^2|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 + t_{\perp}^2}} \Delta^s \quad (4.7)$$

$$\Delta_{\text{band2}}(\mathbf{k}) = \Delta_{\text{band1}}(\mathbf{k}) \quad (4.8)$$

$$\Delta_{\text{band3}}(\mathbf{k}) = \Delta^p |\mathbf{g}(\mathbf{k})| - \frac{\alpha|\mathbf{g}(\mathbf{k})|}{\sqrt{\alpha^2|\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 + t_{\perp}^2}} \Delta^s \quad (4.9)$$

$$\Delta_{\text{band4}}(\mathbf{k}) = \Delta_{\text{band3}}(\mathbf{k}) \quad (4.10)$$

となる。ここで、 $d(\mathbf{k}) = \Delta^p g(\mathbf{k})$ を仮定した。 $\alpha = 0$ の場合、バンド内 Cooper 対は、BCS 状態においてはスピン一重項超伝導成分、ペア密度波状態においてはスピン三重項超伝導成分で記述される。しかし、本論文で考えているスピン一重項超伝導が支配的な場合において、 $\alpha = 0$ で存在する超伝導状態はスピン一重項超伝導のみである。そのため、 $\alpha = 0$ では、ペア密度波状態におけるバンド内 Cooper 対は存在しない。ゆえに、ペア密度波状態はバンド間 Cooper 対により記述されるが、一般にバンド間の Cooper 対は超伝導を安定化しない。結果として、 $\alpha = 0$ においてペア密度波状態は安定とならない。

一度スピン軌道相互作用が有限になったならば、ペア密度波状態はバンド内 Cooper 対により誘起される。前述したように、磁場中ではペア密度波状態の方が BCS 状態よりも安定である。したがって、磁場を印加すると BCS 状態からペア密度波状態へ相転移する [図 4.3(b), (c), (d) を参照]。BCS 状態からペア密度波状態への相転移は、秩序変数の層間位相が 0 から π に不連続に飛ぶため、一次相転移である。スピン軌道相互作用の大きさが大きくなるにつれ、ペア密度波状態は相図の広い領域を占めるようになる。

ペア密度波状態は BCS 状態に比べ磁場中でエネルギー的に得をするため、BCS 状態よりも大きな磁化を持つと予想される。各層での磁化の z 成分 M_z^m は

$$M_z^m = \mu_B \sum_{\mathbf{k}} [\langle c_{\mathbf{k}\uparrow m}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow m} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}\downarrow m}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow m} \rangle] \quad (4.11)$$

で計算される。計算結果を図 4.4 に示す。ペア密度波状態の磁化は BCS 状態の磁化に比べ大きな値を持つことが分かる。ペア密度波状態が磁場中でエネルギー的に得をすることが確かめられた。

4.2.2 状態密度

ペア密度波状態では、Pauli 対破壊効果が抑制されるため、超伝導ギャップにその特徴が現れると期待される。この章では、各層の状態密度の計算結果を紹介する。各層の状態密度 $\rho_m(\omega)$ は

$$\rho_m(\omega) = \sum_{\mathbf{k}, s, \nu} |u_{sm, \nu}(\mathbf{k})|^2 \delta[\omega - E_\nu(\mathbf{k})] \quad (4.12)$$

で計算される。デルタ関数は式 (3.20) のような Lorentz 型に近似して計算した。無限小パラメータ ε は $\varepsilon = 10^{-4}$ とし、 $N = 700 \times 700$ で決定した秩序変数を用いて、 $N = 30000 \times 30000$ のサイズで状態密度の計算を行った。

図 4.5 にある磁場での状態密度の計算結果を示す。ゼロ磁場 BCS 状態ではよく知られた s 波の超伝導ギャップが Fermi 面に開いている。磁場を印加すると Pauli 対破壊効果により超伝導ギャップは小さくなるが、さらに磁場を印加してペア密度波状態に相転移すると、再び大きな超伝導ギャップが開く。 $\mu_B H_z = 0.075$ では BCS 状態、ペア密度波状態どちらの解も得られたが、秩序変数の絶対値は前者の方が大きい。それにもかかわらず大きな超伝導ギャップがペア密度波状態で開くのは、ペア密度波状態で Pauli 対破壊効果が抑制されていることの帰結である。まとめると、BCS 状態からペア密度波状態へ相転移すると状態密度に大きな超伝導ギャップが開く。この振る舞いは STM により観測可能である。

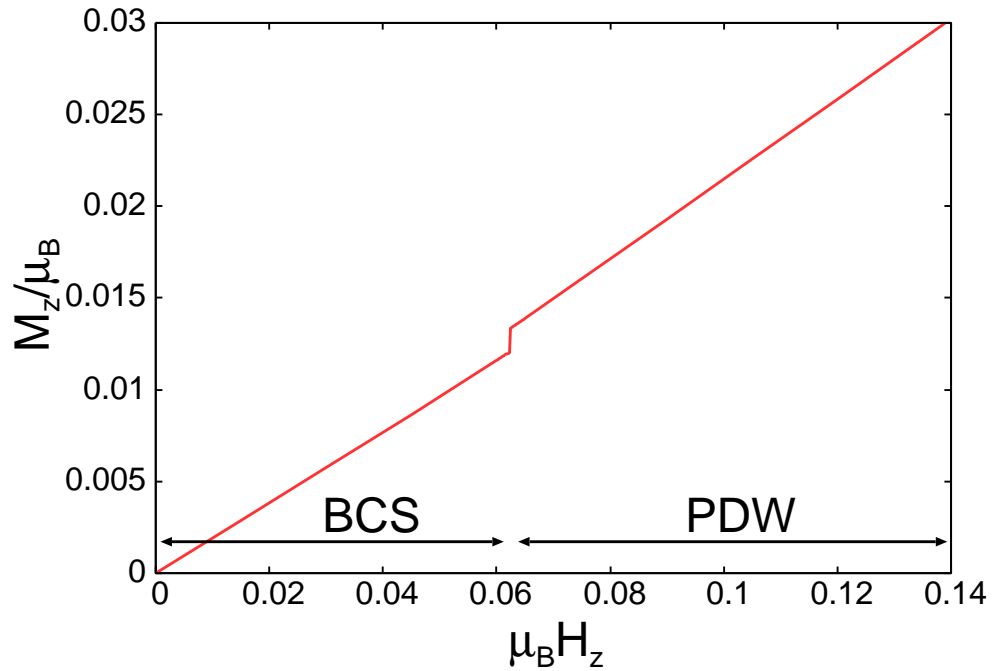


図 4.4 二層系 s 波超伝導体における磁化の z 成分 $M_z = M_z^1 = M_z^2$ の磁場依存性。 $T = 0.002$, $\alpha = 0.3$ の計算結果である。

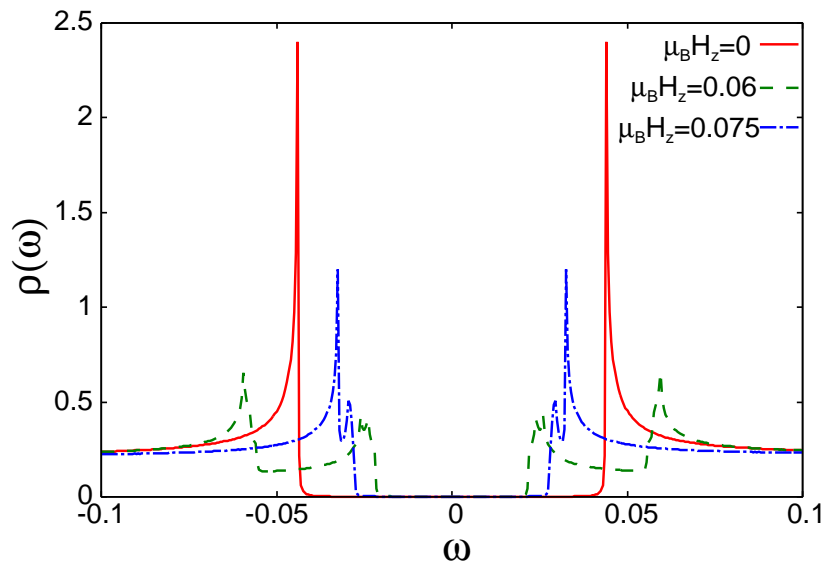


図 4.5 二層系 s 波超伝導体における状態密度 $\rho(\omega) = \rho_1(\omega) = \rho_2(\omega)$ 。実線が $\mu_B H_z = 0$ (BCS 状態)、点線が $\mu_B H_z = 0.06$ (ペア密度波状態への転移近傍の BCS 状態)、鎖線が $\mu_B H_z = 0.075$ (ペア密度波状態) の結果である。秩序変数は温度 $T = 0.002$, $\alpha = 0.3$ における各磁場での計算結果を用いた。

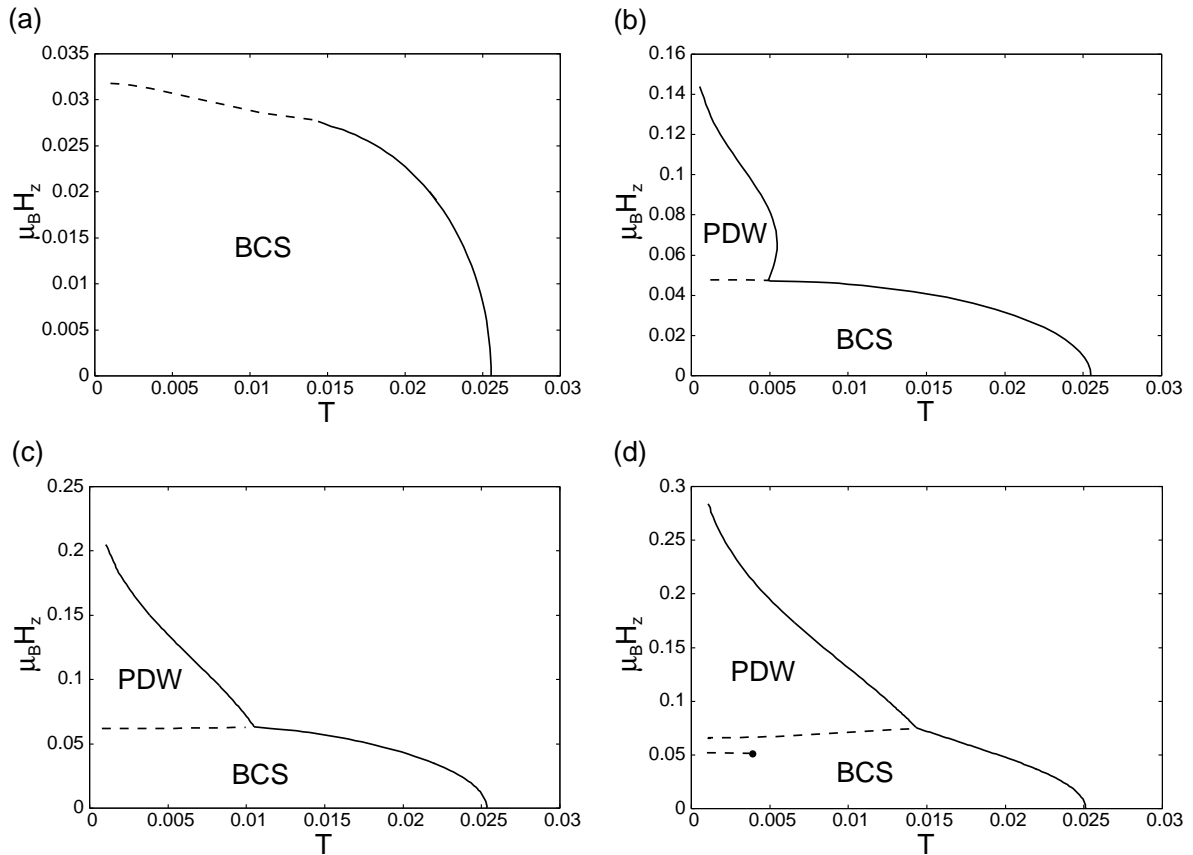


図 4.6 三層系 s 波超伝導体における温度・磁場相図。(a) $\alpha = 0$ (b) $\alpha = 0.1$ (c) $\alpha = 0.2$ (d) $\alpha = 0.3$ の場合の結果である。点線は一次相転移、実線は二次相転移を表している。黒丸は臨界終点を表している。

4.3 三層系 s 波超伝導体

次に、三層系 s 波超伝導体の結果について述べる。二層系と三層系で決定的に異なる点は、三層系には空間反転中心に位置する層が存在することである。そのため、スピン軌道相互作用は $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (\alpha, 0, -\alpha)$ となり、内側の層で 0 となる。

図 4.6 に、 $\alpha = 0, 0.1, 0.2, 0.3$ の場合の温度・磁場相図を示す。 $\alpha \leq 0.2$ の場合、温度・磁場相図は二層系の結果と定性的に等しい。ペア密度波状態が占める領域が若干狭くなっているのは、三層系においてペア密度波状態は内側の層の超伝導を破壊する必要があるためである。

一方、 α が増大していくと、BCS 状態において新たな一次相転移が現れる [図 4.6(d)]。この相転移の正体を明かにするため、図 4.7 に超伝導秩序変数の磁場依存性を示す。 $T = 0.001$ の場合 [図 4.7(a)]、低磁場領域では秩序変数は内側の層と外側の層でほぼ同じ大きさをとる。しかし、磁場を印加していき問題の一次相転移にさしかかると、内側の層の秩序変数のみが大きく抑制されている。このような層に依存した秩序変数の振る舞いは、再びスピン感受率を考えれば理解できる。図

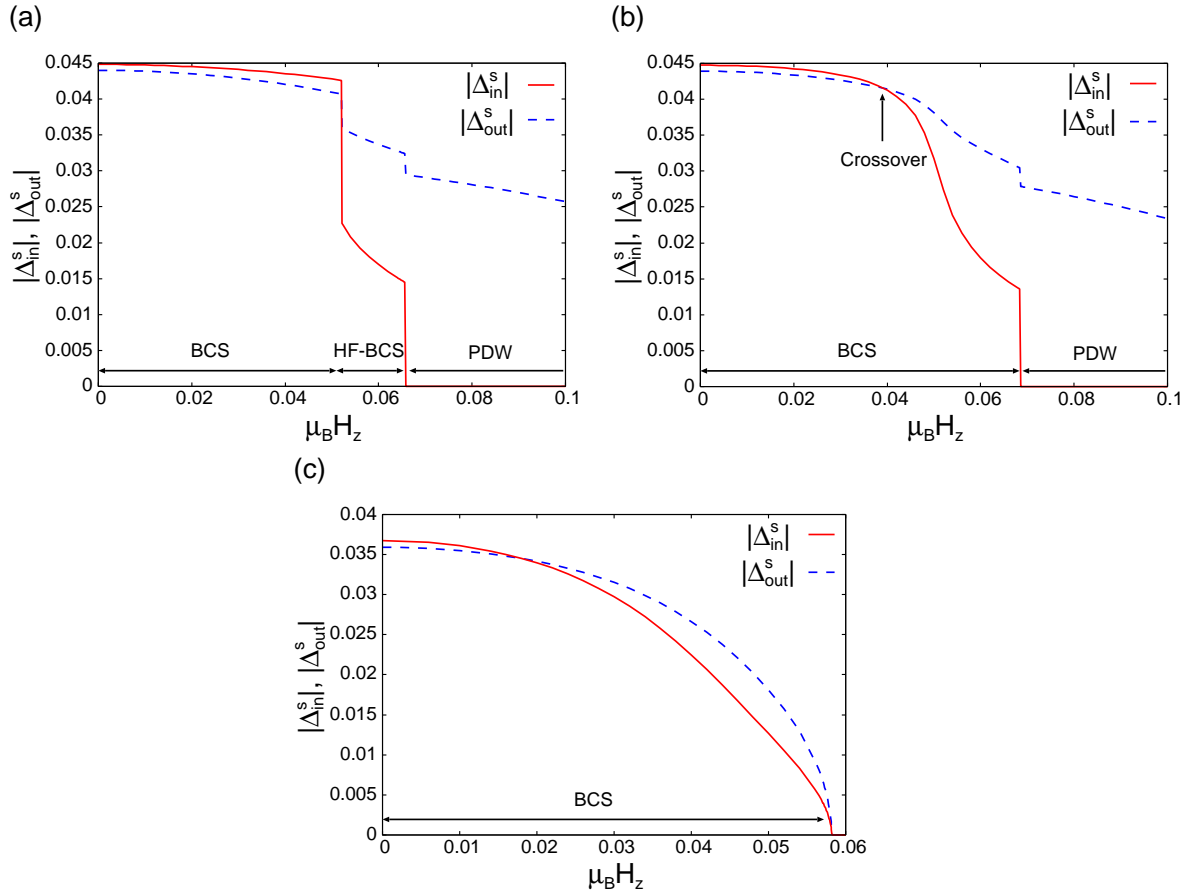


図 4.7 超伝導秩序変数の磁場依存性。(a) $T = 0.001$, (b) $T = 0.007$, (c) $T = 0.018$ の結果である。赤の実線が内側の層の秩序変数の絶対値 $|\Delta_{in}^s| = |\Delta_2^s|$ 、青の点線が外側の層の秩序変数の絶対値 $|\Delta_{out}^s| = |\Delta_1^s| = |\Delta_3^s|$ を表している。「BCS」は BCS 状態、「HF-BCS」は内側の層の秩序変数のみが抑制された BCS 状態、「PDW」はペア密度波状態を表している。

4.8 に Maruyama らによって計算された三層系超伝導体における絶対零度での各層のスピンの磁化率 χ_s/χ_n の α 依存性を示す [54]。 $\alpha < t_\perp$ の領域では、内側の層と外側の層のスピンの磁化率はほぼ同じ値をとる。しかし、スピンの軌道相互作用が大きくなり、 $\alpha > t_\perp$ の領域では内側の層のスピンの感受率が減少していく。これは、外側の二層では反対称スピンの軌道相互作用により Pauli 対破壊効果が抑制されるのに対し、内側の層では $\alpha = 0$ のためその恩恵が存在しないためである。したがって、内側の層は外側の層に比べ磁場中で不安定である。そのため、 $\alpha = 0.3$ において内側の層の秩序変数のみが著しく抑制され、低温領域ではそれが一次相転移となる。温度が上昇すると、この一次相転移はクロスオーバーとなり [図 4.7(b)]。さらに温度が上昇すると内側の層と外側の層のスピンの感受率の差がほとんど無くなり、内側の層の秩序変数のみが抑制されることはない [図 4.7(c)]。

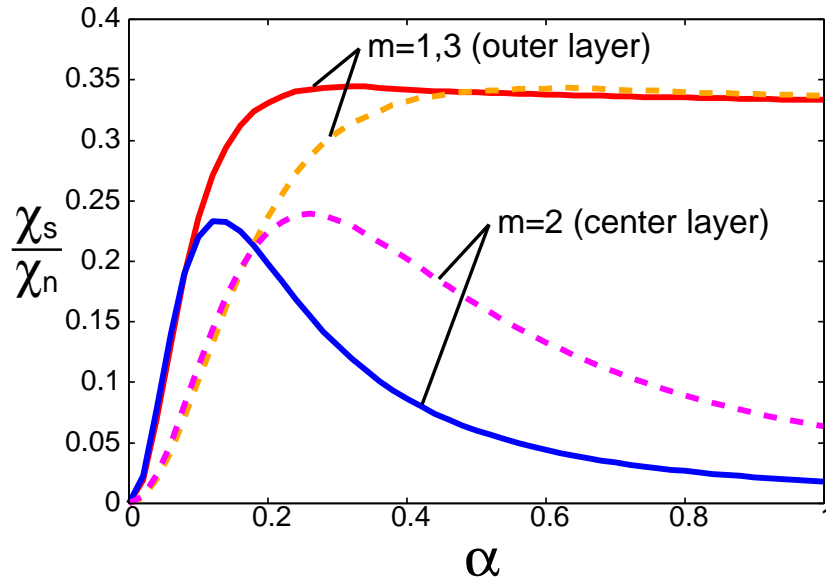


図 4.8 三層系 s 波超伝導体のスピン感受率の α 依存性 [54]。実線が $t_{\perp} = 0.1$ 、点線が $t_{\perp} = 0.2$ の結果である。

4.3.1 状態密度

三層系 s 波超伝導体における状態密度の計算結果を図 4.9 に示す。ゼロ磁場では外側の層も内側の層も Fermi 面に超伝導ギャップが開いている [図 4.9(a)]。一方磁場を印加しペア密度波状態への相転移近傍に差し掛かると、内側の層の超伝導ギャップが完全に潰れている。これは、前述した通り、内側の層は Pauli 対破壊効果の影響を受けやすいためである。内側の層由来のゼロエネルギー状態は、層間遷移により外側の層に染み出すため、外側の層の状態密度にもわずかにゼロエネルギー状態が現れている [図 4.9(b)]。しかし、ペア密度波状態に転移すると、Pauli 対破壊効果は抑制されるため、再び超伝導ギャップが開く [図 4.9(c)]。この様に、三層系超伝導体では二層系超伝導体よりも状態密度に大きな変化が見られる。

4.4 S+p 波超伝導体

これまで p 波の引力を 0 としてきた。しかし、ペア密度波状態において p 波成分との混成を考慮することは、非常に興味深い。なぜなら、図 4.1(c)、4.2(c) に示したように、ペア密度波状態では空間的に一様なスピン三重項超伝導が誘起されるからである。つまり、スピン一重項超伝導体からスピン三重項超伝導体を作り出すことができる。この章では誘起されるスピン三重項超伝導の決定と、それによる温度・磁場相図、状態密度の変化について議論する。なお、この節を通じて $\alpha = 0.3$ とする。

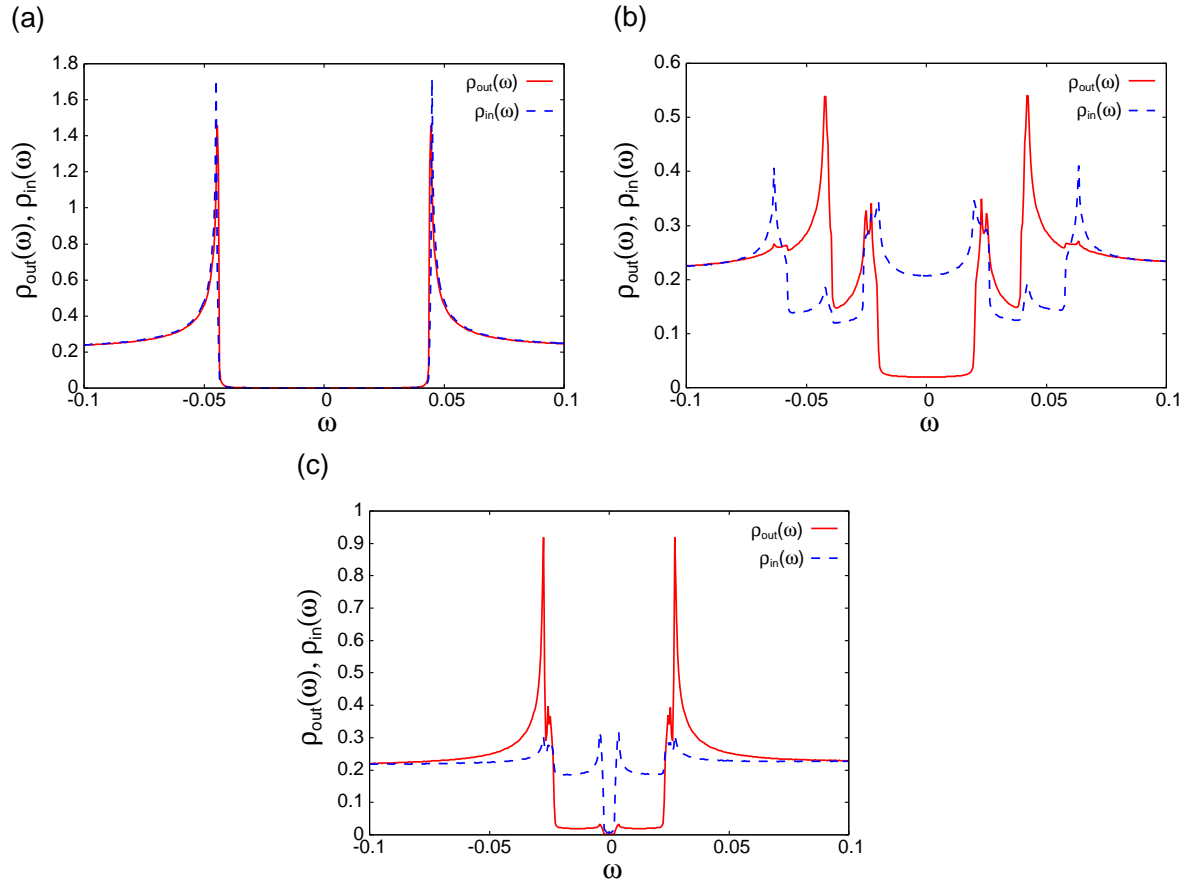


図 4.9 三層系 s 波超伝導体における状態密度。赤の実線が外側の層の状態密度 $\rho_{\text{out}}(\omega) = \rho_1(\omega) = \rho_3(\omega)$ 、青の点線が内側の層の状態密度 $\rho_{\text{in}}(\omega) = \rho_2(\omega)$ を表している。(a) $\mu_B H_z = 0$ (BCS 状態) (b) $\mu_B H_z = 0.06$ (ペア密度波状態への相転移近傍の BCS 状態) (c) $\mu_B H_z = 0.072$ (ペア密度波状態) での結果である。秩序変数は $\alpha = 0.3$, $T = 0.002$ における各磁場での計算結果を用いた。

4.4.1 二層系 S+p 波超伝導体

二層系 S+p 波超伝導体における温度・磁場相図を図 4.10 に示す。p 波の引力 V_p が大きくなるにつれて、上部臨界磁場が増加しているのが分かる。ここで注意すべき点は、p 波の引力が非常に小さいことである。実際、図 4.10 において最も大きな引力相互作用 $V_p = 0.85$ でも、 $V_s = 0$ の時の超伝導転移温度 T_c^p は $T_c^p < 6.0 \times 10^{-4}$ と非常に低い。つまり、依然として超伝導はスピン一重項超伝導で引き起こされている。しかし、このような非常に小さな p 波の引力でも、上部臨界磁場は著しく上昇する。なお、これまでの所スピン一重項超伝導とスピン三重項超伝導が強く混成した超伝導体は見つかっていないが、このような小さな p 波の引力は存在していても不思議はない。

次に、誘起されるスピン三重項超伝導状態について述べる。ギャップ方程式の解析の結果、 d -ベ

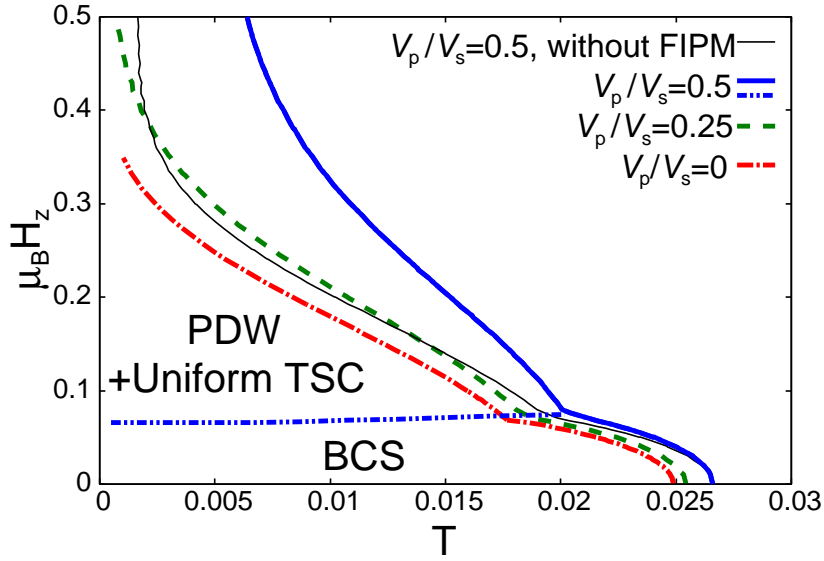


図 4.10 二層系 S+p 波超伝導体における温度・磁場相図。赤の鎖線が $V_p = 0$ 、緑の点線が $V_p/V_s = 0.25$ ($V_p = 0.425$)、青の実線が $V_p/V_s = 0.5$ ($V_p = 0.85$) の場合の上部臨界磁場を表している。青の二重鎖線は $V_p/V_s = 0.5$ の時の BCS 状態からペア密度波状態への一次相転移を示している。黒の実線は磁場誘起のパリティ混成を無視した場合の上部臨界磁場である。

クトルは以下のようにかけることが分かった。

$$\mathbf{d}_m(\mathbf{k}) = a_m(-\sin k_y, \sin k_x, 0) + ib_m(\sin k_x, \sin k_y, 0) \quad (4.13)$$

ここで、 a_m, b_m は実数とする。式 (4.13) の右辺第一項はゼロ磁場でも現れる項であり、右辺第二項は磁場により時間反転対称性が破れたことにより誘起される秩序変数である。今後、前者をヘリカル 1 状態、後者をヘリカル 2 状態と呼ぶことにする。ヘリカル 2 状態が誘起されることにより、スピン三重項超伝導は非ユニタリー状態となる。非ユニタリー状態とは、 $\mathbf{d}_m(\mathbf{k}) \times \mathbf{d}_m^*(\mathbf{k}) \neq 0$ を満たす状態のことである。

図 4.11 にパラメーター a_m, b_m の磁場依存性を示す。ゼロ磁場ではヘリカル 1 状態のみが誘起され、層 1 と層 2 で d -ベクトルの符号が異なる BCS 状態である。一方、磁場中ではヘリカル 2 状態も誘起される。磁場を印加していくと、BCS 状態からペア密度波状態状態への一次相転移が起き ($\mu_B H_z \sim 0.066$)、 d -ベクトルは層間で符号を揃える。

図 4.11 で最も注目すべき点は、ヘリカル 2 状態の占める割合が磁場の印加とともに著しく増大する点である。実際、非ユニタリー性を表すパラメーター $K_m \equiv 2a_m b_m / (a_m^2 + b_m^2)$ はペア密度波状態において最大値 1 に近い値をとる (図 4.12)。第 1 章で示したように、反対称スピン軌道相互作用が与える d -ベクトルの異方性は $\alpha \gg T_c$ の場合非常に巨大なものとなる。そのため、非ユニタリー性は非常に小さいと考えられる。しかし、数値計算の結果では非常に大きな非ユニタリー性が得られた。

大きな非ユニタリー性の原因を解明するため、既約超伝導感受率 $\chi^{(0)}$ の磁場依存性を計算した。

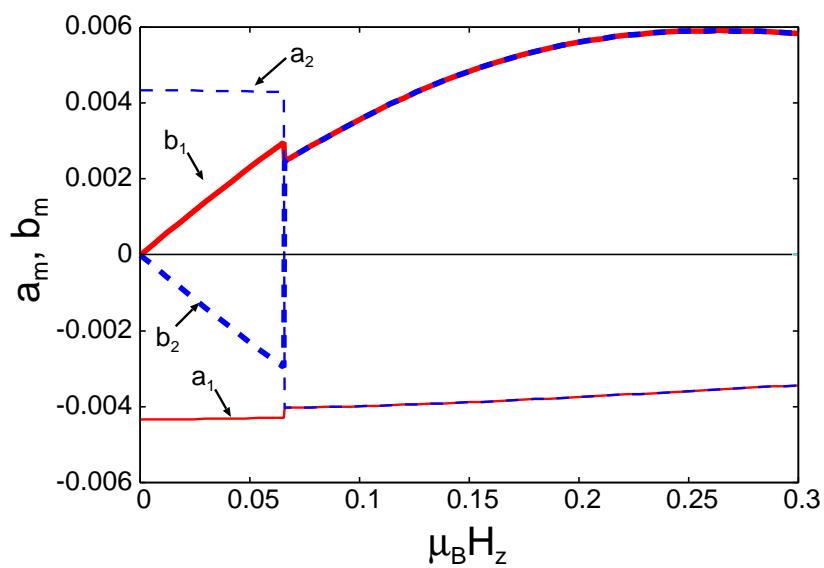


図 4.11 d -ベクトルの磁場依存性。 $V_p/V_s = 0.5$ の結果である。温度は $T = 0.002$ に固定した。その他のパラメーターは図 4.10 と等しい。赤の実線が層 1、青の点線が層 2 における d -ベクトルであり、細線が a_m 、太線が b_m を表している。

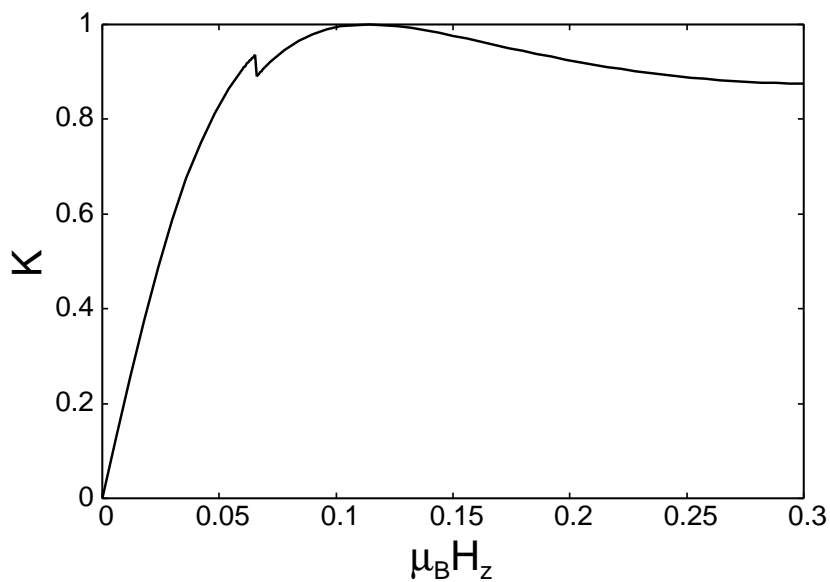


図 4.12 非ユニタリー性を表すパラメーター $K = K_m \equiv 2a_m b_m / (a_m^2 + b_m^2)$ の磁場依存性。図 4.11 の結果を用いて計算した。

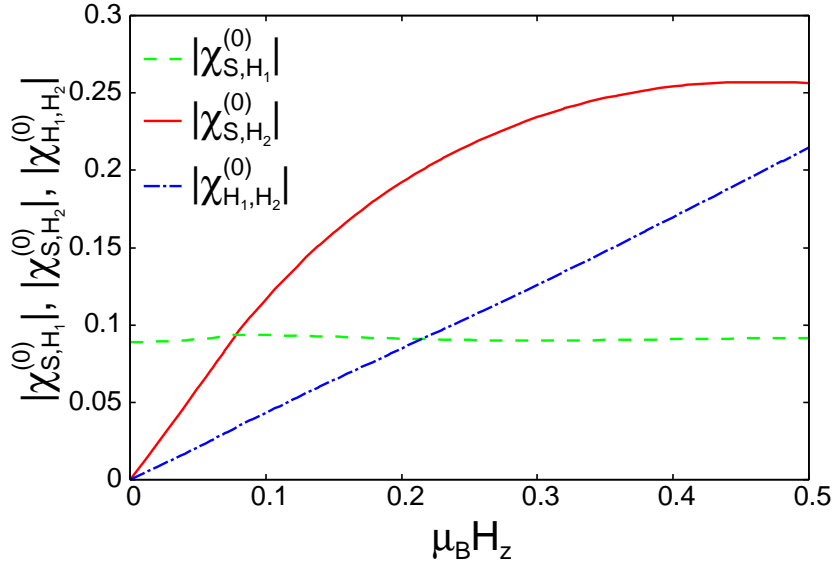


図 4.13 既約超伝導感受率 $\chi^{(0)}$ の絶対値 ($V_p/V_s = 0.5$)、超伝導転移温度 $T_c(H)$ での結果である。赤の実線が $|\chi_{S,H_2}^{(0)}| \equiv |\chi_{11,21}^{(0)}(0)| = |\chi_{12,22}^{(0)}(0)|$ 、青の二重線が $|\chi_{H_1,H_2}^{(0)}| \equiv |\chi_{51,21}^{(0)}(0)| = |\chi_{52,22}^{(0)}(0)|$ 、緑の点線が $|\chi_{S,H_1}^{(0)}| \equiv |\chi_{11,51}^{(0)}(0)| = |\chi_{12,52}^{(0)}(0)|$ を示している。

図 4.13 に結果を示す。ヘリカル 2 状態の起源として、s 波超伝導とのパリティ混成が考えられる。それを表すのが $\chi_{S,H_2}^{(0)} \equiv \chi_{11,21}^{(0)}(0) = -\chi_{12,22}^{(0)}(0)$ である。図 4.13 から分かるように、 $|\chi_{S,H_2}^{(0)}|$ はゼロ磁場では 0 である。一方、磁場中ではその振幅は増大し、s 波超伝導とヘリカル 1 状態の混成を表す $\chi_{S,H_1}^{(0)} \equiv \chi_{11,51}^{(0)}(0) = -\chi_{12,52}^{(0)}(0)$ よりも大きくなる。したがって、ヘリカル 2 状態は s 波状態とのパリティ混成を通じてヘリカル 1 状態と同程度誘起される。また、 $\chi_{S,H_1}^{(0)}$ が実数の場合 $\chi_{S,H_2}^{(0)}$ は純虚数である。そのため、非ユニタリースピン三重項超伝導状態が実現する。なお、図 4.13 には、ヘリカル 1 状態とヘリカル 2 状態の混成、つまりスピン偏極効果に対応する成分 $\chi_{H_1,H_2}^{(0)} \equiv \chi_{51,21}^{(0)}(0) = \chi_{52,22}^{(0)}(0)$ も示した。 $\chi_{S,H_2}^{(0)}$ と $\chi_{H_1,H_2}^{(0)}$ の振幅は同程度の大きさを持つが、後者の影響は小さいと考えられる。なぜなら、今 s 波超伝導が支配的であり、ヘリカル 1 状態、ヘリカル 2 状態はどちらも準支配的な状態であるためである。

s 波超伝導とヘリカル 2 状態のパリティ混成は、上部臨界磁場の増大にも重要な寄与を果たす。図 4.10 に示したように、 $\chi_{S,H_2}^{(0)} = 0$ としたときの上部臨界磁場は、 $V_p = 0$ の場合のそれとほとんど変わらない。

s 波超伝導とのパリティ混成により誘起されるスピン三重項超伝導は式 (4.13) で表されるが、ハーフフィリング $\mu = 0$ の場合のみ結果は異なる。ハーフフィリングの場合、ヘリカル 1 状態は完全に抑制され、ヘリカル 2 状態のみが磁場中で誘起される。つまり、ゼロ磁場では純粋な s 波超伝導であり、磁場中ではユニタリースピン三重項超伝導が誘起される。これは、今採用しているモデルが粒子・正孔対称性を持つためである。第 1 章で示したように、スピン一重項超伝導とスピン三重項超伝導の相対位相は、スピン軌道相互作用の符号により決定される。実は、スピン軌道相互

作用の符号を反転することは、化学ポテンシャルの符号を反転させることと等価である。モデルハミルトニアンにおいて、 $\mu \rightarrow -\mu$ としたものを考える。その後、 $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{Q}$, $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ の変換を施してみる。すると、運動エネルギー $\xi(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned}\xi(\mathbf{k}) \rightarrow \xi(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) &= -2t[\cos(k_x + \pi) + \cos(k_y + \pi)] + \mu \\ &= -[-2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu]\end{aligned}\quad (4.14)$$

と変換される。その他の項はこの変換の元で不変である。次に、ハミルトニアン全体にマイナスを掛ける。超伝度秩序変数は U(1) 自由度を持つため、秩序変数全体にマイナスを掛けても結果は不変である。結果としてスピン軌道相互作用の符号が反転したハミルトニアンが得られる。よって、化学ポテンシャルの符号変化は、スピン軌道相互作用の符号変化と等しい。つまり $\mathcal{H}(\alpha, -\mu) = \mathcal{H}(-\alpha, \mu)$ である。そのため、 $\mu = 0$ の場合、 $\mathcal{H}(\alpha) = \mathcal{H}(-\alpha)$ となる。第 1 章で示した通り、スピン軌道相互作用の符号が変われば、スピン一重項超伝導とスピン三重項超伝導の相対位相も変化する。 $\mu = 0$ の時 $\mathcal{H}(\alpha) = \mathcal{H}(-\alpha)$ を満たすためには、誘起されるスピン三重項超伝導はゼロとならなければならない。よって、 $\mu = 0$ で超伝導のパリティ混成は完全に抑制されることになる。一方、磁場中で誘起されるヘリカル 2 状態には上記の制限は存在しない。以上の理由から、粒子・正孔対称性のある模型を用いると、ハーフフィリング $\mu = 0$ では s 波超伝導とヘリカル 1 状態のパリティ混成は完全に抑制され、磁場中ではユニタリーなヘリカル 2 状態のみが現れる。

最後に、p 波成分の混成による状態密度の変化について示す。図 4.14 に二層系 S+p 波超伝導体の状態密度を示す。 $V_p = 0$ での結果 (図 4.5) と比較すると、各磁場において状態密度のピークが分裂しているのが分かる。これは、式 (4.6), (4.10) に示したように、S+p 波状態ではバンド内の秩序変数が二種類あるためである。これを反映して、状態密度のピークの分裂が起こる。

4.4.2 三層系 S+p 波超伝導体

三層系 S+p 波超伝導体の温度・磁場相図を図 4.15 に示す。二層系の結果と同様に、p 波成分との混成により上部臨界磁場は上昇する。BCS 状態において、低温領域に存在する一次相転移は、 $V_p = 0$ の時と同様に内側の層の超伝導のみが抑制された BCS 状態への転移である。

d -ベクトルは再び式 (4.13) で記述される。パラメーター a_m, b_m の計算結果を図 4.16 に示す。外側の層に対する結果 (a_1, a_3, b_1, b_3) は二層系の結果とほぼ等価である。一方、内側の層に対する結果は、それらとは異なる振る舞いをしている。 a_2, b_2 は BCS 状態では 0 であるが、PDW 状態になると有限の値を持つ。そして、 $b_2 > a_2$ となる、つまり内側の層では非ユニタリー性は小さくなる。これは以下の様に理解できる。内側の層ではスピン軌道相互作用は 0 である。そのため、ヘリカル 1 状態を安定化させるメカニズムが存在しない。一方、磁場によりヘリカル 2 状態が誘起され、主なスピン三重項超伝導状態となる。結果として、内側の層ではヘリカル 2 状態が支配的なスピン三重項超伝導が誘起される。

この章の最後に、p 波超伝導の混成による状態密度の変化について議論する。図 4.17 に各層における状態密度の計算結果を示す。ゼロ磁場での結果 [図 4.17(a)] を見ると、二層系と同様に状態密度のピークが分裂している。これは、三層系では、バンド表示でのバンド内の秩序変数は、BCS

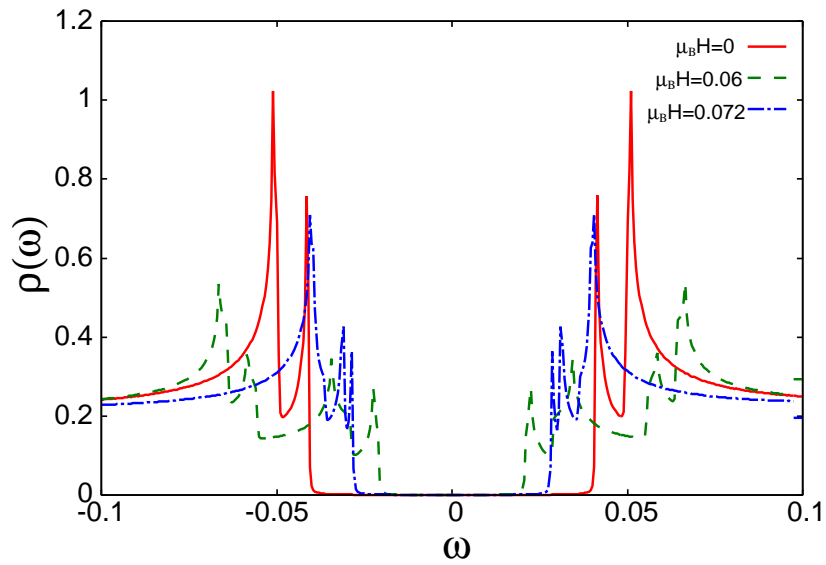


図 4.14 二層系 S+p 波超伝導体の状態密度。赤の実線が $\mu_B H_z = 0$ (BCS 状態)、緑の点線が $\mu_B H_z = 0.06$ (ペア密度波状態への転移近傍の BCS 状態)、青の鎖線が $\mu_B H_z = 0.072$ (PDW 状態) での結果である。秩序変数は $V_p = 0.85$, $T = 0.002$ における各磁場での計算結果を用いた。

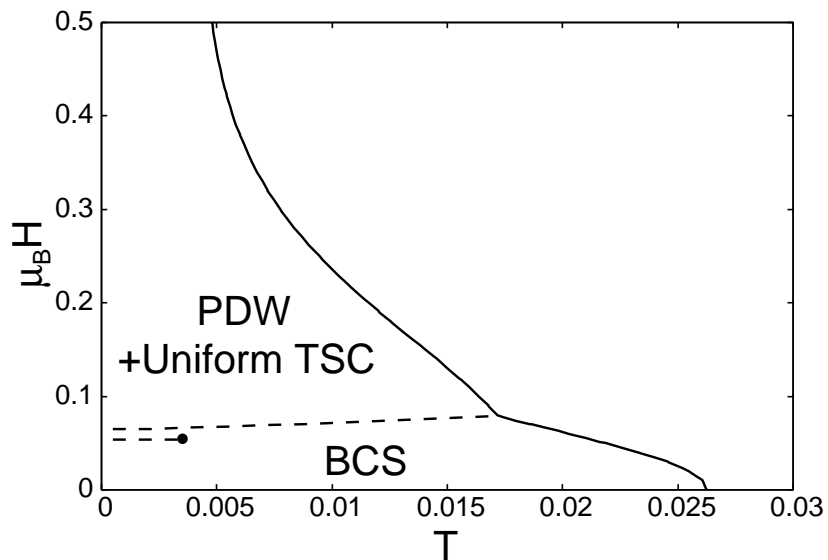


図 4.15 三層系 S+p 波超伝導体における温度・磁場相図。 $V_p/V_s = 0.5$ の結果である。点線は一次相転移、実線は二次相転移を表している。黒丸は臨界終点である。

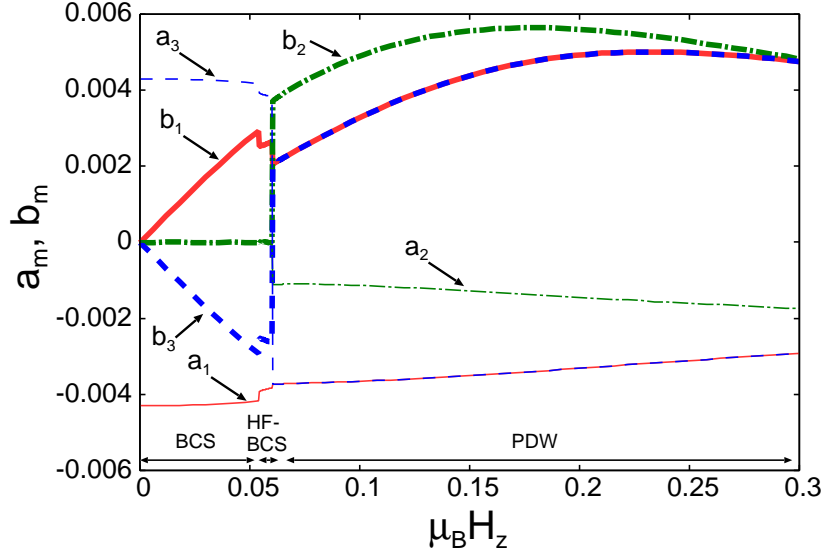


図 4.16 三層系 S+p 波超伝導体における d -ベクトルの磁場依存性。 $T = 0.002$ の結果である。その他のパラメータは図 4.15 と同じである。実線が層一、鎖線が層二、点線が層三の結果であり、細線が a_m 、太線が b_m を表している。

状態の時

$$\Delta_{\text{band1}} = \Delta^s + \frac{\alpha |\mathbf{g}(\mathbf{k})|}{\sqrt{\alpha^2 |\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 + 2t_{\perp}^2}} \Delta^p |\mathbf{g}(\mathbf{k})| \quad (4.15)$$

$$\Delta_{\text{band2}} = \Delta^s \quad (4.16)$$

$$\Delta_{\text{band3}} = \Delta^s - \frac{\alpha |\mathbf{g}(\mathbf{k})|}{\sqrt{\alpha^2 |\mathbf{g}(\mathbf{k})|^2 + 2t_{\perp}^2}} \Delta^p |\mathbf{g}(\mathbf{k})| \quad (4.17)$$

となり、三つの超伝導ギャップが存在するためである。ここで、 $\Delta_{\text{out}} = \Delta_{\text{in}} = \Delta^s$ 、 $\mathbf{d}_{\text{out}}(\mathbf{k}) = \Delta^p \mathbf{g}(\mathbf{k})$ を仮定した。磁場を印加していくと、内側の層のギャップが潰れていく [図 4.17(b)]。さらに磁場を印加し、PDW 状態に移ると、内側の層の状態密度のピークが分裂する。これは、p 波超伝導が非ユニタリーであることを表している。図 4.17(d) にスピン分解した内側の層の状態密度

$$\rho_{2\uparrow}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}, s, \nu} |u_{\uparrow 2, \nu}(\mathbf{k})|^2 \delta[\omega - E_{\nu}(\mathbf{k})] \quad (4.18)$$

$$\rho_{2\downarrow}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}, s, \nu} |u_{\downarrow 2, \nu}(\mathbf{k})|^2 \delta[\omega - E_{\nu}(\mathbf{k})] \quad (4.19)$$

の計算結果を示す。明らかに、上向きスピンと下向きスピンの異なる大きさの超伝導ギャップを持つことが分かる。これは、非ユニタリースピン三重項状態では、 $|\Delta_{\uparrow\uparrow}| \neq |\Delta_{\downarrow\downarrow}|$ となるためである。よって、非ユニタリー状態が実現しているかどうか、状態密度の観測により判断できる。

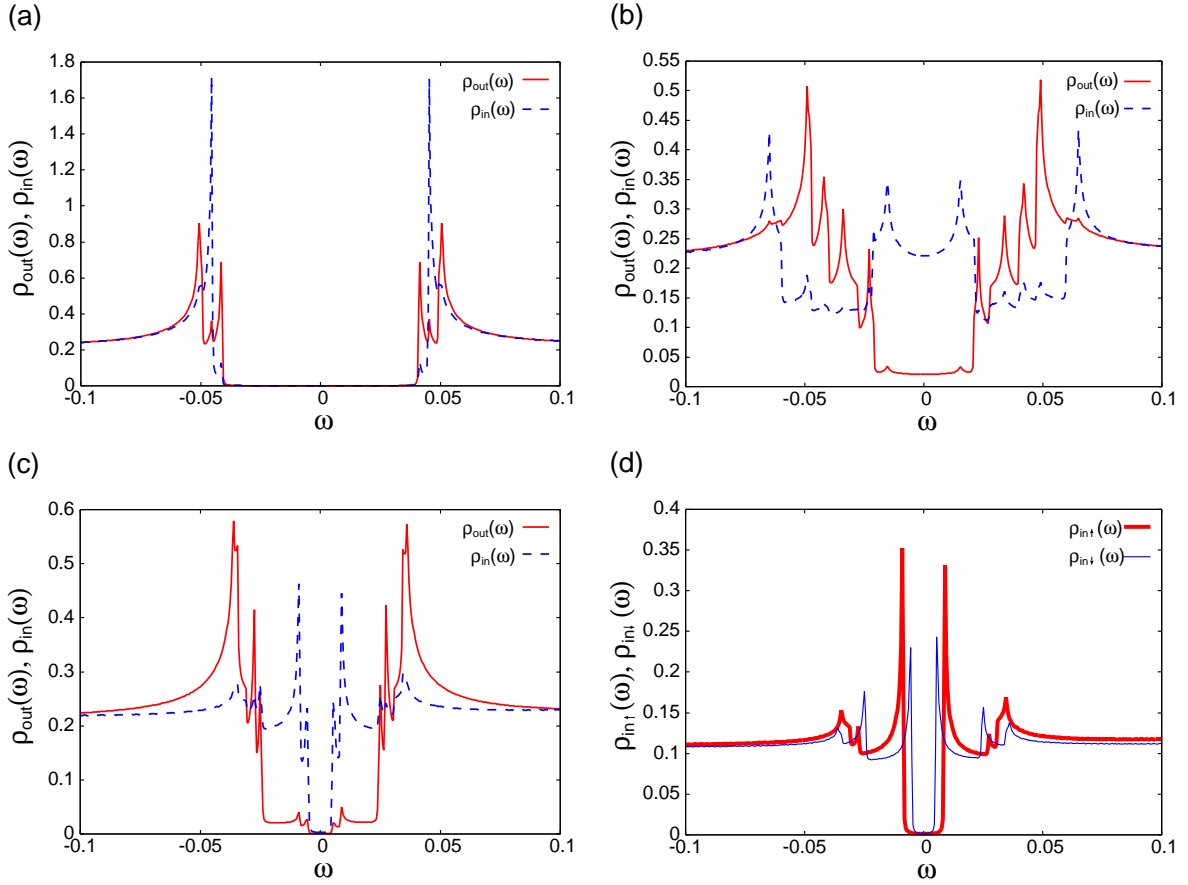


図 4.17 (a)-(c) 三層系 S+p 波超伝導体の各層における状態密度。赤の実線が外側の層の状態密度 $\rho_{out}(\omega) = \rho_1(\omega) = \rho_3(\omega)$ 、青の点線が内側の層の状態密度 $\rho_{in}(\omega) = \rho_2(\omega)$ を表している。磁場の値は (a) $\mu_B H_z = 0$ (BCS 状態) (b) $\mu_B H_z = 0.058$ (ペア密度波状態への転移近傍の BCS 状態) (c) $\mu_B = 0.072$ (PDW 状態) である。秩序変数は $T = 0.002$ における各磁場での計算結果を用いた。(d) 磁場 $\mu_B H_z = 0.072$ における内側の層の状態密度を、スピン分解したものを、赤の太線が準粒子のスピンが上向き、青の細線が下向きの結果である。

4.5 d 波超伝導体

この節では、d 波超伝導体の計算結果について述べる。ペア密度波状態が磁場中で安定となる理由は、前述したとおりペア密度波状態では Pauli 対破壊効果が抑制されるためである。これはスピン-重項超伝導が支配的な場合常に期待されることであり、超伝導対称性にはよらない。そのため、d 波対称性の場合も、磁場中ではペア密度波状態が安定となると予想される。以下、二層系、三層系における温度・磁場相図、状態密度の計算結果を紹介し、最後に D+p 波超伝導体の結果について述べる。なお、この節を通じて $V_d = 2.2$, $V_p = 0$ とする。

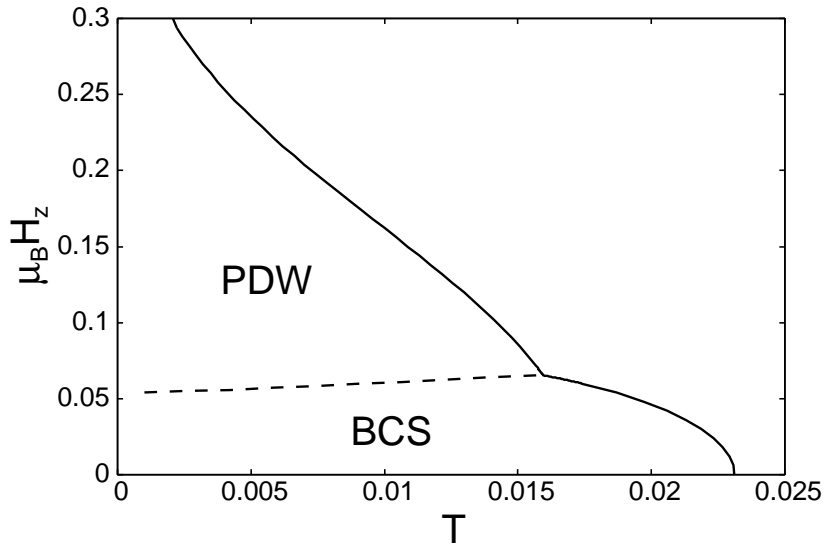


図 4.18 二層系 d 波超伝導体における温度・磁場相図。 $\alpha = 0.3$ の結果である。点線は一次相転移、実線は二次相転移を表している。

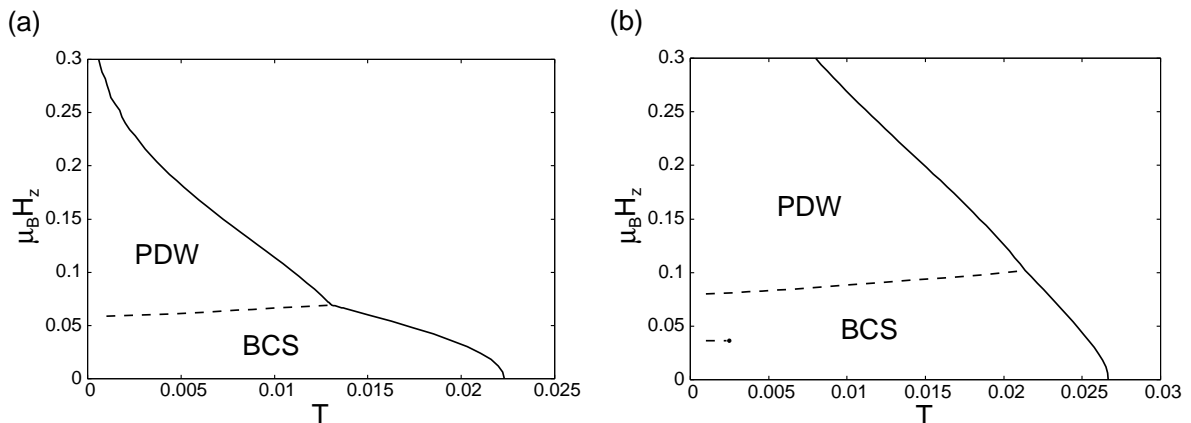


図 4.19 三層系 d 波超伝導体における温度・磁場相図。(a) $\alpha = 0.3$ 、(b) $\alpha = 0.5$ の結果である。

4.5.1 温度・磁場相図

初めに、二層系 d 波超伝導体の結果について述べる。図 4.18 に二層系 d 波超伝導体の温度・磁場相図を示す。予想したとおり、s 波超伝導体とほぼ同じ結果を得た。

次に、三層系 d 波超伝導体の温度・磁場相図を図 4.19 に示す。こちらもほぼ s 波超伝導体と等価な結果を得たが、s 波超伝導体において $\alpha = 0.3$ で現れた BCS 状態内での一次転移は、d 波超伝導体では得られなかった。しかし、この一次転移が現れるかどうかはパラメーターに依存しており、実際 $\alpha = 0.5$ とした場合、内側の層の超伝導のみが抑制される一次転移が現れた [図 4.19(b)]。定性的には s 波超伝導と d 波超伝導は同じ結果を与えることを確認した。

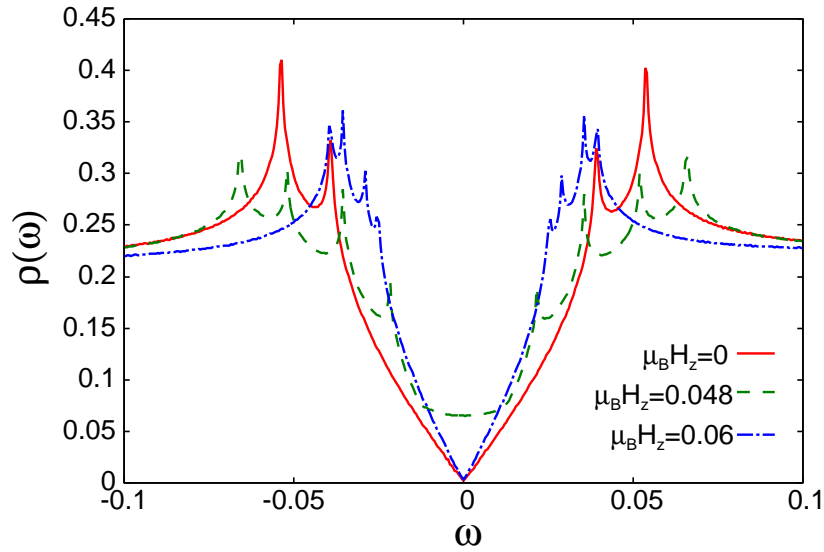


図 4.20 二層系 d 波超伝導体における状態密度。赤の実線が $\mu_B H_z = 0$ (BCS 状態)、緑の点線が $\mu_B H_z = 0.049$ (ペア密度波状態への転移近傍の BCS 状態)、青の鎖線が $\mu_B H_z = 0.06$ (ペア密度波状態) での結果である。秩序変数は $\alpha = 0.3$, $T = 0.002$ における各磁場での計算結果を用いた。

4.5.2 状態密度

図 4.20 に二層系 d 波超伝導体の状態密度を示す。ゼロ磁場では、よく知られた d 波超伝導の振る舞いを示す。磁場を印加していくと、超伝導ギャップが潰れるが、ペア密度波状態へ相転移するとゼロ磁場と同様の振る舞いを示す。これもペア密度波状態では Pauli 対破壊効果が抑制されるためである。

次に、三層系 d 波超伝導体の状態密度を図 4.21 に示す。こちらも磁場を印加していくと超伝導ギャップが潰れているが [図 4.21(a), (b)]、ペア密度波状態へ相転移すると、Fermi 面のごく近傍で d 波超伝導の振る舞いをする [図 4.21(c)]。これもまた、ペア密度波状態で Pauli 対破壊効果が抑制されるためである。

4.6 D+p 波超伝導体

この節では、D+p 波超伝導体の結果を示す。まず初めに、温度・磁場相図を示し、その後状態密度の計算結果を示す。この節を通じて、 $\alpha = 0.3$, $V_d = 2.2$, $V_p = 0.85$ とする。

4.6.1 温度・磁場相図

図 4.22 に二層系 D+p 波超伝導体の温度・磁場相図を示す。S+p 波超伝導体と同様に、p 波超伝導との混成により上部臨界磁場が増大している (図 4.18 と図 4.22 を比較)。

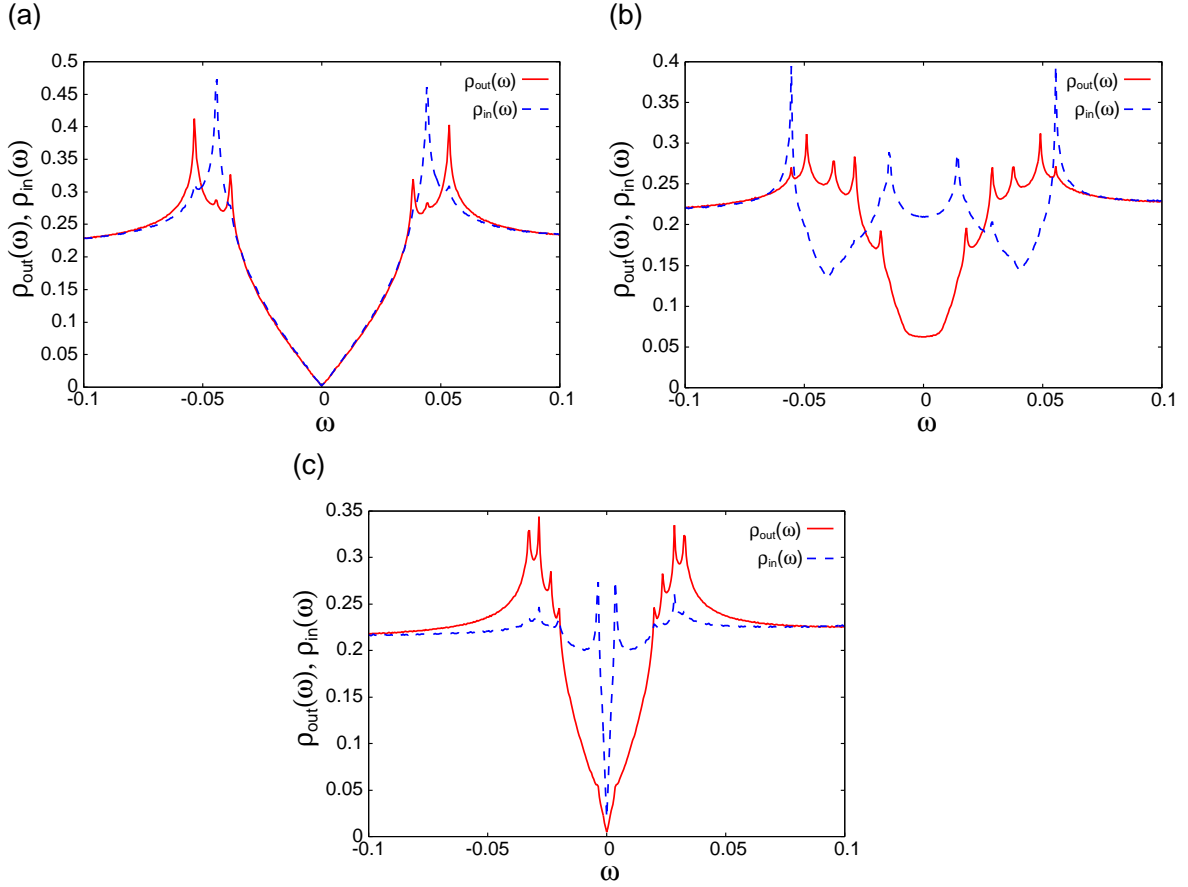


図 4.21 三層系 d 波超伝導体の各層における状態密度。赤の実線が外側の層の状態密度 $\rho_{\text{out}}(\omega) = \rho_1(\omega) = \rho_3(\omega)$ 、青の点線が内側の層の状態密度 $\rho_{\text{in}}(\omega) = \rho_2(\omega)$ を示している。(a) $\mu_B H_z = 0$ (BCS 状態) (b) $\mu_B H_z = 0.054$ (ペア密度波状態への転移近傍の BCS 状態) (c) $\mu_B H_z = 0.066$ (ペア密度波状態) での結果である。秩序変数は $\alpha = 0.3$, $T = 0.002$ における各磁場での計算結果を用いた。

次に、 d -ベクトルの構造を示す。ギャップ方程式の解析の結果、 d -ベクトルは以下の式で与えられることが分かった。

$$\mathbf{d}_m(\mathbf{k}) = c_m(\sin k_y, \sin k_x, 0) + id_m(-\sin k_x, \sin k_y, 0) \quad (4.20)$$

ここで、パラメーター c_m, d_m は実数とする。式 (4.20) の右辺第一項がゼロ磁場でも混成する超伝導状態 (ヘリカル 3 状態と呼ぶ) であり、第二項が磁場中でのみ混成する状態 (ヘリカル 4 状態と呼ぶ) である。図 4.23 にパラメーター c_m, d_m の磁場依存性を示す。ゼロ磁場では c_m のみが現れ、磁場を印加すると d_m が急激に大きくなる様子が見取れる。つまり、d 波超伝導体においても、s 波超伝導体と同様に非ユニタリースピン三重項超伝導状態が実現している。また、 c_m, d_m の大きさその物も、 $|c_m|, |d_m| \sim 0.002$ と大きな値を持っている (ゼロ磁場において $|\Delta_m^d| \sim 0.04$ である)。ヘリカル 3, 4 状態はどちらも $\alpha \gg T_c$ の時著しく抑制されてしまうが (第 1 章参照)、d 波

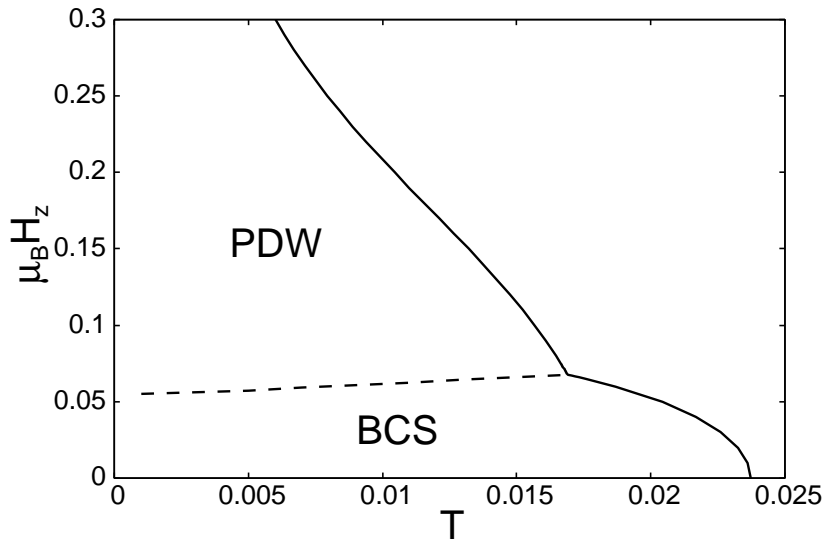


図 4.22 二層系 D+p 波超伝導体の c 軸磁場中超伝導相図。

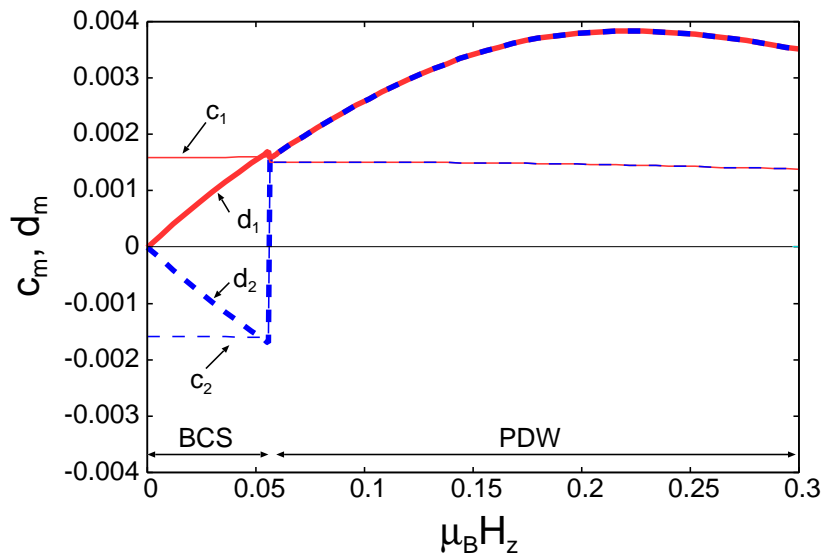


図 4.23 パラメーター c_m, d_m の磁場依存性。温度を $T = 0.002$ に固定した。

超伝導との混成により顔を出すようになる。

続いて三層系 D+p 波超伝導の結果を示す。図 4.24 に三層系 D+p 波超伝導体の温度・磁場相図を示す。p 波超伝導との混成により上部臨界磁場が上昇している。 d -ベクトルは式 (4.20) で記述され、図 4.25 にパラメーター c_m, d_m の磁場依存性を示した。外側の層の結果は二層系 D+p 波超伝導体の結果とほぼ等価である。内側の層では、 $c_m < d_m$ となり非ユニタリー性は小さい。この結果も S+p 波超伝導体と同じである。

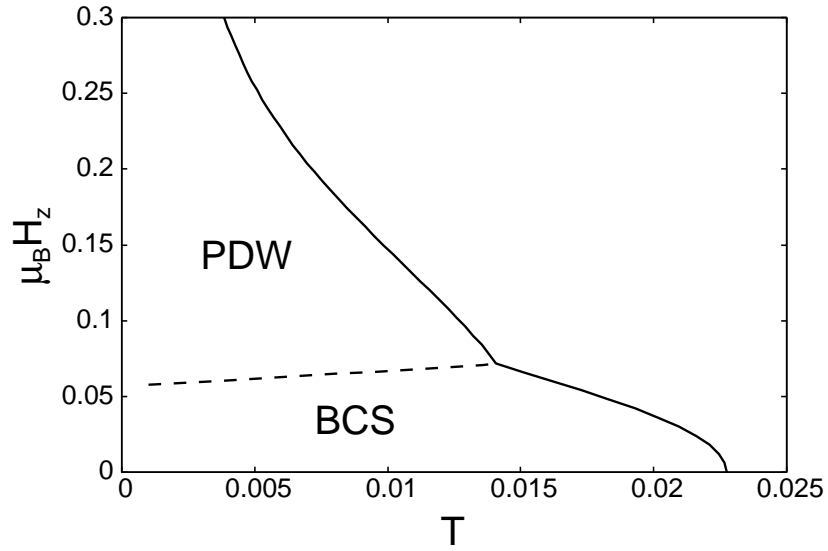


図 4.24 三層系 D+p 波超伝導体の c 軸磁場中超伝導相図。

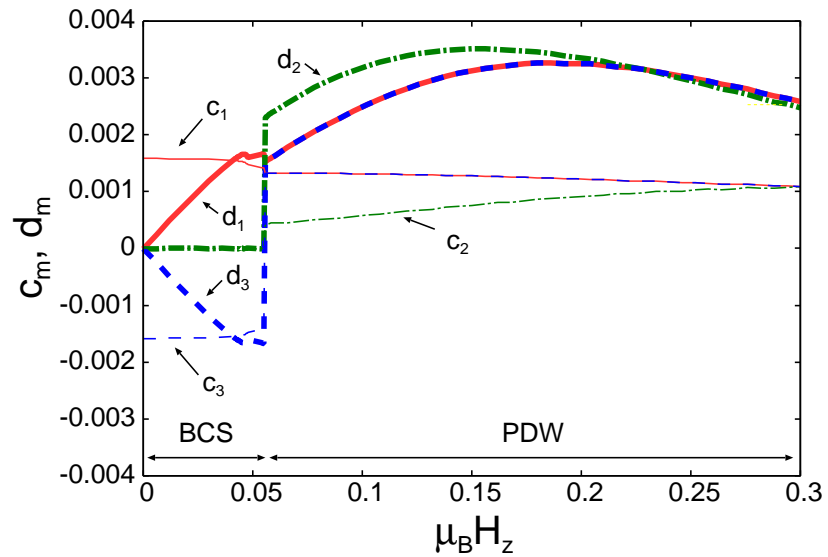


図 4.25 三層系 D+p 波超伝導体におけるパラメータ c_m, d_m の磁場依存性。温度は $T = 0.002$ に固定した。

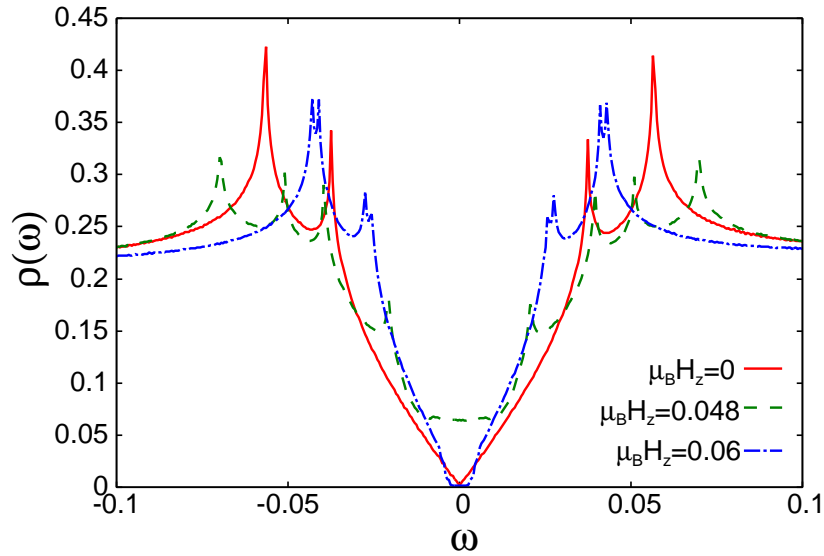


図 4.26 二層系 D+p 波超伝導体の状態密度。(a) $\mu_B H_z = 0$ (BCS 状態) (b) $\mu_B H_z = 0.048$ (ペア密度波状態への転移近傍の BCS 状態) (c) $\mu_B H_z = 0.06$ (ペア密度波状態) の結果である。温度 $T = 0.002$ における各磁場での秩序変数を用いた。

4.6.2 状態密度

最後に、状態密度の計算結果を示す。D+p 波超伝導体の結果は、誘起される d -ベクトルが違うなどの相違点はあったが S+p 波超伝導体とほぼ同じ結果を得た。つまり、p 波超伝導との混成により上部臨界磁場が上昇し、誘起されたスピン三重項超伝導は非ユニタリー状態である。しかし、状態密度には超伝導の対称性が重要になってくるため、S+p 波超伝導体と異なる結果が得られると期待される。以下、二層系 D+p 波超伝導体、三層系 D+p 波超伝導体の計算結果を示す。

図 4.26 に二層系 D+p 波超伝導体における状態密度を示す。ゼロ磁場では d 波超伝導の振る舞いをし、磁場を印加すると超伝導ギャップが潰れていく様子が分かる。しかし、ペア密度波状態へ相転移すると、Fermi 面に有限のギャップが開く。この振る舞いは d 波超伝導体では見られなかったものである (図 4.20 参照)。つまり、p 波超伝導とのパリティ混成により、ペア密度波状態はフルギャップとなる。この事実は、次章で議論するトポロジカル超伝導で非常に重要になってくる。

図 4.27 に三層系 D+p 波超伝導体の各層での状態密度を示す。BCS 状態では有限の超伝導ギャップは得られないが [図 4.27(a), (b)]、ペア密度波状態へ相転移すると有限の超伝導ギャップが開く [図 4.27(c)]。p 波超伝導との混成により、三層系 D+p 波超伝導体のペア密度波状態もフルギャップとなる。

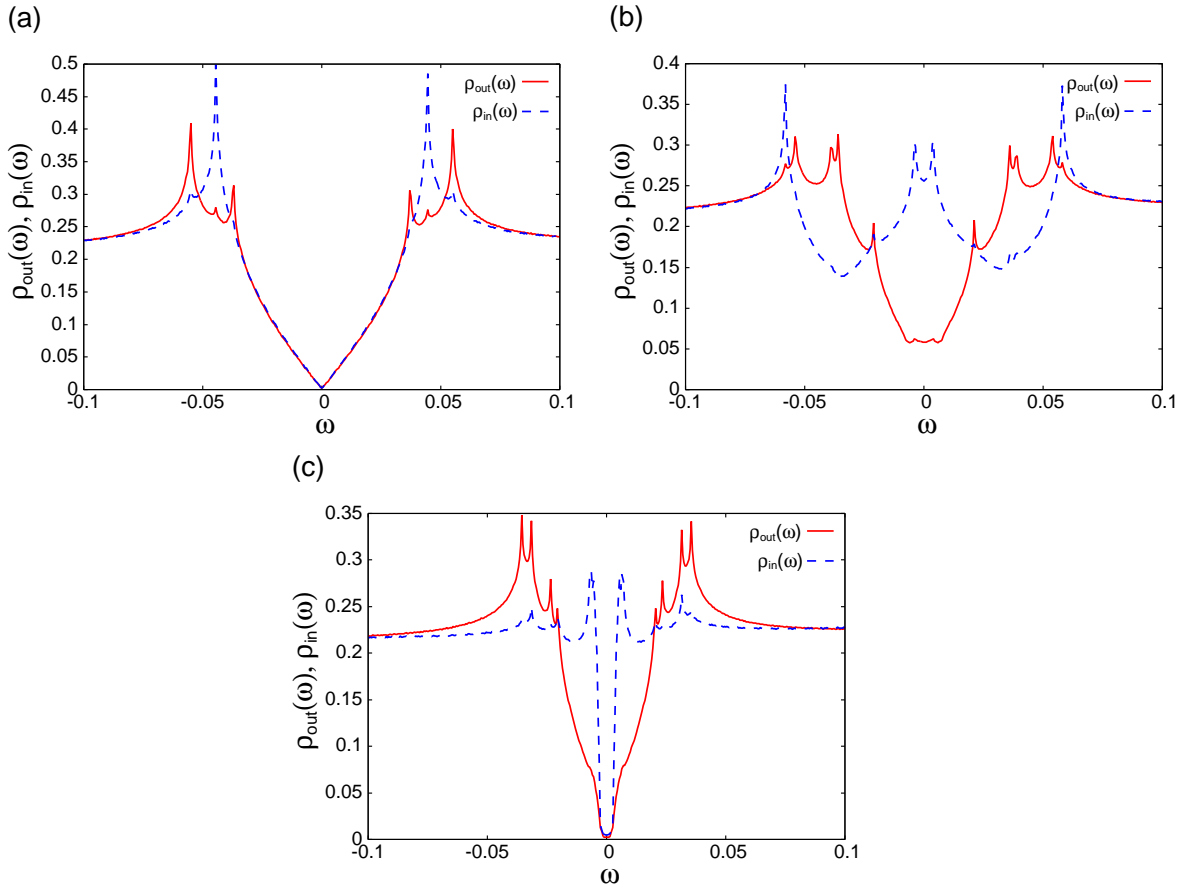


図 4.27 三層系 d 波超伝導体の各層における状態密度。赤の実線が外側の層の状態密度 $\rho_{\text{out}}(\omega) = \rho_1(\omega) = \rho_3(\omega)$ 、青の点線が内側の層の状態密度 $\rho_{\text{in}}(\omega) = \rho_2(\omega)$ を示している。(a) $\mu_B H_z = 0$ (BCS 状態) (b) $\mu_B H_z = 0.048$ (ペア密度波状態への転移近傍の BCS 状態) (c) $\mu_B H_z = 0.072$ (ペア密度波状態) での結果である。温度 $T = 0.002$ における各磁場での秩序変数を用いた。

4.7 まとめ

この章では、層に垂直な磁場中で実現する新奇超伝導状態について議論した。s 波超伝導、d 波超伝導どちらの場合においても、超伝導秩序変数が空間反転中心で符号を変えるペア密度波状態がスピン軌道相互作用と磁場により安定となることが分かった。これは、ペア密度波状態では Pauli 対破壊効果が抑制されるためである。それを反映して、ペア密度波状態の状態密度は、Fermi 面近傍でゼロ磁場での状態密度と同様の振る舞いを示す。これは STM により実験的に観測可能であると考えられる。

p 波超伝導とのパリティ混成を考えると、ペア密度波状態では空間的に一様なスピン三重項超伝導が誘起されることが分かった。つまり、Josephson 結合のような秩序変数の位相を検知する実験

手法で見ると、スピン三重項超伝導の様に見えることになる。言い換えれば、局所的な空間反転対称性の破れと磁場により、スピン一重項超伝導超伝導体からスピン三重項超伝導体を作り出すことができる。さらに興味深いことに、磁場中では非ユニタリースピン三重項超伝導が誘起されることが分かった。これは s 波、d 波超伝導と p 波超伝導の磁場誘起のパリティ混成により引き起こされる。

S+p 波超伝導体の場合、p 波超伝導とのパリティ混成の影響は状態密度のピークの分裂に現れる。また、非ユニタリースピン三重項超伝導が実現しているかどうかは、三層系ペア密度波状態における内側の層の状態密度を見れば判断可能である。より興味深いことは、D+p 波超伝導体の場合に起こる。D+p 波超伝導体におけるペア密度波状態は、d 波超伝導体にもかかわらずフルギャップとなる。

本論文では、超伝導体に対する磁場の効果として、Pauli 対破壊効果のみを考慮し、軌道対破壊効果は無視している。この仮定は Pauli 極限の超伝導体で正当化されるが、仮に軌道対破壊効果を考慮しても、十分に大きな Maki パラメーターを持つ超伝導体ではペア密度波状態が安定になると考えられる。なぜなら、超伝導渦は面内の空間変化のみを与えるためであり、面間は依然として一様であるからである。

5 多層系超伝導体におけるトポロジカル結晶超伝導

この章では、局所的な空間反転対称性が破れている多層系超伝導体におけるトポロジカル超伝導について議論する。まず初めに、トポロジカル超伝導について説明し、その後多層系超伝導体におけるミラー対称性について説明する。次に、二層系 $s+p$ 波超伝導体、三層系 $s+p$ 波超伝導体の結果を示し、最後に $d+p$ 波超伝導体の結果を示す。

5.1 序論

最近、物性物理学においてトポロジカル超伝導体が注目を集めている [36–39, 76–88]。トポロジカル超伝導体とは、準粒子の波動関数が非自明なトポロジーを持つ超伝導体である。その特徴の一つとして、系の境界（表面や渦の中など）に束縛されたギャップレスの励起状態（Andreev 束縛状態）の存在が挙げられる。系の境界に束縛されたギャップレス状態は、系の持つ「トポロジカルな性質」によりその存在が保証されている。この関係は「バルク・エッジ対応」と呼ばれている。また、このギャップレス状態は、超伝導体の持つ粒子・正孔対称性により、反粒子が自分自身である Majorana フェルミオンとして記述することができる。Majorana フェルミオンの存在により、超伝導体中の渦系が非可換統計に従うため、量子計算への応用が盛んに議論されている [89, 90]。

今考えている系がトポロジカル超伝導になるかどうか、なるならばどのようなトポロジカル数で特徴づけられるのかについては、Schnyder らにより得られたトポロジカル相の周期表 [78] を参照すればよい。表 5.1 にそれを示す。この周期表は、時間反転対称性、粒子正孔対称性及びこれらを組み合わせたカイラル対称性にに基づき導出されたものである。

トポロジカル超伝導体の候補として、これまでに Sr_2RuO_4 [91], UPt_3 などのウラン化合物 [50, 51]、空間反転対称性が破れた超伝導体 [11] などが研究されてきた。上にあげた物質のほとんどがスピン三重項超伝導体、つまり奇パリティ超伝導体であるが、これは偶然ではない。奇パリティ超伝導体は正常状態の Fermi 面が奇数枚ならばトポロジカル超伝導体となることが Sato [82] 及び Fu と Berg [85] により示されている。そのため、奇パリティ超伝導体はトポロジカル超伝導体の有力な候補となっている。

第 4 章で議論したペア密度波状態は、パリティで分類すると実は奇パリティ超伝導状態である。そのため、トポロジカル超伝導となることが強く期待される。実際、Nakosai らはゼロ磁場での二層系ペア密度波状態がトポロジカル超伝導（クラス DIII）となることを指摘している [92]。一方、本研究で明かとなったことは、ペア密度波状態は広い磁場領域で安定となることである。そのため、磁場中でのトポロジカル超伝導を考える必要がある。磁場中では時間反転対称性が破れるため、表 5.1 のクラス D に属することになる。二次元のクラス D は整数のトポロジカル数を持ち得るが、それは Chern 数である [86, 93, 94]。ペア密度波状態が安定となる磁場領域で Chern 数が有限となる場合を考えてみる。有限の Chern 数を得るためには時間反転対称性が破れている必要があるため、ゼロ磁場では Chern 数は 0 である。磁場中ですぐに Chern 数が有限になることはな

クラス	対称性			空間次元						
	TRS	PHS	CS	1	2	3	4	5	6	7
A	0	0	0	0	Z	0	Z	0	Z	0
AIII	0	0	1	Z	0	Z	0	Z	0	Z
AI	+1	0	0	0	0	0	2Z	0	Z ₂	Z ₂
BDI	+1	+1	1	Z	0	0	0	2Z	0	Z ₂
D	0	+1	0	Z ₂	Z	0	0	0	2Z	0
DIII	-1	+1	1	Z ₂	Z ₂	Z	0	0	0	2Z
AII	-1	0	0	0	Z ₂	Z ₂	Z	0	0	0
CII	-1	-1	1	2Z	0	Z ₂	Z ₂	Z	0	0
C	0	-1	0	0	2Z	0	Z ₂	Z ₂	Z	0
CI	+1	-1	1	0	0	2Z	0	Z ₂	Z ₂	Z

表 5.1 Schnyder らにより得られたトポロジカル相の周期表 [78]。各対称性クラスは時間反転対称性 (TRS)、粒子正孔対称性 (PHS)、カイラル対称性 (CS) の有無によって定義されている。「Z」、「Z₂」、「2Z」はそれぞれ整数、パナリー数、偶数のトポロジカル数で特徴づけられるトポロジカル相が存在し得ることを表しており、「0」はトポロジカル相が存在し得ないことを表している。

く、有限の Chern 数を得るためには一度超伝導ギャップを閉じる必要がある。これは、トポロジカル数はギャップを閉じない限りその値を変えないためである [81]。しかし、すでに示したようにペア密度波状態では Pauli 対破壊効果が抑制されるため、超伝導ギャップは閉じない。よって、Chern 数は 0 のままであり、磁場中のペア密度波状態はトポロジカルに自明である、という結論が得られる。

上記の議論はトポロジカル相の周期表に則ったものである。しかし、この周期表では時間反転対称性、粒子正孔対称性、カイラル対称性しか考慮されていない。実勢にはこの他にも多くの対称性があり、その中でも重要な対称性の一つに、結晶の対称性がある。最近の研究により、結晶の対称性により保護されたトポロジカル相の存在が明らかとなり [95–102]、トポロジカル結晶超伝導と名づけられた。これまでの所、ミラー対称性、回転対称性、磁気点群による分類がなされている。トポロジカル結晶超伝導体、超流動体の候補として ³He [96], Sr₂RuO₄ [99], UPt₃ [101] が議論されている。

第 1 章で述べたとおり、多層系超伝導体ではミラー対称性が保存する。そのため、ミラー対称性によって保護されたトポロジカル相の実現が期待される。以下では、多層系超伝導体のミラー対称性に注目したトポロジカル結晶超伝導の研究結果について述べる。

5.2 多層系超伝導体におけるミラー対称性とミラー Chern 数

本論文で注目する結晶の対称性は、 xy 平面に対するミラー対称性である。ここでは、多層系超伝導体におけるミラー対称性について考えてみる。

まず、 xy 平面に対するミラー操作 $z \rightarrow -z$ で系の持つ自由度がどのような変換を受けるか考える。考慮すべき自由度は、波数 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 、スピン $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$ 、そして層の自由度 m である。ミラー操作で波数は $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \rightarrow (k_x, k_y, -k_z)$ と変換され、 k_z の符号が反転するが、本論文で用いている擬二次元模型では k_z の項は現れないため、波数について変更はない。一方、スピンは $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z) \rightarrow (-s_x, -s_y, s_z)$ と変換されるが、これはスピンを z 軸回りに $\pm\pi$ だけ回転させる操作と等価である。層の自由度は、反転中心層を境にインデックスを入れ替える必要がある。結果として、 xy 平面に対するミラー操作 \mathcal{M}_{xy} は

\mathcal{M}_{xy} = (スピンを z 軸回りに π 回転) \times (層のインデックスを反転中心層を境に入れ替える) となる。具体的な形を書くと、二層系では

$$\mathcal{M}_{xy} = \begin{pmatrix} i\sigma_z & 0 \\ 0 & i\sigma_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_z \\ i\sigma_z & 0 \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

であり、三層系では

$$\mathcal{M}_{xy} = \begin{pmatrix} i\sigma_z & 0 & 0 \\ 0 & i\sigma_z & 0 \\ 0 & 0 & i\sigma_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_0 \\ 0 & \sigma_0 & 0 \\ \sigma_0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i\sigma_z \\ 0 & i\sigma_z & 0 \\ i\sigma_z & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

である。実際にこの操作で正常状態のハミルトニアン (2.32), (2.33) をユニタリー変換すると、不変となっている。

次に、ミラー操作により超伝導秩序変数 $\Delta(\mathbf{k})$ がどのような変換を受けるか考える。BCS 状態では

$$\mathcal{M}_{xy}\Delta_{\text{BCS}}(\mathbf{k})\mathcal{M}_{xy}^T = \Delta_{\text{BCS}}(\mathbf{k}) \quad (5.3)$$

を得る。ここで、 $\Delta_{\text{BCS}}(\mathbf{k})$ は BCS 状態での超伝導秩序変数の行列表示である。よって BCS 状態は偶パリティ超伝導状態である。一方、ペア密度波状態では

$$\mathcal{M}_{xy}\Delta_{\text{PDW}}(\mathbf{k})\mathcal{M}_{xy}^T = -\Delta_{\text{PDW}}(\mathbf{k}) \quad (5.4)$$

となり、奇パリティ超伝導状態である。

以上から、BdG ハミルトニアン (2.31) を不変に保つミラー操作を構築することができる。偶パリティ BCS 状態では

$$\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^+ = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{xy} & 0 \\ 0 & \mathcal{M}_{xy}^* \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

となり、奇パリティペア密度波状態では

$$\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^- = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{xy} & 0 \\ 0 & -\mathcal{M}_{xy}^* \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

となる。± は偶パリティ、奇パリティを区別するためにつけた。この演算子 $\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^{\pm}$ を用いて BdG ハミルトニアンをユニタリー変換すると不変である。つまり

$$\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^{\pm} \mathcal{H}^{\pm}(\mathbf{k}) \tilde{\mathcal{M}}_{xy}^{\pm} = \mathcal{H}^{\pm}(\mathbf{k}) \quad (5.7)$$

を得る。ここで、 $\mathcal{H}^+(\mathbf{k})[\mathcal{H}^-(\mathbf{k})]$ は BCS 状態 (ペア密度状態) での BdG ハミルトニアンである。

式 (5.7) は $\mathcal{H}^{\pm}(\mathbf{k})$ と $\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^{\pm}$ が可換であることを意味している。そのため、 $\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^{\pm}$ の固有ベクトルを用いて $\mathcal{H}^{\pm}(\mathbf{k})$ をユニタリー変換すると、 $\mathcal{H}^{\pm}(\mathbf{k})$ は $\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^{\pm}$ の固有値 λ で特徴づけられるブロックにブロック対角化されることとなる。 $\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^{\pm}$ の固有値は $\lambda = \pm i$ であるため、 $\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^{\pm}$ を対角化する行列を U_{xy}^{\pm} とすると

$$U_{xy}^{\pm\dagger} \mathcal{H}^{\pm}(\mathbf{k}) U_{xy}^{\pm} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{\lambda=i}^{\pm}(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{\lambda=-i}^{\pm}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

となる。ここで、新しいトポロジカル数を定義することができる。それは、ミラー Chern 数 [96,99] と呼ばれるものであり、その定義は

$$\nu(\lambda) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y \epsilon^{ij} \partial_{k_i} \sum_{E_{\nu}^{\lambda}(\mathbf{k}) < 0} \langle u_{\nu}^{\lambda}(\mathbf{k}) | \partial_{k_j} u_{\nu}^{\lambda}(\mathbf{k}) \rangle \quad (5.9)$$

で与えられる。ここで、 $E_{\nu}^{\lambda}(\mathbf{k})$, $|u_{\nu}^{\lambda}(\mathbf{k})\rangle$ はそれぞれ $\mathcal{H}_{\lambda}^{\pm}(\mathbf{k})$ の固有値と固有ベクトルであり、右辺の和は占有されている状態、つまり $E_{\nu}^{\lambda}(\mathbf{k}) < 0$ の状態についての和を意味している。ミラー Chern 数はその定義から、明らかにミラー対称性が保存する場合にのみ定義可能である。以下では、ミラー Chern 数に基づくトポロジカル相の分類を行った。なお、ミラー Chern 数の計算において、文献 [103] の手法を用いた。

5.3 二層系 s+p 波超伝導体

この節では、二層系 s+p 波超伝導体に対する解析結果を紹介する。興味があるのはペア密度波状態におけるトポロジカルな性質であるが、以下では BCS 状態もトポロジカル超伝導になるかどうか、考察した。まず初めに BCS 状態の結果について述べ、その後ペア密度波状態の結果について示す。

5.3.1 BCS 状態

まず初めに、偶パリティ BCS 状態の結果について述べる。二層系 BCS 状態におけるミラー操作 $\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^+$ を対角化するユニタリー行列 U_{xy}^+ は

$$U_{xy}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 & -\sigma_z & 0 \\ \sigma_0 & 0 & \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_z & 0 & \sigma_z \\ 0 & \sigma_0 & 0 & \sigma_0 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

である。このユニタリー行列を用いて二層系 BCS 状態に対する BdG ハミルトニアン (8×8 行列) をユニタリー変換すると、以下の 4×4 行列にブロック対角化される。

$$\mathcal{H}_{\lambda=\pm i}^+(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_2(\mathbf{k}) \pm t_{\perp} \sigma_z & i[\psi(\mathbf{k})\sigma_0 - \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] \sigma_y \\ -i[\psi^*(\mathbf{k})\sigma_0 - \mathbf{d}^*(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] \sigma_y & -\mathcal{H}_2^T(-\mathbf{k}) \pm t_{\perp} \sigma_z \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

ここで、d+p 波超伝導の場合も考慮に入れて、超伝導秩序変数の一般的な表式 [式 (2.25) にて、 $q = 0$ としたもの] を用いた。次に、このブロック対角化された行列のトポロジカルクラスを考えしてみる。元の BdG ハミルトニアン $\mathcal{H}^+(\mathbf{k})$ に対する時間反転対称性、粒子正孔対称性、カイラル対称性は

$$T\mathcal{H}^+(\mathbf{k})T^{\dagger} = \mathcal{H}^{+*}(-\mathbf{k}) \quad (5.12)$$

$$P\mathcal{H}^+(\mathbf{k})P^{\dagger} = -\mathcal{H}^{+T}(-\mathbf{k}) \quad (5.13)$$

$$C\mathcal{H}^+(\mathbf{k})C^{\dagger} = -\mathcal{H}^+(\mathbf{k}) \quad (5.14)$$

である。ここで T, P, C はそれぞれ 8×8 行列で

$$T = \begin{pmatrix} i\sigma_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\sigma_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\sigma_y \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

$$C = PT^{\dagger} \quad (5.17)$$

である。ブロック対角化したハミルトニアンのクラスを考察するため、式 (5.12), (5.13), (5.14) を U_{xy}^+ でユニタリー変換する。すると、次式を得る。

$$T_{\text{BCS}} \begin{pmatrix} \mathcal{H}_i^+(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{-i}^+(\mathbf{k}) \end{pmatrix} T_{\text{BCS}}^{\dagger} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_i^{+*}(-\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{-i}^{+*}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

$$P_{\text{BCS}} \begin{pmatrix} \mathcal{H}_i^+(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{-i}^+(\mathbf{k}) \end{pmatrix} P_{\text{BCS}}^{\dagger} = \begin{pmatrix} -\mathcal{H}_i^{+T}(-\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -\mathcal{H}_{-i}^{+T}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

$$C_{\text{BCS}} \begin{pmatrix} \mathcal{H}_i^+(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{-i}^+(\mathbf{k}) \end{pmatrix} C_{\text{BCS}}^{\dagger} = \begin{pmatrix} -\mathcal{H}_i^+(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -\mathcal{H}_{-i}^+(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

ここで、 $T_{\text{BCS}}, P_{\text{BCS}}, C_{\text{BCS}}$ はそれぞれ T, P, C を U_{xy}^+ でユニタリー変換したもので

$$T_{\text{BCS}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i\sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\sigma_y \\ i\sigma_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\sigma_y & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

$$P_{\text{BCS}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \sigma_0 \\ 0 & 0 & \sigma_0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 & 0 & 0 \\ \sigma_0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

$$C_{\text{BCS}} = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_y & 0 & 0 \\ -i\sigma_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\sigma_y \\ 0 & 0 & -i\sigma_y & 0 \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

である。最終的に、時間反転対称性 (5.18) は

$$\begin{pmatrix} i\sigma_y & 0 \\ 0 & i\sigma_y \end{pmatrix} \mathcal{H}_i^+(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} -i\sigma_y & 0 \\ 0 & -i\sigma_y \end{pmatrix} = \mathcal{H}_{-i}^{+*}(-\mathbf{k}) \quad (5.24)$$

となる。同様に、粒子正孔対称性は

$$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{H}_i^+(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} = -\mathcal{H}_{-i}^{+T}(-\mathbf{k}) \quad (5.25)$$

となり、カイラル対称性は

$$\begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_y \\ -i\sigma_y & 0 \end{pmatrix} \mathcal{H}_\lambda^+(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_y \\ i\sigma_y & 0 \end{pmatrix} = -\mathcal{H}_\lambda^+(\mathbf{k}) \quad (5.26)$$

となる。元の BdG ハミルトニアン $\mathcal{H}^+(\mathbf{k})$ が時間反転対称性を持つとは、式 (5.24) を満たすことと同義である。一方、ブロック対角化されたハミルトニアン $\mathcal{H}_{\pm i}^+(\mathbf{k})$ が時間反転対称性を持つのは、 $\mathcal{H}_i^+(\mathbf{k}) = \mathcal{H}_{-i}^+(\mathbf{k})$ がかつ式 (5.24) を満たした場合のみである。粒子正孔対称性についても同様のことが言える。一方、カイラル対称性は、ブロック対角化されたハミルトニアンがカイラル対称性を持つためには、 $\mathcal{H}_i^+(\mathbf{k}) = \mathcal{H}_{-i}^+(\mathbf{k})$ を満たす必要がなく、単に式 (5.26) を満たせばよい。

式 (5.24), (5.25), (5.26) を用いてブロック対角化した BdG ハミルトニアンのクラスを分類した。結果を表 5.2 にまとめる。興味あるパラメータ領域は $t_\perp \neq 0$ なので、以下ではその場合に限定する。

	$t_\perp = 0, H_z = 0$	$t_\perp \neq 0, H_z = 0$	$t_\perp = 0, H_z \neq 0$	$t_\perp \neq 0, H_z \neq 0$
BCS 状態	DIII	AIII	D	A
ペア密度波状態	DIII	D	D	D

表 5.2 二層系 BCS 状態およびペア密度波状態におけるブロック対角化されたハミルトニアンの対称性クラス。

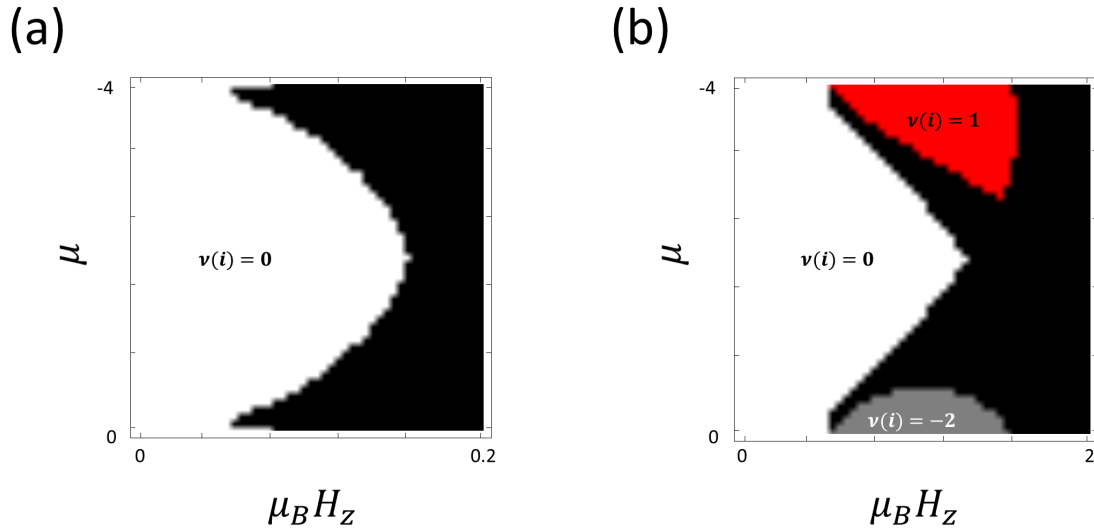


図 5.1 二層系 BCS 状態におけるミラー Chern 数 $\nu(i)$ 。縦軸は化学ポテンシャル μ 、横軸は磁場 $\mu_B H_z$ である。計算に用いたパラメータは (a) $\alpha = 0.3$, $t_{\perp} = 0.1$, $\Delta^s = 0.05$, $a = b = 0$ (b) $\alpha = 0.3$, $t_{\perp} = 0.1$, $\Delta^s = 0.5$, $a = b = 0$ である。ミラー Chern 数ごとに色分けをした。黒の領域はギャップレスであることを意味している。

まず、ゼロ磁場での BCS 状態のトポロジカルな性質について考察する。この場合、周期表のクラス AIII に属することとなる。表 5.1 から、二次元のクラス AIII はトポロジカル超伝導になり得ないことが分かる。よって、ゼロ磁場での二層系 BCS 状態はトポロジカルに自明である。

次に、磁場中での BCS 状態について考える。磁場中では、クラス A に属し、整数のトポロジカル数、つまりミラー Chern 数で特徴づけられるトポロジカル超伝導になることが可能である。図 5.1 にミラー Chern 数の計算結果を示す。現実的なパラメータ $t_{\perp} \gg |\Delta^s|$ では磁場の印加とともに超伝導ギャップが潰れてしまい、トポロジカル超伝導にはなれない [図 5.1(a)]。一方、 $t_{\perp} \ll |\Delta^s|$ の場合には、有限のミラー Chern 数が得られる [図 5.1(b)]。なお、前者の方が現実的なパラメータとなっているため、二層系 BCS 状態がトポロジカル超伝導になるのは難しいと考えられる。

5.3.2 ペア密度波状態

次に、二層系ペア密度波状態のトポロジカルな性質を議論する。ペア密度波状態での BdG ハミルトニアン $\mathcal{H}^-(\mathbf{k})$ は、ミラー操作 $\tilde{\mathcal{M}}_{xy}^-$ を対角化するユニタリー行列

$$U_{xy}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 & -\sigma_z & 0 \\ \sigma_0 & 0 & \sigma_0 & 0 \\ 0 & \sigma_z & 0 & -\sigma_z \\ 0 & \sigma_0 & 0 & \sigma_0 \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

を用いてユニタリー変換すると、以下のようにブロック対角化される。

$$\mathcal{H}_{\lambda=\pm i}^-(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_2(\mathbf{k}) \pm t_{\perp} \sigma_z & -i[\psi(\mathbf{k})\sigma_0 - \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] \sigma_y \\ i[\psi^*(\mathbf{k})\sigma_0 - \mathbf{d}^*(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] \sigma_y & -\mathcal{H}_2^T(-\mathbf{k}) \mp t_{\perp} \sigma_z \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

ブロック対角化されたハミルトニアンクラスは、BCS 状態での手順と同様に決めることができる。時間反転対称性、粒子性対称性はそれぞれ

$$\begin{pmatrix} i\sigma_y & 0 \\ 0 & i\sigma_y \end{pmatrix} \mathcal{H}_i^-(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} -i\sigma_y & 0 \\ 0 & -i\sigma_y \end{pmatrix} = \mathcal{H}_{-i}^*(-\mathbf{k}) \quad (5.29)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{H}_{\pm i}^-(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} = -\mathcal{H}_{\pm i}^{-T}(-\mathbf{k}) \quad (5.30)$$

となる。式 (5.28) と式 (5.30) を見比べると、常に粒子正孔対称性を持つことが分かる。そのため、カイラル対称性については考える必要はない。二層系ペア密度波状態のクラスを表 5.2 にまとめた。

二層系 s+p 波超伝導体におけるペア密度波状態のトポロジカルな性質について考察する。式 (5.28) を見ると、これは磁場中の空間反転対称性が破れた二次元超伝導体のハミルトニアンとまったく等価であることが分かる [11]。つまり、二層系ペア密度波状態は空間反転対称性が破れた二次元超伝導体と等価である。唯一異なる点は、磁場が $\mu_B H_z \pm t_{\perp}$ と t_{\perp} だけ繰り込まれている点である。空間反転対称性が破れた二次元 s+p 波超伝導体のトポロジカルな性質は、既によく調べられている [36, 38, 39]。その結果を引用すると、p 波超伝導が支配的な場合はトポロジカル超伝導となる。s 波超伝導が支配的な場合でも、 $\sqrt{(4t + \mu)^2 + |\Delta^s|^2} < \mu_B H_z \pm t_{\perp} < \sqrt{(4t - \mu)^2 + |\Delta^s|^2}$ ($\mu < -2t$ の時) $\sqrt{\mu^2 + |\Delta^s|^2} < \mu_B H_z \pm t_{\perp} < \sqrt{(4t - \mu)^2 + |\Delta^s|^2}$ ($-2t < \mu < 0$ の時) を満たすことにより、トポロジカル超伝導となる。

空間反転対称性が破れた二次元 S+p 波超伝導体は前述したとおり、トポロジカル超伝導体となるが、そのためには巨大な磁場が必要となる。一方、二層系 S+p 波超伝導体では、トポロジカル超伝導体となるのに磁場を必要としない。なぜなら、層間遷移 t_{\perp} が磁場の働きをするためである。Nakosai 等が示したように [92]、ゼロ磁場でも t_{\perp} が前述した条件を満たせば、トポロジカル結晶超伝導となることができる。また、その時に磁場が印加されても、前述した条件を満たす限り、トポロジカル超伝導となる。その場合、Chern 数は 0 であるが、ミラー Chern 数は $\nu(\pm i) = \pm 1$ となる。つまり、超伝導ギャップが潰れないような低磁場領域では、二層系 S+p 波超伝導体のペア密度波状態は、ミラー対称性によって保護されたトポロジカル結晶超伝導となる。

5.4 三層系 s+p 波超伝導体

ここでは、三層系 s+p 波超伝導体のトポロジカル相について議論する。初めに、BCS 状態の結果について述べる。その後、ペア密度波状態の結果を示す。

5.4.1 BCS 状態

三層系 BCS 状態におけるミラー操作 \tilde{M}_{xy} を対角化するユニタリー行列は

$$U_{xy}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 & 0 & -\sigma_z & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}(\sigma_0 + \sigma_z) & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) & 0 \\ \sigma_0 & 0 & 0 & \sigma_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma_z & 0 & 0 & \sigma_z \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}(\sigma_0 - \sigma_z) & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_0 & 0 & 0 & \sigma_0 \end{pmatrix} \quad (5.31)$$

となる。このユニタリー行列を用いて三層系 BCS 状態をブロック対角化すると

$$\mathcal{H}_i^+(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \xi_\uparrow(\mathbf{k}) & \alpha k_+ & \sqrt{2}t_\perp & 0 & d_{\text{out}-}(\mathbf{k}) & \psi_{\text{out}}(\mathbf{k}) \\ \alpha k_- & \xi_\downarrow(\mathbf{k}) & 0 & 0 & -\psi_{\text{out}}(\mathbf{k}) & -d_{\text{out}+}(\mathbf{k}) \\ \sqrt{2}t_\perp & 0 & \xi_\uparrow(\mathbf{k}) & \psi_{\text{in}}(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \psi_{\text{in}}^*(\mathbf{k}) & -\xi_\downarrow(\mathbf{k}) & 0 & -\sqrt{2}t_\perp \\ d_{\text{out}-}^*(\mathbf{k}) & -\psi_{\text{out}}^*(\mathbf{k}) & 0 & 0 & -\xi_\uparrow(\mathbf{k}) & \alpha k_- \\ \psi_{\text{out}}^*(\mathbf{k}) & -d_{\text{out}+}^*(\mathbf{k}) & 0 & -\sqrt{2}t_\perp & \alpha k_+ & -\xi_\downarrow(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

$$\mathcal{H}_{-i}^+(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \xi_\uparrow(\mathbf{k}) & \alpha k_+ & 0 & 0 & d_{\text{out}-}(\mathbf{k}) & \psi_{\text{out}}(\mathbf{k}) \\ \alpha k_- & \xi_\downarrow(\mathbf{k}) & \sqrt{2}t_\perp & 0 & -\psi_{\text{out}}(\mathbf{k}) & -d_{\text{out}+}(\mathbf{k}) \\ 0 & \sqrt{2}t_\perp & \xi_\downarrow(\mathbf{k}) & -\psi_{\text{in}}(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\psi_{\text{in}}^*(\mathbf{k}) & -\xi_\uparrow(\mathbf{k}) & -\sqrt{2}t_\perp & 0 \\ d_{\text{out}-}^*(\mathbf{k}) & -\psi_{\text{out}}^*(\mathbf{k}) & 0 & -\sqrt{2}t_\perp & -\xi_\uparrow(\mathbf{k}) & \alpha k_- \\ \psi_{\text{out}}^*(\mathbf{k}) & -d_{\text{out}+}^*(\mathbf{k}) & 0 & 0 & \alpha k_+ & -\xi_\downarrow(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (5.33)$$

を得る。ここで、 $\xi_s(\mathbf{k}) = \xi(\mathbf{k}) - (\sigma_z)_{ss}\mu_B H_z$, $k_\pm = \sin k_y \pm i \sin k_x$, $d_{\text{in(out)}\pm}(\mathbf{k}) = d_{\text{in(out)},x}(\mathbf{k}) \pm i d_{\text{in(out)},y}(\mathbf{k})$ である。ブロック対角化されたハミルトニアン $\mathcal{H}_{\pm i}^+(\mathbf{k})$ のクラスは、二層系の場合と同様に求められる。時間反転対称性、粒子正孔対称性、カイラル対称性はそれぞれ

$$\begin{pmatrix} -i\sigma_y & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_z & 0 \\ 0 & 0 & -i\sigma_y \end{pmatrix} \mathcal{H}_i^+ \begin{pmatrix} i\sigma_y & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_z & 0 \\ 0 & 0 & i\sigma_y \end{pmatrix} = \mathcal{H}_{-i}^{+*}(-\mathbf{k}) \quad (5.34)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_0 \\ 0 & \sigma_x & 0 \\ \sigma_0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{H}_i^+(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_0 \\ 0 & \sigma_x & 0 \\ \sigma_0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\mathcal{H}_{-i}^{+T}(-\mathbf{k}) \quad (5.35)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -i\sigma_y \\ 0 & \mp i\sigma_y & 0 \\ -i\sigma_y & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{H}_{\pm i}^+(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & i\sigma_y \\ 0 & \pm i\sigma_y & 0 \\ i\sigma_y & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\mathcal{H}_{\pm i}^+(\mathbf{k}) \quad (5.36)$$

となる。二層系と同様に考えて得たハミルトニアンのクラスを表 5.3 にまとめた。二層系同様に、 $t_\perp \neq 0$, $H_z = 0$ の時クラス AIII であり、 $t_\perp \neq 0$, $H_z \neq 0$ の時クラス A となる。そのため、ゼロ

	$t_{\perp} = 0, H_z = 0$	$t_{\perp} \neq 0, H_z = 0$	$t_{\perp} = 0, H_z \neq 0$	$t_{\perp} \neq 0, H_z \neq 0$
BCS 状態	DIII	AIII	A	A

表 5.3 三層系 BCS 状態におけるブロック対角化されたハミルトニアンクラス。

磁場ではトポロジカルに自明であり、磁場中ではトポロジカル超伝導になる可能性がある。しかし、三層系 BCS 状態では、第 4 章で示した通り内側の層が Pauli 対破壊効果の影響を受けやすいため、超伝導ギャップがすぐに潰れてしまう。そのため、有限のミラー Chern 数は得ることができない。結果として、三層系 BCS 状態はトポロジカルに自明である。

5.4.2 ペア密度波状態

三層系 BCS 状態はトポロジカルに自明であったが、三層系ペア密度波状態はトポロジカル結晶超伝導となる。以下にそれを示す。

三層系ペア密度波状態に対するミラー操作を対角化するユニタリ行列は

$$U_{xy}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 & 0 & -\sigma_z & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}(\sigma_0 + \sigma_z) & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) & 0 \\ \sigma_0 & 0 & 0 & \sigma_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z & 0 & 0 & -\sigma_z \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}(\sigma_0 - \sigma_z) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_0 & 0 & 0 & \sigma_0 \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

となる。これを用いて BdG ハミルトニアンをブロック対角化すると

$$\mathcal{H}_i^-(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) & \alpha k_+ & \sqrt{2}t_{\perp} & 0 & -d_{\text{out}-}(\mathbf{k}) & -\psi_{\text{out}}(\mathbf{k}) \\ \alpha k_- & \xi_{\downarrow}(\mathbf{k}) & 0 & 0 & \psi_{\text{out}}(\mathbf{k}) & d_{\text{out}+}(\mathbf{k}) \\ \sqrt{2}t_{\perp} & 0 & \xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) & -d_{\text{in}-}(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -d_{\text{in}-}^*(\mathbf{k}) & -\xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) & -\sqrt{2}t_{\perp} & 0 \\ -d_{\text{out}-}^*(\mathbf{k}) & \psi_{\text{out}}^*(\mathbf{k}) & 0 & -\sqrt{2}t_{\perp} & -\xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) & \alpha k_- \\ -\psi_{\text{out}}^*(\mathbf{k}) & d_{\text{out}+}^*(\mathbf{k}) & 0 & 0 & \alpha k_+ & -\xi_{\downarrow}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (5.38)$$

$$\mathcal{H}_{-i}^-(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) & \alpha k_+ & 0 & 0 & -d_{\text{out}-}(\mathbf{k}) & -\psi_{\text{out}}(\mathbf{k}) \\ \alpha k_- & \xi_{\downarrow}(\mathbf{k}) & \sqrt{2}t_{\perp} & 0 & \psi_{\text{out}}(\mathbf{k}) & d_{\text{out}+}(\mathbf{k}) \\ 0 & \sqrt{2}t_{\perp} & \xi_{\downarrow}(\mathbf{k}) & d_{\text{in}+}(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_{\text{in}+}^*(\mathbf{k}) & -\xi_{\downarrow}(\mathbf{k}) & 0 & -\sqrt{2}t_{\perp} \\ -d_{\text{out}-}^*(\mathbf{k}) & \psi_{\text{out}}^*(\mathbf{k}) & 0 & 0 & -\xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) & \alpha k_- \\ -\psi_{\text{out}}^*(\mathbf{k}) & d_{\text{out}+}^*(\mathbf{k}) & 0 & -\sqrt{2}t_{\perp} & \alpha k_+ & -\xi_{\downarrow}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (5.39)$$

	$t_{\perp} = 0, H_z = 0, d_{\text{in}} = 0$	その他
PDW 状態	DIII	D

表 5.4 三層系 PDW 状態におけるブロック対角化されたハミルトニアンクラス。

を得る。時間反転対称性、粒子正孔対称性は

$$\begin{pmatrix} -i\sigma_y & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\sigma_y \end{pmatrix} \mathcal{H}_i^-(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} i\sigma_y & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 & i\sigma_y \end{pmatrix} = \mathcal{H}_{-i}^{-*}(-\mathbf{k}) \quad (5.40)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_0 \\ 0 & \sigma_x & 0 \\ \sigma_0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{H}_i^-(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_0 \\ 0 & \sigma_x & 0 \\ \sigma_0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\mathcal{H}_{-i}^{-T}(-\mathbf{k}) \quad (5.41)$$

を用いてこれまでと同様に考えればよい。常に粒子正孔対称性があるため、カイラル対称性は考えなくてもよい。ブロック対角化されたハミルトニアンのクラスを表 5.4 にまとめた。 $t_{\perp} \neq 0$ の場合、常にクラス D に属するため、有限のミラー Chern 数を持ち得る。

図 5.2、5.3 に S+p 波超伝導体に対する $\mathcal{H}_i^-(\mathbf{k})$, $\mathcal{H}_{-i}^-(\mathbf{k})$ のミラー Chern 数の計算結果を示す。二層系ペア密度波状態と異なり、三層系ペア密度波状態は広いパラメーター領域で有限のミラー Chern 数を持つ。

なぜ三層系ペア密度波状態は広い領域で有限のミラー Chern 数を持つのか考察する。そのためには、ハミルトニアンを断熱変化させると都合がよい。系の持つトポロジカルな性質は、系の対称性を変えず、さらにギャップも閉じない限り変化しない。そのため、もしギャップを閉じることなく $t_{\perp} \rightarrow 0$ とすることができたならば、 $t_{\perp} \neq 0$ の場合のトポロジカルな性質は、 $t_{\perp} = 0$ の時のそれに等しい。なお、ブロック対角化されたハミルトニアン (5.38), (5.39) において、 $t_{\perp} = 0$ としてもハミルトニアンのクラスは変わらない。結果として、ブロック対角化されたハミルトニアンはさらに二つのブロックに分けられる (図 5.4 参照)。一つは空間反転対称性が破れた二次元超伝導体、もう一方はスピンレスのスピン三重項超伝導体である。S+p 波超伝導体の場合、後者はカイラル p 波超伝導体となる。したがって、三層系ペア密度波状態のトポロジカル相は「空間反転対称性が破れた二次元超伝導体」+「スピン三重項超伝導体」とトポロジカルに等しい。カイラル p 波超伝導体はトポロジカル超伝導状態として知られており [76]、その Chern 数 $\nu_p(\lambda)$ は

$$\nu_p(\lambda) = -\frac{1}{2} \sum_{\eta_{\lambda}(\mathbf{k}^0)=0} \text{sgn}[\xi_{\lambda}(\mathbf{k}^0)] \text{sgn}[\det \partial_{k_i} \eta_{\lambda,j}(\mathbf{k}^0)] \quad (5.42)$$

で与えられる [81, 88]。ここで、 $\xi_{\lambda}(\mathbf{k})$, $\eta_{\lambda}(\mathbf{k})$ は $\lambda = i$ の時 $\xi_i(\mathbf{k}) = \xi_{\uparrow}(\mathbf{k})$, $\eta_i(\mathbf{k}) = -d_{\text{in}-}(\mathbf{k})$ であり、 $\lambda = -i$ の場合 $\xi_{-i}(\mathbf{k}) = \xi_{\downarrow}(\mathbf{k})$, $\eta_{-i}(\mathbf{k}) = d_{\text{in}+}(\mathbf{k})$ である。また、 $\eta_{\lambda,i}(\mathbf{k})$ ($i=1,2$) は $\eta_{\lambda,1} = \text{Re}\eta_{\lambda}(\mathbf{k})$, $\eta_{\lambda,2} = \text{Im}\eta_{\lambda}(\mathbf{k})$ であり、右辺の和は $\eta_{\lambda}(\mathbf{k}^0) = 0$ を満たす \mathbf{k}^0 についての和である。 $\nu_p(\lambda)$ は広いパラメーター領域で有限の値を持つ。そのため三層系 S+p 波超伝導体におけるペア密度波状態は広いパラメーター領域でトポロジカルに非自明となる。実際にギャップを閉じる

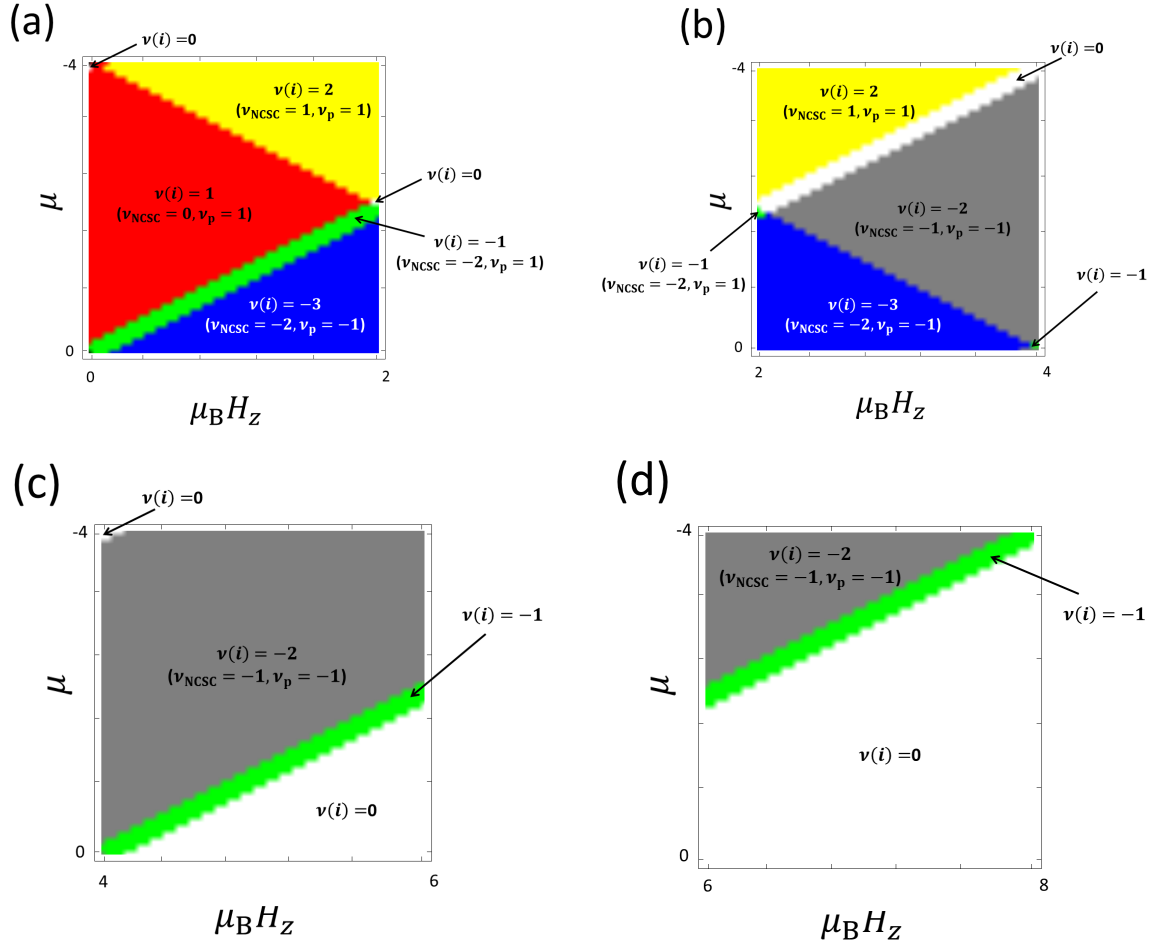


図 5.2 $\mathcal{H}_i^-(k)$ の固有ベクトルを用いて計算されたミラー Chern 数 $\nu(i)$ 。計算に用いたパラメータは $\alpha = 0.3$, $t_{\perp} = 0.1$, $\Delta_{\text{out}}^s = 0.05$, $a_{\text{out}} = a_{\text{in}} = -0.005$, $b_{\text{out}} = b_{\text{in}} = 0.01$ である。これはギャップ方程式の計算結果 (図 4.16) を参考に決定した。縦軸は化学ポテンシャル $-4 < \mu < 0$ 、横軸は磁場 $\mu_B H_z$ で、(a) $0 < \mu_B H_z < 2$ (b) $2 < \mu_B H_z < 4$ (c) $4 < \mu_B H_z < 6$ (d) $6 < \mu_B H_z < 8$ の結果である。ミラー Chern 数ごとに色分けをした。黒の領域はギャップレスであることを意味している。

ことなく $t_{\perp} = 0$ とできる領域には、空間反転対称性が破れた二次元超伝導体を与える Chern 数 ν_{NCSC} 、カイラル p 波超伝導体を与える Chern 数 ν_p を図 5.2, 5.3 に示した。ほとんどの領域で、三層系 S+p 波超伝導体のトポロジカル相は、空間反転対称性が破れた二次元超伝導体とカイラル p 波超伝導体の和で理解することができる。この結果はパラメータ Δ^s , a_{out} , a_{in} , b_{out} , b_{in} の変化に対してほぼ変わらない。

現実的なパラメータ領域は、図 5.2(a), 5.3(a) の低磁場領域である。実際、既に得られた相図 4.6, 4.15 において計算された秩序変数を用いてミラー Chern 数を計算すると、 $\nu(\pm i) = \pm 1$ となる。Chern 数 ν は $\nu = \nu(i) + \nu(-i)$ で与えられるため、 $\nu(\pm i) = \pm 1$ の場合 $\nu = 0$ である。そのため、低磁場領域における三層系ペア密度波状態は広いパラメータ領域でトポロジカル結晶超伝

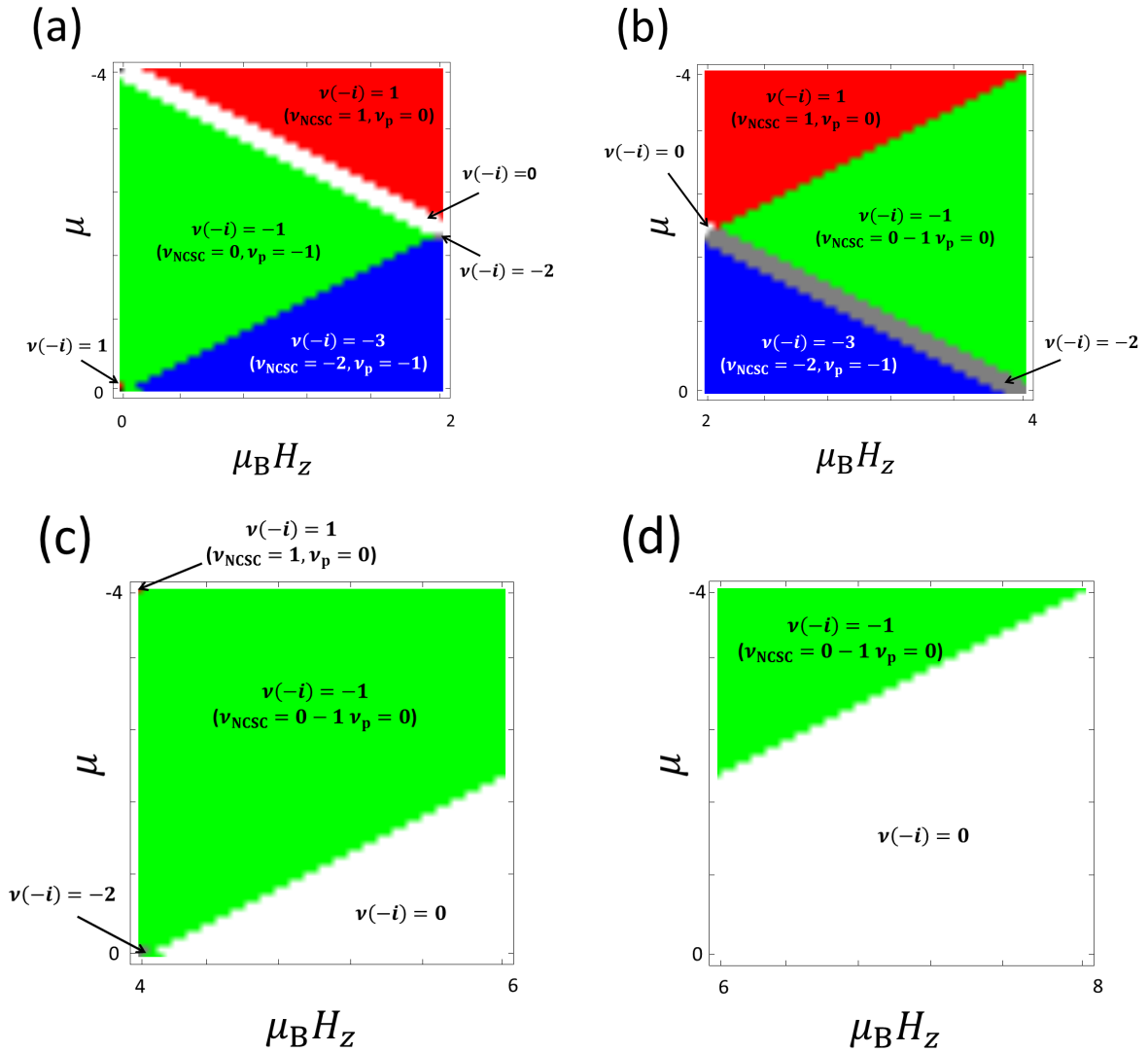


図 5.3 $\mathcal{H}_{-i}^-(k)$ の固有ベクトルを用いて計算されたミラー Chern 数。パラメータは図 5.2 と同じである。縦軸は化学ポテンシャル $-4 < \mu < 0$ 、横軸は磁場 $\mu_B H_z$ で、(a) $0 < \mu_B H_z < 2$ (b) $2 < \mu_B H_z < 4$ (c) $4 < \mu_B H_z < 6$ (d) $6 < \mu_B H_z < 8$ の結果である。ミラー Chern 数ごとに領域を色分けした。黒の領域はギャップレスであることを意味している。

導状態である。なお、トポロジカル結晶超伝導体となるためには、p 波超伝導とのパリティ混成は必ずしも必要としない。なぜなら、p 波超伝導とのパリティ混成が存在せずともペア密度波状態はフルギャップであり [図 4.9(c) 参照]、また $t_{\perp} \neq 0$ の場合ギャップを閉じることなく $d_m(k) \rightarrow 0$ とすることが可能であるためである。そのため、純粋な s 波超伝導からトポロジカル超伝導が得られる。

バルク・エッジ対応が成り立っているか確認するために、エッジ状態の計算を行った。y 方向には無限に広がっているが、x 方向には $i_x = 1$ と $i_x = L$ に端を持つ系を考える。ブロック対角化さ

$$\begin{pmatrix} \begin{array}{cc|cc|cc} \xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) & \alpha k_{+} & 0 & 0 & -d_{\text{out}-}(\mathbf{k}) & -\psi_{\text{out}}(\mathbf{k}) \\ \alpha k_{-} & \xi_{\downarrow}(\mathbf{k}) & 0 & 0 & \psi_{\text{out}}(\mathbf{k}) & d_{\text{out}+}(\mathbf{k}) \\ \hline 0 & 0 & \xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) & -d_{\text{in}-}(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -d_{\text{in}-}^{*}(\mathbf{k}) & -\xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ \hline -d_{\text{out}-}^{*}(\mathbf{k}) & \psi_{\text{out}}^{*}(\mathbf{k}) & 0 & 0 & -\xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) & \alpha k_{-} \\ -\psi_{\text{out}}^{*}(\mathbf{k}) & d_{\text{out}+}^{*}(\mathbf{k}) & 0 & 0 & \alpha k_{+} & -\xi_{\downarrow}(\mathbf{k}) \end{array} \end{pmatrix}$$



空間反転対称性が破れた二次元超伝導体



スピン三重項超伝導体

図 5.4 $t_{\perp} \rightarrow 0$ とした場合のハミルトニアン $\mathcal{H}_i^{-}(\mathbf{k})$ 。

れたハミルトニアンは x 方向に Fourier 変換すると

$$\mathcal{H}_i^{-}(k_y) = \begin{pmatrix} \hat{\xi}_{\uparrow}(k_y) & \alpha \hat{g}(k_y) & \sqrt{2}t_{\perp} 1_{N_x \times N_x} & 0 & \hat{d}_{\text{out}}^{-}(k_y) & -\Delta_{\text{out}}^{\text{s}} 1_{N_x \times N_x} \\ \alpha \hat{g}^{\dagger}(k_y) & \hat{\xi}_{\downarrow}(k_y) & 0 & 0 & \Delta_{\text{out}}^{\text{s}} 1_{N_x \times N_x} & \hat{d}_{\text{out}}^{+}(k_y) \\ \sqrt{2}t_{\perp} 1_{N_x \times N_x} & 0 & \hat{\xi}_{\uparrow}^{\dagger}(k_y) & \hat{d}_{\text{in}}^{-}(k_y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{d}_{\text{in}}^{+}(k_y) & -\hat{\xi}_{\uparrow}(k_y) & -\sqrt{2}t_{\perp} 1_{N_x \times N_x} & 0 \\ \hat{d}_{\text{out}}^{-\dagger}(k_y) & \Delta_{\text{out}}^{\text{s}*} 1_{N_x \times N_x} & 0 & -\sqrt{2}t_{\perp} 1_{N_x \times N_x} & -\hat{\xi}_{\uparrow}^{\dagger}(k_y) & \alpha \hat{g}^{\dagger}(k_y) \\ -\Delta_{\text{out}}^{\text{s}*} 1_{N_x \times N_x} & \hat{d}_{\text{out}}^{+\dagger}(k_y) & 0 & 0 & \alpha \hat{g}(k_y) & -\hat{\xi}_{\downarrow}(k_y) \end{pmatrix} \quad (5.43)$$

$$\mathcal{H}_{-i}^{-}(k_y) = \begin{pmatrix} \hat{\xi}_{\uparrow}^{\dagger}(k_y) & \alpha \hat{g}(k_y) & 0 & 0 & \hat{d}_{\text{out}}^{-}(k_y) & -\Delta_{\text{out}}^{\text{s}} 1_{N_x \times N_x} \\ \alpha \hat{g}^{\dagger}(k_y) & \hat{\xi}_{\downarrow}(k_y) & \sqrt{2}t_{\perp} 1_{N_x \times N_x} & 0 & \Delta_{\text{out}}^{\text{s}} 1_{N_x \times N_x} & \hat{d}_{\text{out}}^{+}(k_y) \\ 0 & \sqrt{2}t_{\perp} 1_{N_x \times N_x} & \hat{\xi}_{\downarrow}^{\dagger}(k_y) & \hat{d}_{\text{in}}^{+}(k_y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{d}_{\text{in}}^{+\dagger}(k_y) & -\hat{\xi}_{\downarrow}(k_y) & 0 & -\sqrt{2}t_{\perp} 1_{N_x \times N_x} \\ \hat{d}_{\text{out}}^{-\dagger}(k_y) & \Delta_{\text{out}}^{\text{s}*} 1_{N_x \times N_x} & 0 & 0 & -\hat{\xi}_{\uparrow}^{\dagger}(k_y) & \alpha \hat{g}^{\dagger}(k_y) \\ -\Delta_{\text{out}}^{\text{s}*} 1_{N_x \times N_x} & \hat{d}_{\text{out}}^{+\dagger}(k_y) & 0 & -\sqrt{2}t_{\perp} 1_{N_x \times N_x} & \alpha \hat{g}(k_y) & -\hat{\xi}_{\downarrow}(k_y) \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

$$\xi_{s,i_x,j_x}(k_y) = -t(\delta_{i_x+1,j_x} + \delta_{i_x-1,j_x}) - 2t \cos k_y \delta_{i_x,j_x} - \mu \delta_{i_x,j_x} - (\sigma_z)_{ss} \mu_B H_z \delta_{i_x,j_x} \quad (5.45)$$

$$g_{i_x,j_x}(k_y) = \frac{1}{2}(\delta_{i_x+1,j_x} - \delta_{i_x-1,j_x}) + \sin k_y \delta_{i_x,j_x} \quad (5.46)$$

$$d_{\text{out}(\text{in}),i_x,j_x}^{\pm}(k_x) = \frac{1}{2}(a_{\text{out}(\text{in})} \pm b_{\text{out}(\text{in})})(\delta_{i_x+1,j_x} - \delta_{i_x-1,j_x}) \mp (a_{\text{out}(\text{in})} \pm b_{\text{out}(\text{in})}) \sin k_y \delta_{i_x,j_x} \quad (5.47)$$

となる。ここで $1_{N_x \times N_x}$ は $N_x \times N_x$ の単位行列である。行列 (5.43), (5.44) を対角化して得たエネルギー固有値を図 5.5 に示す。ミラー Chern 数 $\nu(\pm i) = \pm 1$ を反映して、一つのカイラルエッジ状態がそれぞれのブロックから得られる。

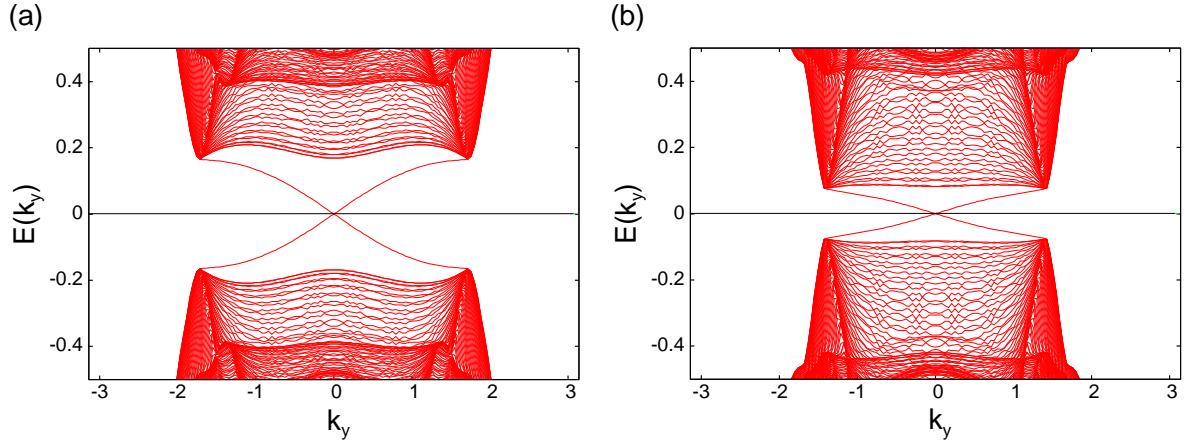


図 5.5 $x = 1$ と $x = 150$ に端を持つ系のエネルギー固有値。(a) $\lambda = i$ (b) $\lambda = -i$ のブロックのエネルギー固有値である。計算に用いたパラメーターは $\mu = -2$, $\mu_B H_z = 0.3$, $\alpha = 0.3$, $t_{\perp} = 0.1$, $\Delta_{\text{out}}^s = 0.5$, $a_{\text{out}} = a_{\text{in}} = -0.05$, $b_{\text{in}} = b_{\text{out}} = 0.1$ であり、ミラー Chern 数は $\nu(\pm i) = \pm 1$ である。これは図 5.2(a) [5.3(a)] の $\nu(i) = 1$ [$\nu(-i) = -1$] とトポロジカルに等しい。

5.5 d 波超伝導体

第 4 章で示したように、多層系 D+p 波超伝導体におけるペア密度波状態では有限の超伝導ギャップが開く。そのため、トポロジカル超伝導になることが期待されるが、S+p 波超伝導体と同様に、低磁場領域では Chern 数は 0 である。一方、D+p 波超伝導体においてもミラー対称性は保存するため、ミラー Chern 数で特徴づけられるトポロジカル相の実現可能性がある。ここでは、二層系、三層系 D+p 波超伝導体のトポロジカルな性質について考える。

5.5.1 二層系 D+p 波超伝導体

まず、二層系 D+p 波超伝導体の結果を示す。ミラー対称性を用いて BdG ハミルトニアンをブロック対角化すると、式 (5.28) を得る。そのため、二層系 D+p 波超伝導体のペア密度波状態は、空間反転対称性が破れた二次元 D+p 波超伝導体と等価である。よって、二層系 D+p 波超伝導体のペア密度波状態におけるトポロジカルな性質を明かにするためには、空間反転対称性が破れた二次元 D+p 波超伝導体のトポロジカルな性質を解明すればよい。

空間反転対称性が破れた二次元 d+P (B_1 対称性) 波超伝導体のトポロジカルな性質は Tada らによって既に調べられている [104] が、D 波超伝導が支配的な場合はいまだ研究されたことはない。したがって、空間反転対称性が破れた二次元 D+p 波超伝導体のトポロジカルな性質を調べる

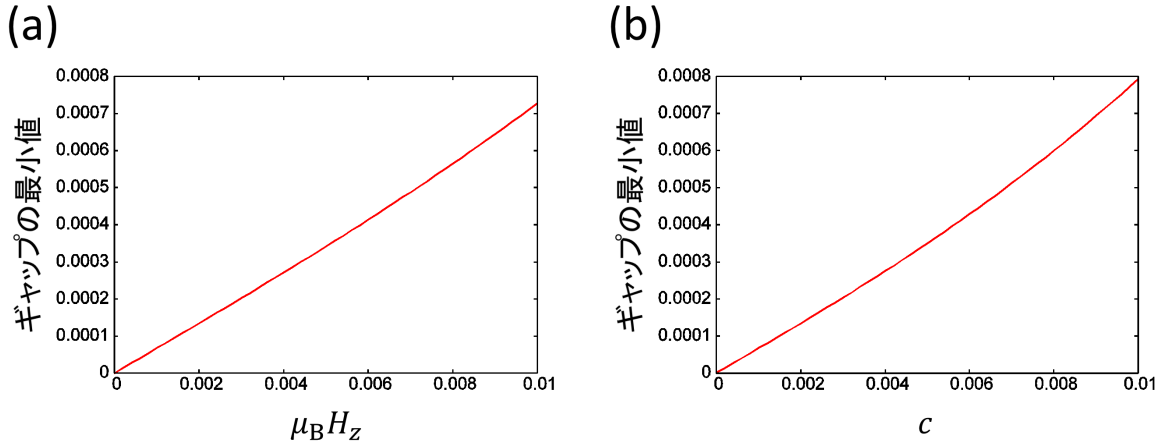


図 5.6 (a) 磁場及び (b) p 波超伝導とのパリティ混成による超伝導ギャップの最小値の変化。計算に用いたパラメータは (a) $N = 4602$, $\alpha = 0.3$, $\Delta^d = 0.05$, $c = 0.001$, $d = 0$ (b) $N = 3038$, $\alpha = 0.3$, $\Delta^d = 0.05$, $\mu_B H_z = 0.01$, $d = 0$ である。

ことにする。空間反転対称性が破れた二次元 D+p 波超伝導体のハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}s} \xi(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} + \alpha \sum_{\mathbf{k},s,s'} \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s'} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\Delta^d (\cos k_x - \cos k_y) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}] \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [-(c+d) k_- c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + (c-d) k_+ c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}] \quad (5.48)
 \end{aligned}$$

となる。 d -ベクトルは式 (4.20) で記述されると仮定した。つまり、パラメータ c がゼロ磁場で混成するスピン三重項超伝導（ヘリカル 3 状態）の割合を表し、パラメータ d が磁場中で混成するスピン三重項超伝導（ヘリカル 4 状態）に対応する。

d 波超伝導体は通常ギャップレスであるため、パリティ混成と磁場によりどのように有限の超伝導ギャップが開くか調べる必要がある。図 5.6 に磁場及び p 波超伝導とのパリティ混成による超伝導ギャップの変化を示す。磁場、パリティ混成どちらも存在しない場合ギャップレスであり、超伝導ギャップは磁場及び c について線形に増大することが分かる。

次に、D+p 波超伝導体における Chern 数を示す。Chern 数 ν は、ハミルトニアン (5.48) の固有値 $E_\nu(\mathbf{k})$ と固有ベクトル $|u_\nu(\mathbf{k})\rangle$ を用いて

$$\nu = \frac{i}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y \epsilon^{ij} \partial_{k_i} \sum_{E_\nu(\mathbf{k}) < 0} \langle u_\nu(\mathbf{k}) | \partial_{k_j} u_\nu(\mathbf{k}) \rangle \quad (5.49)$$

で計算される。まず初めに、ヘリカル 4 状態が混成しない場合の結果を図 5.7 に示す。広い領域で有限の Chern 数を持つトポロジカル超伝導状態となる。現実的な磁場領域 $\mu_B H_z < \Delta^p = 0.05$ において、 $\nu = -4$ となるが、これはトポロジカルには空間反転対称性が破れたカイラル d 波超伝導体と等価である [39]。

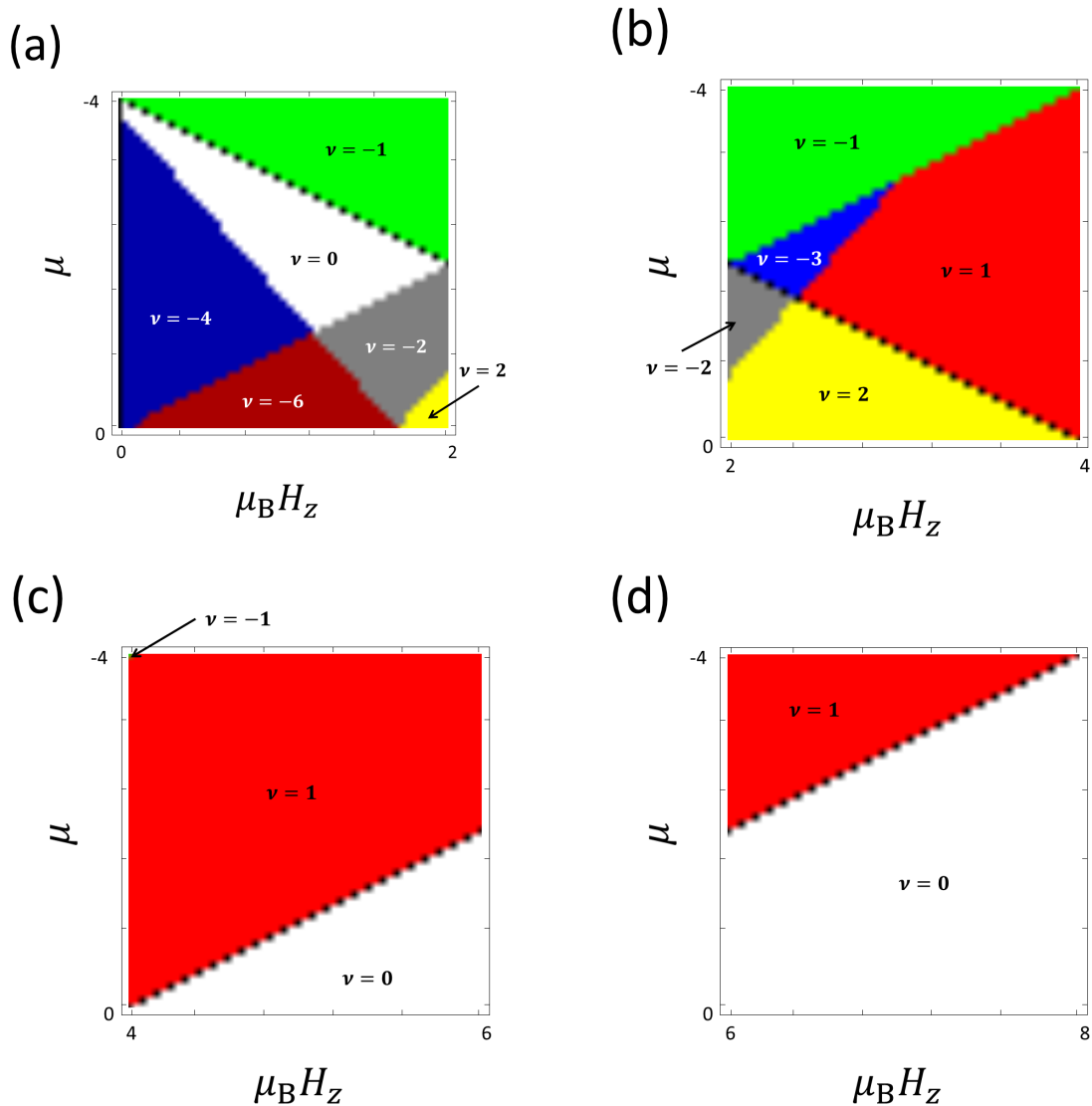


図 5.7 空間反転対称性が破れた二次元 D+p 波超伝導体の Chern 数。縦軸は化学ポテンシャル、横軸は磁場である。計算に用いたパラメーターは $\alpha = 0.3$, $\Delta^d = 0.05$, $c = 0.01$, $d = 0$ であり、磁場の値は (a) $0 \leq \mu_B H_z \leq 2$ (b) $2 \leq \mu_B H_z \leq 4$ (c) $4 \leq \mu_B H_z \leq 6$ (d) $6 \leq \mu_B H_z \leq 8$ である。Chern 数ごとに色分けし、ギャップレスの領域を黒で表した。

次に、ギャップ方程式の計算結果 (図 4.23) を参考にして、非ユニタリー状態を仮定して計算した Chern 数を図 5.8 に示す。高磁場領域の結果はユニタリー状態、非ユニタリー状態で変化はないが、低磁場領域 ($0 < \mu_B H_z < 2$) に注目すると、非ユニタリースピン三重項超伝導を仮定すると Chern 数が 0 の領域が広がっていることが分かる。つまり、ヘリカル 4 状態の割合が大きくなると、低磁場領域のトポロジカル相が破壊されることになる。これは、S+p 波超伝導体のトポロジカル相がパラメーター a , b の変化に対して強固であることと対照的である。

パラメーター c と d の比によりどのように Chern 数が変化するか明かにするため、図 5.9 に

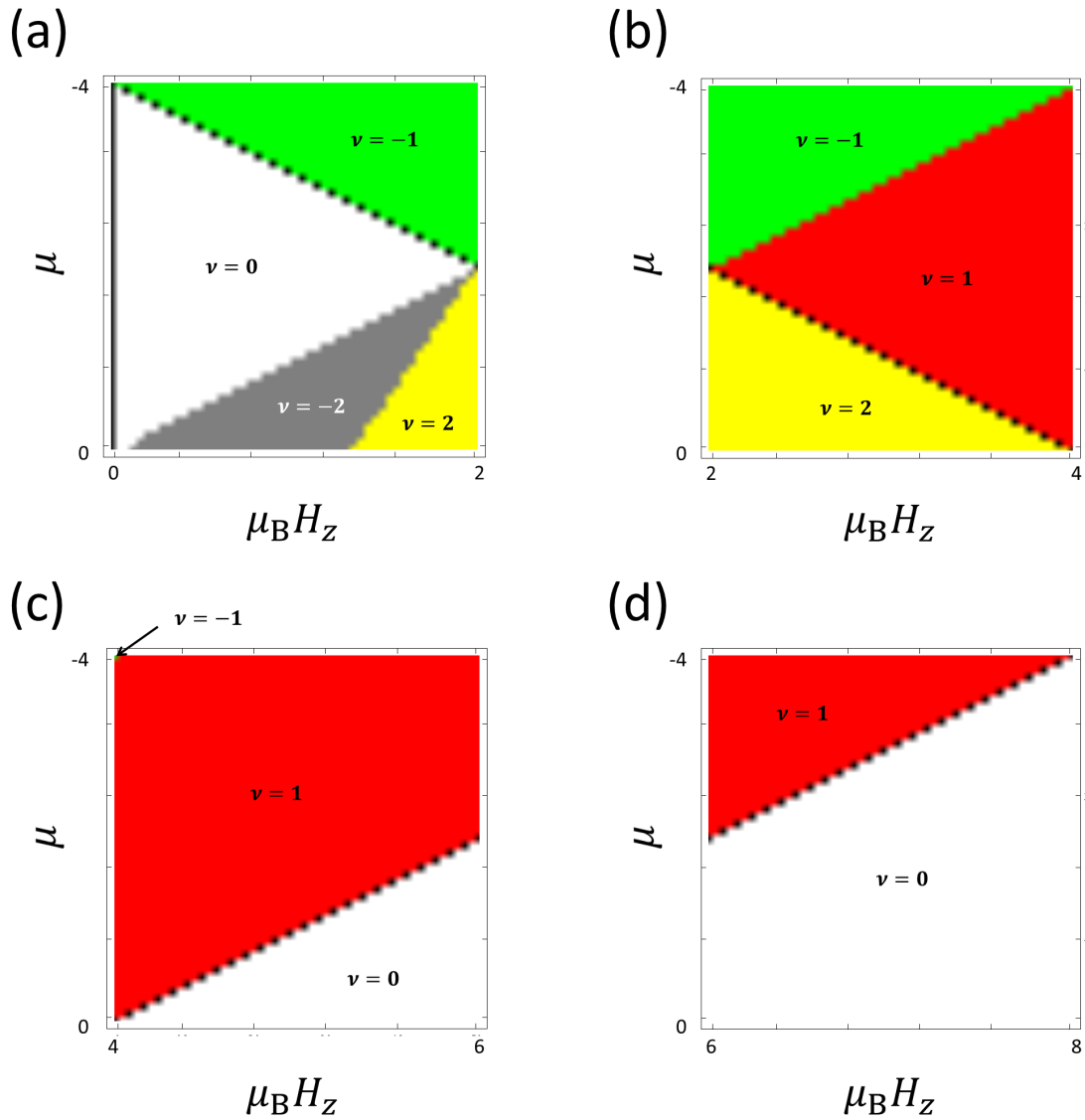


図 5.8 空間反転対称性が破れた二次元 D+p 波超伝導体の Chern 数。縦軸は化学ポテンシャル、横軸は磁場である。計算に用いたパラメータは $\alpha = 0.3$, $\Delta^d = 0.05$, $c = 0.005$, $d = 0.01$ であり、磁場の値は (a) $0 \leq \mu_B H_z \leq 2$ (b) $2 \leq \mu_B H_z \leq 4$ (c) $4 \leq \mu_B H_z \leq 6$ (d) $6 \leq \mu_B H_z \leq 8$ である。Chern 数ごとに色分けし、ギャップレスの領域を黒で表した。

Chern 数のパラメータ c, d 依存性を示す。 $c \gg d$ の場合 $\nu = -4$ であるが、ヘリカル 4 状態の混成により容易に $\nu = 0$ へとトポロジカル相転移することが分かる。

以上から、二層系 D+p 波超伝導体のトポロジカルな性質が分かる。現実的なパラメータ領域 ($\mu_B H_z \sim \Delta^d = 0.05$) では、ヘリカル 4 状態の混成がほぼ無視できる場合、二層系 D+p 波超伝導体はミラー Chern 数 $\nu(\pm i) = \mp 4$ を持つトポロジカル結晶超伝導状態であるが、ヘリカル 4 状態がヘリカル 3 状態と同程度誘起された非ユニタリー状態では $\nu(\pm i) = 0$ となる。

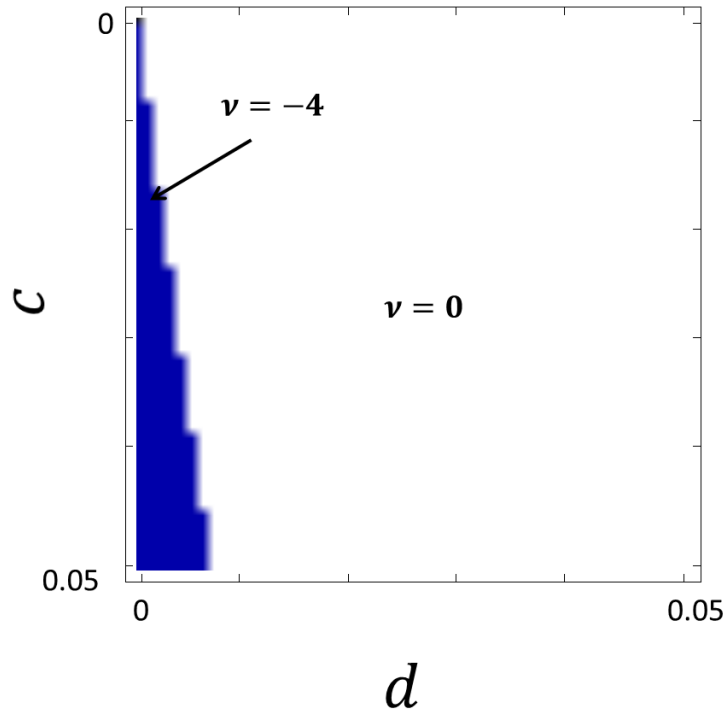


図 5.9 空間反転対称性が破れた二次元 D+p 波超伝導体の Chern 数。縦軸はゼロ磁場で混成するスピン三重項超伝導を表すパラメーター c 、横軸は磁場中で混成するスピン三重項超伝導を表すパラメーター d である。計算に用いたパラメーターは $\alpha = 0.3$, $\Delta^d = 0.05$, $\mu_B H_z = 0.05$ である。Chern 数ごとに色分けし、ギャップレスの領域を黒で表した。

5.5.2 三層系 D+p 波超伝導体

次に、三層系 D+p 波超伝導状態について考える。ブロック対角化されたハミルトニアンは再び式 (5.38), (5.39) で与えられる。二層系で得た知見を元に、以下ではヘリカル 3 状態のみを考慮したユニタリースピン三重項超伝導状態と $d > c$ の非ユニタリースピン三重項超伝導のトポロジカルな性質を示す。

図 5.10, 5.11 にヘリカル 4 状態を無視したユニタリースピン三重項超伝導の場合のミラー Chern 数を示す。S+p 波超伝導体の時と同様に、高磁場領域 ($\mu_B H_z > 2$) におけるほとんどのトポロジカル数は「空間反転対称性が破れた二次元 D+p 波超伝導体」+「スピン三重項超伝導体」で理解できる。一方低磁場領域 ($\mu_B H_z < 2$) では三層系特有のミラー Chern 数を持つ領域が多くある。また、現実的なパラメーター領域 $\mu_B H_z < \Delta^d = 0.05$ では、ミラー Chern 数が $\nu(\pm i) = \mp 1$ となり、トポロジカル結晶超伝導状態であるが、そのトポロジカルな性質は空間反転対称性が破れた二次元 D+p 波超伝導体とスピン三重項超伝導体の和では理解できない、三層系特有のトポロジカル相となっている。

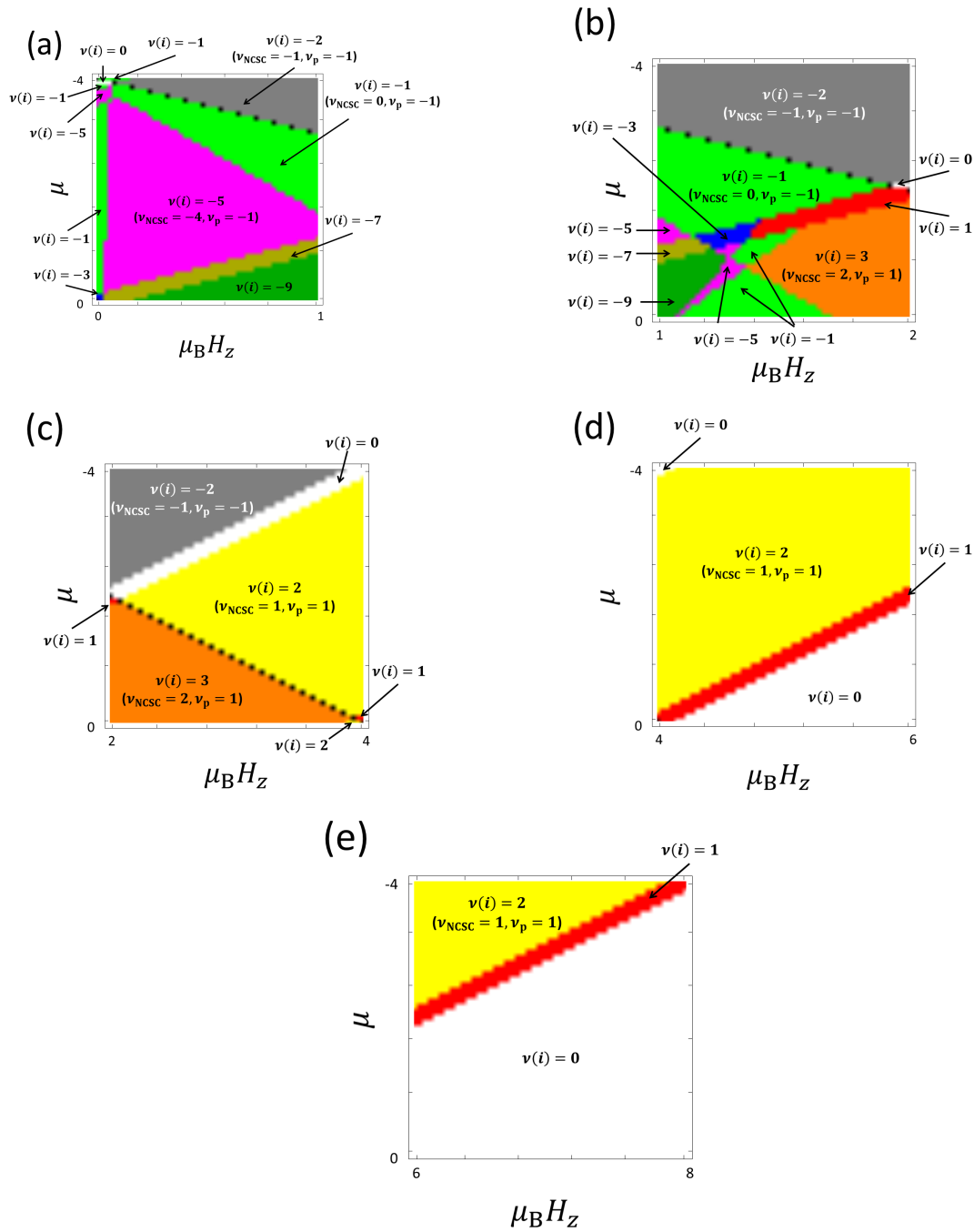


図 5.10 $\mathcal{H}_i^-(k)$ の固有ベクトルを用いて計算された三層系 D+p 波超伝導体におけるペア密度波状態のミラー Chern 数 $\nu(i)$ 。計算に用いたパラメータは $\alpha = 0.3$, $t_{\perp} = 0.1$, $\Delta_{\text{out}}^s = 0.05$, $c_{\text{out}} = c_{\text{in}} = 0.01$, $d_{\text{out}} = d_{\text{in}} = 0$ である。縦軸は化学ポテンシャル $-4 < \mu < 0$ 、横軸は磁場 $\mu_B H_z$ で、(a) $0 < \mu_B H_z < 1$ (b) $1 < \mu_B H_z < 2$ (c) $2 < \mu_B H_z < 4$ (d) $4 < \mu_B H_z < 6$ (e) $6 \leq \mu_B H_z \leq 8$ の結果である。ミラー Chern 数ごとに色分けをした。黒の領域はギャップレスであることを意味している。

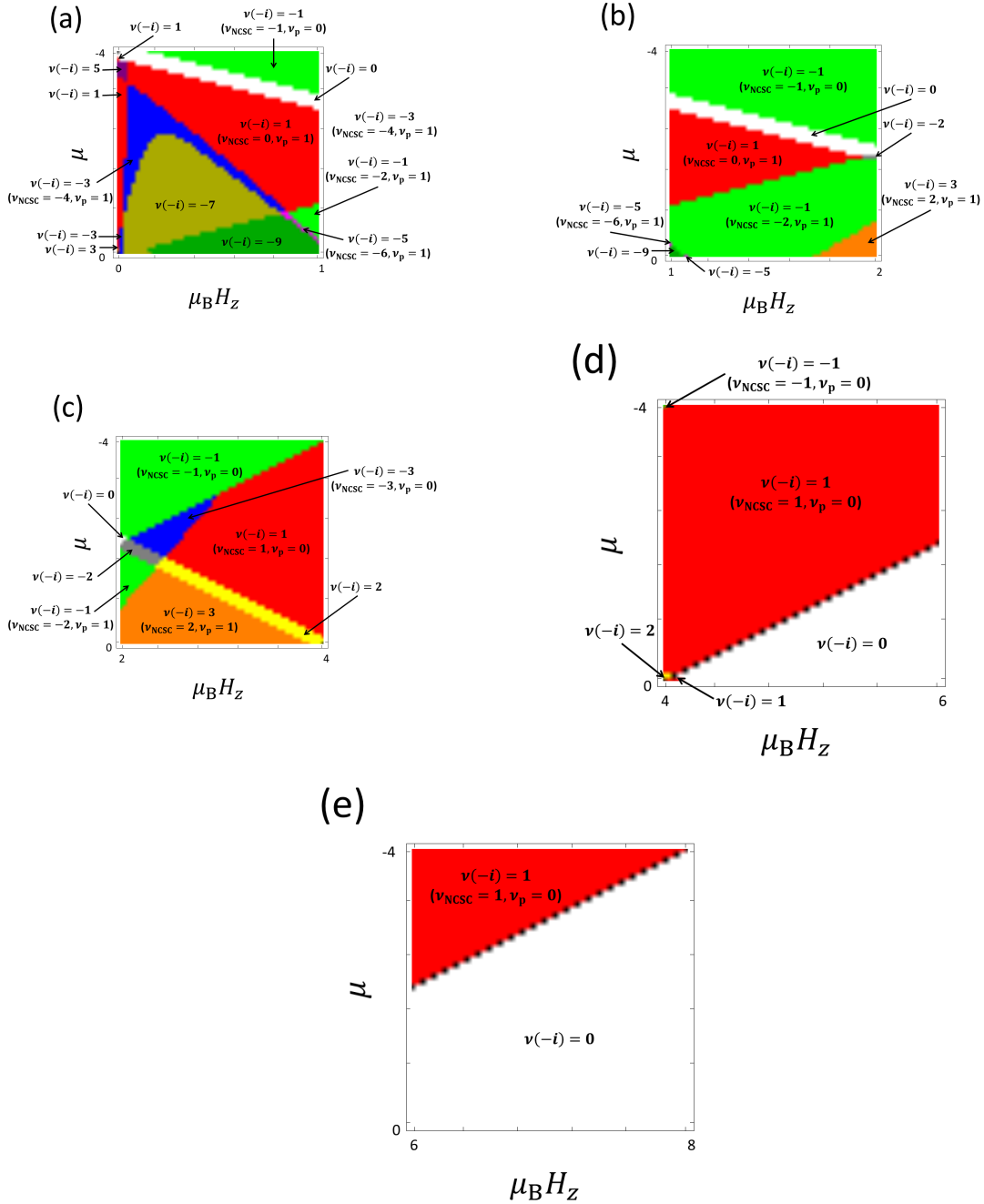


図 5.11 $\mathcal{H}_{-i}(\mathbf{k})$ の固有ベクトルを用いて計算された三層系 D+p 波超伝導体におけるペア密度波状態のミラー Chern 数 $\nu(-i)$ 。計算に用いたパラメーターは図 5.10 と等しい。縦軸は化学ポテンシャル $-4 < \mu < 0$ 、横軸は磁場 $\mu_B H_z$ で、(a) $0 < \mu_B H_z < 1$ (b) $1 < \mu_B H_z < 2$ (c) $2 < \mu_B H_z < 4$ (d) $4 < \mu_B H_z < 6$ (e) $6 \leq \mu_B H_z \leq 8$ の結果である。ミラー Chern 数ごとに色分けをした。黒の領域はギャップレスであることを意味している

図 5.12, 5.13 に非ユニタリースピン三重項超伝導を仮定した場合のミラー Chern 数を示す。ヘリカル 4 状態との混成により低磁場領域 ($\mu_B H_z < 2$) ミラー Chern 数は大きく値を変え、現実的なパラメーター領域 $\mu_B H_z < \Delta^d = 0.05$ で $\nu(\pm i) = \mp 1$ となる。これはスピン三重項超伝導体とトポロジカルに等しい。

ユニタリー状態、非ユニタリー状態どちらの場合も、現実的なパラメーター領域ではミラー Chern 数 $\nu(\pm i) = \mp 1$ のトポロジカル結晶超伝導状態である。しかし、非ユニタリー状態がスピン三重項超伝導体とトポロジカルに等しいのに対し、ユニタリー状態では三層系特有のトポロジカル結晶超伝導となる。

5.6 まとめ

この章では、多層系超伝導体におけるトポロジカル超伝導体について議論した。ペア密度波状態が安定となる磁場領域では、Chern 数は 0 であるが、ミラー Chern 数は有限の値を持ち得る。そのため、ペア密度波状態はミラー対称性により保護されたトポロジカル結晶超伝導となる。

二層系ペア密度波状態は空間反転対称性が破れた二次元超伝導体と等価である。そのため、S+p 波超伝導体の場合、狭いパラメーター領域でのみトポロジカル超伝導となる。D+p 波超伝導体の場合、トポロジカル数は誘起されるスピン三重項超伝導に大きく依存する。誘起されたスピン三重項超伝導がヘリカル 3 状態ならば、ミラー Chern 数 $\nu(\pm i) = \mp 1$ のトポロジカル結晶超伝導となるが、ヘリカル 4 状態が誘起されると、有限のミラー Chern 数を持たない。

三層系 S+p 波超伝導体のペア密度波状態のトポロジカル相は、空間反転対称性が破れた二次元超伝導体とスピン三重項超伝導体の和でほぼ理解することが可能である。そのため、現実的なパラメーター領域でカイラル p 波超伝導体とトポロジカルに等価な、ミラー Chern 数 $\nu(\pm i) = \pm 1$ のトポロジカル結晶超伝導となる。一方 D+p 波超伝導体の場合、 $\nu(\pm i) = \mp 1$ のトポロジカル結晶超伝導となるが、そのトポロジカルな性質は誘起されるスピン三重項超伝導により異なる。ヘリカル 3 状態が支配的な場合、スピン三重項超伝導とトポロジカルに等価であるが、ヘリカル 4 状態が誘起されると三層系特有のトポロジカル相となる。

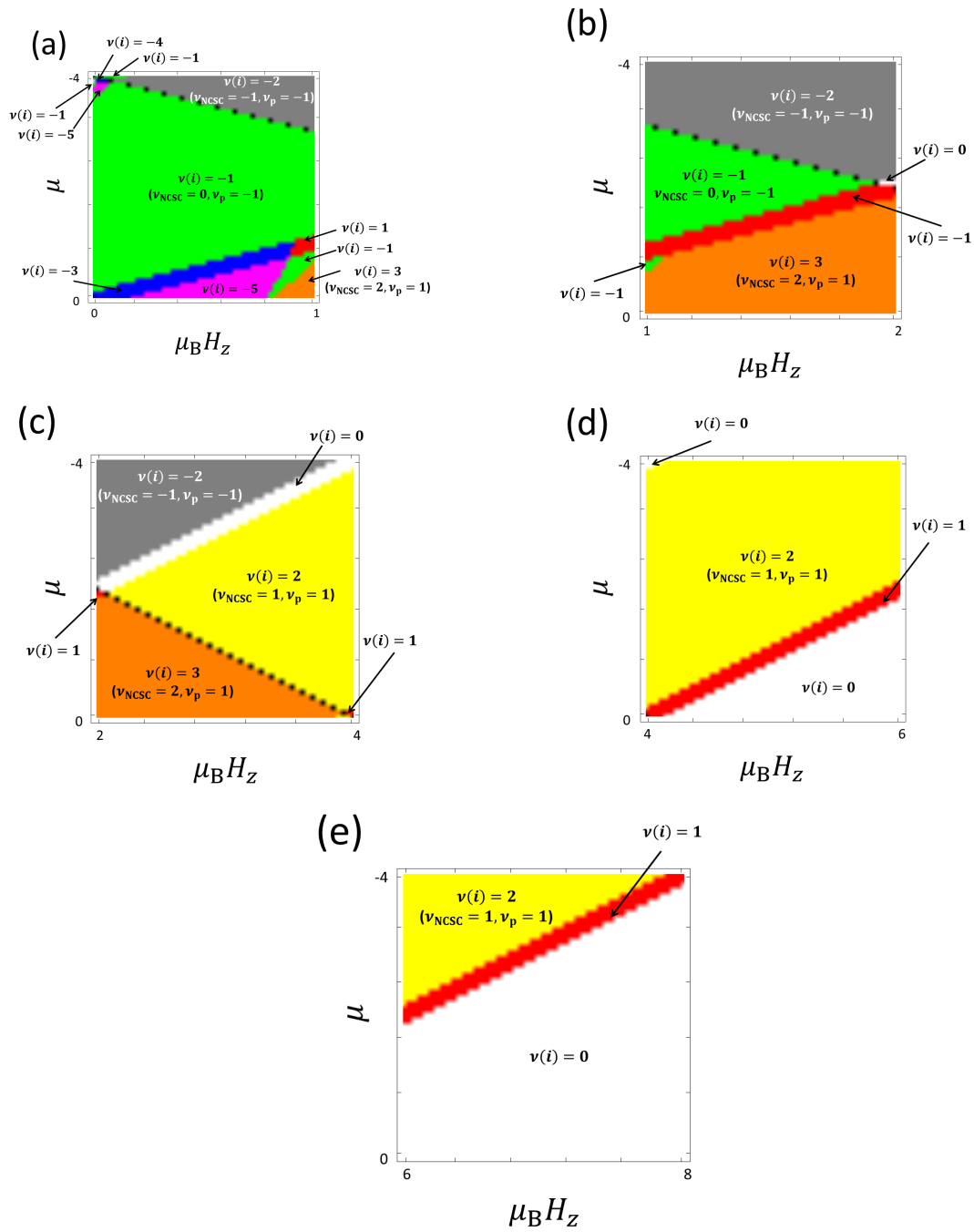


図 5.12 $\mathcal{H}_i^-(k)$ の固有ベクトルを用いて計算された三層系 D+p 波超伝導体におけるペア密度波状態のミラー Chern 数 $\nu(i)$ 。計算に用いたパラメータは $\alpha = 0.3$, $t_{\perp} = 0.1$, $\Delta_{\text{out}}^s = 0.05$, $c_{\text{out}} = c_{\text{in}} = 0.005$, $d_{\text{out}} = d_{\text{in}} = 0.01$ である。これはギャップ方程式の計算結果 (図 4.25) を参考に決定した。縦軸は化学ポテンシャル $-4 < \mu < 0$ 、横軸は磁場 $\mu_B H_z$ で、(a) $0 < \mu_B H_z < 1$ (b) $1 < \mu_B H_z < 2$ (c) $2 < \mu_B H_z < 4$ (d) $4 < \mu_B H_z < 6$ (e) $6 \leq \mu_B H_z \leq 8$ の結果である。ミラー Chern 数ごとに色分けをした。黒の領域はギャップレスであることを意味している。

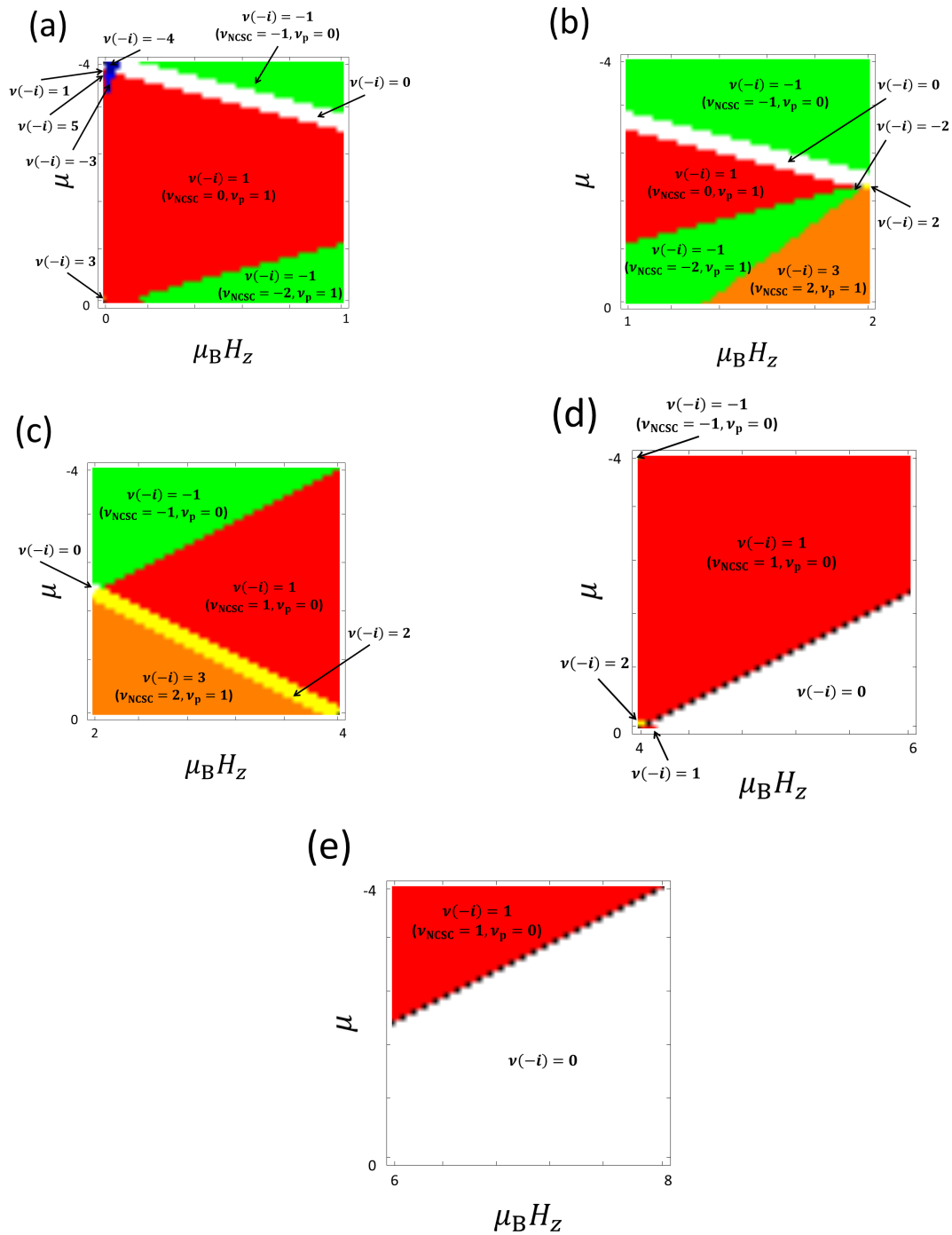


図 5.13 $\mathcal{H}_{-i}^-(\mathbf{k})$ の固有ベクトルを用いて計算された三層系 D+p 波超伝導体におけるペア密度波状態のミラー Chern 数 $\nu(-i)$ 。計算に用いたパラメータは図 5.12 と等しい。縦軸は化学ポテンシャル $-4 < \mu < 0$ 、横軸は磁場 $\mu_B H_z$ で、(a) $0 < \mu_B H_z < 1$ (b) $1 < \mu_B H_z < 2$ (c) $2 < \mu_B H_z < 4$ (d) $4 < \mu_B H_z < 6$ (e) $6 \leq \mu_B H_z \leq 8$ の結果である。ミラー Chern 数ごとに色分けをした。黒の領域はギャップレスであることを意味している

6 総括

本論文では、Pauli 極限での局所的な空間反転対称性が破れた多層系スピン一重項超伝導体における新奇超伝導状態の実現可能性について議論した。局所的な空間反転対称性の破れにより、多層系超伝導体には空間的に非一様な反対称スピン軌道相互作用が現れる。このスピン軌道相互作用と磁場により、複素ストライプ状態、ペア密度波状態が実現することが分かった。

面内磁場中で実現する複素ストライプ状態は、大局的な空間反転対称性が破れた系で現れるヘリカル超伝導状態と、空間反転対称性が保存する系で安定となる LO 状態の中間の状態とみなせる、局所的な空間反転対称性が破れた系特有の超伝導状態である。複素ストライプ状態は、LO 状態と異なり温度・磁場相図の広い領域で安定となる。また、ヘリカル状態が実験的に観測不可能であることに對し、複素ストライプ状態は、例えば局所状態密度の観測により実験的に検出できる。複素ストライプ状態の安定性は超伝導対称性に依存せず、s 波超伝導、d 波超伝導どちらの場合にも実現することを示した。

面に垂直な磁場中で実現するペア密度波状態は、スピン一重項超伝導の秩序変数が空間反転中心層を境に符号を変える超伝導状態である。ペア密度波状態では Pauli 対破壊効果が抑制されるため、状態密度にその特徴が現れることを示した。ペア密度波状態の安定性も、s 波超伝導、d 波超伝導に依存しない。また、p 波超伝導とのパリティ混成を考えると、ペア密度波状態では p 波超伝導が空間的に一様となる。そのため、スピン一重項超伝導からスピン三重項超伝導を得ることが可能である。p 波超伝導との混成の特徴は、状態密度に現れる。特に、D+p 波超伝導体におけるペア密度波状態では、p 波超伝導とのパリティ混成により有限の超伝導ギャップが開くことを発見した。

ペア密度波状態は、パリティで分類すると奇パリティ超伝導状態である。そのため、トポロジカル超伝導となることが期待される。解析の結果、ペア密度波状態は xy 平面に対するミラー対称性に守られたトポロジカル結晶超伝導状態になり得ることが分かった。二層系ペア密度波状態は、大局的な空間反転対称性が破れた磁場中の二次元超伝導体と等価である。低磁場領域において、S+p 波超伝導は狭いパラメーター領域でトポロジカル結晶超伝導 [ミラー Chern 数 $\nu(\pm i) = \pm 1$] であり、D+p 波超伝導は誘起されたスピン三重項超伝導がヘリカル 3 状態ならば広いパラメーター領域でトポロジカル結晶超伝導 [ミラー Chern 数 $\nu(\pm i) = \mp 4$] である。三層系 S+p 波超伝導体は、トポロジカルには大局的な空間反転対称性が破れた磁場中の二次元超伝導体とスピンレスのカイラル p 波超伝導体の和と等価である。一方、三層系 D+p 波超伝導体は、誘起されたスピン三重項超伝導がヘリカル 3 状態ならばトポロジカルには大局的な空間反転対称性が破れた磁場中の二次元超伝導体とスピンレスのカイラル p 波超伝導体の和と等価であり、ヘリカル 4 状態が支配的な場合は三層系特有のトポロジカル相となる。

前述した新奇超伝導体の実現のためには、Pauli 対破壊効果が重要な役割を果たす。そのため、軌道対破壊効果が弱い物質が望まれる。有力な候補として、重い電子系超伝導体 CeCoIn_5 の人工超格子があげられる。バルクの CeCoIn_5 は Pauli 対破壊効果が重要であることが分かっている [4]。また、最近の実験研究により、局所的な空間反転対称性の破れの顕在化が指摘されている [48, 49]。

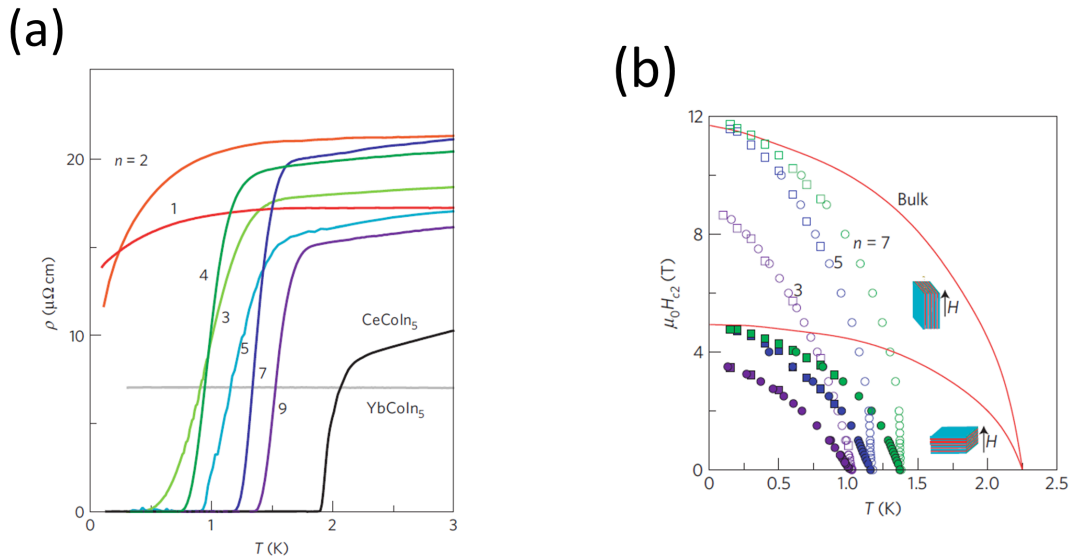


図 6.1 (a) CeCoIn₅ 人工超格子における電気抵抗の温度依存性 [47]。YbCoIn₅ の層の数を 5 に固定し、異なる CeCoIn₅ の層の数 n についての結果を示している。(b) CeCoIn₅ 人工超格子の磁場中超伝導相図 [47]。 $n=3, 5, 7$ の結果である。比較のため、バルクの CeCoIn₅ の上部臨界磁場も示されている。

本論文の最後に、CeCoIn₅ の人工超格子の実験結果をレビューし、複素ストライプ状態、ペア密度波状態の実現可能性について議論する。

重い電子系超伝導体 CeCoIn₅ の人工超格子は、2011 年に京都大学の実験グループで作成された [47]。CeCoIn₅ の人工超格子は重い電子系の d 波超伝導体 CeCoIn₅ と通常金属の YbCoIn₅ が図 1.9 に示したように交互に積層した構造を持つ。図 6.1(a) に電気抵抗の実験結果を示した。CeCoIn₅ の層の数が 3 を越えると明確な超伝導転移が観測されている。また、上部臨界磁場も観測されている [図 6.1(b)]。超伝導転移温度がバルクのものに比べ低下しているにもかかわらず、絶対零度での上部臨界磁場は依然として大きな値を持つことがわかる。

最近の実験研究により、CeCoIn₅ の人工超格子において、Pauli 対破壊効果の抑制が観測されている。図 6.2 に Shimozawa らにより観測された c 軸磁場中の上部臨界磁場を示す [49]。CeCoIn₅ の層の数が減少するにつれ、 $H_{c2\perp}/H_{c2\perp}^{\text{orb}}(0)$ が上昇しているのがわかる。バルクの CeCoIn₅ では上部臨界磁場は Pauli 対破壊効果で決まっているため、これは人工超格子で Pauli 対破壊効果が抑制されていることを示している。人工超格子における Pauli 対破壊効果の抑制は、ペア密度波状態の実現を示唆している。第 4 章で示した通り、三層系の上部臨界磁場は二層系の上部臨界磁場に比べ小さな値を持ち、ペア密度波状態が安定となる領域が狭い。これは、三層系でのペア密度波状態は内側の層の超伝導を潰すためと、層の数が增大するにつれスピン軌道相互作用の影響が小さくなる (三層系では、内側の層でスピン軌道相互作用はゼロ) ためである。そのため、層の枚数が增大するにつれ、ペア密度波状態が安定となる領域が狭くなり、Pauli 対破壊効果が顔を出すようになる。上記の実験結果は正しくこれを観測したものと考えられる。よって、CeCoIn₅ の人工超格子

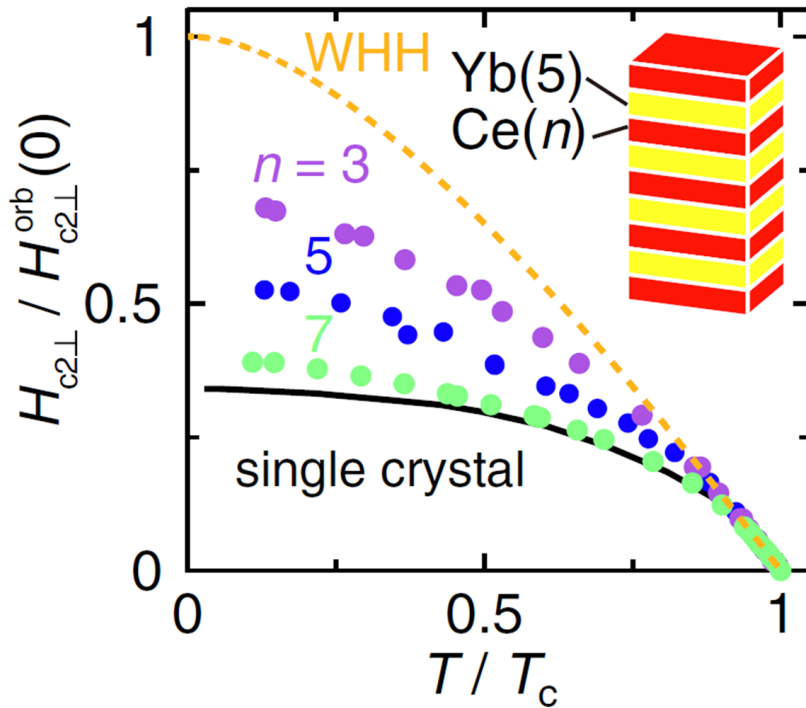


図 6.2 c 軸磁場中の上部臨界磁場 [49]。縦軸は軌道対破壊効果のみを考慮した場合の上部臨界磁場 $H_{c2\perp}^{\text{orb}}(0)$ でスケールされている。

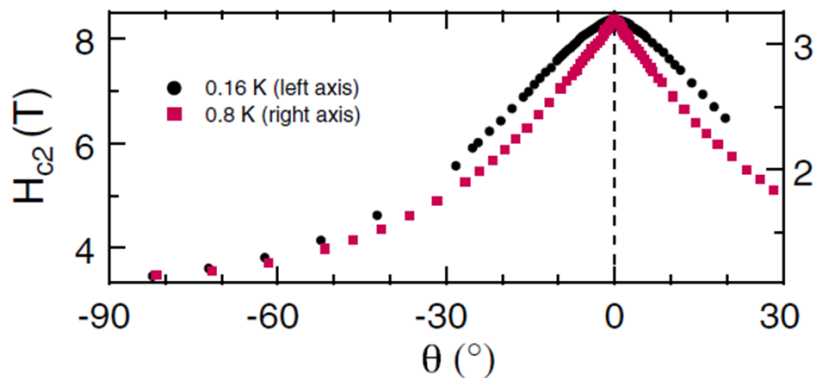


図 6.3 上部臨界磁場の角度依存性 [48]。CeCoIn₅ が三層、YbCoIn₅ が五層の結果である。 $\theta = 0^\circ$ が面内磁場、 $\theta = -90^\circ$ が面直磁場である。

においてペア密度波状態が低温高磁場領域で実現していると期待される。

上部臨界磁場の角度依存性により、空間的に非一様な超伝導状態の実現が示唆されている。図 6.3 に Goh らにより測定された上部臨界磁場の角度依存性を示す [48]。転移温度近傍 ($T = 0.8\text{K}$) では $\theta = 0^\circ$ 近傍でカスプ状の振る舞いをするが、これは薄膜の Tinkham モデルで理解できる [105]。温度を下げていくと、 $\theta = 0^\circ$ 近傍の傾きが小さくなっているのが分かる ($T=0.16\text{K}$)。

これは、空間的に非一様な超伝導状態の実現に近づいていることを意味している。超伝導体の Ginzburg-Landau 自由エネルギーに現れる「グラディエント項」 $|\nabla\Psi|^2$ の係数を κ とすると

$$\kappa \propto \left. \frac{\partial H_{c2}}{\partial \theta} \right|_{\theta=0^\circ} \quad (6.1)$$

の関係がある [106, 107]。 κ が正の場合、空間的に一様な状態が安定となるが、 $\kappa < 0$ の場合には空間的に非一様な状態の方がエネルギーが低くなる。そのため、 $\kappa = 0$ で空間的に一様な状態から非一様な状態へと相転移が起こることになる。よって、図 6.3 に示した $|\partial H_{c2}/\partial \theta|_{\theta=0^\circ}$ の減少は空間的に非一様な状態の実現に近づいていることを示唆している。

以上をまとめると、重い電子系超伝導体 CeCoIn_5 の人工超格子における Pauli 対破壊効果の抑制はペア密度波状態の実現を示唆しており、また上部臨界磁場の角度依存性から、空間的に非一様な状態の実現が示唆されている。バルクの CeCoIn_5 は FFLO 超伝導状態の有力な候補であるが [74, 75]、人工超格子では低温高磁場領域で複素ストライプ状態が実現していると期待される。ペア密度波状態、複素ストライプ状態が実現している実験的な確証は未だ得られていないが、上述した理由により CeCoIn_5 の人工超格子で実現していることが強く期待される。今後の実験研究に期待する。

付録 A T -行列近似の元での超伝導感受率の導出

ここでは、 T -行列近時の元での超伝導感受率 (2.62) の導出を行う。超伝導感受率 (2.59) を摂動計算すると、摂動の各次数は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \chi_{lm,l'm'}^{(n)}(q) &= \frac{1}{4N} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\Omega_n \tau} \sum d_l^{\mu*}(\mathbf{k})(i\sigma_\mu \sigma_y)_{s's}^\dagger d_{l'}^\nu(\mathbf{k})(i\sigma_\nu \sigma_y)_{\sigma\sigma'} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \\ &\quad \times \int_0^{1/T} d\tau_1 \cdots \int_0^{1/T} d\tau_n \langle \mathcal{H}_{\text{pair}}(\tau_1) \cdots \mathcal{H}_{\text{pair}}(\tau_n) c_{-\mathbf{k}s'm}(\tau) c_{\mathbf{k}+qsm}(\tau) c_{\mathbf{k}'+q\sigma m}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\sigma'm}^\dagger \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

摂動の 0 次は

$$\begin{aligned} \chi_{lm,l'm'}^{(0)}(q) &= \frac{1}{4N} \int_0^{1/T} \sum d_l^{\mu*}(\mathbf{k})(\sigma_\mu i\sigma_y)_{s's}^\dagger d_{l'}^\nu(\mathbf{k}')(\sigma_\nu i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} \langle c_{-\mathbf{k}s'm}(\tau) c_{\mathbf{k}+qsm}(\tau) c_{\mathbf{k}'+q\sigma m}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\sigma'm}^\dagger \rangle \\ &= \frac{T}{4N} \sum (\sigma_\mu i\sigma_y)_{s's}^\dagger (\sigma_\nu i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} [G_{sm\sigma m'}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}, i\omega_r) G_{s'm\sigma'm'}^0(-\mathbf{k}, i\Omega_n - i\omega_r) d_l^{\mu*}(\mathbf{k}) d_{l'}^\nu(\mathbf{k}) \\ &\quad - G_{sm\sigma'm'}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}, i\omega_r) G_{s'm\sigma m'}^0(-\mathbf{k}, i\Omega_n - i\omega_r) d_l^{\mu*}(\mathbf{k}) d_{l'}^\nu(-\mathbf{k}-\mathbf{q})] \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

となる。ここで $G_{sm\sigma'm'}^0(\mathbf{k}, i\omega_r)$ は正常状態のグリーン関数

$$G_{sm\sigma'm'}^0(\mathbf{k}, i\omega_r) = \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_r \tau} \langle c_{\mathbf{k}sm}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma'm'}^\dagger \rangle \quad (\text{A.3})$$

であり、 ω_r は r を整数として $\omega_r = T(2r+1)$ で与えられる奇数の松原振動数である。

次に、摂動の一次の項を考える。 T -行列近似では、図 2.2 に示したダイアグラムからの寄与のみを考慮する。摂動の一次は図 2.2 の二番目のダイアグラムに対応している。図 2.2 の二番目のダイアグラムからの寄与を計算すると

$$\begin{aligned} \chi_{lm,l'm'}^{(1)}(q) &= \frac{1}{4N^2} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\Omega_n \tau} \sum d_l^{\mu*}(\mathbf{k})(\sigma_\mu i\sigma_y)_{s's}^\dagger d_{l'}^\nu(\mathbf{k}')(\sigma_\nu i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} \\ &\quad \times \langle c_{-\mathbf{k}s'm}(\tau) c_{\mathbf{k}+qsm}(\tau) c_{\mathbf{k}'+q\sigma m}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\sigma'm}^\dagger \\ &\quad \times \int_0^{1/T} d\tau \sum_{l_1} V_{l_1} d_{l_1}^{\mu'}(\mathbf{k}_1)(\sigma_{\mu'} i\sigma_y)_{s_1 s_2} d_{l_1}^{\nu'*}(\mathbf{k}_2)(\sigma_{\nu'} i\sigma_y)_{s_3 s_4}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+q'sm_1}^\dagger(\tau_1) \\ &\quad \times c_{-\mathbf{k}_1 s_2 m_1}^\dagger(\tau_1) c_{-\mathbf{k}_2 s_3 m_1}(\tau_1) c_{\mathbf{k}_2+q's_4 m_1}(\tau_1) \rangle \\ &\simeq \sum \left\{ \frac{T}{4N} [G_{sm s_1 m_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}, i\omega_n + i\omega_r) G_{s'm s_1 m_1}^0(-\mathbf{k}, -i\omega_r) d_{s's}^{l*}(\mathbf{k}) d_{s_1 s_2}^{l_1}(\mathbf{k}) \right. \\ &\quad - G_{sm s_2 m_1}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}, i\Omega_n + i\omega_r) G_{s'm s_1 m_1}^0(-\mathbf{k}, -i\omega_r) d_{s's}^{l*}(\mathbf{k}) d_{s_1 s_2}^{l_1}(-\mathbf{k}-\mathbf{q})] \\ &\quad \times V_{l_1} \frac{T}{4N} [G_{s_3 m_1 \sigma m}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}, i\omega_n + i\omega_r) G_{s_4 m_1 \sigma'm}^0(-\mathbf{k}, -i\omega_r) d_{s_3 s_4}^{l_1*}(\mathbf{k}') d_{\sigma\sigma'}^{l'}(\mathbf{k}') \\ &\quad \left. - G_{s_4 m \sigma'm}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}, i\Omega_n + i\omega_r) G_{s_3 m_1 \sigma m}^0(-\mathbf{k}, -i\omega_r) d_{s_3 s_4}^{l_1*}(\mathbf{k}') d_{\sigma\sigma'}^{l'}(-\mathbf{k}'-\mathbf{q})] \right\} \\ &= \chi_{lm_1, l_1 m_1}^{(0)}(q) V_{l_1} \chi_{l_1 m_1, l' m'}^{(0)}(q) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

を得る。ここで $d_{ss'}^l(\mathbf{k}) = \sum_{\mu} d_l^{\mu}(\mathbf{k})(\sigma_{\mu} i \sigma_y)_{ss'}$ である。超伝導感受率を

$$\begin{pmatrix} 11, 11 & 11, 21 & 11, 31 & \cdots & 11, L1 & 11, 12 & 11, 22 & \cdots & 11, LM \\ 21, 11 & 21, 21 & 21, 31 & \cdots & 21, L1 & 21, 12 & 21, 22 & \cdots & 21, LM \\ & & & & \vdots & & & & \\ LM, 11 & LM, 21 & LM, 31 & \cdots & LM, L1 & LM, 12 & LM, 22 & \cdots & LM, LM \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

で行列表示すると (L は超伝導状態の総数)

$$\chi^{(1)}(q) = \chi^{(0)}(q) V \chi^{(0)}(q) \quad (\text{A.6})$$

となる。摂動の二次以上も同様に計算でき、結果として T -行列近似の元での超伝導感受率は

$$\begin{aligned} \chi(q) &= \chi^{(0)}(q) + \chi^{(0)}(q) V \chi^{(0)}(q) + \chi^{(0)}(q) V \chi^{(0)}(q) V \chi^{(0)}(q) + \cdots \\ &= \frac{\chi^{(0)}(q)}{1 - V \chi^{(0)}(q)} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

となり、式 (2.62) を得る。

付録 B Supercell の方法

ここでは、空間的に非一様な超伝導状態の計算に便利な Supercell の方法について解説する。Supercell の方法は、超伝導秩序変数の空間変化が周期的な場合用いることができる。ここでは簡単のため一次元系を例にとり説明するが、二次元以上の系への拡張は容易に行うことができる。

系のサイズを N とし、超伝導秩序変数の空間変化が

$$\Delta(i) = \Delta_0 \cos\left(\frac{2\pi}{N'} i\right) \quad (\text{B.1})$$

のように与えられたとする ($N' < N$)。この時、超伝導秩序変数は周期 N' を持つ (図 B.1)。なお、Supercell の方法は超伝導秩序変数の空間変化が周期的であればよいので、式 (B.1) のように書けなくてもよい。そこで、秩序変数を図 B.1 のように区切り、各領域をユニットセルと見なし新たなインデックス R で指定することにする。すると、各格子点は R と i' ($1 \leq i' \leq N'$) で指定することができる。

次に、本論文で考えてきた最近接遷移のみを考慮した運動エネルギー項が R, i' を用いてどのように書けるか考える。一次元系の場合、最近接遷移のみを考慮した運動エネルギー項は

$$\mathcal{H}_{\text{kin}} = -t \sum_{i,j} (\delta_{i+1,j} + \delta_{i-1,j}) c_i^{\dagger} c_j \quad (\text{B.2})$$

であるが (スピンなどのインデックスは省く) R, i' を用いると

$$\mathcal{H}_{\text{kin}} = -t \sum_{i',j',R} (\delta_{i'+1,j'} + \delta_{i'-1,j'}) c_{i'R}^{\dagger} c_{j'R} - t \sum_R (c_{1R+1}^{\dagger} c_{N'R} + c_{N'R-1}^{\dagger} c_{1R}) \quad (\text{B.3})$$

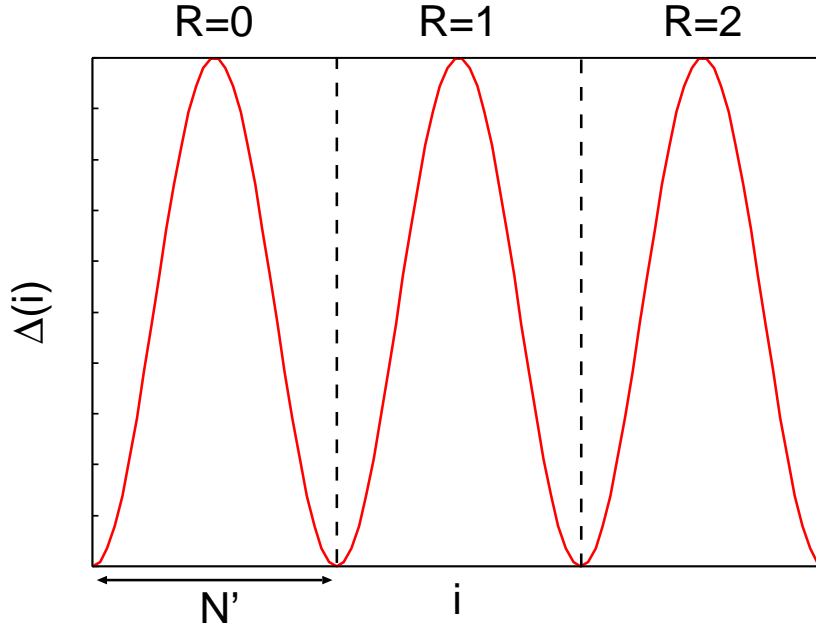


図 B.1 超伝導秩序変数の空間依存性。

と書き直される。右辺第一項の和は、ユニットセル R 内の遷移のみを考慮した項で和の i はそれを表している。右辺第二項、第三項は異なるユニットセルへの遷移を表している。ここで、超伝導秩序変数が周期的であることを利用し、 R に関する Fourier 変換

$$c_{i'R} = \frac{1}{R'} \sum_K e^{-iKR} c_i(K) \quad (\text{B.4})$$

を行う。ここで、 R' はユニットセルの総数で、 $R' = N/N'$ である。すると、式 (B.3) は

$$\mathcal{H}_{\text{kin}} = -t \sum_{i',j',K} (\delta_{i'+1,j'} + \delta_{i'-1,j'}) c_{i'}^\dagger(K) c_{j'}(K) - t \sum_K [e^{iK} c_1^\dagger(K) c_{N'}(K) + e^{-iK} c_{N'}^\dagger(K) c_1(K)] \quad (\text{B.5})$$

となる。ユニットセルをまたぐ遷移に位相 $e^{\pm iK}$ がつく以外は、式 (B.2) と等価である。

ここで、式 (B.5) が持つ意味を考える。元々の運動エネルギー項 (B.2) は行列表示すると $N \times N$ 行列である。そのため、系のサイズ N が大きくなると行列が巨大になり、対角化などに膨大な計算時間を要することとなる。一方、式 (B.5) は $N' \times N'$ 行列であり、行列サイズが小さくなっている。その代わりに、 K についての和が現れている。一般に行列の対角化は、系のサイズが得ると膨大な時間がかかることになる。Supercell の方法は、系の周期性を利用して対角化する行列のサイズを小さくする手法となる。これはまさに Bloch の定理に他ならない。Supercell の方法により計算時間の短縮が行える。

謝辞

本論文をまとめるにあたり、多くの方々の御協力を頂きました。皆様に心より感謝申し上げます。

指導教官である柳瀬陽一准教授には、本研究を進めるにあたり非常に多くのご助言を頂きました。それにより、研究とはどのように行うのか、どのように研究テーマを見つけるのか、といった研究者としての姿勢を学ぶことが出来ました。深く感謝いたします。

共同研究者の Manfred Sigrist 教授（スイス連邦工科大学チューリッヒ校）には様々な有益なコメントをいただきました。感謝致します。

新潟大学物性理論研究室の他の先生方、大野義章教授、奥西功一准教授、金鋼准教授にも研究成果についての的確な質問を頂きました。先生方のおかげで本研究に対する理解が深まりました。心より感謝いたします。摂待力生教授、武田直也教授には学位論文審査員として、数多くの有益なご指摘をいただきました。

物性理論研究室の先輩方にも本研究を進めるにあたり、多くのご助言を頂きました。特に現在名古屋大学の博士研究員でいらっしゃる山川洋一氏には、数値計算の高速化に関する多くのご助言を頂きました。現在東京理科大学助教の柳有紀氏には数値計算や解析計算、物理的な議論など多くの点でご指導頂きました。山田武見氏には研究への助言に加え、日々のトラブルに関してして多くの有益なご指摘をいただきました。ここに感謝の意を示します。

新潟大学大学院自然科学研究科数理物質科学専攻物理学コースの同期の方々には、研究以外の場面でも大変お世話になりました。特に物性理論研究室の新井優太氏には日常の豆知識などを教えていただきました。関川直毅氏、吉川丈夫氏にはいろいろな場所へ食事に連れて行っていただきました。両氏のおかげで新潟の美味しいものをたくさん食べることが出来ました。丸山大輔氏には週一回の楽しみを届けていただきました。宇宙物理学研究室の金山雅人氏には研究の息抜きとして、話し相手になっていただきました。皆様のおかげで博士後期課程をととても楽しくすごすことが出来ました。ありがとうございます。

研究室の後輩である高松周平氏、川辺俊介氏、中村康晴氏、小野澤景介氏、人見尚典氏、渡辺達也氏のゼミでは、多くの知識を得ることが出来ました。

皆様のご助力がなければ本研究を成し遂げることは不可能でした。深く感謝いたします。

最後に、私を育み見守ってくれた祖母、両親、兄弟達に感謝致します。どうもありがとうございます。

論文リスト

1. *Pair-density wave states through spin-orbit coupling in multilayer superconductors*
T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase: Phys. Rev. B Vol. 86, pp. 134514.1-6 (6pages), 2012. (第4章に対応)
2. *Complex-stripe phases induced by staggered Rashba spin-orbit coupling*
T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase: J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 82, pp. 074714.1-6 (6pages), 2013. (第3章に対応)
3. *Parity-Mixed Superconductivity in Locally Non-centrosymmetric System*
T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase: J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 83, pp. 013703.1-5 (5pages), 2014. (第4章に対応)
4. パリティの局所的な破れが誘起するエキゾチック超伝導
吉田智大, 柳瀬陽一, 丸山大輔: 固体物理 第49巻第3号, pp. 109-124 (16pages), 2014. (第3, 4章に対応)
5. *Superconductors with Staggered Non-centrosymmetry*
M. Sigrist, D. F. Agterberg, M. H. Fischer, J. Goryo, F. Loder, S. -H. Rhim, D. Maruyama, Y. Yanase, T. Yoshida, and S. J. Youn: J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 83, pp. 061014.1-8 (8pages), 2014. (第3, 4章に対応)
6. *Local magnetization in pair-density wave state*
T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase: JPS Conf. Proc. Vol. 3, pp. 015026.1-4 (4pages), 2014. (第4章に対応)

その他参考論文

1. *Rotating Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state in cold Fermi gases*
T. Yoshida and Y. Yanase: Phys. Rev. A Vol. 84, pp. 063605.1-9 (9pages), 2011.
2. *Crossover from Fulde-Ferrell state to Larkin-Ovchinnikov state in cold fermion gases*
T. Yoshida and Y. Yanase: J. Phys. : Conf. Ser. Vol. 400, pp. 012086.1-4 (4pages), 2012.

参考文献

- [1] Y. Yanase, T. Jujo, T. Nomura, H. Ikeda, T. Hotta and K. Yamada: Phys. Rep. **387** (2003) 1.
- [2] P. Fulde and R. A. Ferrell: Phys. Rev. **135** (1964) A550.
- [3] A. I.Larkin and Y. N. Ovchinnikov: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47** (1964) 1136.
- [4] Y. Matsuda and H. Shimahara: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 051005.
- [5] V. M.Edelstein: Sov. Phys. JETP **68** (1989) 1244.
- [6] E. Bauer, G. Hilscher, H. Michor, C. Paul, E. W. Scheidt, A. Griбанov, Y. Seropegin, H. Noël, M. Sigrist, and P. Rogl: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 027003.
- [7] T. Akazawa, H. Hidaka, H. Kotegawa, T. C. Kobayashi, T. Fujiwara, E. Yamamoto, Y. Haga, R. Settai, and Y. Ōnuki: J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004) 3129.
- [8] N. Kimura, K. Ito, K. Saitoh, Y. Umeda, H. Aoki, and T. Terashima: Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 247004.
- [9] I. Sugitani, Y. Okuda, H. Shishido, T. Yamada, A. Thamizhavel, E. Yamamoto, T. D. Matsuda, Y. Haga, T. Takeuchi, R. Settai, and Y. Ōnuki: J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 043703.
- [10] K. Togano, P. Badica, Y. Nakamori, S. Orimo, H. Takeya, and K. Hirata: Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 247004.
- [11] Non-Centrosymmetric Superconductors: Edited by E. Bauer and M. Sigrist (Springer, Berlin, 2012) Lecture Notes in Physics.
- [12] E. I. Rashba: Sov. Phys. Solid State **1** (1959) 368.
- [13] G. Dresselhaus: Phys. Rev. **100** (1955) 580.
- [14] N. Kimura, K. Ito, H. Aoki, S. Uji, and T. Terashima: Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 197001.
- [15] Y. Okuda, Y. Miyauchi, Y. Ida, Y. Takeda, C. Tonohiro, Y. Oduchi, T. Yamada, N. D. Dung, T. D. Matsuda, Y. Haga, T. Takeuchi, M. Hagiwara, K. Kindo, H. Harima, K. Sugiyama, R. Settai, and Y. Ōnuki: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 044708.
- [16] L. N.Bulaevskii, A. A.Guseinov, and A. I.Rusinov: Sov. Phys. JETP **44** (1976) 1243.
- [17] L. P. Gor'kov and E. I. Rashba: Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 037004.
- [18] P. A. Frigeri, D. F. Agterberg, A. Koga, and M. Sigrist: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 097001.
- [19] P. A. Frigeri, D. F. Agterberg, and M. Sigrist: New J. Phys. **6** (2004) 115.
- [20] K. V. Samokhin: Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 027004.
- [21] V. P. Mineev and K. V. Samokhin: Phys. Rev. B **72** (2005) 212504.
- [22] Y. Yanase and M. Sigrist: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 043712.

- [23] Y. Yanase and M. Sigrist: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 124711.
- [24] Y. Yanase and M. Sigrist: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 124709.
- [25] O. V. Dimitrova and M. V. Feigel'man: JETP Lett. **78** (2003) 637.
- [26] O. Dimitrova and M. V. Feigel'man: Phys. Rev. B **76** (2007) 014522.
- [27] K. V. Samokhin: Phys. Rev. B **70** (2004) 104521.
- [28] R. P. Kaur, D. F. Agterberg, and M. Sigrist: Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 137002.
- [29] D. F. Agterberg and R. P. Kaur: Phys. Rev. B **75** (2007) 064511.
- [30] Y. Matsunaga, N. Hiasa, and R. Ikeda: Phys. Rev. B **78** (2008) 220508.
- [31] V. M. Edelstein: Phys. Rev. B **72** (2005) 172501.
- [32] S. K. Yip: Phys. Rev. B **65** (2002) 144508.
- [33] S. Fujimoto: Phys. Rev. B **72** (2005) 024515.
- [34] S. Fujimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 034712.
- [35] S. Fujimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 051008.
- [36] M. Sato and S. Fujimoto: Phys. Rev. B **79** (2009) 094504.
- [37] Y. Tanaka, T. Yokoyama, A. V. Balatsky, and N. Nagaosa: Phys. Rev. B **79** (2009) 060505.
- [38] M. Sato, Y. Takahashi, and S. Fujimoto: Phys. Rev. Lett. **103** (2009) 020401.
- [39] M. Sato, Y. Takahashi, and S. Fujimoto: Phys. Rev. B **82** (2010) 134521.
- [40] 林伸彦, M. Sigrist: 固体物理 **41** (2006) 631.
- [41] 藤本聡: 日本物理学会誌 **63** (2008) 18.
- [42] M. Sigrist and K. Ueda: Rev. Mod. Phys. **63** (1991) 239.
- [43] Y. Tada, N. Kawakami, and S. Fujimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 054707.
- [44] Y. Tada, N. Kawakami, and S. Fujimoto: Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 267006.
- [45] Y. Tada, N. Kawakami, and S. Fujimoto: Phys. Rev. B **81** (2008) 104506.
- [46] 柳瀬陽一, 播磨尚朝: 固体物理 **47** (2011) 283.
- [47] Y. Mizukami, H. Shishido, T. Shibauchi, M. Shimozawa, S. Yasumoto, D. Watanabe, M. Yamashita, H. Ikeda, T. Terashima, H. Kontani, and Y. Matsuda: Nat. Phys. **7** (2011) 849.
- [48] S. K. Goh, Y. Mizukami, H. Shishido, D. Watanabe, S. Yasumoto, M. Shimozawa, M. Yamashita, T. Terashima, Y. Yanase, T. Shibauchi, A. I. Buzdin, and Y. Matsuda: Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 157006.
- [49] M. Shimozawa, S. K. Goh, R. Endo, R. Kobayashi, T. Watashige, Y. Mizukami, H. Ikeda, H. Shishido, Y. Yanase, T. Terashima, T. Shibauchi, and Y. Matsuda: Phys. Rev. Lett. **112** (2014) 156404.
- [50] R. Joynt and L. Taillefer: Rev. Mod. Phys. **74** (2002) 235.
- [51] D. Aoki and J. Flouquet: J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 011003.
- [52] Y. Nishikubo, K. Kudo, and M. Nohara: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 055002.

- [53] P. K. Biswas, H. Luetkens, T. Neupert, T. Stürzer, C. Baines, G. Pascua, A. P. Schnyder, M. H. Fischer, J. Goryo, M. R. Lees, H. Maeter, F. Brückner, H.-H. Klauss, M. Nicklas, P. J. Baker, A. D. Hillier, M. Sigrist, A. Amato, and D. Johrendt: *Phys. Rev. B* **87** (2013) 180503.
- [54] D. Maruyama, M. Sigrist, and Y. Yanase: *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** (2012) 034702.
- [55] T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase: *Phys. Rev. B* **86** (2012) 134514.
- [56] T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase: *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** (2013) 074714.
- [57] T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase: *J. Phys. Soc. Jpn.* **83** (2014) 013703.
- [58] 吉田智大, 柳瀬陽一, 丸山大輔: *固体物理* **49** (2014) 109.
- [59] M. Sigrist, D. F. Agterberg, M. H. Fischer, J. Goryo, F. Loder, S. -H. Rhim, D. Maruyama, Y. Yanase, T. Yoshida, and S. J. Youn: *J. Phys. Soc. Jpn.* **83** (2014) 061014.
- [60] M. H. Fischer, F. Loder, and M. Sigrist: *Phys. Rev. B* **84** (2011) 184533.
- [61] S. J. Youn, M. H. Fischer, S. H. Rhim, M. Sigrist, and D. F. Agterberg: *Phys. Rev. B* **85** (2012) 220505.
- [62] J. Goryo, M. H. Fischer, and M. Sigrist: *Phys. Rev. B* **86** (2012) 100507.
- [63] M. H. Fischer, T. Neupert, C. Platt, A. P. Schnyder, W. Hanke, J. Goryo, R. Thomale, and M. Sigrist: *Phys. Rev. B* **89** (2014) 020509.
- [64] Y. Yanase: *J. Phys. Soc. Jpn.* **83** (2014) 014703.
- [65] N. Harrison and A. Shekhter: arXiv.1407.2291.
- [66] 人見尚典, 柳瀬陽一: 日本物理学会第 69 回年次大会, 2014 年 3 月 28 日, 東海大学, 28aCG-10.
- [67] Y. Yanase: *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** (2013) 044711.
- [68] Y. Nakamura and Y. Yanaes: *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** (2013) 083705.
- [69] A. B. Vorontsov, J. A. Sauls, and M. J. Graf: *Phys. Rev. B* **72** (2005) 184501.
- [70] K. M. Suzuki, Y. Tsutsumi, N. Nakai, M. Ichioka, and K. Machida: *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** (2011) 123706.
- [71] 渡辺達也, 柳瀬陽一, 吉田智大: 日本物理学会第 69 回年次大会, 2014 年 3 月 28 日, 東海大学, 28aPS-1.
- [72] D. F. Agterberg, M. Sigrist, and H. Tsunetsugu: *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 207004.
- [73] A. Aperis, G. Varelogiannis, and P. B. Littlewood: *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010) 216403.
- [74] H. A. Radovan, N. A. Fortune, T. P. Murphy, S. T. Hannahs, E. C. Palm, S. W. Tozer, and D. Hall: *Nature (London)* **425** (2003) 51.
- [75] A. Bianchi, R. Movshovich, C. Capan, P. G. Pagliuso, and J. L. Sarrao: *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 187004.
- [76] N. Read and D. Green: *Phys. Rev. B* **61** (2000) 10267.
- [77] A. Y. Kitaev: *Phys. Usp.* **44** (2001) 131.
- [78] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig: *Phys. Rev. B* **78** (2008)

195125.

- [79] L. Fu and C. L. Kane: Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 096407.
- [80] X.-L. Qi, T. L. Hughes, S. Raghu, and S.-C. Zhang: Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 187001.
- [81] 佐藤昌利 : 物性研究 **94** (2010) 311.
- [82] M. Sato: Phys. Rev. B **81** (2010) 220504.
- [83] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma: Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 077001.
- [84] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen: Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 177002.
- [85] L. Fu and E. Berg: Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 097001.
- [86] 笠真生 , 古崎昭 : 固体物理 **45** (2010) 731.
- [87] X.-L. Qi and S.-C. Zhang: Rev. Mod. Phys. **83** (2011) 1057.
- [88] Y. Tanaka, M. Sato, and N. Nagaosa: J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 011013.
- [89] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma: Rev. Mod. Phys. **80** (2008) 1083.
- [90] C. J. Bolech and E. Demler: Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 237002.
- [91] Y. Maeno, S. Kittaka, T. Nomura, S. Yonezawa, and K. Ishida: J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 011009.
- [92] S. Nakosai, Y. Tanaka, and N. Nagaosa: Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 147003.
- [93] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs: Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 405.
- [94] M. Kohmoto: Ann. Phys. (N. Y.) **160** (1985) 343.
- [95] L. Fu: Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 106802.
- [96] M. Sato, A. Yamakage, and T. Mizushima, Physica E **55** (2014) 20.
- [97] F. Zhang, C. L. Kane, and E. J. Mele: Phys. Rev. Lett. **111** (2013) 056403.
- [98] C.-K. Chiu, H. Yao, and S. Ryu: Phys. Rev. B **88** (2013) 075142.
- [99] Y. Ueno, A. Yamakage, Y. Tanaka, and M. Sato: Phys. Rev. Lett. **111** (2013) 087002.
- [100] T. Morimoto and A. Furusaki: Phys. Rev. B **88** (2013) 125129.
- [101] Y. Tsutsumi, M. Ishikawa, T. Kawakami, T. Mizushima, M. Sato, M. Ichioka, and K. Machida J. Phy. Soc. Jpn. **82** (2013) 113707.
- [102] K. Shiozaki and M. Sato: arXiv:1403.3331.
- [103] T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 1674.
- [104] Y. Tada, N. Kawakami, and S. Fujimoto: New. J. Phys. **11** (2009) 055070.
- [105] M. Tinkham: Phys. Rev. **129** (1963) 2413.
- [106] A. I. Buzdin and H. Kachkachi: Phys. Lett. A **225** (1997) 341.
- [107] A. Buzdin, Y. Matsuda, and T. Shibauchi: Europhys. Lett. **80** (2007) 67004.