金属・超伝導界面における θ パラメータ表示された Usadel 方程式の解

岡田 大 (Okada Masaru)

October 24, 2025

Abstract

超伝導・金属の界面における状態密度を調べる。空間座標 $x < 0$ の領域で超伝導、$x > 0$ の領域で金属であるような界面について考察する。

1 θ パラメータ表示

一様な状態において、南部空間における準古典グリーン関数は

$$\begin{aligned}\check{g}_{\omega_n} &= \begin{pmatrix} g_{\omega_n} & f_{\omega_n} \\ -f^{\dagger}_{\omega_n} & -g_{\omega_n} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}} \begin{pmatrix} \omega_n & -i\Delta \\ i\Delta^* & -\omega_n \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{1}$$

ここで g_{ω_n} を $\cos\theta$ で置き換えると、$\theta = \theta(x) = \arctan\dfrac{\Delta(x)}{\omega_n}$ となり、

$$\begin{aligned}\check{g} &= \begin{pmatrix} \cos\theta & -i\sin\theta \\ i\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \\ &= \check{\tau}_3\cos\theta + \check{\tau}_2\sin\theta \end{aligned} \tag{2}$$

ただし $\check{\tau}$ はパウリ行列であり、Δ は実数とした。このとき、Usadel 方程式は以下のようになる。

$$D\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} = 2\omega_n\sin\theta \tag{3}$$

2 無限遠での境界条件

Usadel 方程式は次のように書き換えることができる。

$$\frac{\partial}{\partial x}\Big[\frac{D}{2}\Big(\frac{\partial\theta}{\partial x}\Big)^2 + 2\omega_n\cos\theta\Big] = 0 \tag{4}$$

簡単のため、定数 A を導入すると、

$$\frac{\partial\theta}{\partial x} = \pm\sqrt{\frac{2A}{D} - \frac{4\omega_n}{D}\cos\theta} \tag{5}$$

2.1　超伝導体極限

$x \to -\infty$ の極限において、この領域はバルクの超伝導状態であり、一様な状態とみなすことができる。したがって、境界条件は

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \frac{\partial \theta}{\partial x}\Big|_{x\to-\infty} & = & 0 \\ \lim_{x\to-\infty}\theta & = & \arctan\frac{\Delta_0}{\omega_n} \quad = \quad \Theta_{\omega_n} \end{array} \right. \tag{6}$$

となる。ここで Θ_{ω_n} を定義した。これらの条件から、 A の値が $A = \frac{2\omega_n^2}{\sqrt{\omega_n^2+\Delta_0^2}}$ と決まる。表現を簡単にするため、もう一度、定数 $B = \frac{2\omega_n}{A} = \frac{\sqrt{\omega_n^2+\Delta_0^2}}{\omega_n}$ を再定義してみよう。

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \pm\sqrt{\frac{4\omega_n}{DB}}\sqrt{1-B\cos\theta} \quad = \quad \pm\sqrt{\frac{4\omega_n}{DB}}\sqrt{1-B(1-2\sin^2\frac{\theta}{2})} \tag{7}$$

$$2\frac{\partial \theta}{\partial x} = \pm\sqrt{\frac{4\omega_n}{DB}}\sqrt{1-B}\sqrt{1+\frac{2B}{1-B}\sin^2\theta} \tag{8}$$

これを明示的に書くと、

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \pm\sqrt{\frac{\omega_n\left(\omega_n-\sqrt{\omega_n^2+\Delta_0^2}\right)}{D\sqrt{\omega_n^2+\Delta_0^2}}}\sqrt{1-\frac{2\sqrt{\omega_n^2+\Delta_0^2}}{\sqrt{\omega_n^2+\Delta_0^2}-\omega_n}\sin^2\theta} \tag{9}$$

したがって、この方程式は容易に解くことができ、その解は積分定数 C_S と第一種不完全楕円積分 $F(\theta,k) = \int_0^\theta \frac{d\theta'}{\sqrt{1-k^2\sin^2\theta'}}$ を用いて次のように表される。

$$F\left(\theta, \sqrt{\frac{2}{1-\cos\Theta_{\omega_n}}}\right) = \pm\frac{x}{2}\sqrt{\frac{\omega_n}{D}}\sqrt{\cos\Theta_{\omega_n}-1} + C_S \qquad (x<0) \tag{10}$$

2.2　常伝導金属極限

反対に、$x \to +\infty$ の極限は、常伝導金属 $(\Delta = 0)$ の領域に対応する。

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \frac{\partial \theta}{\partial x}\Big|_{x\to\infty} & = & 0 \\ \lim_{x\to\infty}\theta & = & 0 \end{array} \right. \tag{11}$$

このとき、パラメータ A は $A = 2\omega_n$ と決まる。

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \pm 2\sqrt{\frac{2\omega_n}{D}}\left|\sin\frac{\theta}{2}\right| \tag{12}$$

これは初等的な計算の範囲で解くことができる。

$$\mathrm{sgn}\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\,\ln\left(\tan\frac{\theta}{4}\right) = \pm 2x\sqrt{\frac{2\omega_n}{D}} + C_N \qquad (x>0) \tag{13}$$

ここで、複素関数 $\mathrm{sgn}(z)$ は $\mathrm{sgn}(z) = \frac{z}{|z|}$ と定義され、C_N は未定の定数である。

3　超伝導体・常伝導金属界面の条件

超伝導体側 $(x<0)$ と常伝導金属側 $(x>0)$ から、それぞれの x 微分は

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\theta_S}{\partial x} & = & \pm 2\sqrt{\dfrac{\omega_n}{D_S}}\sqrt{\cos\Theta_{\omega_n}-\cos\theta_S} & (x<0\ :\ \text{super}) \\ \\ \dfrac{\partial\theta_N}{\partial x} & = & \pm 2\sqrt{\dfrac{2\omega_n}{D_N}}\left|\sin\dfrac{\theta_N}{2}\right| & (x>0\ :\ \text{nomal}) \end{cases} \tag{14}$$

となる。$x=0$ の界面において、関数 θ は以下の境界条件を満たす。

$$\begin{cases} \gamma_0\xi_N\dfrac{\partial\theta_N}{\partial x}\Big|_{x\to+0} & = & \lim\limits_{x\to\pm0}\sin(\theta_S-\theta_N) \\ \\ \gamma_1\xi_N\dfrac{\partial\theta_N}{\partial x}\Big|_{x\to+0} & = & \xi_S\dfrac{\partial\theta_S}{\partial x}\Big|_{x\to-0} \end{cases} \tag{15}$$

$\gamma_{0,1}$ は近接効果のパラメータ、$\xi_{N,S}=\sqrt{\dfrac{D_{N,S}}{2\pi\Delta_0}}$ である。未知数である $\theta_{S0}=\lim\limits_{x\to-0}\theta_S$ と $\theta_{N0}=\lim\limits_{x\to+0}\theta_N$ は、以下の連立方程式を満たす。

$$\begin{cases} \gamma_0\sqrt{\dfrac{\omega_n}{\Delta_0}}\sin\dfrac{\theta_{N0}}{2} & = & \sin(\theta_{S0}-\theta_{N0}) \\ \\ \gamma_1\sin\dfrac{\theta_{N0}}{2} & = & \sqrt{\cos\Theta_{\omega_n}-\cos\theta_{S0}} \end{cases} \tag{16}$$

ここで C_N は複素数であるため、位相因子 $\mathrm{sgn}\Big(\sin\dfrac{\theta_{N0}}{2}\Big)$ は C_N に繰り込まれ、また $\gamma_{0,1}$ も 1 のオーダーの因子として繰り込まれている。$\gamma_B=\dfrac{R_B}{\rho_N\xi_N}$, $\gamma=\dfrac{\rho_S\xi_S}{\rho_N\xi_N}$

4　数値計算

まず、ソルバーに複素数 $\gamma_{0,1}$ を与え、方程式を解く。θ_{N0} は、以下の超越方程式を解くことによって得られるはずである。

$$\theta_{N0}=\arccos\Big(\cos\Theta_{\omega_n}-\gamma_1^2\sin^2\frac{\theta_{N0}}{2}\Big)-\arcsin\Big(\gamma_0\sqrt{\frac{\omega_n}{\Delta_0}}\sin\frac{\theta_{N0}}{2}\Big) \tag{17}$$

この超越方程式が解けたなら、次に θ_{S0} を解く。これは以下のように決定される。

$$\theta_{S0}=\arccos\Big(\cos\Theta_{\omega_n}-\gamma_1^2\sin^2\frac{\theta_{N0}}{2}\Big) \tag{18}$$

C_N と C_S も同時に定まる。

$$\begin{cases} C_N & = & \ln\Big(\tan\dfrac{\theta_{N0}}{4}\Big) \\ \\ C_S & = & F\Big(\theta_{S0},\sqrt{\dfrac{2}{1-\cos\Theta_{\omega_n}}}\Big) & = & \theta_{S0}\displaystyle\int_0^1\dfrac{dx}{\sqrt{1-\dfrac{2\sin^2(\theta_{S0}x)}{1-\cos\Theta_{\omega_n}}}} \end{cases} \tag{19}$$

楕円積分の逆関数は、ヤコビ (Jacobi) の楕円関数を用いて表すことができる。ヤコビの振幅関数 $\mathrm{am}(z,m)$ は、次のように定義される。

$$F(\mathrm{am}(x,k^2),k)=x \tag{20}$$

言い換えれば、次のように書ける。

$$x = \int_0^{\mathrm{am}(x,m)} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - m\,\sin^2 x}} \tag{21}$$

そして、ヤコビの楕円関数 sn, cn, dn は、それぞれ次のように定義される。

$$\begin{cases} \mathrm{sn}(x,m) &= \sin[\mathrm{am}(x,m)] \\ \mathrm{cn}(x,m) &= \cos[\mathrm{am}(x,m)] \\ \mathrm{dn}(x,m) &= \sqrt{1 - m\,\sin^2[\mathrm{am}(x,m)]} \end{cases} \tag{22}$$

sn, cn, dn はランベルト (Lambert) 級数展開の形で書き直すことができる。

解を陽に書き下すために、フェルミエネルギーから測った状態密度 (DOS) をヤコビの楕円関数を用いて表現することができる。

$$\begin{aligned} &-\mathrm{Im}[\cos\theta_{\omega_n}(x)] \\ &= \begin{cases} -\mathrm{Im}\Big[\mathrm{cn}\Big(\dfrac{x}{2}\sqrt{\dfrac{\omega_n}{D}}\sqrt{\cos\Theta_{\omega_n} - 1} + C_S\ ,\ \dfrac{2}{1 - \cos\Theta_{\omega_n}}\Big)\Big] & (x < 0\ :\ \mathrm{super}) \\ -\mathrm{Im}\Big(\cos\Big\{4\mathrm{arctan}\Big[\exp\Big(2x\sqrt{\dfrac{2\omega_n}{D}} + C_N\Big)\Big]\Big\}\Big) & (x > 0\ :\ \mathrm{nomal}) \end{cases} \end{aligned} \tag{23}$$

特に、 $i\omega_n \to E + i0^+$ という解析接続を行った後では、ZEDOS ($E = 0$ での状態密度) を描画することができる。

$$-\mathrm{Im}[\cos\theta(x, E=0)] = \begin{cases} -\mathrm{Im}\Big[\mathrm{cn}\Big(ix0^+ + C_S\ ,\ 2\Big)\Big] & (x < 0\ :\ \mathrm{super}) \\ -\mathrm{Im}\Big(\cos\Big\{4\mathrm{arctan}\Big[\exp\Big(x0^+ + C_N\Big)\Big]\Big\}\Big) & (x > 0\ :\ \mathrm{nomal}) \end{cases} \tag{24}$$

5 ルンゲ=クッタを利用して常微分方程式のまま解く

5.1 問題設定

解析接続された Usadel 方程式は次のようになる。

$$\pi\theta''(x,E) + iE\sin\theta(x,E) = 0 \tag{25}$$

ここでプライム ($'$) は $\partial/\partial x$ であり、変数はそれぞれ規格化された距離とエネルギー $x/\xi \to x$、$E/\Delta_0 \to E$ である。ここで、$\theta(x,E) = \theta_r(x,E) + i\theta_i(x,E)$ として、複素関数をそのまま扱うことを避けて、実部と虚部に分ける。このとき方程式は 2 つに分離される。

$$\begin{cases} \pi\theta_r''(x,E) - E\cos\theta_r(x,E)\,\sinh\theta_i(x,E) &= 0 \\ \pi\theta_i''(x,E) + E\sin\theta_r(x,E)\,\cosh\theta_i(x,E) &= 0 \end{cases} \tag{26}$$

この連立方程式は、物理的な考察から漸近条件が次のように課される。

$$
\begin{cases}
\theta_r(\infty, E) = 0, & \theta_i(\infty, E) = 0 \\
\theta_r(-\infty, E) = 0, & \theta_i(-\infty, E) = \mathrm{arctanh}\dfrac{1}{E}
\end{cases}
\tag{27}
$$

（超伝導体と常伝導体の）界面 ($x = \pm 0$) では境界条件として次が成り立つ。

$$
\begin{cases}
\gamma\theta_r'(+0, E) = \theta_r'(-0, E) \\
\gamma\theta_i'(+0, E) = \theta_i'(-0, E)
\end{cases}
,
\tag{28}
$$

$$
\begin{cases}
\gamma_B\theta_r'(+0, E) = \sin\Big[\theta_r(-0, E) - \theta_r(+0, E)\Big]\cosh\Big[\theta_i(-0, E) - \theta_i(+0, E)\Big] \\
\gamma_B\theta_i'(+0, E) = \cos\Big[\theta_r(-0, E) - \theta_r(+0, E)\Big]\sinh\Big[\theta_i(-0, E) - \theta_i(+0, E)\Big]
\end{cases}
\tag{29}
$$

ここで γ,γ_B は近接効果を特徴付けるパラメータであり、問題に合わせて手で与える定数である。

5.2 戦略

以下では簡単のためにエネルギーを固定して、関数の中の E を表示しない。

まず、古典的な 4 次の Runge-Kutta（RK4）を界面から十分離れた位置[*1] $x = -L$ から界面に向かって走らせる。ここで漸近条件から 0 階導関数の初期値は決定しているので、1 階導関数の値 $\theta'(-L)$ さえ決まれば、$x = -0$ までの関数の値は逐次決定される。$x = -0$ から $x = +0$ へ接続するには界面における境界条件を解く必要がある。$x = -0$ における値が既知であるとして、$\theta_r(+0)$ に関する次のような 1 元の方程式へ還元される。簡単のために $t = \theta_r(-0) - \theta_r(+0)$ と置換すると、

$$
\tan(t) = a\ \tanh\left\{\mathrm{arccosh}\left[\frac{b}{\sin(t)}\right]\right\}
\tag{30}
$$

ここで表記の簡単のためにそれぞれ $a = \dfrac{\theta_r'(-0)}{\theta_i'(-0)}$ 、$b = \dfrac{\gamma_B}{\gamma}\theta_i'(-0)$ と置いた。この方程式の解は次で与えられる。

$$
\theta_r(+0) = \theta_r(-0) + \arcsin\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{b^2}{a^2} - \frac{\sqrt{a^4b^4 - 2a^4b^2 + a^4 + 2a^2b^4 + 2a^2b^2 + b^4}}{a^2} + b^2 + 1\right)}
\tag{31}
$$

この解より、境界条件からすぐに得られる次の関係式[*2]

$$
\theta_i(+0) = \theta_i(-0) - \mathrm{arcsinh}\left\{\frac{\gamma_B}{\gamma}\frac{\theta_i'(-0)}{\cos\left[\theta_r(-0) - \theta_r(+0)\right]}\right\},
\tag{34}
$$

[*1] 当然、$L \to \infty$ で厳密であるが、RK4 で逐次積分していくことを考えるので、途中に不安定な点が存在すると途端に解は信頼性を失ってしまう。今回、解くべき方程式は非線形な連立微分方程式であり、途中で不安定になることは簡単に予想できる。従って、$x = -L$ から界面 $x = -0$ へたどり着くまで不安定な点が出ない範囲の大きさの L を用意する必要があり、この方程式を解く人が自分でチューニングして十分大きくてかつ不安定にならない L を決めるしかない。

[*2] 逆双曲線関数は、実関数の範囲内で全く同値な式

から $\theta_i(+0)$ も同時に求めることができる。

さらに境界条件から $\theta'(+0)$ の値も分かるので、$x=+0$ での関数の値は全て得られる。この値を初期値として RK4 を走らせることで、$x>0$ の場合も全く同様の流れで $x=+L$ の値まで求まる。

未知の定数 c_1、c_2 を用いて整理する。初期値 $\theta'(-L)=c_1+ic_2$ を手で与えて RK4 で $x=-0$ まで走らせる。境界条件が陽に解けたので、$x=-0$ での値をそのまま代入するだけで $x=+0$ での値が求まる。$x=+0$ での値を初期値として、ここから RK4 で出発して $\theta(L)$ を得る。この $\theta(L)$ が最小[*3]になるような (c_1,c_2) を探す。

このときの $\theta(+L)$ は、$x=-L$ における初期値 (c_1,c_2) が決まれば定まるものとして、それを関数 f とみなせば

$$\left|\theta_r(L)+i\theta_i(L)\right|^2=f(c_1,c_2) \tag{35}$$

の最小化問題である。

5.3 手順

- まずパラメータ γ、γ_B を入力する。
- 初期値 (c_1,c_2) を振って、$x=-L$ から界面 $x=-0$ に向かって RK4 を解く。
- 境界条件を満たすように $x=+0$ での値を求める。
- $x=+0$ での値を初期値として $x=L$ に向かって RK4 を回す。
- 得られた $\theta(L)$ から $\left|\theta(L)\right|^2=f(c_1,c_2)$ を各 (c_1,c_2) の場合で計算する。
- この $f(c_1,c_2)$ が最小になるような初期値 (c_1,c_2) を用いて計算されたものが解である。
- これを各 E について繰り返す。

$$\mathrm{arcsinh}(y)=\ln\left(y+\sqrt{1+y^2}\right) \tag{32}$$

$$\mathrm{arctanh}\frac{1}{E} \;=\; \mathrm{arccoth}(E)=\frac{1}{2}\ln\frac{1+E}{1-E} \tag{33}$$

を数値計算では用いる。

[*3] 厳密には $\lim_{L\to\infty} f(c_1,c_2)=0$ である。