異方的超伝導体の渦系状態における電子状態の 理論

指導教官 加藤雄介 助教授

平成15年2月提出

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 37-16435 植野洋介

目次

第1章	はじめに	3		
1.1	第 2 種超伝導体と Vortex	3		
1.2	秩序変数と Vortex	3		
1.3	Vortex 束縛状態	4		
1.4	Vortex 構造と STM	4		
1.5	高温超伝導体の vortex			
1.6	再び NbSe ₂ に戻って	11		
1.7	本研究の動機と目的・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	13		
1.8	本論文の構成	16		
第2章	準古典理論の定式化	17		
2.1	Green 関数	17		
2.2	singlet-pairing の場合	18		
2.3	準古典近似	21		
2.4	規格化条件	27		
2.5	準古典 Green 関数による物理量の表現	29		
第3章	explosion trick \succeq zero-core model	35		
第4章	Riccati Formalism			
4.1	Scalar Riccati 方程式	39		
4.2	Kramer-Pesch 近似	44		
第5章	結果と議論	49		
5.1	Vortex Bound State への応用	49		
5.2	準古典理論の限界	54		
5.3	各対称性における Vortex Bound State	57		
	5.3.1 s 波の場合	57		
	5.3.2 d波の場合	59		
	5.3.3 NbSe ₂ の場合			
5.4	- 3 次元への拡張	63		
	5.4.1 s 波の場合	68		

		d 波の場合	
第6章	i まとめ		73

1.1 第 2 種超伝導体と Vortex

1957年に Abrikosov によって超伝導体が第1種と第2種とに区分できる事が見出された。金属元素の多くは第1種超伝導体である。これらは臨界磁場 H_c 以下の磁場中においては磁場を試料内から完全に排除し、 H_c 以上では超伝導状態が壊れて正常状態となる。それに対して多くの合金および Nb、V といった元素は第2種超伝導体である。これらは下部臨界磁場 H_{c1} 以下では完全に磁場を排除し、上部臨界磁場 H_{c2} 以上で正常状態となる。そしてその中間領域 $H_{c1} < H < H_{c2}$ においては、超伝導状態を保持したまま磁場は試料内に侵入する。この時、超伝導体のマクロな量子性により侵入磁束は量子化され 1 、この量子化された磁束は 1 ないている。一般に 1 ないている。一般に 1 ないでは、の量子数の2乗に比例している。従って平衡状態において各 1 ないます。これらの 1 ないている。この時の超伝導体の状態は混合状態あるいは 1 ないては、状態と呼ばれる。

また、液体 He や中性アルカリ原子気体の超流動体においても vortex および Abrikosov 格子が存在する。これらの系では粒子は電荷を持たない為、磁場と位相は結合せず、vortex は磁場の代わりに各運動量を量子化して保持する。

1.2 秩序変数と Vortex

一般に超伝導体は、正常状態の持つ対称性をなんらかのレベルで自発的に破っており、その事によって超伝導体を特徴付ける秩序変数 Δ が定義される。この時、超伝導体に特有な事として $\mathrm{U}(1)$ ゲージ対称性が破れている。超伝導における秩序変数 Δ はまた超伝導ギャップ、pair-potential とも呼ばれる。

vortex は線欠陥とも呼ばれ、1次元のトポロジカルな励起構造である。すなわち、vortex はその秩序変数が構成する空間の1次元ホモトピー群(基本群) π_1 によって分類される。このことから、vortex は秩序変数と密接な関係にある。

 $^{^{1}}$ 磁束量子は $\frac{ch}{2e}$ である。

1.3 Vortex 束縛状態

vortex 付近において超伝導ギャップ Δ は空間的に変化し、vortex core でその絶対値 $|\Delta|$ は極小点を持つ。電子はこの pair-potential の変化により vortex core 付近に離散的な量子準位を形成する(図 1.1)。これが vortex 束縛状態 と呼ばれるもの

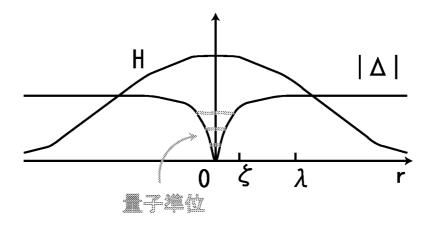


図 1.1: 典型的な第2種超伝導体における vortex の周りの模式図。

である。1964年に Caroli,de Gennes,Matricon によって、このような低エネルギーの vortex 束縛状態の存在が理論的に初めて示された [1]。彼らは s 波超伝導対中の一本の vortex を考え、Bogolubov-de Gennes(BdG) 方程式の固有値を求める事によって vortex core 付近でのエネルギースペクトルを得た。

超伝導ギャップ以下のエネルギー領域におけるこのような vortex 束縛状態は局所的にゼロでない状態密度を生み出し、その超伝導体の熱力学的諸量や伝導特性に重要な役割を果たすと考えられる。

1.4 Vortex 構造とSTM

1989 年に Hess らは vortex の周りの電子状態を実験的に観測する事に初めて成功した [2]。それまでは Bitter pattern としてしか観測できなかった Abrikosov 格子を、彼らは走査型トンネル顕微鏡 (STM^3) を用いて鮮明に観測した (図 1.2)。さらに、彼らは STM によって Abrikosov 格子中の一本の vortex の周りのエネルギースペクトルを観測した。STM におけるトンネル電流は

$$I(\mathsf{r},V) \propto \int_{\infty}^{\infty} dE \ \nu(\mathsf{r},E) \{ f(E) - f(E+eV) \}$$
 (1.1)

²vortex bound state

³Scanning Tunneling Microscope. IBM Zurich Laboratory の Gerd Binnig と Heinrich Rohrer によって 1981 年に開発された。その業績によりこの二人は 1986 年にノーベル物理学賞受賞。

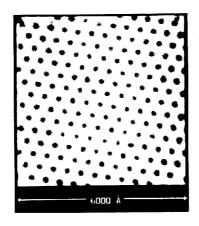


図 1.2: 温度 1.8K、磁場 1T 中の $NbSe_2$ における Abrikosov 格子。vortex が三角格子を組んでいることがわかる。色の濃淡は dI/dV の大きさに対応する。([2] より)

で与えられる。ここで $V, E, \nu(\mathbf{r}, E), f(E)$ はそれぞれバイアス電圧、エネルギー値、超伝導体の局所状態密度 (Local Density Of States; 略してLDOS と呼ぶ)、Fermi 分布関数である。上式を微分して

$$\frac{dI(\mathsf{r},V)}{dV} \propto \int_{\infty}^{\infty} dE \ \nu(\mathsf{r},E) \{ -\frac{df(E+eV)}{dV} \}$$
 (1.2)

となる。十分低温で、Fermi 分布関数の導関数は Fermi 面付近のみで値を持つ δ 関数のように振舞う。従って $\frac{dI}{dV}$ を測定する事によって超伝導体の LDOS が得られる。Hess らは δ 回回転対称性 C_{δ} を持つ層状の第 δ 種超伝導体である δ 2H-NbSe2 を用いて実験を行い、vortex core 付近で δ 0mV の大きなピークが表れる事を発見した(図 δ 1.3)。このピークは今では zero-bias peak と呼ばれている。 δ 2H-NbSe2 は不純物が少なく、その表面もきれいである。また、その超伝導転移温度 δ 2H-NbSe2 は不純物が少なく、その表面もきれいである。また、その超伝導転移温度 δ 2H-NbSe2 に関する詳細な δ 32kG、77A、 δ 69A である。Hess δ はさらに連続して δ 2H-NbSe2 に関する詳細な δ 3TM の実験を行った δ 4、 δ 6。その結果は以下のようにまとめられる δ 8、 δ 9 (図 δ 1.4)。

- 1. vortex core 周りの LDOS の等高線は 6 回回転対称 C_6 の星型をしている。
- 2. この星型は、エネルギーの変化と共に回転する:V=0mV においては星型の突 起部分の一つが a 軸方向を向いているのに対し、エネルギーを徐々に上げていくにつれ回転し、V=0.5mV において 30 度まで回転している。
- $3.\ V=0.24 {
 m mV}$ 程度の中間領域では星型の突起は 2 本のほぼ平行な突起に分裂している。
- 4. vortex center を通る直線上の LDOS をみると、vortex center における zerobias peak 以外にも 2 種類のピークが見える (図 1.5)。 これらのうち、外側

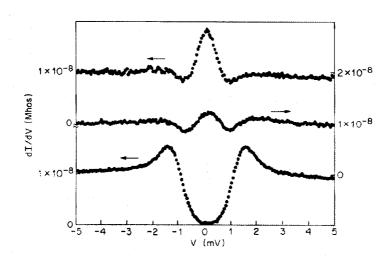


図 1.3: 温度 1.85K、磁場 0.02T における NbSe₂ の dI/dV と V。 3 つの点 (vortex 上、vortex から 75A の点、2000A の点)についてプロットしてある。zero-bias peak が顕著に表れている。([2] より)

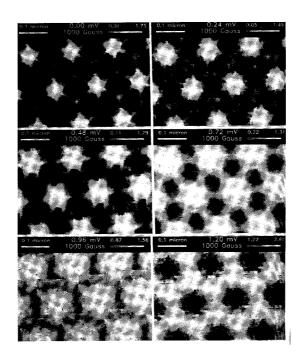


図 1.4: 実空間における ${
m NbSe_2}$ の dI/dV のパターン。星型の突起の回転および分裂が見て取れる。([4] より)

のピーク位置は直線の角度にほとんど依存しない。それに対して内側のピーク位置は、直線の角度を 0 度、15 度、30 度と変えるにつれ(図 1.6)、より低バイアス電圧側にシフトしている。

1.5 高温超伝導体の vortex

一般的に、高温超伝導体は d 波のクーパーペアを持つと考えられているが、それに反対する意見もあり活発な議論がなされている。 Schopohl と Maki は準古典理論 [10] を用いて 2 次元的な d 波超伝導体の vortex 周りのエネルギースペクトルを調べた [11]。彼らは

$$\Delta(\mathbf{r}, \theta) = \Delta(T)\cos(2\theta)\tanh\left\{\frac{r}{\xi}\right\}e^{i\phi}$$
(1.3)

という秩序変数の形を仮定し 4 、変分法を用いてLDOSN(r, E)を解析的に求めた。 その結果、彼らはd波の超伝導ギャップから4回回転対称 C_4 のLDOSの十字型パ ターンが生じる事を見出した(図1.7)。それに対して、ギャップがs波の場合の LDOS のパターンは円形である。この事から、vortex 付近の LDOS のパターンか らその物質の超伝導ギャップの対称性を推定する事が出来ると考えられる。さら に、Ichioka らはこの LDOS の十字型がエネルギーの変化と共に 45 度回転する事 を示した [12]。彼らも準古典の Eilenberger 方程式を用いて、一本の vortex 周りの 電子状態を数値的に調べた。Schopohl-Maki と大きく異なるのは、ギャップの形を 仮定せずに自己無撞着に求めた事である。その結果、LDOSの実空間におけるパ ターンはSchopohl-Makiのものとほぼ同様であった(図1.8(a))。また、Ichiokaら は8本の隆起線がvortex coreから充分遠方にまで伸びていることに着目した(図 1.8(b) 。 これは Schopohl-Maki では見落とされていた観点であり、以下で見るよ うにこれがLDOS パターンの回転に本質的な役割を果たす。vortex-core の大きさ はエネルギーの低下と共に小さくなる(Kramer-Pesch 効果 [16])。その結果、エネ ルギーを低くしていくとLDOS は vortex center に集まってきて、そこでの LDOS のピークが成長していく。またそれと共に、上で述べた隆起線が LDOS のパター ンを決定するようになる (図 1.8(c))。引き続き E=0 にまでエネルギーを下げる と、vortex center では大きな zero-bias peak が表れる。一方、8本の隆起線は2本 ずつが重なって4本となり、再び十字型のLDOSパターンを形成する(図1.8(d))。 この時の十字型を見ると、高エネルギー領域における十字型が45度回転したよう に見える。このようにしてLDOSパターンの回転は説明される5。

⁴文献[11]の式(3)

⁵この LDOS パターンの回転のメカニズムは d 波の場合、つまり高温超伝導体の場合に対して初めて解明された。しかしながら、高温超伝導体においてそもそも準古典理論が一般に適用可能かどうかは未だ疑問の残るところである。従って、本節の主眼はその LDOS パターンの回転のアイディアにあるのであり、高温超伝導体の vortex 束縛状態を議論するものではないことを注意しておく。

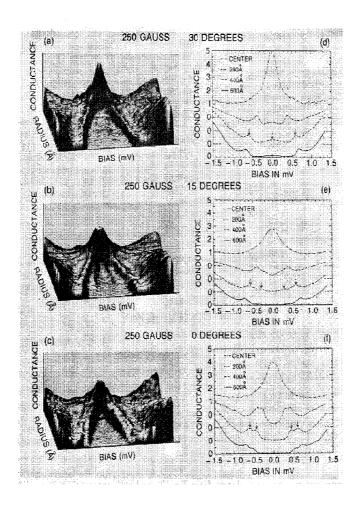


図 1.5: 図 1.6 で示された直線上での $dI(\mathbf{r},V)/dV$ 。(a) 30° (b) 15° (c) 0° 外側のピークが直線の角度に依存しないのに対し、内側のピークが角度の増大とともに低バイアス電圧側にシフトしているのがみてとれる。[7]

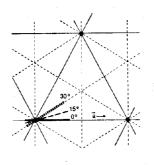


図 1.6: 図 1.5 中における直線の角度を示したもの。([7] より)

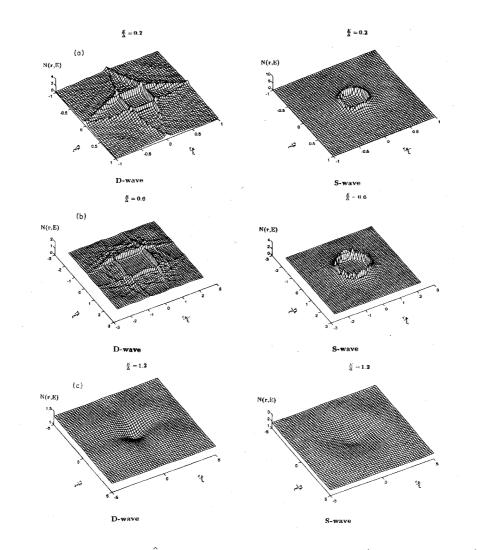


図 1.7: 実空間 $\mathbf{r}=r_a\hat{\mathbf{a}}+r_b\hat{\mathbf{b}}$ における s 波 (右図)) および d 波 (左図) ギャップ の LDOS $N(\mathbf{r},E)$ 。 (a) $E/\Delta(T)=0.2$ (b) $E/\Delta(T)=0.6$ (c) $E/\Delta(T)=1.2$ ([11] より)

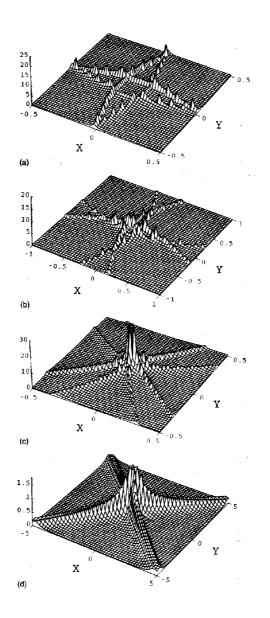


図 1.8: 実空間における d 波 vortex の周りの LDOS N(r, E)。 N(r, E) の値が振動しているように見えるのはメッシュ数の不足によるものであり、充分細かいメッシュではその値は滑らかに変化する。 (a)E=0.2 自己無撞着に LDOS を求めた場合も Schopohl-Maki とほぼ同様になる。 (b)E=0.2 (a) と全く同じ図であるが、それよりも広い空間領域を表示している。こうすると (a) では見えなかった 8 本の隆起線が見える。 (c)E=0.01 エネルギーを小さくすると十字型の図形は縮小していく。 (d)E=0 充分エネルギーが低い時には、vortex core における通常の zero-bias peak と 4 つのそれよりも低いピークとになる。また、 (a) に比較すると十字型の図形が 45 度回転している事がわかる。 ([12] より)

1.6 再び NbSe₂ に戻って

さて、前の節でd波超伝導体に対して得られた理論結果を見てみると、 $NbSe_2$ の実験結果と共通するものが多い事に気が付く。そこでd波超伝導体に対して得られた理論結果を、 $NbSe_2$ と対応させるように、以下のようにまとめてみる:

- 1. E = 0.2 において、4回回転対称 C_4 の LDOS の十字型パターンが生じる。
- 2. この十字型は、エネルギーの変化と共に回転する:E=0.2 においては十字型の 4 本の突起部分の一つが a 軸方向を向いているのに対し、エネルギーを徐々に下げていくにつれ回転し、E=0 において 45 度まで回転する。
- 3. E=0.01 において、 8 本の隆起線はほぼ平行な 2 本ごとに 4 方向に伸びている。これは E=0.2 および E=0 の状況からみると、十字型の各突起が回転しながらほぼ平行な 2 本の突起に分裂したように見える。
- 4. vortex center を通る直線上の LDOS をみると、E=0.2 では vortex center における zero-bias peak 以外にも確かにピークが見える角度が存在する(図 1.8)。 ただしそれは 1 種類であり、直線の角度を変えるにつれ低バイアス電圧側にもシフトする。

こうしてみると、 $NbSe_2$ の STM 実験で見られた 4 つの特徴と全て定性的にはほぼ 一致している事がわかる。

今、 $NbSe_2$ の実験を振り返ってみると、それはAbrikosov格子中の一本のvortex周りのトンネル電流を測定したものであった。従って、観測されたLDOSの異方的な特徴は次のような効果によって引き起こされていると考えられる:

- I. 超伝導ギャップの異方性の効果
- II. vortex 間相互作用の効果
- III. 異方的な Fermi 面による効果

一方、前節で引用したd波超伝導体の理論は皆1本のvortexのみを扱っている。また、等方的なFermi 面を仮定している。にもかかわらず、そこから得られる特徴は上記のように $NbSe_2$ の実験結果の特徴を良く捉えている。従って、超伝導ギャップの異方性こそがこれらの特徴を引き起こす主要因であると推測される。

一般に超伝導ギャップ $\Delta(\mathbf{r},\theta)$ は以下の様に書かれる:

$$\Delta(\mathsf{r},\theta) = \Delta(\mathsf{r}) \cdot f(\theta) \tag{1.4}$$

ただし、 θ は層状物質における運動量ベクトルの面内方向を表す 6 。そうすると、単純にギャップの異方性と言っても、それは以下の 2 種類に分けられる事がわかる:

 $^{^{6}}$ r = r_{a} â + r_{b} $\hat{\mathsf{b}}$ = r_{\parallel} U + r_{\perp} V , p = $\cos\theta$ â + $\sin\theta$ $\hat{\mathsf{b}}$

I-i. ギャップの振幅 Δ(r) の異方性

I-ii. 運動量空間におけるギャップの異方性 ($f(\theta)$ の異方性)

再び前節の d 波超伝導体に関する結果を振り返ってみると、そこでは LDOS の異方性はギャップ振幅 $\Delta(r)$ の異方性にはほとんどよらない。Ichioka らの自己無撞着な計算によれば、ギャップ振幅 $\Delta(r)$ は $f(\theta)$ の異方性の影響を受けて 4 回回転対称 C_4 な異方性を持つ(図 1.9 》。しかしながら、この異方性を取り込んで計算された

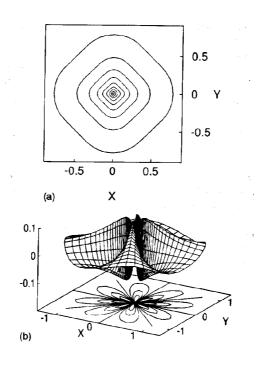


図 1.9: $T/T_c = 0.1$ における pair-potential。4回回転対称であるのがわかる。(a) pair-potential の振幅。 (b) pair-potential の位相。 ([12] より)

LDOS のパターンは、完全に等方的なギャップ振幅を仮定した Schopohl-Maki のものとほぼ同一であった。このことから、超伝導ギャップ、とりわけその $f(\theta)$ 部分の異方性が LDOS のパターンを本質的に決めていると推測される。

Hayashi らは、NbSe₂ における超伝導ギャップの異方性の効果を詳細に調べ、NbSe₂ の STM 実験で見られた 4 つの特徴を再現する事が出来た [8, 9]。彼らは

$$\Delta(\mathsf{r},\theta) = \Delta(\mathsf{r}) \cdot \left(1 + \frac{1}{3}\cos 6\theta\right) \tag{1.5}$$

という異方的 s 波のペアリングを仮定して 1 本の vortex に対して準古典理論を適用し、Eilenberger 方程式を数値的に解いた。自己無撞着に計算されたギャップは、d 波の場合同様、 $f(\theta)=1+\frac{1}{3}\cos 6\theta$ 部分の対称性を反映して 6 回の回転対称性 C_6 を持つ (図 1.10)。この pair-potential を用いて計算された LDOS を図 1.11 に示す。これは $NbSe_2$ に関する STM 実験の 4 つの特徴の初めの 3 つ、すなわち

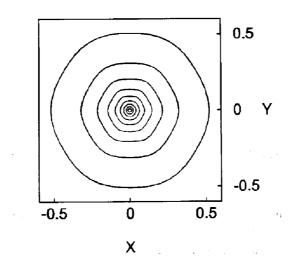


図 1.10: $T/T_c = 0.1$ における pair-potential。 ([8] より)

- 1.6回回転対称の星型パターン
- 2. 星型の30度回転
- 3. 中間エネルギー領域での隆起線の分裂

をよく再現している。また、vortex-center を通る直線上の LDOS は図 1.12 のようになる。これは Hess らの図 1.6 に対応したもので、 0° においてはピーク γ とほとんど一体となっているピーク ϵ が、角度を上げるに伴ってピーク γ がほとんど変化しないのに対して、ピーク ϵ の方は分裂して低バイアス電圧側に移動していくのが見える。すなわち、4 番目の特徴も再現している事がわかる。

さらに、Hayashi らはこれらの結果を quasiparticle trajectory という観点からその物理的解釈を試みた。この事については第4章で詳しく議論する。

1.7 本研究の動機と目的

動機

Hayashi らの数値的な結果は NbSe₂ に関する Hess らの実験結果をよく再現するものである。しかしながらまず第一に、手法そのものは一般的であるものの、彼らの LDOS の結果はいわば場当たり的であり、異なる系に適用するには再び全ての計算過程をやり直さなければならない。第二に、彼らの結果から LDOS パターン形成を物理的に解釈することは困難であり、実際彼らの解釈は満足のいくものではない。このような観点から、彼らの結果によって Vortex Bound State の LDOS パターン形成が物理的に理解されたとは言い難い。

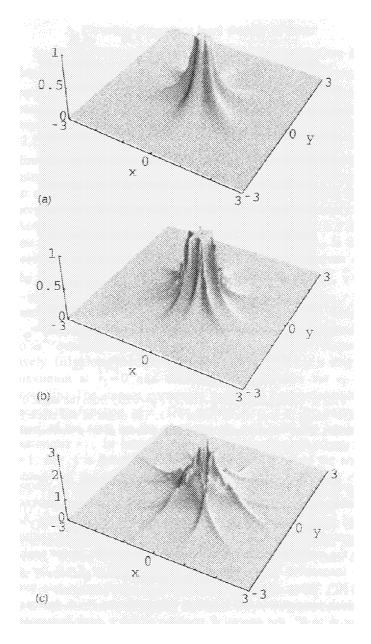


図 1.11: $T/T_c=0.1$ における LDOS $N(\mathsf{r},E)$ 。 (a) $E/\Delta(T)=0$ (b) $E/\Delta(T)=0.2$ (c) $E/\Delta(T)=0.4$ ([8] より)

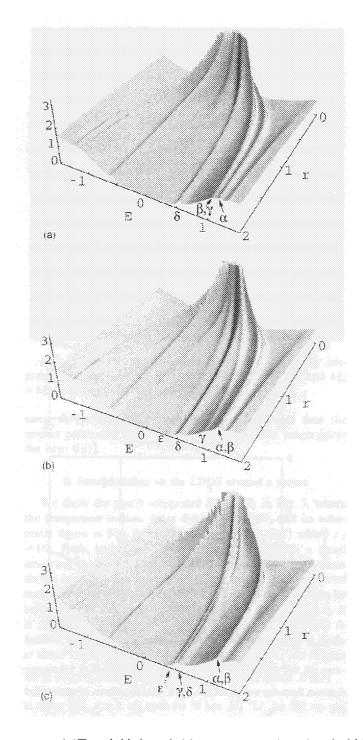


図 1.12: vortex-center を通る直線上における LDOS $N(\mathsf{r},E)$ 。 ただし $T/T_c=0.1$ 。 (a) 30° (b) 15° (c) 0° 角度を上げるに伴ってピーク ϵ がピーク γ から分裂し、低バイアス電圧側に移動しているのが見える。 ([8] より)

目的

本研究では、Kramer と Pesch の用いた近似法を Riccati Formalism の準古典理論に適用する事によって、解析的手法で vortex の周りの LDOS を理論的に考察する。そのような手法によって Vortex 束縛状態を物理的に理解する事が本研究の最大の目的である。

その上で、準古典理論の適用範囲内における、系によらない一般的な LDOS パターンの表式の導出も試みる。その諸熱力学的量を考慮できるようにするため、エネルギースペクトルに関する議論も行いたい。

さらに、それまでの2次元の場合と同様の議論を、3次元的なFermi面を持つ場合に拡張することも試みる。

1.8 本論文の構成

本論文は次のように構成されている。まず第2章では簡単に Green 関数法をまとめた後、Gor'kov 方程式から出発して Eilenberger 方程式に至るまでの、準古典理論の定式化について丁寧に述べる。これまで紹介したように準古典理論は vortex 束縛状態を調べる際にも非常に有効な手法である。第3章では vortex の zero-core モデルの議論を通して、explosion trick という解の構成法を導入する。第4章ではまず Riccati Formalism の定式化について丁寧に述べる。Schopohl によって考案されたこの Riccati Formalism では交換関係や explosion trick が実に巧みに用いられ、準古典理論は Scalar Riccati 方程式に従う2つのスカラー量 $a_+(\mathbf{r},\mathbf{p};\omega_n),b_-(\mathbf{r},\mathbf{p};\omega_n)$ を求める事に帰する。また、この Riccati Formalism に Kramer と Pesch による近似法を適用する。第5章では以上の理論を vortex 束縛状態に適用して、Vortex Bound State に関する議論を行う。その後、さらにその理論を 3 次元的な Fermi 面を持つ場合に拡張する。この章が本論文におけるハイライトである。以上の議論を第6章において簡単にまとめる。

第2章 準古典理論の定式化

この章では、準古典理論の定式化について述べる。まず初めに Green 関数を定義して Gor'kov 理論を簡単にまとめた後、準古典近似を導入して準古典理論を展開していく。最後に準古典 Green 関数に課される規格化条件と、準古典 Green 関数による物理量の表式を述べる。

2.1 Green 関数

(虚時間) Green 関数を次のように定義する 1 。G は通常の Green 関数であり、 F は異常 Green 関数である。

$$G_{\alpha\beta}(x_1, x_2) \equiv -\langle T\psi_{\alpha}(\mathsf{r}_1, \tau_1)\psi_{\beta}^{\dagger}(\mathsf{r}_2, \tau_2)\rangle \tag{2.1}$$

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(x_1, x_2) \equiv \langle T\psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathsf{r}_1, \tau_1)\psi_{\beta}(\mathsf{r}_2, \tau_2)\rangle \tag{2.2}$$

$$F_{\alpha\beta}(x_1, x_2) \equiv \langle T\psi_{\alpha}(\mathsf{r}_1, \tau_1)\psi_{\beta}(\mathsf{r}_2, \tau_2)\rangle \tag{2.3}$$

$$F^{\dagger}{}_{\alpha\beta}(x_1, x_2) \equiv \langle T\psi_{\alpha}{}^{\dagger}(\mathsf{r}_1, \tau_1)\psi_{\beta}{}^{\dagger}(\mathsf{r}_2, \tau_2)\rangle \tag{2.4}$$

これらの間には次のような対称性がある:

$$G_{\alpha\beta}(x_{1}, x_{2}) = -\langle T\psi_{\alpha}(x_{1})\psi_{\beta}^{\dagger}(x_{2})\rangle$$

$$= \langle T\psi_{\beta}^{\dagger}(x_{2})\psi_{\alpha}(x_{1})\rangle$$

$$= \bar{G}_{\beta\alpha}(x_{2}, x_{1}) \qquad (2.5)$$

$$G^{*}_{\alpha\beta}(x_{1}, x_{2}) = -\langle T\psi_{\alpha}(x_{1})\psi_{\beta}^{\dagger}(x_{2})\rangle^{*}$$

$$= -\langle T\psi_{\beta}(r_{2}, -\tau_{2})\psi_{\alpha}^{\dagger}(r_{1}, -\tau_{1})\rangle$$

$$= G_{\beta\alpha}(r_{2}, -\tau_{2}; r_{1}, -\tau_{1}) \qquad (2.6)$$

$$\bar{G}^{*}_{\alpha\beta}(x_{1}, x_{2}) = \langle T\psi_{\alpha}^{\dagger}(x_{1})\psi_{\beta}(x_{2})\rangle^{*}$$

$$= \langle T\psi_{\beta}^{\dagger}(r_{2}, -\tau_{2})\psi_{\alpha}(r_{1}, -\tau_{1})\rangle^{*}$$

$$= \bar{G}_{\beta\alpha}(r_{2}, -\tau_{2}; r_{1}, -\tau_{1}) \qquad (2.7)$$

$$F^{*}_{\alpha\beta}(x_{1}, x_{2}) = \langle T\psi_{\alpha}(x_{1})\psi_{\beta}(x_{2})\rangle^{*}$$

$$= \langle T\psi_{\beta}^{\dagger}(r_{2}, -\tau_{2})\psi_{\alpha}^{\dagger}(r_{1}, -\tau_{1})\rangle$$

$$= F^{\dagger}_{\beta\alpha}(r_{2}, -\tau_{2}; r_{1}, -\tau_{1}) \qquad (2.8)$$

¹以下で $x \equiv (\mathbf{r}, \tau)$ とする。

$$F_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = -\langle T\psi_{\beta}(x_2)\psi_{\alpha}(x_1)\rangle$$

= $-F_{\beta\alpha}(x_2, x_1)$ (2.9)

また、

$$\dot{\nabla} \equiv \nabla - \frac{ie}{c} \mathsf{A}(\mathsf{r}) \tag{2.10}$$

$$\acute{\nabla} \equiv \nabla + \frac{ie}{c} \mathsf{A}(\mathsf{r}) \tag{2.11}$$

と書くことにする²。BCS-Hamiltonian ³ :

$$H_{BCS} = \int d\mathbf{r} \left\{ -\psi_{\alpha}^{\dagger} \frac{\nabla^2}{2m} \psi_{\alpha} + \frac{g}{2} \psi_{\beta}^{\dagger} \psi_{\alpha}^{\dagger} \psi_{\alpha} \psi_{\beta} \right\}$$
 (2.12)

より、BCS近似におけるこれらの運動方程式(Gor'kov 方程式4)は

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau_1} + \frac{\dot{\nabla}_1^2}{2m} + \mu\right) G_{\alpha\beta}(x_1, x_2) + \Delta_{\alpha\gamma}(x_1) F^{\dagger}_{\gamma\beta}(x_1; x_2)
= \delta_{\alpha\beta} \delta(x_1 - x_2)$$
(2.13)

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} + \frac{\acute{\nabla}_1^2}{2m} + \mu\right) \bar{G}_{\alpha\beta}(x_1, x_2) + \Delta^*_{\alpha\gamma}(x_1) F_{\gamma\beta}(x_1, x_2)$$

$$= \delta_{\alpha\beta} \delta(x_1 - x_2) \tag{2.14}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} + \frac{\dot{\nabla}_1^2}{2m} + \mu\right) F^{\dagger}{}_{\alpha\beta}(x_1, x_2) - \Delta^*{}_{\alpha\gamma}(x_1) G_{\gamma\beta}(x_1, x_2)
= 0$$
(2.15)

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau_1} + \frac{\dot{\nabla}_1^2}{2m} + \mu\right) F_{\alpha\beta}(x_1, x_2) - \Delta_{\alpha\gamma}(x_1) \bar{G}_{\gamma\beta}(x_1, x_2)$$

$$= 0 \tag{2.16}$$

と表される。ここで pair potential は以下のように定義される。

$$\Delta_{\alpha\beta}(x) \equiv |g|F_{\alpha\beta}(x,x) \tag{2.17}$$

2.2 singlet-pairing の場合

singlet-pairing において、pair-potential はspin添え字に対して反対称である:

$$\Delta_{\alpha\beta}(x) = -\Delta_{\beta\alpha}(x) \tag{2.18}$$

 $^{^2}$ 以下では定常状態を考える。そのため、随時 $x\Rightarrow r$ 等の置き換えをする。 3 ここでは s 波とする。

⁴ゴリコフなのかゴルコフなのかは定かではない。

したがって

$$\Delta_{\alpha\beta}(x) = i\sigma_{\alpha\beta}^y \Delta(x) \tag{2.19}$$

$$\Delta^{\dagger}{}_{\alpha\beta}(x) = -i\sigma^{y}{}_{\alpha\beta}\Delta^{*}(x) \tag{2.20}$$

と書いてspin index を持たない量が定義できる5。

Green 関数も同様にして次のように表される:

$$G_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = \delta_{\alpha\beta}G(x_1, x_2) \tag{2.21}$$

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = \delta_{\alpha\beta}\bar{G}(x_1, x_2) \tag{2.22}$$

$$F_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = i\sigma^y{}_{\alpha\beta}F(x_1, x_2) \tag{2.23}$$

$$F^{\dagger}{}_{\alpha\beta}(x_1, x_2) = -i\sigma^y{}_{\alpha\beta}F^{\dagger}(x_1, x_2) \tag{2.24}$$

これらを用いると運動方程式は次のように書ける:

$$\begin{pmatrix}
-\frac{\partial}{\partial \tau_1} + \frac{\dot{\nabla}_1^2}{2m} + \mu & -\Delta(x_1) \\
\Delta^*(x_1) & \frac{\partial}{\partial \tau_1} + \frac{\dot{\nabla}_1^2}{2m} + \mu
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
G(x_1, x_2) & F(x_1, x_2) \\
-F^{\dagger}(x_1, x_2) & \bar{G}(x_1, x_2)
\end{pmatrix}$$

$$= \delta(x_1 - x_2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.25}$$

また

$$\check{G}^{-1}(x) \equiv \begin{pmatrix} -\frac{\partial}{\partial \tau_{1}} + \frac{\dot{\nabla}_{1}^{2}}{2m} + \mu & -\Delta(x_{1}) \\ \Delta^{*}(x_{1}) & \frac{\partial}{\partial \tau_{1}} + \frac{\dot{\nabla}_{1}^{2}}{2m} + \mu \end{pmatrix}$$

$$\check{G}(x_{1}, x_{2}) \equiv \begin{pmatrix} G(x_{1}, x_{2}) & F(x_{1}, x_{2}) \\ -F^{\dagger}(x_{1}, x_{2}) & \bar{G}(x_{1}, x_{2}) \end{pmatrix}$$
(2.26)

$$\check{G}(x_1, x_2) \equiv \begin{pmatrix} G(x_1, x_2) & F(x_1, x_2) \\ -F^{\dagger}(x_1, x_2) & \bar{G}(x_1, x_2) \end{pmatrix}$$
(2.27)

とすると上の式は簡潔に

$$\check{G}^{-1}(x_1)\check{G}(x_1, x_2) = \check{1}\delta(x_1 - x_2) \tag{2.28}$$

と書くことが出来る。この表示における Green 関数の対称性は

$$G(x_1, x_2) = \bar{G}(x_2, x_1)$$
 (2.29)

$$G^*(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;\tau) = G(\mathsf{r}_2,\mathsf{r}_1;\tau)$$
 (2.30)

$$\bar{G}^*(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;\tau) = \bar{G}(\mathsf{r}_2,\mathsf{r}_1;\tau)$$
 (2.31)

$$F^*(\mathsf{r}_1, \mathsf{r}_2; \tau) = F^{\dagger}(\mathsf{r}_2, \mathsf{r}_1; \tau)$$
 (2.32)

$$F(x_1, x_2) = F(x_2, x_1) (2.33)$$

 $^{^{5}}i\sigma^{y}=\left(egin{array}{cc} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{array} \right)$

となる 6 。また、以上では au_1 に関する運動方程式を立てたが、 au_2 に対して同じ計算を行うとその運動方程式は

$$\begin{pmatrix}
G(x_1, x_2) & F(x_1, x_2) \\
-F^{\dagger}(x_1, x_2) & \bar{G}(x_1, x_2)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\frac{\partial}{\partial \tau_2} + \frac{\dot{\nabla}_2^2}{2m} + \mu & -\Delta(x_2) \\
\Delta^*(x_2) & -\frac{\partial}{\partial \tau_2} + \frac{\dot{\nabla}_2^2}{2m} + \mu
\end{pmatrix}$$

$$= \delta(x_1 - x_2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.34}$$

となる⁷。あるいはまた

$$\tilde{\tilde{G}}^{-1}(x) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \tau_2} + \frac{\dot{\nabla}_2^2}{2m} + \mu & -\Delta(x_2) \\ \Delta^*(x_2) & -\frac{\partial}{\partial \tau_2} + \frac{\dot{\nabla}_2^2}{2m} + \mu \end{pmatrix}$$
(2.35)

を定義して

$$\check{G}(x_1, x_2)\bar{\check{G}}^{-1}(x_2) = \check{1}\delta(x_1 - x_2)$$
(2.36)

と書くことも出来る。

このような右 $\operatorname{Gor'kov}$ 方程式の表式には注意が必要である。演算子 $\overline{\check{G}}^{-1}$ はそのオペランドをもたないように見える。それはこの表式が積分によって定義されているからと考えることもできる。この見方では、演算子 $\overline{\check{G}}^{-1}(x_2)$ が $\check{G}(x_1,x_2)$ に作用するように部分積分を行うのであるが、その際には符合が変わらないように定義する。あるいはもっと簡単に、右 $\operatorname{Gor'kov}$ 方程式の行列 $\overline{\check{G}}^{-1}$ 中の各成分における演算子は単純に \check{G} に作用するとみなしてもよい 8 。

ここで虚時間に対して Fourier 変換を行うと Green 関数は

$$\check{G}(x_1, x_2) = T \sum_n e^{-i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)} \check{G}(\mathsf{r}_1, \mathsf{r}_2; i\omega_n)$$
(2.37)

$$\check{G}(\mathsf{r}_1, \mathsf{r}_2; i\omega_n) = \int_0^{1/T} e^{i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)} \check{G}(x_1, x_2) \, d\tau \tag{2.38}$$

と書け、その運動方程式は

$$\check{G}(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) \equiv \begin{pmatrix} G(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) & F(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) \\ -F^{\dagger}(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) & \bar{G}(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) \end{pmatrix}$$
(2.39)

$$\check{G}^{-1}(\mathbf{r}, i\omega_n) \equiv \begin{pmatrix} i\omega_n + \frac{\dot{\nabla}^2}{2m} + \mu & -\Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -i\omega_n + \frac{\dot{\nabla}^2}{2m} + \mu \end{pmatrix}$$
(2.40)

を用いて

$$\check{G}^{-1}(\mathsf{r}_1, i\omega_n)\check{G}(\mathsf{r}_1, \mathsf{r}_2; i\omega_n) = \check{1}\delta(\mathsf{r}_1 - \mathsf{r}_2) \tag{2.41}$$

⁷演算子が右側にあるこの Gor'kov 方程式を"右 Gor'kov 方程式"、それに対して演算子が左側にある Gor'kov 方程式を"左 Gor'kov 方程式"と呼ぶことにする。

 $^{^8}$ いずれにせよ、この奇妙さは Gor'kov 方程式を行列 (Nambu-space) 表示したことにより生じるもので本質的なものでは一切ない。

と書くことができる。また、

$$\tilde{\tilde{G}}^{-1}(\mathbf{r}, i\omega) \equiv \begin{pmatrix} i\omega_n + \frac{\dot{\nabla}^2}{2m} + \mu & -\Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -i\omega_n + \frac{\dot{\nabla}^2}{2m} + \mu \end{pmatrix}$$
(2.42)

とすると右 Gor'kov 方程式は

$$\check{G}(\mathsf{r}_1, \mathsf{r}_2; i\omega_n) \bar{\check{G}}^{-1}(\mathsf{r}_2, i\omega) = \check{\mathsf{1}}\delta(\mathsf{r}_1 - \mathsf{r}_2) \tag{2.43}$$

とも書ける。

Green 関数の対称性はこの周波数表示においては次のように書き換えられる。

$$G(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) = \bar{G}(\mathsf{r}_2,\mathsf{r}_1;-i\omega_n) \tag{2.44}$$

$$G^*(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) = G(\mathsf{r}_2,\mathsf{r}_1;-i\omega_n) \tag{2.45}$$

$$\bar{G}^*(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) = \bar{G}(\mathsf{r}_2,\mathsf{r}_1;-i\omega_n) \tag{2.46}$$

$$F^*(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) = F^{\dagger}(\mathsf{r}_2,\mathsf{r}_1;-i\omega_n) \tag{2.47}$$

$$F(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) = F(\mathsf{r}_2,\mathsf{r}_1;-i\omega_n) \tag{2.48}$$

さらに、座標に対して Fourier 変換を行うと

$$\check{G}(\mathsf{r}_1, \mathsf{r}_2; i\omega_n) = \int \frac{d\mathsf{p}_1}{(2\pi)^3} \frac{d\mathsf{p}_2}{(2\pi)^3} \, \check{G}(\mathsf{p}_1, \mathsf{p}_2; i\omega_n) e^{i(\mathsf{p}_1\mathsf{r}_1 - \mathsf{p}_2\mathsf{r}_2)}$$
(2.49)

$$\check{G}(\mathsf{p}_1,\mathsf{p}_2;i\omega_n) = \int d\mathsf{r}_1 d\mathsf{r}_2 \; \check{G}(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n) e^{-i(\mathsf{p}_1\mathsf{r}_1-\mathsf{p}_2\mathsf{r}_2)}$$
 (2.50)

となる。

この表現における Green 関数の対称性の表式は

$$G(\mathsf{p}_1, \mathsf{p}_2; i\omega_n) = \bar{G}(-\mathsf{p}_2, -\mathsf{p}_1; -i\omega_n) \tag{2.51}$$

$$G^*(p_1, p_2; i\omega_n) = G(p_2, p_1; -i\omega_n)$$
 (2.52)

$$\bar{G}^*(p_1, p_2; i\omega_n) = \bar{G}(p_2, p_1; -i\omega_n)$$
 (2.53)

$$F^*(p_1, p_2; i\omega_n) = F^{\dagger}(p_2, p_1; -i\omega_n)$$
 (2.54)

$$F(p_1, p_2; i\omega_n) = F(-p_2, -p_1; -i\omega_n)$$
 (2.55)

と書かれる。

2.3 準古典近似

運動量表示における Green 関数法によって種々の物理量を求める際、運動量 pに関する積分が現れる。これらの被積分関数の中で Green 関数は |p| に関して最も急激に変化し、Fermi 面付近において $\delta \xi_{\rm p} \sim \Delta$ 程度の幅の局在したピークを持

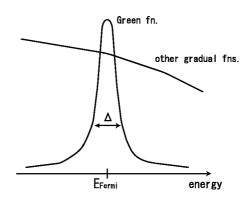


図 2.1: 局在化した Green 関数。

 O^9 (図 2.1)。この事を考えると、 $\Delta \ll E_F$ という条件 10 のもとでは他の被積分関数はその Fermi 面上の値で置き換えることができる。すなわち、運動量 p に関する積分を p の立体角 Ω_p に関する積分と p の絶対値 p に関する積分とに分けた時に、Green 関数のみが後者の被積分関数となりそれ以外の関数は立体角 Ω_p のみに依存する。

今、絶対値 p に関して積分された Green 関数(準古典 Green 関数)について考える。p に関してこのように Green 関数を積分してしまうということは、相対座標 $r \equiv r_1 - r_2$ の振動に関する余分な情報を切り捨てるということである:

$$e^{i(p_{1}r_{1}-p_{2}r_{2})} = e^{i\frac{p_{1}+p_{2}}{2}(r_{1}-r_{2})}e^{i(p_{1}-p_{2})\frac{r_{1}+r_{2}}{2}}$$
$$= e^{ipr}e^{ikr}$$
(2.56)

相対座標 $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ に関する振動の特徴的な長さのスケールは p_F^{-1} であり、そのエネルギーの大きさからしてそれは超伝導体の諸性質にとって本質的ではない。 ξ の長さスケールで変化する重心座標 $\mathbf{r} \equiv (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ のみが超伝導体の諸性質に本質的に寄与する。したがって、積分したことによって Green 関数から超伝導にとって重要でない余分な情報を除いたということが出来る。

Gor'kov 理論から相対座標 r に関する情報を除いて、この準古典 Green 関数について閉じた理論を構成することが出来る。これが準古典理論¹¹である。上で述べたような理由から準古典理論は Gor'kov 理論に比べてその取り扱いが著しく容易になり、特に空間的に非一様な状況におけるミクロな理論として強力である。

また、これまでに知られている従来型超伝導体は $\Delta/E_F\sim 10^{-3}$ であり準古典条件が良く成り立つ。高温超伝導体は $\Delta/E_F=10^{-1}\sim 10^{-2}$ 程度であるが、準古典理論の正当性に関しては未だ議論の残るところである。この点に関しては 5 章の議論においてまた触れる。

 $[\]overline{\ \ ^9}$ 以下において ${\sf p}\equiv ({\sf p}_1+{\sf p}_2)/2, {\sf k}\equiv {\sf p}_1-{\sf p}_2, \xi_{\sf p}\equiv p^2/2m-\mu$ とする。

¹⁰準古典条件

¹¹quasiclassical theory

それでは実際に準古典理論を構成する。準古典理論の本質は上に述べた事に尽きるが、その実際の構成の仕方は技巧的には何種類か存在する。ここではKopnin[10]と Kato[20] による方法とを折衷した形の構成法を示す。少なくとも不純物等による自己エネルギー項を考慮しない場合においては、この導出が最も素朴でわかりやすいと思う。

まず初めに異常 Green 関数 $F(p_1,p_2;i\omega_n),F^{\dagger}(p_1,p_2;i\omega_n)$ を考える。これらは超 伝導状態でのみ有限の値を持ち、 ξ_p^{-2} で減衰する。そのため ξ_p に関する積分を近似的に次のように書き、準古典異常 Green 関数を定義することができる:

$$\int \frac{d\xi_{p}}{\pi i} F^{(\dagger)}(\mathbf{p}_{1}, \mathbf{p}_{2}; i\omega_{n}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi_{p}}{\pi i} F^{(\dagger)}(\mathbf{p}_{1}, \mathbf{p}_{2}; i\omega_{n})$$

$$= \oint \frac{d\xi_{p}}{\pi i} F^{(\dagger)}(\mathbf{p}_{1}, \mathbf{p}_{2}; i\omega_{n})$$

$$\equiv f^{(\dagger)}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_{n}) \tag{2.57}$$

それに対して Green 関数 $G(p_1, p_2; i\omega_n)$, $\overline{G}(p_1, p_2; i\omega_n)$ は常伝導成分を含み、積分が収束しないために上のような式は成り立たない 12 。 その為、Green 関数 G, \overline{G} に関してはいったん常流動成分 G^n と超流動成分 $G-G^n$ とを分けてから、超流動成分に関しては上と同様の手続きを行ってやればよい:

$$\int \frac{p^{2}dp}{2\pi^{2}} G(\mathbf{p}_{1}, \mathbf{p}_{2}; i\omega_{n}) = \int \frac{p^{2}dp}{2\pi^{2}} G^{n} + \int \frac{p^{2}dp}{2\pi^{2}} [G - G^{n}]$$

$$= \int \frac{p^{2}dp}{2\pi^{2}} G^{n} + \nu(\hat{\mathbf{p}}) \oint d\xi_{\mathbf{p}} [G - G^{n}]$$
(2.58)

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

$$G^{n}(\mathbf{p}_{1}, \mathbf{p}_{2}; i\omega_{n}) = (2\pi)^{3} \delta(\mathbf{k}) G^{n}(\mathbf{p}; i\omega_{n})$$

$$= -(2\pi)^{3} \delta(\mathbf{k}) \frac{1}{\xi_{\mathbf{p}} - i\omega_{n}}$$

$$= -(2\pi)^{3} \delta(\mathbf{k}) \left[\mathcal{P} \frac{1}{\xi_{\mathbf{p}}} + i\pi \operatorname{sign}(\omega_{n}) \delta(\xi_{\mathbf{p}}) \right]$$
(2.59)

を用いると

$$\oint d\xi_{\mathsf{p}} G^n = -2i\pi \mathrm{sign}(\omega_n) \tag{2.60}$$

また、準古典 Green 関数を次のように定義する:

$$g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \equiv \oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} G(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; i\omega_n)$$
 (2.61)

 $^{^{12}}G \sim \xi_{\rm p}^{-1}$

以上より

$$\int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} G = \int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} G^n + \nu(\hat{\mathbf{p}}) \left[\oint d\xi_{\mathbf{p}} G + 2i\pi \operatorname{sign}(\omega_n) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}) \right]
= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}) \mathcal{P} \int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} \frac{1}{\xi_{\mathbf{p}}} + \nu(\hat{\mathbf{p}}) i\pi \left[g + (2\pi)^3 \operatorname{sign}(\omega_n) \delta(\mathbf{k}) \right]$$
(2.62)

が得られる。

全く同様に \bar{G} に関しても

$$\bar{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \equiv \oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} \bar{G}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; i\omega_n) \qquad (2.63)$$

$$\int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} \bar{G} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}) \mathcal{P} \int \frac{p^2 dp}{2\pi^2} \frac{1}{\xi_{\mathbf{p}}} + \nu(\hat{\mathbf{p}}) i\pi \left[\bar{g} - (2\pi)^3 \mathrm{sign}(\omega_n) \delta(\mathbf{k}) \right] \qquad (2.64)$$

となる。ここで次のように Green 関数の行列表示を定義する:

$$\check{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \equiv \begin{pmatrix} g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) & f(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \\ -f^{\dagger}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) & \bar{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) \end{pmatrix}$$
(2.65)

また、k に関して Fourier 変換を行う:

$$\check{g}(\hat{p}, r; i\omega_n) = \begin{pmatrix} g(\hat{p}, r; i\omega_n) & f(\hat{p}, r; i\omega_n) \\ -f^{\dagger}(\hat{p}, r; i\omega_n) & \bar{g}(\hat{p}, r; i\omega_n) \end{pmatrix} \\
= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}r} \check{g}(\hat{p}, \mathbf{k}; i\omega_n) \tag{2.66}$$

これらの準古典 Green 関数の対称性は次のようになる 13 :

$$g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) = \bar{g}(-\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; -i\omega_n)$$
 (2.67)

$$g^*(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) = -g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; -i\omega_n) \tag{2.68}$$

$$\bar{g}^*(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) = -\bar{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; -i\omega_n) \tag{2.69}$$

$$f^*(\hat{\mathbf{p}}, \mathsf{r}; i\omega_n) = -f^{\dagger}(\hat{\mathbf{p}}, \mathsf{r}; -i\omega_n) \tag{2.70}$$

$$f(\hat{p}, r; i\omega_n) = f(-\hat{p}, r; -i\omega_n)$$
 (2.71)

次に準古典 Green 関数が従う運動方程式を導く。前に述べたように、重心座標に関して閉じた準古典理論を作りたいのであるが、この為には左 Gor'kov 方程式から右 Gor'kov 方程式を引いてから積分を行えばよい。ただし以下では

$$\nabla \cdot \mathsf{A} = 0 \tag{2.72}$$

 $^{^{13}}$ 準古典 Green 関数の定義の際にここではその積分測度に πi という因子を加えてあるため、準古典 Green 関数の複素共役を取ると負符号が表れる。文献によってはこの πi という因子を除いて定義しているものもある。その場合にはこれらの関係式の符号は全て正となるため、注意が必要である。

とし、さらに A の 2 次の項を無視する。また

$$\check{\Delta}(\hat{p},r) \equiv \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\hat{p},r) \\ -\Delta^*(\hat{p},r) & 0 \end{pmatrix}$$
 (2.73)

とおく14。

まず、左 Gor'kov 方程式から右 Gor'kov 方程式を引く:

$$\check{G}^{-1}(\mathsf{r}_{1}, i\omega_{n})\check{G}(\mathsf{r}_{1}, \mathsf{r}_{2}; i\omega_{n}) - \check{G}(\mathsf{r}_{1}, \mathsf{r}_{2}; i\omega_{n})\bar{\check{G}}^{-1}(\mathsf{r}_{2}, i\omega_{n})$$

$$= \begin{pmatrix} i\omega_{n} + \frac{1}{2m}(\nabla_{1} - \frac{ie}{c}\mathsf{A}(\mathsf{r}_{1}))^{2} & -\Delta(\hat{\mathsf{p}}_{1}, \mathsf{r}_{1}) \\ \Delta^{*}(\hat{\mathsf{p}}_{1}, \mathsf{r}_{1}) & -i\omega_{n} + \frac{1}{2m}(\nabla_{1} + \frac{ie}{c}\mathsf{A}(\mathsf{r}_{1}))^{2} \end{pmatrix} \check{G}$$

$$-\check{G}\begin{pmatrix} i\omega_{n} + \frac{1}{2m}(\nabla_{2} + \frac{ie}{c}\mathsf{A}(\mathsf{r}_{2}))^{2} & -\Delta(\hat{\mathsf{p}}_{2}, \mathsf{r}_{2}) \\ \Delta^{*}(\hat{\mathsf{p}}_{2}, \mathsf{r}_{2}) & -i\omega_{n} + \frac{1}{2m}(\nabla_{2} - \frac{ie}{c}\mathsf{A}(\mathsf{r}_{2}))^{2} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\nabla_{1}^{2} - \nabla_{2}^{2}}{2m}\check{G} + i\omega_{n} \left[\sigma^{z}, \check{G}\right] - \left\{\check{\Delta}(\hat{\mathsf{p}}_{1}, \mathsf{r}_{1})\check{G} - \check{G}\check{\Delta}(\hat{\mathsf{p}}_{2}, \mathsf{r}_{2})\right\}$$

$$-\frac{ie}{mc}\left\{\mathsf{A}(\mathsf{r}_{1}) \cdot \nabla_{1}\sigma^{z}\check{G} + \mathsf{A}(\mathsf{r}_{2}) \cdot \nabla_{2}\check{G}\sigma^{z}\right\} \tag{2.74}$$

この最後の式は

$$\frac{\nabla_{1}^{2} - \nabla_{2}^{2}}{2m} \check{G} + i\omega_{n} \left[\sigma^{z}, \check{G}\right] - \left[\frac{\check{\Delta}(\hat{p}_{1}, \Gamma_{1}) + \check{\Delta}(\hat{p}_{2}, \Gamma_{2})}{2}, \check{G}\right] \\
- \left[\frac{\check{\Delta}(\hat{p}_{1}, \Gamma_{1}) - \check{\Delta}(\hat{p}_{2}, \Gamma_{2})}{2}, \check{G}\right]_{+} - \frac{ie}{mc} \left\{ \mathsf{A}(\Gamma_{1}) \cdot \nabla_{1} \sigma^{z} \check{G} + \mathsf{A}(\Gamma_{2}) \cdot \nabla_{2} \check{G} \sigma^{z} \right\}$$
(2.75)

と変形できる。ここで、ベクトルポテンシャル A の変化する特徴的な長さのスケールは λ_L 、また pair-potential $\Delta(\mathbf{r})$ 及び重心座標 $\mathbf{r}=(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)/2$ の変化する特徴的な長さのスケールはともに ξ 程度である。それに対して相対座標 $\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$ に関する振動の特徴的な長さのスケールは p_F^{-1} とそれらよりもはるかに小さい。したがって、最終的には積分して準古典 Green 関数の運動方程式を得たいという現在の方針を念頭におくと

$$\left[\frac{\mathring{\Delta}(\hat{p}_1, \mathsf{r}_1) + \mathring{\Delta}(\hat{p}_2, \mathsf{r}_2)}{2}, \check{G}\right] \sim \left[\check{\Delta}(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}), \check{G}\right]$$
(2.76)

$$\left[\frac{\check{\Delta}(\hat{p}_1, r_1) - \check{\Delta}(\hat{p}_2, r_2)}{2}, \check{G}\right] \sim 0 \tag{2.77}$$

$$\left\{ \mathsf{A}(\mathsf{r}_1) \cdot \nabla_1 \sigma^z \check{G} + \mathsf{A}(\mathsf{r}_2) \cdot \nabla_2 \check{G} \sigma^z \right\} \sim \mathsf{A}(\mathsf{r}) \cdot \left\{ \nabla_1 \sigma^z \check{G} + \nabla_2 \check{G} \sigma^z \right\} \quad (2.78)$$

という近似を用いて上式は次のように書き直される:

$$\frac{\nabla_1^2 - \nabla_2^2}{2m} \check{G} - \left[-i\omega_n \sigma^z + \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}), \check{G} \right] - \frac{ie}{mc} \mathsf{A}(\mathbf{r}) \cdot \left\{ \nabla_1 \sigma^z \check{G} + \nabla_2 \check{G} \sigma^z \right\} \tag{2.79}$$

 $^{^{-14}}$ ここで Δ の引数に新たに $\hat{
ho}$ が加わっている。前の節までは s 波の相互作用を扱っていたためにこの引数を除くことが出来た。以降ではより一般的な場合を扱えるようにするためにこの引数をここで加えておく。

ここで $\check{G}(\mathsf{r}_1,\mathsf{r}_2;i\omega_n)$ に作用する微分演算子 $abla_1,
abla_2$ を重心座標 \mathbf{r} 及び相対座標 \mathbf{r} に関する微分演算子 ∇ 、 $\overline{\nabla}$ で書き換える:

$$\frac{\nabla \bar{\nabla}}{m} \check{G} - \left[-i\omega_n \sigma^z + \check{\Delta}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}), \check{G} \right] - \frac{ie}{mc} \mathsf{A}(\mathbf{r}) \cdot \left\{ \left[\sigma^z, \bar{\nabla} \check{G} \right] + \frac{1}{2} \left[\sigma^z, \nabla \check{G} \right]_+ \right\} \quad (2.80)$$

今、Green 関数の相対座標 r に関する Fourier 表示は

$$\check{G}(\mathsf{r}_1, \mathsf{r}_2; i\omega_n) = \int \frac{d\mathsf{p}}{(2\pi)^3} \check{G}(\mathsf{p}, \mathsf{r}; i\omega_n) e^{i\mathsf{pr}}$$
(2.81)

である。また、

$$\frac{e\mathsf{A}(\mathsf{r})}{mc} \ll \mathsf{V}_F \tag{2.82}$$

が成り立つことから、第1項に対して最後の項を無視することが出来る。 これらを整理すると

$$-i\mathbf{v}\cdot\nabla\check{G}(\mathbf{p},\mathbf{r};i\omega_n) = \left[i\omega_n\sigma^z - \check{\Delta}(\hat{\mathbf{p}},\mathbf{r}) + \frac{e}{c}\mathbf{v}\cdot\mathsf{A}(\mathbf{r})\sigma^z, \check{G}(\mathbf{r},\mathbf{p};i\omega_n)\right]$$
(2.83)

となる15。最後にこの式をこの章の始めに述べた手続きに従って周回積分する事に より、準古典 Green 関数に関する運動方程式 (Eilenberger 方程式 [24]16) が得ら れる:

$$-i\mathsf{V}_{F}\cdot\nabla\check{g}(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r};i\omega_{n}) = \begin{bmatrix} i\omega_{n}\sigma^{z} - \check{\Delta}(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r}) + \frac{e}{c}\mathsf{V}_{F}\cdot\mathsf{A}(\mathsf{r})\sigma^{z},\check{g} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} i\omega_{n} + \frac{e}{c}\mathsf{V}_{F}\cdot\mathsf{A} & -\Delta(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r}) \\ \Delta^{*}(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r}) & -i\omega_{n} - \frac{e}{c}\mathsf{V}_{F}\cdot\mathsf{A} \end{bmatrix},\check{g} \end{bmatrix}$$
(2.84)

また、これらを成分ごとに書き出すと次のようになる:

$$-i\mathsf{v}_F \cdot \nabla g(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r};i\omega_n) + \Delta^*(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r})f - \Delta(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r})f^{\dagger} = 0 \qquad (2.85)$$

$$-i\mathsf{v}_F\cdot\nabla\bar{g}(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r};i\omega_n) - \Delta^*(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r})f + \Delta(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r})f^{\dagger} = 0 \qquad (2.86)$$

$$-i\mathsf{v}_F \cdot \left(\nabla - \frac{2ie}{c}\mathsf{A}\right)f - 2i\omega_n f - \Delta(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r})(g - \bar{g}) = 0 \tag{2.87}$$

$$i \mathbf{V}_F \cdot \left(\nabla + \frac{2ie}{c} \mathbf{A} \right) f^{\dagger} - 2i\omega_n f^{\dagger} - \Delta^*(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r})(g - \bar{g}) = 0$$
 (2.88)

この4つの方程式のうち第1式と第2式、第3式と第4式がそれぞれ類似した形を 持っているのがわかる。実際それらは完全に同等であり、従って独立な方程式は2 つのみである。この事はまた後ほど示す。

 $v \equiv p/m$ 16 アイレンバーガーと読む。

2.4 規格化条件

Eilenberger 方程式より

$$-i\mathsf{v}_{F}\cdot\nabla\left(\check{g}\check{g}\right) = -i\mathsf{v}_{F}\cdot\left(\nabla\check{g}\check{g}+\check{g}\nabla\check{g}\right)$$

$$= \left[i\omega_{n}\sigma^{z}-\check{\Delta}(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r})+\frac{e}{c}\mathsf{v}_{F}\cdot\mathsf{A}(\mathsf{r})\sigma^{z},\check{g}\check{g}\right] \qquad (2.89)$$

となって行列積 $\check{g}\check{g}$ もまた Eilenberger 方程式の解となっていることがわかる。従って、 \hat{p} 方向に沿って

$$\check{g}(\hat{p}, r; i\omega_n)\check{g}(\hat{p}, r; i\omega_n) = \begin{pmatrix} gg - ff^{\dagger} & f(g + \bar{g}) \\ -f^{\dagger}(g + \bar{g}) & \bar{g}\bar{g} - ff^{\dagger} \end{pmatrix}
= A\check{1} + B\check{g}(\hat{p}, r; i\omega_n)$$
(2.90)

と書ける 17 。あるいはまた、Eilenberger 方程式の右辺が交換関係の形をしていることから両辺の行列式及びトレースをとると、 \hat{p} 方向に沿って

$$\det \check{g}(\hat{p}, r; i\omega_n) = g\bar{g} + ff^{\dagger}$$

$$= \text{const.}$$

$$\text{Tr } \check{g}(\hat{p}, r; i\omega_n) = g + \bar{g}$$

$$(2.91)$$

$$\operatorname{Tr} g(\mathsf{p}, \mathsf{r}; i\omega_n) = g + g$$

$$= \text{const.} \tag{2.92}$$

となり、同じような条件が導かれる事がわかる。

さて、ここでこれらの定数を決定したい。そこで、十分遠方において系が空間的に一様かつ A=0 という状態に連続的に移行するという境界条件を課す。そうすることによって、空間的に一様な場合の準古典 Green 関数の具体的な表式からこれらの定数が決まる。

この場合の Gor'kov 方程式は

$$\begin{pmatrix} i\omega_{n} - \xi_{p} & -\Delta \\ \Delta^{*} & -i\omega_{n} - \xi_{p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G(p; i\omega_{n}) & F(p; i\omega_{n}) \\ -F^{\dagger}(p; i\omega_{n}) & \bar{G}(p; i\omega_{n}) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(2.93)

であり、また時間反転対称性を持つことから

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

$$= \bar{G}(\mathbf{p}; -i\omega_n)$$
(2.94)

$$F^{*}(\mathbf{p}; i\omega_{n}) = F^{\dagger}(-\mathbf{p}; -i\omega_{n})$$

$$= F^{\dagger}(\mathbf{p}; -i\omega_{n})$$
(2.95)

 $^{^{17}}$ A, B = const.

が成り立つ。よって

$$G(\mathbf{p}; i\omega_n) = -\frac{\xi_{\mathbf{p}} + i\omega_n}{{\xi_{\mathbf{p}}}^2 + {\omega_n}^2 + |\Delta|^2}$$
(2.96)

$$\bar{G}(\mathbf{p}; i\omega_n) = -\frac{\xi_{\mathbf{p}} - i\omega_n}{\xi_{\mathbf{p}}^2 + \omega_n^2 + |\Delta|^2}$$
(2.97)

$$F(\mathbf{p}; i\omega_n) = \frac{\Delta}{\xi_{\mathbf{p}}^2 + \omega_n^2 + |\Delta|^2}$$
 (2.98)

$$F^{\dagger}(\mathbf{p}; i\omega_n) = \frac{\Delta^*}{\xi_{\mathbf{p}}^2 + \omega_n^2 + |\Delta|^2}$$
 (2.99)

これらから、準古典 Green 関数が次のように求められる:

$$g(\hat{\mathbf{p}}; i\omega_n) = -\oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} \frac{\xi_{\mathbf{p}} + i\omega_n}{\xi_{\mathbf{p}}^2 + \omega_n^2 + |\Delta|^2}$$
$$= -\frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}}$$
(2.100)

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

$$= \frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}}$$
(2.101)

$$f(\hat{p}; i\omega_n) = \oint \frac{d\xi_p}{\pi i} \frac{\Delta}{\xi_p^2 + \omega_n^2 + |\Delta|^2}$$

$$= \frac{\Delta}{i\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}}$$
(2.102)

$$f^{\dagger}(\hat{\mathbf{p}}; i\omega_{n}) = \oint \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{\pi i} \frac{\Delta}{\xi_{\mathbf{p}}^{2} + \omega_{n}^{2} + |\Delta|^{2}}$$

$$= \frac{\Delta^{*}}{i\sqrt{\omega_{n}^{2} + |\Delta|^{2}}}$$
(2.103)

以上より、空間的に非一様で $A \neq 0$ の場合に関しても

$$\det \check{g}(\hat{p}, r; i\omega_n) = g\bar{g} + ff^{\dagger}$$

$$= -1 \tag{2.104}$$

$$\operatorname{Tr} \check{g}(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r};i\omega_n) = g + \bar{g}$$

$$= 0 \qquad (2.105)$$

となる。これはより簡潔に次のように書かれる:

$$\check{g}(\hat{p}, r; i\omega_n)\check{g}(\hat{p}, r; i\omega_n) = \hat{1}$$
(2.106)

これを規格化条件¹⁸と呼ぶ。この条件によって4個のEilenberger方程式のうち2個のみが独立となる。第1式と第2式が同等なのは明らかである。ここでは第3式

¹⁸normalization condition

と第4式が同値であることを示す。第4式の左辺は、規格化条件及び準古典 Green 関数の対称性により

$$i \nabla_{F} \cdot \left(\nabla + \frac{2ie}{c} \mathsf{A}\right) f^{\dagger}(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}; i\omega_{n}) - 2i\omega_{n} f^{\dagger} - \Delta^{*}(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r})(g - \bar{g})$$

$$= -i \nabla_{F} \cdot \left(\nabla + \frac{2ie}{c} \mathsf{A}\right) f^{*}(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}; -i\omega_{n}) + 2i\omega_{n} f^{*} - 2\Delta^{*} g(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}; i\omega_{n})$$
(2.107)

となる。複素共役をとって

$$i \nabla_F \cdot \left(\nabla - \frac{2ie}{c} \mathsf{A}\right) f(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}; -i\omega_n) - 2i\omega_n f - 2\Delta g^*(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}; i\omega_n) = 0$$
 (2.108)

この左辺はさらに

$$i \mathsf{V}_{F} \cdot \left(\nabla - \frac{2ie}{c} \mathsf{A}\right) f(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}; -i\omega_{n}) + 2(-i\omega_{n}) f + 2\Delta g(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}; -i\omega_{n})$$

$$= i \mathsf{V}_{F} \cdot \left(\nabla - \frac{2ie}{c} \mathsf{A}\right) f(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}; i\omega_{m}) + 2i\omega_{m} f(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}; i\omega_{m}) + 2\Delta g(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{r}; i\omega_{m})$$

$$(2.109)$$

と変形される¹⁹。以上より第3式と第4式が等価であることが示された。ではこの 等価性の起因するところはなにかと問うならば、それは particle-hole symmetry に 他ならない。この事は次の節で述べる。

2.5 準古典 Green 関数による物理量の表現

ここで粒子数密度、電流、Gap 方程式、状態密度をそれぞれ準古典 Green 関数を用いて書き直す。Green 関数と準古典 Green 関数の変換公式は既に導いてあるので、それらを代入して整理すればよいだけである。

まず初めに電子数密度の表式を書き換える:

$$\begin{split} N(\mathsf{k}) &= \int d\mathsf{r} \; N(\mathsf{r}) e^{-i\mathsf{k}\mathsf{r}} \\ &= 2 \int d\mathsf{r} \; G(\mathsf{r},\mathsf{r};-0) e^{-i\mathsf{k}\mathsf{r}} \\ &= 2T \lim_{\tau \to -0} \sum_n \int d\mathsf{r} \; G(\mathsf{r},\mathsf{r};i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} e^{-i\mathsf{k}\mathsf{r}} \\ &= 2T \lim_{\tau \to -0} \sum_n \int d\mathsf{r} \frac{d\mathsf{p}}{(2\pi)^3} \frac{d\bar{\mathsf{k}}}{(2\pi)^3} \; G(\mathsf{p}_1,\mathsf{p}_2;i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} e^{-i\mathsf{k}\mathsf{r}} e^{i\bar{\mathsf{k}}\mathsf{r}} \\ &= 2T \lim_{\tau \to -0} \sum_n \int \frac{d\mathsf{p}}{(2\pi)^3} \; G(\mathsf{p} + \mathsf{k}/2,\mathsf{p} - \mathsf{k}/2;i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \\ &= 2T \lim_{\tau \to -0} \sum_n \Big[\int \frac{d\mathsf{p}}{(2\pi)^3} \; G^n(\mathsf{p} + \mathsf{k}/2,\mathsf{p} - \mathsf{k}/2;i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \Big] \end{split}$$

 $¹⁹⁻i\omega_n \equiv i\omega_m$

$$+i\pi \left\{ 2\langle \nu \rangle_{\mathsf{p}} \operatorname{sign}(\omega_{n})(2\pi)^{3} \delta(\mathsf{k}) + \int \frac{d\Omega_{\mathsf{p}}}{4\pi} \nu(\hat{\mathsf{p}}) g(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_{n}) \right\} \right]$$

$$= N_{0}(\mathsf{k})$$

$$+2i\pi T \sum_{n} \left[\left\langle \nu(\hat{\mathsf{p}}) g(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_{n}) \right\rangle_{\mathsf{p}} + 2\langle \nu \rangle_{\mathsf{p}} \operatorname{sign}(\omega_{n})(2\pi)^{3} \delta(\mathsf{k}) \right]$$

$$= N_{0}(\mathsf{k}) + 2i\pi T \sum_{n} \left\langle \nu(\hat{\mathsf{p}}) g(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_{n}) \right\rangle_{\mathsf{p}}$$

$$(2.110)$$

上の表式において

$$\langle \cdots \rangle_{\rm p} \equiv \int \frac{d\Omega_{\rm p}}{4\pi} \cdots$$
 (2.111)

$$\langle \nu \rangle_{\mathsf{p}} \equiv \int \frac{d\Omega_{\mathsf{p}}}{4\pi} \nu(\hat{\mathsf{p}})$$
 (2.112)

としている。この変形で、

$$\sum_{n} \operatorname{sign}(\omega_n) = 0 \tag{2.113}$$

を用いた。また、

$$N_0(k) \equiv 2T \lim_{\tau \to -0} \sum_n \int \frac{dp}{(2\pi)^3} G^n(p + k/2, p - k/2; i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}$$
 (2.114)

は常伝導状態における粒子数密度である。同様にして

$$N(\mathsf{k}) = 2 \int d\mathsf{r} \, \bar{G}(\mathsf{r}, \mathsf{r}; +0) e^{-i\mathsf{k}\mathsf{r}}$$

$$= 2T \lim_{\tau \to +0} \sum_{n} \int d\mathsf{r} \, \bar{G}(\mathsf{r}, \mathsf{r}; i\omega_{n}) e^{-i\omega_{n}\tau} e^{-i\mathsf{k}\mathsf{r}}$$

$$= N_{0}(\mathsf{k}) + 2i\pi T \sum_{n} \left\langle \nu(\hat{\mathsf{p}}) \bar{g}(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_{n}) \right\rangle_{\mathsf{p}}$$
(2.115)

この2式を平均して規格化条件を用いると、

$$N(\mathsf{k}) = N_0(\mathsf{k}) + i\pi T \sum_{n} \langle \nu(\hat{\mathsf{p}}) \left[g(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_n) + \bar{g}(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_n) \right] \rangle_{\mathsf{p}}$$
$$= N_0(\mathsf{k}) \tag{2.116}$$

となる。従って、準古典近似における電子数密度は常伝導状態から定常的超伝導 状態に転移する際に変化しない。

前に詳しく述べたように、準古典近似においては Green 関数以外の関数は皆その |p| 依存性を無視する。その結果として、規格化条件:

$$g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) + \bar{g}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_n) = 0$$
 (2.117)

が成り立つのであるが、これは状態密度の |p| 依存性を無視したために現れた particle-hole symmetry に他ならない。上で得られた電子数密度 N(k) に関する結

果は、この particle-hole symmetry のひとつの帰結である。また、Eilenberger の4 つの方程式が2つの独立な方程式に落ちるのも、この symmetry の結果である。Green 関数を用いて電流密度は次の様に書かれる:

$$\begin{split} \mathbf{j}(\mathbf{k}) &= \frac{e}{m} \int d\mathbf{r} \left[(-i \dot{\nabla}_{1} + i \dot{\nabla}_{2}) G(\mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2}; -0) \right]_{\mathbf{r}_{1} = \mathbf{r}_{2}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \\ &= -\frac{ie}{m} \int d\mathbf{r} \left[(\nabla_{1} - \nabla_{2}) G \right]_{\mathbf{r}_{1} = \mathbf{r}_{2}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \int d\mathbf{r} \frac{N(\mathbf{r}) e^{2}}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \\ &= -\frac{ieT}{m} \sum_{n} \int d\mathbf{r} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \frac{d\bar{\mathbf{k}}}{(2\pi)^{3}} \ 2i\mathbf{p} \ G(\mathbf{p}_{1}, \mathbf{p}_{2}; i\omega_{n}) e^{i\bar{\mathbf{k}}\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \\ &- \int d\mathbf{r} \frac{N(\mathbf{r}) e^{2}}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \\ &= \frac{2eT}{m} \sum_{n} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \mathbf{p} \ G(\mathbf{p}_{1}, \mathbf{p}_{2}; i\omega_{n}) - \int d\mathbf{r} \frac{N(\mathbf{r}) e^{2}}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \end{split}$$

$$(2.118)$$

以前と同じようにしてこれを準古典 Green 関数に書き換える:

$$2eT \sum_{n} \left[\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \mathsf{V}_{F} G^{n} + 2(2\pi)^{3} \delta(\mathsf{k}) i \pi \mathrm{sign}(\omega_{n}) \left\langle \nu(\hat{\mathbf{p}}) \mathsf{V}_{F} \right\rangle_{\mathbf{p}} \right]$$

$$- \int d\mathbf{r} \frac{Ne^{2}}{mc} \mathsf{A} e^{-i\mathsf{k}\mathsf{r}} + 2ei\pi T \sum_{n} \left\langle \nu(\hat{\mathbf{p}}) \mathsf{V}_{F} g(\hat{\mathbf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_{n}) \right\rangle_{\mathbf{p}}$$

$$(2.119)$$

常伝導状態においては

$$j^{n}(\mathbf{k}) = 2eT \sum_{n} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \mathsf{V}_{F} G^{n}(\mathbf{p}_{1}, \mathbf{p}_{2}; i\omega_{n}) - \int d\mathbf{r} \frac{Ne^{2}}{mc} \mathsf{A} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

$$= 0 \qquad (2.120)$$

が成立する。以上より電流密度は次の様に書き換えられる:

$$\begin{split} \mathbf{j}(\mathbf{k}) &= 2ei\pi T \sum_{n} \left\langle \nu(\hat{\mathbf{p}}) \mathbf{v}_{F} \ g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{k}; i\omega_{n}) \right\rangle_{\mathbf{p}} \\ &= 2ei\pi T \sum_{n} \int d\mathbf{r} \ \left\langle \nu(\hat{\mathbf{p}}) \mathbf{v}_{F} \ g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_{n}) \right\rangle_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \end{split} \tag{2.121}$$

あるいは座標表示で

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 2ei\pi T \sum_{n} \left\langle \nu(\hat{\mathbf{p}}) \mathbf{v}_{F} \ g(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_{n}) \right\rangle_{\mathbf{p}}$$
 (2.122)

となる。同様にして

$$j(r) = \frac{e}{m} \left[(i \acute{\nabla}_1 - i \grave{\nabla}_2) \bar{G}(r_1, r_2; +0) \right]_{r_1 = r_2}$$
 (2.123)

から出発して準古典 Green 関数に書き換えると

$$j(k) = -2ei\pi T \sum_{n} \langle \nu(\hat{p}) V_F \bar{g}(p_1, p_2; i\omega_n) \rangle_{p}$$
 (2.124)

となるが、規格条件によりこれらの二つの表現は全く同等である。

一般の相互作用 $U(\hat{p}_1, \hat{p}_2)$ は角運動量の固有関数によって展開することが出来る:

$$U(\hat{p}_1, \hat{p}_2) = U_s + U_d(\hat{p}_1, \hat{p}_2) + \cdots$$
 (2.125)

ここで

$$U_s = -|g| (2.126)$$

$$U_d = -|g_d| V_d(\hat{p}_1, \hat{p}_2) \tag{2.127}$$

はそれぞれ s 波、 d 波の相互作用である。この表記を用いて Gap 方程式を書き換える:

$$\Delta_{p}(\mathsf{k}) = -T \sum_{n} \int \frac{d\mathsf{p}_{1}}{(2\pi)^{3}} U(\hat{\mathsf{p}}, \hat{\mathsf{p}}_{1}) F(\mathsf{p}_{1}, \mathsf{p}_{2}; i\omega_{n})$$

$$= |g|\pi i T \sum_{n} \int \frac{d\Omega_{\mathsf{p}_{1}}}{4\pi} \nu(\hat{\mathsf{p}}_{1}) V(\hat{\mathsf{p}}, \hat{\mathsf{p}}_{1}) f(\hat{\mathsf{p}}_{1}, \mathsf{k}; i\omega_{n})$$

$$\equiv |g|\pi i T \sum_{n} \left\langle \nu(\hat{\mathsf{p}}_{1}) V(\hat{\mathsf{p}}, \hat{\mathsf{p}}_{1}) f(\hat{\mathsf{p}}_{1}, \mathsf{k}; i\omega_{n}) \right\rangle_{\mathsf{p}_{1}} \tag{2.128}$$

ここで相互作用パラメータ λ を次の様に定義する:

$$\lambda \equiv |g|\nu(0) \tag{2.129}$$

そうすると、等方的な Fermi 面を持つ s 波の場合の Gap 方程式は以下のようになる span :

$$\frac{\Delta(\mathsf{k})}{\lambda} = \pi i T \sum_{n} \int \frac{d\Omega_{\mathsf{p}}}{4\pi} f(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_{n})$$

$$\equiv \pi i T \sum_{n} \left\langle f(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_{n}) \right\rangle_{\mathsf{p}}$$
(2.130)

$$\frac{\Delta^{*}(\mathsf{k})}{\lambda} = \pi i T \sum_{n} \int \frac{d\Omega_{\mathsf{p}}}{4\pi} f^{\dagger}(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_{n})$$

$$\equiv \pi i T \sum_{n} \left\langle f^{\dagger}(\hat{\mathsf{p}}, \mathsf{k}; i\omega_{n}) \right\rangle_{\mathsf{p}} \tag{2.131}$$

また、一般に準古典理論において pair-potential $\Delta_p(k)$ と $f(\hat{p},k;i\omega_n)$ の回転対称性は一致しない。等方的な Fermi 面と $d_{x^2-y^2}$ 対称性の d 波相互作用を持つ場合についてこの事を簡単にみてみる。今、相互作用の角度依存性は

$$V_d(\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2) = 2\cos(2\theta_1) \cdot \cos(2\theta_2) \tag{2.132}$$

²⁰準古典 Green 関数の対称性によりこれらの 2 式は同等である。

であり、

$$\Delta_{p}(k) = \Delta_{0}(k) \cos(2\theta_{p}) \tag{2.133}$$

と書くと Gap 方程式は空間座標表示で

$$\frac{\Delta_0(\mathbf{r})}{\lambda} = \pi i T \sum_{n} \left\langle 2\cos(2\theta_{\rm p}) f(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_n) \right\rangle_{\rm p}$$
 (2.134)

となる。これから $f(\hat{p},k;i\omega_n)$ を $\cos(n\theta)$ で Fourier 展開した際に $^{21}\cos(2\theta)$ の成分のみが $\Delta_0(r)$ に寄与する事がわかる。しかしながら、Eilenberger 方程式左辺の $v_F\cdot\nabla$ の項は s 波(n=0)の回転対称性を持つ。したがって、この空間変化項が pair-potential 項よりも十分大きい($v_F\cdot\nabla\gg|\Delta|$)領域においては $f(\hat{p},k;i\omega_n)$ は pair-potential に反して s 波的になると考えられる。vortex core 付近においてはこの条件が良く当てはまる。

最後に Fermi 面近傍における状態密度 (DOS) の表式を求める²²:

$$\nu(\epsilon) = -\frac{1}{4\pi i} Tr \int d\mathbf{r} \ \sigma^{z} \cdot \left[\check{G}^{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \epsilon) - \check{G}^{A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \epsilon) \right]$$

$$= -\frac{1}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \left[G^{R}(\mathbf{p}_{1}, \mathbf{p}_{2}; \epsilon) - G^{A}(\mathbf{p}_{1}, \mathbf{p}_{2}; \epsilon) \right]$$

$$= -\frac{1}{2} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{p}}}{4\pi} \nu(\hat{\mathbf{p}}) \left[g^{R}(\hat{\mathbf{p}}, 0; \epsilon) - g^{A}(\hat{\mathbf{p}}, 0; \epsilon) \right]$$

$$= -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \left\langle \nu(\hat{\mathbf{p}}) \left[g^{R}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; \epsilon) - g^{A}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; \epsilon) \right] \right\rangle_{\mathbf{p}}$$

$$= -\int d\mathbf{r} \left\langle \nu(\hat{\mathbf{p}}) \operatorname{Re} \left\{ g^{R}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; \epsilon) \right\} \right\rangle_{\mathbf{p}}$$

$$(2.135)$$

ここで

$$g^{R}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; \epsilon) - g^{A}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; \epsilon) = 2\operatorname{Re}\left\{g^{R}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; \epsilon)\right\}$$
(2.136)

を用いた23。上で

$$\check{g}^{R}(\mathsf{r}_{1},\mathsf{r}_{2};\epsilon) \equiv \check{g}(\mathsf{r}_{1},\mathsf{r}_{2};i\omega_{n}\to\epsilon+i\delta) \tag{2.137}$$

$$\check{g}^{A}(\mathsf{r}_{1},\mathsf{r}_{2};\epsilon) \equiv \check{g}(\mathsf{r}_{1},\mathsf{r}_{2};i\omega_{n}\to\epsilon-i\delta)$$
(2.138)

はそれぞれ遅延・先進準古典 Green 関数である。また、上の表式より $LDOS^{24}$ は

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) = -\langle \nu(\hat{\mathbf{p}}) \operatorname{Re} \left\{ g^{R}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; \epsilon) \right\} \rangle_{\mathbf{p}}$$
(2.139)

²¹n は整数

²²状態密度にスピン自由度は含めないとする。

 $^{^{23}}$ 準古典 Green 関数の定義の際に πi という因子を加えてある場合にこの等式は成り立つ。この因子を除いて定義する場合は Re を i athrmIm と書き換えればよい。

²⁴local density of state

と書ける。例えば等方的な Fermi 面を持つ s 波の状態密度は

$$\nu_{s}(\epsilon) = -\frac{1}{2}\nu(0) \left[g^{R}(\hat{\mathbf{p}}, 0; \epsilon) - g^{A}(\hat{\mathbf{p}}, 0; \epsilon) \right]$$

$$= -\frac{1}{2}\nu(0) \int d\mathbf{r} \left[g^{R}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; \epsilon) - g^{A}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; \epsilon) \right]$$

$$= -\nu(0) \int d\mathbf{r} \operatorname{Re} \left\{ g^{R}(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; \epsilon) \right\}$$
(2.141)

となる。

参考までに、前に求めた表式をこれらに代入して空間的に一様な場合のこれらの物理量の表式を求める。まず初めに電流密度は

$$j(\mathbf{r}) = 2\nu(0)ei\pi T \nabla_F \sum_n \frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}}$$

$$= 0 \qquad (2.142)$$

と確かに消える。Gap方程式は

$$\frac{\Delta(\mathbf{r})}{\lambda} = \pi i T \sum_{n} f(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}; i\omega_{n})$$

$$= \pi T \sum_{n} \frac{\Delta}{\sqrt{\omega_{n}^{2} + |\Delta|^{2}}} \tag{2.143}$$

という良く知られた形となる。最後に、状態密度は次の様になる:

$$\nu(\epsilon) = \nu(0) \ \theta(|\epsilon| - |\Delta|) \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}}$$
 (2.144)

第3章 explosion trickとzero-core model

この短い章では vortex の zero-core model を取り上げ、explosion trick という解の 構成法を導入する。ここでは Thuneberg ら [17] に従って以下のように表記する:

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

$$\equiv g_1 \sigma^x + g_2 \sigma^y + g_3 \sigma^z$$

$$= \begin{pmatrix} g_3 & g_1 - ig_2 \\ g_1 + ig_2 & -g_3 \end{pmatrix}$$

$$\equiv \begin{pmatrix} g_1(\hat{p}, r; i\omega_n) \\ g_2(\hat{p}, r; i\omega_n) \\ g_3(\hat{p}, r; i\omega_n) \end{pmatrix}$$

$$\hat{\Delta}(\hat{p}, r; i\omega_n) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\hat{p}, r) \\ -\Delta^*(\hat{p}, r) & 0 \end{pmatrix}$$

$$\equiv i(\Delta_1 \sigma^x + \Delta_2 \sigma^y)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & i\Delta_1 + \Delta_2 \\ i\Delta_1 - \Delta_2 & 0 \end{pmatrix}$$
(3.2)

この時、Eilenberger 方程式は次の様に書き直される:

$$\mathsf{V}_{F} \cdot \nabla \begin{pmatrix} g_{1} \\ g_{2} \\ g_{3} \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 & i\omega_{n} + \frac{e}{c} \mathsf{V}_{F} \cdot \mathsf{A} & i\Delta_{2} \\ -i\omega_{n} - \frac{e}{c} \mathsf{V}_{F} \cdot \mathsf{A} & 0 & -i\Delta_{1} \\ -i\Delta_{2} & i\Delta_{1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{1} \\ g_{2} \\ g_{3} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

また、

$$\left[\sigma^{i}, \sigma^{j}\right]_{\perp} = 2\delta_{ij} \tag{3.4}$$

より、規格化条件は

$$\check{g}\check{g} = g_1^2 + g_2^2 + g_3^2 = 1 \tag{3.5}$$

となる。ここで

$$\alpha \equiv \sqrt{{\omega_n}^2 + {\Delta_1}^2 + {\Delta_2}^2} \tag{3.6}$$

とすると、Eilenberger 方程式右辺の係数行列の固有値は $\pm 2\alpha$, 0 である。今、 Δ が空間座標に依存しない (constant gap model) とするとそれぞれに対応する固有ベクトルは以下のとおりである¹:

$$\check{g}_{0}(\hat{\mathbf{p}}, x; i\omega_{n}) = \frac{1}{\alpha} \begin{pmatrix} \Delta_{1}(\hat{\mathbf{p}}) \\ \Delta_{2}(\hat{\mathbf{p}}) \\ -\omega_{n} \end{pmatrix}
\check{g}_{\pm}(\hat{\mathbf{p}}, x; i\omega_{n}) = \begin{pmatrix} \mp \Delta_{2}(\hat{\mathbf{p}})\alpha + i\Delta_{1}(\hat{\mathbf{p}})\omega_{n} \\ \pm \Delta_{1}(\hat{\mathbf{p}})\alpha + i\Delta_{2}(\hat{\mathbf{p}})\omega_{n} \\ i(\Delta_{1}^{2} + \Delta_{2}^{2}) \end{pmatrix} e^{\pm \frac{2\alpha x}{v_{F}}}$$
(3.7)

 \check{g}_{\pm} は規格化条件を満たしえず、 $x
ightarrow \pm \infty$ でそれぞれ発散する:

$$\check{g}_{\pm}(\hat{\mathbf{p}}, x; i\omega_n) \ \check{g}_{\pm}(\hat{\mathbf{p}}, x; i\omega_n) = 0$$
(3.8)

従って \check{g}_0 のみが物理的な解であることがわかる。しかしながら、 \check{g}_\pm には興味深い特徴がある。すなわち、規格条件を満たしえないこれらの発散する二つの解の交換関係が、規格条件を満たしかつ発散しない解を与える:

$$[\check{g}_{+}, \check{g}_{-}] = [(g_{+})_{i}\sigma^{i}, (g_{-})_{j}\sigma^{j}]$$

$$= 2i\epsilon_{ijk}(g_{+})_{i}(g_{-})_{j}\sigma^{k}$$

$$= -4\alpha(\Delta_{1}^{2} + \Delta_{2}^{2})\{\Delta_{1}\sigma^{x} + \Delta_{2}\sigma^{y} - \omega_{n}\sigma^{z}\}$$

$$\propto \check{g}_{0}(\hat{p}, x; i\omega_{n})$$
(3.9)

このような解の構成法を explosion trick と呼ぶ。

ここでどうして交換関係を取るかについて簡単に考える。Eilenberger 方程式の二つの解をそれぞれ \check{g}_1,\check{g}_2 とすると、前に見たように線形結合 $C_1\check{g}_1+C_2\check{g}_2$ だけでなく行列積 $\check{g}_1\check{g}_2$ も解となる事がわかっている。今、Eilenberger 方程式右辺の係数行列の対称性から、その 3 つの固有値は $0,\pm 2\alpha$ となる。この時、発散する 2 つの固有関数はそれぞれ $e^{\pm\frac{2\alpha x}{v_F}}$ という発散部分を持つ。そのために、これらの固有関数をそれぞれ \check{g}_\pm とすると $\check{g}_+\check{g}_-$ という積は Eilenberger 方程式の発散しない解になる。さらに $Tr\ \check{g}=0$ という規格化条件を満たすためには $\check{g}_+\check{g}_--\check{g}_-\check{g}_+$ を(規格化定数を除いて) \check{g} と取ればよいことがわかる。

それでは zero-core vortex model を考える。このモデルでは vortex は無限小のサイズを持つとする。vortex と垂直な平面内において vortex core を通る一本の軌跡を考える 2 。

 $^{^1}$ 以下において $x\equiv\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{r}$ とする。 \mathbf{x} に直交するような空間座標に対する依存性はここでは考えない。

 $^{^2}$ vortex と平行な方向においては系は一様だとする。その為、以下は実質的に 2 次元問題である。

$$\Delta = \Delta 2 - i \Delta 1$$

$$\Delta = +\Delta 2 + i \Delta 1$$

$$\times$$

図 3.1: zero core vortex を通る一本の軌跡。vortex の前後で位相が π 変化する。

この軌跡上において vortex core の前後で pair-potential の位相が π だけずれる3:

$$\Delta(\hat{\mathbf{p}}, x < 0) \equiv -\Delta_2 - i\Delta_1 \tag{3.10}$$

$$\Delta(\hat{\mathbf{p}}, x > 0) \equiv +\Delta_2 + i\Delta_1 \tag{3.11}$$

x < 0 における Eilenberger 方程式の解は

$$\check{g}_{0}(\hat{\mathbf{p}}, x < 0; i\omega_{n}) = -\frac{1}{\alpha} \begin{pmatrix} \Delta_{1}(\hat{\mathbf{p}}) \\ \Delta_{2}(\hat{\mathbf{p}}) \\ \omega_{n} \end{pmatrix}$$

$$\check{g}_{\pm}(\hat{\mathbf{p}}, x < 0; i\omega_{n}) = \begin{pmatrix} \pm \Delta_{2}(\hat{\mathbf{p}})\alpha - i\Delta_{1}(\hat{\mathbf{p}})\omega_{n} \\ \mp \Delta_{1}(\hat{\mathbf{p}})\alpha - i\Delta_{2}(\hat{\mathbf{p}})\omega_{n} \\ i(\Delta_{1}^{2} + \Delta_{2}^{2}) \end{pmatrix} e^{\pm \frac{2\alpha x}{v_{F}}} \tag{3.12}$$

x>0 においては

$$\check{g}_{0}(\hat{\mathbf{p}}, x > 0; i\omega_{n}) = \frac{1}{\alpha} \begin{pmatrix} \Delta_{1}(\hat{\mathbf{p}}) \\ \Delta_{2}(\hat{\mathbf{p}}) \\ -\omega_{n} \end{pmatrix}$$

$$\check{g}_{\pm}(\hat{\mathbf{p}}, x > 0; i\omega_{n}) = \begin{pmatrix} \mp \Delta_{2}(\hat{\mathbf{p}})\alpha + i\Delta_{1}(\hat{\mathbf{p}})\omega_{n} \\ \pm \Delta_{1}(\hat{\mathbf{p}})\alpha + i\Delta_{2}(\hat{\mathbf{p}})\omega_{n} \\ i(\Delta_{1}^{2} + \Delta_{2}^{2}) \end{pmatrix} e^{\pm \frac{2\alpha x}{v_{F}}} \tag{3.13}$$

となる。これらの解を特異点である原点で接続する:

$$C_1 \check{g}_+(\hat{p}, x = -0) + C_2 \check{g}_0(\hat{p}, x = -0)$$

= $C_3 \check{g}_-(\hat{p}, x = +0) + C_4 \check{g}_0(\hat{p}, x = +0)$ (3.14)

これを解くと

$$-i\alpha\omega_n C_1 = -i\alpha\omega_n C_3 = C_2 = C_4 \tag{3.15}$$

となりさらに規格化条件を考慮すると、原点における物理的な解が次の様に決定する:

$$\check{g}_{\text{phys}}(\hat{\mathbf{p}}, x = 0; i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n} \begin{pmatrix} -\Delta_2(\hat{\mathbf{p}}) \\ \Delta_1(\hat{\mathbf{p}}) \\ -i\alpha \end{pmatrix}$$
(3.16)

 $^{^{3}}$ vortex の位置を x=0 とする。

同様にして x < 0 及び x > 0 における物理的な解が決定する:

$$\check{g}_{\text{phys}}(\hat{\mathbf{p}}, x < 0; i\omega_n) = -\frac{1}{\alpha} \begin{pmatrix} \Delta_1(\hat{\mathbf{p}}) \\ \Delta_2(\hat{\mathbf{p}}) \\ \omega_n \end{pmatrix} + \frac{1}{i\omega_n} \begin{pmatrix} -\Delta_2 + i\Delta_1 \frac{\omega_n}{\alpha} \\ \Delta_1 + i\Delta_2 \frac{\omega_n}{\alpha} \\ -i\alpha + i\omega_n \frac{\omega_n}{\alpha} \end{pmatrix} e^{\frac{2\alpha x}{v_F}}$$

$$= \check{g}(\hat{\mathbf{p}}, x = 0; i\omega_n) e^{\frac{2\alpha x}{v_F}} - \frac{1 - e^{\frac{2\alpha x}{v_F}}}{\alpha} \begin{pmatrix} \Delta_1(\hat{\mathbf{p}}) \\ \Delta_2(\hat{\mathbf{p}}) \\ \omega_n \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

$$\check{g}_{\text{phys}}(\hat{\mathbf{p}}, x > 0; i\omega_n) = \frac{1}{\alpha} \begin{pmatrix} \Delta_1(\hat{\mathbf{p}}) \\ \Delta_2(\hat{\mathbf{p}}) \\ -\omega_n \end{pmatrix} + \frac{1}{i\omega_n} \begin{pmatrix} -\Delta_2 - i\Delta_1 \frac{\omega_n}{\alpha} \\ \Delta_1 - i\Delta_2 \frac{\omega_n}{\alpha} \\ -i\alpha + i\omega_n \frac{\omega_n}{\alpha} \end{pmatrix} e^{-\frac{2\alpha x}{v_F}}$$

$$= \check{g}(\hat{\mathbf{p}}, x = 0; i\omega_n) e^{-\frac{2\alpha x}{v_F}} + \frac{1 - e^{-\frac{2\alpha x}{v_F}}}{\alpha} \begin{pmatrix} \Delta_1(\hat{\mathbf{p}}) \\ \Delta_2(\hat{\mathbf{p}}) \\ -\omega_n \end{pmatrix}$$

$$(3.18)$$

この表式より $g_3(\hat{p},x)$ が偶関数であるのに対し、 $g_1(\hat{p},x)$ と $g_2(\hat{p},x)$ は vortex の 遠方で減衰していく偶関数部分と、constant gap model 解に収束していく奇関数部分とに分かれる事がわかる。空間座標に回転操作を行うことによって、ある \hat{p} を持つ軌跡に対して pair-potential を実数にとることが出来る。その時には $\Delta_1(\hat{p})=0$ より、 $g_1(\hat{p},x)$ と $g_2(\hat{p},x)$ はそれぞれ偶関数と奇関数とになる。

この zero-core vortex model においても explosion trick が以下のように成り立つ:

$$[\check{g}_{-}(x>0), \check{g}_{+}(x<0)] = 2\omega_{n} \left(\Delta_{1}^{2} - \Delta_{2}^{2}\right) \left(-\Delta_{2}\sigma^{x} + \Delta_{1}\sigma^{y} - i\alpha\sigma^{z}\right)$$

$$\propto \check{g}_{\text{phys}}(\hat{p}, x=0; i\omega_{n})$$
(3.19)

ただし $\check{g}_+(\hat{\mathbf{p}},x>0;i\omega_n)$ と $\check{g}_-(\hat{\mathbf{p}},x<0;i\omega_n)$ の交換関係や $\check{g}_{\mathrm{phys}}(\hat{\mathbf{p}},x>0;i\omega_n)$ と $\check{g}_{\mathrm{phys}}(\hat{\mathbf{p}},x<0;i\omega_n)$ の交換関係はどの意味のある関数とも一致しないことを注意しておく。

第4章 Riccati Formalism

Scalar Riccati 方程式 4.1

ここでは空間を2次元として議論する。まず初めに空間座標の記号に関して以 下のように定義する(図4.1)。

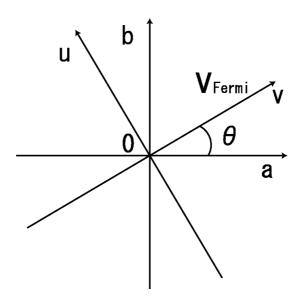


図 4.1: 座標の定義

$$V_F = v_F(\cos\theta \,\,\hat{a} + \sin\theta \,\,\hat{b}) \tag{4.1}$$

$$\mathsf{r}(x) = r_a \hat{\mathsf{a}} + r_b \hat{\mathsf{b}}$$

$$= x\hat{\mathsf{V}} + y\hat{\mathsf{U}} \tag{4.2}$$

$$= x\hat{\mathbf{v}} + y\hat{\mathbf{u}}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{v}} \\ \hat{\mathbf{u}} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{a}} \\ \hat{\mathbf{b}} \end{pmatrix}$$

$$(4.2)$$

ここで x 及び y が θ に依存していることに注意:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_a \\ r_b \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

今、次のように行列 K_+, K_3 を定義する:

$$K_{+} \equiv -\frac{i}{2}(\sigma_{x} + i\sigma_{y})$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(4.5)$$

$$K_{-} \equiv -\frac{i}{2}(\sigma_{x} - i\sigma_{y})$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

$$(4.6)$$

$$K_3 \equiv \frac{1}{2}\sigma_z$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0\\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$(4.7)$$

これらは次の様な交換関係を満たす:

$$[K_+, K_-] = -2K_3 (4.8)$$

$$[K_3, K_{\pm}] = \pm K_{\pm}$$
 (4.9)

また、次の様な関係式を導いておくと便利である1:

$$\begin{aligned}
\left[K_{3}, e^{CK_{\pm}}\right] &= \pm CK_{\pm}e^{CK_{\pm}} \\
\left[K_{\pm}, e^{CK_{3}}\right] &= (e^{\mp C} - 1)e^{CK_{3}}K_{\pm} \\
\left[K_{-}, e^{CK_{+}}\right] &= 2Ce^{CK_{+}}K_{3} + C^{2}K_{+}e^{CK_{+}} \\
\left[K_{-}, e^{CK_{-}}\right] &= 2Ce^{CK_{-}}K_{3} + C^{2}K_{-}e^{CK_{-}} \\
\left[K_{-}, e^{CK_{-}}\right] &= 2Ce^{CK_{-$$

$$\left[K_{\pm}, e^{CK_3}\right] = (e^{\mp C} - 1)e^{CK_3}K_{\pm} \tag{4.11}$$

$$[K_{-}, e^{CK_{+}}] = 2Ce^{CK_{+}}K_{3} + C^{2}K_{+}e^{CK_{+}}$$
(4.12)

$$[K_{+}, e^{CK_{-}}] = -2Ce^{CK_{-}}K_{3} + C^{2}K_{-}e^{CK_{-}}$$

$$(4.13)$$

これらを用いて Eilenberger 方程式は次の様に書くことが出来る:

$$-i\mathsf{V}_{F}\cdot\nabla\check{g}(\theta,\mathsf{r};i\omega_{n}) = \begin{bmatrix} \left(i\omega_{n} + \frac{e}{c}\mathsf{V}_{F}\cdot\mathsf{A} & \Delta(\theta,\mathsf{r}) \\ -\Delta^{*}(\theta,\mathsf{r}) & -i\omega_{n} - \frac{e}{c}\mathsf{V}_{F}\cdot\mathsf{A} \end{array}\right),\check{g} \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} 2i\bar{\omega}_{n}K_{3} - i\Delta K_{+} + i\Delta^{*}K_{-},\hat{g} \end{bmatrix} \tag{4.14}$$

ここで簡単のため、

$$i\bar{\omega}_n \equiv i\omega_n + \frac{e}{c} \mathsf{V}_F \cdot \mathsf{A} \tag{4.15}$$

とした。

今、次の微分方程式に従う 2×2 行列 $\hat{Y}(\theta,x,y;i\omega_n)$ という関数を導入する 2 :

$$-iv_F \frac{\partial}{\partial x} \hat{Y}(\theta, x, y; i\omega_n) = (2i\bar{\omega}_n K_3 + i\Delta(\theta, x, y)K_+ - i\Delta^*(\theta, x, y)K_-)\hat{Y}$$
 (4.16)

 $^{^1}C \equiv {
m const.}$ 2 ここで y, heta は固定する。

この $\hat{Y}(\theta,x,y;i\omega_n)$ を用いると、規格化も含めて $\hat{g}(\theta,x,y;i\omega_n)$ は次の様に書くことができる:

$$\check{g}(\theta, x, y; i\omega_n) = -\hat{Y} \cdot 2K_3 \cdot [\hat{Y}]^{-1} \tag{4.17}$$

今、

$$\hat{Y}(\theta, x, y; i\omega_n) \equiv e^{a_+(\theta, x, y; i\omega_n)K_+} e^{a_3(\theta, x, y; i\omega_n)K_3} e^{a_-(\theta, x, y; i\omega_n)K_-}$$
(4.18)

とおくと

$$\check{g}(\theta, x, y; i\omega_n) = -\left\{1 - 2a_- a_+ e^{-a_3}\right\} 2K_3 - a_+ \left\{a_- a_+ e^{-a_3} - 1\right\} 2K_+
-a_- e^{-a_3} 2K_-$$
(4.19)

と書け、 $\hat{Y}(\theta,x,y;i\omega_n)$ に関する微分方程式は次の様に書き換えられる:

$$\frac{\partial a_3}{\partial x} - 2a_+ e^{-a_3} \frac{\partial a_-}{\partial x} = -\frac{2\bar{\omega}_n}{v_F} \tag{4.20}$$

$$e^{-a_3} \frac{\partial a_-}{\partial x} = -\frac{2\Delta^*}{v_F} \tag{4.21}$$

$$\frac{\partial a_{+}}{\partial x} - a_{+} \frac{\partial a_{3}}{\partial x} + a_{+}^{2} e^{-a_{3}} \frac{\partial a_{-}}{\partial x} = \frac{\Delta}{v_{F}}$$

$$(4.22)$$

この微分方程式より a_- 及び a_3 が $a_+(\theta,x,y;i\omega_n)$ を用いて表せることがわかる:

$$a_3(\theta, x, y; i\omega_n) = \frac{2}{n_E} \left[\bar{\omega}_n x + \int_0^x dx' \Delta^* a_+ \right] + a_3(\theta, 0, y; i\omega_n)$$
(4.23)

$$a_{-}(\theta, x, y; i\omega_{n}) = -\frac{1}{v_{F}} \int_{0}^{x} dx' \Delta^{*} e^{a_{3}} + a_{-}(\theta, 0, y; i\omega_{n})$$
 (4.24)

従って、解くべき微分方程式は $a_+(\theta,x,y;i\omega_n)$ に関する以下の ${
m Riccati}$ 方程式 3 の みとなる:

$$v_F \frac{\partial}{\partial x} a_+(\theta, x, y; i\omega_n) + \left[2\bar{\omega}_n + \Delta^*(\theta, x, y)a_+\right] a_+ - \Delta(\theta, x, y) = 0$$
 (4.25)

このように、 $\check{g}(\theta,x,y;i\omega_n)$ を得るには次のような手順を踏めばよい事がわかる。

- 1. まず Riccati 方程式を解いて $a_{+}(\theta, x, y; i\omega_n)$ を求める。
- 2. 1. で求まった a_+ を積分して a_-, a_3 を求める。
- 3. それらを代入して $\check{g}(\theta, x, y; i\omega_n)$ を得る。

³Jacopo Francesco Riccati (ヤコポ・リッカティ) (1676/5/28 - 1754/4/15) ベネツィア共和国ベネツィアに生まれ、ベネツィア共和国トレヴィソに死す。ベネツイァの運河の堤防を建設。ニュートンをイタリアに紹介した。

しかしながら、前章で導入した explosion trick を巧みに用いる事によってより簡単に $\check{g}(\theta,x,y;i\omega_n)$ を得る方法が知られている。以下でその方法について述べる。

今、次のような $\check{g}_A(\theta,x,y;i\omega_n),\check{g}_B(\theta,x,y;i\omega_n)$ という2つの解を考える⁴:

$$\check{g}_A(\theta, x, y; i\omega_n) \equiv \hat{Y}_A \cdot 2K_- \cdot [\hat{Y}_A]^{-1}$$
(4.26)

$$= e^{-a_3} \left(K_- - 2a_+ K_3 + a^2_+ K_+ \right) \tag{4.27}$$

$$\check{g}_B(\theta, x, y; i\omega_n) \equiv \hat{Y}_B \cdot 2K_+ \cdot [\hat{Y}_B]^{-1}$$
(4.28)

$$= e^{b_3} \left(K_+ + 2b_- K_3 + b^2_- K_- \right) \tag{4.29}$$

$$\hat{Y}_A(\theta, x, y; i\omega_n) \equiv e^{a_+ K_+} e^{a_3 K_3} e^{a_- K_-}$$
 (4.30)

$$\hat{Y}_{B}(\theta, x, y; i\omega_{n}) \equiv e^{b-K-} e^{b_{3}K_{3}} e^{b+K+} \tag{4.31}$$

 $a_\pm,a_3(\theta,x,y;i\omega_n)$ は前述の方程式を満たす。 $b_\pm,b_3(\theta,x,y;i\omega_n)$ の満たす微分方程式は

$$\frac{\partial b_3}{\partial x} + 2b_- e^{b_3} \frac{\partial b_+}{\partial x} = -\frac{2\bar{\omega}_n}{v_F} \tag{4.32}$$

$$e^{b_3} \frac{\partial ab +}{\partial x} = \frac{2\Delta}{v_F} \tag{4.33}$$

$$\frac{\partial b_{-}}{\partial x} + b_{-} \frac{\partial b_{3}}{\partial x} + b^{2}_{-} e^{b_{3}} \frac{\partial b_{+}}{\partial x} = \frac{\Delta}{v_{F}}$$

$$(4.34)$$

となり、 b_+, b_3 は $b_-(\theta, x, y; i\omega_n)$ を用いて次の様に求められる:

$$b_3(\theta, x, y; i\omega_n) = -\frac{2}{v_F} \left[\bar{\omega}_n x + \int_0^x dx' \Delta b_- \right] + b_3(\theta, 0, y; i\omega_n)$$
 (4.35)

$$b_{+}(\theta, x, y; i\omega_{n}) = \frac{1}{v_{F}} \int_{0}^{x} dx' \Delta e^{-b_{3}} + b_{+}(\theta, 0, y; i\omega_{n})$$
(4.36)

ここで $b_-(\theta,x,y;i\omega_n)$ は次の Riccati 方程式を満たす:

$$v_F \frac{\partial}{\partial x} b_- - \left[2\bar{\omega}_n + \Delta b_-\right] b_- + \Delta^* = 0 \tag{4.37}$$

この Riccati 方程式を $a_+(\theta,x,y;i\omega_n)$ に関するものと比べるとこれらは互いに

$$b_{-}(\theta, x, y; i\omega_n) = -\frac{1}{a_{+}(\theta, x, y; i\omega_n)}$$

$$(4.38)$$

という関係にあることがわかる 5 。 $x\to\pm\infty$ に対して \check{g}_A,\check{g}_B はそれぞれ発散する。またこれらは規格化条件を満たしえない:

$$\dot{g}_A \cdot \dot{g}_A = 0 \tag{4.39}$$

$$\dot{g}_B \cdot \dot{g}_B = 0 \tag{4.40}$$

 $^{^4\}hat{Y}_A$ と \hat{Y}_B との定義の違いに注意。

 $^{^5}$ この関係式は必ずしも成り立つわけではない。後で見るように、 a_+ と b_- の解の符号を対応するように選んだときのみこの式は成り立つ。

そこで以前に述べたようにこれらの交換関係をとる:

$$\check{g}(\theta, x, y; i\omega_n) = \left[\check{g}_A(\theta, x, y; i\omega_n), \check{g}_B(\theta, x, y; i\omega_n)\right]
\equiv g_3 2K_3 + g_+ K_+ - g_- K_-$$
(4.41)

上の表式で $g_+, g_3(\theta, x, y; i\omega_n)$ はそれぞれ

$$g_3(\theta, x, y; i\omega_n) = [1 - a_+ b_-][1 + a_+ b_-]e^{b_3 - a_3}$$
(4.42)

$$g_{+}(\theta, x, y; i\omega_n) = -2a_{+}[1 + a_{+}b_{-}]e^{b_3 - a_3}$$

$$(4.43)$$

$$g_{-}(\theta, x, y; i\omega_n) = -2b_{-}[1 + a_{+}b_{-}]e^{b_3 - a_3}$$
(4.44)

で与えられる。次にこの $\check{g}(\theta,x,y;i\omega_n)$ の規格定数を求める。

となり、また

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ [1 + a_+ b_-]^4 e^{2b_3 - 2a_3} \right\} = 0 \tag{4.46}$$

となることから

$$[1 + a_{+}b_{-}]^{2} e^{b_{3}-a_{3}} = -1 (4.47)$$

とおけば良いことがわかる 6 。従って、規格化まで含めて g_{\pm}, g_3 は

$$g_3(\theta, x, y; i\omega_n) = -\frac{1 - a_+ b_-}{1 + a_+ b_-}$$
(4.48)

$$g_{+}(\theta, x, y; i\omega_{n}) = 2\frac{a_{+}}{1 + a_{+}b_{-}}$$
 (4.49)

$$g_{-}(\theta, x, y; i\omega_n) = 2\frac{b_{-}}{1 + a_{+}b_{-}}$$
 (4.50)

となる。これらの表式より、 $a_+(x)$ と $b_-(x)$ それぞれに対する Scalar Riccati 方程式を解くことで (さらに積分して $a_-(x), a_3(x)$ 等を求めることなく) Eilenberger 方程式の解を得られるということがみてとれる。

最も簡単な例として、系が空間的に一様かつ A=0 という状態に対して、この方法を用いて準古典 Green 関数を求める。この時、Riccati 方程式は

$$\Delta^* a_+^2 + 2\omega_n a_+ - \Delta = 0 (4.51)$$

$$\Delta b^2_- + 2\omega_n b_- - \Delta^* = 0 (4.52)$$

⁶もちろんここでは符号の任意性が残る。しかしながら、例えば一様な場合の準古典 Green 関数の符号をあらかじめ定めておいてそれに合うように規格化定数を定義することでこの任意性は取り除かれる。ここではそのようにしているものとする。

となり、これらを解いて

$$a_{+}(\theta, x, y; i\omega_{n}) = \frac{\Delta(\theta, x, y; i\omega_{n})}{\omega_{n} + \sqrt{\omega_{n}^{2} + |\Delta|^{2}}}$$

$$(4.53)$$

$$b_{-}(\theta, x, y; i\omega_n) = \frac{\Delta^*(\theta, x, y; i\omega_n)}{\omega_n + \sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}}$$
(4.54)

したがって

$$g_3(\theta, x, y; i\omega_n) = -\frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}}$$
(4.55)

$$g_{+}(\theta, x, y; i\omega_n) = \frac{\Delta}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}}$$
(4.56)

$$g_{-}(\theta, x, y; i\omega_n) = \frac{\Delta^*}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}}$$
(4.57)

となり、結局準古典 Green 関数が次の様にもとまる:

$$\check{g} = -\frac{1}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}} \begin{pmatrix} \omega_n & i\Delta \\ -i\Delta^* & -\omega_n \end{pmatrix}$$
(4.58)

これは確かに前章で求めた一様な場合の準古典 Green 関数に一致する。

4.2 Kramer-Pesch 近似

Kramer と Pesch は一種の摂動論を用いて、vortex 周りの低エネルギースペクトルを解析的に求めた [16]。本論文ではその近似法を Kramer-Pesch 近似と呼ぶ。本節ではまずこの Kramer-Pesch 近似を Riccati Formalism に適用する事によって 7 、十分低いエネルギー領域($|\omega_n| \ll |\Delta_\infty|$)における Green 関数の表式を求め vortex 周りの LDOS について議論する。

不純物の存在しない完全に clean な状況を考えると、Green 関数に対する impact parameter y からの寄与は $\xi_0=\hbar v_F/(\pi\Delta_\infty)$ よりも十分小さい領域のみから生じる。したがって、Riccati 方程式を ω_n と y で展開してそれぞれに関して 1 次までの表式を求める。

一般の pair-potential を

$$\Delta(\theta, x, y) = |\Delta(r)|e^{i\theta_{r}}f(\theta)$$
(4.59)

と書く。pair-potential の位相部分 $e^{i\theta_r}$ は以降の計算において本質的な役割を持たない。従って以下では、

$$\Delta(\theta, x, 0) \to \Delta(\theta, x) = \operatorname{sign}(x)|\Delta(x)|f(\theta)$$
 (4.60)

⁷この形での Kramer-Pesch 近似については例えば [18, 19] を参照。

として a(x,y),b(x,y) を求める。そうして導かれた a,b は最終的に

$$a(x,y) \rightarrow a^{true}(x,y) = a(x,y)e^{i\theta_{\Gamma}}$$
 (4.61)

$$b(x,y) \rightarrow b^{true}(x,y) = b(x,y)e^{-i\theta_r}$$
 (4.62)

とする事によって真の解が得られる。この事から、上の位相部分を無視した方法で得られた Green 関数は最終的に

$$g_3(\theta, x, y; i\omega_n) \rightarrow g_3^{true}(\theta, x, y; i\omega_n) = g_3$$
 (4.63)

$$g_{+}(\theta, x, y; i\omega_n) \rightarrow g_{+}^{true}(\theta, x, y; i\omega_n) = g_{+} \cdot e^{i\theta_{r}}$$
 (4.64)

$$g_{-}(\theta, x, y; i\omega_n) \rightarrow g_{-}^{true}(\theta, x, y; i\omega_n) = g_{-} \cdot e^{-i\theta_{\Gamma}}$$
 (4.65)

とすればよいことがわかる⁸。

それではまず0次の解を求める。

$$\omega_n = y = 0 \tag{4.66}$$

とおくと、0次のRiccati 方程式は

$$v_F \frac{\partial}{\partial x} a_0(\theta, x, y = 0) = \Delta(\theta, x) \left\{ 1 - a_0^2 \right\}$$
 (4.67)

となる。これは非線型方程式であるが

$$a_{0}(\theta, x, y = 0) = \tanh (u(\theta, x) + C_{a})$$

$$u(\theta, x) \equiv \frac{1}{v_{F}} \int_{0}^{x} dx' \operatorname{sign}(x') |\Delta(x')| f(\theta)$$

$$= \frac{1}{v_{F}} \int_{0}^{|x|} dx' \Delta(\theta, x')$$

$$(4.69)$$

と解かれる。 x_a において一様な状態に移行するという境界条件:

$$a_{0}(\theta, x_{a}, y = 0) = \frac{\Delta(\theta, x_{a})}{|\Delta(\theta, x_{a})|}$$

$$= \operatorname{sign}(x_{a})\operatorname{sign}(f(\theta))$$

$$= \operatorname{sign}(x_{a}f(\theta))$$
(4.70)

を課すと積分定数が決まる:

$$C_{a} = \operatorname{arctanh} \left(\operatorname{sign} \left(x_{a} f(\theta) \right) \right) - u(x_{a})$$

$$= \frac{1}{2} \log \frac{1 + \operatorname{sign} \left(x_{a} f(\theta) \right)}{1 - \operatorname{sign} \left(x_{a} f(\theta) \right)} - u(x_{a})$$

$$= \operatorname{sign} \left(x_{a} f(\theta) \right) \cdot \infty \tag{4.71}$$

 $^{^8}$ もちろん初めから pair-potential の位相部分 $e^{i heta_r}$ を完全に含めて計算しても結果は全く同じである。

ゆえに

$$a_0(\theta, x, y = 0) = \operatorname{sign}(x_a f(\theta)) \tag{4.72}$$

となる。次に、yと ω_n に関して1次の項を考える。今、

$$\Delta(\theta, x, y) = \Delta(\theta, x, y = 0) + \frac{\partial \Delta(\theta, x, y = 0)}{\partial y} \cdot y$$

$$= \Delta(\theta, x) + y \left\{ \frac{\partial |\Delta(r)|}{\partial y} e^{i\varphi} + |\Delta(r)| i \frac{\partial \varphi}{\partial y} e^{i\varphi} \right\}_{y=0}$$

$$= \Delta(\theta, x) + i \frac{y}{x} \Delta(\theta, x)$$
(4.73)

を用いて⁹1次の Riccati 方程式を書くと

$$v_F \frac{\partial}{\partial x} a_1(\theta, x, y) = -2\Delta(\theta, x) a_0 a_1 + i \frac{y}{x} \Delta(\theta, x) \left(a_0^2 + 1\right) - 2\omega_n a_0 \tag{4.74}$$

と書かれ、その解は境界条件も考慮して次の様に求まるは

$$a_1(\theta, x, y) = \frac{2}{v_F} \int_{x_a}^x dx' \left\{ -\omega_n a_0 + i \frac{y}{x'} \Delta(\theta, x') \right\} e^{2a_0 u(\theta, x')} \cdot e^{-2a_0 u(\theta, x)}$$
(4.75)

b(heta,x,y) に関しても全く同様の操作を行う。 0 次の解に関しては

$$v_{F} \frac{\partial}{\partial x} b_{0}(\theta, x, y = 0) = \Delta(\theta, x) \left\{ b_{0}^{2} - 1 \right\}$$

$$b_{0}(\theta, x, y = 0) = -\tanh(u(\theta, x) + C_{b})$$

$$= \operatorname{sign}(x_{b} f(\theta))$$

$$C_{b} = \operatorname{arctanh}(-\operatorname{sign}(x_{b} f(\theta))) - u(x_{b})$$

$$= \frac{1}{2} \log \frac{1 - \operatorname{sign}(x_{b} f(\theta))}{1 + \operatorname{sign}(x_{b} f(\theta))} - u(x_{b})$$

$$= -\operatorname{sign}(x_{b} f(\theta)) \cdot \infty$$

$$(4.76)$$

となり、1次に関しては

$$v_{F} \frac{\partial}{\partial x} b_{1}(x, y) = 2\Delta(\theta, x) b_{0} b_{1} + i \frac{y}{x} \Delta(\theta, x) \left(b_{0}^{2} + 1\right) + 2\omega_{n} b_{0}$$

$$= 2\Delta \operatorname{sign}\left(x_{b} f\right) b_{1} + i 2 \frac{y}{x} \Delta + 2\omega_{n} \operatorname{sign}\left(x_{b} f\right)$$

$$b_{1}(x, y) = \frac{2}{v_{F}} \int_{x_{b}}^{x} dx' \left\{\omega_{n} b_{0} + i \frac{y}{x'} \Delta\right\} e^{-2b_{0} u(x')} \cdot e^{2b_{0} u(x)}$$

$$(4.80)$$

と求まる。次にこれらの表式を代入して Green 関数を得る。その際、explosion trick を用いる事を見越して

$$-x_a = x_b \to +\infty \tag{4.81}$$

 $^{^{9}\}varphi \equiv \theta_{\rm r} - \theta$

と選ぶと a, b はそれぞれ

$$a(x,y) = -\zeta(\theta) + \frac{2}{v_F} \int_{-\infty}^{x} dx' \left\{ \omega_n \zeta + i \frac{y}{x'} \Delta(x') \right\} e^{-2\zeta u(x')} \cdot e^{2\zeta u(x)}$$

$$b(x,y) = \zeta(\theta) + \frac{2}{v_F} \int_{+\infty}^{x} dx' \left\{ \omega_n \zeta + i \frac{y}{x'} \Delta(x') \right\} e^{-2\zeta u(x')} \cdot e^{2\zeta u(x)}$$
(4.82)
$$(4.83)$$

となり、Green 関数は次の様に求まる:

$$g_{3}(\theta, x, y; i\omega_{n}) = -\frac{2}{a_{0}b_{1} + a_{1}b_{0}}$$

$$= -\frac{2e^{-2\zeta(\theta)u(\theta, x)}}{\frac{2}{v_{F}} \left\{ \int_{x_{a}}^{x} - \int_{x_{b}}^{x} \right\} dx' \left\{ \omega_{n} + i\frac{y}{x'}\zeta\Delta \right\} e^{-2\zeta(\theta)u(\theta, x')}}$$

$$= -\frac{2e^{-2\zeta(\theta)u(\theta, x)}}{\frac{2}{v_{F}} \int_{x_{a}}^{x_{b}} dx' \left\{ \omega_{n} + i\frac{y}{x'}\zeta(\theta)\Delta(\theta, x') \right\} e^{-2\zeta(\theta)u(x')}}$$

$$= -\frac{2e^{-2\zeta(\theta)u(\theta, x)}}{\frac{4}{v_{F}} \int_{0}^{\infty} dx' \left\{ \omega_{n} + i\frac{y}{x'}\zeta(\theta)\Delta_{0}(\theta, x') \right\} e^{-2\zeta(\theta)u(\theta, x')}}$$

$$= -\frac{v_{F}e^{-2\zeta(\theta)u(\theta, x)}}{2C\left\{ \omega_{n} + iE(\theta, y) \right\}}$$
(4.84)

ただし

$$\zeta(\theta) \equiv \operatorname{sign}(f(\theta))$$
 (4.85)

$$C \equiv \int_0^\infty dx' e^{-2\zeta(\theta)u(\theta,x')} \tag{4.86}$$

$$E(\theta, y) \equiv \frac{y}{C} \int_0^\infty dx' \frac{\zeta(\theta)\Delta(\theta, x')}{x'} e^{-2\zeta(\theta)u(\theta, x')}$$
(4.87)

とおいた。同様にして、この近似のもとでは

$$g_{+}(\theta, x, y; i\omega_{n}) = -\frac{2}{a_{0}b_{1} + a_{1}b_{0}}$$

$$= g_{3}(\theta, x, y; i\omega_{n}) \qquad (4.88)$$

$$g_{-}(\theta, x, y; i\omega_{n}) = \frac{2}{a_{0}b_{1} + a_{1}b_{0}}$$

$$= -g_{3}(\theta, x, y; i\omega_{n}) \qquad (4.89)$$

となり、これらをまとめて行列表示で書くと次のようになる:

$$\check{g}(\theta, x, y; i\omega_n) = g_3(\theta, x, y; i\omega_n) \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & -1 \end{pmatrix}$$
(4.90)

これまで無視してきた位相部分を加えて最終的に次の Green 関数を得る:

$$\check{g}(\theta, x, y; i\omega_n) = g_3(\theta, x, y; i\omega_n) \begin{pmatrix} 1 & -ie^{i\theta_r} \\ -ie^{-i\theta_r} & -1 \end{pmatrix}$$
(4.91)

遅延 Green 関数は

$$g^{R}(\theta, x, y; \epsilon) = -\frac{iv_{F}e^{-2\zeta(\theta)u(\theta, x)}}{2C\left\{\epsilon + i\delta - E(\theta, y)\right\}}$$
(4.92)

となる。

第5章 結果と議論

この章では、前章において定式化した Riccati Formalism の準古典理論を Vortex Bound State に適用し、Vortex の周りの LDOS について議論する。まず初めに一般的な議論をした後、実際にs 波、 $d_{x^2-y^2}$ 波、 NbSe_2 の 3 つの場合に関して LDOS を具体的に求め、それぞれの場合について考察する。それぞれの結果の解釈及び準古典理論の限界についても述べる。最後に 3 次元に拡張した場合について同様の議論を行う。

5.1 Vortex Bound Stateへの応用

vortex core 近傍 ($|r| \ll \xi$) では次の近似式

$$u(\theta, x) = \frac{1}{v_F} \int_0^{|x|} dx' \Delta(\theta, x') \sim \zeta(\theta) \cdot 0$$
 (5.1)

$$C \sim \int_0^\infty dx' e^{-2|f(\theta)|\frac{\Delta_\infty x'}{v_F}} \sim \frac{\xi_0}{|f(\theta)|}$$
 (5.2)

$$E(\theta, y) = \frac{y}{C} \int_0^\infty dx' \frac{\zeta \Delta(\theta, x')}{x'} e^{-2\zeta u} \sim \frac{y}{\xi_0} \Delta_\infty f^2(\theta)$$
 (5.3)

が成り立つことから、等方的な Fermi 面を仮定した場合の vortex core 近傍の LDOS $\nu(\mathbf{r},\epsilon)$ は

$$\nu(\mathsf{r},\epsilon) = -\left\langle \nu(\hat{\mathsf{p}}) \operatorname{Re} \left\{ g^{R}(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r};\epsilon) \right\} \right\rangle_{\mathsf{p}}$$

$$= -\nu(0) \int_{0}^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \operatorname{Re} g^{R}(\theta,x,y;\epsilon)$$

$$= \frac{\nu(0)v_{F}}{2C} \int_{0}^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{\delta}{\left(\epsilon - E(\theta,y)\right)^{2} + \delta^{2}} e^{-2\zeta(\theta)u(\theta,x)}$$

$$= \frac{\nu(0)v_{F}}{4\xi_{0}} \int_{0}^{2\pi} d\theta \, \delta\left(\epsilon - E(\theta,y)\right) \tag{5.4}$$

となる 1 。ここで LDOS が発散する点について考える。まず θ をパラメータとする曲線族:

$$h(\theta) \equiv \epsilon - E(\theta, y)$$

$$= 0 \tag{5.5}$$

 $[\]frac{1}{n}\lim_{n o\infty}rac{1}{\pi}rac{n}{1+n^2x^2}=\delta(x)$: ただしこれは数学的には厳密ではない。

を考える。この曲線族の包絡線2は

$$\frac{\partial h(\theta)}{\partial \theta} = -\frac{\partial E(\theta, y)}{\partial \theta}
= 0$$
(5.6)

を満たす解 θ_0 を用いて

$$h(\theta_0) = 0 \tag{5.7}$$

50

と書ける。さて、LDOSの表式に戻るとこれは

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) = \nu(0) \frac{v_F}{4\xi_0} \int_0^{2\pi} d\theta \, \delta(h(\theta))$$

$$= \nu(0) \frac{v_F}{4\xi_0} \int_0^{2\pi} d\theta \sum_i \frac{\delta(\theta - \theta_i)}{\left|\frac{\partial h(\theta_i)}{\partial \theta}\right|}$$

$$= \nu(0) \frac{\pi \Delta_{\infty}}{4} \sum_i \left|\frac{\partial h(\theta_i)}{\partial \theta}\right|^{-1} \tag{5.8}$$

となることから、 $f(\theta)$ の包絡線上でLDOS が発散していることがわかる。今、上 の包絡線を求める連立方程式は

$$y = r\sin(\theta_{\Gamma} - \theta) \tag{5.9}$$

$$X \equiv r \cos \theta_{\rm r} \tag{5.10}$$

$$Y \equiv r \sin \theta_{\rm r} \tag{5.11}$$

より

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X' \\ Y' \end{pmatrix} = \frac{\epsilon'}{f^2(\theta)} \begin{pmatrix} 2\frac{\dot{f}(\theta)}{f(\theta)} \\ 1 \end{pmatrix}$$
 (5.12)

となる³。これを解いて

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \end{pmatrix} = \frac{\epsilon'}{f^2(\theta)} \begin{pmatrix} 2\frac{\dot{f}(\theta)}{f(\theta)}\cos\theta - \sin\theta \\ 2\frac{\dot{f}(\theta)}{f(\theta)}\sin\theta + \cos\theta \end{pmatrix}$$
 (5.13)

が LDOS の発散する点を与える 4 。この結果は $f(\theta)$ の具体的表式に依存しない事 を強調しておく。すなわち、あらゆる対称性の pair-potential を持つ超伝導体に対 して、この結果は成り立つ。

 $^{^2}$ ある曲線族が覆っている領域の境界を表す曲線。包絡線上の点は、変数の値 $\,r\,$ を固定した時に パラメータ θ が変化しても関数の値 f が変化しないということで特徴付けられる。

 $^{3\}dot{f}(heta)\equiv rac{\partial f(heta)}{\partial heta}$ 4 ここで次の無次元量を用いた: $X'\equiv X/\xi_0$ 、 $Y'\equiv Y/\xi_0$ 、 $\epsilon'\equiv \epsilon/\Delta_\infty$ 。以降の記述においても、 (ダッシュ)′のついている量は無次元量を表すものとする。

第5章 結果と議論 51

さて、以上の LDOS $\nu(\mathbf{r},\epsilon)$ に関する一般的議論を $\nu(\mathbf{r},\epsilon;\theta)$ という観点から見て みる。ただし

$$\nu(\mathbf{r}, \epsilon) = \int_0^{2\pi} d\theta \ \nu(\mathbf{r}, \epsilon; \theta) \tag{5.14}$$

である。

Hayashi らはそれまでの Kramer-Pesch[16]、Klein[22]、Ullah[23] 達の $\nu(\mathbf{r}, \epsilon; \theta)$ に関する結果を次のようにまとめている。

- 1. $\mathbf{r}=(x,y)$ の関数としての $\nu(\mathbf{r},\epsilon;\theta)$ は $y=\mathrm{const.}=y(\epsilon)$ という直線上でのみ (ゼロでない) 値を持つ。この直線および $y(\epsilon)$ をそれぞれ quasiparticle path、 impact parameter と呼ぶ。
- 2. $y=y(\epsilon)$ という直線上において、 $\nu(\mathsf{r},\epsilon;\theta)$ は x=0 の 1 点で最大値を持ち、 $x\to\pm\infty$ では指数関数的に減少する。
- 3. impact parameter $y(\epsilon)$ は ϵ の単調増加関数である。また、 $\epsilon(y)$ を逆に impact parameter y によって決まるエネルギー ϵ だとすると、それは直線 $y=y(\epsilon)$ 上の $\min |\Delta(\mathbf{r})|$ で定まる。

これらは ${
m S}$ 波に対する結果である ($f(\theta)=1$)。一方、異方的な場合も含めた一般の場合の ${
m Riccati}$ 方程式は

$$v_F \frac{\partial}{f(\theta)\partial x} a_+(\theta, x, y; i\omega_n) + \left[2\frac{\bar{\omega}_n}{f(\theta)} + |\Delta| e^{-i\theta_\Gamma} a_+ \right] a_+ - |\Delta| e^{i\theta} = 0$$
 (5.15)

と書かれることから、Hayashi らは、異方的な場合に以下のような特徴が加わると述べた:

1. Riccati 方程式において x は $f(\theta) \cdot x$ という形であらわれているため、 $f(\theta)$ が 小さくなる θ の領域では $\nu(\mathbf{r}, \epsilon; \theta)$ のピークが広がる(図 5.1)。

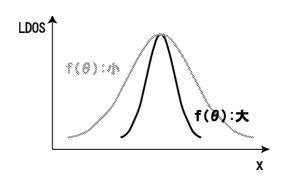


図 5.1: s 波における quasiparticle path 上の $\nu(\mathsf{r},\epsilon;\theta)$ の模式図。 $f(\theta)$ が小さくなる θ の quasiparticle path 上では、 $\nu(\mathsf{r},\epsilon;\theta)$ のピークは広がる。

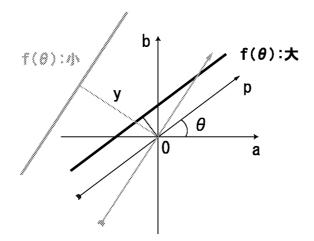


図 5.2: s 波における quasiparticle path の模式図。 $f(\theta)$ が小さくなる方向を向いている quasiparticle path はその impact parameter が大きくなる。

2. また、 ϵ は $\frac{\epsilon}{f(\theta)}$ という形であらわれているため、 $f(\theta)$ が小さくなる θ の領域では impact parameter $y(\epsilon)$ が大きくなる (図 5.2)。

それに対して本論文の計算では、 $u(\mathsf{r},\epsilon)$ 表式中の δ 関数より

$$y' = \frac{\epsilon'}{f^2(\theta)} \tag{5.16}$$

という直線上でのみ $\nu(\mathbf{r}, \epsilon; \theta)$ がゼロでない値を持つ 5 。すなわち、これが Hayashi らの言うところの quasiparticle path を記述する方程式である。また、この直線上の

$$x' = 2\epsilon' \frac{\dot{f}(\theta)}{f^3(\theta)} \tag{5.17}$$

を満たす点で LDOS は発散する。この事から例えば s 波 ($f(\theta)=1$) の場合、impact parameter y は θ に依存せず ($y'=\epsilon'$)、この直線上の x=0 で LDOS が発散する。 ゆえに LDOS の発散パターンが円周となる事がわかる(図 5.3)。これは Hayashi らの議論と同等である。しかしながら異方性を持つ場合は一般には

$$\dot{f}(\theta) \neq 0 \tag{5.18}$$

であり、ゼロでない x の点において LDOS が発散する。従って、x=0 において $\nu(\mathbf{r},\epsilon;\theta)$ がピークを持つとするのは $\dot{f}(\theta)=0$ の場合に限られる。この修正点を除き、本論分の結果は前述の 5 つの特徴を明確に再現する。

Hayashi らはまた、 $\nu(\mathbf{r},\epsilon;\theta)$ を部分的に θ 積分する事によって、 $\nu(\mathbf{r},\epsilon)$ のパターンを形成する曲線群の存在を指摘した。彼らは NbSe_2 ($f(\theta)=1+\frac{1}{3}\cos 6\theta$) にお

 $⁵x' \equiv x/\xi_0, y' \equiv y/\xi_0$

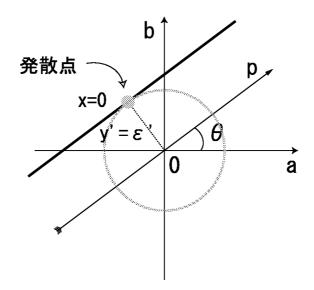


図 5.3: s 波の場合の $\nu(\mathbf{r},\epsilon;\theta)$ の発散点。 $y'=\epsilon'$ という円周上で LDOS が発散する事がわかる。

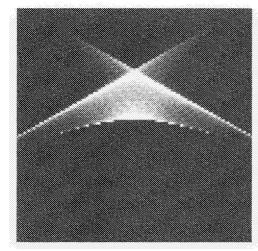
いて、 -30° < θ < 30° の範囲で ν (r, ϵ ; θ) を積分した(図 5.4)。この結果を、彼らは図 5.5 に描かれた準粒子の流れと解釈し、この軌道を quasiparticle trajectory と名付けた。vortex に束縛された準粒子がこの quasiparticle trajectory に沿って流れていると考えたのである。しかし、彼らはこの quasiparticle trajectory と前に述べた quasiparticle path との関係を明確に述べておらず、時にはこの両者を同一視するような表現も見受けられる。この同一視は $\theta=\pm30^\circ$ の時の解釈に顕著である。NbSe2 では、 $f(\theta)$ は例えば $\theta=\pm30^\circ$ で最小値 $\frac{2}{3}$ をとる。従って、 $\theta=\pm30^\circ$ において ν (r, ϵ ; θ) のピークは最も広がっている。この quasiparticle path 上の LDOS の広がりの特徴およびその外見上の一致が、この path を quasiparticle trajectory に同一視した理由だと思われる。しかしながら、この同一視は誤りである。1 本の quasiparticle path 上において重要なのは

$$x' = 2\epsilon' \frac{\dot{f}(\theta)}{f^3(\theta)} \tag{5.19}$$

を満たす1点であり、この点の集合が quasiparticle trajectory を構成するのである (図5.6)。実際、後に見るようにこの点の集合によって構成される LDOS の発散 点のパターンは Hayashi らの LDOS パターンを再現する。そしてこれらの点の集合は数学的には包絡線となっている事を前に見た。 quasiparticle path の包絡線が quasiparticle trajectory という事である6。

⁶次の節で詳しく述べるが、準古典理論は一本の quasiparticle path 上においては量子力学を適用するが複数の quasiparticle path 間は古典的に取り扱う。したがって、quasiparticle path の包絡線が quasiparticle trajectory という事から、quasiparticle trajectory は完全に古典的な曲線である事をここで注意しておく。

第5章 結果と議論 54



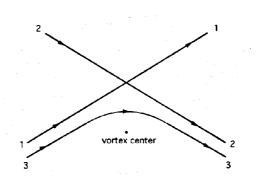


図 5.5: 図 5.4 に対応した quasiparticle trajectory。([8] より)

図 5.4: $\nu(\mathsf{r},\epsilon;\theta)$ を $-30^\circ<\theta<30^\circ$ の範囲で積分したもの。 $\epsilon'=0.5$ 。表示領域は $6\xi_0\times 6\xi_0$ 。([8]より)

5.2 準古典理論の限界

準古典理論は準古典条件 $\Delta \ll E_F$ を前提としている。この準古典条件は $\frac{1}{k_F} \ll \xi$ とも書き換えられる。波動関数の原子スケールでの変化の特徴的な長さ $\frac{1}{k_F}$ が、コヒーレンス長 ξ よりもはるかに小さく、従って本質的な寄与をしないというのが準古典条件の意味する所であった。しかし、高温超伝導体においては $k_F\xi \sim 1$ となることもあり 7 、そのような場合には一般に準古典理論は適用できない。また、準古典理論では vortex 束縛状態のエネルギー準位の離散化といったような量子論的効果が表れない。以下では、準古典理論によって得られた結果からどのようにして量子力学的状態を得るかについて考える。

量子化条件

今、Riccati Formalism における準古典理論を考える。この理論は、ある θ を持つ一本の直線上 8 においては系を量子力学的に取り扱っているが、複数の直線は互いに古典的に扱われる。x 軸方向を量子力学的に、y 方向を古典的に取り扱っていると言うことも出来る。角運動量 $L_{\theta} = -y \cdot p_F$ とそれに共役な座標 θ が同時に確定する、すなわち交換していることからもその事が分る。従って、準古典理論によって得られた状態は真の量子学的状態ではない。この理論のもとでは、前節でみたように、vortex 束縛状態のエネルギースペクトルは角運動量 L_{θ} と直線の方向

⁷それ以外にも、高温超伝導体においてはゆらぎの効果が重要であると考えられている。

 $^{^8}$ ここで言う直線は quasiparticle path を含むが、決して quasiparticle path そのものではないことを念のために注意しておく。

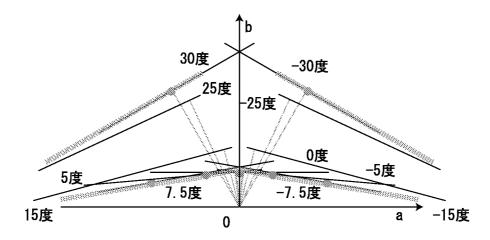


図 5.6: quasiparticle path と quasiparticle trajectory の関係。 0° 、 $\pm 5^{\circ}$ 、 $\pm 7.5^{\circ}$ 、 $\pm 25^{\circ}$ 、 $\pm 25^{\circ}$ 、 $\pm 30^{\circ}$ の quasiparticle path を細実線で表した。灰丸はそれぞれの path 上の発散点。1 本の path 上には発散点はただ1 つ。太破線は quasiparticl trajectory、すなわち灰丸の集合を表す。 $\theta = \pm 30^{\circ}$ の path が trajectory とほぼ一致してるが、それらは同一視されるものではない。

 θ という 2 つの連続量によって決まる θ :

$$E'(L_{\theta}, \theta) = -L'_{\theta} \cdot f^{2}(\theta) \tag{5.20}$$

一方、BdG 方程式は完全に量子学的な取り扱いである。BdG 方程式の解析によって、s 波の vortex 周りの各運動量が半整数になり、vortex 束縛状態のエネルギー準位が以下の様に離散的になる事が知られている[1]:

$$E = -L_{\theta} \cdot \omega_0 = -\omega_0 \left(m + \frac{1}{2} \right) \quad , \quad m \in \mathbf{Z}$$
 (5.21)

ただしここで

$$\omega_0 \sim \frac{\Delta_\infty^2}{E_F} \tag{5.22}$$

である¹⁰。

Kopnin と Volovik は Bohr-Sommerfeld-Wilson (BSW) の量子化条件¹¹を適用する事によって、準古典理論の結果から、失われた量子性を回復して真の量子力学

 $^{^9}E' \equiv E/\Delta_{\infty}, \ L'_{\theta} \equiv L_{\theta}/\xi_0 p_F$

 $^{^{10}}$ 上の表式より、準古典条件 $\Delta_{\infty} \ll E_F$ のもとでこの離散準位が連続準位とみなされることがわかる。すなわち、準古典理論の範囲内ではこの離散化は議論する事が出来ないということである。

 $^{^{11}}$ Bohr-Sommerfeld-Wilson Quantum Condition: 1913年に Niels Bohr は原子構造について 3 部作の論文を発表した。水素原子を取り扱ったその第 1 論文において Bohr はエネルギー量子の存在を仮定し、定常状態や遷移に関するいくつかの基本仮定の上に原子スペクトルの実験を理解する鍵を与えた。この第 1 論文においてエネルギー量子の存在から角運動量の量子化が導かれる事に気付いた Bohr は、その第 2 論文においては角運動量が量子化されるという要請を議論の出発点とした。以後、量子論的に許された状態を取り出すためのこの量子条件を任意の力学系に適用できる

的状態が導かれると述べた [25]。彼らは実際に 2 次元の場合における d 波 vortex に対してこの方法を適用し、混合状態の比熱を論じた。本研究でもこの量子化条件を用いて諸量の量子化や LDOS について、準古典近似を超えた議論を行う。BSW の量子化条件は

$$J = \oint d\theta \ L_{\theta}(\theta, E) = 2\pi\hbar \left(m + \frac{1}{2} \right) \quad , \quad m \in \mathsf{Z}$$
 (5.23)

と書かれる 12 。ここで右辺に $\frac{1}{2}$ が表れるのは、量子数1の vortex を周回した時に波動関数の符号が反転するからである。また、J は作用変数 13 である。これによって角運動量の量子化およびエネルギー準位の離散性が現れる 14 :

$$E = -\frac{\pi}{2\langle f^{-2}(\theta)\rangle_{\theta}} \frac{\Delta_{\infty}^2}{E_F} \left(m + \frac{1}{2} \right) \quad , \quad m \in \mathbb{Z}$$
 (5.24)

準古典条件がよく成り立つ状況においては、準古典理論の結果よりこの量子化条件によって vortex 束縛状態の量子論的なエネルギー準位が求まると考えられる。 以下の節において、そのようにして各場合に対するエネルギー準位を求める。

また上の表式より、一般に pair-potential の異方性が vortex 束縛状態の準位間隔を小さくする事が分る。

LDOS の形状

ここである注意をしておく。上で述べた量子化条件によって量子論的に許された状態のみが選び出され、quasiparticle trajectory は離散的な軌道となるが、その形状そのものは変化しない。一方で、 $d_{x^2-y^2}$ 対称性の場合において、 BdG 方程式を解く事によって得られた LDOS パターンが準古典理論のものと定性的にも大きく異なるという報告がある [27, 28, 29]。したがって一般に準古典条件が成り立たない状況では、準古典理論から得られた結果に対して量子化を適用したとしてもそれは正しい LDOS パターンを与えるわけではない。つまり量子化条件は、 BdG 理論における完全な量子性を回復するのでは決してない。この点は次節の d 波の小節において立ち戻る。

よう一般化することが求められた。やがて Ehrenfest の断熱仮説に集約されるように、原理的に連続的変化の可能な古典力学の諸物理量の中で、系の無限にゆるやかな連続的変化に対してその値を変えない所謂断熱不変量こそが量子的に許される状態を規定する事が明らかになった。そうして、Planck 定数 h と同じ次元を持ちさらには正準変換に対して不変な作用変数 $J_s=\oint p_s dq_s$ の断熱不変性が示され、 $J_s=n_sh$ という量子条件が A.Sommerfeld と W.Wilson らによって導入されたのである。詳しくは例えば [30] を参照。

¹²**Z**:整数

 $^{^{13}}$ action variable

 $^{^{14}\}langle\cdots\rangle_{\theta}\equiv\int_{0}^{2\pi}\frac{d\theta}{2\pi}\cdots$

第5章 結果と議論 57

5.3 各対称性における Vortex Bound State

それでは具体的に各対称性における Vortex Bound State を議論する。それぞれの場合に対し、まず準古典理論によって得られる LDOS の発散点のパターンを示す。次にそのパターンの物理的解釈について述べる。そして最後に、準古典理論によって得られたエネルギースペクトル・LDOS パターンが量子化条件によってどのように修正されるかについて議論する。

5.3.1 s 波の場合

まず s 波の pair-potential の場合:

$$f(\theta) = 1 \tag{5.25}$$

を考える。この時、pair-potential は θ によらない。また、この時に限り LDOS の表式が解析的に求まる。Green 関数は

$$g_3(\theta, x, y; i\omega_n) = -\frac{v_F e^{-2u(x)}}{2C\{\omega_n + iE(y)\}}$$
 (5.26)

と求まる。従って遅延 Green 関数は

$$g^{R}(\theta, x, y; \epsilon) = -\frac{iv_{F}e^{-2u(x)}}{2C\left\{\epsilon + i\delta - E(y)\right\}}$$
(5.27)

となる。vortex core 近傍で次の様な近似式:

$$u(x) \sim +0 \tag{5.28}$$

$$C \sim \xi_0 \tag{5.29}$$

$$E(\theta, y) \sim \frac{y}{\xi_0} \Delta_{\infty}$$
 (5.30)

が成り立つことから、等方的な Fermi 面を仮定した場合の vortex core 近傍の LDOS $u(\mathsf{r},\epsilon)$ は

$$\nu'(\mathbf{r}, \epsilon) \sim \frac{v_F}{4\xi_0} \int_0^{2\pi} d\theta \, \delta(\epsilon - \frac{y}{\xi_0} \Delta_{\infty})$$

$$= \frac{v_F}{4} \int_0^{2\pi} d\theta \sum_i \frac{\delta(\theta - \theta_i)}{r \Delta_{\infty} |\cos(\theta - \theta_i)|}$$

$$= \frac{\pi}{2r'} \operatorname{Re} \frac{1}{\sqrt{1 - (\epsilon'/r')^2}}$$
(5.31)

となる。従って

$$r' = \epsilon' \tag{5.32}$$

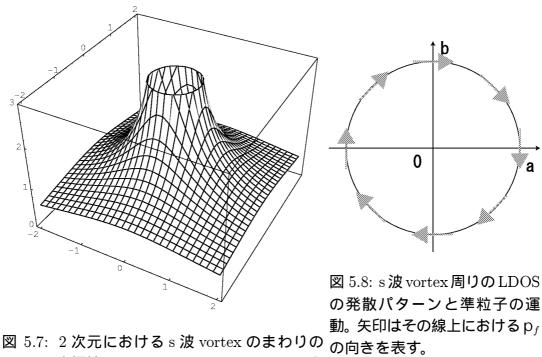


図 5.7: 2 次元における s 波 vortex のまわりの LDOS。座標軸は $(X',Y',\nu'(\mathsf{r},\epsilon'=0.1))$ 。円周上で LDOS が発散していることがわかる。

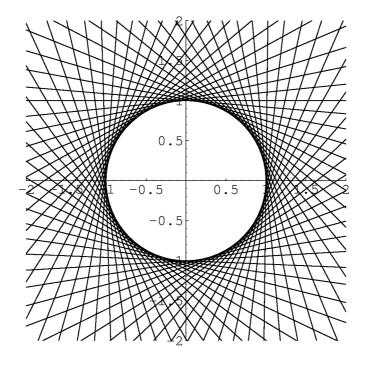


図 5.9: s 波の場合における quantum paths。座標軸は (X',Y')。 quantum paths の 包絡線が円周をなしている。ただし $\epsilon'=0.1$ 。

第5章 結果と議論 59

という円周上で状態密度が発散する(図 5.7)。また、この円周すなわち LDOS の発散点の集合に運動量 p_F の方向 θ を書き加えてみると図 5.8 のようになる。これは vortex bound state が、vortex core の周りを周回する準粒子の状態であると解釈する事ができる。ただし、前に述べたようにこの quasiparticle rajectory すなわち準粒子の軌道は完全に古典的である。そこで BSW の量子化条件より

$$\epsilon = -\frac{2}{\pi} \frac{\Delta_{\infty}^2}{E_F} \left(m + \frac{1}{2} \right) \quad , \quad m \in \mathbf{Z}$$
 (5.33)

とすることによって量子性が回復される。この結果は前に述べた BdG 理論のものとよく合う。

最後に、図 5.9 は quantum paths を示したものである。 quantum paths の包絡 線が quantum trajectory であることが見て取れる。

5.3.2 d 波の場合

次に $d_{x^2-y^2}$ 対称性の pair-potential $\Delta(\theta,x,y)$;

$$\Delta(\theta, x, y) = \Delta(x, y) \cos 2\theta$$
$$= |\Delta(r)|e^{i\theta_r} \cos 2\theta \qquad (5.34)$$

すなわち

$$f(\theta) = \cos 2\theta \tag{5.35}$$

の場合を考える。この時、

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \end{pmatrix} = \frac{\epsilon'}{\cos^2 2\theta} \begin{pmatrix} -4\cos\theta \tan 2\theta - \sin\theta \\ -4\sin\theta \tan 2\theta + \cos\theta \end{pmatrix}$$
 (5.36)

が LDOS の発散する点を与える(図 5.10)。これは Schopohl-Maki や Ichioka らの結果とよく合う。図 5.11 は実際に LDOS を求めたものである。また、quantum trajectory が quantum path の包絡線となっている様子を図 5.12 に示す。

回転現象

LDOS の発散パターンはエネルギー ϵ に比例しており、エネルギー ϵ の変化はこのパターンの拡大・縮小をもたらす。 $\epsilon \to 0$ の極限において、LDOS の発散点の描く図形は

$$y = \pm x \tag{5.37}$$

となる。従って、エネルギー ϵ を変化させる事によって、LDOS のパターンが 45 度回転するという効果も含んでいることがわかる (図 5.13)。また、図 5.14 は図 5.10 に運動量 p_F の方向 θ を書き加えたものである。

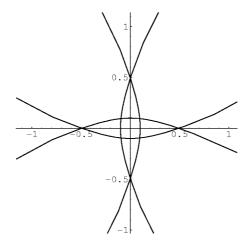


図 5.10: d波 vortex 周りの $LDOS \nu(r, \epsilon' = 0.1)$ の発散点の集合。座標軸は (X', Y')。

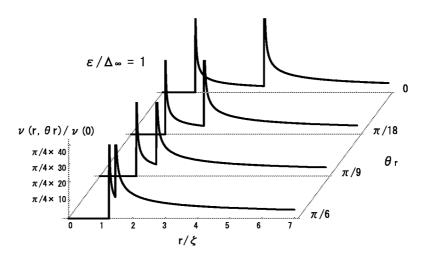


図 5.11: d 波 vortex 周りの LDOS $\nu'(r',\theta_r,\epsilon'=1)$ 。図 5.10 に対応している事が分る。

node の影響

 $d_{x^2-y^2}$ 波の場合はs 波や NbSe $_2$ には見られない特徴がある。それは pair-potential が $\theta=\pm\pi/4\pmod{\pi}$ において 4 つの node を持つという事である。この node の存在は様々な効果を及ぼす事が知られている。まず、図 5.14 から分るように準粒子は vortex に完全には束縛されず、node 方向から vortex を飛び出す。遠方まで伸びる 8 本の隆起線はこの結果として表れるものであり、vortex の存在が vortex から充分離れた地点の低エネルギー電子状態にも影響を及ぼす事が分る。また BSW の量子化条件によって低エネルギー準位を求めると

$$J = \oint d\theta \ L_{\theta} \propto \oint d\theta \ \frac{1}{\cos^2 2\theta} = \infty \tag{5.38}$$

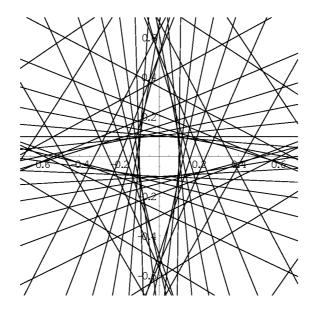


図 5.12: d 波の場合における quantum paths。座標軸は (X',Y')。 quantum paths の包絡線が十字型の quantum trajectory をなしている。ただし $\epsilon'=0.1$ 。

と、nodeの寄与によって(本論文における近似では)作用変数は発散する。nodeの存在によってエネルギー準位間隔がs波の場合に比べてはるかに小さくなり、ほぼ連続なエネルギー準位となっているという事である。これは準粒子がpair-potentialが0となるnode方向からvortexを飛び出す事に対応している。

高温超伝導体

上で述べてきたような結果は、d波の高温超伝導体の場合には一般に成り立つ事ではない。高温超伝導体の中には $k_F\xi\sim 1$ となるものもあり、原子スケールでの波動関数の変化の効果を必ずしも無視できるとは限らないからである。また、平均場理論では無視された揺らぎの効果も重要になると考えられている。

Maggio-Aprile らは、d 波の高温超伝導体であると考えられている $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ の単結晶 15 を用いて、Abrikosov 格子を STM を用いて観測した [26]。しかしながらそこでは LDOS パターンに 4 回回転対称性 C_4 の異方性は見られず、s 波の場合のような回転対称性を持った LDOS パターンが観測された。vortex 束縛状態のエネルギー準位に対しても、あたかも s 波 vortex であるかの様に、vortex core において離散的な準位がわずかに存在するだけであると彼らは主張した 16 。この結果は準古典理論による d 波の結果の特徴とは大きく異なる。Morita らは BdG 方程式を用いた結果が Maggio-Aprile SO の実験結果を再現し、SO において準古典理論

¹⁵以降、YBCO と記す。

¹⁶LDOS パターンが円形であればそれは準粒子が vortex から飛び出さずに束縛されているという事である。従ってその束縛状態のスペクトルが離散的であるのは驚くべき事ではない。

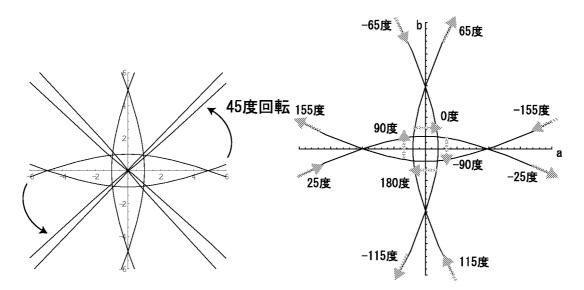


図 5.13: d波 vortex 周りの LDOS パターンの回転。遠方まで伸びる隆起線によって十字型パターンが 45 度回転する。

図 5.14: d 波 vortex 周りの LDOS の発散パターンと準粒子の運動。矢印はその線上における p_f の向きを表す。node 方向から準粒子が vortex から飛び出している。

の適用が不適当であると論じた[27, 28, 29]。

さて本論分の s 波の議論で見たように、等方的な LDOS パターンにとって重要なのは、quasiparticle path 上において LDOS が発散する点の $x(\theta)$ である。一方、量子化条件によって量子性が回復されるのは y 方向であり、x 方向は準古典理論の枠組内で既に量子力学的に取り扱っている事は前に述べた通りである。従って、上述のような LDOS パターンの違いは量子化条件によってなんら改善されるものではなく、準古典理論そのものの適用が不適切なのだと考えられる。このような事情により、一般の d 波の高温超伝導体に対して、LDOS パターンが図 5.10 のような 4 回回転対称性 C_4 の異方性を示すかどうかは明らかではない。

5.3.3 NbSe₂ の場合

NbSe₂ は異方的な s 波 pairing を持つと考えられており、その pair-potential は次の様に書かれる:

$$\Delta(\theta, x, y) = |\Delta(r)|e^{i\theta_r} \left(1 + c_A \cos 6\theta\right) \tag{5.39}$$

すなわち

$$f(\theta) = 1 + c_A \cos 6\theta \tag{5.40}$$

である。現実の値としては

$$c_A \sim \frac{1}{3} \tag{5.41}$$

第5章 結果と議論 63

と考えられている[8,9]。この時、

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \end{pmatrix} = \frac{\epsilon'}{(1 + c_A \cos 6\theta)^2} \begin{pmatrix} -\frac{12c_A \cos \theta \sin 6\theta}{1 + c_A \cos 6\theta} - \sin \theta \\ -\frac{12c_A \sin \theta \sin 6\theta}{1 + c_A \cos 6\theta} + \cos \theta \end{pmatrix}$$
(5.42)

がLDOS の発散する点を与える(図5.15)。

これは Hayashi らの図形を再現している (図 5.18)。また、図 5.16 は実際に図 5.18 が quantum path の包絡線であることを示している。

回転現象

pair-potential に node が存在せず遠方まで伸びる隆起線が表れないために、本論 文の結果は Hayashi らの結果(図 1.11)に見られる LDOS パターンの 30° 回転を はっきりとは示さない。ただし、図 5.15 においても LDOS パターンの細い" 突起 " が 1 2 本見える。 d 波の場合からも分るように、 $NbSe_2$ における LDOS パターンの回転現象の本質は低エネルギー領域におけるこの 12 本の細い LDOS パターンの " 突起 "にある。 d 波と同様、ある有限の領域のみに着目するなら、高エネルギー領域において見えなかったこの突起は低エネルギー領域において現れる。これが $NbSe_2$ における LDOS パターンの回転現象の説明である17。

エネルギー準位

また、図 5.19 は図 5.15 に運動量 p_F の方向 θ を書き加えたものである。BSW の量子化条件により、この quasiparticle trajectory を量子化することによって量子論的なエネルギー準位を求めると

$$\oint \frac{d\theta}{2\pi} \, \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{3}\cos 6\theta\right)^2} = \frac{27}{16\sqrt{2}}$$
(5.43)

より

$$\epsilon = -\frac{8\sqrt{2}\pi}{27} \frac{\Delta_{\infty}^2}{E_F} \left(m + \frac{1}{2} \right) \sim 0.838\epsilon_s \tag{5.44}$$

となる。ここで ϵ_s は等方的 s 波の場合のエネルギー準位である。

5.4 3次元への拡張

これまでの議論では2次元的な系、すなわち Fermi 面がc軸に対して不変な場合を考えた。次にこの制約を取り除く。Fermi 面のc軸に対する依存性が、vortex core 近傍のLDOS にどのような効果を及ぼすかを調べるのが目的である。

 $^{^{17}\}mathrm{d}$ 波の回転現象に対して、 node の存在しない $\mathrm{NbSe_2}$ といった系での回転現象を"弱い回転現象 "と呼ぶことにする。

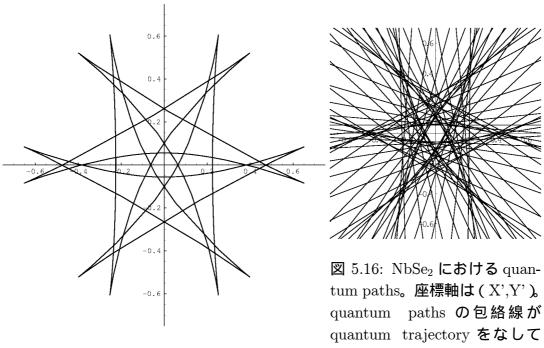


図 5.15: NbSe₂ の vortex 周りの LDOS $\nu(\mathsf{r},\epsilon'=\mathsf{N}$ る。ただし $\epsilon'=0.1$ 。0.1) の発散点の集合。座標軸は (X',Y')。

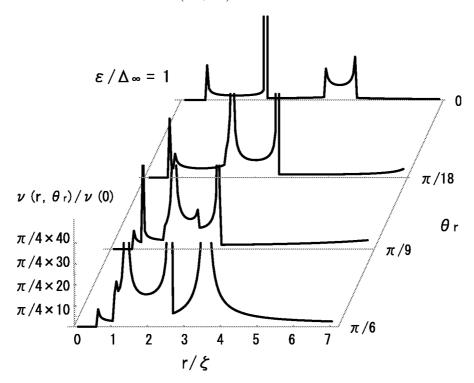
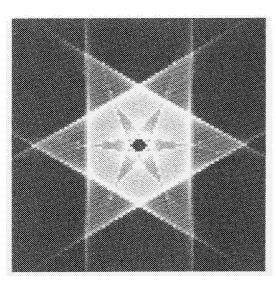


図 5.17: NbSe $_2$ における vortex 周りの LDOS $\nu(r,\theta_r,\epsilon'=0.1)$ 。 実際には発散する点においても、プロット点の数の制約のために有限な値を持つカスプのように見えることに注意。



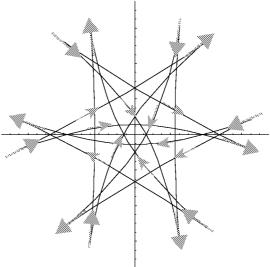


図 5.18: NbSe₂ における vortex 周りの $ext{LDOS}\,
u(\mathsf{r},\epsilon'\,=\,0.5)\,$ の発散点。([8] よ 1))

図 5.19: NbSe₂ における vortex 周りの LDOS の発散パターンと準粒子の運動。 矢印はその線上における pf の向きを表

今、空間座標の記号を次のように定義する。

$$r = X \hat{\mathbf{a}} + Y \hat{\mathbf{b}} + Z \hat{\mathbf{c}}
= x \hat{\mathbf{v}} + y \hat{\mathbf{u}} + z \hat{\mathbf{v}} \times \hat{\mathbf{u}}$$
(5.45)

$$\hat{\mathbf{V}} \equiv \sin \chi \left(\cos \theta \, \hat{\mathbf{a}} + \sin \theta \, \hat{\mathbf{b}} \right) + \cos \chi \, \hat{\mathbf{c}} \tag{5.46}$$

$$\hat{\mathbf{u}} \equiv -\sin\theta \,\hat{\mathbf{a}} + \cos\theta \,\hat{\mathbf{b}} \tag{5.47}$$

$$\hat{\mathbf{v}} \times \hat{\mathbf{u}} = -\cos\chi \left(\cos\theta \,\hat{\mathbf{a}} + \sin\theta \,\hat{\mathbf{b}}\right) + \sin\chi \,\hat{\mathbf{c}} \tag{5.48}$$

これらより

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta \sin\chi & -\sin\theta & -\cos\theta \cos\chi \\ \sin\theta \sin\chi & \cos\theta & -\sin\theta \cos\chi \\ \cos\chi & 0 & \sin\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$
(5.49)
$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta \sin\chi & \sin\theta \sin\chi & \cos\chi \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ -\cos\theta \cos\chi & -\sin\theta \cos\chi & \sin\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}$$
(5.50)

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta \sin\chi & \sin\theta \sin\chi & \cos\chi \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ -\cos\theta \cos\chi & -\sin\theta \cos\chi & \sin\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}$$
(5.50)

となる。

Kramer-Pesch 近似における 0 次項は次元によらない。 1 次に関しては z に関す る項を y 同様に取り入れるのみである。前に示したように、この線形項の効果は pair-potential からのみ生じる。 3 次元の場合、

$$\delta\theta/\delta y = 1/(x\sin\chi) \tag{5.51}$$

$$\delta \chi / \delta y = 0 \tag{5.52}$$

$$\delta\theta/\delta z = 0 \tag{5.53}$$

$$\delta \chi / \delta z = -1/x \tag{5.54}$$

より

$$\Delta(\theta, x, y, z) = \Delta(\theta, x) + \frac{\partial \Delta(\theta, x)}{\partial y} \cdot y + \frac{\partial \Delta(\theta, x)}{\partial z} \cdot z$$

$$\sim \Delta(\theta, x) + i \frac{y}{x \sin \chi} \Delta(\theta, x)$$
(5.55)

となる。この事から Green 関数がただちに求まる:

$$g_3(\theta, \chi, x, y, z; i\omega_n) = -\frac{v_F e^{-2\zeta(\theta)u(\theta, x)}}{2C\left\{\omega_n + iE(\theta, \chi, y, z)\right\}}$$
(5.56)

ただし C 及び $\zeta(\theta)$ の定義は 2 次元の場合と等しく、唯一定義が異なるのは

$$E(\theta, \chi, y, z) \equiv \frac{y}{C \sin \chi} \int_{0}^{\infty} dx' \frac{\zeta(\theta) \Delta(\theta, x')}{x'} e^{-2\zeta(\theta)u(\theta, x')}$$

$$\sim \frac{y}{\xi_0 \sin \chi} \Delta_{\infty} f^2(\theta)$$

$$= E_{2D}(\theta, y) / \sin \chi$$
(5.57)

である。以上より、(3次元的に)等方的な Fermi 面を仮定した時の vortex core 近傍の LDOS は

$$\nu(\mathsf{r},\epsilon) = -\langle \nu(\hat{\mathsf{p}}) \operatorname{Re} \left\{ g^{R}(\hat{\mathsf{p}},\mathsf{r};\epsilon) \right\} \rangle_{\mathsf{p}}$$

$$= -\nu(0) \int \frac{d\Omega_{\mathsf{p}}}{4\pi} \operatorname{Re} g^{R}(\theta,\chi,x,y,z;\epsilon)$$

$$= \frac{\nu(0)v_{F}}{8\xi_{0}} \int_{0}^{\pi} d\chi \sin \chi \int_{0}^{2\pi} d\theta \, \delta \left(\epsilon - E(\theta,\chi,y,z)\right)$$

$$= \frac{\nu(0)v_{F}}{8\xi_{0}} \int_{0}^{\pi} d\chi \sin \chi \int_{0}^{2\pi} d\theta \, \sum_{i} \frac{\delta \left(\theta - \theta_{i}(\chi)\right)}{\left|\frac{\partial h(\theta_{i},\chi)}{\partial \theta}\right|}$$

$$= \frac{\nu(0)v_{F}}{8\xi_{0}} \sum_{i} \int_{0}^{\pi} d\chi \sin \chi \left|\frac{\partial h(\theta_{i},\chi)}{\partial \theta}\right|^{-1} \tag{5.58}$$

となる。

さて、運動量空間において c 軸に垂直な平面を一つ考える。準古典理論の枠組みの中では $|\mathbf{p}|=\mathrm{const.}$ であるから、これは χ を固定することに対応する (図 5.20)。この平面内においては LDOS の発散する点の集合は

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \end{pmatrix} = \frac{\epsilon' \sin \chi}{f^2(\theta)} \begin{pmatrix} 2\frac{\dot{f}(\theta)}{f(\theta)} \cos \theta - \sin \theta \\ 2\frac{\dot{f}(\theta)}{f(\theta)} \sin \theta + \cos \theta \end{pmatrix}$$
 (5.59)

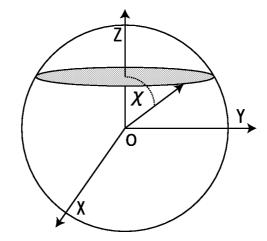


図 5.20: 3次元運動量空間中の c 軸に垂直な平面。図の球殻は $|\mathbf{p}| = \mathrm{const.} = p_F$ を表している。この平面を定める事は角度 χ を固定する事に対応している。

で与えられる。上の 3 次元の LDOS 発散パターンの表式は、 c 軸に垂直な平面上での LDOS (を $\sin \chi$ 倍に縮小したもの)を $\frac{\sin^2 \chi}{2}$ という重みで足し合わせたものに他ならない。2 次元の場合において LDOS パターンはエネルギー ϵ に比例して拡大・縮小をする事を見た。この事から 3 次元の LDOS は、異なるエネルギー ϵ を持つ 2 次元の場合の LDOS の重み付き"足し合わせ"であるという事も出来る:

$$\nu_{3D}(\mathsf{r},\epsilon) = \int_0^\pi d\chi \, \frac{\sin^2 \chi}{2} \cdot \nu_{2D}(\mathsf{r},\epsilon_\chi = \epsilon \, \sin \chi) \tag{5.60}$$

エネルギー準位

ここで、3 次元の場合の Bohr-Sommerfeld-Wilson の量子化条件を考える。今、 角運動量は

$$L = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

$$= (x \hat{\mathbf{v}} + y \hat{\mathbf{u}} + z \hat{\mathbf{v}} \times \hat{\mathbf{u}}) \times (p_F \hat{\mathbf{v}})$$

$$= p_F(z \hat{\mathbf{u}} - y \hat{\mathbf{v}} \times \hat{\mathbf{u}})$$

$$= p_F \left\{ (y \cos \chi \cos \theta - z \sin \theta) \hat{\mathbf{a}} + (y \cos \chi \sin \theta + z \cos \theta) \hat{\mathbf{b}} - y \sin \chi \hat{\mathbf{c}} \right\}$$
(5.61)

と表されるから

$$J_{\theta} = \oint d\theta L_{\theta}$$
$$= -\int_{0}^{2\pi} d\theta \, p_{F} y \, \sin \chi$$

$$= -\xi_0 p_F E' \sin^2 \chi \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{f^2(\theta)}$$

$$= 2\pi \hbar \left(m + \frac{1}{2} \right) , \quad m \in \mathbb{Z}$$

$$(5.62)$$

より

$$E(\chi) = -\frac{\pi}{2\langle f^{-2}(\theta)\rangle_{\theta} \sin^2 \chi} \frac{\Delta_{\infty}^2}{E_F} \left(m + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\sin^2 \chi} E_{2D}$$
 (5.63)

となる 18 。ただし E_{2D} は 2 次元におけるエネルギー準位である。従って $\chi=\pi/2$ において準位間隔は 2 次元の場合と一致して最も小さくなり、それからずれるに従って準位間隔は増大し、 $\chi\sim0,\pi$ では発散する。すなわち 3 次元の場合における Vortex Bound State は、このような様々な準位間隔を持つスペクトルを足し合わせた結果として、連続的となっている。束縛条件が存在しないために古典論的である 2 軸の存在がこの連続性の起因である。

以下の各小節において具体的に3次元の場合の各対称性における Vortex Bound State を議論する。

5.4.1 s 波の場合

2次元の時同様、s波すなわち

$$f(\theta) = 1 \tag{5.64}$$

の場合には LDOS $\nu(\mathbf{r}, \epsilon)$ の表式が解析的に求まる。今、

$$X = r \cos \theta_{\Gamma} \tag{5.65}$$

$$Y = r \sin \theta_{\Gamma} \tag{5.66}$$

とおくとLDOSの表式は

$$\nu'(\mathbf{r}, \epsilon) = \frac{\pi}{8} \int_0^{\pi} d\chi \sin^2 \chi \frac{1}{|X' \cos \theta(\chi) + Y' \sin \theta(\chi)|}$$

$$= \frac{\pi}{8r'} \int_0^{\pi} d\chi \frac{\sin^2 \chi}{\sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon'}{r'}\right)^2 \sin^2 \chi}}$$

$$= \frac{\pi}{8r'} \int_0^1 dt \frac{t}{\sqrt{t}\sqrt{1 - t}} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon'}{r'}\right)^2 t}}$$

$$= \frac{\pi^2}{16r'} \operatorname{Re} F(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}; 2; \left(\frac{\epsilon'}{r'}\right)^2)$$
(5.67)

 $^{^{18}\}langle\cdots\rangle_{\theta}\equiv\int_{0}^{2\pi}\frac{d\theta}{2\pi}\cdots$

第5章 結果と議論 69

となる。従って

$$r' = \epsilon' \tag{5.68}$$

という半径を持つ円周上で状態密度が発散する(図5.21)。

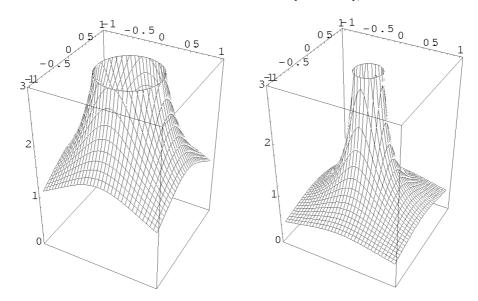


図 5.21: 2次元(左)と3次元(右)におけるs波 vortex 周りの LDOS。座標軸は $(X',Y',\nu'(r',\epsilon'=0.1))$ 。一見すると2次元の方が発散が強いように見えるが、これは係数の差によるものである。それぞれ $1/\sqrt{1-(\frac{\epsilon'}{r'})^2}$ 、 $-\ln\left\{(\frac{\epsilon'}{r'})^2-1\right\}$ で発散する。

また、発散点付近 $r' \sim \epsilon'$ において

$$\nu'(\mathbf{r},\epsilon) = \frac{\pi}{8r'} \int_{0}^{\pi} d\chi \left\{ \frac{\sin^{2}\chi}{\sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon'}{r'}\right)^{2} \sin^{2}\chi}} - \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon'}{r'}\right)^{2} \left(1 - \frac{(\chi - \frac{\pi}{2})^{2}}{2}\right)}} \right\}$$

$$+ \frac{\pi}{8r'} \int_{0}^{\pi} d\chi \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon'}{r'}\right)^{2} \left(1 - \frac{(\chi - \frac{\pi}{2})^{2}}{2}\right)}}$$

$$\sim \frac{\pi}{8r'} \int_{0}^{\pi} d\chi \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon'}{r'}\right)^{2} \left(1 - \frac{(\chi - \frac{\pi}{2})^{2}}{2}\right)}}$$

$$= \frac{\pi}{8r'} \frac{\sqrt{2}r'}{\epsilon'} \ln \frac{\pi + \sqrt{(-8 + \pi^{2}) + 8\left(\frac{r'}{\epsilon}\right)^{2}}}{-\pi + \sqrt{(-8 + \pi^{2}) + 8\left(\frac{r'}{\epsilon'}\right)^{2}}}$$

$$\sim \frac{\pi}{4\sqrt{2}\epsilon'} \ln \frac{2}{-1 + \sqrt{1 + \frac{8}{\pi^{2}}\left(\left(\frac{r'}{\epsilon'}\right)^{2} - 1\right)}}$$

$$\sim \frac{\pi}{4\sqrt{2}\epsilon'} \ln \frac{\pi^{2}}{2\left(\left(\frac{r'}{\epsilon'}\right)^{2} - 1\right)}$$
(5.69)

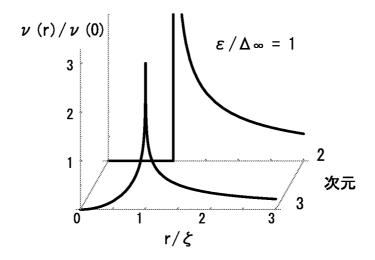


図 5.22: 2 次元(奥)と3 次元(手前)におけるs 波 vortex 周りの LDOS $\nu'(r)$ の動径 r 依存性。図 5.21 の断面図になっている。

より、log 発散していることがわかる(図5.21、図5.22)。

 BSW の量子化条件により、 χ 平面 19 におけるエネルギー準位は以下の様になる:

$$\epsilon(\chi) = -\frac{\pi}{2\sin^2\chi} \frac{\Delta_{\infty}^2}{E_F} \left(m + \frac{1}{2} \right) \quad , \quad m \in \mathsf{Z}$$
 (5.70)

5.4.2 d波の場合

ある χ の値に対する LDOS の発散点は

$$\begin{pmatrix} X'(\chi) \\ Y'(\chi) \end{pmatrix} = \frac{\epsilon' \sin \chi}{\cos^2 2\theta} \begin{pmatrix} -4\cos\theta \tan 2\theta - \sin\theta \\ -4\sin\theta \tan 2\theta + \cos\theta \end{pmatrix}$$
 (5.71)

で与えられる。

d 波の場合において特徴的なことは、その遠方まで伸びる 8 本の LDOS 隆起線が足し合わせられることの効果である(図 5.23)。その結果として LDOS パターンは 2 次元の場合と比較して"円く"なる。すなわち、2 次元における LDOS パターンの回転現象が、3 次元においては異方性を"丸める"という役割を担っているのである。

¹⁹運動量空間における $\chi={
m const.}$ という平面を以後このように呼ぶ事にする (5.20)。

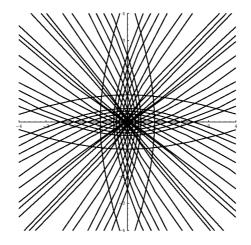


図 5.23: 3次元の場合における d 波 vortex 周りの LDOS の発散パターンの模式図。 座標軸は空間座標を表す。ただし、連続的に χ を足し合わせると空間全体が埋まる為、離散的な χ の発散パターンのみを足し合わせている。遠方まで伸びる隆起線のために、足し合わせの結果として異方性が弱まる。

5.4.3 NbSe₂的対称性(異方的s波)の場合

ある χ の値に対する LDOS の発散点は

$$\begin{pmatrix} X'(\chi) \\ Y'(\chi) \end{pmatrix} = \frac{\epsilon' \sin \chi}{(1 + c_A \cos 6\theta)^2} \begin{pmatrix} -\frac{12c_A \cos \theta \sin 6\theta}{1 + c_A \cos 6\theta} - \sin \theta \\ -\frac{12c_A \sin \theta \sin 6\theta}{1 + c_A \cos 6\theta} + \cos \theta \end{pmatrix}$$
(5.72)

と書ける。 $NbSe_2$ 的対称性(異方的 s 波)の場合の LDOS パターンは、2 次元においては d 波と同様な回転現象を示すが、3 次元に拡張した場合の効果は d 波の場合とは異なる。 $NbSe_2$ 対称性の pair-potential は node を持たず、従って遠方まで伸びる隆起線が存在しない事はこれまで繰り返して述べてきた事である。このために 3 次元の場合における LDOS パターンは、その"弱い回転現象" 20 は消失するものの、pair-potential の持つ 6 回回転対称 C_6 の異方性を保つ(図 5.24)。

 χ 平面におけるエネルギー準位は、再び BSW の量子化条件より

$$\epsilon(\chi) = -\frac{8\sqrt{2}\pi}{27\,\sin^2\chi} \frac{\Delta_\infty^2}{E_F} \left(m + \frac{1}{2} \right) \quad , \quad m \in \mathsf{Z} \tag{5.73}$$

となる。

 $^{^{20}}$ pair-potential の node に起因する隆起線によって引き起こされる回転現象ではないという意味において。(2次元の場合の議論を参照。)

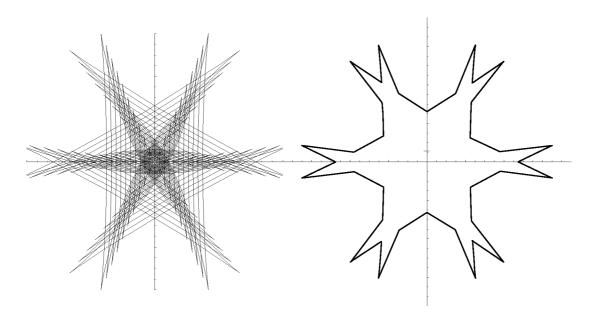


図 5.24: NbSe₂ の pair-potential 対称性と 3 次元的等方 Fermi 面を持つ場合の vortex 周りの LDOS 発散パターンの模式図。座標軸は空間座標を表す。左図は、2 次元 における LDOS パターンを足し合わせる事によって 3 次元の場合を構成したもの。技術的な理由により、離散的な χ の発散パターンのみを足し合わせている。右図 は左図の輪郭を示したもの。

第6章 まとめ

本研究は、pair-potentialの異方性がVortex 束縛状態に及ぼす効果について理論的に研究したものである。特に、Vortex 束縛状態がどのように物理的に理解できるかを明らかにする事を目標として行われた。

具体的には、まず Riccati Formalism の準古典理論に Kramer-Pesch 近似を導入し、その理論を Vortex 束縛状態に適用した。この手法によって、まず quasiparticle trajectory が quasiparticle path の包絡線である事を明らかにした。すなわち、Vortex 束縛状態が、1 次元の S-N-S 接合¹における Andreev 束縛状態の包絡線として理解できることを示した。これが本研究の最大の成果である。

次に、LDOS が発散する点が描く軌跡 (quasiparticle trajectory) を記述する一般的²な表式を導出し、実際に s 波、d 波、NbSe₂ の場合の LDOS パターンを再現した。

この一般表式の導出過程で、quasiparticle trajectory が古典的な軌道である事を示した。その古典的軌道に Bohr-Sommerfeld-Wilson の量子化条件を適用する事によって、LDOS パターン、角運動量、エネルギー準位の離散化に関する準古典近似を超えた議論も行った。この量子化は上記諸量の量子性を回復するが、準古典理論そのものの適用範囲を広げるものではない。特に高温超伝導体の d 波の場合に、どこまで準古典理論の議論が有効であるのかを明らかにする事は、今後の理論・実験双方の進展に期待するところである。

また、それまでの 2 次元の Fermi 面を前提とした議論を 3 次元 Fermi 球の場合にも拡張し、その違いを議論した。3 次元における LDOS は、異なるエネルギーを持つ 2 次元の LDOS を重み付きで足し合わせたものになっている事を示した。この特徴により、一般表式が求まっている 2 次元での LDOS パターンと合わせて、任意の系に対する 3 次元の場合の LDOS パターンも容易に求められる方法論を確立した。本研究において明らかになった、3 次元的な場合の vortex 周りの LDOS パターンに関する以下の 2 つの疑問:

- 1. pair-potential の異方性は残るか。
- 2. 回転現象は現れるか。

と pair-potential の node の存在との密接な関係は特に興味深い。今後、様々な種

¹S:超伝導体、N:常伝導体

²準古典理論の適用可能範囲内において一般的である。

第6章 **まとめ** 74

類の node を持つ 3 次元的な系が発見され、その vortex 周りの LDOS が観測される事を期待する。

謝辞

本研究を行うにあたり、終始ご指導を頂きました加藤雄介助教授に深く感謝致します。基礎物理や物性物理、科学史を中心とした多くの興味深いお話は胸躍るものでした。

東京大学基礎科学科の野村健太郎博士、濱田晃一氏、岩浪大祐氏、鈴木正博士、田村弘徳氏、鈴木良宏氏、相坂有理氏、大屋健二郎氏には物理、計算機から日常の事まで様々な形でお世話になり、感謝せずにはいられません。

また、駒場において優れた講演や講義をして頂けた多くの方々に感謝します。今後も多くの優れたお話がより大勢の方々に届けられる事を願ってやみません。

参考文献

- [1] P. G. de Gennes, Superconductivity of Metals and Alloys (Perseus Books, 1999)
- [2] H. F. Hess, et al., Phys. Rev. Lett. 62, 214(1989)
- [3] H. F. Hess, et al., Phys. Rev. Lett. 64, 2711(1990)
- [4] H. F. Hess, Physica C 185-189, 259(1991)
- [5] H.F.Hess, Jpn. J. Appl. Phys. Ser. 9, 270(1993)
- [6] H. F. Hess, et al., Physica B 169, 422(1991)
- [7] H. F. Hess, in Scanning Tunneling Microscopy, edited by J. A. Stroscio, et al., (Academic Press, San Diego, 1993)
- [8] N. Hayashi, et al., Phys. Rev. B 56, 9052(1997)
- [9] N. Hayashi, Ph. D. Thesis, Okayama University (1999)
- [10] N. Kopnin, Theory of Nonequilibrium Superconductivity (Oxford University Press, 2001)
- [11] N. Schopohl, et al., Phys. Rev. B 52, 490(1995)
- [12] M. Ichioka, et al., Phys. Rev. B 53, 15316(1996)
- [13] N. Schopohl, lecture note (unpubished)
- [14] N. Schopohl, cond-mat/9804064
- [15] W. Pesch, et al., J. Low Temp. Phys. 15, 367(1974)
- [16] L. Kramer, et al., Z. Phys. 269, 59(1974)
- [17] E. V. Thuneberg, et al., Phys. Rev. B 29, 3913(1984)
- [18] M. Eschrig, Ph. D. Thesis, University of Bayreuth (1997)

第6章 まとめ 77

- [19] Y. Kato, J. Phys. Soc. Jpn. 70, 3368(2001)
- [20] Y. Kato, private communication
- [21] A. F. Andreev, Sov. Phys. JETP 19, 1228(1964)
- [22] U. Klein, Phys. Rev. B 40, 6601(1989)
- [23] S. Ullah, et al., Phys. Rev. B 2, 9950(1990)
- [24] G. Eilenberger, Z. Phys. 241, 195(1968)
- [25] N. B. Kopnin et al., JETP Lett. 64, 690(1996)
- [26] I. Maggio-Aprile, et al., Phys. Rev. Lett. 75, 2754(1995)
- [27] Y. Morita, et al., Phys. Rev. Lett. 78, 4841(1997)
- [28] Y. Morita, et al., Phys. Rev. Lett. 79, 4514(1997)
- [29] M. Franz, et al., Phys. Rev. Lett. 79, 4513(1997)
- [30] 朝永 振一郎、量子力学 (みすず書房, 1997)