

目次

第1章 序論	3
1.1 背景	3
1.2 先行研究:第一原理計算によるモデル提案	7
1.2.1 ドーピング比 δ とフェルミ面構造の変化	9
第2章 理論と計算手法	12
2.1 理論模型:多軌道ハバードモデル	12
2.2 乱雑位相近似によるスピン感受率・軌道感受率	16
2.2.1 温度グリーン関数	16
2.2.2 スピン感受率・軌道感受率	17
2.3 乱雑位相近似による線形化エリアシュベルグ方程式	21
2.3.1 ダイソン・ゴルコフ方程式	22
2.3.2 線形化エリアシュベルグ方程式	23
2.3.3 BCS ギャップ方程式 (弱結合近似)	30
2.4 数値計算について	31
第3章 計算結果	33
3.1 感受率の計算による結果	33
3.2 2軌道ギャップ方程式による結果	37
3.2.1 ギャップ対称性	37
3.2.2 相図 $T/W - \delta$	41
3.2.3 相図 $T/W - U/W$	42
3.2.4 圧力と T_c の関係	43

第4章	まとめと考察	45
4.1	まとめ	45
4.2	今後の課題	46

第1章 序論

1.1 背景

1911年、カマリンオネスによって、水銀が4.2K以下で電気抵抗がゼロとなることが発見された [1]。これはのちに超伝導と呼ばれる状態のもつ性質の一つである完全導電性の発見であった。更に、1933年にマイスナーらにより、超伝導体のマイスナー効果、すなわち完全反磁性が発見された [2]。これにより、超伝導体は単なる完全導体ではないことがわかった。

理論研究としては、1935年にロンドン兄弟のロンドン方程式によってマイスナー効果が説明され [3]、1950年、ギンツブルグとランダウによる、秩序変数を巨視的な電子場とした相転移の理論によってロンドン方程式が説明された [4]。更に1957年、バーディーン、クーパー、シュリーファーによるミクロな理論 (BCS理論) [5] によって、超伝導発現が格子振動によるクーパー対の形成によるものであり、そのクーパー対の波動関数が巨視的な電子場であることが説明された。

その後の研究で、超伝導転移温度は30K程度が限界であると考えられていた。しかし1986年、ベドノルツとミュラーによって銅酸化物高温超伝導体が発見された [6]。この物質群の転移温度は液体窒素程度 (77K) を超えるものであった。更にこれらの構造は2次元超伝導層と絶縁体であるブロック層が積み重なったものであり、これらの超伝導発現、すなわちクーパー対の形成は格子振動によるものではなく、2次元 CuO_2 面内の電子のスピン揺らぎによるものであるとする見方が現在主流である。

更に2006年、細野らによって鉄系超伝導体が発見された [7]。これは上記の銅酸化物系と同様、超伝導層とブロック層からなっており、転移温度は銅酸化物系に次ぐものである。こちらの超伝導発現のメカニズムに

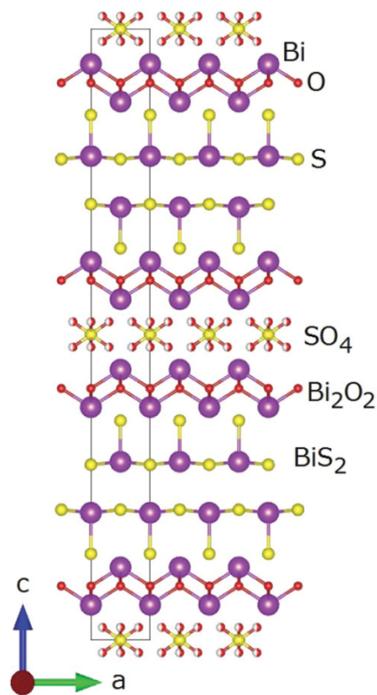


図 1.1: $\text{Bi}_4\text{O}_4\text{S}_3$ の構造 [8]

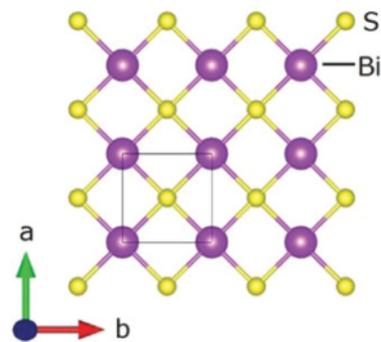


図 1.2: $\text{Bi}_4\text{O}_4\text{S}_3$ の BiS_2 面 [8]

関してはまだ結論が出ていないところである。

このように超伝導に関する研究は理論・実験ともに盛んに行われてきているが、高温、更には室温に至る超伝導発現のメカニズムに関してはまだ完全には解明されていない。

そして2012年、水口らの研究により、 BiS_2 系超伝導体が発見された[8]。この研究によると、この超伝導体の物質群はブロック層と BiS_2 層からなる層状超伝導体であり(図1.1、図1.2)、銅酸化物系高温超伝導体、鉄系超伝導体と同様の2次元構造をしていることがわかっており、この BiS_2 系超伝導体も高温超伝導となることが期待されるほか、クーパー対の形成に寄与しているものが一体何であるのか、どうすれば転移温度が上がるのかなどについて現在研究が進められている。

この新しい BiS_2 系超伝導体の一つに、 $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{BiS}_2$ というものがある[9]。この系の母物質は LaOBiS_2 であり、図1.3のような構造をしている。

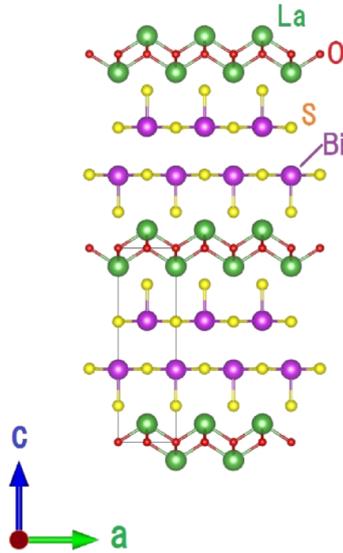


図 1.3: LaOBiS₂ の構造 [9]

この母物質は半導体として知られており [11]、O を F に置換することによって BiS₂ 層に電子ドーピングを行うと、超伝導物質になることが知られている。この系の超伝導転移温度 T_c は現在 BiS₂ 系超伝導体の中では最高であり、 T_c は 10.6K 程度である。また実験事実として、この系が完全導電性を示すこと (図 1.4) や、完全反磁性を示唆すること (図 1.6) などが知られている。図 1.4 中の赤線は母物質の電気抵抗率の温度依存性であり、このままでは完全導電性を示さない。しかし、電子ドーピングを行うことで、図中の青線のようにある温度で完全導電性を示すようになる。更に、圧力をかけると T_c^{onset} が 3K 程度から 10.6K 程度と大幅に上昇することが知られている (図 1.5)。図 1.5 中の青線は通常の合成、赤線は高圧アニール合成を行った場合の電気抵抗率の温度依存性である。これを見ると、高圧アニール合成された LaO_{0.5}F_{0.5}BiS₂ は T_c が大幅に上昇しており、この系では圧力の T_c に対する影響が大きいと考えられる。

また図 1.6a は磁化率の温度依存性を表しており、左に行くほど温度が低くなっている。図 1.6b は電気抵抗率の温度依存性を表している。FC は field cooling であり、磁場をかけた状態から低温にしている。ZFC は zero

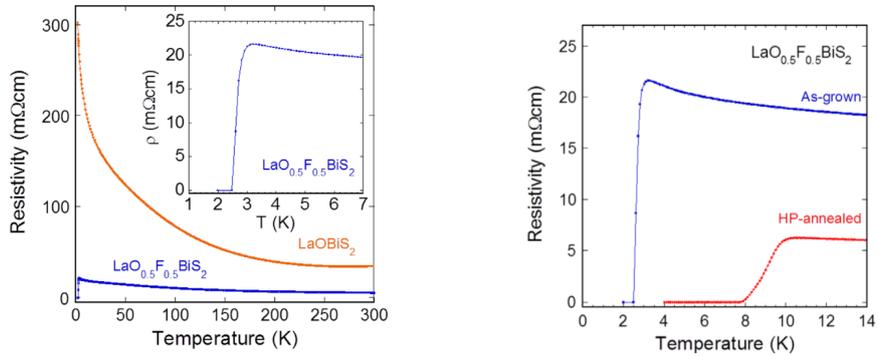


図 1.4: $\text{LaO}_{0.5}\text{F}_{0.5}\text{BiS}_2$ の電気抵抗率の温度依存性 [10] 図 1.5: $\text{LaO}_{0.5}\text{F}_{0.5}\text{BiS}_2$ の電気抵抗率の温度依存性 2[10]

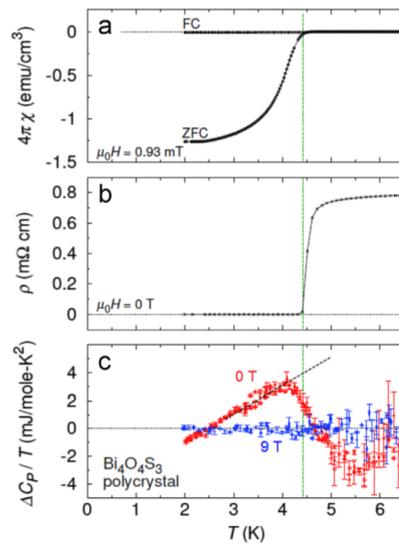


図 1.6: $\text{Bi}_4\text{O}_4\text{S}_3$ (多結晶) の磁化率、電気抵抗率、比熱の温度依存性 [10]

field cooling であり、低温にしてから磁場をかけている。ZFC のグラフは完全反磁性、すなわちマイスナー効果を示唆している。本来 FC は転移温度以下では負の値をもつはずであるが、これはこの実験が多結晶で行われたことから、磁場を完全には排除しきれていないと考えられる。また、図 1.6c は比熱の温度依存性であり、この比熱のとびは超伝導体であることを示唆している。

この系に関して、第一原理計算によって有効 2 軌道モデルが提案されている [12]。本研究ではこのモデルに電子間相互作用を取り入れた乱雑位相近似 (random phase approximation, RPA) によって電子のスピン揺らぎ、軌道揺らぎを考慮した線形化エリアシュベルグ方程式の計算を行い、超伝導相と磁気秩序相とフェルミ面の構造との関係、また超伝導状態におけるギャップ関数の対称性について議論する。

1.2 先行研究:第一原理計算によるモデル提案

第一原理計算によるこの系の母物質 LaOBiS_2 のバンド構造が図 1.7 である。ここには Bi の $6p_x, 6p_y, 6p_z$ が各 2 つ、S の $3p_x, 3p_y, 3p_z$ が各 4 つ、

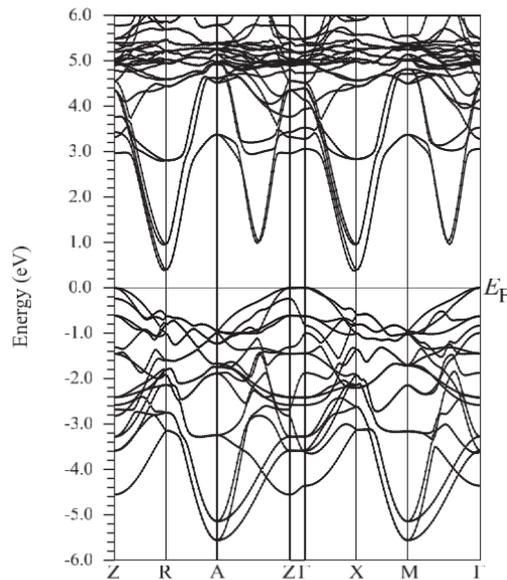


FIG. 2. The first-principles band structure is shown.

図 1.7: 第一原理計算による LaOBiS_2 のバンド構造 [12]

O の $2p_x, 2p_y, 2p_z$ が各 2 つ含まれている。この中から、まず BiS_2 層の中でも BiS_2 平面にある Bi の $6p_x, 6p_y$ 軌道と S の $3p_x, 3p_y$ 軌道を取り出すと、4 軌道モデルとなる (図 1.8)。図 1.8 中の 2 つの点線のうち、下側の点線

が $x = 0.25$ 、上側の点線が $x = 0.50$ のフェルミ準位を表す。これらのフェルミ準位を横切るようなバンドを取り出すと、 BiS_2 面の中でも Bi の $6p_x, 6p_y$ 軌道のみ考慮した 2 軌道モデルとなる (図 1.9)。

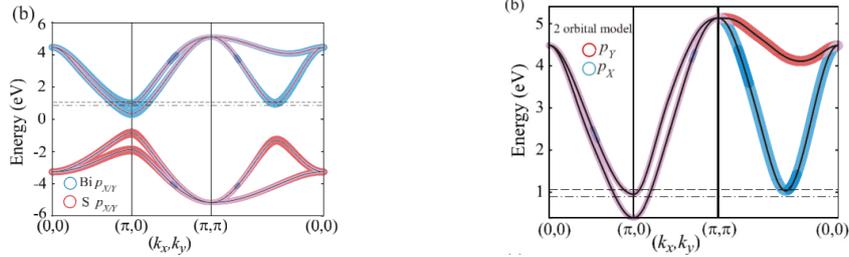


図 1.8: 4 軌道のみ考慮したバンド構造 [12] 図 1.9: 2 軌道のみ考慮したバンド構造 [12]

本論文では、この 2 軌道モデルを用いて、 $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{BiS}_2$ の超伝導について考察する。また、一貫して図 1.9 の上側のバンドを a バンド、下側のバンドを b バンドと呼ぶことにする。

2 軌道モデルのハミルトニアンは以下ようになる。

$$H_0 = \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\sigma} [t(x_i - x_j, y_i - y_j; \mu, \nu) c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{j\nu\sigma} + t(x_j - x_i, y_j - y_i; \nu, \mu) c_{j\nu\sigma}^\dagger c_{i\mu\sigma}] + \sum_{i,\mu,\sigma} \varepsilon_{\mu} n_{i\mu\sigma} \quad (1.1)$$

ここで、 $t(a, b; \mu, \nu)$ はホッピングパラメータ、 ε_{μ} はオンサイトエネルギーであり、その値は表 1.1 で与えられている。 $\mu, \nu = 1(p_y), 2(p_x)$ は軌道であり、 $\Delta x, \Delta y$ は格子点の間隔を表している。図 1.10 はここで用いるホッピングをどこまで取るかを示している。

更に、オンサイトエネルギーは表 1.1 における $[\Delta x, \Delta y] = [0, 0]$ のパラメータを用いる。

(μ, ν)	[$\Delta x, \Delta y$]						I	σ_d	
	[0,0]	[1,0]	[1,-1]	[1,1]	[2,0]	[2,1]			[2,-1]
(1,1)	2.811	-0.167	0.880	0.094		0.014	0.069	+	+
(1,2)		0.107			-0.028	0.020	0.020	+	-
(2,1)		0.107			-0.028	0.020	0.020	+	-
(2,2)	2.811	-0.167	0.094	0.880		0.069	0.014	+	+

表 1.1: 第一原理計算によるホッピングパラメータ [12]

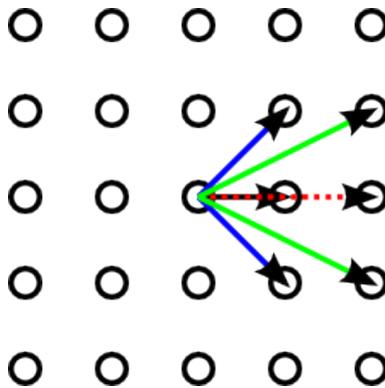


図 1.10: どのサイトまでホッピングを考えるかを示した概念図。第 4 次近接まで考慮している。

1.2.1 ドーピング比 δ とフェルミ面構造の変化

2 軌道モデルを用いた時のフェルミ面の構造は、 $\delta (= x)$ の値によって変わる。そして、フェルミ面の構造が大きく変わるような δ が存在する。この変化がギャップ関数の対称性に関わってくるので、本研究ではこのフェルミ面構造の違いは重要な違いとなる。

以下に代表的な 3 種類のフェルミ面構造を示す。 $\delta = 0.40$ では $(\pi, 0)$ の周囲にフェルミ面ができていますが、これは b バンドによるものである。 δ を小さくしていくと、このフェルミ面が小さくなるが、大きな構造の変化は見られない。 δ を大きくするとこのフェルミ面の先端が伸びていき、 $\delta = 0.50$ になると $\delta = 0.40$ の時のフェルミ面がつながる。2 本のフェルミ面が見えているが、これらは同一の b バンドによるものである。 $\delta = 0.60$

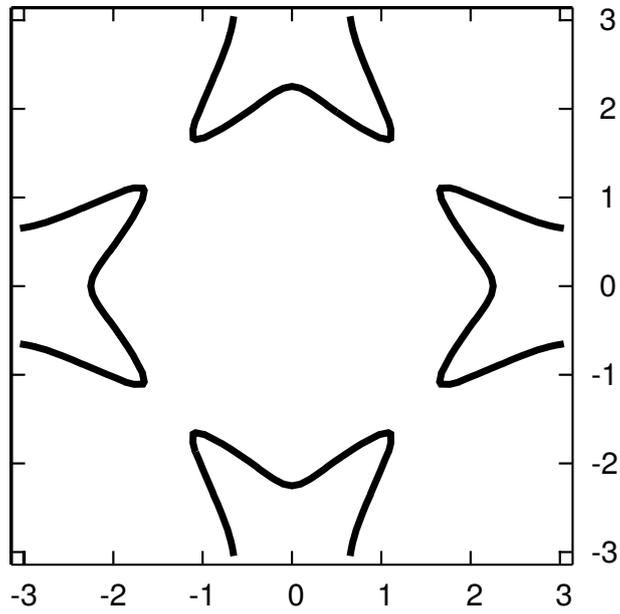


図 1.11: $\delta=0.40$ の時のフェルミ面

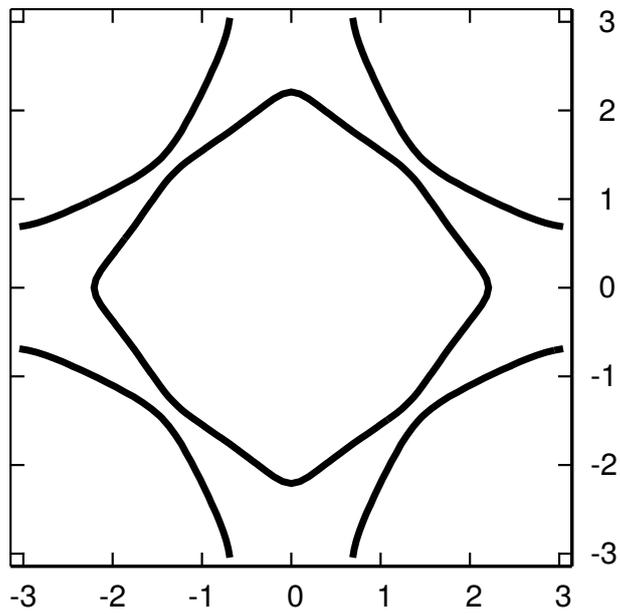


図 1.12: $\delta=0.50$ の時のフェルミ面

では $\delta = 0.50$ の時の b バンドのフェルミ面があり、更に $(\pi, 0)$ の周囲に a バンドによるフェルミ面のポケットができています。

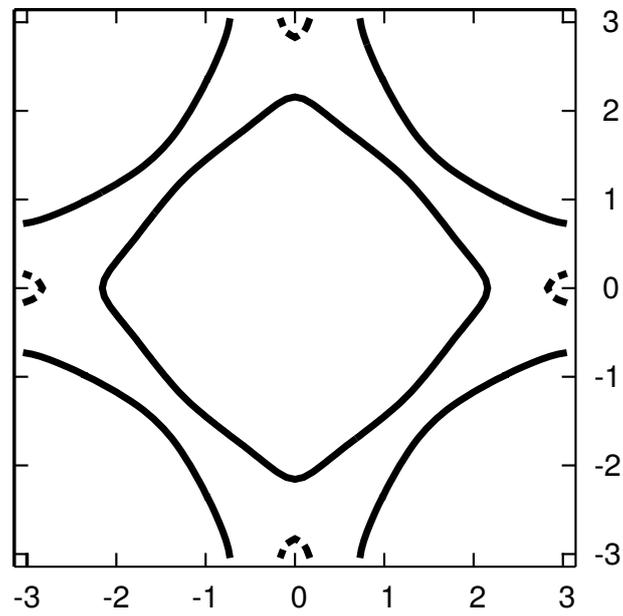


図 1.13: $\delta=0.60$ の時のフェルミ面

この系で特徴的なフェルミ面の構造は以上の3種類であり、他にフェルミ面構造が大きく変化することはないため、本論文ではこれら代表的な3種類のドーピング比 $\delta = 0.40, 0.50, 0.60$ について詳しく見ていくこととする。

第2章 理論と計算手法

2.1 理論模型:多軌道ハバードモデル

本論文では、以下のような多軌道ハバードモデルを考える。

$$H = H_0 + H_U + H_{U'} + H_J + H_{J'} \quad (2.1)$$

$$H_0 = \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\sigma} [t(x_i - x_j, y_i - y_j; \mu, \nu) c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{j\nu\sigma} + t(x_j - x_i, y_j - y_i; \nu, \mu) c_{j\nu\sigma}^\dagger c_{i\mu\sigma}] + \sum_{i,\mu,\sigma} \varepsilon_\mu n_{i\mu\sigma} \quad (2.2)$$

$$H_U = \frac{U}{2} \sum_i \sum_{\mu} \sum_{\sigma \neq \sigma'} c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\mu\sigma} c_{i\mu\sigma'}^\dagger c_{i\mu\sigma'} \quad (2.3)$$

$$H_{U'} = \frac{U'}{2} \sum_i \sum_{\mu \neq \nu} \sum_{\sigma \sigma'} c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\mu\sigma} c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\nu\sigma'} \quad (2.4)$$

$$H_J = \frac{J}{2} \sum_i \sum_{\mu \neq \nu} \sum_{\sigma, \sigma'} c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\nu\sigma} c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\mu\sigma'} \quad (2.5)$$

$$H_{J'} = \frac{J'}{2} \sum_i \sum_{\mu \neq \nu} \sum_{\sigma, \sigma'} c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\nu\sigma} c_{i\mu\sigma'}^\dagger c_{i\nu\sigma'} \quad (2.6)$$

ここで、 $c_{i\mu\sigma}^\dagger$ は i サイトの μ 軌道にスピン σ の電子を生成する演算子で、 $n_{i\mu\sigma} = c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\mu\sigma}$ 、 ε_μ はオンサイトのエネルギー、 $t(a, b; \mu, \nu)$ は (x, y) 座標がそれぞれ (a, b) だけ離れたサイトの (μ, ν) 軌道間の跳び移り積分であり、また U は軌道内クーロン相互作用、 U' は軌道間クーロン相互作用、 J は交換相互作用、 J' はペアホッピングである。軌道の添字は $\mu, \nu = 1$ or 2

である。更にフーリエ変換

$$c_{i\mu\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}\mu\sigma} \quad (2.7)$$

を用いて座標表示から波数表示へ移ると、

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\mu\nu\sigma} \varepsilon_{\mu\nu}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\mu\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\nu\sigma} \quad (2.8)$$

$$H_U = \frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\mu} \sum_{\sigma \neq \sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mu\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\mu\sigma} c_{\mathbf{k}'\mu\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\mu\sigma'} \quad (2.9)$$

$$H_{U'} = \frac{U'}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \sum_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mu\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\mu\sigma} c_{\mathbf{k}'\nu\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\nu\sigma'} \quad (2.10)$$

$$H_J = \frac{J}{2N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \sum_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mu\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\nu\sigma} c_{\mathbf{k}'\nu\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\mu\sigma'} \quad (2.11)$$

$$H_{J'} = \frac{J'}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\mu \neq \nu} \sum_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mu\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\nu\sigma} c_{\mathbf{k}'\mu\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\nu\sigma'} \quad (2.12)$$

と表せる。 $\varepsilon_{\mu\nu}(\mathbf{k})$ に関しては、具体的に以下のようにになっている。

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11}(\mathbf{k}) &= t_0 + 2t_1(\cos k_x + \cos k_y) + 2t_3 \cos(k_x + k_y) \\ &\quad + 2t_2 \cos(k_x - k_y) + 2t_6\{\cos(2k_x + k_y) + \cos(k_x + 2k_y)\} \\ &\quad + 2t_8\{\cos(2k_x - k_y) + \cos(k_x - 2k_y)\} \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{22}(\mathbf{k}) &= t_0 + 2t_1(\cos k_x + \cos k_y) + 2t_2 \cos(k_x + k_y) \\ &\quad + 2t_3 \cos(k_x - k_y) + 2t_8\{\cos(2k_x + k_y) + \cos(k_x + 2k_y)\} \\ &\quad + 2t_6\{\cos(2k_x - k_y) + \cos(k_x - 2k_y)\} \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{12}(\mathbf{k}) &= \varepsilon_{21}(\mathbf{k}) \\ &= 2t_4(\cos k_x - \cos k_y) + 2t_5(\cos(2k_x) - \cos(2k_y)) \\ &\quad + 2t_7\{\cos(2k_x + k_y) - \cos(k_x + 2k_y) + \cos(2k_x - k_y) - \cos(k_x - 2k_y)\} \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned}
t_0 &= t(0, 0; 1, 1) = t(0, 0; 2, 2) \\
t_1 &= t(1, 0; 1, 1) = t(1, 0; 2, 2) \\
t_2 &= t(1, 0; 1, 2) = t(1, 0; 2, 1) \\
t_3 &= t(1, 1; 1, 1) = t(1, -1; 1, 1) \\
t_4 &= t(1, 0; 1, 2) = t(1, 0; 2, 1) \\
t_5 &= t(2, 0; 1, 2) = t(2, 0; 2, 1) \\
t_6 &= t(2, 1; 1, 1) = t(2, -1; 2, 2) \\
t_7 &= t(2, 1; 1, 2) = t(2, 1; 2, 1) \\
t_8 &= t(2, -1; 1, 1) = t(2, 1; 2, 2)
\end{aligned}$$

また、相互作用部分は、 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ を軌道の添字として、以下のようにまとめることができる。

$$\begin{aligned}
H_{\text{int}} &= H_U + H'_U + H_J + H'_J \\
&= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{\sigma\sigma'} U_{\alpha\beta,\gamma\delta}^{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\alpha\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma} c_{\mathbf{k}'\delta\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\gamma\sigma'} \quad (2.16)
\end{aligned}$$

ここで、 $U_{\alpha\beta,\gamma\delta}^{\sigma\sigma'}$ の下付きの添え字について以下のような行列になっており、以後下付きの添字が4つある場合には、同様の行列になっている。

$$\begin{pmatrix}
1111 & 1122 & 1112 & 1121 \\
2211 & 2222 & 2212 & 2221 \\
1211 & 1222 & 1212 & 1221 \\
2111 & 2122 & 2112 & 2121
\end{pmatrix} \quad (2.17)$$

この形式を用いて、行列はそれぞれ以下ようになる。

$$U^{\uparrow\downarrow} = U^{\downarrow\uparrow} = \begin{pmatrix} U & U' & 0 & 0 \\ U' & U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J & J' \\ 0 & 0 & J' & J \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

$$U^{\uparrow\uparrow} = U^{\downarrow\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & U' - J & 0 & 0 \\ U' - J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J - U' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J - U' \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

また、相互作用をダイアグラムで表すと、図 2.1 のようになる。

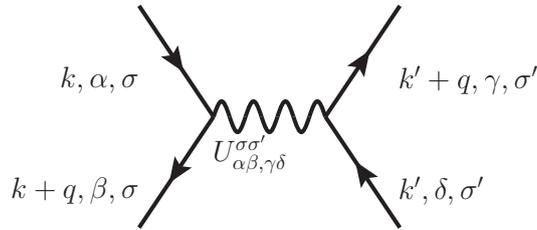


図 2.1: 相互作用のダイアグラム。\$(\mathbf{k}, i\omega_m) = k\$ と表している

更に、 H_0 を対角化すると、バンドの添字 $\xi = a$ or b として、以下のようになる。

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\xi\sigma} \varepsilon_\xi(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\xi\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\xi\sigma} \quad (2.20)$$

$$\varepsilon_a(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{22}(\mathbf{k}) + \sqrt{(\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{22}(\mathbf{k}))^2 + 4\varepsilon_{12}(\mathbf{k})^2}}{2} \quad (2.21)$$

$$\varepsilon_b(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{22}(\mathbf{k}) - \sqrt{(\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{22}(\mathbf{k}))^2 + 4\varepsilon_{12}(\mathbf{k})^2}}{2} \quad (2.22)$$

$$\begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}a\sigma} \\ c_{\mathbf{k}b\sigma} \end{pmatrix} = \hat{P} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}1\sigma} \\ c_{\mathbf{k}2\sigma} \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

ここで、 \hat{P} はハミルトニアン H_0 を対角化するようなユニタリ行列である。

2.2 乱雑位相近似によるスピン感受率・軌道感受率

多軌道系の乱雑位相近似に関する定式化は、[13]に従う。

2.2.1 温度グリーン関数

1 粒子温度グリーン関数は、以下のように定義される。

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \tau) = - \left\langle T_{\tau} \left[c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^{\dagger} \right] \right\rangle \quad (2.24)$$

τ : 虚時間

T_{τ} : 時間順序積

$\langle \dots \rangle$: 統計平均

更にフーリエ級数展開によって、このグリーン関数は

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \tau) = T \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (2.25)$$

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \tau) \quad (2.26)$$

($\omega_n = (2n + 1)\pi T$ はフェルミオンの松原振動数) と表せる。相互作用のない場合のグリーン関数を書き下すと、以下ようになる。

$$G_{11}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\varepsilon_a(\mathbf{k}) - \varepsilon_b(\mathbf{k})} \left(\frac{\varepsilon_{22}(\mathbf{k}) + \varepsilon_a(\mathbf{k})}{i\omega_n - \varepsilon_a(\mathbf{k})} - \frac{\varepsilon_{22}(\mathbf{k}) + \varepsilon_b(\mathbf{k})}{i\omega_n - \varepsilon_b(\mathbf{k})} \right) \quad (2.27)$$

$$G_{22}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\varepsilon_a(\mathbf{k}) - \varepsilon_b(\mathbf{k})} \left(\frac{\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) + \varepsilon_a(\mathbf{k})}{i\omega_n - \varepsilon_a(\mathbf{k})} - \frac{\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) + \varepsilon_b(\mathbf{k})}{i\omega_n - \varepsilon_b(\mathbf{k})} \right) \quad (2.28)$$

$$G_{12}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\varepsilon_{12}(\mathbf{k})}{\varepsilon_a(\mathbf{k}) - \varepsilon_b(\mathbf{k})} \left(\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_a(\mathbf{k})} - \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_b(\mathbf{k})} \right) \quad (2.29)$$

更に、以下のように $P(\mathbf{k}), Q(\mathbf{k}), R(\mathbf{k})$ を定義する。

$$P(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{22}(\mathbf{k})}{\sqrt{[\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{22}(\mathbf{k})]^2 + 4\varepsilon_{12}^2(\mathbf{k})}} \right) \quad (2.30)$$

$$Q(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{22}(\mathbf{k})}{\sqrt{[\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{22}(\mathbf{k})]^2 + 4\varepsilon_{12}^2(\mathbf{k})}} \right) \quad (2.31)$$

$$R(\mathbf{k}) \equiv \frac{\varepsilon_{12}(\mathbf{k})}{\sqrt{[\varepsilon_{11}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{22}(\mathbf{k})]^2 + 4\varepsilon_{12}^2(\mathbf{k})}} \quad (2.32)$$

これらを用いて、相互作用のないグリーン関数は以下のように書ける。

$$G_{11}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{P(\mathbf{k})}{i\omega_n - \varepsilon_a(\mathbf{k})} + \frac{Q(\mathbf{k})}{i\omega_n - \varepsilon_b(\mathbf{k})} \quad (2.33)$$

$$G_{22}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{Q(\mathbf{k})}{i\omega_n - \varepsilon_a(\mathbf{k})} + \frac{P(\mathbf{k})}{i\omega_n - \varepsilon_b(\mathbf{k})} \quad (2.34)$$

$$G_{12}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = R(\mathbf{k}) \left(\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_a(\mathbf{k})} - \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_b(\mathbf{k})} \right) \quad (2.35)$$

2.2.2 スピン感受率・軌道感受率

乱雑位相近似は、線形応答理論における近似手法の一つである。まず、線形応答理論により、スピン感受率・軌道感受率は以下のように定義される。

$$\chi_{\mu\nu, \alpha\beta}^S(\mathbf{q}, i\nu_m) \equiv \frac{1}{2} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\nu_m \tau} \langle S_{\mathbf{q}\mu\nu}^z(\tau) S_{-\mathbf{q}\beta\alpha}^z(0) \rangle \quad (2.36)$$

$$\chi_{\mu\nu, \alpha\beta}^O(\mathbf{q}, i\nu_m) \equiv \frac{1}{2} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\nu_m \tau} \langle O_{\mathbf{q}\mu\nu}(\tau) O_{-\mathbf{q}\beta\alpha}(0) \rangle \quad (2.37)$$

$$S_{\mathbf{q}\mu\nu}^z \equiv \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mu\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\nu\uparrow} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mu\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\nu\downarrow}) \quad (2.38)$$

$$O_{\mathbf{q}\mu\nu} \equiv \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mu\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\nu\uparrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mu\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\nu\downarrow}) \quad (2.39)$$

ここで、 $\nu_m = 2m\pi T$ はボソンの松原振動数である。

更に、相互作用のある場合の感受率を以下のように定義する。

$$\chi_{\alpha\beta,\gamma\delta}^{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, i\nu_m) \equiv \frac{1}{N} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\nu_m\tau} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left\langle T_\tau \left[c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\beta\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\delta\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\gamma\sigma'} \right] \right\rangle \quad (2.40)$$

これは、 $(\mathbf{k}, i\omega_n) = k$ 、 $(\mathbf{q}, i\nu_m) = q$ とすると、図 2.2 のようなダイアグラムで表せる。

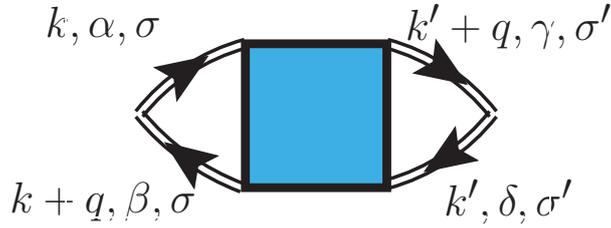


図 2.2: 感受率のダイアグラム

整理すると、

$$\chi^S = \chi^{\uparrow\uparrow} - \chi^{\uparrow\downarrow} \quad (2.41)$$

$$\chi^O = \chi^{\uparrow\uparrow} + \chi^{\uparrow\downarrow} \quad (2.42)$$

という関係が得られる。更に、自由電子の感受率 (既約感受率) を以下のように定義する。

$$\chi_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\mathbf{q}, i\nu_m) \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned} &\equiv \frac{1}{N} \int_0^{1/T} d\tau e^{i\nu_m\tau} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left\langle T_\tau \left[c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\beta}(\tau) c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\delta}^\dagger c_{\mathbf{k}'\gamma} \right] \right\rangle_0 \\ &= -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} G_{\gamma\alpha}^0(\mathbf{k}, i\omega_n) G_{\beta\delta}^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + i\nu_m) \end{aligned} \quad (2.44)$$

これは、ダイアグラムで図 2.3 のように表せる。これらを用いて、スピン感受率・軌道感受率を計算することができる。以下にそれを示す。乱雑位相近似においては、波数の異なる成分は無視するので、図 2.4 のようなバ

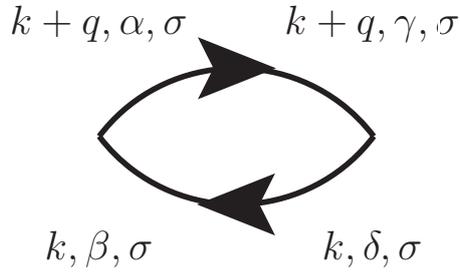


図 2.3: 既約感受率のダイアグラム

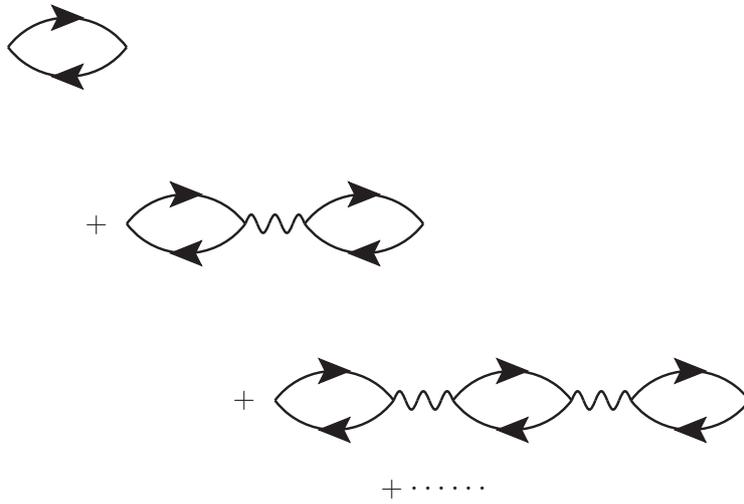


図 2.4: バブル型のダイアグラムの和

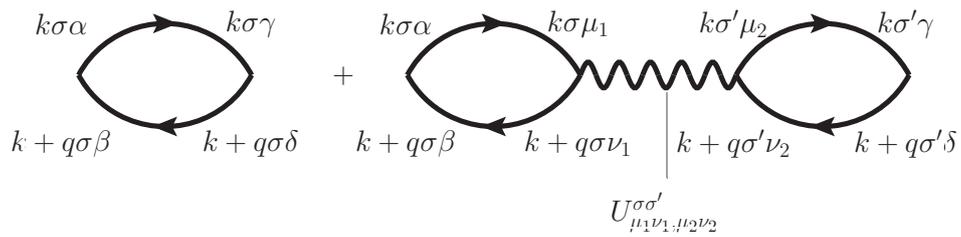


図 2.5: χ の和の U の 1 次までの和

ブル型のダイアグラムのみを足し合わせる。この和を考えるが、まず U の 1 次の項までを考える (図 2.5)。この和は以下のような式で表される。

$$\chi_{\alpha\beta,\gamma\delta}(q)\delta_{\sigma\sigma'} - \chi_{\alpha\beta,\mu_1\nu_1}U_{\mu_1\nu_1,\mu_2\nu_2}^{\sigma\sigma'}\chi_{\mu_2\nu_2,\gamma\delta}(q) \quad (2.45)$$

これは次のように行列で表せる。

$$\hat{\chi}(q)\delta_{\sigma\sigma'} - \hat{\chi}(q)\hat{U}^{\sigma\sigma'}\hat{\chi}(q) \quad (2.46)$$

更に、U の 2 次まで考える (図 2.6)。これは次のように行列で表せる。

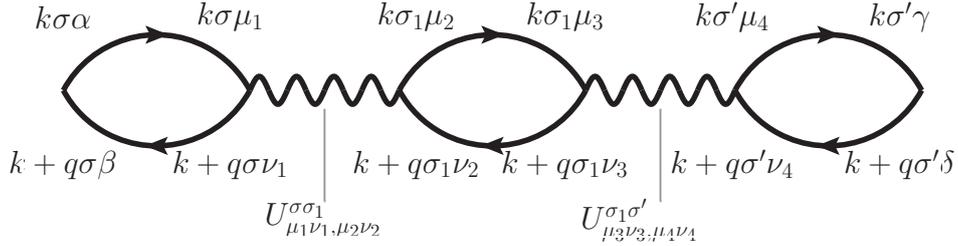


図 2.6: χ の和の U の 2 次

$$\hat{\chi}(q)\hat{U}^{\sigma\sigma_1}\hat{\chi}(q)\hat{U}^{\sigma_1\sigma'}\hat{\chi}(q) \quad (2.47)$$

1 次までの和と 2 次の項を合わせ、高次の項も同様に考え、更に σ, σ' に \uparrow, \downarrow を代入すると、

$$\begin{aligned} \hat{\chi}^{\uparrow\uparrow}(q) &= \hat{\chi}(q) - \hat{\chi}(q)\hat{U}^{\uparrow\uparrow}\hat{\chi}(q) \\ &\quad + \hat{\chi}(q)\hat{U}^{\uparrow\uparrow}\hat{\chi}(q)\hat{U}^{\uparrow\uparrow}\hat{\chi}(q) \\ &\quad + \hat{\chi}(q)\hat{U}^{\uparrow\downarrow}\hat{\chi}(q)\hat{U}^{\downarrow\uparrow}\hat{\chi}(q) + \dots \quad (2.48) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{\chi}^{\uparrow\downarrow}(q) &= -\hat{\chi}(q)\hat{U}^{\uparrow\downarrow}\hat{\chi}(q) \\ &\quad + \hat{\chi}(q)\hat{U}^{\downarrow\uparrow}\hat{\chi}(q)\hat{U}^{\uparrow\uparrow}\hat{\chi}(q) \\ &\quad + \hat{\chi}(q)\hat{U}^{\downarrow\downarrow}\hat{\chi}(q)\hat{U}^{\downarrow\uparrow}\hat{\chi}(q) + \dots \quad (2.49) \end{aligned}$$

これより、 $\hat{\chi}^O(q)$ は、

$$\begin{aligned} \hat{\chi}^O &= \hat{\chi}^{\uparrow\uparrow}(q) + \hat{\chi}^{\uparrow\downarrow}(q) \\ &= \hat{\chi}(q) - \hat{\chi}(q)\hat{U}^O\hat{\chi}(q) + \hat{\chi}(q)\hat{U}^O\hat{\chi}(q)\hat{U}^O\hat{\chi}(q) \dots \\ &= (\hat{1} + \hat{U}^O\hat{\chi}(q))^{-1}\hat{\chi}(q) \quad (2.50) \end{aligned}$$

となる。同様に $\hat{\chi}^S(q)$ は、

$$\begin{aligned}
\hat{\chi}^S &= \hat{\chi}^{\uparrow\uparrow}(q) - \hat{\chi}^{\uparrow\downarrow}(q) \\
&= \hat{\chi}(q) + \hat{\chi}(q)\hat{U}^S\hat{\chi}(q) + \hat{\chi}(q)\hat{U}^S\hat{\chi}(q)\hat{U}^S\hat{\chi}(q) \dots\dots \\
&= (\hat{1} - \hat{U}^S\hat{\chi}(q))^{-1}\hat{\chi}(q)
\end{aligned} \tag{2.51}$$

となる。ここで、 \hat{U}^S , \hat{U}^O は以下で表されている。

$$\begin{aligned}
\hat{U}^S &= \hat{U}^{\uparrow\downarrow} - \hat{U}^{\uparrow\uparrow} \\
&= \begin{pmatrix} U & J & 0 & 0 \\ J & U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U' & J' \\ 0 & 0 & J' & U' \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.52}$$

$$\begin{aligned}
\hat{U}^O &= \hat{U}^{\uparrow\downarrow} + \hat{U}^{\uparrow\uparrow} \\
&= \begin{pmatrix} U & 2U' - J & 0 & 0 \\ 2U' - J & U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2J - U' & J' \\ 0 & 0 & J' & 2J - U' \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.53}$$

更に、感受率が発散する時、相転移が起こると考えられるので、

$$\det(\hat{1} - \hat{U}^S\hat{\chi}(q)) = 0 \tag{2.54}$$

$$\det(\hat{1} + \hat{U}^O\hat{\chi}(q)) = 0 \tag{2.55}$$

となる時に磁気秩序、軌道秩序が発生する。

2.3 乱雑位相近似による線形化エリアシュベルグ方程式

乱雑位相近似による対相互作用の定式化は、[14]に従う。線形化エリアシュベルグ方程式を解くことによって、超伝導転移温度とギャップ関数の対称性が求まる。以下でそれを説明する。

ようになる。

$$\hat{\Delta}^{\sigma\sigma'}(k) = T \sum_{k'} \sum_{\omega'_m} \hat{\Gamma}^{\sigma\sigma'}(k - k') \hat{F}^{\sigma\sigma'}(k') \quad (2.63)$$

ここで、 $\hat{\Gamma}^{\sigma\sigma'}$ は電子間有効相互作用であり、乱雑位相近似でのものを次節で導出する。

2.3.2 線形化エリアシュベルグ方程式

ダイソンゴルコフ方程式において、超伝導状態近傍では、 F と Δ が小さいとし、これらの 2 次の項を落とす。すると、グリーン関数と異常グリーン関数に関して、以下のように線形化ができる。

$$G_{\alpha\beta}(k) = G_{\alpha\beta}^0(k) + G_{\alpha\mu}^0(k) \Sigma_{\mu\nu}(k) G_{\nu\beta}(k) \quad (2.64)$$

$$F_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'}(k) = G_{\alpha\mu}^0(k) \Sigma_{\mu\nu}(k) F_{\nu\beta}^{\sigma\sigma'}(k) + G_{\alpha\mu}^0(k) \Delta_{\mu\nu}^{\sigma\sigma'}(k) G_{\nu\beta}^T(k) \quad (2.65)$$

式 2.64 を式 2.65 に代入することで、次の式が得られる。

$$F_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'}(k) = G_{\alpha\mu}(k) G_{\beta\nu}(-k) \Delta_{\mu\nu}^{\sigma\sigma'}(k) \quad (2.66)$$

式 (2.66) と式 (2.63) を用いて、線形エリアシュベルグ方程式と呼ばれる次の方程式が得られる。

$$\Delta_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'}(k) = T \sum_{k'} \Gamma_{\alpha\gamma,\beta\delta}^{\sigma\sigma'}(k, k') F_{\gamma'\delta'}^{\sigma\sigma'}(k') \quad (2.67)$$

$$= T \sum_{k'} \Gamma_{\alpha\gamma,\beta\delta}^{\sigma\sigma'}(k, k') G_{\gamma\gamma'}(k') G_{\delta\delta'}(-k') \Delta_{\gamma'\delta'}^{\sigma\sigma'}(k') \quad (2.68)$$

$\Delta_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'}(k)$ はギャップ関数であり、クーパ対の波動関数を表すものであるが、これには singlet(s) と triplet(t) のものがある。本論文では singlet のものについてのみ考える。singlet の場合、ギャップ関数と異常グリーン関数は以下ようになる。

$$F_{\alpha\beta}^s(k) = \frac{1}{2} (F_{\alpha\beta}^{\uparrow\downarrow}(k) - F_{\alpha\beta}^{\downarrow\uparrow}(k)) \quad (2.69)$$

$$\Delta_{\alpha\beta}^s(k) = \frac{1}{2} (\Delta_{\alpha\beta}^{\uparrow\downarrow}(k) - \Delta_{\alpha\beta}^{\downarrow\uparrow}(k)) \quad (2.70)$$

これを用いると、singlet 状態に対する線形化エリアシュベルグ方程式は、以下のようになる。

$$\begin{aligned}
\Delta_{\alpha\beta}^s(k) &= \frac{1}{2}(\Delta_{\alpha\beta}^{\uparrow\downarrow}(k) - \Delta_{\alpha\beta}^{\downarrow\uparrow}(k)) \\
&= \frac{T}{2} \sum_{k'} \left(\Gamma_{\alpha\gamma,\beta\delta}^{\uparrow\downarrow}(k, k') F_{\gamma\delta}^{\uparrow\downarrow}(k') - \Gamma_{\alpha\gamma,\beta\delta}^{\downarrow\uparrow}(k, k') F_{\gamma\delta}^{\downarrow\uparrow}(k') \right) \\
&= \frac{T}{2} \sum_{k'} \Gamma_{\alpha\gamma,\beta\delta}^{\uparrow\downarrow}(k, k') \left(F_{\gamma\delta}^{\uparrow\downarrow}(k') - F_{\gamma\delta}^{\downarrow\uparrow}(k') \right) \\
&= T \sum_{k'} \Gamma_{\alpha\gamma,\beta\delta}^{\uparrow\downarrow}(k, k') F_{\gamma\delta}^s(k) \\
&= T \sum_{k'} \Gamma_{\alpha\gamma,\beta\delta}^s(k, k') G_{\gamma\gamma'}(k') G_{\delta\delta'}(-k') \Delta_{\gamma'\delta'}(k') \quad (2.71)
\end{aligned}$$

ここで、クーロン相互作用の対称性から $\Gamma^{\sigma\sigma'} = \Gamma^{\sigma'\sigma}$ であることを用い、 $\Gamma^{\uparrow\downarrow} = \Gamma^s$ とした。

この方程式は、固有値が 1 の固有値方程式と見ることができる。そこで、固有値 λ を人為的に導入し、

$$\lambda \Delta_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'}(k) = T \sum_{k'} \Gamma_{\alpha\gamma,\beta\delta}^{\sigma\sigma'}(k, k') G_{\gamma\gamma'}(k') G_{\delta\delta'}(-k') \Delta_{\gamma'\delta'}(k') \quad (2.72)$$

とし、温度を変化させてこの方程式の固有値を求めることにする。温度を下げていき、最大固有値がちょうど 1 となった時、超伝導状態になったと考えることができる。また、この時の Δ は固有関数として求まるが、これがギャップ関数となる。ここで、

$$\phi_{\alpha\beta,\gamma\delta}(k) = G_{\alpha\gamma}(k) G_{\delta\beta}(-k) \quad (2.73)$$

と定義すると、線形エリアシュベルグ方程式は以下のように書ける。

$$\lambda \Delta_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'}(k) = T \sum_{k'} \Gamma_{\alpha\gamma,\beta\delta}^{\sigma\sigma'}(k, k') \phi_{\gamma\delta,\delta'\gamma'}(k') \Delta_{\gamma'\delta'}^{\sigma\sigma'}(k') \quad (2.74)$$

この方程式をダイアグラムで表すと、図 2.8 のようになる。

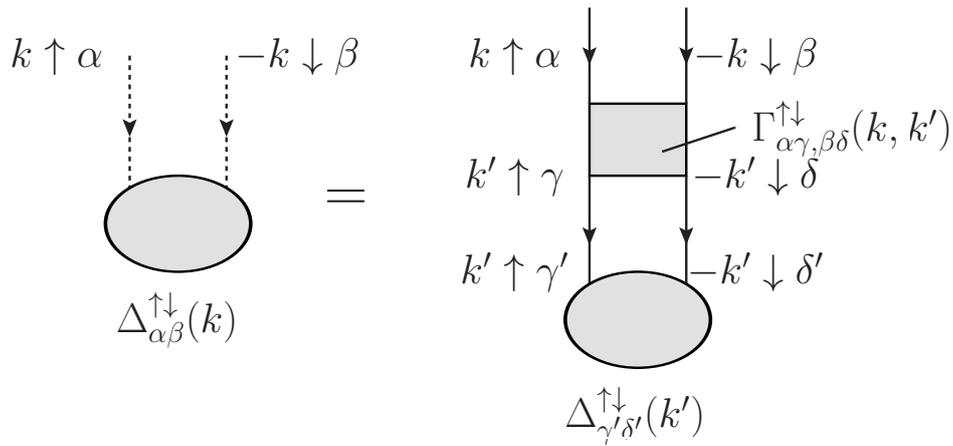


図 2.8: 線形化エリヤシュベルグ方程式のダイアグラム

電子間有効相互作用 Γ

乱雑位相近似における電子間有効相互作用 Γ は図 2.9 のバブル型と図 2.10 のラダー型のダイアグラム、更に図 2.11 のダイアグラム (バブル型、ラダー型両方に含まれるので被らないように) 和をとることによって求められる。

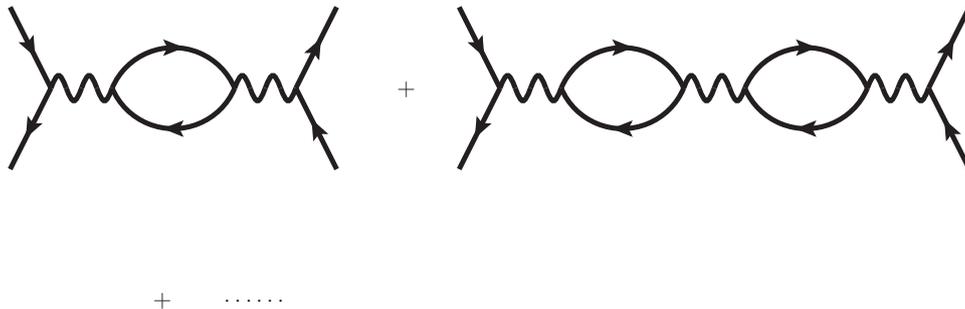


図 2.9: バブル型のダイアグラム

ここで、これらの図形はバブル型、ラダー型の2つの図形で表せる既約感受率で表される。バブル型は図 2.3 に示されている。ラダー型の既約感受率は、図 2.3.2 で表され、バブル型とは符号のみが異なる。

従って、まずバブル型のダイアグラムの、 $\hat{\chi}$ の1次の項は、式 2.75 の

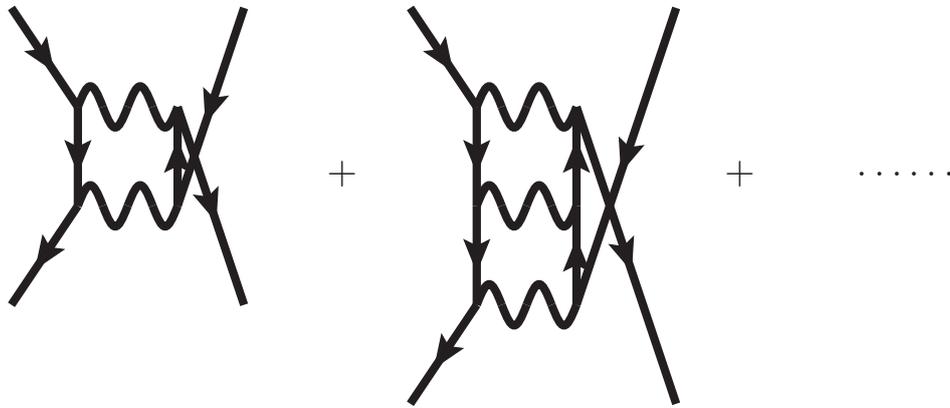


図 2.10: ラダー型のダイアグラム

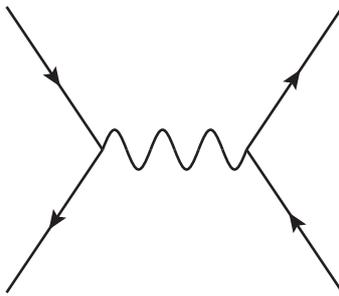


図 2.11: バブル、ラダー型両方に含まれるダイアグラム

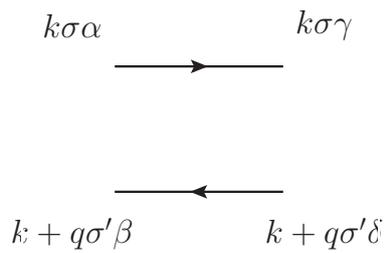


図 2.12: ラダー型の既約感受率, $-\chi_{\alpha\beta,\gamma\delta}(q)$

ようになる。(図 2.13 も参照)

$$-U_{\alpha\gamma,\mu_1\nu_1}^{\uparrow\sigma} \chi_{\mu_1\nu_1,\mu_2\nu_2}(q) U_{\mu_2\nu_2,\beta\delta}^{\sigma\downarrow} \quad (2.75)$$

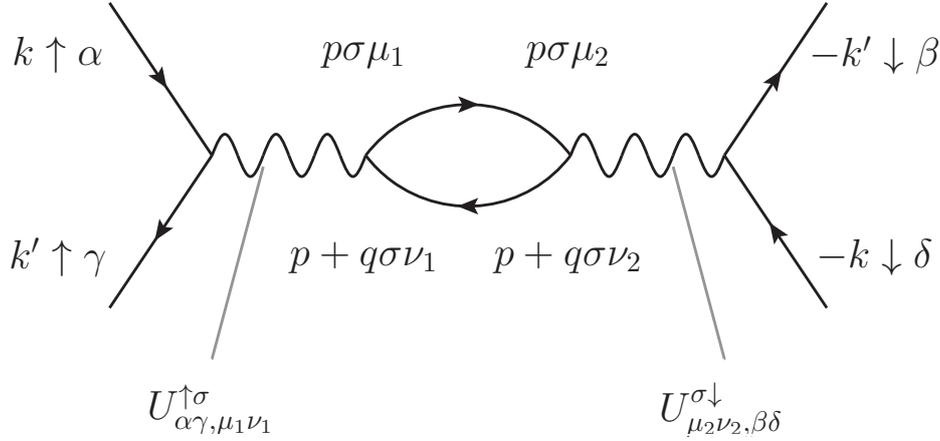


図 2.13: バブル型の U の 1 次のダイアグラム、 $k - k' = q$

これは、行列で表し、 σ の和を取れば、以下ようになる。

$$\begin{aligned}
 &= \hat{U}^{\uparrow\uparrow} \hat{\chi}(q) \hat{U}^{\uparrow\downarrow} + \hat{U}^{\uparrow\downarrow} \hat{\chi}(q) \hat{U}^{\downarrow\downarrow} \\
 &= \frac{1}{4} (\hat{U}^O - \hat{U}^S) \hat{\chi}(q) (\hat{U}^O + \hat{U}^S) + \frac{1}{4} (\hat{U}^O + \hat{U}^S) \hat{\chi}(q) (\hat{U}^O - \hat{U}^S) \\
 &= \frac{1}{2} (\hat{U}^O \hat{\chi} \hat{U}^S - \hat{U}^S \hat{\chi} \hat{U}^O)(q) \tag{2.76}
 \end{aligned}$$

2 次の項は、以下ようになる (図 2.14)。

$$-U_{\alpha\gamma, \mu_1 \nu_1}^{\uparrow\sigma_1} \chi_{\mu_1 \nu_1, \mu_2 \nu_2}(q) U_{\mu_2 \nu_2, \mu_3 \nu_3}^{\sigma_1 \sigma_2} \chi_{\mu_3 \nu_3, \mu_4 \nu_4}(q) U_{\mu_4 \nu_4, \beta\delta}^{\sigma_2 \downarrow}(q) \tag{2.77}$$

更に高次の項まで考え、これらを行列で表し、1 次の項と同様に σ の和

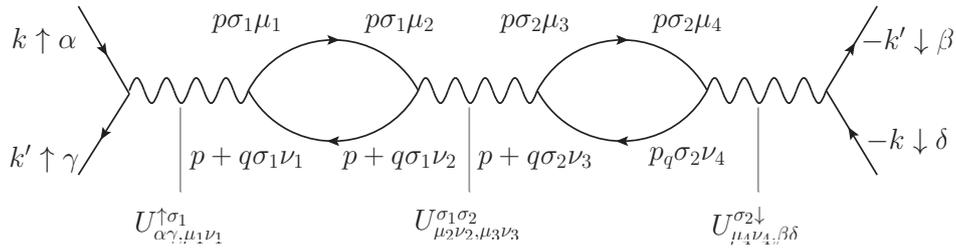


図 2.14: バブル型の U の 2 次のダイアグラム、 $k - k' = q$

を取ると、最終的にバブル型のダイアグラムの和は以下ようになる。

$$= \frac{1}{2} (\hat{U}^O \hat{\chi}^O \hat{U}^O - \hat{U}^S \hat{\chi}^S \hat{U}^S)(q) \tag{2.78}$$

次に、ラダー型のダイアグラムの $\hat{\chi}$ の 1 次の項は、以下ようになる。
 (図 2.15 も参照)

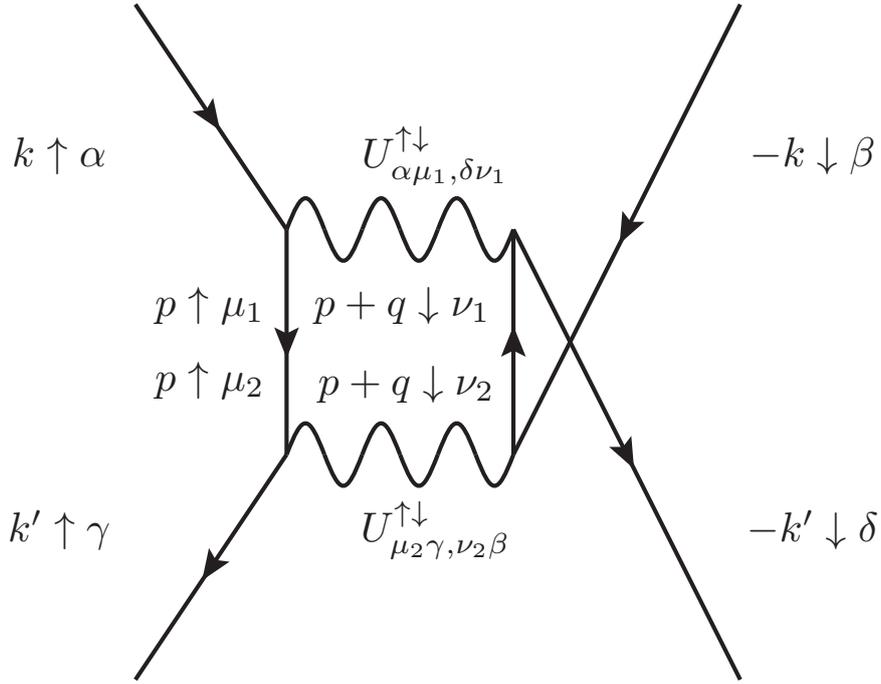


図 2.15: ラダー型の U の 1 次のダイアグラム、 $k + k' = -q$

$$U_{\alpha\mu_1,\beta\nu_1}^{\uparrow\downarrow} \chi_{\mu_1\nu_1,\mu_2\nu_2}(q) U_{\mu_2\gamma,\nu_2\delta}^{\uparrow\downarrow} \quad (2.79)$$

ここで、

$$U_{\tau_1\tau_2,\tau_3\tau_4}^{\uparrow\downarrow} = U_{\tau_1\tau_3,\tau_2\tau_4}^S \quad (2.80)$$

という関係があるので、式 2.79 は、以下ようになる。

$$U_{\alpha\beta,\mu_1\nu_1}^S \chi_{\mu_1\nu_1,\mu_2\nu_2}(k + k') U_{\mu_2\nu_2,\gamma\delta}^S \quad (2.81)$$

これを行列で表すと、

$$\hat{U}^S \hat{\chi}(k + k') \hat{U}^S \quad (2.82)$$

となる。2 次の項 (図 2.3.2) は、行列で表すと、

$$- \left(\hat{U}^S \hat{\chi}(k + k') \hat{U}^S \hat{\chi}(k + k') \hat{U}^S \right)_{\alpha\delta,\gamma\beta} \quad (2.83)$$

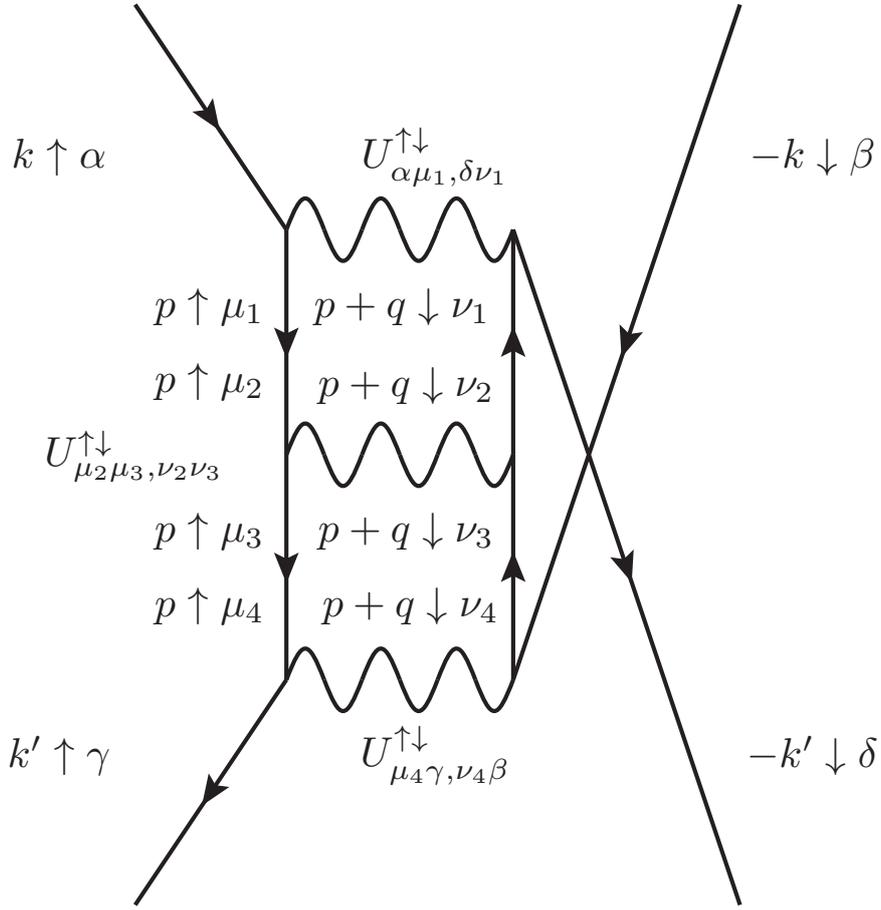


図 2.16: ラダー型の U の 2 次のダイアグラム、 $k + k' = -q$

となる。最後に、図 (2.11) は、

$$-U_{\alpha\gamma,\delta\beta}^{\uparrow\downarrow} = -\frac{1}{2} (U^S + U^O)_{\alpha\gamma,\delta\beta} \quad (2.84)$$

となる。これらの図形を高次まで足し合わせると、有効相互作用は以下のようになる。

$$\begin{aligned} & \left(-\hat{U}^S \hat{\chi}^S \hat{U}^S \right)_{\alpha\delta,\gamma\beta} (k + k') \\ & - \frac{1}{2} \left(\hat{U}^S \hat{\chi}^S \hat{U}^S - \hat{U}^O \hat{\chi}^O \hat{U}^O \right)_{\alpha\gamma,\delta\beta} (k - k') - \frac{1}{2} (U^S + U^O)_{\alpha\gamma,\delta\beta} \quad (2.85) \end{aligned}$$

この相互作用は引数が $k + k'$ の項と $k - k'$ の項が含まれているが、以下

のようにすることによって、 $k - k'$ の項のみにできる。

$$\begin{aligned}
\lambda\Delta_{\alpha\beta}^S(k) &= -T \sum_{k'} \left[\left(\hat{U}^S \hat{\chi} \hat{U}^S \right)_{\alpha\delta, \beta\gamma} (k + k') \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\hat{U}^S \hat{\chi}^S \hat{U}^S - \hat{U}^O \hat{\chi}^O \hat{U}^O + \hat{U}^S + \hat{U}^O \right)_{\alpha\gamma, \beta\delta} (k - k') \right] F_{\gamma\delta}^S(k') \\
&= -T \sum_{k'} \left[\left(\hat{U}^S \hat{\chi} \hat{U}^S \right)_{\alpha\delta, \beta\delta} (k + k') F_{\delta\gamma}^S(k') \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\hat{U}^S \hat{\chi}^S \hat{U}^S - \hat{U}^O \hat{\chi}^O \hat{U}^O + \hat{U}^S + \hat{U}^O \right)_{\alpha\gamma, \beta\delta} (k - k') F_{\gamma\delta}^S(k') \right] \\
&= -T \sum_{k'} \left[\left(\hat{U}^S \hat{\chi} \hat{U}^S \right)_{\alpha\gamma, \beta\delta} (k - k') \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\hat{U}^S \hat{\chi}^S \hat{U}^S - \hat{U}^O \hat{\chi}^O \hat{U}^O + \hat{U}^S + \hat{U}^O \right)_{\alpha\gamma, \beta\delta} (k - k') \right] F_{\gamma\delta}^S(k') \\
&= -T \sum_{k'} \left[\frac{3}{2} \hat{U}^S \hat{\chi}^S \hat{U}^S - \frac{1}{2} \hat{U}^O \hat{\chi}^O \hat{U}^O + \hat{U}^S + \hat{U}^O \right]_{\alpha\gamma, \beta\delta} (k - k') F_{\gamma\delta}^S(k')
\end{aligned} \tag{2.86}$$

ここで、 $F_{\gamma\delta}^S(k) = F_{\delta\gamma}^S(-k)$ の関係を使った。

2.3.3 BCS ギャップ方程式 (弱結合近似)

線形化エリアシュベルグ方程式において、 ϕ については以下に定義し直す。

$$\phi_{\alpha\beta, \gamma\delta} = T \sum_{\omega_n} G_{\alpha\gamma}^0(k) G_{\delta\beta}^0(-k) \tag{2.87}$$

更に、 ϕ 以外の部分については振動数の依存性を落とせば、singlet 対の線形化エリアシュベルグ方程式は行列とベクトルを用いて以下のようになる。

$$\lambda\Delta^S(\mathbf{k}) = \sum_{k'} \hat{\Gamma}^S(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \hat{\phi}(\mathbf{k}') \Delta^S(\mathbf{k}') \tag{2.88}$$

ここで、

$$\Delta^S(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \Delta_{11}^S(\mathbf{k}) \\ \Delta_{22}^S(\mathbf{k}) \\ \Delta_{12}^S(\mathbf{k}) \\ \Delta_{21}^S(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.89)$$

である。本論文ではこのBCSギャップ方程式の固有値と固有関数をべき乗法と高速フーリエ変換を用いて求める。

また、本論文では感受率の計算とBCSギャップ方程式の計算時、 $G \rightarrow G^0$ として計算を行う。

2.4 数値計算について

本論文では、感受率の計算を台形公式による積分によって行っている。その際、ブリルアンゾーンの k_x, k_y をそれぞれ $N = 1000$ に分割している。また、ギャップ方程式の固有値・固有関数の計算の際はべき乗法を用いた。更に、ギャップ方程式が畳み込みの形になっているため、高速フーリエ変換を用いた高速化を行っている。その際のブリルアンゾーンは q_x, q_y をそれぞれ $N = 64$ に分割している。

計算における分割数については、オーダーとして

$$\frac{W}{N} < T \text{ の刻み} \quad (2.90)$$

となっていれば、温度の刻みよりもブリルアンゾーンの刻みの方が細かくなり、十分な精度で計算できると考えられる。本論文では、感受率の計算は

$$\frac{W = 4.491354eV}{N = 1000} \simeq 0.0045eV \quad (2.91)$$

となっているため、0.01eV程度までは十分な精度で計算されていることになる。また、ギャップ方程式の計算では

$$\frac{W = 4.491354eV}{N = 64} \simeq 0.07eV \quad (2.92)$$

となっているため、0.1eV程度までは十分な精度で計算されていることになる。

本論文では、ギャップ方程式の計算に関して精度があまり良いとは言えないが、物理的内容が大きく変わることはないと考えて計算を行っている。

また、パラメータ U', J, J' に関しては、まず回転対称性から $U = U' + J + J'$ であり、波動関数が実であることから $J = J'$ である。更に本研究では $U' = 2U/3$ 、 $J = U/6$ とする。ここから、電子間相互作用のパラメータは U のみを決めれば良いことになる。また、 $W (= 4.491345eV)$ はバンド幅である。ホッピングパラメータは表 1.1 のものを用いる。

第3章 計算結果

3.1 感受率の計算による結果

まず $\delta = 0.40, 0.50, 0.60$ の場合について、静的なスピン感受率・軌道感受率を計算する。クーロン相互作用 U に関しては、まず

$$\det(\hat{1} - \hat{U}^S \hat{\chi}(\mathbf{q}, 0)) = 0 \quad (3.1)$$

となる $U = U_m$ 、すなわち磁気秩序の発生する時の U を計算し、 $U = 0.7U_m$ として計算を行っている。

$\delta = 0.40$ の場合のスピン感受率・軌道感受率は図 3.1, 図 3.2 である。 $\delta = 0.50$ の場合は図 3.3, 図 3.4 である。 $\delta = 0.60$ の場合は図 3.5, 図 3.6 である。これらを見ると、スピン感受率に鋭いピーク構造が見られ、軌道感受率はさほど大きなピークが存在しないことが分かる。従って、乱雑位相近似による計算では、この系では軌道秩序ではなく磁気秩序が優勢であることがわかった。また、最も早く式 3.1 となる $q = Q$ の位置を表 3.1 にまとめた。スピン感受率の図では Q は最も左側のピークに対応することがわかる。スピン感受率の最大のピークと対応していないが、これは感受率の添字が軌道の添字であり、バンドの添字ではないからだと考えられる。

また、 $\delta \leq 0.45$ の時は $Q = 0$ となっているため、強磁性的なゆらぎが強いと考えられる。よって、 $\delta \leq 0.45$ ではクーパー対は triplet 対である可能性も考えられる。 $\delta \geq 0.50$ の時は Q は $(Q, 0)$, (Q は δ の値によって変化) となっているため、反強磁性的なゆらぎが強いと考えられる。

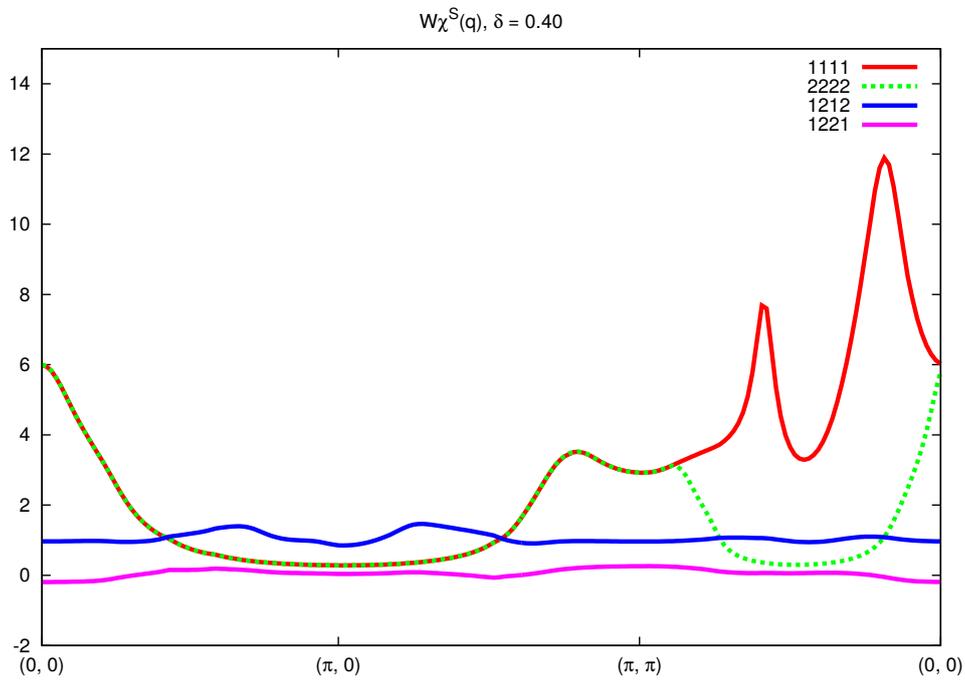


図 3.1: $\delta = 0.40$ の場合のスピンの感受率

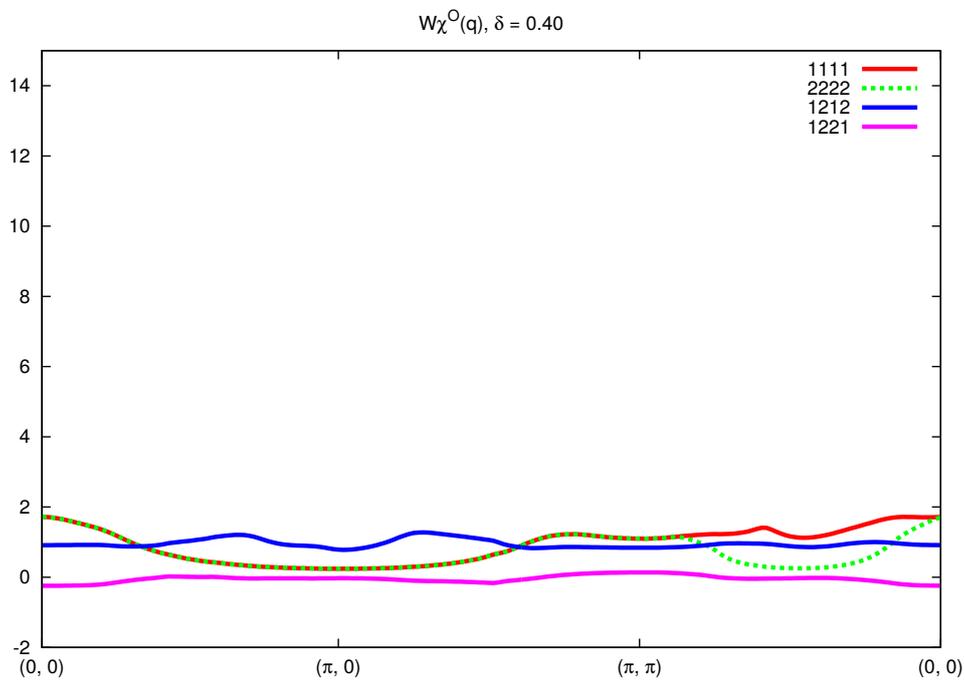


図 3.2: $\delta = 0.40$ の場合の軌道の感受率

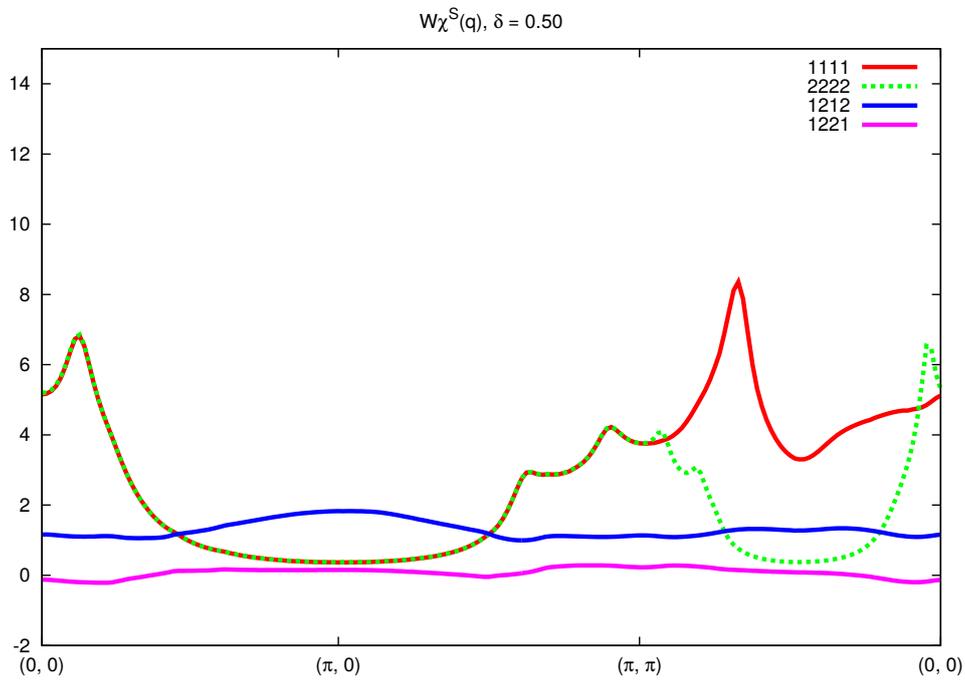


図 3.3: $\delta = 0.50$ の場合のスピンの感受率

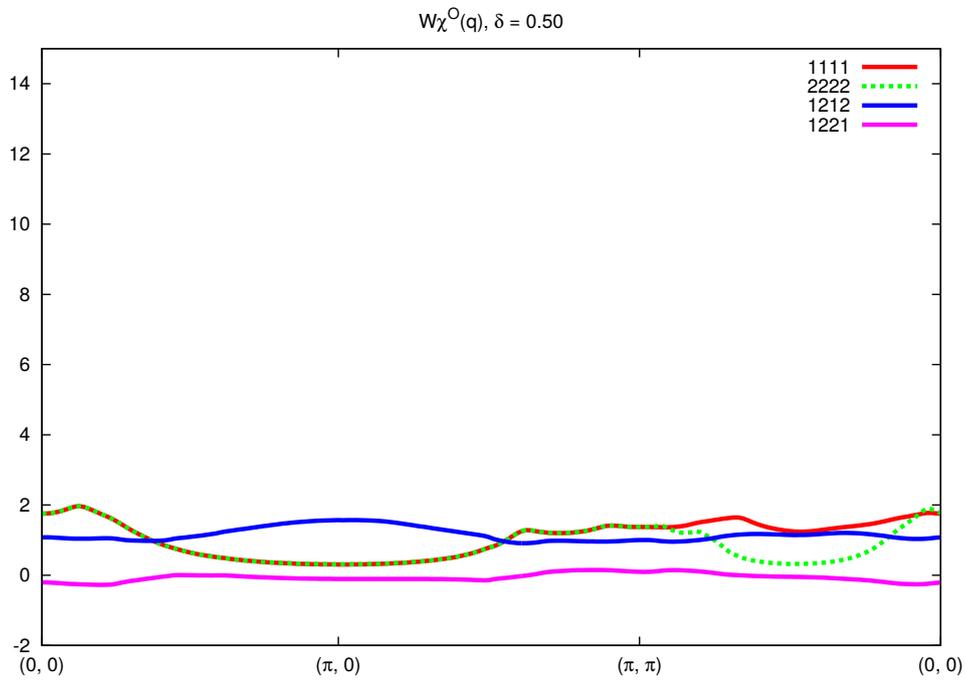


図 3.4: $\delta = 0.50$ の場合の軌道の感受率

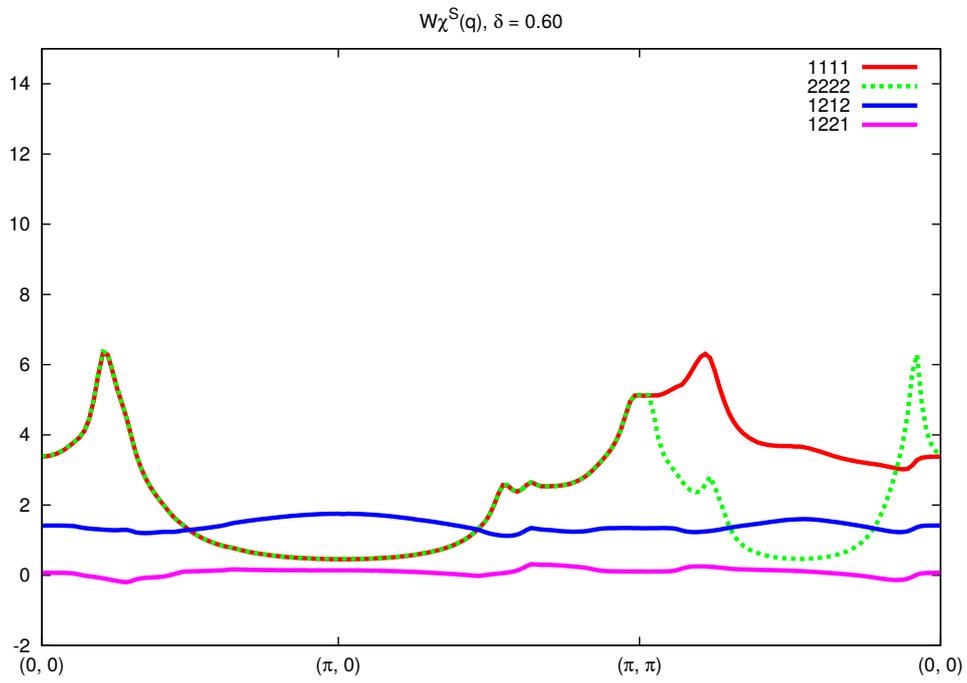


図 3.5: $\delta = 0.60$ の場合のスピンの感受率

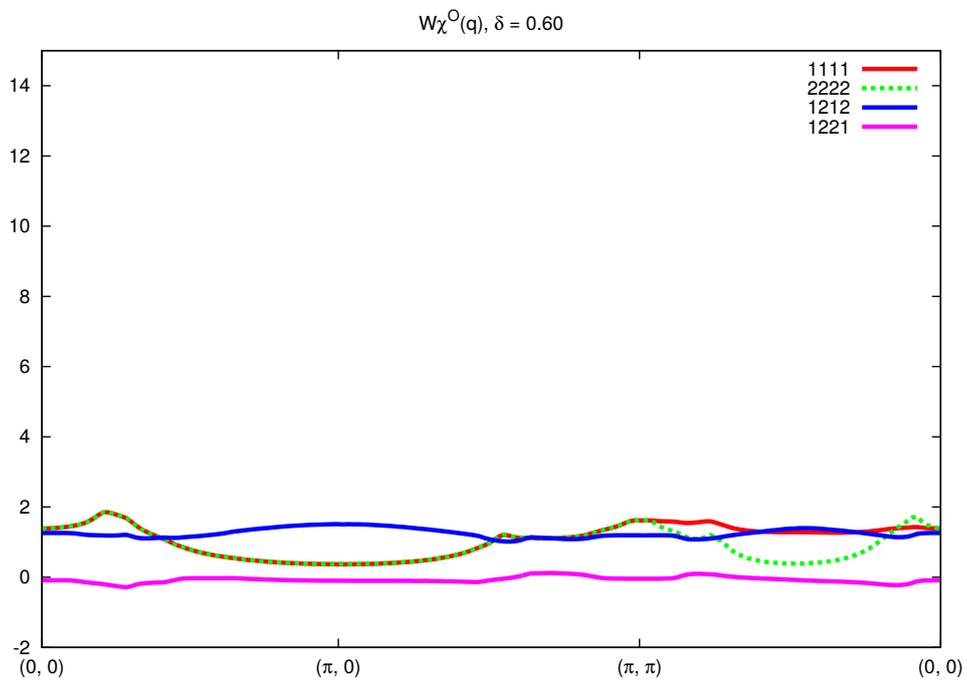


図 3.6: $\delta = 0.60$ の場合の軌道の感受率

δ	Q_x	Q_y
0.35	0	0
0.40	0	0
0.45	0	0
0.50	0.376991	0
0.55	0.534071	0
0.60	0.659734	0
0.65	0.785398	0

表 3.1: $Q = (Q_x, Q_y)$

3.2 2軌道ギャップ方程式による結果

3.2.1 ギャップ対称性

ギャップ関数に関して、本研究では添字が軌道を表すインデックスとなっていたが、ハミルトニアンを対角化するようなユニタリ行列によってユニタリ変換を施すことで、バンドの添字を変える。このようにすることで、フェルミ面との対応がわかりやすくなる。

今回の計算では異なるバンド間のペアは形成されにくいので、 $\Delta_{ab}(k)$ の値は他の成分より1桁ほど小さいため、載せていない。なお、ギャップ関数の計算に関しては $U = 2.0eV$ に固定して行っている。また、今回は δ の値によらず singlet 対の相互作用のみを考えて計算を行っている。

図 3.7 は $\delta = 0.40$ の時の a バンド間のギャップ関数である。この δ ではまだ a バンドによる $(\pi, 0)$ の周りのフェルミ面は発生していないが、バンドがフェルミ準位の近傍にあるため、その影響で a バンド間のギャップ関数が出ている。

図 3.8 は $\delta = 0.40$ の時の b バンド間のギャップ関数である。太い実線は対応する b バンドのフェルミ面である。 b バンドのフェルミ面のところにギャップ関数が出ており、フェルミ面間で符号が異なる。更に、フェルミ面上でも符号が異なる。このことから、 $\delta = 0.40$ の時、少なくともギャッ

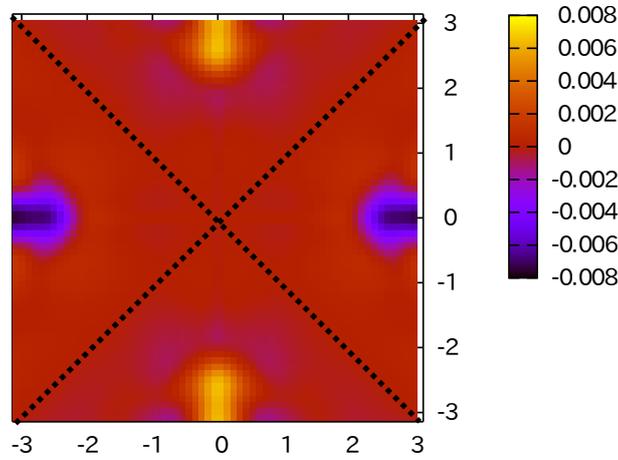


図 3.7: $\delta = 0.40, U = 2.0eV$ の場合のギャップ関数 $\Delta_{aa}(\mathbf{k})$

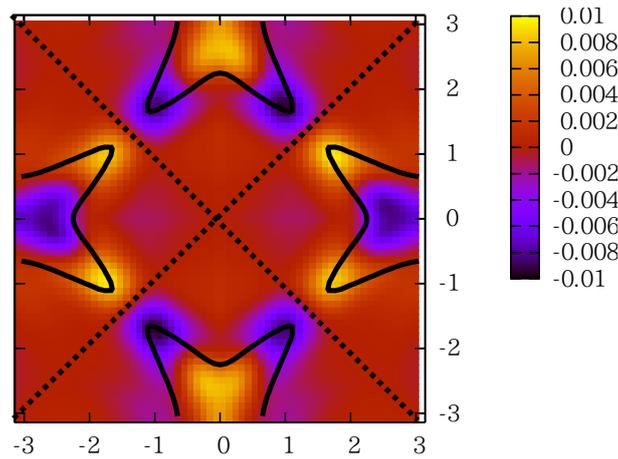


図 3.8: $\delta = 0.40, U = 2.0eV$ の場合のギャップ関数 $\Delta_{bb}(\mathbf{k})$

ブ関数は直線 $q_x = q_y, q_x = -q_y$ 上にノードを持ち、 $d_{x^2-y^2}$ の対称性を持つとわかった。図 3.7, 図 3.8 に点線でノードを示した。

図 3.9 は $\delta = 0.50$ の時の a バンド間のギャップ関数である。ここでも a バンドによる $(\pi, 0)$ の周りのフェルミ面はまだ発生していないが、 a バンドの影響を受けたギャップ関数が出ている。

図 3.10 は $\delta = 0.50$ の時の b バンド間のギャップ関数である。太い実線は対応する b バンドのフェルミ面である。 b バンドのフェルミ面のところにギャップ関数が出ており、2 本あるフェルミ面上ではどちらの線上でも

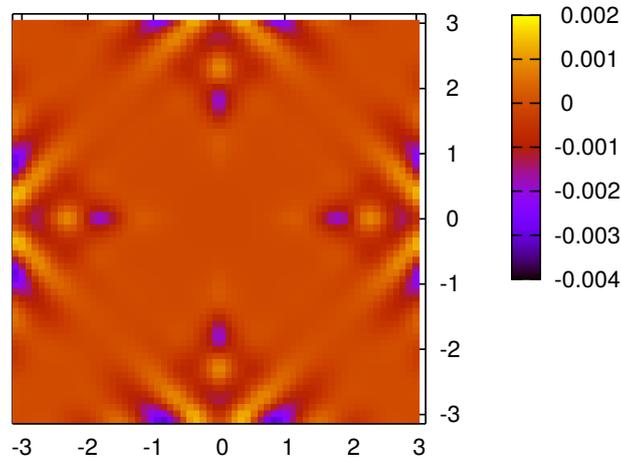


図 3.9: $\delta = 0.50, U = 2.0eV$ の場合のギャップ関数 $\Delta_{aa}(\mathbf{k})$

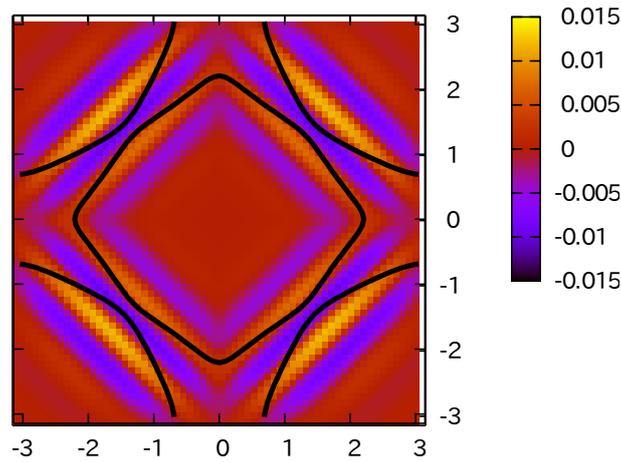


図 3.10: $\delta = 0.50, U = 2.0eV$ の場合のギャップ関数 $\Delta_{bb}(\mathbf{k})$

ギャップ関数の符号が変わっている。このことから、 $\delta = 0.50$ の時はギャップ関数は拡張 s 波の対称性を持つとわかる。

図 3.11 は $\delta = 0.60$ の時の a バンド間のギャップ関数である。太い実線は対応する a バンドのフェルミ面であり、点線は b バンドのフェルミ面である。ここでは a バンドによるフェルミ面が $(\pi, 0)$ の周りに発生しており、 a バンドの影響を受けたギャップ関数が出ている。

図 3.12 は $\delta = 0.60$ の時の b バンド間のギャップ関数である。太い実線

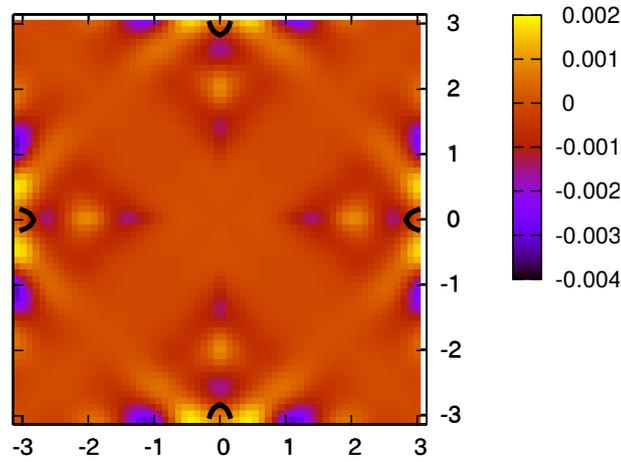


図 3.11: $\delta = 0.60, U = 2.0eV$ の場合のギャップ関数 $\Delta_{aa}(\mathbf{k})$

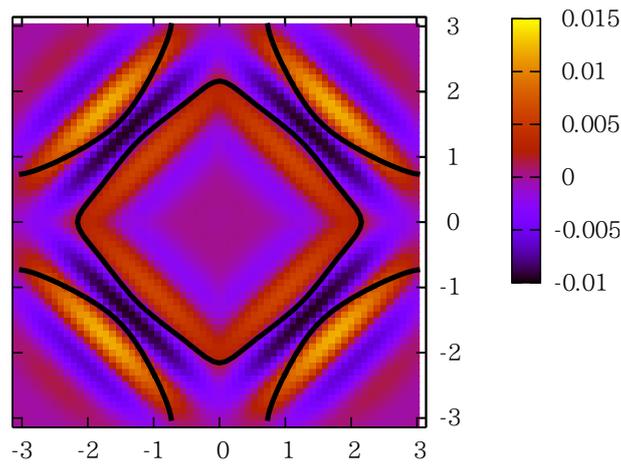


図 3.12: $\delta = 0.60, U = 2.0eV$ の場合のギャップ関数 $\Delta_{bb}(\mathbf{k})$

は対応する b バンドのフェルミ面である。ここでも $\delta = 0.50$ と同様、 b バンドのフェルミ面のところにギャップ関数が出ており、2本あるうちの外側のフェルミ面上ではギャップ関数の符号が変わっており、内側のフェルミ面上では符号は変わっていない。 $\delta = 0.60$ の時も $\delta = 0.50$ の時と同様、ギャップ関数は拡張 s 波の対称性を持つとわかる。

3.2.2 相図 $T/W - \delta$

横軸 δ 、縦軸 T/W とし、 $\delta = 0.35$ から 0.65 の範囲で相図を作成した。
 (図 3.13) この時、 q は表 3.1 のものを用いた。実験結果によると、 $\delta = 0.5$

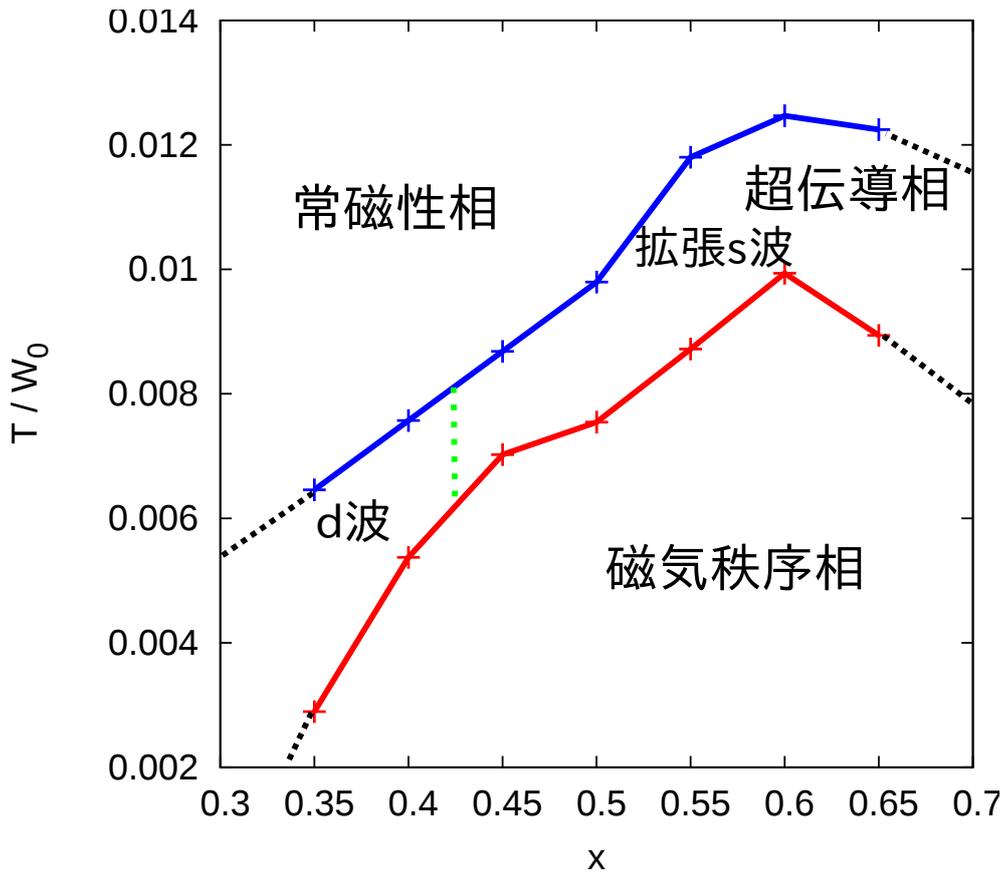


図 3.13: 相図 $T/W - \delta$, $U = 2.0\text{eV}$

付近で最も超伝導転移温度が高くなっているが、本研究では $\delta = 0.60$ で最も転移温度が高くなっている。このことについては、本研究で用いているモデルが、フォノンの効果を取り入れておらず、ドーピングすることによる構造の変化などが考慮されていないからではないかと考えられる。

また、前節の結果から、 δ の値によって singlet 対のギャップ関数の対称性が変化することがわかった。ギャップ関数の対称性は、 $\delta = 0.40$ と 0.45 の間で d 波から拡張 s 波へと変化している。

ちなみに、 $\delta \leq 0.45$ では感受率のところで見たとおり強磁性的なゆらぎが強くなっているため、triplet 超伝導が安定化、発現することも十分考えられる。しかしながら、今回の計算では singlet 対しか考えていないため、今後、triplet 対についても考える必要がある。

3.2.3 相図 $T/W - U/W$

横軸 U/W 、縦軸 T/W とし、 $\delta = 0.5$ に固定し、 $U = 1.6eV$ から $2.3eV$ の範囲で相図を作成した。(図 3.14) 図 3.14 中の赤線は常磁性相と超伝導

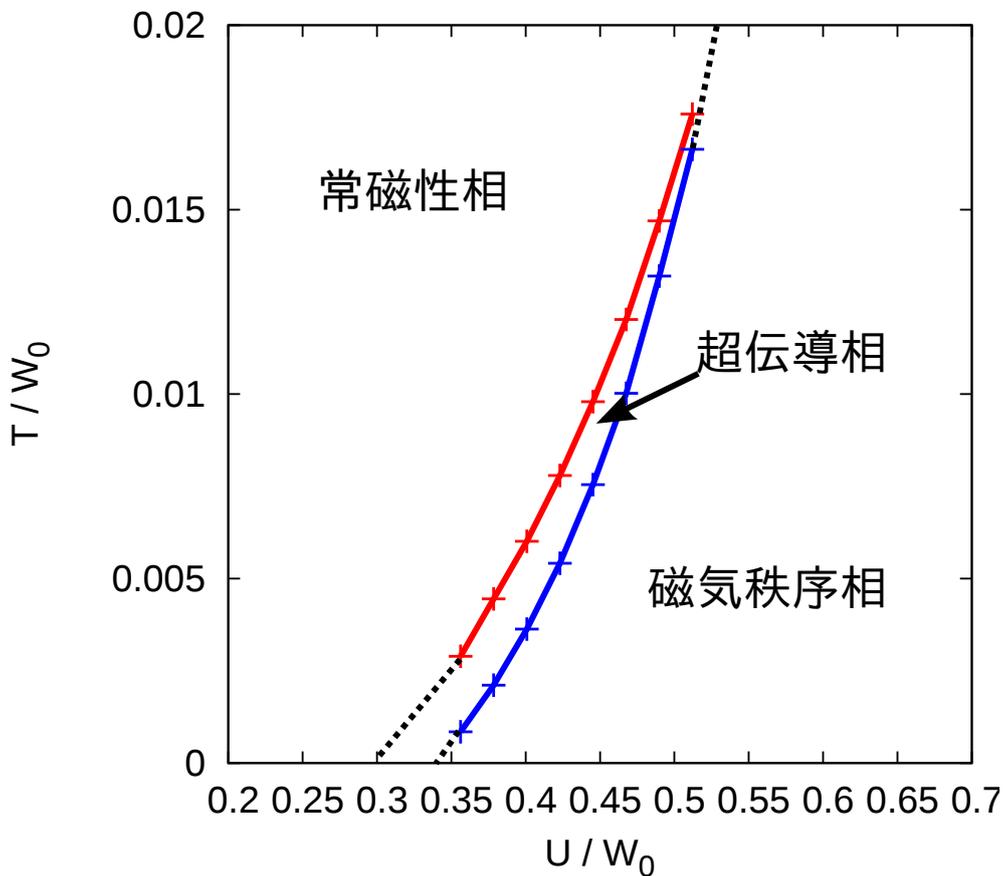


図 3.14: 相図 $T/W - U/W$, $\delta = 0.5$

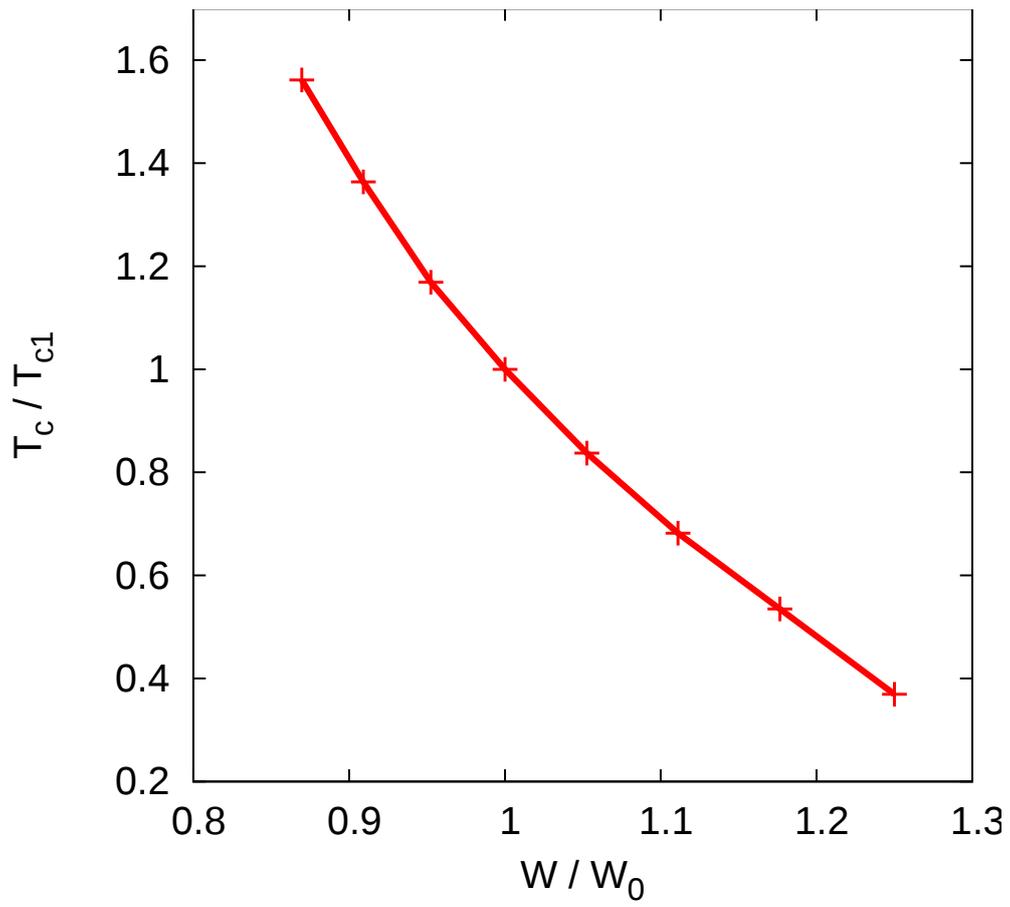
相の境界、青線は超伝導相と磁気秩序相の境界である。これより、クー

ロン相互作用 U を大きくすれば、 $U \simeq 2.3eV$ までは T_c が上がることがわかった。そして、それよりも U が大きくなると、超伝導にはならないこともわかる。更に、 T を固定して U を大きくしていけば、常磁性 \rightarrow 超伝導 \rightarrow 磁気秩序、あるいは常磁性 \rightarrow 磁気秩序と相転移する。

3.2.4 圧力と T_c の関係

一般的に、圧力が増すとホッピングパラメータが大きくなる。そして、ホッピングパラメータが大きくなると、バンド幅 W も大きくなる。そこで、バンド幅 W の変化による T_c の変化を調べることによって、圧力による T_c の変化を考えた。

前節の相図では W_0 を固定し U を変化させたが、本節ではその変化を U を固定し W を変化させたものとする。まずバンド幅 W_0 をバンド幅の基準とし、前節の相図で $U = 2.0eV$ の時の T_c を T_{c1} とし、これを T_c の基準とする。そのようにして、 W/W_0 と T_c/T_{c1} の関係を図 3.15 に示した。圧力をかけることによって W は大きくなり、 T_c は下がっていることになる。実験結果では圧力によって T_c が大幅に上昇しており、これと食い違う。これは、本論文では電子格子相互作用を取り入れておらず、圧力による格子構造の変化が全く考慮されていないことによるものだと考えられる。



☒ 3.15: $T_c/T_{c1} - W/W_0$, $\delta = 0.50$

第4章 まとめと考察

4.1 まとめ

本研究では、BiS₂系層状超伝導体であるLaO_xF_{1-x}BiS₂の有効2軌道モデルに対して、乱雑位相近似を用い、まずドーピング比 $\delta(=x)$ の値が0.40, 0.50, 0.60の場合にスピン感受率・軌道感受率の計算を行った。その結果、乱雑位相近似の範囲では、この系は軌道秩序よりも磁気秩序が発生しやすいことがわかった。また、感受率が最も早く発散するベクトル Q が $\delta \leq 0.45$ では $Q = 0$ となることから、 $\delta \sim 0.45$ 付近でギャップ関数がtripletからsingletに入れ替わっている可能性があることがわかった。

更に、 δ の値や U の値を変えてスピン感受率の発散する温度を計算することで、磁気相転移の発生する点を計算し、また、ギャップ方程式を解くことで超伝導転移の発生する点を計算することで、この系の相図を作成した。その結果、この系に圧力をかけると超伝導転移温度が下がるという結果となった。更に、実験結果では $\delta \simeq 0.5$ 付近で超伝導転移温度が最大になることがわかっているが、本研究では $\delta = 0.6$ で超伝導転移温度が最大になっている。

これらは、本研究では電子格子相互作用を取り入れていないため、圧力による構造の変化を考慮できていないからではないかと考えられる。スピン揺らぎよりも電子格子相互作用の方が超伝導発現に大きく寄与していることも考えられる。

また、ギャップ関数の対称性も調べた。結果、ギャップ関数は $\delta = 0.40$ では $d_{x^2-y^2}$ 波の対称性、 $\delta = 0.50, 0.60$ では拡張s波の対称性を持つことがわかった。更に $\delta = 0.50$ の時は各フェルミ面上でギャップ関数の符号が変化するのに対して、 $\delta = 0.60$ では外側のフェルミ面上でのみギャップ

関数の符号が変化することがわかった。

4.2 今後の課題

今回の計算では δ の値によらず、singlet 対の相互作用を用いたが、先に述べたように $\delta \leq 0.45$ では triplet 対の超伝導が発現している可能性があるため、triplet 対の相互作用を用いた計算も行う必要がある。更に、本論文では圧力による T_c の上昇は再現されなかったため、フォノンの効果を取り入れ、構造のゆらぎを考慮した計算を行う必要がある。

また本論文では、線形化エリアシュベルグ方程式の松原振動数依存性を落として BCS ギャップ方程式の計算を行っており、この振動数依存性を落とさず計算を行った時の違いを調べることが考えられる。計算精度についても、ギャップ方程式の計算の際のブリルアンゾーンの分割数が、今回の計算では足りないということも考えられるので、より分割数を増やし、精度を良くした計算を行う必要もある。

更に、今回は $G \rightarrow G^0$ という単純化を行ったが、これを行わず、自己エネルギーの影響も含めて自己無撞着に計算する、すなわち揺らぎ交換近似 (fluctuation exchange approximation, FLEX) を行うことが考えられる。また、Bi は原子番号が大きく、スピン軌道相互作用が大きいのではないかと考えられるため、これを取り入れた計算を行うことも考えられる。

謝辞

本研究を進めるにあたり、多くの方々のお世話になりました。

研究の進め方や論文の書き方、研究発表の方法などについて、堀田貴嗣教授には2年間ものご指導をしていただきました。また、青木勇二教授、荒畑恵美子准教授には本論文をご精読いただきました。

強相関電子論研究室の先輩方にも、研究に関するアドバイスをいただきました。研究室の同期である松井大氏には、コンピュータに関することを教えていただいたり、研究に関することを議論させていただき、多くの知識や示唆をいただきました。

近隣研究室の皆様とも、研究に関する議論をさせていただきました。近隣分野の研究について多くの知識をいただきました。

最後に、家族の皆様は、2年間私の生活を支えてくださいました。

お世話になりました皆様へ深く感謝申し上げます。ありがとうございました。

参考文献

- [1] H. K. Onnes, Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden, Nos. 119, 120, 122 (1911).
- [2] W. Meissner and R. Ochsenfeld, Naturwiss. **21**, 787 (1933).
- [3] H. London and F. London, Proc. Roy. Soc. (London) **A149**, 71 (1935); Physica **2**, 341 (1935).
- [4] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **20**, 1064 (1950).
- [5] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [6] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Physik B Condensed Matter **64** 189 (1986).
- [7] Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, and H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. **128**, 10012 (2006).
- [8] Y. Mizuguchi, H. Fujihisa, Y. Gotoh, K. Suzuki, H. Usui, K. Kuroki, S. Demura, Y. Takano, H. Izawa, and O. Miura, Phys. Rev. B **86**, 220510 (2012).
- [9] Y. Mizuguchi, S. Demura, K. Deguchi, Y. Takano, H. Fujihisa, Y. Gotoh, H. Izawa, and O. Miura, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 114725 (2012).
- [10] Y. Mizuguchi, J. Phys. Chem. Solids (2014).

- [11] V. S. Tanryverdiev, O. M. Aliev, and I. I. Aliev, *Inorg. Mater* **31** 1497 (1995).
- [12] H. Usui, K. Suzuki, and K. Kuroki, *Phys. Rev. B* **86**, 220501 (2012).
- [13] T. Takimoto, T. Hotta, and K. Ueda, *Phys. Rev. B* **69**, 104504 (2004).
- [14] D. J. Scalapino, E. Loh, Jr., and J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **34**, 8190 (1986).