

修士論文

磁気多極子秩序と共に存する超伝導の研究

京都大学大学院理学研究科
物理学・宇宙物理学専攻 凝縮系理論グループ
角田 峻太郎

平成 29 年 1 月 26 日

概要

電気伝導などの物質の伝導現象は主に電子が担っている。電子の持つ自由度には電荷とスピンがあることは言うまでもないが、近年の凝縮系物理学では「多極子」という固体内の電子のミクロな自由度が注目を集めている。多極子は偶奇のパリティを持ち、特に偶パリティ多極子に関しては重い電子系の分野で研究が進められてきた。一方で、空間反転対称性を自発的に破る奇パリティ多極子が伝導現象などに果たす役割が注目され始めており、現在、新学術領域“J-Physics”をはじめとして、理論・実験の両面から精力的に研究が行われている。また、磁性と共に超伝導も近年の物性物理学における重要なテーマの一つである。このような超伝導は強磁性相内で超伝導転移する UGe_2 , URhGe , UCoGe や、反強磁性と共に超伝導を示す UPd_2Al_3 , UNi_2Al_3 などの物質で見られ、磁性相での超伝導の発現機構およびその共存相の性質は非常に興味深く、注目を集めている。

こうした背景に刺激されて、本論文では磁気多極子と共に超伝導についての研究を行う。その結果、磁気多極子との共存相に特有の様々な超伝導状態が見られることを示す。構成は以下の通りになっている。まず第1章で本論文で前提とする背景知識と目的を説明したあと、第2章から主要な解析結果を見る。第2章ではミニマルモデルとして1次元ジグザグ格子を採用する。磁気单極子・磁気双極子・磁気四極子という3つの磁気多極子状態の中での超伝導状態を調べ、それぞれBCS状態・PDW状態・FFLO状態が実現することを示す。第3章では今回のテーマの対象となりうる候補物質として Sr_2IrO_4 を取り上げ、 $-++-$ と $-+-+$ という磁気秩序と共に超伝導状態の性質を見る。結果として、磁気八極子に分類される $-++-$ 秩序内では対称性に守られた非自明な超伝導ノード構造が現れ、磁気四極子に分類される $-+-+$ 秩序内ではやはり FFLO 超伝導が発現しうることを示す。最後に第4章で、本論文のまとめを行う。

目次

概要	i
-----------	---

第1章 背景と目的	1
1.1 空間反転対称性の破れた系	1
1.1.1 反対称スピン軌道相互作用	2
1.1.2 局所的な空間反転対称性の破れた系	5
1.1.3 磁場中の超伝導状態	6
1.2 多極子	9
1.2.1 多極子の定義	10
1.2.2 奇パリティ多極子	11
1.3 超伝導対称性の分類	14
1.3.1 点群の既約表現によるギャップ関数の分類	14
1.4 本論文の目的および構成	17
第2章 1次元ジグザグ格子において磁気多極子と共に存する超伝導	19
2.1 モデルと手法	19
2.1.1 モデル	20
2.1.2 平均場理論	21
2.2 多極子への分類	23
2.2.1 磁気双極子	24
2.2.2 磁気四極子	25
2.2.3 磁気单極子	25
2.2.4 補足	26
2.3 電子構造と超伝導状態	26
2.3.1 エネルギースペクトル	26
2.3.2 磁気多極子状態特有のバンド構造	27
2.3.3 補足：バンドの縮退	28
2.3.4 超伝導状態	29
2.4 磁気单極子状態における BCS 超伝導	30
2.5 磁気双極子状態における PDW 超伝導	30

2.5.1	相図	31
2.5.2	トポロジカル超伝導	32
2.6	磁気四極子状態における FFLO 超伝導	35
2.6.1	T - μ 相図	35
2.6.2	凝縮エネルギーと状態密度	36
2.7	結論	38
第 3 章 Sr_2IrO_4 において磁気多極子と共存する超伝導		40
3.1	物質の背景	40
3.1.1	電子ドープした Sr_2IrO_4 における d 波ギャップ	41
3.1.2	結晶構造	42
3.1.3	磁気構造	43
3.2	モデルと手法	43
3.2.1	モデル	44
3.2.2	平均場理論	46
3.2.3	線形化 BdG 方程式	49
3.2.4	小群に基づいた超伝導ギャップの分類	49
3.3	多極子への分類	54
3.3.1	$- + + -$ 秩序の解析	54
3.3.2	$- + - +$ 秩序の解析	55
3.4	$- + + -$ 状態における非自明なノード構造	56
3.4.1	群論による超伝導ギャップの分類	56
3.4.2	数値計算の結果	58
3.5	$- + - +$ 状態における FFLO 超伝導	59
3.5.1	電子構造	59
3.5.2	FFLO 超伝導	61
3.6	結論	63
3.7	付録	63
3.7.1	補足：小群に基づいた超伝導ギャップの分類	63
3.7.2	$- + + -$ 状態における群論の結果の例外	66
3.7.3	$- + + -$ 状態における対称性に守られた 4 重縮退	67
第 4 章 総括		68
謝辞		69
参考文献		70
参考		75

第1章

背景と目的

本章では、本論文における研究の背景と目的について説明する。1.1節で空間反転対称性の破れた系について、特に反対称スピン軌道相互作用を軸に簡単なまとめを行う。1.2節では近年注目を集めている多極子の概念について説明し、いくつかの実験結果も紹介する。1.3節では、あまり一般には知られていない「空間群に基づく超伝導ギャップの分類」についてのイントロダクションを行う。1.4節でこれらの背景を踏まえて本論文の目的を述べる。

1.1 空間反転対称性の破れた系

1957年に発表された Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) 理論 [1] によって、超伝導は2つの電子が束縛状態を形成した Cooper 対の量子凝縮によって記述できることが分かった。BCS 理論では Cooper 対の内部自由度は考慮されていないが、実際には有限の内部自由度を持つ超伝導状態が存在する。例えば、Cooper 対が有限の相対角運動量を持つ異方的超伝導 [2]、有限の重心運動量を持つ Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) 超伝導 [3–5] などが挙げられる。これら内部自由度の顕在化は、系の対称性の破れに起因している。

物理学における重要な対称性の一つに、空間反転対称性がある。2004年に Bauer らが空間反転対称性の破れた結晶構造を持つ重い電子系超伝導体 CePt_3Si を発見したことを機に [6]、空間反転対称性の破れた系における超伝導の研究が盛んに行われるようになった。そこで本節では、空間反転対称性の破れの効果が物性にどのような影響を与えるかを説明する。結論から言うと、空間反転対称性の破れは「反対称スピン軌道相互作用」(antisymmetric spin-orbit coupling) を通じて物性に影響を与える。1.1.1節ではこの反対称スピン軌道相互作用について概観する。次に、結晶全体として大域的な空間反転対称性は保たれているが、ある原子を中心に考えると空間反転対称性が破れている「局所的な空間反転対称性の破れた系」について説明する(1.1.2節)。また、特に空間反転対称性のない超伝導体においての研究、特に磁場中の超伝導状態について簡単にレビューする(1.1.3節)。

1.1.1 反対称スピン軌道相互作用

通常用いられる反対称スピン軌道相互作用の表記とその一般的な性質について解説しておく。一般的に、反対称スピン軌道相互作用は第二量子化表現で以下のようなハミルトニアンで記述される。

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

ここで $c_{\mathbf{k}s}$ は波数 \mathbf{k} 、スピン s を持つ電子に対する消滅演算子であり、 $\boldsymbol{\sigma}$ は Pauli 行列のベクトル表示 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ である。ベクトル量 $\mathbf{g}(\mathbf{k})$ は g -ベクトルと呼ばれるもので、反対称スピン軌道相互作用を特徴付けるものである。代表的なものとしてよく知られているのが Rashba 型であり、その g -ベクトルは

$$\mathbf{g}(\mathbf{k}) = (k_y, -k_x, 0) \quad (1.2)$$

と表現される [7]。Rashba 型反対称スピン軌道相互作用は、例えば図 1.1 に示す CePt₃Si のように、 C_{4v} の点群に属する結晶で c 軸方向の鏡映対称性が破れた場合に現れる。

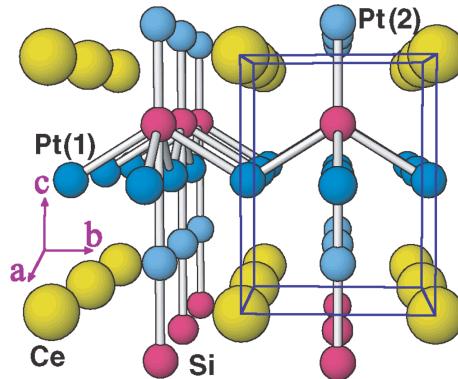


図 1.1 CePt₃Si の結晶構造 [6]。 c 軸方向の鏡映対称性が破れていることが分かる。

このように結晶の対称性が決まれば g -ベクトルの対称性も決まる。Rashba 型の他に有名なものとして、点群 T_d に属する結晶において現れる Dresselhaus 型 [8]

$$\mathbf{g}(\mathbf{k}) = (k_x(k_y^2 - k_z^2), k_y(k_z^2 - k_x^2), k_z(k_x^2 - k_y^2)) \quad (1.3)$$

などがある。いずれの場合にも、結晶構造の詳細によらず、 g -ベクトルは奇のパリティを持つ： $\mathbf{g}(-\mathbf{k}) = -\mathbf{g}(\mathbf{k})$ 。これは時間反転対称性による帰結であり、反対称スピン軌道相互作用と呼ばれる所以である。

反対称スピン軌道相互作用の微視的起源

反対称スピン軌道相互作用が生じる起源について議論しておこう。一般的によく用いられる説明としては、これは「電場中を走る電子に働く相対論効果」で理解される。空間反転対称性が破れた系においては、結晶内部に異方的な電場勾配 \mathbf{E} が生じる。電場中を速度 \mathbf{k}/m で等速運動する

電子を考え、それが静止系となるようにローレンツ変換をすると、電場が磁場に変換される。その磁場と電子スピンの結合エネルギーにより、電子には

$$H_{\text{Lorentz}} = -\frac{e}{2m^2}(\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \cdot \mathbf{S} \quad (1.4)$$

の相互作用が働く。簡単のため z 方向の電場 ($\mathbf{E} = E\hat{z}$) を考えることにすると、 $\mathbf{g}(\mathbf{k}) = (k_y, -k_x, 0)$ として、この相互作用は

$$H_{\text{Lorentz}} = -\frac{eE}{2m^2}\mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{S} \quad (1.5)$$

と書ける。この形式は Rashba 型の反対称スピン軌道相互作用そのものである。

非常にナイーブな理解としてはこれで良いが、実際にこの相互作用の大きさを見積もってみると、金属中の典型的な反対称スピン軌道相互作用の大きさよりも 5 衍も小さくなってしまうことが分かっている [9]。したがって、上記の説明は厳密には正しくない。より正確な説明としては、反対称スピン軌道相互作用は次の 3 つの過程から生まれる、と言うのが良い [9, 10] :

- (1) パリティが異なる軌道間の局所的混成
- (2) 原子間の飛び移りによるパリティが異なる軌道間の混成
- (3) 原子内の LS 結合

このうち (2) と (3) は空間反転対称性がある系にも存在する過程であり、(1) が空間反転対称性が破れた系に特有の過程である。

$s-p$ 電子系を例として、このメカニズムを模式的に示したものが図 1.2 である。図 1.2(a) は主として p_z 軌道からなる電子の局所的な波動関数を表している。 p_z 軌道は、(3) 原子内の LS 結合によって p_x , p_y 軌道と混成し(図中では簡単のため p_y 軌道を無視している)、(1) 空間反転対称性の破れに起因する奇パリティの結晶場によって s 軌道と混成する。ここで p_z 軌道と p_x 軌道が逆向きのスピンを持つことに注意しよう。このような局所的波動関数によって記述される電子は、(2) 原子間の $s-p$ 混成^{*1}を通じてスピン反転を伴う飛び移りをする[図 1.2(b)]。この飛び移りを運動量表示したものが Rashba 型の反対称スピン軌道相互作用となる。運動量に対する反対称性は、原子間 $s-p$ 混成が運動量に関して奇であることに由来している。

反対称スピン軌道相互作用による電子状態の変化

大域的な空間反転対称性が破れた系に現れる反対称スピン軌道相互作用による電子状態の変化について、Rashba 型の反対称スピン軌道相互作用 $\mathbf{g}(\mathbf{k}) = (\sin k_y, -\sin k_x, 0)$ を例にとり説明する。 xy 面での鏡映対称性が破れた 2 次元電子系を考える。この系のハミルトニアンは以下で与えられる：

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, s} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} + \alpha \sum_{\mathbf{k}, s, s'} \mathbf{g}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s'} \quad (1.6)$$

^{*1} この $s-p$ 混成が「波動関数の歪み」に対応する重要な役割を果たすが、これが上記の「電場中を走る電子に働く相対論効果」の描像では考慮されていなかった [9]。

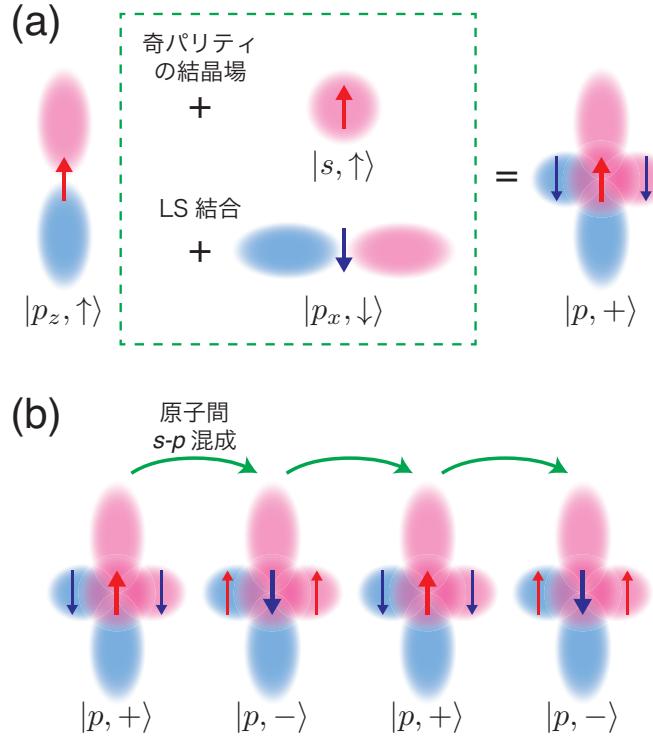


図 1.2 $s-p$ 電子系における Rashba 型スピン軌道相互作用の起源を示す模式図 [10]. (a) 主として p_z 軌道からなる電子の局所的な波動関数. (b) 原子間の $s-p$ 混成によるスピン反転を伴う飛び移り.

右辺第1項が運動エネルギー項、第2項が反対称スピン軌道相互作用項である。このハミルトンを行列表示して対角化することで、固有値

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

が得られる。 α により縮退が解け、エネルギーバンドが分裂する。この分裂したバンドのイメージを図 1.3 に示す。時間反転対称性が保存するため、 $\mathbf{k} = 0$ での縮退は残る [図 1.3(a)]. ここで注目すべき点は、スピンが各波数点で異なる量子化軸を持っていることである [図 1.3(b)]. これは、式 (1.6) を対角化するユニタリー変換がスピン量子化軸を $\mathbf{g}(\mathbf{k})$ 方向に変換させるためである。そのため、 g -ベクトルは波数 \mathbf{k} に依存した有効磁場とみなすことができる。

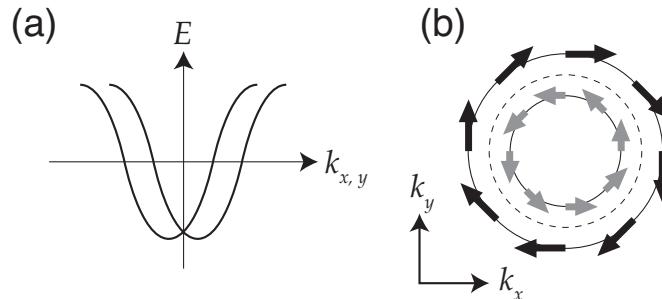


図 1.3 (a) Rashba 型の反対称スピン軌道相互作用によるバンド分裂。時間反転対称性により $\mathbf{k} = 0$ での縮退は残る。 (b) フェルミ面の様子。点線が $\alpha = 0$ のフェルミ面、実線が $\alpha \neq 0$ のフェルミ面である。矢印はフェルミ面上のスピンを表している。

次に、磁場中での結果について紹介する。磁場中ではハミルトニアン(1.6)に以下の Zeeman 項が加わることになる。

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

これによって、エネルギー分散は以下のように変化する。

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

磁場が加わったときのフェルミ面の変化を表したのが図 1.4 である。 z 軸方向の磁場 $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$ の場合、磁場と g -ベクトルは垂直になり、エネルギー(1.9)のルート内に磁場の 1 次の項は現れない。そのため、 z 軸方向の磁場下ではフェルミ面の分裂の大きさが少し変わるもの程度で、劇的な変化はない[図 1.4(a)]。一方、面内磁場[例えば x 方向の磁場 $\mathbf{H} = (H_x, 0, 0)$]の場合、磁場の 1 次の項が現れることでフェルミ面が非対称に変形する[図 1.4(b)]。

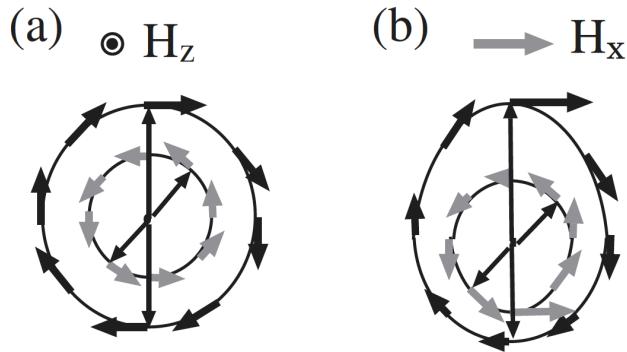


図 1.4 Zeeman 磁場がフェルミ面に及ぼす影響 [11]。 (a) z 軸方向に磁場をかけた場合。 (b) 面内方向に磁場をかけた場合。

1.1.2 局所的な空間反転対称性の破れた系

結晶構造

これまで、空間反転対称性のない系における反対称スピン軌道相互作用の起源や、それがもたらす電子状態について簡単に述べてきた。この研究分野では「大域的な空間反転対称性のない結晶」が多く対象とされてきたが、近年ではそれが拡張され、「局所的な空間反転対称性のない結晶」に関する研究が多く行われている。このような結晶では、結晶全体として空間反転対称性は保存されるが、結晶の一部ではそれが破れている。すなわち、ある原子を中心にして考えると空間反転対称性が破れている。このような結晶では単位格子内に複数の原子が存在して、副格子の自由度が現れる。

局所的な空間反転対称性が破れた結晶構造の具体例として、ジグザグ格子、ハニカム格子、多層系、ダイヤモンド格子などが挙げられる。図 1.5 は 1 次元ジグザグ格子と 2 次元ハニカム格子の結晶構造を示している。これらの結晶構造では、大域的な空間反転中心に原子がないが、空間反転中心を各原子に持ってきた場合には空間反転対称性が破れている。

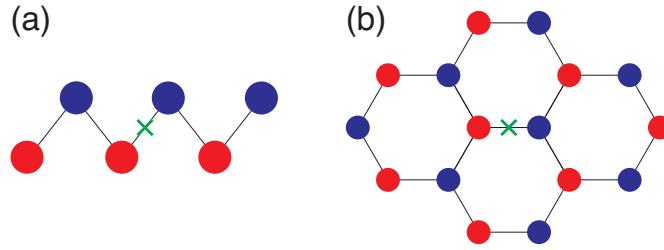


図 1.5 局所的な空間反転対称性を持つ結晶の例：(a) 1次元ジグザグ格子，(b) 2次元ハニカム格子。赤丸と青丸は単位格子内で異なる副格子を，バツ印は空間反転中心を表している。

反対称スピン軌道相互作用

局所的な空間反転対称性を破る系に現れる反対称スピン軌道相互作用について説明する。例として、図 1.6 に示すような二層系を考えよう。空間反転中心は A 層と B 層の中間に位置している。各層に注目すると、A 層を基準に見たときは上側に層がなく下側に層がある。一方 B 層を基準に見たときは逆に下側に層がなく上側に層がある。したがって各層では c 軸方向の鏡映対称性が破れているため、(各層が点群 C_{4v} に属する結晶とすると) Rashba 型の反対称スピン軌道相互作用が働くことになる。しかし、系全体では空間反転対称性が保たれるため、この反対称スピン軌道相互作用は和がゼロになるように層間で逆符号を取る。このように、二層系では「スタッガードな反対称スピン軌道相互作用」が現れることになる。一般に、大域的な空間反転対称性のない結晶に現れる反対称スピン軌道相互作用は空間的に一様になるが、局所的に空間反転対称性が破れた結晶に現れる反対称スピン軌道相互作用は空間的に非一様となり副格子に依存する。



図 1.6 二層系を表した図。大域的な空間反転中心が A 層と B 層の中間に存在している（バツ印）。各層で空間反転対称性が破れているが、系全体では空間反転対称性が保存されているため、層間でスタッガードな反対称スピン軌道相互作用が働くことになる。

1.1.3 磁場中の超伝導状態

大域的な空間反転対称性の破れた系

近年の理論的研究によって、空間反転対称性の破れた超伝導体が様々な非一様超伝導状態の舞台になっているということが分かってきた [12]。大域的な空間反転対称性の破れた Rashba 系において、面内に磁場をかけた場合を考えよう。このとき、フェルミ面は図 1.4(b) に示したように

非対称に歪むこととなる。そのため、同一バンド内でのフェルミ面近傍で \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ の対形成ができなくなり、一般的な BCS 理論は成り立たなくなる。しかし、有限の重心運動量 \mathbf{q} を持つ対 (\mathbf{k} と $-\mathbf{k} + \mathbf{q}$) によって新たに Cooper 対を組むことが可能となり、FFLO 状態が実現する [13–15]。バンド $E_+(\mathbf{k})$ と $E_-(\mathbf{k})$ ではフェルミ面のシフト方向が逆になるため、Cooper 対の重心運動量として \mathbf{q} と $-\mathbf{q}$ の 2 つが考えられるが、フェルミ面での状態密度が大きい方のバンドのシフトに対応する \mathbf{q} が選ばれることとなる。このように、特に空間反転対称性が破れた系において Cooper 対が有限の重心運動量を持つ超伝導状態は、ヘリカル超伝導状態と呼ばれる。その秩序変数は実空間表示で

$$\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0 e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (1.10)$$

と書くことができる。

Agterberg と Kaur は、Rashba 型反対称スピン軌道相互作用を持つ超伝導体において、面内磁場に誘起される FFLO (ヘリカル) 状態の安定性を議論した [16]。彼らにより計算された温度-磁場相図を図 1.7 に示す。バンド $E_+(\mathbf{k})$ と $E_-(\mathbf{k})$ の間の状態密度の差 δN が大きくなると、ヘリカル状態の占める領域が広くなっていることが分かる。また、重心運動量 \mathbf{q} を持つ対と $-\mathbf{q}$ を持つ対どちらも超伝導になっている状態「Stripe 状態」が安定な領域も示されているが、Stripe 状態は δN の増大とともに不安定になっていることが分かる。

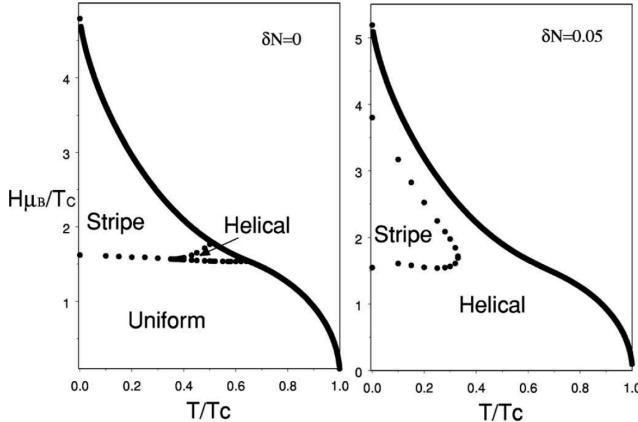


図 1.7 Rashba 型反対称スピン軌道相互作用を持つ超伝導体における、面内磁場中の超伝導相図 [16]。左図がバンド $E_+(\mathbf{k})$ と $E_-(\mathbf{k})$ の状態密度の差 δN がゼロの場合、右図が $\delta N = 0.05$ の場合の結果である。“Uniform” は空間的に一様な状態、“Helical” はヘリカル状態、“Stripe” は重心運動量 \mathbf{q} の Cooper 対と $-\mathbf{q}$ の対がどちらも超伝導に寄与している状態を表す。

このように、大域的な空間反転対称性が破れた超伝導体に磁場をかけると、FFLO 超伝導が実現するだろうという提案が多くの理論研究でなされてきた。しかし実際には、FFLO の秩序変数は渦糸状態に隠されてしまうことが分かっており [17, 18]、有限の磁場下では渦糸の問題を無視できないため、実験での観測は難しいと考えられている。したがって、外部磁場を用いずに FFLO 超伝導を観測する方法の開発が期待されている。

局所的な空間反転対称性の破れた系

一方、局所的に空間反転対称性が破れた系では、磁場の向きに応じてペア密度波 (pair-density-wave, PDW) 状態 [19] や複素ストライプ状態 [20] が安定化しうることが分かっている。本研究 (2.5節) でも取り扱う PDW 状態について、メカニズムを含めて簡単に説明しておこう。

再び二層系を例にとり、まずはゼロ磁場中での超伝導秩序変数について考えてみる。各層で空間反転対称性が破れていることから、偶パリティのスピン一重項超伝導 [秩序変数 $\psi(\mathbf{k})$] と奇パリティのスピン三重項超伝導 [秩序変数 $\mathbf{d}(\mathbf{k})$] の混成が許される。このとき、自由度として両者の間の相対位相 ϕ が残るが、これは反対称スピン軌道相互作用 α の符号により決定され、

$$\phi = \begin{cases} 0 & \alpha > 0 \\ \pi & \alpha < 0 \end{cases} \quad (1.11)$$

となることが分かっている [21]。既に述べたように二層系での反対称スピン軌道相互作用は上層と下層で逆符号になっているので、例えば上層において秩序変数が $\Delta_1 = i[\psi(\mathbf{k})\sigma_0 + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y$ で記述されたとき、下層では $\Delta_2 = i[\psi(\mathbf{k})\sigma_0 - \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]\sigma_y$ が最も安定な状態になる。

こういった状況で、超伝導秩序変数の層依存性を考えてみよう。簡単のため、層間の飛び移り t_{\perp} が 0 の極限を考えてみる。このとき各層は完全に独立しているため、秩序変数の層間の位相差 θ は自由な値を取ることができる [図 1.8(a)]。次に、 $t_{\perp} \neq 0$ の場合を考える。この場合、層間の Josephson 結合により、超伝導秩序変数の支配的な成分を層間で揃えた状態が安定になる。したがって、スピン一重項超伝導が支配的な場合には図 1.8(b) の状態、スピン三重項超伝導が支配的な場合には図 1.8(c) の状態が安定になる。

次に、この二層系に対して、面に (反対称スピン軌道相互作用に) 垂直な磁場をかけた場合を考える。このとき、超伝導体の凝縮エネルギー (正常状態と超伝導状態の自由エネルギーの差 $\Delta\Omega = \Omega_S - \Omega_N$) に次の項が加わることになる。

$$\begin{aligned} \Delta\Omega_H &= \int_0^H dH' [M_N(H') - M_S(H')] \\ &= \int_0^H dH' [\chi_N(H') - \chi_S(H')] H' \end{aligned} \quad (1.12)$$

ここで、 $M_N (\chi_N)$, $M_S (\chi_S)$ はそれぞれ正常状態、超伝導状態における磁化 (スピン感受率) である。したがって、正常状態と超伝導状態のスピン感受率の差が小さいほど安定化する方向にある。局所的な空間反転対称性が破れた多層系超伝導体におけるスピン感受率は、Maruyama らによつて既に計算されており、

- 図 1.8(b) の秩序変数構造の場合： χ_S/χ_N は反対称スpin軌道相互作用の大きさに応じて 0 から 1 の間の値をとる。
- 図 1.8(c) の秩序変数構造の場合： χ_S/χ_N は反対称スpin軌道相互作用の大きさに依存せず 1 をとる。

という結果になる [22]。図 1.8(b) の状態のときには $\chi_S < \chi_N$ となるため磁場により超伝導が破

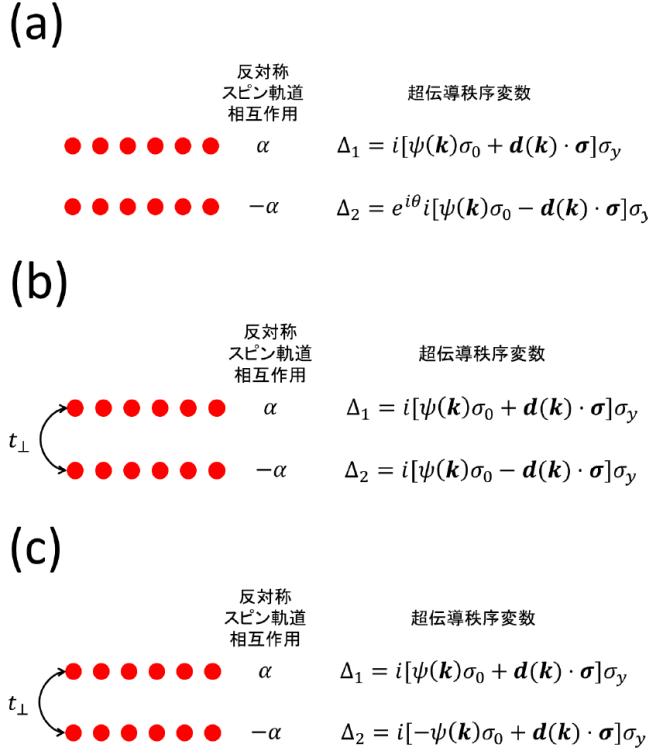


図 1.8 二層系超伝導体における超伝導秩序変数の層依存性 [21]. (a) $t_{\perp} = 0$ の場合. (b, c) $t_{\perp} \neq 0$ の場合. (b) はスピン一重項成分が支配的な場合, (c) はスピン三重項成分が支配的な場合である.

壊される (Pauli 常磁性対破壊効果) が, 図 1.8(c) の状態のときには $\chi_S = \chi_N$ となるため超伝導は破壊されない.

以上の結果を, スピン一重項超伝導が支配的な場合についてまとめよう. ここで注意すべき重要な点は, 上記のスピン感受率の結果は, スpin一重項超伝導とスpin三重項超伝導の混成度合い (どちらが支配的か) によらず, 秩序変数の層依存性だけで決まっていることである [22]. したがって, ゼロ磁場では図 1.8(b) の状態が安定となっていたが, 面直磁場中では超伝導が破壊されにくい図 1.8(c) の状態が実現すると考えられる. 後者の状態は, スpin一重項成分だけに注目すると上層で $\psi(\mathbf{k})$, 下層で $-\psi(\mathbf{k})$ となっており, 秩序変数が原子スケールで変調しているようにみなすことができる. このような超伝導状態を PDW 状態と呼んでいる. 多層系においては, 特に局所的な空間反転対称性の破れが顕在化する $\alpha/t_{\perp} \gtrsim 1$ のパラメーター領域で PDW 状態が安定化することが分かっている [19].

1.2 多極子

近年注目を集める「多極子」という固体内の電子のミクロな自由度について説明しよう. 原子に束縛された d 電子や f 電子の持つ軌道角運動量はスpinと結合して全角運動量になり, 結晶中では周囲の影響によって縮退が解け, 多極子に変わる. すなわち, スpin自由度による磁荷分布の異方性, 軌道自由度による電荷・磁荷分布の異方性は多極子という概念によって統一的に記述

することができ、電荷分布の異方性は電気多極子、磁荷分布の異方性は磁気多極子と呼ばれる。

1.2.1 多極子の定義

電荷・磁荷分布を特徴付けるためには、電荷分布 $\rho_e(\mathbf{r})$ と磁荷分布 $\rho_m(\mathbf{r})$ を球面調和関数 $Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}})$ に射影して、その歪み具合を計るのがよい。ここで、 \mathbf{r} は磁性イオンの中心を原点とする空間座標、 $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$ はその単位ベクトル（角度成分）である。電気多極子モーメント $Q_{l,m}$ および磁気多極子モーメント $M_{l,m}$ を以下のように定義する。

$$Q_{l,m} \equiv \int d\mathbf{r} r^l Z_{l,m}(\hat{\mathbf{r}})^* \rho_e(\mathbf{r}) \quad (1.13a)$$

$$M_{l,m} \equiv \int d\mathbf{r} r^l Z_{l,m}(\hat{\mathbf{r}})^* \rho_m(\mathbf{r}) \quad (1.13b)$$

ここで $Z_{l,m}(\hat{\mathbf{r}})$ は Racah の規格化を行った球面調和関数 $\sqrt{4\pi/(2l+1)}Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}})$ である。また、球面調和関数の位相として、 $Z_{l,m}(\hat{\mathbf{r}})^* = (-1)^m Z_{l,-m}(\hat{\mathbf{r}})$ を満たす定義を用いる (Condon-Shortley 位相)。式 (1.13)において、 l を多極子のランクと呼ぶ。多極子は l の値に応じて 2^l 極子と名前が付いている。つまり、 $l = 0$: 単極子 (monopole), $l = 1$: 双極子 (dipole), $l = 2$: 四極子 (quadrupole), $l = 3$: 八極子 (octupole), $l = 4$: 16 極子 (hexadecapole), $l = 5$: 32 極子 (dotriacontapole), … といった具合である。

空間反転 I に関する $\rho_e(\mathbf{r})$ と $\rho_m(\mathbf{r})$ の性質

$$\rho_e(\mathbf{r}) \xrightarrow{I} \rho_e(-\mathbf{r}), \quad \rho_m(\mathbf{r}) \xrightarrow{I} -\rho_m(-\mathbf{r}) \quad (1.14)$$

および $Z_{l,m}(-\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^l Z_{l,m}(\hat{\mathbf{r}})$ を用いると、電気多極子 $Q_{l,m}$ はパリティ $(-1)^l$ 、磁気多極子 $M_{l,m}$ はパリティ $(-1)^{l+1}$ を持つことが分かる。系に空間反転対称性があるときには偶パリティの多極子、すなわち $l =$ (偶数) の電気多極子および $l =$ (奇数) の磁気多極子のみが有限になりうる。こういった偶パリティ多極子については、特に重い電子系の分野でよく研究が進められてきた。しかし近年では、局所的に反転対称性が破れた系における奇パリティ多極子の秩序が注目を集めている。このことについては 1.2.2 節で後述する。

多極子の量子力学的演算子

量子統計力学では、電荷・磁荷分布は分布の演算子の熱平均を考える必要がある。例えば、電荷分布の演算子は、 n 個の電子からの寄与を合わせて

$$\hat{\rho}_e(\mathbf{r}) = e \sum_{j=1}^n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (1.15)$$

で与えられる (各電子の座標 \mathbf{r}_j が演算子であることに注意)。関与する局在電子の多重項についての熱平均 $\langle \dots \rangle$ を用いて、電荷分布は $\rho_e(\mathbf{r}) = \langle \hat{\rho}_e(\mathbf{r}) \rangle$ と表される。これに応じて、電気多極子の演算子は式 (1.13a) より、

$$\hat{Q}_{l,m} \equiv \int d\mathbf{r} Z_{l,m}(\hat{\mathbf{r}})^* \hat{\rho}_e(\mathbf{r}) = e \sum_{j=1}^n r_j^l Z_{l,m}(\hat{\mathbf{r}}_j)^* \quad (1.16)$$

となる。詳細は省くが、磁気多極子の演算子も同様にして

$$\hat{M}_{l,m} = \mu_B \sum_{j=1}^n \left(\frac{2l_j}{l+1} + 2s_j \right) \cdot \nabla_j (r_j^l Z_{l,m}(\hat{\mathbf{r}}_j)^*) \quad (1.17)$$

で与えられる [23]。ここで、 l_j 、 s_j は各電子に作用する軌道角運動量演算子およびスピン演算子である。

こういった多極子モーメントの熱平均、すなわち基底多重項の波動関数に関する期待値を求めるためには一般に大変煩雑な計算が必要とされる。これを簡便に求める方法も存在するが、本論文の主旨からやややざれることに加え、既に優れたレビューも存在するため [24, 25]、ここでは省略することにする。

1.2.2 奇パリティ多極子

上記で述べたように、系に空間反転対称性があるときには偶パリティの多極子のみが現れる。しかし局所的に空間反転対称性の破れた系においては、偶パリティ多極子が単位格子内で反強的に並ぶことで奇パリティ多極子の秩序が現れうるということが、近年の理論研究 [26–33] によって指摘されている。例えば、図 1.9(a) のようなジグザグ格子における単位格子内の反強磁性モーメントは磁気四極子モーメントを誘起する [27, 31]。あるいは図 1.9(b) のように、Rashba 型反対称スピン軌道相互作用を持つ二層系において局所的な電気四極子モーメントが反強的に積み重なったものは電気八極子秩序とみなせる [28, 33]。特に前者の例については、本論文の第 2 章でも議論する。こういった強的な奇パリティ多極子状態においては、大域的な空間反転対称性が自発的に破れることによって非常に面白い物性が見られる [26–34]。

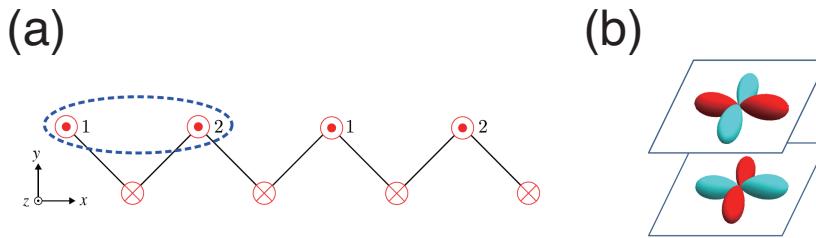


図 1.9 奇パリティ多極子の例。(a) ジグザグ格子における磁気四極子秩序 [31]。(b) Rashba 型反対称スピン軌道相互作用を持つ二層系における電気八極子秩序 [28]。

いくつかの実験結果も見ておこう。

Cr_2O_3 における奇パリティ磁気多極子

奇パリティ磁気多極子秩序を示す物質の具体例として Cr_2O_3 を取り上げよう。この物質は線形の電気磁気効果が見出された初めての物質である。 Cr_2O_3 はコランダムな結晶構造をとり、図 1.10(a) のように菱面体の単位格子内に 4 個の Cr イオンを含む。結晶構造が属す対称性は空間群 $R\bar{3}c$ (点群 D_{3d}) であり、空間反転対称性を持つ。しかし Cr サイトを中心に取ったときの点群は C_3 なので、局所的に空間反転対称性が破れている系になっている。

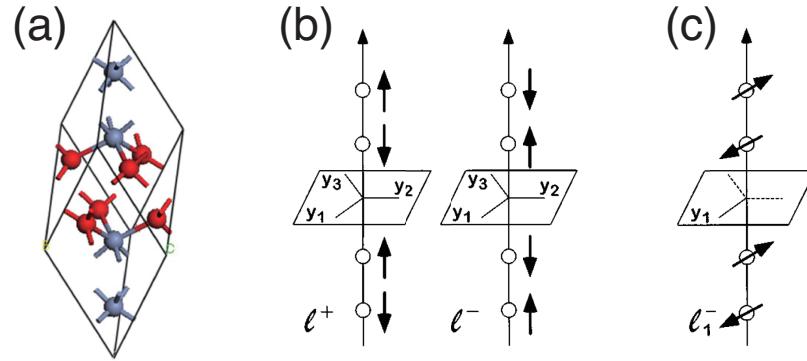


図 1.10 (a) Cr_2O_3 の結晶構造 [35]. Cr サイトは灰色, O サイトは赤色で塗られている. (b, c) Cr_2O_3 の Cr サイトにおける磁気秩序 [36]. ゼロ磁場ではネール温度以下で反強磁性スピントラップが z 軸方向に向くが (b), 磁場中でスピンフロップ相に入ると y 軸方向に反強磁性秩序が立つ (c).

ゼロ磁場において, Cr_2O_3 はネール温度 $T_N = 307.6$ K 以下で図 1.10(b) のようにスピンが z 軸方向に向いた反強磁性秩序に入る [37]. このようなスピン配置は, 図 1.11(a) のように磁気单極子と磁気四極子の重ね合わせとして捉えることができる. また, z 軸方向に十分大きい磁場をかけていくと, $B_C > 5.8$ T (90 K 以下) で1次相転移が起き, y 軸方向にスpinがフロップして図 1.10(c) のような磁気秩序になる [36, 38, 39]. この秩序は図 1.11(b) のように磁気四極子秩序とトロイダル秩序の重ね合わせとみなせる.

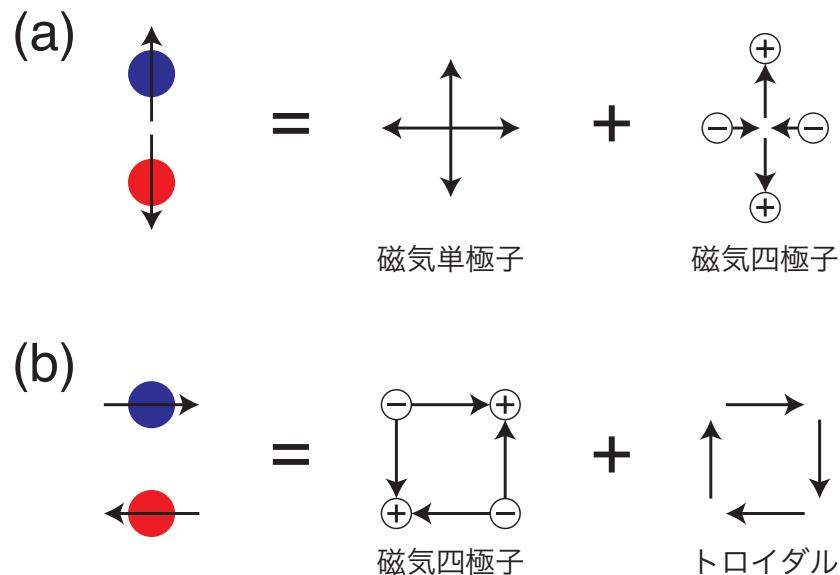


図 1.11 スpin対は磁気单極子, 磁気四極子, トロイダルの合成とみなすことができる.

ここでは詳細な説明は省くが, 磁気单極子・磁気四極子・トロイダルといった奇パリティの磁気多極子秩序の存在によって, 線形の電気磁気効果が生み出されることが期待される [40]. 実際, Cr_2O_3 では単結晶に電場を印加したときに磁化が変化するという実験結果 [41] によって線形の電気磁気効果が観測されていることが分かる. このように, 奇パリティ多極子はマルチフェロイクスの分野においても非常に面白い性質を示すものである.

Pr_T₂X₂₀ における奇 parity 電気多極子

近年、4f² 配位の Pr³⁺ を含む化合物、特に籠状物質 Pr_T₂X₂₀ (T: 遷移金属, X = Al, Zn) における多極子自由度に関連した物性についての研究が注目されている。Pr_T₂X₂₀ は図 1.12(a) のような立方晶構造をとるが、これは空間群 Fd $\bar{3}$ m (点群 O_h) に属する空間反転対称性を持つ結晶構造である。しかし Pr サイトを中心取ったときの点群は T_d であり、やはり局所的に空間反転対称性が破れている系であることが分かる。

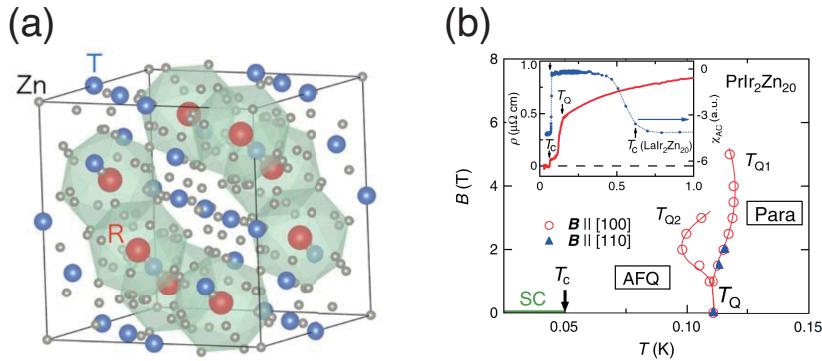


図 1.12 (a) R_T₂Zn₂₀ (R: 希土類, T: 遷移金属) の籠状構造。 (b) 磁場を [100] 方向にかけたとき (白抜きの円) と [110] 方向にかけたとき (三角形) の PrIr₂Zn₂₀ の温度-磁場相図 [42]。

Pr³⁺ の Hund 則による基底状態は $S = 1$, $L = 5$, $J = 4$ であるため、 $2J + 1 = 9$ 重に縮退している。この基底多重項が点群 T_d の結晶場のもとでどのように分裂するかを見るためには、回転群 D⁽⁴⁾ を T_d に制限し簡約を行えばよい。結果として、

$$D^{(4)} \downarrow T_d = \Gamma_1 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5 \quad (1.18)$$

といったように 4 つの多重項に分裂することが分かる^{*2}。このうち Γ_3 は非 Kramers 二重項であり、電気四極子 $Q_{2z^2-x^2-y^2}$, $Q_{x^2-y^2}$ と磁気八極子 M_{xyz} の基底を持つ。したがって、 Γ_3 が基底多重項になっている場合には、これらの多極子自由度により多彩な強相関電子現象が現れると期待できる。

実際、 Γ_3 が基底多重項になっている物質の例として、PrIr₂Zn₂₀ を紹介しよう。PrIr₂Zn₂₀ は $T_Q = 0.11$ K で反強電気四極子秩序に入り、さらに $T_C = 0.05$ K で超伝導転移を示す [42]。この物質の温度-磁場相図を示したものが図 1.12(b) である。特に T_{Q1} に注目すると、磁場の増加に伴って転移温度が増加するという、通常の磁性体では観測されないふるまいを見せている。これは CeB₆ の反強電気四極子相 (II 相) におけるふるまいとよく似ており [43]、磁場に誘起された多極子間の相互作用 [44] や四極子モーメントの揺らぎ [45] によって説明できると考えられる。また、PrIr₂Zn₂₀ ではゼロ磁場でも反強電気四極子秩序が活性であり、超伝導相が反強四極子相に含

^{*2} 一般に結晶場分裂を表す際にはこのような Bethe 表記を用いることが多いが、Mulliken 表記で表した場合には

$$D^{(4)} \downarrow T_d = A_1 \oplus E \oplus T_1 \oplus T_2$$

となる。

まれているため、電気四極子揺らぎによる超伝導が起こっている可能性がある。このような「電気四極子揺らぎ媒介超伝導」の可能性は $\text{PrV}_2\text{Al}_{20}$ などでも示唆されており [46]、多極子と超伝導の関連を探る研究の発展がますます期待される。

1.3 超伝導対称性の分類

1.1節でも少し触れたが、BCS理論の枠組みから外れた超伝導として異方的超伝導がある [2]。異方的超伝導には p 波、 d 波といった様々な形があり、その形を分類しておくことは重要である。よく知られているように、超伝導のペアリング対称性は結晶が持つ点群の既約表現によって分類できる [47]。さらに最近の研究 [48–52] では、非共型対称性に守られた新しいタイプのラインノードがブリルアンゾーンの境界に現れることが、ペアの波動関数の構築 [48] や空間群に基づくギャップ関数の分類 [49–52] を用いて示されている。このような隠れた対称性に守られたラインノードを持つ超伝導は、 UPt_3 、 UCoGe 、 UPd_2Al_3 といったいくつかの候補物質で現れると期待されている。

本研究では上記の「空間群に基づく超伝導ギャップの分類」に注目し、 Sr_2IrO_4 の $-++-$ 状態に対して実際に適用する(3.4.1節)。本節はそのイントロダクションとして、ギャップ関数は系が共型か非共型かに関わらず点群の既約表現で分類できるということを、線形化 BdG 方程式を用いて明確な形で示しておくこととする [53]。

1.3.1 点群の既約表現によるギャップ関数の分類

まずは、空間群 G での BCS モデルを記述するハミルトニアン $H = H_0 + H_{\text{int}}$ を考える：

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s_1, s_2} [\hat{h}(\mathbf{k})]_{s_1, s_2} c_{s_1}^\dagger(\mathbf{k}) c_{s_2}(\mathbf{k}) \quad (1.19)$$

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} v_{s_1 s_4, s_3 s_2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') c_{s_1}^\dagger(\mathbf{k}) c_{s_2}^\dagger(-\mathbf{k}) c_{s_3}(-\mathbf{k}') c_{s_4}(\mathbf{k}') \quad (1.20)$$

ここで、 $\hat{h}(\mathbf{k})$ はバンド構造を記述するエルミート行列である。 s_1, \dots, s_4 は軌道・スピン・原子サイトの自由度を表す添字であり、 $c_s^\dagger(\mathbf{k})$ は波数 \mathbf{k} 、自由度 s をもつ Bloch 状態の生成演算子を表す。このハミルトニアンでは、 H_0 と H_{int} はどちらも空間群 G 内の任意の操作 $g = \{p|\mathbf{a}\}$ のもとで不变であるはずである ($\{p|\mathbf{a}\}$ は Seitz 表記での空間群の操作であり、点群 P の操作 p を行った後に並進 \mathbf{a} を行うことのことを表す)。すなわち $[H_0, g] = 0$ かつ $[H_{\text{int}}, g] = 0$ である。次の関係

$$g c_{s_1}^\dagger(\mathbf{k}) g^{-1} = \sum_{s_2} c_{s_2}^\dagger(p\mathbf{k}) [\hat{U}(g; \mathbf{k})]_{s_2 s_1} \quad (1.21)$$

を用いると、

$$\begin{aligned} g H_0 g^{-1} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s_1, s_2} [\hat{h}(\mathbf{k})]_{s_1 s_2} \sum_{s'_1} c_{s'_1}^\dagger(p\mathbf{k}) [\hat{U}(g; \mathbf{k})]_{s'_1 s_1} \sum_{s'_2} c_{s'_2}^\dagger(p\mathbf{k}) [\hat{U}^*(g; \mathbf{k})]_{s'_2 s_2} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s'_1, s'_2} \left\{ \sum_{s_1, s_2} [\hat{U}(g; \mathbf{k})]_{s'_1 s_1} [\hat{h}(\mathbf{k})]_{s_1 s_2} [\hat{U}^\dagger(g; \mathbf{k})]_{s_2 s'_2} \right\} c_{s'_1}^\dagger(p\mathbf{k}) c_{s'_2}^\dagger(p\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (1.22)$$

となる(ここで行列 $\hat{U}(g; \mathbf{k})$ は $c_{s_1}^\dagger(\mathbf{k})$ の変換の性質を記述し、一般に \mathbf{k} に依存する)。したがつて、 $[H_0, g] = 0$ から

$$\hat{U}(g; \mathbf{k})\hat{h}(\mathbf{k})\hat{U}^\dagger(g; \mathbf{k}) = \hat{h}(p\mathbf{k}) \quad (1.23)$$

を得る。

H_{int} に対しては、 $v_{s_1 s_4, s_3 s_2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ を次の形式に展開できる^{*3} :

$$v_{s_1 s_4, s_3 s_2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \sum_{\Gamma, i} v^\Gamma [\varphi_i^\Gamma(\mathbf{k})]_{s_1 s_2} [\varphi_i^\Gamma(\mathbf{k}')]_{s_4 s_3}^* \quad (1.24)$$

ここで、 Γ は P の異なる既約表現を表し、ラベル i は同じ Γ の縮退する基底を表す。 v^Γ は既約表現 Γ のペアリング相互作用とみなせ、 H_{int} のエルミート性から実数である。 P の既約表現 Γ の i 番目の基底関数 $\varphi_i^\Gamma(\mathbf{k})$ は

$$\hat{U}(g; \mathbf{k})\varphi_i^\Gamma(\mathbf{k})\hat{U}^\text{T}(g; -\mathbf{k}) = \sum_j \varphi_j^\Gamma(p\mathbf{k})\mathcal{D}_{ji}^{(\Gamma)}(p) \quad (1.25)$$

に従って変換する。ここで $\mathcal{D}_{ji}^{(\Gamma)}(p)$ は既約表現 Γ の表現行列である。上式は、Cooper 対の生成演算子

$$(B_i^\Gamma)^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s_1, s_2} [\varphi_i^\Gamma(\mathbf{k})]_{s_1 s_2} c_{s_1}^\dagger(\mathbf{k}) c_{s_2}^\dagger(-\mathbf{k}) \quad (1.26)$$

が以下の変換性

$$g(B_i^\Gamma)^\dagger g^{-1} = \sum_j (B_j^\Gamma)^\dagger \mathcal{D}_{ji}^{(\Gamma)}(p) \quad (1.27)$$

を満たす、すなわち $(B_i^\Gamma)^\dagger$ が既約表現 Γ の基底になるという条件より導かれる。これより、 H_{int} は

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{2N} \sum_{\Gamma, i} v^\Gamma (B_i^\Gamma)^\dagger B_i^\Gamma \quad (1.28)$$

と記述でき、明らかに任意の操作 g のもとで不変である。

ここで、関数 $\varphi_i^\Gamma(\mathbf{k})$ が満たす規則を見ておこう：

$$\varphi_i^\Gamma(\mathbf{k}) = -(\varphi_i^\Gamma(-\mathbf{k}))^\text{T} \quad (1.29a)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} [\varphi_i^\Gamma(\mathbf{k})(\varphi_j^{\Gamma'}(\mathbf{k}))^\dagger] = \delta_{ij} \delta_{\Gamma\Gamma'} \quad (1.29b)$$

^{*3} 例えば、軌道と原子サイトの自由度が 1 の(すなわち s_1, \dots, s_4 がスピン自由度を表す)、点群 D_{4h} に属する系の場合

$$\begin{aligned} & v_{s_1 s_4, s_3 s_2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &= v^{A_{1g}}(i\sigma_y)_{s_1 s_2}(i\sigma_y)_{s_3 s_4} \\ &+ v^{A_{2g}} \sin k_x \sin k_y (\cos k_x - \cos k_y)(i\sigma_y)_{s_1 s_2} \sin k'_x \sin k'_y (\cos k'_x - \cos k'_y)(i\sigma_y)_{s_3 s_4} \\ &+ v^{B_{1g}} (\cos k_x - \cos k_y)(i\sigma_y)_{s_1 s_2} (\cos k'_x - \cos k'_y)(i\sigma_y)_{s_3 s_4} \\ &+ v^{B_{2g}} \sin k_x \sin k_y (i\sigma_y)_{s_1 s_2} \sin k'_x \sin k'_y (i\sigma_y)_{s_3 s_4} \\ &+ v^{E_g} [\sin k_x \sin k_z + \sin k_y \sin k_z](i\sigma_y)_{s_1 s_2} [\sin k'_x \sin k'_z + \sin k'_y \sin k'_z](i\sigma_y)_{s_3 s_4} \\ &+ \dots \end{aligned}$$

などという形で表せるだろう。各表現の基底は他にいくらでもあるが、ここでは \mathbf{k} の部分と \mathbf{k}' の部分が分離できることが重要である。

最初の規則 (1.29a) は式 (1.24) から明らかである。また、式 (1.25) より、表現行列のユニタリ－性を用いると

$$\sum_j \hat{\varphi}_j^\Gamma(p\mathbf{k}) \underbrace{\sum_i \mathcal{D}_{ji}^{(\Gamma)}(p)(\mathcal{D}_{i'i}^{(\Gamma)}(p))^*}_{\delta_{ji'}} = \sum_i \hat{U}(g; \mathbf{k}) \hat{\varphi}_i^\Gamma(\mathbf{k}) \hat{U}^T(g; -\mathbf{k})(\mathcal{D}_{i'i}^{(\Gamma)}(p))^*$$

$$\hat{\varphi}_{i'}^\Gamma(p\mathbf{k}) = \sum_i \hat{U}(g; \mathbf{k}) \hat{\varphi}_i^\Gamma(\mathbf{k}) \hat{U}^T(g; -\mathbf{k})(\mathcal{D}_{i'i}^{(\Gamma)}(p))^*$$

となるので、この式を用いて 2 番目の規則 (1.29b) を示すことができる：

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left[\hat{\varphi}_i^\Gamma(\mathbf{k}) (\hat{\varphi}_j^{\Gamma'}(\mathbf{k}))^\dagger \right] \\ &= \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_p \text{Tr} \left[\hat{\varphi}_i^\Gamma(p\mathbf{k}) (\hat{\varphi}_j^{\Gamma'}(p\mathbf{k}))^\dagger \right] \\ &= \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_p \sum_{i', j'} \text{Tr} \left[\left\{ \hat{U}(g; \mathbf{k}) \hat{\varphi}_{i'}^\Gamma(\mathbf{k}) \hat{U}^T(g; -\mathbf{k}) \right\} \left\{ \hat{U}(g; \mathbf{k}) \hat{\varphi}_{j'}^{\Gamma'}(\mathbf{k}) \hat{U}^T(g; -\mathbf{k}) \right\}^\dagger \right] \\ &\quad \times (\mathcal{D}_{ii'}^{(\Gamma)}(p))^* \mathcal{D}_{jj'}^{(\Gamma')}(p) \\ &= \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i', j'} \text{Tr} \left[\hat{\varphi}_{i'}^\Gamma(\mathbf{k}) (\hat{\varphi}_{j'}^{\Gamma'}(\mathbf{k}))^\dagger \right] \sum_p (\mathcal{D}_{ii'}^{(\Gamma)}(p))^* \mathcal{D}_{jj'}^{(\Gamma')}(p) \end{aligned}$$

既約表現間の表現行列の直交性より、 $\sum_p (\mathcal{D}_{ii'}^{(\Gamma)}(p))^* \mathcal{D}_{jj'}^{(\Gamma')}(p) = \frac{m}{d_\Gamma} \delta_{ij} \delta_{i'j'} \delta_{\Gamma\Gamma'}$ であるから

$$= \frac{1}{d_\Gamma} \delta_{ij} \delta_{\Gamma\Gamma'} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i'} \text{Tr} \left[\hat{\varphi}_{i'}^\Gamma(\mathbf{k}) (\hat{\varphi}_{i'}^\Gamma(\mathbf{k}))^\dagger \right]$$

ここで m は P の位数であり、 d_Γ は表現 Γ の次元である。したがって、適当な規格化をすれば式 (1.29a) と (1.29b) を満たすように $\hat{\varphi}_i^\Gamma(\mathbf{k})$ を選ぶことができる。

次に、式 (1.20) に平均場理論を適用し、超伝導秩序変数を導入する：

$$\begin{aligned} [\hat{\Delta}(\mathbf{k})]_{s_1 s_2} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{s_3, s_4} v_{s_1 s_4, s_3 s_2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle c_{s_4}(\mathbf{k}') c_{s_3}(-\mathbf{k}') \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{s_3, s_4} v_{s_1 s_4, s_3 s_2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') F_{s_4 s_3}(\mathbf{k}') \end{aligned} \quad (1.30)$$

式 (1.24) を式 (1.30) に代入すると、

$$\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = \sum_{\Gamma, i} \Delta_i^\Gamma \hat{\varphi}_i^\Gamma(\mathbf{k}) \quad (1.31a)$$

$$\Delta_i^\Gamma = v^\Gamma \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s_1, s_2} F_{s_1 s_2}(\mathbf{k}) [\hat{\varphi}_i^\Gamma(\mathbf{k})]_{s_1 s_2}^* \quad (1.31b)$$

を得る。転移温度 $T = T_C$ 直下では、フェルミオンの松原振動数 $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ を用いて $F_{s_1 s_2}(\mathbf{k})$ を

$$F_{s_1 s_2}(\mathbf{k}) = T \sum_n [\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{\Delta}(\mathbf{k}) \hat{G}^*(-\mathbf{k}, i\omega_n)]_{s_1 s_2} \quad (1.32)$$

のように線形化できる。1 粒子グリーン関数 $\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ は $\hat{h}(\mathbf{k})$ の変換式 (1.23) と同様の関係式

$$\hat{U}(g; \mathbf{k}) \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{U}^\dagger(g; \mathbf{k}) = \hat{G}(p\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (1.33)$$

を満足する。さて、式(1.31b)に式(1.32)と(1.31a)を代入してギャップ方程式を求めよう：

$$\begin{aligned}
 \Delta_i^\Gamma &= v^\Gamma \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s_1, s_2} T \sum_n [\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{\Delta}(\mathbf{k}) \hat{G}^*(-\mathbf{k}, i\omega_n)]_{s_1 s_2} [\hat{\varphi}_i^\Gamma(\mathbf{k})]_{s_1 s_2}^* \\
 &= v^\Gamma \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n \sum_{\Gamma', j} \Delta_j^{\Gamma'} \sum_{s_1, s_2} [\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{\varphi}_j^{\Gamma'}(\mathbf{k}) \hat{G}^*(-\mathbf{k}, i\omega_n)]_{s_1 s_2} [(\hat{\varphi}_i^\Gamma(\mathbf{k}))^\dagger]_{s_2 s_1} \\
 &= v^\Gamma \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n \sum_{\Gamma', j} \Delta_j^{\Gamma'} \frac{1}{m} \sum_p \text{Tr} \left[\hat{G}(p\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{\varphi}_j^{\Gamma'}(p\mathbf{k}) \hat{G}^*(-p\mathbf{k}, i\omega_n) (\hat{\varphi}_i^\Gamma(p\mathbf{k}))^\dagger \right] \\
 &= v^\Gamma \frac{1}{m} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n \sum_{\Gamma', j} \Delta_j^{\Gamma'} \sum_p \sum_{j', i'} \text{Tr} \left[\hat{G}(p\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{U}(g; \mathbf{k}) \hat{\varphi}_{j'}^{\Gamma'}(\mathbf{k}) \hat{U}^T(g; -\mathbf{k}) \right. \\
 &\quad \times \left. \hat{G}^*(-p\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{U}^*(g; -\mathbf{k}) (\hat{\varphi}_{i'}^{\Gamma'}(\mathbf{k}))^\dagger \hat{U}^\dagger(g; \mathbf{k}) \right] (\mathcal{D}_{ii'}^{(\Gamma')}(p))^* \mathcal{D}_{jj'}^{(\Gamma)}(p)
 \end{aligned}$$

トレースの巡回性および(1.33)を用いて

$$\begin{aligned}
 &= v^\Gamma \frac{1}{m} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n \sum_{\Gamma', j} \Delta_j^{\Gamma'} \sum_{j', i'} \text{Tr} \left[\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{\varphi}_{j'}^{\Gamma'}(\mathbf{k}) \hat{G}^*(-\mathbf{k}, i\omega_n) (\hat{\varphi}_{i'}^{\Gamma'}(\mathbf{k}))^\dagger \right] \\
 &\quad \times \underbrace{\sum_p (\mathcal{D}_{ii'}^{(\Gamma')}(p))^* \mathcal{D}_{jj'}^{(\Gamma)}(p)}_{\frac{m}{d_\Gamma} \delta_{ij} \delta_{i'j'} \delta_{\Gamma\Gamma'}}
 \end{aligned}$$

したがって、次のギャップ方程式を得る：

$$\Delta_i^\Gamma = v^\Gamma \Delta_i^\Gamma \frac{1}{d_\Gamma} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_j \sum_n \text{Tr} \left[\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \hat{\varphi}_j^\Gamma(\mathbf{k}) \hat{G}^*(-\mathbf{k}, i\omega_n) (\hat{\varphi}_j^\Gamma(\mathbf{k}))^\dagger \right] \quad (1.34)$$

このギャップ方程式は各 Γ で分解され、またラベル i には依存しない。このことは、 T_C 直下のギャップ方程式は(系が共型か非共型かに関わらず) P の既約表現で分類できるということを意味する。

1.4 本論文の目的および構成

1.1.3 で述べたように、先行研究では空間反転対称性が破れた系における磁場下での超伝導状態が多く議論されてきた。一方、近年では超伝導現象における多極子の役割が注目を集め始めている。特に、奇 parity 多極子に関しては最近になって注目されるようになった背景もあり、それと超伝導との共存相を調査することは、これまで多くの物質において見過ごされてきた新しい自由度に光を当てるうことになり、大変有益な研究になると考えられる。そこで本論文では、様々な磁気多極子秩序と共に存する超伝導相の新奇な性質を調べることを目的とする。偶・奇両方の parity の磁気多極子を取り扱うため、局所的に空間反転対称性が破れた系を研究対象とする。具体的には、以下の 2 つの系に注目する。

1 次元ジグザグ格子—本論文のように、多極子と共に存する超伝導に特有の状態を探索する研究は未だ例がない。そこでまずはミニマルモデルとして、局所的な空間反転対称性を破りかつ単純な結晶構造を持つ 1 次元ジグザグ格子を対象とする(第 2 章)。これは非常に単純な系ではあるが、強磁性超伝導体として注目される UGe_2 [54], URhGe [55], UCoGe [56] がジグザグ構造を持つ

ことや [57], 「1-2-10 系化合物」 LnT_2Al_{10} が持つジグザグ構造内で磁気四極子に似た秩序が報告されていること [58–61] から, 実際の物質への応用も期待できる. よって, 今回は特に磁気单極子, 磁気双極子, 磁気四極子という低次の 3 つの磁気多極子秩序について考え, これらと共に存する超伝導状態がどのような性質を持つかについて議論する. なお, 厳密な 1 次元系では揺らぎが発散するために超伝導の長距離秩序は起こらないことが知られているが [62], 今回は平均場理論 (2.1.2 節) を用いて長距離秩序を許すことで超伝導状態を調査する.

イリジウム酸化物 Sr_2IrO_4 —ミニマルモデルを用いて磁気多極子と超伝導の共存相の性質を見た後, 次のステップとして現実の物質に焦点を当てて考えてみたい. そこで, 第 3 章では Sr_2IrO_4 に注目して解析を行う. この物質は絶縁体であるが, 3.1 節で詳しく述べるように銅酸化物高温超伝導体との多くの類似点を持っており [63–67], 超伝導の実現が期待されている. また, 様々な実験によっていくつかの磁気構造が提案されている [68–73]. こういった背景から, 我々は Sr_2IrO_4 が磁気多極子と共に存する超伝導相を示す可能性のある候補物質であると考え, それが実現したときどんな新奇な性質が現れるかに注目して調査を行った. さらには, この系が非共型であることにも注目し, 空間群によるギャップ関数の分類を用いて対称性に守られた非自明なギャップ構造を持つかどうかを探る.

第 2 章

1 次元ジグザグ格子において磁気多極子と共存する超伝導

多極子と共に存する超伝導の研究の第 1 段階として、1 次元ジグザグ格子というミニマルモデルを取り扱う。まず 2.1 節で、1 次元ジグザグ格子を表す tight-binding モデルを導入し、平均場近似による定式化を行う。2.2 節ではジグザグ格子に 3 つの異なる磁気秩序を導入し、これらがそれぞれ磁気单極子、磁気双極子、磁気四極子の秩序に対応していることを見る。超伝導状態について調べる前に、2.3 節で 3 つの磁気多極子秩序相それぞれにおける正常状態の電子構造の特徴についてまとめておく。2.4 節以降で各磁気多極子秩序と共に存する超伝導状態について調査する。まず、BCS 状態が磁気单極子秩序に対してロバストであることを示す(2.4 節)。一方、磁気双極子秩序では PDW 状態が安定化することを示す(2.5.1 節)。この PDW 状態はあるパラメーター領域ではトポロジカル超伝導状態となることも分かる(2.5.2 節)。2.6 節では、FFLO 状態が(外部磁場がなくとも)磁気四極子秩序に誘起されるという結果を示す。Cooper 対の有限の重心運動量は非対称なバンド構造に起因していることが示される。最後に、2.7 節で本章の結論をまとめると。

2.1 モデルと手法

本節ではまず最初に、副格子依存する反対称スピン軌道相互作用、磁気多極子秩序、そして s 波引力相互作用に影響される伝導電子の tight-binding モデルを導入する(2.1.1 節)。次に、数値計算で扱える形にするため、相互作用ハミルトニアンに平均場近似を適用し、実際に計算に用いるギャップ方程式や物理量の定式化を行う(2.1.2 節)。

2.1.1 モデル

1次元ジグザグ格子において磁気秩序と共に存する超伝導を記述するモデルを以下の式で導入する：

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{k,s} [\varepsilon(k) a_{ks}^\dagger b_{ks} + \text{h.c.}] + \sum_{k,s} [\varepsilon'(k) - \mu] [a_{ks}^\dagger a_{ks} + b_{ks}^\dagger b_{ks}] \\ & + \alpha \sum_{k,s,s'} \mathbf{g}(k) \cdot \hat{\sigma}_{ss'} [a_{ks}^\dagger a_{ks'} - b_{ks}^\dagger b_{ks'}] - \sum_{k,s,s'} [\mathbf{h}_a \cdot \hat{\sigma}_{ss'} a_{ks}^\dagger a_{ks'} + \mathbf{h}_b \cdot \hat{\sigma}_{ss'} b_{ks}^\dagger b_{ks'}] \\ & + \frac{1}{N} \sum_{k,k',q} [V_a(k, k') a_{k\uparrow}^\dagger a_{-k+q\downarrow}^\dagger a_{-k'+q\downarrow} a_{k'\uparrow} + V_b(k, k') b_{k\uparrow}^\dagger b_{-k+q\downarrow}^\dagger b_{-k'+q\downarrow} b_{k'\uparrow}] \end{aligned} \quad (2.1)$$

ここで a_{ks} と b_{ks} はそれぞれ副格子 a と b の周りに強く束縛された、スピン $s=\uparrow,\downarrow$ をもつ電子の消滅演算子である。このジグザグ格子は c 軸方向に伸びた1次元系なので、波数 k は c 軸方向を向いている。

第1項と第2項はそれぞれ副格子間と（化学ポテンシャル μ を含む）副格子内の飛び移り項である。運動エネルギー $\varepsilon(k)$ と $\varepsilon'(k)$ は最近接および次近接の飛び移りを考慮することによって得られ、

$$\varepsilon(k) = -2t_1 \cos \frac{k}{2} \quad (2.2a)$$

$$\varepsilon'(k) = -2t_2 \cos k \quad (2.2b)$$

となる（本章では格子定数は1とする）。結晶構造と飛び移り積分 t_1, t_2 は図2.1に示されている。

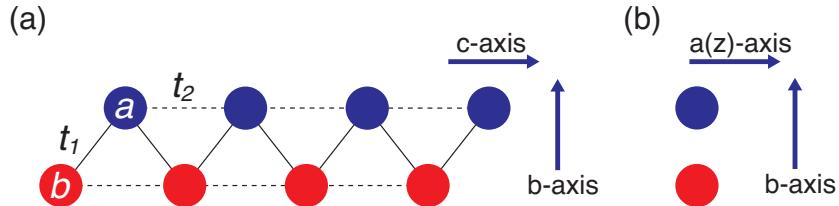


図2.1 1次元ジグザグ格子の結晶構造。(a) a 軸方向から見た図。(b) c 軸方向から見た図。

青と赤の丸はそれぞれ副格子 a と b を表しており、飛び移り積分は t_1 と t_2 で示されている。

第3項は、局所的な空間反転対称性の破れに伴う、副格子依存するスタッガードな反対称スピニ軌道相互作用であり[27]、 g -ベクトルは $\mathbf{g}(k) = \sin k \hat{z}$ と近似される。ここでは a 軸をスピンの量子化軸として選んでいるので、 $\hat{z} = \hat{a}$ である。

第4項は磁気多極子秩序を分子場によって表している項である。この項によって、後述するように様々な超伝導現象が引き起こされる。このモデルにおいて、我々はネール温度 T_N が超伝導転移温度 T_C よりかなり大きいと仮定しており、このとき T_C 以下では多極子秩序の揺らぎは無視できる。また、超伝導のエネルギー・スケールは磁気相互作用のエネルギーよりもかなり小さいので、超伝導が磁気秩序に及ぼす影響も無視できる。したがって、このように磁気秩序の大きさを固定する仮定は正当化される。

この系における超伝導を考えるため、式(2.1)の第5項によって引力相互作用を導入している。ここで N は各副格子のサイト数である。簡単のため、ここでは運動量依存しないペアリング相互作用

$$V_a(k, k') = V_b(k, k') = -V \quad (2.3)$$

を採用し、 s 波の超伝導を仮定する。実際には反対称スピン軌道相互作用の効果によってスピン三重項の p 波の秩序変数が混ざってくるが、この p 波成分は s 波成分と同等かそれ以上に大きくならない限り相図を変えることはない[74]。よって、ここでは p 波の成分は無視することにする。

スピン軌道相互作用と磁気多極子秩序によって誘起される新奇超伝導相を明らかにするという目的から、我々は「深い」ジグザグ格子 $t_1/t_2 < 1$ を扱い、適度な反対称スピン軌道相互作用 $\alpha/t_2 = 0.4$ を仮定した。引力相互作用の大きさは、特に明記しない限り $V/t_2 = 1.5$ とする。

2.1.2 平均場理論

ハミルトニアン(2.1)は2体の相互作用を含むため、解析のためには何らかの近似を用いる必要がある。本研究では、超伝導体の解析によく用いられる平均場近似を採用した。引力相互作用の項は、超伝導秩序変数

$$\Delta_a = -\frac{V}{N} \sum_{k'} \langle a_{-k'+q\downarrow} a_{k'\uparrow} \rangle \quad (2.4a)$$

$$\Delta_b = -\frac{V}{N} \sum_{k'} \langle b_{-k'+q\downarrow} b_{k'\uparrow} \rangle \quad (2.4b)$$

を導入することによって次のように近似できる：

$$\begin{aligned} & -\frac{V}{N} \sum_{k, k', q} [a_{k\uparrow}^\dagger a_{-k+q\downarrow}^\dagger a_{-k'+q\downarrow} a_{k'\uparrow} + b_{k\uparrow}^\dagger b_{-k+q\downarrow}^\dagger b_{-k'+q\downarrow} b_{k'\uparrow}] \\ & \simeq \sum_k [\Delta_a^* a_{-k+q\downarrow} a_{k\uparrow} + \Delta_b^* b_{-k+q\downarrow} b_{k\uparrow} + \text{H.c.}] + \frac{N}{V} (|\Delta_a|^2 + |\Delta_b|^2) \end{aligned} \quad (2.5)$$

この近似においては、単一の q を持った状態が安定化すると仮定している。つまり、Cooper 対の重心運動量 q に関して凝縮エネルギーは最適化される。BCS 状態や PDW 状態は $q = 0$ の状態に対応し、FFLO 状態は $q \neq 0$ の状態に対応する。

平均場ハミルトニアンを行列形式で記述する。簡単のため $k_+ \equiv k$, $k_- \equiv -k + q$ とし、ベクトル演算子

$$\hat{C}_k^\dagger \equiv (a_{k+\uparrow}^\dagger, a_{k+\downarrow}^\dagger, b_{k+\uparrow}^\dagger, b_{k+\downarrow}^\dagger, a_{k-\uparrow}, a_{k-\downarrow}, b_{k-\uparrow}, b_{k-\downarrow}) \quad (2.6)$$

を定義しておく。すると、平均場ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_k \hat{C}_k^\dagger \hat{H}_{\text{BdG}}(k) \hat{C}_k + \text{const.} \quad (2.7)$$

と書き下せる。定数項はエネルギーの原点をずらす効果しかないので、以下では無視する。 8×8 の Bogoliubov-de Gennes (BdG) ハミルトニアン $\hat{H}_{\text{BdG}}(k)$ は以下の形式で与えられる。

$$\hat{H}_{\text{BdG}}(k) = \begin{pmatrix} \hat{H}_4(k_+) & \hat{\Delta}_4 \\ \hat{\Delta}_4^\dagger & -\hat{H}_4^\text{T}(k_-) \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

ここで

$$\hat{H}_4(k_{\pm}) = \begin{pmatrix} \hat{H}_2^{(a)}(k_{\pm}) - \mu\hat{\sigma}_0 & \varepsilon(k_{\pm})\hat{\sigma}_0 \\ \varepsilon(k_{\pm})\hat{\sigma}_0 & \hat{H}_2^{(b)}(k_{\pm}) - \mu\hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

$$\hat{\Delta}_4 = \begin{pmatrix} \Delta_a i\hat{\sigma}_y & \hat{0} \\ \hat{0} & \Delta_b i\hat{\sigma}_y \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

$$\hat{H}_2^{(l)}(k_{\pm}) = \begin{cases} \varepsilon'(k_{\pm})\hat{\sigma}_0 + \alpha \sin k_{\pm}\hat{\sigma}_z - \mathbf{h}_a \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} & (l=a) \\ \varepsilon'(k_{\pm})\hat{\sigma}_0 - \alpha \sin k_{\pm}\hat{\sigma}_z - \mathbf{h}_b \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} & (l=b) \end{cases} \quad (2.11)$$

である。

ハミルトニアンを対角化するため、ユニタリー行列 $\hat{U}_8(k)$ を用いて Bogoliubov 変換を行う：

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{MF}} &= \frac{1}{2} \sum_k \underbrace{\hat{C}_k^{\dagger} \hat{U}_8(k)}_{\hat{\Gamma}_k^{\dagger}} \underbrace{\hat{U}_8^{\dagger}(k) \hat{H}_{\text{BdG}}(k) \hat{U}_8(k)}_{\hat{E}_8(k)} \underbrace{\hat{U}_8^{\dagger}(k) \hat{C}_k}_{\hat{\Gamma}_k} \\ &= \frac{1}{2} \sum_k \hat{\Gamma}_k^{\dagger} \hat{E}_8(k) \hat{\Gamma}_k \end{aligned} \quad (2.12)$$

$\hat{E}_8(k)$ は次の形式で表される対角行列である。

$$\hat{E}_8(k) = \begin{pmatrix} \hat{E}_4(k) & \hat{0} \\ \hat{0} & -\hat{E}_4(k) \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

この Bogoliubov 変換を式 (2.4) に用いることによって、秩序変数が次のように得られる：

$$\begin{aligned} \Delta_a &= -\frac{V_a}{N} \sum_{k'} \langle [\hat{\Gamma}_{k'}^{\dagger} \hat{U}_8^{\dagger}(k')]_6 [\hat{U}_8(k') \hat{\Gamma}_{k'}]_1 \rangle \\ &= -\frac{V_a}{N} \sum_{k'} \sum_{n=1}^8 [\hat{U}_8^{\dagger}(k')]_{n6} [\hat{U}_8(k')]_{1n} f([\hat{E}_8(k')]_{nn}), \end{aligned} \quad (2.14a)$$

$$\Delta_b = -\frac{V_a}{N} \sum_{k'} \sum_{n=1}^8 [\hat{U}_8^{\dagger}(k')]_{n8} [\hat{U}_8(k')]_{3n} f([\hat{E}_8(k')]_{nn}), \quad (2.14b)$$

ここで $f(E)$ はフェルミ分布関数である。式 (2.14a) と (2.14b) は平均場ギャップ方程式であり、これを数値的に解けばよい。

Bogoliubov 準粒子演算子 $\hat{\Gamma}_k^{\dagger}$ とエネルギー $\hat{E}_4(k)$ は添字 (s, l) を用いて次のように表すことができる：

$$\hat{\Gamma}_k^{\dagger} = (\gamma_{k\uparrow a}^{\dagger}, \gamma_{k\downarrow a}^{\dagger}, \gamma_{k\uparrow b}^{\dagger}, \gamma_{k\downarrow b}^{\dagger}, \gamma_{-k\uparrow a}^{\dagger}, \gamma_{-k\downarrow a}^{\dagger}, \gamma_{-k\uparrow b}^{\dagger}, \gamma_{-k\downarrow b}^{\dagger}) \quad (2.15)$$

$$\hat{E}_4(k) = \begin{pmatrix} E_{k\uparrow a} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{k\downarrow a} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{k\uparrow b} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{k\downarrow b} \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

ここで s は擬スピン $s=\uparrow, \downarrow$ を、 l は擬副格子 $l=a, b$ を表す添字である。以上より、平均場ハミルトニアン \mathcal{H}_{MF} と自由エネルギー Ω は

$$\mathcal{H}_{\text{MF}} = \sum_{k,s,l} E_{ksl} \left(\gamma_{ksl}^{\dagger} \gamma_{ksl} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.17)$$

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \sum_{k,s,l} \left\{ \ln (1 + e^{-\beta E_{ksl}}) + \frac{\beta E_{ksl}}{2} \right\} \quad (2.18)$$

で与えられる。ここで $\beta = 1/T$ は逆温度である。

2.2 多極子への分類

2.1.1 節で導入したモデルにおいて、今回我々は図 2.2 に示すような 3 つの磁気秩序を考える。磁気モーメントが単位格子内で反強磁性になっており、それが x 軸方向を向いているときは、これら 2 つの反強磁性モーメントは磁気单極子とみなすことができる [図 2.2(M)]. 一方、2 つの反強磁性モーメントが z 軸と平行なときは、磁気四極子モーメントが単位格子内に誘起される [図 2.2(Q)]. この磁気四極子の秩序は、副格子依存する反対称スピン軌道相互作用によって安定化することが示されている [31]. 実際、1-2-10 系化合物 LnT_2Al_{10} の磁気構造は磁気四極子の秩序と似ている [58–61]. また、この磁気構造は c 軸方向に電場をかけることで、電気磁気効果によって誘起される [27]. これら磁気单極子や磁気四極子は奇 parity の磁気多極子であり、大域的な空間反転対称性を自発的に破るものとなっている。さらに我々は、磁気双極子の秩序とみなせる強磁性の状態についても調査する [図 2.2(D)]. 強磁性超伝導体 UGe₂ [54], URhGe [55], UCoGe [56] の結晶構造もジグザグ格子で構成されている [57]. したがって、本章の研究はこれら強磁性超伝導体とも関連する可能性がある。

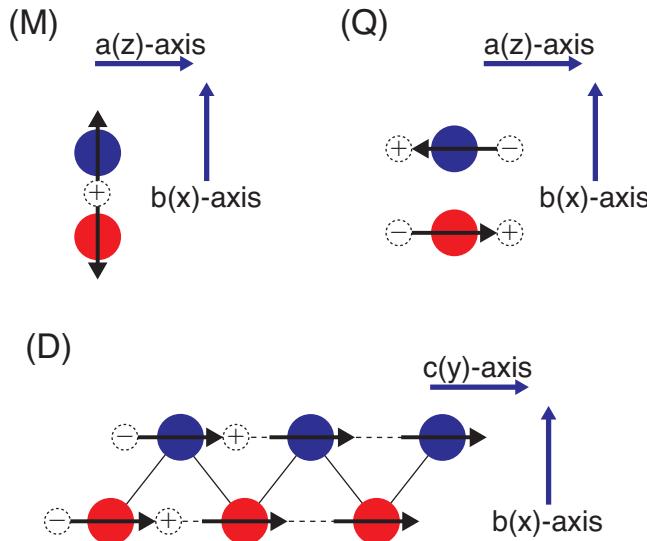


図 2.2 (M) 磁気单極子, (D) 磁気双極子, (Q) 磁気四極子状態における磁気構造. (M) と (Q) では c 軸方向から見た図を, (D) では a 軸方向から見た図を示している。黒矢印は単位格子内の強磁性あるいは反強磁性のモーメントを示している。

さて、上では図 2.2(M), (D), (Q) の秩序はそれぞれ磁気单極子、磁気双極子、磁気四極子の秩序に対応していると述べてきた。図を見るだけでもある程度その対応関係は掴めるかと思うが、この節では磁気多極子の定義に戻ってもう少し丁寧にそれを確かめておくことにする。具体的には、群論による簡単な解析を用いて、磁気秩序を磁気多極子に分類する。それぞれの詳細を見る前に、分類の大体の流れを説明しておく：

1. 注目している磁気秩序相において、元の結晶対称性 P_1 から対称性が落ちて P_2 になったと

する。

2. このとき、元の結晶の点群 P_1 の既約表現が P_2 上に制限されることになる。つまり、 $(P_1$ の既約表現) $\downarrow P_2$ を P_2 の既約表現で分解すればよい。
3. 分解したときに、 P_2 の全対称表現を含んでいる表現が、注目する磁気秩序が属している表現である。
4. その表現の、時間反転が奇の基底を考える。通常は次数が低い方が leading order になっていいると考えられるので、特に最低次の基底に注目する。
5. 考える基底が、磁気多極子を表す演算子 [23]

$$\hat{M}_{l,m} = \mu_B \sum_{j=1}^n \left(\frac{2l_j}{l+1} + 2s_j \right) \cdot \nabla_j (r_j^l Z_{l,m}(\hat{\mathbf{r}}_j)^*) \quad (2.19)$$

のうち、どのランク ($l = 1, 2, \dots$) の多極子を含むかを考える。これにより、注目する磁気秩序がどの磁気多極子に分類されるかが分かる。

以下、このような流れに即して図 2.2(M), (D), (Q) の 3 つの秩序を分類していくことにする。ただし磁気单極子秩序 (M) に関しては扱いがやや特殊なので、(D) \rightarrow (Q) \rightarrow (M) という順で説明する。

2.2.1 磁気双極子

1 次元ジグザグ格子の元の結晶対称性は D_{2h} であるが、図 2.2(D) の磁気秩序相では対称性が C_{2h} に落ちる。この磁気秩序は偶パリティであるので、 D_{2h} の対称既約表現 ($A_g, B_{1g}, B_{2g}, B_{3g}$) を C_{2h} に制限したときに、どのような既約表現で分解できるかを確かめればよい。実際に解析を行った結果を表 2.1 に示す。4 つの D_{2h} の偶パリティ表現のうち、 C_{2h} の全対称表現 (A_g) を含むものは A_g 表現と B_{1g} 表現である。図 2.2(D) の秩序が A_g 表現に属するとすると、秩序相においても対称性が落ちず C_{2h} にならない。よって、図 2.2(D) の秩序は D_{2h} の B_{1g} 表現に属していることが分かる。

表 2.1 D_{2h} の偶パリティ表現を C_{2h} に制限したときの既約表現分解。

$(D_{2h}$ の表現)	A_g	B_{1g}	B_{2g}	B_{3g}
$(D_{2h}$ の表現) $\downarrow C_{2h}$	A_g	A_g	B_g	B_g

次に、この秩序がどのような磁気多極子に分類されるかを考える。 B_{1g} 表現の実空間での基底のうち時間反転が奇のものを考えると、最低次では σ_y となる。これは磁気双極子 ($l = 1$) の秩序

$$\hat{M}_{1,-1} + \hat{M}_{1,1} \propto \hat{y} \quad (2.20)$$

を含んでいることが分かる。以上より、図 2.2(D) の秩序は偶パリティの磁気双極子に分類される。

2.2.2 磁気四極子

図 2.2(Q) の磁気秩序相では対称性が D_{2h} から C_{2v} に落ちる。この磁気秩序は奇パリティであるので、 D_{2h} の反対称既約表現 $(A_u, B_{1u}, B_{2u}, B_{3u})$ を C_{2v} に制限したときの既約表現分解を考える。その結果を表 2.2 に示す。4 つの D_{2h} の奇パリティ表現のうち、 C_{2v} の全対称表現 (A_1) を含むものは B_{1u} 表現だけである。したがって、図 2.2(D) の秩序は D_{2h} の B_{1u} 表現に属していることが分かる。

表 2.2 D_{2h} の奇パリティ表現を C_{2v} に制限したときの既約表現分解。

$(D_{2h} \text{ の表現})$	A_u	B_{1u}	B_{2u}	B_{3u}
$(D_{2h} \text{ の表現}) \downarrow C_{2v}$	A_2	A_1	B_2	B_1

B_{1u} 表現の実空間での基底のうち時間反転が奇のものを考えると、最低次では $\alpha z\sigma_x + \beta x\sigma_z$ となる。これは磁気四極子 ($l = 2$) の秩序

$$\hat{M}_{2,-1} - \hat{M}_{2,1} \propto z\hat{x} + x\hat{z} \quad (2.21)$$

を含んでいることが分かる（実際にはこれに加え、磁気トロイダル双極子の秩序 $\propto z\hat{x} - x\hat{z}$ も含んでいると考えられる [26]）。以上より、図 2.2(Q) の秩序は奇パリティの磁気四極子に分類される。

2.2.3 磁気单極子

図 2.2(M) の磁気秩序相では対称性が D_{2h} から D_2 に落ちる。この磁気秩序も (Q) と同様に奇パリティであるので、 D_{2h} の反対称既約表現 $(A_u, B_{1u}, B_{2u}, B_{3u})$ を D_2 に制限して既約表現分解を行う。結果を表 2.3 に示す。4 つの D_{2h} の奇パリティ表現のうち、 D_2 の全対称表現 (A) を含むものは A_u 表現だけなので、図 2.2(M) の秩序は A_u 表現に属している。

表 2.3 D_{2h} の奇パリティ表現を D_2 に制限したときの既約表現分解。

$(D_{2h} \text{ の表現})$	A_u	B_{1u}	B_{2u}	B_{3u}
$(D_{2h} \text{ の表現}) \downarrow D_2$	A	B_1	B_2	B_3

A_u 表現の実空間での基底のうち時間反転が奇のものを考えると、最低次では $\alpha x\sigma_x + \beta y\sigma_y + \gamma z\sigma_z$ となる。これは磁気四極子 ($l = 2$) の秩序

$$\hat{M}_{2,0} \propto 2z\hat{z} - x\hat{x} - y\hat{y} \quad (2.22)$$

$$\hat{M}_{2,-2} + \hat{M}_{2,2} \propto x\hat{x} - y\hat{y} \quad (2.23)$$

を含んでいるが、これに加えてもう 1 つ独立な基底

$$\hat{M} \propto x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z} \quad (2.24)$$

を含んでいると考えられる。このような項は式 (2.19) の多極子展開においては現れないが、その関数形からここでは式 (2.24) を磁気单極子の秩序とみなすことにする。したがって、図 2.2(M) の秩序は奇パリティの磁気单極子に分類される。

2.2.4 補足

上記の磁気四極子(2.2.2節)と磁気单極子(2.2.3節)に関して補足を加えておく。一般に、2次の基底で時間反転が奇なものは、 $(x, y, z) \otimes (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ のテンソル積に現れる9個の独立な成分をもつ。これらの線形結合を考えてやると、9個の独立な成分のうち5個は式(2.19)の多極子展開に現れる磁気四極子の秩序である：

$$\begin{aligned}\hat{M}_{2,-2} - \hat{M}_{2,2} &\propto x\sigma_y + y\sigma_x \\ \hat{M}_{2,-1} + \hat{M}_{2,1} &\propto y\sigma_z + z\sigma_y \\ \hat{M}_{2,0} &\propto 2z\sigma_z - x\sigma_x - y\sigma_y \\ \hat{M}_{2,-1} - \hat{M}_{2,1} &\propto z\sigma_x + x\sigma_z \\ \hat{M}_{2,-2} + \hat{M}_{2,2} &\propto x\sigma_x - y\sigma_y\end{aligned}$$

また、残り4個のうち3個は磁気トロイダル双極子の秩序である[26]：

$$\begin{aligned}\hat{T}_z &\propto x\sigma_y - y\sigma_x \\ \hat{T}_x &\propto y\sigma_z - z\sigma_y \\ \hat{T}_y &\propto z\sigma_x - x\sigma_z\end{aligned}$$

そして、最後に残った1個を磁気单極子の秩序とみなしている：

$$\hat{M} \propto x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z$$

このように、一般に奇パリティの磁気秩序の分類は(2次の基底に限らず)磁気多極子の秩序だけでは全てを尽くせておらず、磁気トロイダル秩序なども加えて考える必要があるだろう。

2.3 電子構造と超伝導状態

3つの磁気多極子(磁気单極子、磁気双極子、磁気四極子)状態における超伝導を調べる前に、ここでは各状態でのバンド構造について議論しておく。ここで議論する普通でないバンド構造が、エキゾチック超伝導の起源になっていることも後に分かる(2.6節)。また、後の結果で用いる3つの超伝導状態(BCS状態、PDW状態、FFLO状態)について、その言葉の定義を整理しておく。

2.3.1 エネルギースペクトル

まず、各状態での1粒子のエネルギースペクトルを明らかにする。バンド構造は、ベクトル演算子 $\hat{D}_k^\dagger = (a_{k\uparrow}^\dagger, a_{k\downarrow}^\dagger, b_{k\uparrow}^\dagger, b_{k\downarrow}^\dagger)$ を用いて表現された正常状態のハミルトニアン

$$H^{(0)} = \sum_k \hat{D}_k^\dagger \hat{H}_4(k) \hat{D}_k \quad (2.25)$$

によって得られる。ここでは式(2.9)において、化学ポテンシャル μ を0に選んでいる^{*1}。それぞれの磁気多極子状態は、分子場 \mathbf{h}_a と \mathbf{h}_b を以下のようにすることで考慮できる：

$$(\mathbf{h}_a, \mathbf{h}_b) = \begin{cases} (\hat{h}\hat{x}, -\hat{h}\hat{x}) & \text{Case (M) 磁気单極子状態} \\ (\hat{h}\hat{y}, \hat{h}\hat{y}) & \text{Case (D) 磁気双極子状態} \\ (\hat{h}\hat{z}, -\hat{h}\hat{z}) & \text{Case (Q) 磁気四極子状態} \end{cases} \quad (2.26)$$

実際にエネルギーバンドを計算した結果を図2.3に示す。常磁性状態、すなわち $(\mathbf{h}_a, \mathbf{h}_b) = (0, 0)$ のとき[図2.3(N-1), (N-2)]は、2つのバンドは次のような分散関係で表される：

$$E_n(k) = \varepsilon'(k) \pm \sqrt{\varepsilon(k)^2 + \alpha^2 \sin^2 k} \quad (2.27)$$

それぞれのバンドは、(副格子依存する)反対称スピinn軌道相互作用によって混ぜられたスピinnと副格子の自由度に起因する2重縮退をもつ。一方、磁気多極子状態における分散関係は

$$E_n(k) = \begin{cases} \varepsilon'(k) \pm \sqrt{\varepsilon(k)^2 + \alpha^2 \sin^2 k + h^2} & \text{Case (M)} \\ \varepsilon'(k) \pm \sqrt{[\varepsilon(k) \pm h]^2 + \alpha^2 \sin^2 k} & \text{Case (D)} \\ \varepsilon'(k) \pm \sqrt{\varepsilon(k)^2 + (\alpha \sin k - h)^2} & \text{Case (Q)} \end{cases} \quad (2.28)$$

で与えられる。

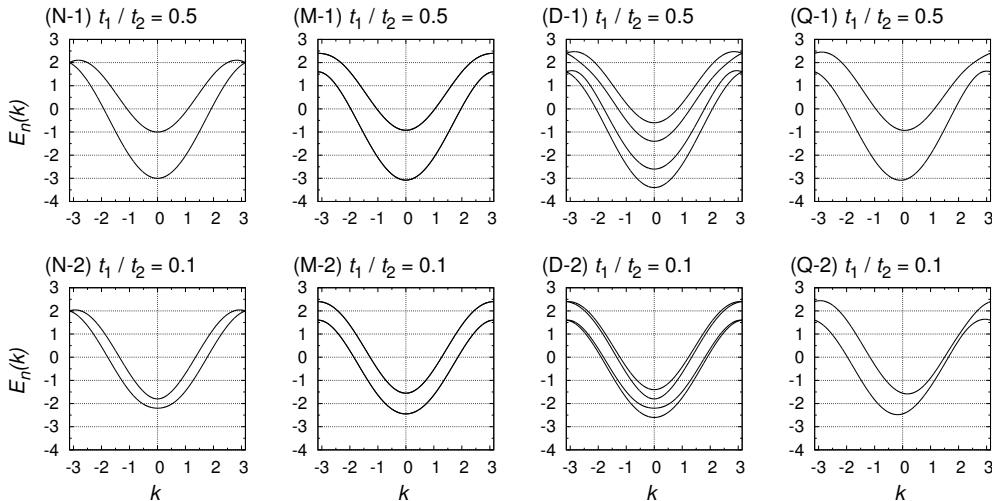


図2.3 (N) 常磁性, (M) 磁気单極子, (D) 磁気双極子, (Q) 磁気四極子状態における1次元ジグザグ格子のバンド構造。それぞれ上側の図は $t_1/t_2 = 0.5$ の結果を、下側の図は $t_1/t_2 = 0.1$ の結果を表す。(M), (D), (Q)においては分子場の大きさを $h = 0.4$ と選んでいる。

2.3.2 磁気多極子状態特有のバンド構造

表2.4はバンド構造の主な2つの特徴を示している：(i)運動量の反転($k \rightarrow -k$)に関する対称性、および(ii)2重縮退である。以下、これらの特徴をそれぞれの磁気多極子状態における対称性の観点から説明する。

^{*1} 正常状態のバンドを考える際には、 μ は単にエネルギーの原点を変えるだけなので特に問題ない。

表 2.4 磁気多極子状態におけるバンド構造.

	(i) 対称性	(ii) 2重縮退
磁気单極子	○	○
磁気双極子	○	×
磁気四極子	×	○

まず、磁気单極子状態においては、もともと大域的に空間反転対称性のある結晶構造にも関わらず、反強磁性秩序が自発的に時間反転対称性 θ を破るだけでなく空間反転対称性 I をも破っている。しかし、正常状態のハミルトニアン $H^{(0)}$ は時間反転と空間反転の合成操作のもとで不变であるので、組み合わせた対称性 θI は保存されている。この合成された操作は $(\theta I)^2 = -1$ を満足するため、Kramers の定理によりバンド構造は 2重縮退をもつ。さらに、この系は 2回回転 $2_x, 2_z$ のもとで不变である：

$$2_x \hat{H}_4(k)(2_x)^{-1} = \hat{H}_4(-k) \quad (2.29a)$$

$$2_z \hat{H}_4(k)(2_z)^{-1} = \hat{H}_4(-k) \text{ Case (M)} \quad (2.29b)$$

これらの式から、磁気单極子状態においては対称的なエネルギー分散 $E_n(k) = E_n(-k)$ であることが理解できる。

次に、磁気四極子状態について考える。この状態においても磁気单極子状態と全く同様の理由で、バンド構造は 2重縮退をもつ。しかし、磁気四極子状態は波数を k から $-k$ に変換するような 2回回転や鏡映に関して不变ではない：

$$2_x \hat{H}_4(k)(2_x)^{-1} \neq \hat{H}_4(-k) \quad (2.30a)$$

$$2_z \hat{H}_4(k)(2_z)^{-1} \neq \hat{H}_4(-k) \quad (2.30b)$$

$$\sigma_y \hat{H}_4(k)(\sigma_y)^{-1} \neq \hat{H}_4(-k) \text{ Case (Q)} \quad (2.30c)$$

したがって、バンド構造を対称的にする全ての対称性が破れており、実際バンド構造は図 2.3(Q-1), (Q-2) に示すように非対称になっている。

最後に磁気双極子状態について考えると、強磁性秩序が空間反転対称性 I を守るためにバンド構造は対称的である。しかし時間反転対称性 θ や合成された対称性 θI は破れており、したがって 2重縮退は解ける。

2.3.3 補足：バンドの縮退

さらに、 $k = \pm\pi$ における対称性に守られた付加的な縮退についても触れておこう。常磁性状態において、2つのスピン縮退したバンドは $k = \pm\pi$ で縮退している。この4重縮退は時間反転-空間反転対称性 $\{\theta I|\mathbf{0}\}$, 2回回転対称性 $\{2_x|\tau_y\}$, 鏡映対称性 $\{\sigma_y|\tau_y\}$ によって守られている。こ

これら 3 つの操作は $k = \pm\pi$ で保存されており、この点で保証される次の 3 つの関係

$$(\{2_x|\tau_y\})^2 = -1 \quad (2.31a)$$

$$\{\{2_x|\tau_y\}, \{\theta I|0\}\} = 0 \quad (2.31b)$$

$$\{\{2_x|\tau_y\}, \{\sigma_y|\tau_y\}\} = 0 \quad (2.31c)$$

から、4 重縮退を示すことができる [75, 76]。2 回回転対称性を用いると、 $k = \pm\pi$ での正常状態のハミルトニアンはブロック対角化され、 $\pm i$ のサブセクターに分解される。 $\{2_x|\tau_y\}$ と $\{\theta I|0\}$ の間の反交換関係によって、各サブセクター内で $\{\theta I|0\}$ が保存される。すなわち、各サブセクター内で Kramers 縮退ができる。さらに、 $\{2_x|\tau_y\}$ と $\{\sigma_y|\tau_y\}$ の間の反交換関係によって、 i サブセクター内の Kramers ペアと、 $-i$ サブセクター内の Kramers ペアが縮退していることが保証される。したがって、4 重縮退が対称性によって保存されていることが示された。磁気单極子状態と磁気四極子状態においては鏡映対称性 $\{\sigma_y|\tau_y\}$ が、磁気双極子状態においては時間反転-空間反転対称性 $\{\theta I|0\}$ が破れている。したがって、磁気多極子状態においてはこの 4 重縮退が解けていることが分かる。

また、磁気双極子状態においても $k = \pm\pi$ での付加的な縮退が見られる。これは、正常状態のハミルトニアンが磁気映進対称性 $\{\theta\sigma_x|\tau_y\}$ を保存しており、 $k = \pm\pi$ で $(\{\theta\sigma_x|\tau_y\})^2 = -1$ を満たしているためである。つまり $k = \pm\pi$ でのみ Kramers の定理が成り立ち、2 重縮退が保証される。

2.3.4 超伝導状態

我々のモデルで安定化する 3 つの超伝導状態 (BCS 状態, PDW 状態, FFLO 状態) の秩序変数についてまとめて整理しておこう。

- 通常の BCS 状態では、Cooper 対の重心運動量はゼロ、すなわち $q = 0$ である。秩序変数は副格子間で一様であり、 $(\Delta_a, \Delta_b) = (\Delta, \Delta)$ となる。
- PDW 状態でも Cooper 対の重心運動量はゼロである。ただし副格子間で秩序変数の符号が変わり、 $(\Delta_a, \Delta_b) = (\Delta, -\Delta)$ という状態である。
- FFLO 状態では、Cooper 対の重心運動量は有限の値をとる ($q \neq 0$)。より一般に知られる FFLO 超伝導では double- q 状態 (q と $-q$ がどちらも超伝導に寄与する状態) が安定になる [5] が、この系で考えられる対称性では单一の q で Cooper 対凝縮が起きる。したがって、実空間での秩序変数は $\Delta(y) = \Delta e^{iqy}$ と表現され、いわゆる「Fulde-Ferrell 状態 [3]」や「ヘリカル状態 [13–16]」と呼ばれる状態である。BCS 状態の場合と同様に、副格子間では秩序変数は一様になっている： $(\Delta_a, \Delta_b) = (\Delta, \Delta)$ 。

2.4 磁気单極子状態における BCS 超伝導

ここからは磁気多極子と共に存する超伝導状態を調べていく。まず最初に、磁気单極子秩序 [図 2.2(M) 参照] と共に存する超伝導について議論する。図 2.4 は、いくつかのパラメータの組に対する T - h 相図を示している。 μ や t_1/t_2 のパラメータに依存せず、相図全体にわたって従来の BCS 超伝導状態が安定であることが分かる。 $t_1/t_2 = 0.5$ のとき [図 2.4(a)]、PDW 状態は準安定な状態ですらない。一方 $t_1/t_2 = 0.1$ のとき [図 2.4(b), (c)] には、あるパラメータ領域で PDW 状態が準安定化する。すなわち、PDW 状態での凝縮エネルギーは負の値をとるもの、その絶対値は BCS 状態での値よりは小さいということである^{*2}。図 2.4 には示していないが、 $\mu = 2$ での相図は $\mu = 1$ のものと似たような図になる。したがって、フェルミ面の数に関係なく、磁気单極子状態では BCS 状態が安定になる。また、全てのパラメータ領域に関して Cooper 対の重心運動量 q はゼロになり、FFLO 状態が安定にならないことも確認している。

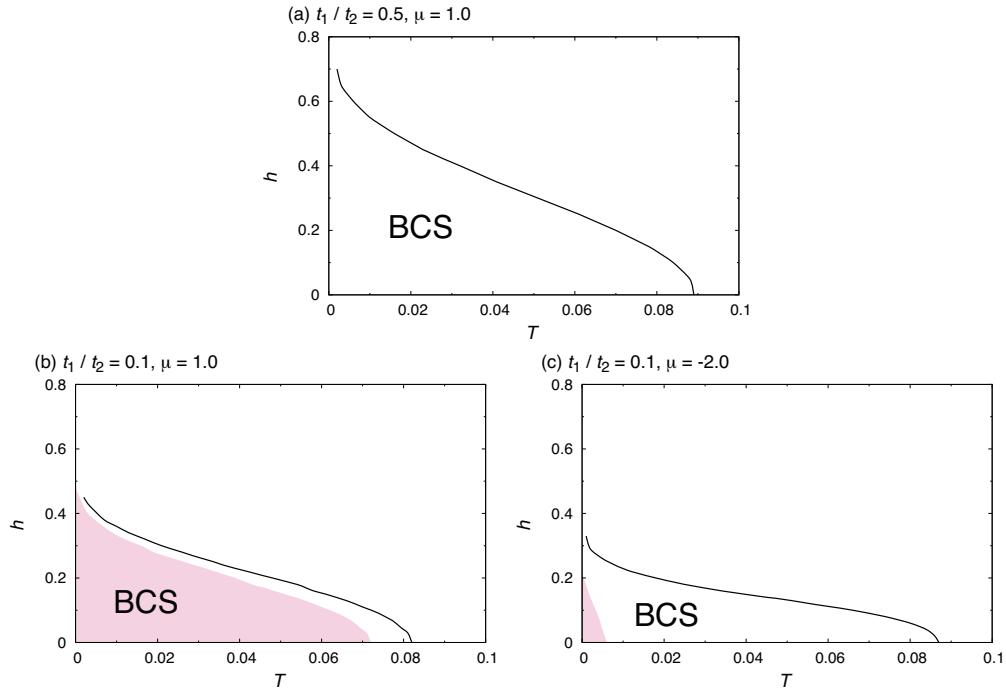


図 2.4 磁気单極子状態における、(a) $t_1/t_2 = 0.5, \mu = 1$ 、(b) $t_1/t_2 = 0.1, \mu = 1$ 、(c) $t_1/t_2 = 0.1, \mu = -2$ についての T - h 相図。超伝導相全体にわたって BCS 状態が安定である。ピンクに色付けられた領域では、PDW 状態が準安定な状態にある。

2.5 磁気双極子状態における PDW 超伝導

次に、磁気双極子状態 [図 2.2(D)] における超伝導を調査する。強磁性金属において超伝導が発現するときこの状況は実現される。実際、ウラン系の重い電子系超伝導体 UGe_2 [54], URhGe [55]

^{*2} 本論文において凝縮エネルギーは、超伝導状態と正常状態での自由エネルギーの差として定義する: $\Delta\Omega = \Omega_S - \Omega_N$.

UCoGe [56] はジグザグ構造を持ち [57], そのような強磁性超伝導が起こっている。本論文では磁気双極子モーメントは y 軸方向を向いていると仮定しており、これは URhGe や UCoGe の強磁性モーメントの向きと合わないように思えるが、今は純粋な 1 次元系を考えているので、スピン空間において x 軸と y 軸は等価である。 x 軸と y 軸はどちらも g -ベクトルに垂直であるということに注意したい。

2.5.1 相図

図 2.5 は $t_1/t_2 = 0.1$ に対する T - h 相図である。弱く分極した (h が小さい) 領域では BCS 状態が安定だが、分極が強く (h が大きく) なっている広いパラメータ領域では PDW 状態が安定化している。BCS 状態と PDW 状態の相境界は 1 次相転移線になっている。この相図は、2 次元の二層系 Rashba 超伝導体での結果とよく類似している [19]。

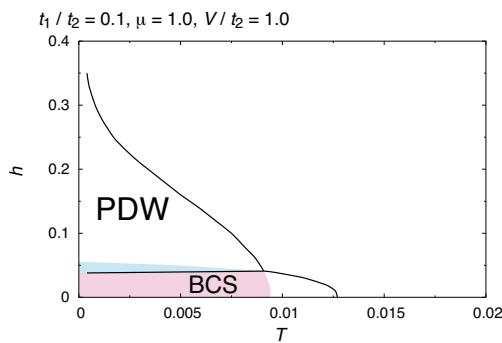


図 2.5 磁気双極子状態における、 $t_1/t_2 = 0.1$ での T - h 相図。ここでは引力相互作用が $V/t_2 = 1.0$ と仮定している。ピンク(水色)に色付けられた領域は、PDW 状態 (BCS 状態) が準安定になっていることを示す。

スピン分極した状況で PDW 状態が起きるメカニズムは Yoshida ら [19, 21] によってよく議論されている(詳しくは 1.1.3 節を参照)。ここでも、Rashba 型反対称スピン軌道相互作用を持つ 2 次元二層系の場合と同様に考えてみよう。有効的な磁場がゼロのとき ($h = 0$) には、副格子間の Josephson 結合により秩序変数の位相を揃えた BCS 状態が安定になる。しかし、 h が大きいときには Pauli 常磁性対破壊効果が働き、BCS 超伝導が不安定になる代わりに、よりこの効果に強い [22] PDW 状態が安定になると考えられる。

ジグザグ格子は副格子 a と副格子 b で構成されており、 t_1 が副格子間の飛び移りである。適度な反対称スピン軌道相互作用をもつ系のとき、小さな t_1/t_2 で PDW 状態は図 2.5 に示すように広いパラメータ領域で安定化し、 t_1/t_2 が大きくなるにつれて PDW 状態は抑制される。我々の選んだパラメータでは、 $t_1/t_2 > 0.7$ になると PDW 状態は安定にならない。2 次元二層系 Rashba 超伝導体では、PDW 状態が安定化する条件は $\alpha/t_{\perp} \gtrsim 1^{*3}$ という結果であった [19] が、今回の結果では $\alpha/t_1 \sim 0.6$ でも PDW 状態が安定化した。この理由の 1 つとして、副格子間の結合は t_1

^{*3} ここで t_{\perp} は層間の飛び移りを表しており(1.1.3 節参照)、ジグザグ格子における副格子間の飛び移り t_1 と対応する。

よりもむしろ $\varepsilon(k_F)$ で表されるものであり、しかも $\varepsilon(k)$ は $k = \pm\pi$ で消えるということが挙げられる。2.3節で述べたように、 $k = \pm\pi$ での4重縮退は2回回転対称性 $\{2_x|\tau_y\}$ と鏡映対称性 $\{\sigma_y|\tau_y\}$ に守られている。したがって、 $\varepsilon(\pm\pi)$ が消えることは非共型な結晶構造によって保証されている。フェルミ運動量が $k = \pm\pi$ に近いとき、 $\varepsilon(k_F)$ が小さくなることによってPDW状態がより安定になる。

補足

図2.5に示したように、PDW状態は $\mu = 1$ 、つまり4枚のエネルギーバンドがフェルミ準位を横切る[図2.3(D-2)参照]とき安定になる。同様に、フェルミ準位上に2枚や3枚のエネルギーバンドがあるときにもPDW状態は安定化する。いずれの場合も、Cooper対の重心運動量 q が0になることも確認している。しかし、化学ポテンシャルがバンド端の近辺にあり、1枚のバンドしかフェルミ準位にかからない場合には、PDW状態は安定にならない。

2.5.2 トポロジカル超伝導

ここでは、PDW状態が巻き付き数や \mathbb{Z}_2 不変量によって特徴付けられる1次元のトポロジカル超伝導であることを示す。BdGハミルトニアンにブリランゾーンの周期性を持たせるため、 $a_k^\dagger \rightarrow a_k^\dagger e^{ik/2}$ というゲージ変換を施しておく。このようなユニタリー変換は非共型な系におけるトポロジカルな性質を議論する際に有用である[77]。

巻き付き数

まず、巻き付き数について明らかにする。 x 軸や y 軸に沿った磁気モーメントによる強磁性状態においては、この系は磁気鏡映、すなわち時間反転 $\theta = -i\hat{\sigma}_y\mathcal{K}$ の後に xy 面に関する鏡映 $\mathcal{M}_{xy} = -i\hat{\sigma}_z$ を行う変換 $\mathcal{T} = \mathcal{M}_{xy}\theta$ のもとで不变である(ここで \mathcal{K} は複素共役演算子)。したがって、BdGハミルトニアン(2.8)は擬時間反転対称性をもつ:

$$\mathcal{T}_8 \hat{H}_{\text{BdG}}(-k) \mathcal{T}_8^\dagger = \hat{H}_8(k) \quad (2.32)$$

ここで

$$\mathcal{T}_8 = \begin{pmatrix} \mathcal{T} & \hat{0} \\ \hat{0} & \mathcal{T}^* \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

である。さらに、このBdGハミルトニアンは粒子正孔対称性を満たす:

$$\mathcal{C} \hat{H}_8(-k) \mathcal{C}^\dagger = -\hat{H}_8(k) \quad (2.34)$$

ここで $\mathcal{C} = \hat{\tau}_x \mathcal{K}$ であり、 $\hat{\tau}_x$ は粒子正孔空間でのパウリ行列である。これらの擬時間反転対称性と粒子正孔対称性を合わせると、カイラル対称性 $\Gamma = -\mathcal{C} \mathcal{T}_8$ を定義できる:

$$\{\Gamma, \hat{H}_8(k)\} = 0 \quad (2.35)$$

このカイラル対称性によって、1次元巻き付き数

$$\omega = \frac{1}{4\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk \text{Tr} [\hat{q}(k)^{-1} \partial_k \hat{q}(k) - \hat{q}^\dagger(k)^{-1} \partial_k \hat{q}^\dagger(k)] \quad (2.36)$$

は、有限のギャップが空いているとき \mathbb{Z} のトポロジカル不変量になるということが保証される [78–84]。 4×4 行列 $\hat{q}(k)$ は、 Γ を対角化するユニタリー行列 \hat{V} を用いて

$$\hat{V} \hat{H}_8(k) \hat{V}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{0} & \hat{q}(k) \\ \hat{q}^\dagger(k) & \hat{0} \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

というユニタリー変換を行うことによって得られる [85]。

$(\mathcal{T}_8)^2 = +1$ かつ $\mathcal{C}^2 = +1$ であるから、BdG ハミルトニアン $\hat{H}_{\text{BdG}(k)}$ は対称クラス BDI に属する。したがって、巻き付き数 ω はクラス BDI のトポロジカル不変量 ν^{BDI} と同一視できる [86–88]。図 2.6 は巻き付き数の化学ポテンシャル依存性を、図 2.3(D-2) のエネルギーバンドと共に示している。1 枚または 3 枚のバンドがフェルミ準位を横切るときに有限の巻き付き数 $\nu^{\text{BDI}} = -1$ が得られ、トポロジカルに非自明な性質を持つことを表している。他の場合には巻き付き数は自明な値である ($\nu^{\text{BDI}} = 0$)。

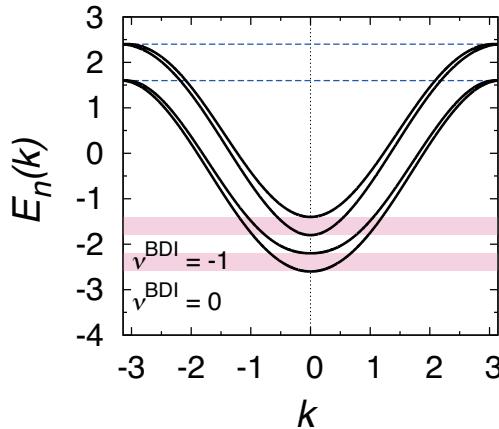


図 2.6 $t_1/t_2 = 0.1$, $h = 0.40$, $(\Delta_a, \Delta_b) = (0.01, -0.01)$ での巻き付き数 ν^{BDI} の化学ポテンシャル依存性。化学ポテンシャルがピンクに色付けられた領域内にあるとき巻き付き数は非自明になる: $\nu^{\text{BDI}} = -1$ 。青色の破線は、ギャップが閉じてしまうために巻き付き数が定義できない化学ポテンシャルの値を表している。

マヨラナ端状態

指数定理を用いると、非自明な巻き付き数によってマヨラナ端状態の存在が保証される [80]。実際、図 2.7 はマヨラナ端状態の存在を表している。エネルギースペクトル ε_n は開放端条件によって得られ、エネルギー固有値は $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \dots$ というように昇順になっている。図 2.7(b) と (d) によって、非自明な巻き付き数 $\nu^{\text{BDI}} = -1$ に守られた 1 つのマヨラナ端状態があることが分かる。

この 1 つのマヨラナ状態は、たとえ磁気鏡映対称性が破れても壊れないような摂動に強い状態である。実際、 $\nu^{\text{BDI}} = -1$ の PDW 状態は、クラス D の \mathbb{Z}_2 不変量に特徴付けられる強いトポロジカル超伝導である [86–88]。巻き付き数のパリティは、 \mathbb{Z}_2 不変量 ν と同等である。この不変量は Berry 位相

$$W[C] = \frac{1}{2\pi} \sum_{n \in \text{occupied}} \oint_C dk i \langle u_n(k) | \partial_k | u_n(k) \rangle \quad (2.38)$$

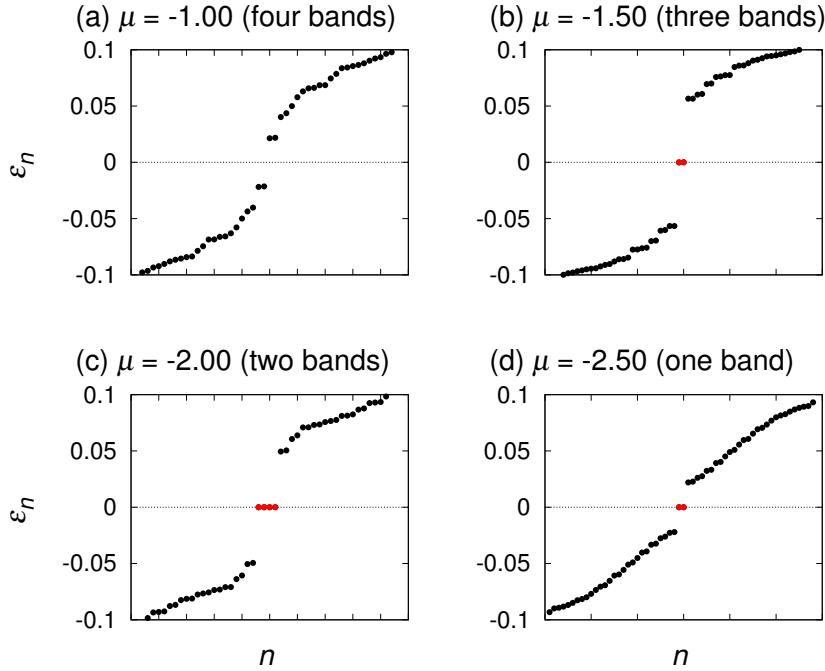


図 2.7 開放端条件での PDW 状態のエネルギースペクトル。強磁性の分子場は $h = 0.4$ と仮定し、化学ポテンシャルは (a) $\mu = -1$, (b) $\mu = -1.5$, (c) $\mu = -2$, (d) $\mu = -2.5$ としている。これらの化学ポテンシャルは、フェルミ準位にかかるバンドの数と対応しており、それぞれ 4, 3, 2, 1 枚になる。その他のパラメータは $t_1/t_2 = 0.1$, $(\Delta_a, \Delta_b) = (0.1, -0.1)$ としている。赤い点がマヨラナ端状態を表しており、2 つの端があることでその数は倍になっている。

で表される量である。ここで C はブリルアンゾーン内の時間反転不変な (time-reversal invariant, TRI) 閉回路で, $|u_n(k)\rangle$ は $\hat{H}_{\text{BdG}}(k)$ の固有状態である。BdG ハミルトニアンは粒子正孔対称性を保存するので, Berry 位相は $e^{2\pi i W[C]} = \pm 1$ というように量子化される [89]。TRI 閉回路は 1 次元系において $C = \{k \in [-\pi : \pi]\}$ の唯 1 つしかないので, 1 つの \mathbb{Z}_2 不变量 $e^{2\pi i W[C]} = (-1)^\nu$ を得る。特に, 正常状態のハミルトニアンは空間反転対称性を保存するが, ギャップ関数のパリティは PDW 状態では奇である。このようなとき, \mathbb{Z}_2 不变量は

$$(-1)^\nu = \prod_n \text{sgn } E_n(\Gamma_1) \text{ sgn } E_n(\Gamma_2) \quad (2.39)$$

という式で評価できる [90]。ここで Γ_1 と Γ_2 は TRI 運動量, すなわち $\Gamma_1 = 0$, $\Gamma_2 = \pi$ である。この表式から, \mathbb{Z}_2 不变量は奇数枚のバンドがフェルミ準位を横切るときに非自明になることが分かる。この条件は, $\nu^{\text{BDI}} = -1$ となるときの条件と一致している。したがって, PDW 状態はクラス D の 1 次元 \mathbb{Z}_2 トポロジカル超伝導と同一視できる。

ここで, 図 2.7(c) のゼロエネルギー状態について簡単にコメントしておこう。2 枚のバンドがフェルミ準位を横切るとき, 巻き付き数や \mathbb{Z}_2 不变量は自明な値をとる ($\nu^{\text{BDI}} = \nu = 0$) にも関わらず, 2 つのマヨラナ端状態が見られる。これらの端状態は何か別の対称性に守られている可能性がある。しかしいずれにしても, 2 つマヨラナ粒子があればそれらがペアを組んでただのフェルミオンになってしまうと予想できるので, これはあまり重要な結果ではないと考えられる。

Kitaev 鎖とのアナロジー

トポロジカル超伝導への直感的な拡張としては、バンド基底で表示した BdG ハミルトニアン

$$\hat{U}(k)^\dagger \hat{H}_{\text{BdG}}(k) \hat{U}(k) \simeq \bigoplus_{n=1}^4 \begin{pmatrix} E_n(k) & \Delta_n(k) \\ \Delta_n^*(k) & -E_n(-k) \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

を見るという方法がある。ここで $\hat{U}(k) = \begin{pmatrix} \hat{U}_4(k) & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{U}_4^*(-k) \end{pmatrix}$ であり、 $\hat{U}_4(k)$ は $\hat{H}_4(k)$ を対角化するユニタリー行列である。バンド基底で表示された秩序変数は、近似的には p 波の形をしている： $\Delta_n(k) \sim \sin k$ 。そういう意味で、この状況はスピンレス p 波超伝導体の Kitaev 鎖 [91] と似ている。もとの超伝導は従来のスピン一重項 s 波ペアリング相互作用によって誘起されているが、秩序変数の副格子間の位相変調によって、有効的に Kitaev 鎖と似た p 波超伝導状態が実現しているのである。

まとめ

1 次元の空間反転対称性が破れた系におけるトポロジカル超伝導相は理論的側面から明らかにされつつあり [92, 93]、最近では実験においてもマヨラナ状態の兆候が半導体 [94, 95] や強磁性原子鎖 [96] で得られている。これらの系では空間反転対称性の破れを必要としているが、それに対し我々の研究では、自発的に形成された奇 parity の PDW 秩序変数によって引き起こされる、反転対称性のあるトポロジカル超伝導が提案される。

2.6 磁気四極子状態における FFLO 超伝導

最後に、磁気四極子状態 [図 2.2(Q)] における超伝導を明らかにする。以下では、 $t_1/t_2 = 0.5$ と仮定する。

2.3 節で示したように、磁気四極子状態においてはエネルギーバンドは非対称になり [図 2.3(Q-1) 参照]、これは常磁性状態や他の多極子状態とは大きく異なる性質である。大雑把に言うと、2 枚のバンドのうち上側の（下側の）バンドは正の（負の）運動量方向に変形していることが図 2.3 より分かる。この普通でないバンド構造によって、エキゾチックな超伝導状態が実現する可能性がある。実際、ゼロ磁場においても FFLO 状態が安定化することを以下で示す。

2.6.1 T - μ 相図

2 つの h の値に対する T - μ 相図を図 2.8 に示す。非対称なバンド構造のために、超伝導相全体にわたって Cooper 対は有限の重心運動量をもつ。この非対称性は磁気四極子状態の対称性に起因するものであり、したがって FFLO 状態は反対称スピン軌道相互作用が消えない限りパラメータに関係なく安定になる。 $\alpha = 0$ のときは、バンド構造が対称的になるため広いパラメータ領域で BCS 状態が安定化する。

相図についてより詳細に議論しよう。まず、図 2.8(a) と 2.8(b) の共通点について触れる。転移温度を見ると、 $\mu \lesssim -1$ よりも $\mu \gtrsim -1$ の方が全体的に高くなっている。これは、 $\mu \lesssim -1$ の領

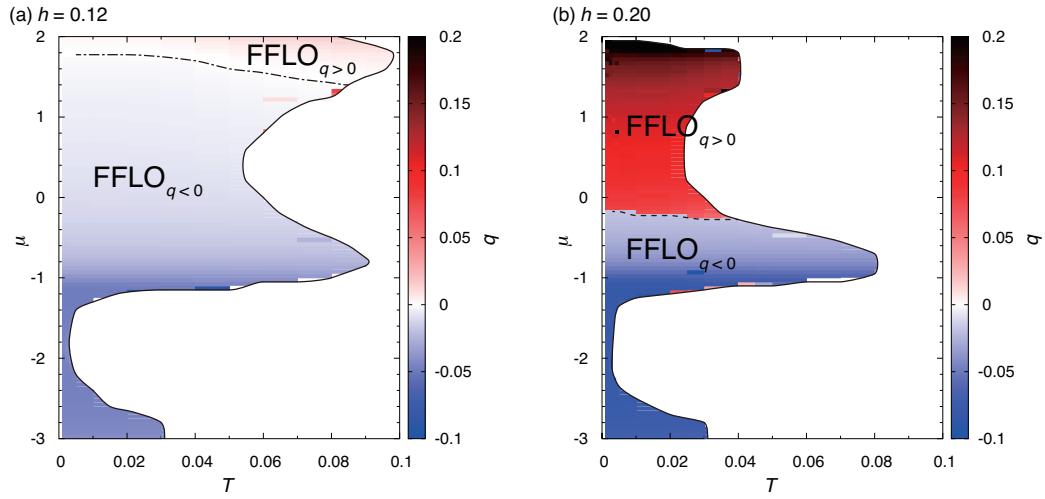


図 2.8 磁気四極子状態における、(a) $h = 0.12$, (b) $h = 0.20$ に対する T - μ 相図。Cooper 対の重心運動量 q は色によって表されている。破線は 1 次相転移線を示し、一点鎖線はクロスオーバーの線を示している。

域では 1 枚のバンドしかないが、 $\mu \gtrsim -1$ の領域ではバンドが 2 枚あり状態密度が大きくなるためである。バンド端近辺 ($\mu \simeq -3, -1, 2$) においても状態密度が大きくなるため、転移温度はより高くなる。次に、「小さな磁気四極子領域」($h = 0.12$) と「大きな磁気四極子領域」($h = 0.20$) の違いについて考える。図 2.8 では、Cooper 対の重心運動量 q の符号に応じて “FFLO _{$q>0$} ” と “FFLO _{$q<0$} ” という状態を明記している。 q の μ と T 依存性は図 2.8 において色で示されている。小さな磁気四極子領域において重心運動量 q は連続的に変化しているが [図 2.8(a)], 大きな磁気四極子領域では、FFLO _{$q<0$} 状態と FFLO _{$q>0$} 状態の間 ($\mu \simeq -0.20$) に 1 次相転移があり、 q の不連続な飛びがあることが分かる [図 2.8(b)]。 μ が小さな領域における負の値の q は、下側のバンドが負の運動量方向にシフトしていることに起因する。つまり、下側のバンドの 2 つのフェルミ運動量の和は負の値になる。一方で、上側のバンドは FFLO _{$q>0$} 状態に有利に働くため、フェルミ準位にバンドが 2 つある領域では FFLO _{$q<0$} 状態と FFLO _{$q>0$} 状態は競合するはずである。実際、Lifshitz 転移を越えると重心運動量 q は μ の増加とともに大きくなる。

2.6.2 凝縮エネルギーと状態密度

FFLO 状態において重心運動量 q を主に決定するのが何なのかを明らかにするため、凝縮エネルギー $\Delta\Omega = \Omega_S - \Omega_N$ (超伝導状態と正常状態の間の自由エネルギーの差) に注目する。正常状態の自由エネルギーは $\Delta_a = \Delta_b = 0$ と仮定することで得られる。

図 2.9(a, b) は小さな磁気四極子領域での凝縮エネルギーを q の関数として描いたものである。谷が 1 つだけ現れ、その底が μ の増加とともに q の正方向へ移動している。したがって、凝縮エネルギーを最小化する最適な q は連続的に変化する。

一方、大きな磁気四極子領域では 3 つの谷があることが分かる。図 2.9(d) では、左右の谷は負の凝縮エネルギーを持つが、中央の谷は正の凝縮エネルギーを持ち、準安定状態を表していることが分かる。化学ポテンシャルを $\mu = -0.5$ に下げると [図 2.9(c)], 凝縮エネルギーは $q = -0.026$

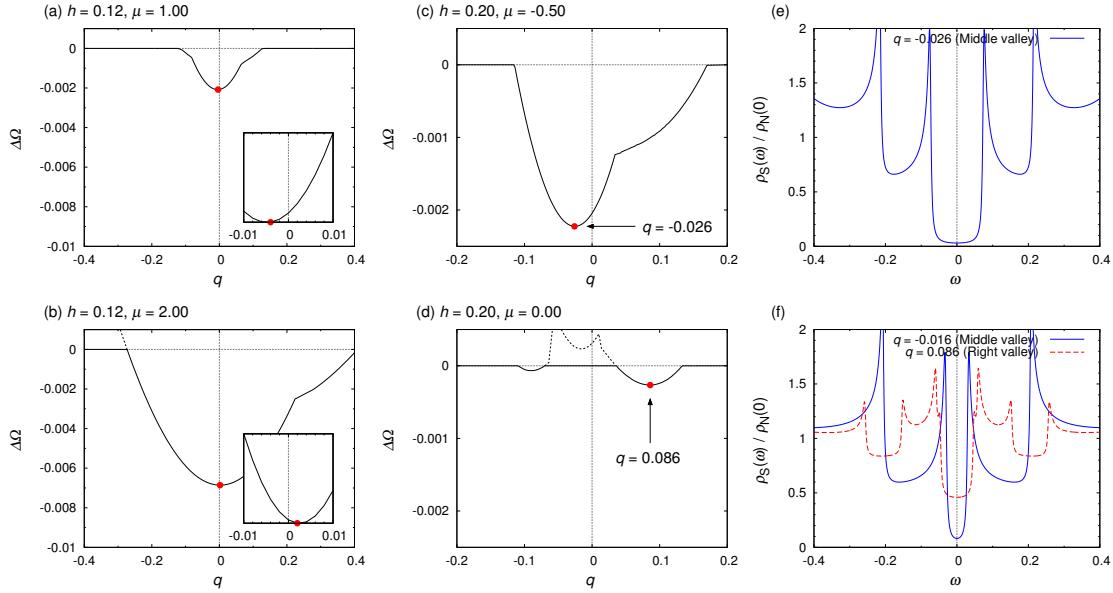


図 2.9 (a, b) 小さな磁気四極子 $h = 0.12$ での、(a) $\mu = 1$, (b) $\mu = 2$ に対応する凝縮エネルギー $\Delta\Omega = \Omega_S - \Omega_N$ の q 依存性。 (c, d) 大きな磁気四極子 $h = 0.20$ での、(c) $\mu = -0.5$, (d) $\mu = 0$ に対応する凝縮エネルギー。赤い点は凝縮エネルギーを最小化する最適な q を示している。 (e, f) それぞれ (c) と (d) に対応した超伝導状態密度 $\rho_S(\omega)$ 。正常状態のフェルミ準位での状態密度 $\rho_N(0)$ で規格化されている。

で最小値をとる。この $q = -0.026$ の状態から出発して断熱的に μ を増加させていくと、図 2.9(d) で点線で示される中央の谷底の状態に行き着く。以上より、FFLO _{$q < 0$} 状態は中央の谷の状態に対応し、FFLO _{$q > 0$} 状態は右の谷の状態に対応していることが分かる。言い換えると、重心運動量 q は自由エネルギーに複数の谷構造が現れることによって不連続に変化する。一方で、小さな磁気四極子領域ではそのような谷構造が隠れており、中央の谷だけが極小値を持っていると理解できる。

では次に、3つの谷に対応する超伝導状態が何なのかを明らかにするため、準粒子の状態密度を見るところにする。「中央の谷状態」においては、 $\mu = -0.5$ と $\mu = 0$ のどちらにおいても $\omega = 0$ 付近に超伝導ギャップが開いていることが分かる [図 2.9(e, f) 青実線]。 $\mu = -0.5$ でのギャップより $\mu = 0$ でのギャップの方が狭いのは、「中央の谷状態」が $\mu = 0$ ではあまり安定でないことを示している。実際、中央の谷状態は準安定状態で、「右の谷状態」が安定になっていることが図 2.9(d) より分かる。中央の谷状態と違って、右の谷状態においては $\omega = 0$ での約 0.5 の状態密度が残っている [図 2.9(f) 赤点線]。したがって、中央の谷状態では 2枚のエネルギーバンド両方が超伝導に寄与しているが、右の谷（左の谷）状態では上側の（下側の）バンドだけが主に超伝導に寄与している、ということが示唆される。言い換えると、下側のバンドは超伝導が弱く、右の谷状態において大きな状態密度を残している。この見地は、右の谷状態での重心運動量 q が上側のバンドのフェルミ運動量の和とほぼ一致していることとも辻褄が合っている。したがって、大きな磁気四極子領域ではバンド依存する FFLO 状態が安定化している。上側のバンドのフェルミ面の準粒子が Cooper 対を形成し、その重心運動量 q は下側のバンドの変形の仕方と一致せず下側の

バンドでは超伝導ギャップが抑制される。一方、中央の谷状態では超伝導はほぼ同等に2つのバンドに影響している。ただし、下側のバンドの方が上側のバンドより変形が大きいので、 q はわずかに負の値をとる。

2.7 結論

この章では、磁気多極子と共に存する超伝導を研究するため、ミニマルモデルとして1次元のジグザグ格子を選んで調査を行った。この系は副格子の自由度によって局所的に空間反転対称性が破れていることから、通常の磁気双極子モーメントだけでなく、奇 parity の多極子モーメントも誘起される可能性がある。特に、結晶運動量 $q_M = 0$ の強的な多極子状態をモデル内に取り入れて計算を行った。この多極子状態によって、以下に述べる様々なエキゾチックな超伝導状態が誘起される。

磁気单極子状態においては、単位格子内に反強磁性モーメントが存在するが、それに対してもロバストな BCS 超伝導が実現する。一方で磁気双極子状態においては BCS 状態は抑制され、奇 parity のスピニ重項 PDW 状態が安定化する。後者の状況は、ウラン系重い電子系超伝導体 UGe₂ [54], URhGe [55], UCoGe [56] と対応する。これらの物質では、スピニ三重項超伝導が実現すると考えられてきた。今回の結果はそれを否定するものではないが、これらの強磁性超伝導体でスピニ重項の PDW 状態が実現しているという新たな可能性を切り開くことができた。この PDW 状態はバンドの1つが十分にスピニ分極していればトポロジカル超伝導状態となる。我々はクラス BDI の非自明な巻き付き数だけでなく、クラス D の非自明な \mathbb{Z}_2 不变量の存在を示した。これらの非自明なトポロジカル数によって、1つのマヨラナ端状態の存在が保証される。

反対称スピニ軌道相互作用と結び付いた磁気四極子秩序はバンド構造を非対称にする。この非対称なバンドによって、スピニ分極させずとも FFLO 状態が安定化する。この発見は、長年行われてきた FFLO 状態の探索 [5] に新たな道を切り開くものである。過去の研究 [97–99] では大きな Maki パラメータを持つ超伝導体を調査していたが、FFLO 状態を安定化させるためにかける外部磁場は、同時に FFLO 状態を見えなくする可能性のある渦糸を誘起してしまう。一方、磁気四極子秩序によって引き起こされる FFLO 状態は外部磁場を必要としないため、渦糸の影響を避けることができる。したがって、磁気四極子秩序と共に存する超伝導を探索することによって、FFLO 超伝導の確実な証拠を得ることができると考えられる。

この FFLO 状態はバンドに依存するという特徴を持つ。磁気四極子モーメントが小さいときは、上側のバンドと下側のバンドは（どちらもフェルミ準位を横切っていれば）ほぼ同程度超伝導に寄与している。このとき Cooper 対の重心運動量は小さく、化学ポテンシャルと共に連続的に増加する。一方、大きな磁気四極子領域のときは、重心運動量は不連続に変化する。この1次相転移の起源は、まさしくこの FFLO 状態がバンド依存していることに起因する。化学ポテンシャルが小さいときは2つのバンドはほとんど同じくらい超伝導に寄与しているが、化学ポテンシャルが大きくなると上側のバンドだけが主に超伝導を引き起こしている。このようなバンド依存する FFLO 超伝導は本章の1次元ジグザグ格子に限った話ではなく、磁気四極子秩序を持つような

系で一般に実現するものと考えられる。特に非共型結晶の場合には、ブリルアンゾーンの端でバンドの縮退が起きる（場合が多い）ので、バンド同士が遠くのエネルギー域に離れてしまうことが少ない。したがって、磁気四極子秩序を持つような様々な非共型結晶を調査することで、バンド依存する FFLO 超伝導という興味深い現象を観測できるであろう。実際、 Sr_2IrO_4 の $-+-+$ 秩序と共に存する超伝導がその例になっていることも後述する（3.5 節参照）。

第3章

Sr_2IrO_4 において磁気多極子と共に存する超伝導

第2章ではミニマルモデルとして1次元ジグザグ格子を選び、磁気多極子と共に存する超伝導が非常にバラエティに富んだ性質を持つことを見てきた。そこで本章では、こうした豊かな物性が現実の物質で起こりうる一つの適用例として、イリジウム酸化物 Sr_2IrO_4 を対象とした研究を行う。この物質で提案されている磁気構造に注目し、それと共に存するような超伝導が起きたという仮定のもとで解析を行い、その超伝導状態がどんな新奇な性質を持つかを議論する。

本章の構成は以下の通りである。3.1節では、様々な実験結果をレビューし、 Sr_2IrO_4 という物質の背景をまとめておく。次に Sr_2IrO_4 を表す3次元の1軌道 tight-binding モデルを導入し(3.2.1節)、平均場近似(3.2.2節)あるいは線形化 BdG 方程式(3.2.3節)による定式化を行う。また、3.2.4節では空間群を用いた超伝導ギャップの分類法について説明する。3.3節では Sr_2IrO_4 で提案されている磁気構造のうちの2つ、 $-++-$ 秩序と $-+-+$ 秩序(詳細は3.1節)について特に注目し、それぞれ磁気八極子と磁気四極子の秩序に対応していることを見る。3.4.1節では、 $-++-$ 状態における超伝導は(磁気的な)非共型対称性によって非自明なギャップ構造を示すことを群論によって明らかにする。さらに3.4.2節で、特に s 波超伝導と d_{xy} 波超伝導を仮定した数値解析によって、我々の作成したモデルで実際に群論の結果が再現できることを示す。一方3.5節では、 $-+-+$ 秩序によってバンド構造が非対称になり、FFLO超伝導が実現しうるということを示す。最後に、3.6節で本章の結論をまとめ、3.7節に付録を添付しておく。

3.1 物質の背景

層状ペロブスカイト構造を持つ5d遷移金属酸化物 Sr_2IrO_4 は、銅酸化物高温超伝導体と多くの類似点を持つことから近年注目を集めている。例えば、 Sr_2IrO_4 と La_2CuO_4 は1つのIr(Cu)イオンごとに1つの正孔を持っていることや、どちらの物質も擬スピン $J_{\text{eff}} = 1/2$ の反強磁性秩序を示す[63]ことである。さらに、最近の電子ドープした Sr_2IrO_4 における実験では、超伝導由来と考えられる擬ギャップの発現や[64–66]、低温での d 波ギャップの性質[67]が観測されている。このような面白い性質を持つ Sr_2IrO_4 という物質について説明しておく。

3.1.1 電子ドープした Sr_2IrO_4 における d 波ギャップ

文献 [67] の結果について簡単にレビューしておこう。図 3.1(a, b) は、約 7 % 電子ドープした Sr_2IrO_4 における角度分解光電子分光 (angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES) のフェルミ面上についての強度マップを描いたものである。 $T = 10 \text{ K}$ では、このマップにおいて有限の強度を持つ軌跡は $(\pi/2, \pi/2)$ の点の近くにかなり集中している。この軌跡に沿ってエネルギー分散曲線 (energy distribution curve, EDC) を描いたものが図 3.1(c) である。光電子スペクトル強度は波数とエネルギーに依存するが、EDC は波数を一定にしたときの光電子のエネルギー分布 $I(E)$ をプロットしたものであり、図 3.1(c) においてはフェルミ準位に関して対称化した EDC $I(E - E_F) + I(-(E - E_F))$ を描いている^{*1}。 $T = 10 \text{ K}$ の場合には、ブリルアンゾーン第一象限内の 1 つの \mathbf{k} 点、すなわち $(\pi/2, \pi/2)$ 付近のノードを除いて明らかにギャップが開いていることが分かる [図 3.1(a, c)]。また、高温になるとこのギャップが閉じていき、ノードが成長して有限の長さのフェルミアークになることが分かる [図 3.1(b, c)]。このフェルミアークの長さは温度やドープ量に強く依存しており、かつその位置は金属相にあるときのフェルミ面から離れてしまうという特徴を持つ [64] が、こういった性質はこれまでにないものであり、このフェルミアークが出る起源は非自明である。

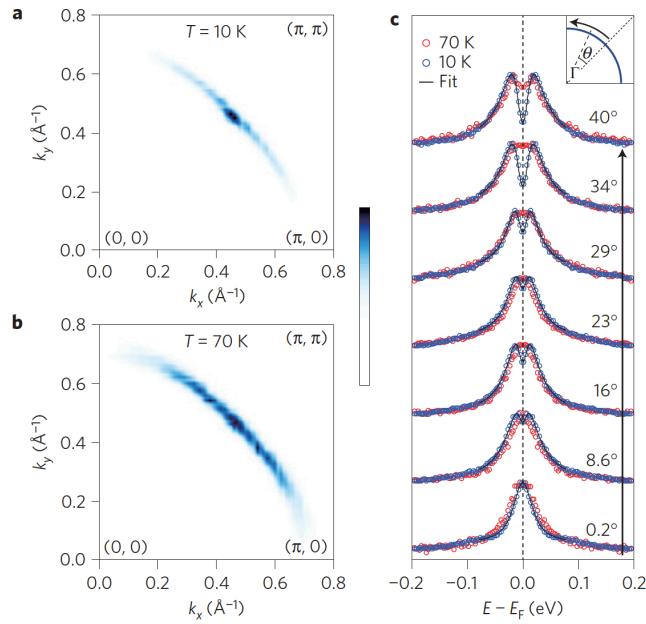


図 3.1 低温でのノードのあるフェルミ面と高温でのフェルミアーク [67]。 (a, b) 約 7 % ドープした Sr_2IrO_4 について、(a) $T = 10 \text{ K}$ および (b) $T = 70 \text{ K}$ で測定したフェルミ準位上の ARPES 強度マップ。図は $(0, 0)$ - (π, π) 線に関して対称化されている。(c) フェルミ面に沿って対称化された EDC (白抜きの円) を $T = 10 \text{ K}$ および $T = 70 \text{ K}$ について表示したもの。

^{*1} 小さい $|\omega|$ および \mathbf{k}_F 周辺の小さな領域内に対して粒子正孔対称性が成り立っていると仮定すると、 \mathbf{k}_F での対称化された強度 $I(\omega) + I(-\omega)$ は単にスペクトル関数に等しくなる [100, 101]。銅酸化物高温超伝導体と比較する意味もあってこのような表示になっている。

\mathbf{k} 点をいくつか固定して、ギャップの温度依存性を見たものが図 3.2 である。図 3.2(a) はフェルミアーク上でノードから 17° 離れた \mathbf{k} 点でのデータであるが、温度が減少していくと $T = 30$ K 以下から有限のギャップが現れ始め、 $T = 10$ K では最大の 22 meV になる [図 3.2(d)]。しかし、ノード上 [図 3.2(b)] やアンチノード上 [図 3.2(c)] でのスペクトルの温度依存性は、上記のノード付近でのギャップの開きとは無関係である。すなわち、低温でのノードのある金属相と、高温でのフェルミアーク相を区別する特徴は、ノード付近でのギャップが決定している。このように、スペクトルの温度依存性が \mathbf{k} によって変わることといった特徴は、銅酸化物高温超伝導体でも見られている [101, 102]。

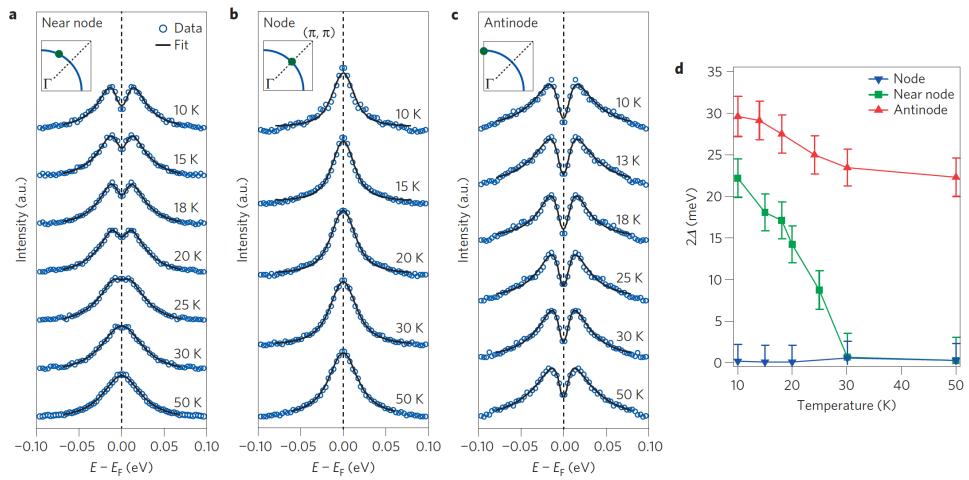


図 3.2 ギャップの温度依存性 [67]。3 つの代表的な運動量についてデータを取っている。
(a-c) 対称化された EDC (白抜きの円) を (a) ノード付近のスペクトル, (b) ノード上のスペクトル, および (c) アンチノード上のスペクトルについて表示したもの。
(d) ギャップの大きさを温度の関数として表示したもの。

以上で示してきたような実験結果は、 Sr_2IrO_4 と銅酸化物高温超伝導体との類似性をさらに強くするものである。また、 Sr_2IrO_4 において d 波超伝導が発現することを理論的に提案した研究もある [103–106]。こういった背景から、 Sr_2IrO_4 における超伝導の実現が期待されている。

3.1.2 結晶構造

Sr_2IrO_4 の結晶空間群は元々 $I4_1/\text{acd}$ であると中性子粉末回折の実験結果から考えられていた [107, 108]。しかし最近の中性子単結晶回折の実験によって、結晶構造はむしろ $I4_1/a$ ではないかという提案がなされ [72, 109]、この結果は非線形光高調波発生の実験においても確かめられている [110]。いずれの場合でも、 Sr_2IrO_4 は大域的な空間反転対称性を持つ系である。一方、Ir サイトを中心に考えた対称性は S_4 であるので、 Sr_2IrO_4 は局所的に空間反転対称性を破っている。1.1 節でも述べたように、このような局所的に反転対称性を破る系では、反対称スピン軌道相互作用によって豊かな物性が現れることが期待される。

3.1.3 磁気構造

Sr_2IrO_4 の磁気的な基底状態は共鳴 X 線散乱 [68–70], 中性子回折 [71, 72], 第二高調波発生 [73] といった様々な実験によって調べられている。このトピックについては、最近の Matteo と Norman の研究 [34] によくまとめられている。 $T_N \simeq 230$ K 以下では、図 3.3 に示すように、 ab 面内かつ a 軸に対して 12° 傾いた反強磁性秩序が発現する。この面内の磁気パターンは、 a 軸方向については反強磁性の成分を持つが、 b 軸方向については強磁性の成分を持つ。ドープされていない化合物では、 b 軸方向の強磁性成分は図 3.3 の黒矢印で示すような $- + + -$ のパターンを持つ [68, 69, 71]。一方、 ab 面内の磁場をかけた Sr_2IrO_4 や [68]、Rh をドープした $\text{Sr}_2\text{Ir}_{1-x}\text{Rh}_x\text{O}_4$ [70, 72] では、 $+++ +$ の磁気構造が提案されている（図 3.3 の青矢印）。しかし、近年の第二高調波発生の実験 [73] では、 Sr_2IrO_4 の隠れた奇パリティ秩序として $- - + +$ の磁気構造（図 3.3 の赤矢印）を発見したと主張している。Matteo と Norman は、文献 [68, 70, 72, 73] の実験では実際には $+++ +$ の磁気構造と $- - + +$ の磁気構造を判別できないので、2 つのパターンを区別できるような X 線や中性子による更なる調査が必要だと強調している [34]。

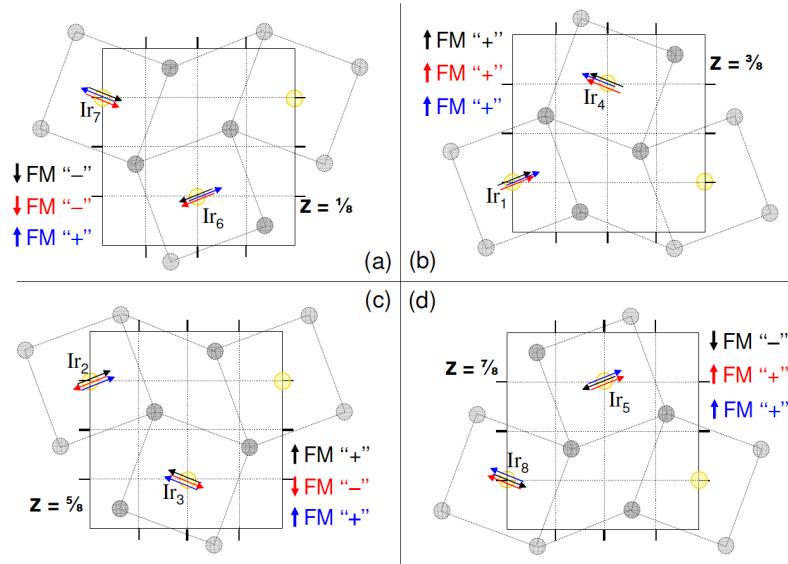


図 3.3 Sr_2IrO_4 の結晶構造と磁気構造を単位格子内の 4 つの IrO_2 面：(a) $z = \frac{1}{8}$ 面、(b) $z = \frac{3}{8}$ 面、(c) $z = \frac{5}{8}$ 面、(d) $z = \frac{7}{8}$ 面について描いた図 [34]。実験的に提案されている 3 つの磁気構造、 $- + + -$ （黒矢印）と $+++ +$ （青矢印）、および $- - + +$ （赤矢印）について示している。これらは面内の強磁性モーメントの b 軸成分が異なっている。

3.2 モデルと手法

この節では、数値計算で用いるための Sr_2IrO_4 のモデルを導入し（3.2.1 節）、平均場近似（3.2.2 節）あるいは線形化 BdG 方程式（3.2.3 節）による定式化を行う。また、本研究の 3.4.1 節で用いる超伝導ギャップの分類法について、その手法の詳細を説明する（3.2.4 節）。

3.2.1 モデル

まず、 Sr_2IrO_4 における磁気秩序と共に存する超伝導を記述するような、3次元の1軌道 tight-binding モデルを導入する。ハミルトニアンは次のような形式で書ける。

$$\mathcal{H} = H_{\text{kin}} + H_{\text{ASOC}} + H_{\text{MO}} + H_{\text{int}} \quad (3.1)$$

第1項は運動エネルギーを表す項であり、

$$\begin{aligned} H_{\text{kin}} = & \sum_{l=\pm, \mathbf{k}, s} \varepsilon_1(\mathbf{k}) (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger b_{l/\mathbf{k}s} + c_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{l/\mathbf{k}s} + \text{H.c.}) \\ & + \sum_{l, \mathbf{k}, s} (\varepsilon_2(\mathbf{k}) - \mu) (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger a_{l/\mathbf{k}s} + b_{l/\mathbf{k}s}^\dagger b_{l/\mathbf{k}s} + c_{l/\mathbf{k}s}^\dagger c_{l/\mathbf{k}s} + d_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{l/\mathbf{k}s}) \\ & + \sum_{l, \mathbf{k}, s} [\varepsilon_3^x(\mathbf{k}) (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger c_{l/\mathbf{k}s} + b_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{l/\mathbf{k}s}) + \varepsilon_3^y(\mathbf{k}) (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{l/\mathbf{k}s} + b_{l/\mathbf{k}s}^\dagger c_{l/\mathbf{k}s}) \\ & + \varepsilon_3^x(\mathbf{k})^* (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{-l/\mathbf{k}s} + b_{l/\mathbf{k}s}^\dagger c_{-l/\mathbf{k}s}) + \varepsilon_3^y(\mathbf{k})^* (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger c_{-l/\mathbf{k}s} + b_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{-l/\mathbf{k}s}) \\ & + \text{H.c.}] \end{aligned} \quad (3.2)$$

で与えられる (μ は化学ポテンシャル)。ここで $a_{\pm/\mathbf{k}s}, \dots, d_{\pm/\mathbf{k}s}$ はそれぞれ副格子 a_\pm, \dots, d_\pm 上にあるスピン $s = \uparrow, \downarrow$ を持った電子の消滅演算子である(図3.4参照)。1電子の運動エネルギー項 $\varepsilon_1(\mathbf{k})$, $\varepsilon_2(\mathbf{k})$, $\varepsilon_3^{x,y}(\mathbf{k})$ はそれぞれ最近接, 次近接, 次々近接の飛び移りを考慮することで記述され、

$$\varepsilon_1(\mathbf{k}) = -4t_1 \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \quad (3.3a)$$

$$\varepsilon_2(\mathbf{k}) = -2t_2 (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \quad (3.3b)$$

$$\varepsilon_3^x(\mathbf{k}) = -t_3 \cos \frac{k_x a}{2} e^{-ik_z c/4} \quad (3.3c)$$

$$\varepsilon_3^y(\mathbf{k}) = -t_3 \cos \frac{k_y a}{2} e^{-ik_z c/4} \quad (3.3d)$$

となる。第2項は Sr_2IrO_4 が局所的に空間反転対称性を破ることに起因する、反対称スピン軌道相互作用を表す項である。これは以下のように表される：

$$\begin{aligned} H_{\text{ASOC}} = & \alpha_1 \sum_{l=\pm, \mathbf{k}, s, s'} \mathbf{g}_{\text{intra1}}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{ss'} (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger b_{l/\mathbf{k}s'} - b_{l/\mathbf{k}s}^\dagger a_{l/\mathbf{k}s'} \\ & + c_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{l/\mathbf{k}s'} - d_{l/\mathbf{k}s}^\dagger c_{l/\mathbf{k}s'}) \\ & + \alpha_2 \sum_{l, \mathbf{k}, s, s'} \mathbf{g}_{\text{intra2}}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{ss'} (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger a_{l/\mathbf{k}s'} - b_{l/\mathbf{k}s}^\dagger b_{l/\mathbf{k}s'} \\ & - c_{l/\mathbf{k}s}^\dagger c_{l/\mathbf{k}s'} + d_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{l/\mathbf{k}s'}) \\ & + \alpha_3 \sum_{l, \mathbf{k}, s, s'} [\mathbf{g}_{\text{inter}}^x(\mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{ss'} (d_{l/\mathbf{k}s}^\dagger a_{-l/\mathbf{k}s'} - c_{l/\mathbf{k}s}^\dagger b_{-l/\mathbf{k}s'}) + \text{H.c.}] \\ & + \alpha_3 \sum_{l, \mathbf{k}, s, s'} [\mathbf{g}_{\text{inter}}^y(\mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{ss'} (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{l/\mathbf{k}s'} - b_{l/\mathbf{k}s}^\dagger c_{l/\mathbf{k}s'}) + \text{H.c.}] \end{aligned} \quad (3.4)$$

この項では、層内の飛び移りに対応する 2 つの g -ベクトル $\mathbf{g}_{\text{intra}1}(\mathbf{k})$, $\mathbf{g}_{\text{intra}2}(\mathbf{k})$ と、層間の飛び移りに対応する g -ベクトル $\mathbf{g}_{\text{inter}}^{x,y}(\mathbf{k})$ を考えている：

$$\mathbf{g}_{\text{intra}1}(\mathbf{k}) = i \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \hat{z} \quad (3.5a)$$

$$\mathbf{g}_{\text{intra}2}(\mathbf{k}) = \sin(k_x a) \cos(k_y a) \hat{x} - \sin(k_y a) \cos(k_x a) \hat{y} \quad (3.5b)$$

$$\mathbf{g}_{\text{inter}}^x(\mathbf{k}) = -e^{-ik_z c/4} \left(\sin \frac{k_x a}{2} \hat{x} - 2i \cos \frac{k_x a}{2} \hat{z} \right) \quad (3.5c)$$

$$\mathbf{g}_{\text{inter}}^y(\mathbf{k}) = e^{-ik_z c/4} \left(\sin \frac{k_y a}{2} \hat{y} - 2i \cos \frac{k_y a}{2} \hat{z} \right) \quad (3.5d)$$

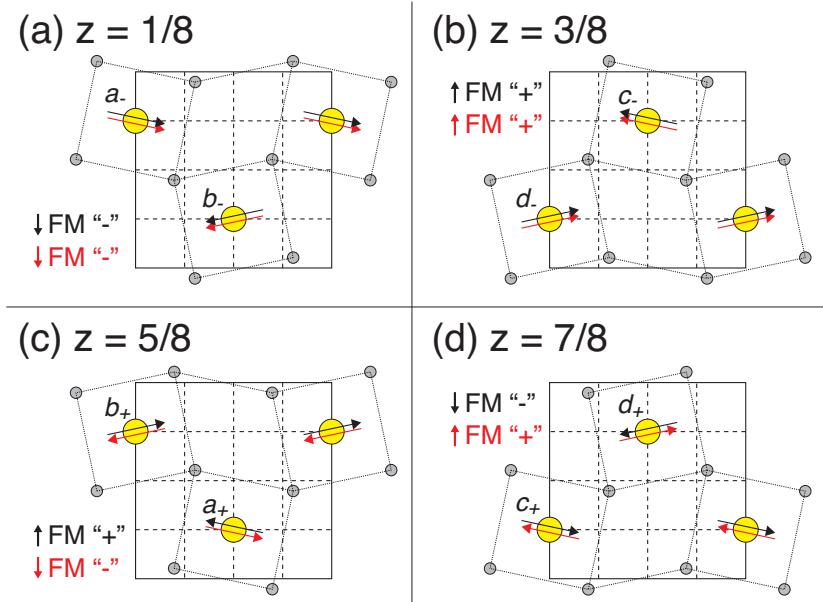


図 3.4 Sr_2IrO_4 の結晶構造と磁気構造を単位格子内の 4 つの IrO_2 面：(a) $z = \frac{1}{8}$ 面, (b) $z = \frac{3}{8}$ 面, (c) $z = \frac{5}{8}$ 面, (d) $z = \frac{7}{8}$ 面について描いた図（文献 [34] の図を参考に筆者が書き直したもの）。ここでは特に興味のある 2 つの磁気構造, $-++-$ (黒矢印) と $-+-+$ (赤矢印) について示している。イリジウム原子 (黄色の丸) は a_-,\dots,d_- , a_+,\dots,d_+ というラベル付けがされている。

式 (3.1) の第 3 項では、今注目している 2 つの磁気秩序 ($-++-$ と $-+-+$) を分子場によって取り入れている。この項によって、後述するような様々な超伝導現象が引き起こされる。図 3.4 に示したように、各 Ir サイトに面内の磁気秩序がある。したがって、

$$H_{\text{MO}} = - \sum_{l=\pm, \mathbf{k}, s, s'} [\mathbf{h}(\theta_{a_l}) \cdot \hat{\sigma}_{ss'} a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger a_{l/\mathbf{k}s} + \cdots + \mathbf{h}(\theta_{d_l}) \cdot \hat{\sigma}_{ss'} d_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{l/\mathbf{k}s}] \quad (3.6)$$

と表される。ここで $\mathbf{h}(\theta) = h(\cos \theta, \sin \theta, 0)$ は面内の磁気モーメントの強さと向きを表すベクトルであり、その向きは

$$\begin{aligned} & (\theta_{a_-}, \dots, \theta_{d_-}, \theta_{a_+}, \dots, \theta_{d_+}) \\ &= \begin{cases} (348^\circ, 192^\circ, 168^\circ, 12^\circ, 168^\circ, 12^\circ, 348^\circ, 192^\circ) & (-++- \text{ 状態}) \\ (348^\circ, 192^\circ, 168^\circ, 12^\circ, 348^\circ, 192^\circ, 168^\circ, 12^\circ) & (-+-+ \text{ 状態}) \end{cases} \end{aligned} \quad (3.7)$$

によって定義される [34]。

式(3.1)の最終項は電子間の相互作用を表す項である。同一サイトのスピン一重項 s 波引力相互作用 $U^{(s)}$ を仮定すると、この項は

$$H_{\text{int}} = -\frac{U^{(s)}}{2N} \sum_{l=\pm, \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, s, s'} \delta_{s, -s'} (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger a_{l/-\mathbf{k}+\mathbf{q}s'}^\dagger a_{l/-\mathbf{k}'+\mathbf{q}s'} a_{l/\mathbf{k}'s} + \cdots + d_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{l/-\mathbf{k}+\mathbf{q}s'}^\dagger d_{l/-\mathbf{k}'+\mathbf{q}s'} d_{l/\mathbf{k}'s}) \quad (3.8)$$

となる。一方、最近接サイト間のスピン一重項 d_{xy} 波引力相互作用 $U^{(d)}$ を考えた場合は

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} = & -\frac{U^{(d)}}{2N} \sum_{l=\pm, \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, s, s'} \delta_{s, -s'} \sin \frac{k_x a}{2} \sin \frac{k_y a}{2} \sin \frac{k'_x a}{2} \sin \frac{k'_y a}{2} \\ & \times (a_{l/\mathbf{k}s}^\dagger b_{l/-\mathbf{k}+\mathbf{q}s'}^\dagger b_{l/-\mathbf{k}'+\mathbf{q}s'} a_{l/\mathbf{k}'s} + c_{l/\mathbf{k}s}^\dagger d_{l/-\mathbf{k}+\mathbf{q}s'}^\dagger d_{l/-\mathbf{k}'+\mathbf{q}s'} c_{l/\mathbf{k}'s}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

である。

3.2.2 平均場理論

ハミルトニアン(3.1)は2体の相互作用を含むため、2.1.2節と同様に平均場近似を用いて解析できる形にする。超伝導秩序変数を

$$\Delta_{a,l}^{(s)} = -\frac{U^{(s)}}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \langle a_{l/-\mathbf{k}'\downarrow} a_{l/\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (s \text{ 波の場合}) \quad (3.10)$$

$$\Delta_{ab,l}^{(d)} = -\frac{U^{(d)}}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \sin \frac{k'_x a}{2} \sin \frac{k'_y a}{2} \langle b_{l/-\mathbf{k}'\downarrow} a_{l/\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (d_{xy} \text{ 波の場合}) \quad (3.11)$$

などと定義し、特に $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ のBCS状態のみを考えることにする(本章では $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ のFFLO状態については平均場理論ではなく3.2.3節の手法で取り扱う)。このとき平均場近似を適用した引力相互作用項は、 s 波の場合

$$H_{\text{int}}^{\text{MF},(s)} = \sum_{l,\mathbf{k}} [\Delta_{a,l}^{(s)} a_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \cdots + \Delta_{d,l}^{(s)} d_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}] \quad (3.12)$$

となり、 d_{xy} 波の場合

$$\begin{aligned} H_{\text{int}}^{\text{MF},(d)} = & \frac{1}{2} \sum_{l,\mathbf{k}} \sin \frac{k_x a}{2} \sin \frac{k_y a}{2} [\Delta_{ab,l}^{(d)} (a_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger b_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + b_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \\ & + \Delta_{cd,l}^{(d)} (c_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + d_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) + \text{H.c.}] \end{aligned} \quad (3.13)$$

となる(定数項は無視している)。本章ではPDW状態のような副格子間での位相変調は考えないことにし、すべて同一の秩序変数 Δ_0 をもつと仮定する。すなわち、 s 波の場合

$$H_{\text{int}}^{\text{MF},(s)} = \sum_{l,\mathbf{k}} [\Delta_0 (a_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \cdots + d_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) + \text{H.c.}] \quad (3.14)$$

であり, d_{xy} 波の場合

$$H_{\text{int}}^{\text{MF},(d)} = \sum_{l,\mathbf{k}} \left[\Delta_0 \sin \frac{k_x a}{2} \sin \frac{k_y a}{2} (a_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger b_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + b_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + d_{l/\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{l/-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) + \text{H.c.} \right] \quad (3.15)$$

と書き直せる。

平均場ハミルトニアンを行列形式で記述する。ベクトル演算子を

$$\hat{C}_{\mathbf{k}}^\dagger = (a_{-/k\uparrow}^\dagger, a_{-/k\downarrow}^\dagger, \dots, d_{-/k\uparrow}^\dagger, d_{-/k\downarrow}^\dagger, a_{+/k\uparrow}^\dagger, a_{+/k\downarrow}^\dagger, \dots, d_{+/k\uparrow}^\dagger, d_{+/k\downarrow}^\dagger, a_{-/-k\uparrow}^\dagger, a_{-/-k\downarrow}^\dagger, \dots, d_{-/-k\uparrow}^\dagger, d_{-/-k\downarrow}^\dagger, a_{+/-k\uparrow}^\dagger, a_{+/-k\downarrow}^\dagger, \dots, d_{+/-k\uparrow}^\dagger, d_{+/-k\downarrow}^\dagger) \quad (3.16)$$

によって定義すると、平均場ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{H}_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) \hat{C}_{\mathbf{k}} \quad (3.17)$$

と書き下せる(定数項は無視している)。32 × 32 の BdG ハミルトニアンは、正常状態のハミルトニアン $\hat{H}_n(\mathbf{k})$ とギャップ関数 $\hat{\Delta}(\mathbf{k})$ を用いて次のように表せる:

$$\hat{H}_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \hat{H}_n(\mathbf{k}) & \hat{\Delta}(\mathbf{k}) \\ \hat{\Delta}(\mathbf{k})^\dagger & -\hat{H}_n^T(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

正常状態のハミルトニアンは

$$\hat{H}_n(\mathbf{k}) = \hat{H}_{\text{kin}}(\mathbf{k}) + \hat{H}_{\text{ASOC}}(\mathbf{k}) + \hat{H}_{\text{MO}} \quad (3.19)$$

と書ける。運動エネルギー項は

$$\hat{H}_{\text{kin}}(\mathbf{k}) = \left[\begin{array}{c|c} \hat{H}_{\text{intra-layer}}(\mathbf{k}) & \hat{H}_{\text{inter-layer2}}(\mathbf{k}) \\ \hat{H}_{\text{inter-layer1}}(\mathbf{k}) & \hline \hat{H}_{\text{inter-layer2}}(\mathbf{k})^\dagger & \hat{H}_{\text{intra-layer}}(\mathbf{k}) \\ & \hat{H}_{\text{inter-layer1}}(\mathbf{k}) \end{array} \right] \quad (3.20)$$

と表される。ただし

$$\hat{H}_{\text{intra-layer}}(\mathbf{k}) = [(\varepsilon_2(\mathbf{k}) - \mu) \hat{\sigma}_0^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_0^{(\text{sl})} + \varepsilon_1(\mathbf{k}) \hat{\sigma}_0^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_x^{(\text{sl})}] \hat{\sigma}_0^{(\text{layer})} \quad (3.21a)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{inter-layer1}}(\mathbf{k}) = & [\text{Re}(\varepsilon_3^x(\mathbf{k})) \hat{\sigma}_0^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_0^{(\text{sl})} + \text{Re}(\varepsilon_3^y(\mathbf{k})) \hat{\sigma}_0^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_x^{(\text{sl})}] \hat{\sigma}_x^{(\text{layer})} \\ & - [\text{Im}(\varepsilon_3^x(\mathbf{k})) \hat{\sigma}_0^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_0^{(\text{sl})} + \text{Im}(\varepsilon_3^y(\mathbf{k})) \hat{\sigma}_0^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_x^{(\text{sl})}] \hat{\sigma}_y^{(\text{layer})} \end{aligned} \quad (3.21b)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{inter-layer2}}(\mathbf{k}) = & [\text{Re}(\varepsilon_3^y(\mathbf{k})) \hat{\sigma}_0^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_0^{(\text{sl})} + \text{Re}(\varepsilon_3^x(\mathbf{k})) \hat{\sigma}_0^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_x^{(\text{sl})}] \hat{\sigma}_x^{(\text{layer})} \\ & + [\text{Im}(\varepsilon_3^y(\mathbf{k})) \hat{\sigma}_0^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_0^{(\text{sl})} + \text{Im}(\varepsilon_3^x(\mathbf{k})) \hat{\sigma}_0^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_x^{(\text{sl})}] \hat{\sigma}_y^{(\text{layer})} \end{aligned} \quad (3.21c)$$

である。 $\hat{\sigma}_i^{(\text{spin})}$, $\hat{\sigma}_i^{(\text{sl})}$, $\hat{\sigma}_i^{(\text{layer})}$ はそれぞれスピン, 副格子, 層の空間を表す 8 × 8 のパウリ行列である。例えば,

$$\hat{\sigma}_z^{(\text{spin})} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_z & & & \\ & \hat{\sigma}_z & & \\ & & \hat{\sigma}_z & \\ & & & \hat{\sigma}_z \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z^{(\text{sl})} = \begin{pmatrix} \hat{1}_2 & & & \\ & -\hat{1}_2 & & \\ & & \hat{1}_2 & \\ & & & -\hat{1}_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z^{(\text{layer})} = \begin{pmatrix} \hat{1}_4 & & & \\ & -\hat{1}_4 & & \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

といった具合である。ここで $\hat{\sigma}_i$ は通常のパウリ行列であり、 $\hat{1}_M$ は $M \times M$ の単位行列である。

空間反転対称性の破れに起因する反対称スピン軌道相互作用項は

$$\hat{H}_{\text{ASOC}}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \hat{H}_{\text{ASOC-intra1}}(\mathbf{k}) & \hat{H}_{\text{ASOC-inter}}^x(\mathbf{k}) \\ \hat{H}_{\text{ASOC-intra2}}(\mathbf{k}) & \hat{H}_{\text{ASOC-inter}}^y(\mathbf{k}) \\ \hat{H}_{\text{ASOC-inter}}^y(\mathbf{k}) & \hat{H}_{\text{ASOC-intra1}}^x(\mathbf{k}) \\ \hline \hat{H}_{\text{ASOC-inter}}^x(\mathbf{k})^\dagger & \hat{H}_{\text{ASOC-intra2}}^x(\mathbf{k}) \\ & \hat{H}_{\text{ASOC-inter}}^y(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

で与えられる。ただし、

$$\hat{H}_{\text{ASOC-intra1}}(\mathbf{k}) = i\alpha_1 \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \hat{\sigma}_z^{(\text{spin})} i\hat{\sigma}_y^{(\text{sl})} \hat{\sigma}_0^{(\text{layer})} \quad (3.24a)$$

$$\hat{H}_{\text{ASOC-intra2}}(\mathbf{k}) = \alpha_2 (\sin(k_x a) \cos(k_y a) \hat{\sigma}_x^{(\text{spin})} - \sin(k_y a) \cos(k_x a) \hat{\sigma}_y^{(\text{spin})}) \hat{\sigma}_z^{(\text{sl})} \hat{\sigma}_z^{(\text{layer})} \quad (3.24b)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{ASOC-inter}}^x(\mathbf{k}) = -\alpha_3 & \left[\left(\cos \frac{k_z c}{4} \sin \frac{k_x a}{2} \hat{\sigma}_x^{(\text{spin})} - 2 \sin \frac{k_z c}{4} \cos \frac{k_x a}{2} \hat{\sigma}_z^{(\text{spin})} \right) i\hat{\sigma}_y^{(\text{sl})} i\hat{\sigma}_y^{(\text{layer})} \right. \\ & \left. + i \left(\sin \frac{k_z c}{4} \sin \frac{k_x a}{2} \hat{\sigma}_x^{(\text{spin})} + 2 \cos \frac{k_z c}{4} \cos \frac{k_x a}{2} \hat{\sigma}_z^{(\text{spin})} \right) i\hat{\sigma}_y^{(\text{sl})} \hat{\sigma}_x^{(\text{layer})} \right] \end{aligned} \quad (3.24c)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{ASOC-inter}}^y(\mathbf{k}) = \alpha_3 & \left[\left(\cos \frac{k_z c}{4} \sin \frac{k_y a}{2} \hat{\sigma}_y^{(\text{spin})} - 2 \sin \frac{k_z c}{4} \cos \frac{k_y a}{2} \hat{\sigma}_z^{(\text{spin})} \right) i\hat{\sigma}_y^{(\text{sl})} i\hat{\sigma}_y^{(\text{layer})} \right. \\ & \left. - i \left(\sin \frac{k_z c}{4} \sin \frac{k_y a}{2} \hat{\sigma}_y^{(\text{spin})} + 2 \cos \frac{k_z c}{4} \cos \frac{k_y a}{2} \hat{\sigma}_z^{(\text{spin})} \right) i\hat{\sigma}_y^{(\text{sl})} \hat{\sigma}_x^{(\text{layer})} \right] \end{aligned} \quad (3.24d)$$

である。磁気秩序 ($-+ +-$ と $-+ -+$) の分子場を表す項は

$$\hat{H}_{\text{MO}} = \begin{bmatrix} -\mathbf{h}(\theta_{a-}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} & & \\ & \ddots & \\ & & -\mathbf{h}(\theta_{d+}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

と表される。

ギャップ関数 $\hat{\Delta}(\mathbf{k})$ を行列形式で表すと、 s 波の場合

$$\hat{\Delta}^{(s)}(\mathbf{k}) = \Delta_0 i\hat{\sigma}_y^{(\text{spin})} \otimes \hat{1}_2 \quad (3.26)$$

となり、 d_{xy} 波の場合

$$\hat{\Delta}^{(d)}(\mathbf{k}) = \Delta_0 \sin \frac{k_x a}{2} \sin \frac{k_y a}{2} i\hat{\sigma}_y^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_x^{(\text{sl})} \otimes \hat{1}_2 \quad (3.27)$$

となる。

本章で用いるパラメータについて述べておこう。Hubbard モデルを用いて解析を行った Sr₂IrO₄ の研究 [104] を参考に、飛び移り積分の値は $t_1 = 1$, $t_2 = 0.26$, $t_3 = 0.1$ と仮定する。さらに、反対称スピン軌道相互作用は重要な役割を果たすため、適度な大きさとして $\alpha_1 = 0.3$, $\alpha_2 = \alpha_3 = 0.1$ を仮定する。文献 [104] によると、電子密度 $n \sim 1.2$ で超伝導が安定化する。この結果から、本論文では化学ポテンシャルの値を $\mu = 1.05$ と決める。このとき、4つのKramers縮退したエネルギー-bandがフェルミ準位を横切る。超伝導の秩序変数は $\Delta_0 = 0.02$ と選ぶことにする。

3.2.3 線形化 BdG 方程式

ここでは、3.5.2節で用いる線形化 BdG 方程式について述べる。一般に転移点近傍では BdG 方程式の収束性は著しく悪くなる。そこで BdG 方程式を線形化することによって、転移点近傍の超伝導状態を（数値計算的な労力をあまり要さず）解析することができる。以下では、表記の簡便さのため前節まで用いていた消滅演算子を全て $c_{\mathbf{k}sm}$ ($m = 1, 2, \dots, 8$) という形式で表す：

$$\begin{aligned} & (c_{\mathbf{k}s1}, c_{\mathbf{k}s2}, c_{\mathbf{k}s3}, c_{\mathbf{k}s4}, c_{\mathbf{k}s5}, c_{\mathbf{k}s6}, c_{\mathbf{k}s7}, c_{\mathbf{k}s8}) \\ &= (a_{-/k_s}, b_{-/k_s}, c_{-/k_s}, d_{-/k_s}, a_{+/k_s}, b_{+/k_s}, c_{+/k_s}, d_{+/k_s}) \end{aligned} \quad (3.28)$$

線形化 BdG 方程式は、以下の超伝導感受率

$$\chi_{mm'}(\mathbf{q}, i\Omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\Omega_n \tau} \langle B_m(\mathbf{q}, \tau) B_{m'}^\dagger(\mathbf{q}, 0) \rangle \quad (3.29)$$

を計算することによって定式化される ($\Omega_n = 2n\pi T$ はボソンの松原振動数)。ここで、 $B_m(\mathbf{q}, \tau) = e^{H_n \tau} B_m(\mathbf{q}) e^{-H_n \tau}$ であり、

$$B_m^\dagger(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{2V}} \sum_{\mathbf{k}, s, s'} (i\sigma_y)_{ss'} c_{\mathbf{k}sm}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}s'm}^\dagger \quad (3.30)$$

は同一サイト m の s 波超伝導という仮定のもとでの Cooper 対の生成演算子を表している。

超伝導感受率を厳密に計算することはできないので、ここでは T -行列近似を用いることにする。 T -行列近似は、スピン感受率の計算で用いられる乱雑位相近似の超伝導感受率版とも言え、平均場近似と等価な近似である。この近似によって、超伝導感受率は

$$\hat{\chi}(\mathbf{q}, i\Omega_n) = \frac{\hat{\chi}^{(0)}(\mathbf{q}, i\Omega_n)}{1_8 - U^{(s)} \hat{\chi}^{(0)}(\mathbf{q}, i\Omega_n)} \quad (3.31)$$

という式で表される [21, 78]。ここで $\hat{\chi} = (\chi_{mm'})$ は 8×8 の行列である。既約感受率 $\hat{\chi}^{(0)}$ は以下のように計算される。

$$\chi_{mm'}^{(0)}(\mathbf{q}, i\Omega_n) = \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s_1, \dots, s_4} \sum_l (i\sigma_y)_{s_1 s_2} (i\sigma_y)_{s_3 s_4} G_{mm'}^{s_1 s_3}(\mathbf{k}, i\omega_l) G_{mm'}^{s_2 s_4}(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\Omega_n - i\omega_l) \quad (3.32)$$

ここで $G_{mm'}^{ss'}(\mathbf{k}, i\omega_l)$ は相互作用がないときのグリーン関数であり、 $\omega_l = (2l + 1)\pi T$ はフェルミオンの松原振動数である。超伝導転移は、 $\hat{\chi}(\mathbf{q}, i\Omega_n)$ が発散するようなパラメータで起こる。したがって本研究では、 $U^{(s)} \hat{\chi}^{(0)}(\mathbf{q}, i\Omega_n)$ の最大固有値 $\chi_{\max}^{(0)}(\mathbf{q}, i\Omega_n)$ が 1 となることを超伝導の不安定性を決める基準とし、計算を行った。

3.2.4 小群に基づいた超伝導ギャップの分類

次に話は変わって、超伝導ギャップの分類について説明する。1.3節で見たように、超伝導ギャップは点群の既約表現によって分類することができる。しかし非共型な系では、点群による分類だけでは分からぬ非自明なラインノードがブリルアンゾーン境界に現れる場合があり、それは空間群（小群）を用いたギャップ関数の分類によって明らかになる [48–52]。よって、以下ではその分類法について具体例を用いながら説明していくこととする。

概観

(通常の)点群を用いたギャップ関数の分類では、 $g \in G$ の作用による波数の変化 $\mathbf{k} \xrightarrow{g} p^{-1}\mathbf{k}$ まで考慮してギャップ関数を分類する。一方、今回用いる分類法は、 $p\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}$ である^{*2}ような g だけを考えた群、すなわち小群 (little group)^{*3}に基づいた計算を行う。小群は各 \mathbf{k} 点で閉じた群があるので、その \mathbf{k} 点の Bloch 状態だけで構成された既約表現 = 小表現 (small representation) を作ることができる。すなわち、ここでは小表現による超伝導ギャップの分類を行う。

もう少し詳しく見てみよう。ハミルトニアンの固有状態とは、そのハミルトニアンが属する群のある表現の基底に等しい。同様のことを各 \mathbf{k} 点で考えると、その \mathbf{k} 点での Bloch 状態は小群の既約表現 (小表現) の基底に等しいということになる。これを式で表すと、小群 $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ 内の対称操作 $g = \{p|\mathbf{a}\}$ による変換として

$$gc_{\Gamma i}^{\dagger}(\mathbf{k})g^{-1} = \sum_j c_{\Gamma j}^{\dagger}(\mathbf{k})[\hat{\gamma}^{\mathbf{k},(\Gamma)}(g)]_{ji} \quad (3.33)$$

となる。ここでラベル Γ と i はそれぞれ $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ の既約表現とその基底を表す。 $\hat{\gamma}^{\mathbf{k},(\Gamma)}(g)$ は対応する表現行列であり、これは並進群操作による位相因子 $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}$ を含んでいる。非共型空間群の場合には、このような位相因子を完全に取り除くことはできないことに注意しよう。注目する \mathbf{k} 点における小群の既約表現 $\hat{\gamma}^{\mathbf{k},(\Gamma)}$ を求めれば、その \mathbf{k} 点での Bloch 状態が分かつことになる。

1粒子の Bloch 状態が分かつたならば、次は超伝導状態について考える。超伝導状態においては、(弱結合の BCS 理論の範疇では)Cooper 対は \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ の2つの縮退する Bloch 状態でペアを形成する。よって、これらの2つの状態は(偶然縮退したのではない限り)何かしらの対称操作によってつながっているはずである。結果として、Cooper 対の波動関数の表現 $\hat{N}^{\mathbf{k},-(\Gamma)}$ は、Bloch 状態の表現 $\hat{\gamma}^{\mathbf{k},(\Gamma)}$ から構築することができる。以上をもとに、この分類法の流れを整理しておく。

1. ブリルアンゾーン内で注目する \mathbf{k} 点を選び^{*4}、その \mathbf{k} での小群 $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ を求める。
2. 小群 $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ の小表現 (\mathbf{k} 点での Bloch 状態) $\hat{\gamma}^{\mathbf{k},(\Gamma)}$ を求める。
3. \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ をつなぐ対称操作 d を用い、 $-\mathbf{k}$ 点での Bloch 状態 $\hat{\gamma}_d^{\mathbf{k},(\Gamma)}$ を求め、Cooper 対の波動関数の表現 $\hat{N}^{\mathbf{k},-(\Gamma)}$ を構築する。
4. $\hat{N}^{\mathbf{k},-(\Gamma)}$ を分類する。

以下、この流れに沿って具体例を用いながら説明していく。

具体例：非共型結晶の典型

結晶空間群が

$$G = \{E|\mathbf{0}\}T + \{2_z|\boldsymbol{\tau}_z\}T + \{I|\mathbf{0}\}T + \{\sigma_h|\boldsymbol{\tau}_z\}T \quad (3.34)$$

^{*2} ここで $\mathbf{k}_1 \equiv \mathbf{k}_2$ は、 \mathbf{k}_1 と \mathbf{k}_2 が逆格子ベクトル \mathbf{K} の整数倍の並進だけを許して等しいことを示す。

^{*3} \mathbf{k} 群と言ふこともある。

^{*4} 通常は $k_z = 0, \pm\pi/c$ など、比較的対称性が高い面を選ぶ。対称性が低い \mathbf{k} 点では小群 $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ の次数が小さくなりすぎてしまい、面白い結果が得られないためである。

の系における、常磁性状態での磁性空間群 $M = G + \{\theta|\mathbf{0}\}G$ を例にとろう。ここで示す結果については文献 [49, 50] にもまとめられている。ここで T はブラベ格子を決める並進群であり、 $\tau_z = \frac{c}{2}\mathbf{e}_c$ は T に含まれない半端な並進を表している。ブリルアンゾーンの中心面 $k_z = 0$ および境界面 $k_z = \pm\pi/c$ 上の Cooper 対に注目することになると、これらの面での小群は

$$\mathcal{M}^k = \{E|\mathbf{0}\}T + \{\sigma_h|\tau_z\}T + \{\theta I|\mathbf{0}\}T + \{\theta 2_z|\tau_z\}T \quad (3.35)$$

となる。並進群 T の次数を N とすると、この群は次数 $4 \times N$ の群で、およそ Z_4 と次数 N の巡回群の直積である。よって小表現 $\hat{\gamma}^k$ を得るためには⁵、小剩余群 (little co-group) $\bar{\mathcal{M}}^k = \mathcal{M}^k/T$ 上の射線既約表現 (projective irreducible representation) $\hat{\gamma}^k$ を考えれば十分である⁶。実際に求めるため、 $\bar{\mathcal{M}}^k$ の群構造を見る：

	$\{E \mathbf{0}\}$	$\{\sigma_h \tau_z\}$	$\{\theta I \mathbf{0}\}$	$\{\theta 2_z \tau_z\}$
$\{E \mathbf{0}\}$	$\{E \mathbf{0}\}$	$\{\sigma_h \tau_z\}$	$\{\theta I \mathbf{0}\}$	$\{\theta 2_z \tau_z\}$
$\{\sigma_h \tau_z\}$	$\{\sigma_h \tau_z\}$	$-\{E \mathbf{0}\}$	$\{\theta 2_z \tau_z\}$	$-\{\theta I \mathbf{0}\}$
$\{\theta I \mathbf{0}\}$	$\{\theta I \mathbf{0}\}$	$e^{ik_z c}\{\theta 2_z \tau_z\}$	$-\{E \mathbf{0}\}$	$-e^{ik_z c}\{\sigma_h \tau_z\}$
$\{\theta 2_z \tau_z\}$	$\{\theta 2_z \tau_z\}$	$-e^{-ik_z c}\{\theta I \mathbf{0}\}$	$-\{\sigma_h \tau_z\}$	$e^{-ik_z c}\{E \mathbf{0}\}$

このように、ところどころ位相因子が付く箇所があることが分かる。例えば、

$$\{\theta I|\mathbf{0}\}\{\sigma_h|\tau_z\} = \{\theta I\sigma_h|\mathbf{0} + \theta I\tau_z\} = \{\theta 2_z| - \tau_z\} = \{E| - \hat{z}\}\{\theta 2_z|\tau_z\}$$

といった具合である。群表では k 群の基本並進操作に対する表現 $\hat{\gamma}^k(\{E|\hat{z}\}) = e^{-ik_z c}\hat{\mathbf{1}}$ を用いている。さて、既約表現 $\hat{\gamma}^k$ を求めるため、まずユニタリー操作に限定したときの群 $\{E|\mathbf{0}\}T + \{\sigma_h|\tau_z\}T$ の既約表現 $\hat{\Delta}^k$ を考える。これは上記の群表の左上部分だけを見ればすぐに分かるようだ。

$$\hat{\Delta}^{k,(\Gamma_1)}(\{E|\mathbf{0}\}) = 1, \quad \hat{\Delta}^{k,(\Gamma_1)}(\{\sigma_h|\tau_z\}) = -i \quad (3.36)$$

$$\hat{\Delta}^{k,(\Gamma_2)}(\{E|\mathbf{0}\}) = 1, \quad \hat{\Delta}^{k,(\Gamma_2)}(\{\sigma_h|\tau_z\}) = i \quad (3.37)$$

となる。次に無視していた反ユニタリー操作を加え、表現 Δ^k がどのように変わるかを考える。これは、次の Wigner の判定条件 [111–113] を調べることによって分かる。

⁵ この例では小表現が 1 つしかないので、既約表現のラベル Γ は省略している。

⁶ $\hat{\gamma}^k$ が求まってしまえば、実際の小表現は $\hat{\gamma}^k(g) = \hat{\gamma}(p)\hat{F}^k(t)$ で求めることができる。ここで $g \in \mathcal{M}^k$ を並進群 T の要素 $t = \{E|\mathbf{t}\}$ を用いて $g = rt$ と分解している。 T の既約表現は $\hat{F}^k(t) = e^{-ik \cdot t}$ と定義される。

Wigner の判定条件

M を非ユニタリ一群とし、 M のユニタリー操作だけを取ってきた群を G (位数 g) とする。すなわち、 M 内の反ユニタリー操作の代表元を a_0 として

$$M = G + a_0 G \quad (3.38)$$

と剩余類分解できる。 M の不变部分群 G の既約ユニタリー表現 $\hat{\Delta}$ が分かっているとして、 M の既約な複表現 $\hat{\gamma}$ を求めたい。その方法は、以下の条件式によって3通りに分けられる：

$$\sum_{a \in M} \chi[\Delta(a^2)] = \sum_{u \in G} \chi[\Delta((a_0 u)^2)] = \begin{cases} g & \text{Case (a)} \\ -g & \text{Case (b)} \\ 0 & \text{Case (c)} \end{cases} \quad (3.39)$$

ここで a は反ユニタリー演算子、 u はユニタリー演算子を表し、 χ は表現の指標を表す。この判定条件に応じて、 M の既約複表現 $\hat{\gamma}$ は次のように定まる。

$$\hat{\gamma}(u) = \hat{\Delta}(u), \quad \hat{\gamma}(a_0) = \hat{U} \quad \text{Case (a)} \quad (3.40a)$$

$$\hat{\gamma}(u) = \begin{pmatrix} \hat{\Delta}(u) & 0 \\ 0 & \hat{\Delta}(u) \end{pmatrix}, \quad \hat{\gamma}(a_0) = \begin{pmatrix} 0 & -\hat{U} \\ \hat{U} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{Case (b)} \quad (3.40b)$$

$$\hat{\gamma}(u) = \begin{pmatrix} \hat{\Delta}(u) & 0 \\ 0 & \hat{\Delta}(a_0^{-1} u a_0)^* \end{pmatrix}, \quad \hat{\gamma}(a_0) = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\Delta}(a_0^2) \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{Case (c)} \quad (3.40c)$$

ここで、(a) と (b) に現れる \hat{U} は $\hat{\Delta}(a_0^{-1} u a_0)^* = \hat{U}^{-1} \hat{\Delta}(u) \hat{U}$ を満たすユニタリー行列である。(a) の場合には反ユニタリー操作の存在を考えても縮重重度は増えないが、(b) と (c) の場合には $\hat{\Delta}$ のときより縮重重度が2倍になることが分かる。

既約表現 $\hat{\gamma}^k$ を求めるため、Wigner の判定条件を用いる。ユニタリー表現 $\hat{\Delta}^{k,(\Gamma_1)}$ の場合も $\hat{\Delta}^{k,(\Gamma_2)}$ の場合も結果は変わらず、以下のようになる：

$$\begin{aligned} \sum_{a \in \bar{\mathcal{M}}^k} \chi[\hat{\Delta}^k(a^2)] &= \chi[\hat{\Delta}^k(\{\theta I|\mathbf{0}\}^2)] + \chi[\hat{\Delta}^k(\{\theta 2_z|\boldsymbol{\tau}_z\}^2)] \\ &= \chi[\hat{\Delta}^k(-\{E|\mathbf{0}\})] + \chi[\hat{\Delta}^k(e^{-ik_z c}\{E|\mathbf{0}\})] = \begin{cases} 0 & k_z = 0 \\ -2 & k_z = \pm\pi/c \end{cases} \end{aligned} \quad (3.41)$$

よって、 $k_z = 0$ と $k_z = \pm\pi/c$ はそれぞれ Wigner の判定条件において Case (c), (b) にあたり、いずれの場合にも縮重重度は2倍になる。結果として1つの2次元表現が得られ、具体的には以下の通りになる：

$$\hat{\gamma}^k(\{E|\mathbf{0}\}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.42a)$$

$$\hat{\gamma}^k(\{\sigma_h|\boldsymbol{\tau}_z\}) = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & ie^{ik_z c} \end{pmatrix}, \quad (3.42b)$$

$$\hat{\gamma}^k(\{\theta I|\mathbf{0}\}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.42c)$$

$$\hat{\gamma}^k(\{\theta 2_z|\boldsymbol{\tau}_z\}) = \begin{pmatrix} 0 & i \\ ie^{ik_z c} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.42d)$$

この系が非共型であることに起因して位相因子が付き、それによってブリルアンゾーン境界で表現が変化していることが分かる。

次に、Cooper 対の波動関数の表現 $\hat{N}^{\mathbf{k},-}$ を計算しよう。 $p_d \mathbf{k} \equiv -\mathbf{k}$ を満たすような点群操作 p_d を含む空間群操作 $d = \{p_d | \mathbf{a}_d\}$ を考える。この d がペアを組む 2 つの状態をつないでいる。今の場合、 d の候補としては

$$d = \{I|\mathbf{0}\}, \{2_z|\boldsymbol{\tau}_z\}, \{\theta|\mathbf{0}\}, \{\theta\sigma_h|\boldsymbol{\tau}_z\} \quad (3.43)$$

が考えられるが、最終的な結果はどの d を選ぶかに関わらない（付録：3.7.1 節参照）ため、代表として空間反転 $\mathcal{I} = \{I|\mathbf{0}\}$ を取って差し支えない。Cooper 対の反対称性と 2 状態の縮退を考慮に入れると、 $\hat{N}^{\mathbf{k},-}$ を誘導表現 (induced representation) $\hat{\gamma}^{\mathbf{k}} \uparrow \widetilde{\mathcal{M}}^{\mathbf{k}}$ の反対称化された Kronecker 平方 [113, 114] とみなすことができる（ここで $\widetilde{\mathcal{M}}^{\mathbf{k}} = \mathcal{M}^{\mathbf{k}} + d\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ ）。系統的な方法としては、これは $d = \mathcal{I}$ と選んだときの Mackey-Bradley の定理 [113–115]

$$\chi[\hat{N}^{\mathbf{k},-}(m)] = \chi[\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}(m)]\chi[\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}(\mathcal{I}m\mathcal{I})] \quad (3.44a)$$

$$\chi[\hat{N}^{\mathbf{k},-}(\mathcal{I}m)] = -\chi[\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}(\mathcal{I}m\mathcal{I}m)] \quad (3.44b)$$

を用いて計算することができる（この部分の数学的な枠組みは付録：3.7.1 節を参照）。この定理を用いて実際に計算してみると、

$$\chi[\hat{N}^{\mathbf{k},-}(\{E|\mathbf{0}\})] = 4 \quad (3.45a)$$

$$\chi[\hat{N}^{\mathbf{k},-}(\{\sigma_h|\boldsymbol{\tau}_z\})] = \begin{cases} 0 & k_z = 0 \\ 4 & k_z = \pm\pi/c \end{cases} \quad (3.45b)$$

$$\chi[\hat{N}^{\mathbf{k},-}(\{I|\mathbf{0}\})] = -2 \quad (3.45c)$$

$$\chi[\hat{N}^{\mathbf{k},-}(\{2_z|\boldsymbol{\tau}_z\})] = \begin{cases} 2 & k_z = 0 \\ -2 & k_z = \pm\pi/c \end{cases} \quad (3.45d)$$

を得る。ここで $\hat{N}^{\mathbf{k},-}$ は $\widetilde{\mathcal{M}}^{\mathbf{k}}/T$ の表現であり、 $g \in \widetilde{\mathcal{M}}^{\mathbf{k}}$ 、 $r \in \widetilde{\mathcal{M}}^{\mathbf{k}}/T$ 、 $t \in T$ に対し $\hat{N}^{\mathbf{k},-}(g) = \hat{N}^{\mathbf{k},-}(r)$ を満足する。

最後に、 $\widetilde{\mathcal{M}}^{\mathbf{k}} = \mathcal{M}^{\mathbf{k}} + d\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ 内の表現 $\hat{N}^{\mathbf{k},-}$ を既約表現に分解する。 $\widetilde{\mathcal{M}}^{\mathbf{k}}$ のユニタリー部分を考えると空間群 $P2_1/m$ になっており、これは（並進部分を除いて）点群の範囲で考えると C_{2h} になる。一般的なギャップ関数の分類は点群の既約表現によって分解するので、今の場合も $\hat{N}^{\mathbf{k},-}$ を C_{2h} の既約表現で分解する。 C_{2h} の既約表現の指標と、 $\hat{N}^{\mathbf{k},-}$ の指標を表にまとめると以下のようになる。

C_{2h}	$\{E \mathbf{0}\}$	$\{\sigma_h \boldsymbol{\tau}_z\}$	$\{I \mathbf{0}\}$	$\{2_z \boldsymbol{\tau}_z\}$
A_g	1	1	1	1
B_g	1	-1	1	-1
A_u	1	-1	-1	1
B_u	1	1	-1	-1
$\hat{N}^{\mathbf{k},-} (k_z = 0)$	4	0	-2	2
$\hat{N}^{\mathbf{k},-} (k_z = \pm\pi/c)$	4	4	-2	-2

この表に基づいて既約分解を行うと、 $k_z = 0, \pm\pi/c$ で許される超伝導ギャップの既約表現は

$$\hat{N}^{\mathbf{k}, -} = \begin{cases} A_g + 2A_u + B_u & k_z = 0 \\ A_g + 3B_u & k_z = \pm\pi/c \end{cases} \quad (3.46)$$

であることが分かる。ブリルアンゾーン境界では表現が変化したことで、 A_u 表現が禁止されることが分かる。つまり、 A_u 表現に属する秩序変数が存在したとしても、ブリルアンゾーン境界では必ずギャップが潰れてノードになるということである。このノードの存在は点群による分類だけでは分からず、小群を用いて初めて分かるノードである。

補足

上記の非共型対称性に守られたブリルアンゾーン境界でのラインノードは、例えば UPt_3 といった物質で現れることが予測されている [48–50]。 UPt_3 の結晶空間群は $\text{P}6_3/\text{mmc}$ (点群 D_{6h}) なので式 (3.34) より大きい群だが、(常磁性状態で) $k_z = 0, \pm\pi/c$ での小群は式 (3.34) と全く同じなので、上記と同様のギャップ関数の分類ができる。よって、 A_u 表現に属する秩序変数はブリルアンゾーン境界 $k_z = \pm\pi/c$ で許されずラインノードになる。しかし、ここで A_u 表現とは「点群 C_{2h} の既約表現としての A_u 」である。ある物質の秩序変数が属する表現を考える際には、その物質の結晶点群が持つ既約表現を用いるのが通常なので、今の場合には C_{2h} と元の結晶点群 D_{6h} との対応を取る必要がある。 D_{6h} と C_{2h} の指標表を見れば、以下のような適合関係があることが分かる(奇 parity 表現に限って示している)。

D_{6h} の表現	A_{1u}	A_{2u}	B_{1u}	B_{2u}	E_{1u}	E_{2u}
$(D_{6h}$ の表現) $\downarrow C_{2h}$	A_u	A_u	B_u	B_u	$2B_u$	$2A_u$

したがって、 D_{6h} の既約表現 A_{1u} , A_{2u} , E_{2u} に属するような秩序変数の場合、ブリルアンゾーン境界でラインノードができることが分かる。実際、 UPt_3 で E_{2u} 表現の秩序変数を仮定したモデル計算ではそのラインノードの存在が示されている [76]。

3.3 多極子への分類

この節では、 Sr_2IrO_4 における 2 つの磁気秩序 ($-++-$ と $-+-+$) がどのような磁気多極子に分類されるかを、2.2 節でも用いた群論による簡単な解析によって示す。

3.3.1 $-++-$ 秩序の解析

Sr_2IrO_4 の元の結晶対称性は D_{4h} であるが、 $-++-$ の磁気秩序相では対称性が D_{2h} に落ちる。 $-++-$ は偶parity の秩序であるので、 D_{4h} の対称既約表現 ($A_{1g}, A_{2g}, B_{1g}, B_{2g}, E_g$) を D_{2h} に制限したときに、どのような既約表現で分解できるかを確かめればよい。実際に解析を行った結果を表 3.1 に示す。5 つの D_{4h} の偶parity 表現のうち、 D_{2h} の全対称表現 (A_g) を含むものは A_{1g} 表現と B_{1g} 表現である。 $-++-$ 秩序が A_{1g} 表現に属するとすると、秩序相においても対称性が落ちず D_{2h} にならない。よって、 $-++-$ 秩序は D_{4h} の B_{1g} 表現に属している

ことが分かる。

表 3.1 D_{4h} の偶パリティ表現を D_{2h} に制限したときの既約表現分解.

$(D_{4h} \text{ の表現})$	A_{1g}	A_{2g}	B_{1g}	B_{2g}	E_g
$(D_{4h} \text{ の表現}) \downarrow D_{2h}$	A_g	B_{1g}	A_g	B_{1g}	$B_{2g} + B_{3g}$

次に、 $-++-$ が実際どの磁気多極子に分類されるかを考えよう。 B_{1g} 表現の実空間での基底のうち時間反転が奇のものを考えると、最低次では $\alpha xy\sigma_z + \beta z(y\sigma_x + x\sigma_y)$ となる。これは磁気八極子 ($l = 3$) の秩序

$$\hat{M}_{3,-2} - \hat{M}_{3,2} \propto xy\hat{z} + yz\hat{x} + zx\hat{y} \quad (3.47)$$

を含んでいることが分かる。よって、 $-++-$ 秩序は偶パリティの磁気八極子に分類される。

3.3.2 $-++-$ 秩序の解析

こちらも $-++-$ の場合と同様の解析を行う。 $-++-$ の磁気秩序相では対称性が D_{4h} から C_{2v} に落ちる。ここで、元の対称性 D_{4h} では主軸が c 軸だが、落ちた後の C_{2v} では主軸が a 軸となっていることに注意したい。 $-++-$ は奇パリティの秩序であるので、 D_{4h} の反対称既約表現 $(A_{1u}, A_{2u}, B_{1u}, B_{2u}, E_u)$ を C_{2v} に制限したときに、どのような既約表現で分解できるかを確かめる。その結果を表 3.2 に示す。5 つの D_{4h} の奇パリティ表現のうち、 C_{2v} の全対称表現 (A_1) を含むものは E_u 表現だけとなっている。したがって、 $-++-$ 秩序は D_{4h} の E_u 表現に属していることが分かる。

表 3.2 D_{4h} の奇パリティ表現を C_{2v} に制限したときの既約表現分解.

$(D_{4h} \text{ の表現})$	A_{1u}	A_{2u}	B_{1u}	B_{2u}	E_u
$(D_{4h} \text{ の表現}) \downarrow C_{2v}$	A_2	B_2	A_2	B_2	$A_1 + B_1$

E_u 表現の基底のうち時間反転が奇のものを考えると、最低次では以下のようになる。

- 実空間: $\alpha(x\sigma_z, y\sigma_z) + \beta(z\sigma_x, z\sigma_y)$
- 波数空間: (k_x, k_y)

これらの基底は、 C_{2v} に制限したときに A_1 表現に属するものと B_1 表現に属するものに分解される。 $-++-$ 秩序を表す関数としては A_1 表現に属するものを考えればよいので、結局以下のようになる。

- 実空間: $\alpha y\sigma_z + \beta z\sigma_y$
- 波数空間: k_x

実空間の関数の形を見ると、これは磁気四極子 ($l = 2$) の秩序

$$\hat{M}_{2,1} + \hat{M}_{2,-1} \propto y\hat{z} + z\hat{y} \quad (3.48)$$

を表していることが分かる（実際にはこれに加え、磁気トロイダル双極子の秩序 $\propto y\hat{z} - z\hat{y}$ も含んでいると考えられる [26]）。したがって、 $-+--$ 秩序は奇パリティの磁気四極子に分類されることが分かった。また、波数空間での関数 k_x は 3.5.1 節で述べるように、エネルギー・バンドの非対称性に関わってくる。

3.4 $-+--$ 状態における非自明なノード構造

以下、 Sr_2IrO_4 において各磁気秩序と共に存する超伝導状態の計算結果を示していく。まず、 $-+--$ 状態において非自明な超伝導ノード構造が現れることを示そう。

3.4.1 群論による超伝導ギャップの分類

最初に、 Sr_2IrO_4 の $-+--$ 状態での磁気空間群 M_{-+--} (P_{1cca}) に注目する。これは剩余類分解を用いて

$$M_{-+--} = G_{-+--} + \{\theta|\tau\}G_{-+--} \quad (3.49)$$

$$G_{-+--} = \{E|\mathbf{0}\}T + \{I|\mathbf{0}\}T + \{2_z|\boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_z\}T + \{\sigma_h|\boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_z\}T \quad (3.50)$$

$$+ \{2_x|\boldsymbol{\tau}_z\}T + \{2_y|\boldsymbol{\tau}_x\}T + \{\sigma_x|\boldsymbol{\tau}_z\}T + \{\sigma_y|\boldsymbol{\tau}_x\}T \quad (3.51)$$

と表される。ここで T はブラベ格子を決める並進群であり、 $\boldsymbol{\tau}_x = \frac{a}{2}\mathbf{e}_a$ 、 $\boldsymbol{\tau}_y = \frac{a}{2}\mathbf{e}_b$ 、 $\boldsymbol{\tau}_z = \frac{c}{2}\mathbf{e}_c$ 、 $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_y + \boldsymbol{\tau}_z$ は T に含まれない半端な並進を表している。すなわち、 M_{-+--} は非共型な空間群である。ここで、式 (3.49)-(3.51) は Sr_2IrO_4 の結晶空間群が $I4_1/acd$ の場合であることに注意したい。もし空間群が $I4_1/a$ の場合には、式 (3.51) は G_{-+--} に現れない。このとき以下に示すギャップの分類は、垂直面 ($k_{x,y} = 0$ と $k_{x,y} = \pm\pi/a$) に対しては適用できない。水平面 ($k_z = 0, \pm\pi/c$) の結果はどちらの空間群についても保たれる。

さて、今回我々は特にブリルアンゾーンの中央面 $k_{z,x,y} = 0$ と境界面 $k_z = \pm\pi/c$ 、 $k_{x,y} = \pm\pi/a$ での Cooper 対を考える。各面で、 M_{-+--} の小群 \mathcal{M}_{-+--}^k は以下の式で与えられる：

$$\mathcal{M}_{-+--}^k = \begin{cases} \{E|\mathbf{0}\}T + \{\sigma_h|\boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_z\}T + \{\theta I|\boldsymbol{\tau}\}T + \{\theta 2_z|\boldsymbol{\tau}_y\}T & (a) k_z = 0, \pm\pi/c \\ \{E|\mathbf{0}\}T + \{\sigma_x|\boldsymbol{\tau}_z\}T + \{\theta I|\boldsymbol{\tau}\}T + \{\theta 2_x|\boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_y\}T & (b) k_x = 0, \pm\pi/a \\ \{E|\mathbf{0}\}T + \{\sigma_y|\boldsymbol{\tau}_x\}T + \{\theta I|\boldsymbol{\tau}\}T + \{\theta 2_y|\boldsymbol{\tau}_y + \boldsymbol{\tau}_z\}T & (c) k_y = 0, \pm\pi/a \end{cases} \quad (3.52)$$

$\hat{\gamma}_{-+--}^k(m)$ を対称操作 $m \in \mathcal{M}_{-+--}^k$ の小表現と定義する。3.2.4 節で示したように、 $\hat{\gamma}_{-+--}^k$ は結晶運動量 \mathbf{k} の Bloch 状態に対応する。これを求めるためには、小剩余群 $\bar{\mathcal{M}}_{-+--}^k = \mathcal{M}_{-+--}^k/T$ 上の射線既約表現 $\hat{\gamma}_{-+--}^k$ を計算すればよい。 $\bar{\mathcal{M}}_{-+--}^k$ のユニタリー操作に対する $\hat{\gamma}_{-+--}^k$ の指標を表 3.3 にまとめて示しておく。

次に、Cooper 対の波動関数の表現 $\hat{N}_{-+--}^{k,-}$ を計算する。 \mathbf{k} 点と $-\mathbf{k}$ 点をつなぐ対称操作 d の候補は次の式で与えられる：

$$d = \begin{cases} \{I|\mathbf{0}\}, \{2_z|\boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_z\}, \{\theta|\boldsymbol{\tau}\}, \{\theta\sigma_h|\boldsymbol{\tau}_y\} & (a) \\ \{I|\mathbf{0}\}, \{2_x|\boldsymbol{\tau}_z\}, \{\theta|\boldsymbol{\tau}\}, \{\theta\sigma_x|\boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_y\} & (b) \\ \{I|\mathbf{0}\}, \{2_y|\boldsymbol{\tau}_x\}, \{\theta|\boldsymbol{\tau}\}, \{\theta\sigma_y|\boldsymbol{\tau}_y + \boldsymbol{\tau}_z\} & (c) \end{cases} \quad (3.53)$$

表 3.3 $\hat{\gamma}_{-++-}^k$ の指標. $k_{x,y} = \pm\pi/a$ の上下(±)の表現は 2 つの非等価な既約表現に対応している.

(a) $k_z = 0, \pm\pi/c$			
$\bar{\mathcal{M}}_{-++-}^k$	$\{E \mathbf{0}\}$	$\{\sigma_h \boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_z\}$	
中央面, 境界面	2	0	

(b) $k_x = 0, \pm\pi/a$			
$\bar{\mathcal{M}}_{-++-}^k$	$\{E \mathbf{0}\}$	$\{\sigma_x \boldsymbol{\tau}_z\}$	
中央面	2	0	
境界面	2	$\pm 2ie^{-ik_z c/2}$	

(c) $k_y = 0, \pm\pi/a$			
$\bar{\mathcal{M}}_{-++-}^k$	$\{E \mathbf{0}\}$	$\{\sigma_y \boldsymbol{\tau}_x\}$	
中央面	2	0	
境界面	2	$\pm 2ie^{-ik_x a/2}$	

3.7.1 節で示すように、どの d を選んでも $\widetilde{\mathcal{M}}_{-++-}^k = \mathcal{M}_{-++-}^k + d\mathcal{M}_{-++-}^k$ は等価であり最終的な結果も変わらない。よって、ここでは d として空間反転 $\mathcal{I} = \{I|\mathbf{0}\}$ を用いる。Mackey-Bradley の定理 [113–115]

$$\chi[\hat{N}_{-++-}^{k,-}(m)] = \chi[\hat{\gamma}_{-++-}^k(m)]\chi[\hat{\gamma}_{-++-}^k(\mathcal{I}m\mathcal{I})] \quad (3.54a)$$

$$\chi[\hat{N}_{-++-}^{k,-}(\mathcal{I}m)] = -\chi[\hat{\gamma}_{-++-}^k(\mathcal{I}m\mathcal{I}m)] \quad (3.54b)$$

を用いて $\widetilde{\mathcal{M}}^k/T$ 上の表現 $\hat{N}_{-++-}^{k,-}$ を計算した結果を表 3.4 に示す。ただし、対称操作 $g = rt$ ($g \in \widetilde{\mathcal{M}}_{-++-}^k, r \in \widetilde{\mathcal{M}}_{-++-}^k/T, t \in T$) に対して $\hat{N}_{-++-}^{k,-}(g) = \hat{N}_{-++-}^{k,-}(r)$ を満足する。

表 3.4 $\hat{N}_{-++-}^{k,-}$ の指標.

(a) $k_z = 0, \pm\pi/c$				
$\widetilde{\mathcal{M}}_{-++-}^k/T$	$\{E \mathbf{0}\}$	$\{\sigma_h \boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_z\}$	$\{I \mathbf{0}\}$	$\{2_z \boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_z\}$
中央面	4	0	-2	2
境界面	4	0	-2	-2

(b) $k_x = 0, \pm\pi/a$			
$\widetilde{\mathcal{M}}_{-++-}^k/T$	$\{E \mathbf{0}\}$	$\{\sigma_x \boldsymbol{\tau}_z\}$	$\{I \mathbf{0}\}$
中央面	4	0	-2
境界面	4	-4	2

(c) $k_y = 0, \pm\pi/a$			
$\widetilde{\mathcal{M}}_{-++-}^k/T$	$\{E \mathbf{0}\}$	$\{\sigma_y \boldsymbol{\tau}_x\}$	$\{I \mathbf{0}\}$
中央面	4	0	-2
境界面	4	-4	2

最後に、表現 $\hat{N}_{-++-}^{k,-}$ を既約表現に分解しよう。群 $\widetilde{\mathcal{M}}_{-++-}^k/T$ は考えているどの面においても磁気点群 C_{2h} と同型なので、4 つの既約表現 A_g, B_g, A_u, B_u で分解できる。分解された $\hat{N}_{-++-}^{k,-}$ は、「Frobenius の相互律」[112, 113] を用いて元の磁気点群 $M_{-++-}/T \simeq D_{4h}$ に誘導することができる。この誘導表現 $\hat{N}_{-++-}^{k,-} \uparrow M_{-++-}/T$ は次のような結果になる：

(a) $k_z = 0, \pm\pi/c$

$$\hat{N}_{-++-}^{k,-} \uparrow M_{-++-}/T = \begin{cases} A_{1g} + A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + 2A_{1u} \\ \quad + 2A_{2u} + 2B_{1u} + 2B_{2u} + 2E_u & \text{中央面} \\ 2E_g + A_{1u} + A_{2u} + B_{1u} + B_{2u} + 4E_u & \text{境界面} \end{cases} \quad (3.55)$$

(b, c) $k_{x,y} = 0, \pm\pi/a$

$$\hat{N}_{-++-}^{\mathbf{k},-} \uparrow M_{-++-}/T = \begin{cases} A_{1g} + B_{1g} + E_g + 2A_{1u} & \text{中央面} \\ + A_{2u} + 2B_{1u} + B_{2u} + 3E_u \\ A_{2g} + B_{2g} + E_g + 3A_{1u} + 3B_{1u} + 3E_u & \text{境界面} \end{cases} \quad (3.56)$$

ブリルアンゾーンの中央面と境界面とでギャップ関数の分類が変化しているのは、非共型対称性による帰結である。ギャップ関数は、これらの分解の中に対応する既約表現がないときゼロになり、ラインノードが現れる。そうでないときには超伝導ギャップが開くと考えられる。式(3.55), (3.56)の結果から、例えば A_{1g} と B_{2g} 表現に属する超伝導ギャップ関数は表3.5に示すような構造をとることが分かる。

表3.5 A_{1g} または B_{2g} に属するギャップ関数を仮定した場合に現れるギャップ構造。

	$k_z = 0$	$k_z = \pm\pi/c$	$k_{x,y} = 0$	$k_{x,y} = \pm\pi/a$
A_{1g} (<i>s</i> 波)	ギャップ	ノード	ギャップ	ノード
B_{2g} (d_{xy} 波)	ギャップ	ノード	ノード	ギャップ

3.4.2 数値計算の結果

次に、上記の群論による結果(表3.5)を3次元の1軌道tight-binding模型(3.2.1節参照)を用いて数値的に実証する。ここでは平均場理論を適用し(3.2.2節参照)，特に点群 D_{4h} の A_{1g} 表現に属する*s*波の秩序変数の場合

$$\hat{\Delta}^{(s)}(\mathbf{k}) = \Delta_0 i\hat{\sigma}_y^{(\text{spin})} \otimes \hat{1}_2 \quad (3.57)$$

および、 D_{4h} の B_{2g} 表現に属する d_{xy} 波の秩序変数の場合

$$\hat{\Delta}^{(d)}(\mathbf{k}) = \Delta_0 \sin \frac{k_x a}{2} \sin \frac{k_y a}{2} i\hat{\sigma}_y^{(\text{spin})} \hat{\sigma}_x^{(\text{sl})} \otimes \hat{1}_2, \quad (3.58)$$

を考える。超伝導状態での準粒子エネルギー分散 $E = E(k_x, k_y, k_z)$ はBdGハミルトニアン(3.18)を対角化することによって得られる。これを数値的に計算した結果を図3.5と3.6に示す。これらの図では規格化されたエネルギー E/Δ_0 を等高線プロットしており， $0 \leq E/\Delta_0 < 2$ の領域だけが色付けられている。 $E \sim 0$ の領域は黒色で， $E \sim \Delta_0$ の領域はピンク色で表されている。

図3.5と3.6に見られるギャップ構造は、表3.5の結果をきちんと再現できていることが分かる。すなわち、*s*波の場合も d_{xy} 波の場合も数値計算の結果は群論の結果と辻褷が合っており、図3.5と3.6のラインノードは非共型対称性に守られたものである。しかし、 $k_y = 0, \pm\pi/a$ の面に関しては、我々のモデルによる数値計算の結果は群論の結果と一致していない。ただしこれはこのモデルの計算上の問題なので、あまり深刻な問題ではないと考えられる(3.7.2節参照)。

3.1節で述べたように、電子ドープした Sr_2IrO_4 における*d*波超伝導は、理論研究[103–106]からも実験[67]からも提案されている。したがって、特に d_{xy} 波秩序変数に注目する^{*7}。水平面

^{*7} ここでの d_{xy} 波超伝導は、主軸まわりに $\pi/4$ 回転することで銅酸化物における $d_{x^2-y^2}$ 波超伝導と対応する。

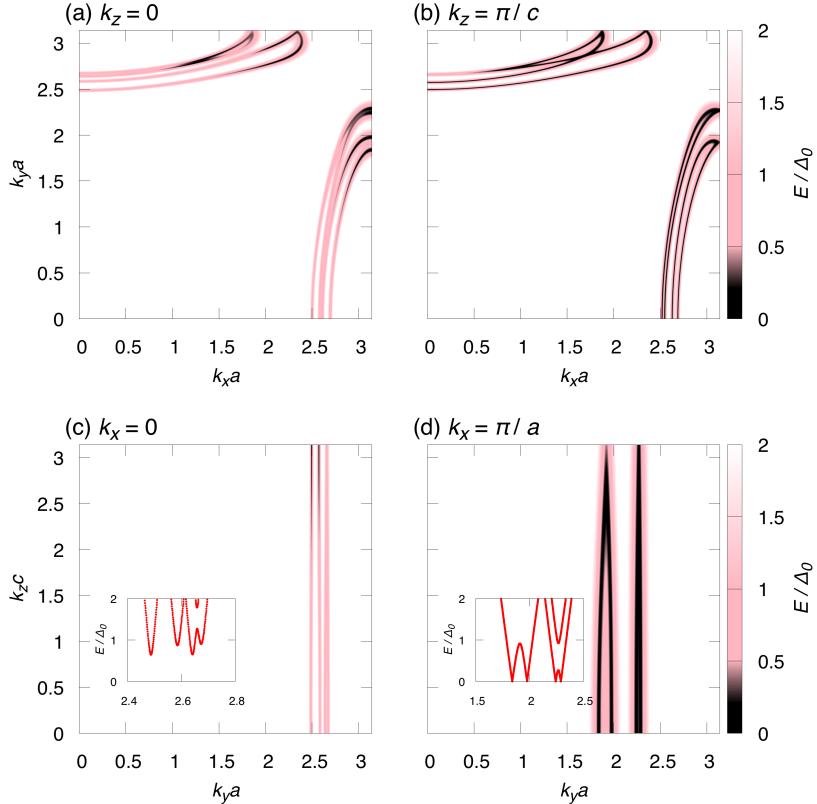


図 3.5 s 波の秩序変数の場合の規格化された準粒子エネルギー分散 E/Δ_0 . (a) $k_z = 0$, (b) $k_z = \pm\pi/c$, (c) $k_x = 0$, (d) $k_x = \pm\pi/a$ の面について, 第一象限内でそれぞれ等高線プロットしている. (c) と (d) 内の挿入図は, それぞれ $(k_x a, k_z c) = (0, 0)$ と $(\pi, 0)$ の線上に関して E/Δ_0 の $k_y a$ 依存性を示している. ブリルアンゾーン境界の $k_z = \pm\pi/c$ と $k_x = \pm\pi/a$ でラインノード (黒線) が現れている.

上では, ブリルアンゾーン境界 ($k_z = \pm\pi/c$) で非共型対称性によって守られたラインノードが現れ, 中央面 ($k_z = 0$) でギャップが開く. 一方垂直面上では, 中央面 ($k_x = 0$) でラインノードが存在する. d_{xy} 波の秩序変数はこの中央面で元々ゼロになるので, この結果は自明である. さらに, ブリルアンゾーン境界 ($k_x = \pm\pi/a$) でギャップが開くが, これは通常の d_{xy} 波の場合とは異なる非従来的な結果である. したがって, もし Sr_2IrO_4 で $-+-+$ 秩序と共に超伝導が実現すれば, ブリルアンゾーン境界で水平面上のラインノードや垂直面上で開いたギャップなどの非自明な結果が得られる可能性がある.

3.5 $-+-+$ 状態における FFLO 超伝導

次に, $-+-+$ 状態と共に超伝導は, FFLO 超伝導になることを示す.

3.5.1 電子構造

超伝導状態について議論する前に, 正常状態におけるバンド構造の特徴を調べることにする.

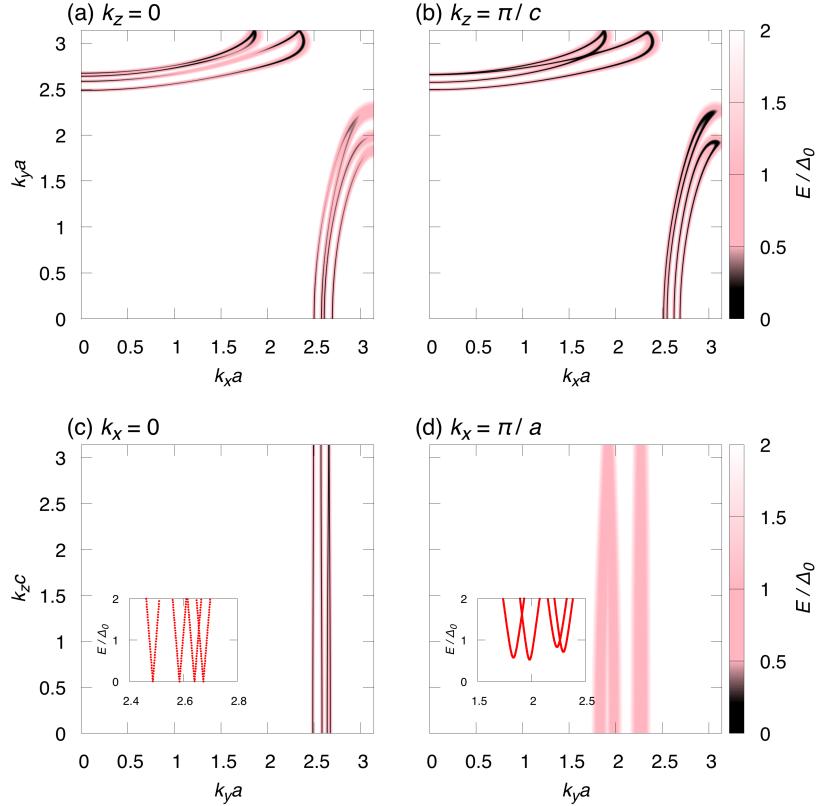


図 3.6 d_{xy} 波の秩序変数の場合の規格化された準粒子エネルギー分散 E/Δ_0 . ブリルアンズーン境界の $k_z = \pm\pi/c$ と中央面 $k_x = 0$ でラインノード (黒線) が現れている.

バンドの2重縮退

Sr_2IrO_4 が反転対称性のある結晶構造を持っているにも関わらず, $-+-+$ の磁気秩序は自発的に時間反転対称性 θ を破っているだけでなく反転対称性 I をも破っている. しかし, それらを組み合わせた対称性 θI は保存されている. この合成された演算は $(\theta I)^2 = -1$ を満たすため, ジグザグ格子における磁気单極子状態や磁気四極子状態と同様の理由で, バンド構造は2重の縮退を持つ (2.3節参照).

バンドの非対称性

3.3.2節で示したように, $-+-+$ 秩序は奇 parity の磁気四極子に分類され, 波数空間では最低次で k_x という関数で表される. この1次の k_x の項によって, バンド構造は k_x 方向に非対称になることが分かる. 我々のモデルを用いた数値解析の結果も示しておく. 図 3.7 は, $k_z = 0$ の面における正常状態のハミルトニアン $\hat{H}_n(k_x, k_y, 0)$ を対角化したときの固有値の1つ $E_n(k_x, k_y, 0)$ と, k_x 成分だけ反転させた固有値 $E_n(-k_x, k_y, 0)$ との差を表している. この図から明らかのように, 数値解析においてもバンド構造は k_x 方向に非対称になっている.

このバンド構造の非対称性は, $-+-+$ 状態で保存されている対称操作を考えることによっても理解することができる. この系で保存されている操作の中には, 波数 k_y を $-k_y$ に変換する操作が

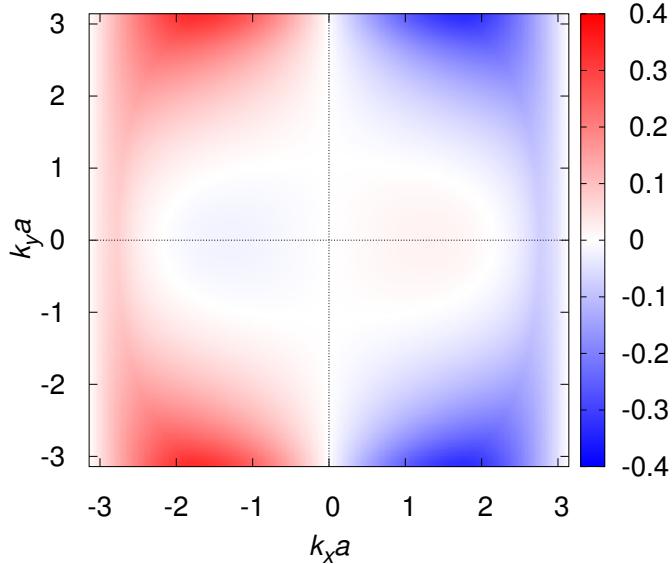


図 3.7 正常状態のエネルギー分散の差 $E_n(k_x, k_y, 0) - E_n(-k_x, k_y, 0)$ を等高線プロットしたもの。色の付いた領域は、バンド構造が k_x 方向に非対称であることを示す。一方で、 k_y 方向に対しては対称であることも分かる。

含まれている。すなわち 2 回回転 $\{2_x|\tau_z\}$, 2 回螺旋 $\{2_x|\tau_x + \tau_y\}$ と映進 $\{\sigma_y|\tau_x\}, \{\sigma_y|\tau_y + \tau_z\}$ である。同様に波数 k_z を $-k_z$ に変換する操作についても、系を不变に保つ操作が存在する。しかし、波数 k_x を $-k_x$ に変換するすべての操作 (反転 $\{I|0\}$, 2 回回転 $\{2_z|\tau_y\}, \{2_y|\tau_x\}$, 2 回螺旋 $\{2_z|\tau_x + \tau_z\}, \{2_y|\tau_y + \tau_z\}$ と映進 $\{\sigma_x|\tau_z\}, \{\sigma_x|\tau_x + \tau_y\}$) は $-+-+$ 状態において保存されていない。したがって、 k_x 方向に対称なバンド構造を保つようなすべての対称性は破れており、 k_x 方向に非対称なバンド構造となりうる。

まとめ

$-+-+$ 状態における 2 重縮退した非対称なバンド構造は、ジグザグ格子における磁気四極子状態のそれと類似している (2.3 節参照)。上記の結果から Sr_2IrO_4 の $-+-+$ 状態においても、反対称スピン軌道相互作用と結び付いた磁気四極子秩序がこのようなバンド構造を作り出しているということが示唆される。

3.5.2 FFLO 超伝導

次に、 $-+-+$ 状態における超伝導の性質を、線形化ギャップ方程式を用いた解析によって明らかにする。我々は既約超伝導感受率 $U^{(s)}\hat{\chi}^{(0)}(\mathbf{q}, i\Omega_n)$ を式 (3.32) によって計算し、その行列を対角化して最大固有値 $\chi_{\max}^{(0)}(\mathbf{q}, i\Omega_n)$ を求めた。ここで仮定として、ボソンの松原振動数は常に 0 とし ($\Omega_n = 0$)、またバンド構造の k_y, k_z 方向の対称性から $q_y = q_z = 0$ とする。我々は、 $\chi_{\max}^{(0)}(\mathbf{q}, 0)$ の転移点近傍での q_x 依存性を調べた。結果を図 3.8 に示す。これより、以下のようなことが分かる。

- 非磁性状態 ($h = 0$) においては系は空間反転対称性を保っているので、反対称スピン軌道

相互作用の有無に関わらず $\chi_{\max}^{(0)}$ は $q_x = 0$ の位置にピークを持つ [図 3.8(a)].

- 一方 $-+--$ 状態 ($h = 0.2, 0.8$) においては、反対称スピン軌道相互作用があるときにのみバンド構造が k_x 方向に非対称になる。したがって、 $\chi_{\max}^{(0)}$ は反対称スピン軌道相互作用がないときは $q_x = 0$ の位置にピークを持つが、あるときには有限の q_x の位置にピークを持つ [図 3.8(b, c)]. この結果は、奇パリティの $-+--$ 秩序によって、外部磁場がなくても FFLO 状態が安定化することを示している。
- さらに、強い $-+--$ 状態 ($h = 0.8$) においては、 $\chi_{\max}^{(0)}$ は $q_x a \sim -0.42, -0.09, 0.31$ の 3 つの位置で極大値をとる [図 3.8(c)]. このふるまいは、ジグザグ格子中の大きな磁気四極子によって引き起こされるバンド依存 FFLO 状態における凝縮エネルギーのふるまいと似ている (2.6 節参照)。すなわち、弱い $-+--$ 状態においてはフェルミ準位を横切るすべてのバンドがほぼ等しく超伝導に寄与しているが、強い $-+--$ 状態においてはバンドの変形が大きくなり、バンドの一部だけが主に超伝導に寄与している、と理解できる。

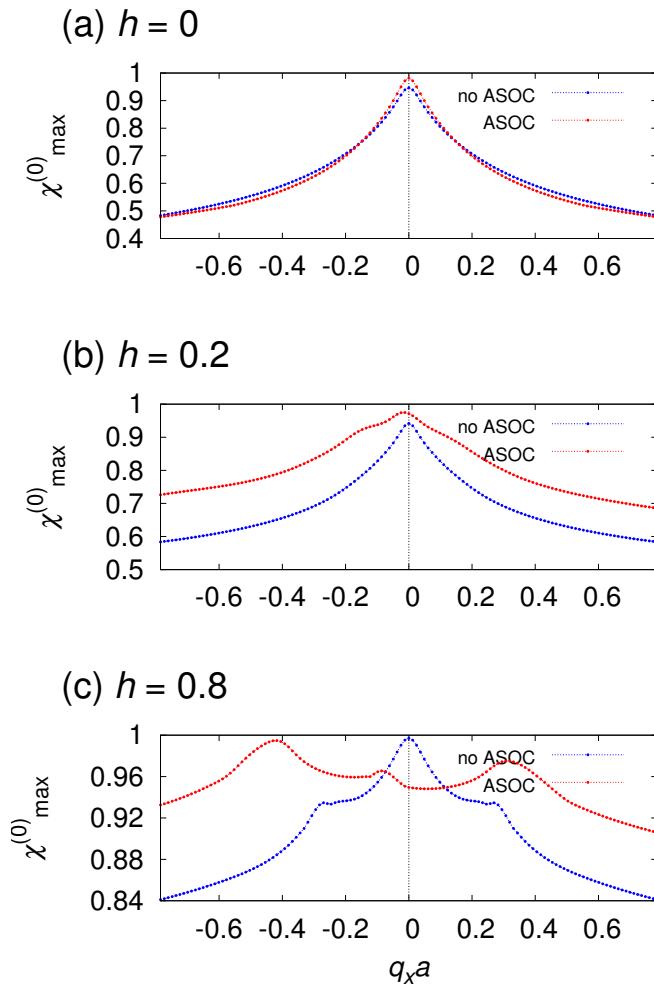


図 3.8 (a) 非磁性状態 ($h = 0$), (b) 弱い $-+--$ 状態 ($h = 0.2$), (c) 強い $-+--$ 状態 ($h = 0.8$) における、 $T \sim T_C$ での最大固有値 $\chi_{\max}^{(0)}$ 。温度は $T = 0.01 \sim T_C$ として固定している。反対称スピン軌道相互作用があるとき、 s 波の同一サイト相互作用 $U^{(s)}$ は $h = 0, 0.2, 0.8$ に対してそれぞれ 0.26, 0.47, 1.45 しており、スピン軌道相互作用がないときは 0.31, 0.55, 1.60 としている。

3.6 結論

本章では、磁気多極子と共に存する超伝導の具体的な対象物質として、イリジウム酸化物 Sr_2IrO_4 を選んで調査を行った。この物質もまたジグザグ格子と同様に局所的な空間反転対称性が破れていることから、奇 parity の多極子モーメントが誘起される可能性がある。実際、この物質で提案されている $-+-+$ 磁気秩序は奇 parity の磁気四極子に分類される秩序である。この秩序の他に、偶 parity の磁気八極子に分類される $-+-$ 秩序も研究対象とし、それぞれの磁気秩序と共に存する超伝導が実現した場合、どんな新規性が現れるかに注目して研究を行った。

まず、 $-+-$ 状態で s 波超伝導が発現したとすると、全てのブリルアンゾーン境界で磁気的な非共型対称性に守られた非自明なラインノードが現れる。一方で、銅酸化物高温超伝導体との類似 [67] から d_{xy} 波超伝導を仮定した場合、水平面のブリルアンゾーン境界では s 波と同様に非自明なラインノードが現れるのに加え、垂直面のブリルアンゾーン境界ではギャップが開く。こういったギャップ構造は通常の d 波超伝導体とは異なる性質であり、実験での観測が期待される。

他方、 $-+-$ 状態のもとでは、ジグザグ格子と同様に反対称スピン軌道相互作用と結び付いた磁気四極子秩序によってバンド構造が非対称になる。よって、 $-+-$ 秩序と共に存する超伝導は外部磁場がなくとも FFLO 超伝導になる。さらに、この FFLO 超伝導は磁気モーメントが大きいときにバンド依存するような性質を持つ。このような性質はジグザグ格子の簡単なモデルでも示したが(2.6 節)、それだけでなく具体的な物質でも実現する可能性を示すことができた。

3.7 付録

3.7.1 補足：小群に基づいた超伝導ギャップの分類

ここでは、3.2.4 節や 3.4.1 節で説明した「小群に基づいた超伝導ギャップの分類」について補足を行う。上記では Bloch 状態の表現 $\hat{\gamma}^k$ から Cooper 対波動関数の表現 $\hat{N}^{k,-}$ を求めるため Mackey-Bradley の定理を機械的に用いていたが、その数学的な枠組みを簡単に記しておく^{*8}。

反対称化された誘導表現の平方（一般論）

まず、結晶の対称性を表す（磁性）空間群 M について、小群 \mathcal{M}^k を用いて二重剩余類分解（double coset decomposition）を行う：

$$M = \sum_{\alpha} \mathcal{M}^k d_{\alpha} \mathcal{M}^k \quad (3.59)$$

ただし、和の中で同一の要素が複数回出てきても一回しか数えないものとする。この分解の仕方は必ず一意に定まる（代表元 d_{α} のとり方は一意ではないが、 $d_1 = \{E|\mathbf{0}\}$ と約束しても一般性を失わない）。さて、このとき \mathcal{M}^k の小表現 $\hat{\gamma}^k$ によって誘導された M の誘導表現 $\hat{\gamma}^k \uparrow M$ を考える。同じ誘導表現 2 つの直積（平方）は、 $L_{\alpha}^k = \mathcal{M}^k \cap d_{\alpha} \mathcal{M}^k d_{\alpha}^{-1}$ 上で定義された Kronecker 積

^{*8} さらに詳しい解説は文献 [113, 114] を参照。

$\hat{\gamma}^k \otimes \hat{\gamma}_\alpha^k$ を用いて以下のように分解できることが知られている [113, 116] :

$$(\hat{\gamma}^k \uparrow M) \otimes (\hat{\gamma}^k \uparrow M) = \sum_{\alpha} ((\hat{\gamma}^k \otimes \hat{\gamma}_\alpha^k) \downarrow L_\alpha^k) \uparrow M \quad (3.60)$$

ここで $\hat{\gamma}_\alpha^k$ は M の部分群 $d_\alpha \mathcal{M}^k d_\alpha^{-1}$ の表現であり

$$\hat{\gamma}_\alpha^k (d_\alpha m d_\alpha^{-1}) = \hat{\gamma}^k(m), \text{ for all } m \in \mathcal{M}^k \quad (3.61)$$

で定義される。

さて、 $\hat{\gamma}^k$ は k 点での Bloch 状態を表しているのであった (3.2.4 節) から、式 (3.60) は 2 つの Bloch 状態の直積とみなせる。これが(弱結合の BCS 理論の範囲で) 超伝導の Cooper 対とみなせるためには、さらに (a) フェルミオンの反可換性 および (b) 重心運動量がゼロとなるような直積であることが必要である。したがって、条件 (a) よりまず反対称化された誘導表現の平方 $\{(\hat{\gamma}^k \uparrow M) \otimes (\hat{\gamma}^k \uparrow M)\}$ の Kronecker 積による分解を考え、その中で条件 (b) を満たす $d_\alpha k \equiv -k$ となる α について考えればよい、ということが分かる。このような反対称表現の分解の方法は既に知られており、 α に応じて次の 3 種類に大別できる：

- $\alpha = 1$ のとき (すなわち $\mathcal{M}^k d_\alpha \mathcal{M}^k = \mathcal{M}^k$).
- $\alpha \in A$ のとき。ここで A は \mathcal{M}^k 自身を除く自己逆元な (self-inverse) 二重剩余類 $\mathcal{M}^k d_\alpha \mathcal{M}^k = \mathcal{M}^k d_\alpha^{-1} \mathcal{M}^k$ の集合を表す。
- $\alpha \in B$ のとき。ここで B は非自己逆元な二重剩余類 $\mathcal{M}^k d_\alpha \mathcal{M}^k$ に対し、全ての異なる集合 $\mathcal{M}^k d_\alpha \mathcal{M}^k \cup \mathcal{M}^k d_\alpha^{-1} \mathcal{M}^k$ の集合を表す。

このような類別のもとで、誘導表現の直積の反対称表現は以下のように分解される [113, 114] :

$$\{(\hat{\gamma}^k \uparrow M) \otimes (\hat{\gamma}^k \uparrow M)\} = \{\hat{\gamma}^k \otimes \hat{\gamma}^k\} \uparrow M + \sum_{\alpha \in A} \hat{N}_\alpha^{k,-} \uparrow M + \sum_{\beta \in B} \hat{N}_\beta^k \uparrow M \quad (3.62)$$

ここで \hat{N}_β^k は L_β^k の表現であり

$$\begin{aligned} \hat{N}_\beta^k(l) &= \hat{\gamma}^k(l) \otimes \hat{\gamma}_\beta^k(l) \\ &= \hat{\gamma}^k(l) \otimes \hat{\gamma}^k(d_\beta^{-1} l d_\beta), \text{ for all } l \in L_\beta^k \end{aligned} \quad (3.63)$$

で定義される。さらに、 $\alpha \in A$ のとき $d_\alpha \mathcal{M}^k \cap \mathcal{M}^k d_\alpha^{-1}$ は空でない^{*9}ので、この共通集合に含まれる要素 a をとる。式 (3.62) に含まれる $\hat{N}_\alpha^{k,-}$ は $\tilde{L}_\alpha^k = L_\alpha^k + a L_\alpha^k$ の表現であり

$$\hat{N}_\alpha^{k,-}(l) = \hat{N}_\alpha^k(l), \text{ for all } l \in L_\alpha^k \quad (3.64a)$$

$$\hat{N}_\alpha^{k,-}(a) = -\hat{P} \quad (3.64b)$$

で定義される。ここで \hat{P} は

$$\hat{P}^2 = \hat{N}_\alpha^k(a^2) \quad (3.65a)$$

$$\hat{P} \hat{N}_\alpha^k(a^{-1} l a) \hat{P}^{-1} = \hat{N}_\alpha^k(l), \text{ for all } l \in L_\alpha^k \quad (3.65b)$$

^{*9} [証明] $\mathcal{M}^k d_\alpha \mathcal{M}^k = \mathcal{M}^k d_\alpha^{-1} \mathcal{M}^k$ であるから、 $m_a d_\alpha m_b = m_c d_\alpha^{-1} m_d$ であるような \mathcal{M}^k の要素 m_a, m_b, m_c, m_d が存在する。これより、 $d_\alpha m_b m_d^{-1} = m_a^{-1} m_c d_\alpha^{-1}$ である。■

を満たすような行列である。表現 $\hat{N}_\alpha^{\mathbf{k},-}$ は少々面倒な形をしているが、その指標は Mackey-Bradley の定理 [113–115]

$$\chi[\hat{N}_\alpha^{\mathbf{k},-}(l)] = \chi[\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}(l)]\chi[\hat{\gamma}_\alpha^{\mathbf{k}}(l)] = \chi[\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}(l)]\chi[\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}(d_\alpha^{-1}ld_\alpha)] \quad (3.66a)$$

$$\chi[\hat{N}_\alpha^{\mathbf{k},-}(al)] = -\chi[\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}(alal)] \quad (3.66b)$$

を用いて簡単に求められることが分かっている。

以上で反対称化された誘導表現の平方が Kronecker 積によって分解できた。Cooper 対の波動関数の表現を求めるためにはさらに条件 (b) を加える必要がある。以下では、条件 (b) を満たすのは $\alpha \in A$ の場合に含まれる（すなわち Mackey-Bradley の定理を使える）ことを示し、どの d_α を選んでも結果が変わらないことを明確な形で示しておく。

Cooper 対波動関数の場合

条件 (b) $d_\alpha \mathbf{k} \equiv -\mathbf{k}$ を満たす d_α について、次の 3 つの性質が成り立つ。

(i) $d_\alpha^2 \in \mathcal{M}^{\mathbf{k}}$.

この性質より $\mathcal{M}^{\mathbf{k}} d_\alpha^{-1} \mathcal{M}^{\mathbf{k}} = \mathcal{M}^{\mathbf{k}} d_\alpha^{-1} d_\alpha^2 \mathcal{M}^{\mathbf{k}} = \mathcal{M}^{\mathbf{k}} d_\alpha \mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ が成り立ち、 $\alpha \in A$ であることが分かる。

(ii) $\mathcal{M}^{\mathbf{k}} = d_\alpha \mathcal{M}^{\mathbf{k}} d_\alpha^{-1} = \mathcal{M}^{\mathbf{k}} \cap d_\alpha \mathcal{M}^{\mathbf{k}} d_\alpha^{-1}$.

(iii) 共通集合 $d_\alpha \mathcal{M}^{\mathbf{k}} \cap \mathcal{M}^{\mathbf{k}} d_\alpha^{-1}$ に含まれる a として、常に d_α を選ぶことができる。

[証明] (i) $d_\alpha^2 \mathbf{k} \equiv -d_\alpha \mathbf{k} \equiv \mathbf{k}$ (ほぼ自明)。

(ii) 小群の性質より、任意の $m \in \mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ に対し $m\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}$ 。したがって、 $d_\alpha m d_\alpha^{-1} \mathbf{k} \equiv -d_\alpha m \mathbf{k} \equiv -d_\alpha \mathbf{k} \equiv \mathbf{k}$ 。

(iii) (i) の性質を用いると、 $d_\alpha \mathcal{M}^{\mathbf{k}} \ni d_\alpha \cdot e = d_\alpha$ (e は単位元) かつ $\mathcal{M}^{\mathbf{k}} d_\alpha^{-1} \ni d_\alpha^2 \cdot d_\alpha^{-1} = d_\alpha$ であるから、 d_α は常に共通集合 $d_\alpha \mathcal{M}^{\mathbf{k}} \cap \mathcal{M}^{\mathbf{k}} d_\alpha^{-1}$ に含まれる。■

d_α はどれを選んでも変わらないことを示そう。 ψ_i を $\mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ の表現 $\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}$ の基底関数とすると、 $d_\alpha \psi_i$ は $d_\alpha \mathcal{M}^{\mathbf{k}} d_\alpha^{-1} = \mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ の表現 (3.61) の基底関数になる。 $d_\alpha \psi_i$ に $m \in \mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ を作用させることを考える：

- (ii) より、 $d_\alpha^{-1} m d_\alpha \in \mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ であるから

$$\begin{aligned} m d_\alpha \psi_i &= d_\alpha (d_\alpha^{-1} m d_\alpha) \psi_i \\ &= d_\alpha \sum_j \psi_j [\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}(d_\alpha^{-1} m d_\alpha)]_{ji} = \sum_j (d_\alpha \psi_j) [\hat{\gamma}_\alpha^{\mathbf{k}}(m)]_{ji} \end{aligned} \quad (3.67)$$

- 一方、 d_α とは異なる $d_{\alpha'}$ を用いて $m = d_{\alpha'} m' d_{\alpha'}^{-1}$ ($m' \in \mathcal{M}^{\mathbf{k}}$) と表したとすると、(i) 同様の理由で $d_{\alpha'}^{-1} d_\alpha \in \mathcal{M}^{\mathbf{k}}$ であるから

$$\begin{aligned} m d_\alpha \psi_i &= d_{\alpha'} (m' d_{\alpha'}^{-1} d_\alpha) \psi_i \\ &= d_{\alpha'} \sum_j \psi_j [\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}(m' d_{\alpha'}^{-1} d_\alpha)]_{ji} = \sum_j (d_{\alpha'} \psi_j) [\hat{\gamma}^{\mathbf{k}}(m' d_{\alpha'}^{-1} d_\alpha)]_{ji} \end{aligned} \quad (3.68)$$

式(3.67)と(3.68)から、2つの基底 $d_\alpha \psi_i$ と $d_{\alpha'} \psi_i$ について明らかに

$$d_\alpha \psi_i = \sum_j (d_{\alpha'} \psi_j) \hat{U}_{ji} \quad (3.69)$$

となるような変換行列 \hat{U} が存在する。これは、表現 γ_α^k と $\gamma_{\alpha'}^k$ が同値であることを意味する。したがって、 d_α の候補が複数あったとしても、どれを選んでも結果は変わらない。以上のような理由から、3.2.4節や3.4.1節では簡単のため空間反転を選び $a = d_\alpha = \mathcal{I}$ としていた。

3.7.2 $- + + -$ 状態における群論の結果の例外

$- + + -$ 状態において、群論を用いたギャップ関数の分類の結果(3.4.1節)は、 A_{1g} 表現に属するギャップ関数は中央面 $k_y = 0$ では許されるがブリルアンゾーン境界 $k_y = \pm\pi/a$ ではラインノードになるというものであった。しかし、我々のモデル(3.2.1節)による数値計算の結果では、ゾーン境界のギャップは中央面よりも小さくなりはするが完全に閉じてはいない(図3.9)。その理由は、 $k_y = \pm\pi/a$ の面で4重縮退が存在することにある。この面にはいくつかの場所で対称性に守られた4重縮退があるが(3.7.3節参照)，我々のモデルではそれだけでなく $k_y = \pm\pi/a$ の面全体にわたって4重縮退が存在してしまう。小群によるギャップ関数の分類の議論はバンド内ギャップ、すなわちバンド基底で表示した秩序変数行列の対角要素だけに適用できることが分かっている[50]。通常の場合には、バンド間ギャップ(バンド基底で表示した秩序変数行列の非対角要素)は $E = 0$ 付近の準粒子エネルギースペクトルにほとんど影響しないので、バンド内ギャップが実際のギャップ構造を決めていると考えてよい。しかし4重縮退が存在する場合には、バンド間ギャップが $E = 0$ 付近のスペクトルへ大きく寄与し、その影響を無視できない。したがって図3.9の結果は、非共型対称性に守られたバンド内ギャップのノードは存在するが、4重縮退があることでバンド間ギャップの影響を受け、実際のスペクトルではラインノードが消えてしまっているような状況であると考えられる。

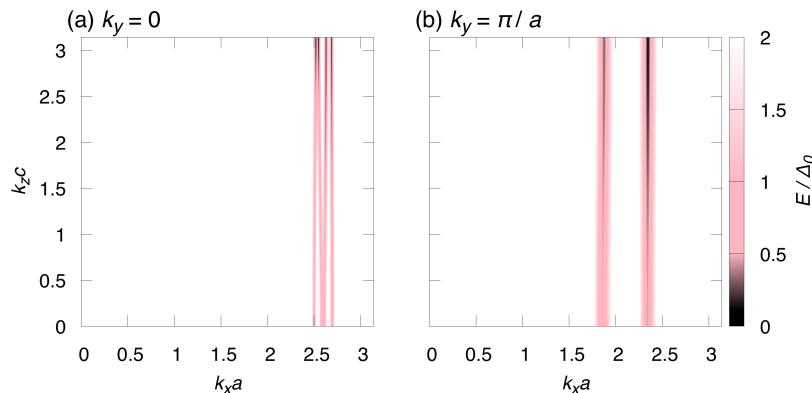


図3.9 s 波の秩序変数の場合に、規格化された準粒子エネルギー分散 E/Δ_0 。(a) 中央面 $k_y = 0$ では、ブリルアンゾーン境界を除いたほぼ全ての領域でギャップが開いている。(b) ブリルアンゾーン境界面 $k_y = \pm\pi/a$ では、(a) よりもノード(黒線)の領域が広がっているが、 $k_z \sim 0$ ではギャップが開いてしまっている。

3.7.3 $- + + -$ 状態における対称性に守られた 4 重縮退

$- + + -$ 状態において、ブリルアンゾーン境界で対称性に守られた 4 重縮退が存在することを示す。この 4 重縮退は、図 3.10 において $U-R$, $R-T$, $T-Y$, $Y-S$ の線上で現れる。各線での小群を考えることで、この縮退の存在が証明できる。

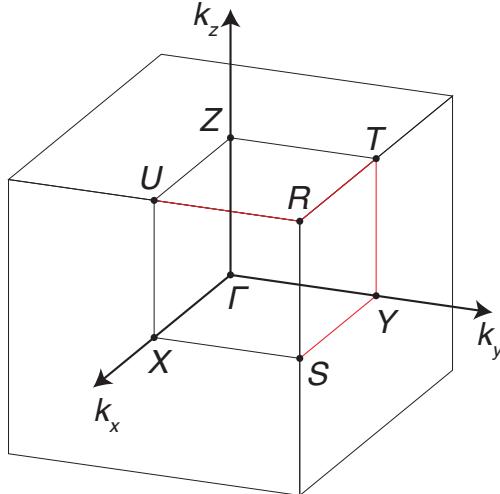


図 3.10 単純直方晶格子のブリルアンゾーン。 $- + + -$ 状態では赤線の部分で 4 重縮退が存在する。

$U-R$ 線上 ($k_y = \pm\pi/a$ かつ $k_z = \pm\pi/c$) での小群は以下の式で与えられる：

$$\begin{aligned} & \{E|\mathbf{0}\}T + \{\sigma_h|\boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_z\}T + \{\sigma_x|\boldsymbol{\tau}_z\}T + \{2_y|\boldsymbol{\tau}_x\}T \\ & + \{\theta I|\boldsymbol{\tau}\}T + \{\theta 2_z|\boldsymbol{\tau}_y\}T + \{\theta 2_x|\boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_y\}T + \{\theta \sigma_y|\boldsymbol{\tau}_y + \boldsymbol{\tau}_z\}T. \end{aligned} \quad (3.70)$$

ここで、4 重縮退は以下の 3 つの関係式

$$(\{2_y|\boldsymbol{\tau}_x\})^2 = -1 \quad (3.71a)$$

$$\{\{2_y|\boldsymbol{\tau}_x\}, \{\sigma_x|\boldsymbol{\tau}_z\}\} = 0 \quad (3.71b)$$

$$\{\{2_y|\boldsymbol{\tau}_x\}, \{\theta I|\boldsymbol{\tau}\}\} = 0 \quad (3.71c)$$

から示すことができる [75, 76]。この証明は 2.3.3 節で示した方法と全く同様なので省略する。

他の線上においても全く同じ方法で証明できるので、ここでは必要な関係式だけを記しておくこととする。 $R-T$ と $Y-S$ の線上では

$$(\{2_x|\boldsymbol{\tau}_z\})^2 = -1 \quad (3.72a)$$

$$\{\{2_x|\boldsymbol{\tau}_z\}, \{\sigma_y|\boldsymbol{\tau}_x\}\} = 0 \quad (3.72b)$$

$$\{\{2_x|\boldsymbol{\tau}_z\}, \{\theta I|\boldsymbol{\tau}\}\} = 0 \quad (3.72c)$$

の関係式を用いる。最後に、 $T-Y$ の線上では

$$(\{\sigma_y|\boldsymbol{\tau}_x\})^2 = -1 \quad (3.73a)$$

$$\{\{\sigma_y|\boldsymbol{\tau}_x\}, \{2_z|\boldsymbol{\tau}_x + \boldsymbol{\tau}_z\}\} = 0 \quad (3.73b)$$

$$\{\{\sigma_y|\boldsymbol{\tau}_x\}, \{\theta I|\boldsymbol{\tau}\}\} = 0 \quad (3.73c)$$

の関係式を用いることで 4 重縮退の存在を証明できる。

第4章

総括

本論文では、局所的に空間反転対称性が破れた系において磁気多極子と共に存する超伝導に特有の性質を調査した。このような研究はこれまでに例がなく、非常に新しい切り口の研究である。加えて、対象となるような物質も数多くあり、そのような物質において見過ごされてきた新たな自由度に光を当てる研究となっている。

こうした新しい研究の第1段階として、1次元ジグザグ格子というミニマルモデルを用いて調査を行った。このモデルの磁気单極子状態においては、単位格子内の反強磁性モーメントに対してもロバストなBCS超伝導が実現する。一方で磁気双極子状態では奇 parity のスピン一重項PDW状態が安定化し、かつこの状態はトポロジカル数によって特徴付けられることが分かった。さらに磁気四極子状態においては、反対称スピン軌道相互作用との協力効果によって非対称なバンド構造が生まれ、外部磁場をかけることなくFFLO超伝導が実現しうる。このFFLO状態においては、Cooper対の重心運動量がバンドに依存するという興味深い特徴も得ることができた。

ミニマルモデルによる解析の後、具体的な物質を対象とした研究としてイリジウム酸化物 Sr_2IrO_4 についても調査を行った。磁気八極子秩序に分類される $-++-$ 状態においては、磁気的な非共型対称性に守られた非自明なノード構造が現れることが分かった。一方、磁気四極子秩序に分類される $-+-+$ 状態においては、ジグザグ格子の場合と同様のFFLO超伝導の性質が示唆される。

以上のように我々は、単純なモデルないしは具体的な物質を調査し、磁気多極子と共に存する超伝導には様々な興味深い性質が現れることを示し、多極子分野における先駆的な研究を行うことができた。今後の展望としては、イリジウム酸化物以外にも多くの候補物質を対象とした研究を行うことや、あるいは電気多極子に注目してみるとといったことが挙げられる。解析手法の観点からも新しい方向性が考えられる。例えば、今回無視してきた多軌道性を取り入れたモデルを用い、これが多極子と超伝導の共存相にもたらす影響を見ることも可能であろう。乱雑位相近似や揺らぎ交換近似などによって多極子感受率の計算を行い、多極子揺らぎと超伝導相の安定性の関係を調べるといったテーマも興味深い。このような「多極子」と「超伝導」の2つの大きな分野を繋ぐ様々な研究を行い、互いの分野をさらに発展させていくことが期待される。

謝辞

本研究は京都大学大学院理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 物理学第一分野 凝縮系理論グループにおいて、柳瀬陽一准教授ご指導の下に行われたものです。指導教官である柳瀬陽一准教授には、本研究の遂行と本論文作成にあたって懇切丁寧なご指導を頂き、心から感謝いたします。早稲田大学の渡辺洋助教と名古屋大学の小林伸吾特任助教には、Sr₂IrO₄ の研究に際して有益な議論をさせて頂き、感謝を申し上げます。また、同研究グループの川上則雄教授、池田隆介准教授、手塚真樹助教の先生方からは日々のセミナー等を通じて、多くのことを指導して頂き感謝しております。加えて、研究室の他の方々には有益なアドバイスを頂くのみならず、様々な面でお世話になりました。特に共同研究者である野本拓也氏には、群論を用いた解析手法などについて多くのアドバイスを頂き、突然質問に伺っても親切にご指導して頂きました。この場を借りて御礼を申し上げます。

また、本論文は L^AT_EX を用いて作成されたものであります。その執筆にあたっては Emacs の入力支援環境である「YaTeX (野鳥)」に大変お世話になりました。YaTeX の作者である廣瀬雄二氏には、「環境補完 (C-c b) で subequations 環境を使おうとすると Emacs が固まる」という私のしがないバグ報告に対しても親切かつ迅速な対応をして頂き、感謝を申し上げたいと思います。

参考文献

- [1] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [2] Y. Yanase, T. Jujo, T. Nomura, H. Ikeda, T. Hotta, and K. Yamada, Phys. Rep. **387**, 1 (2003).
- [3] P. Fulde and R. A. Ferrell, Phys. Rev. **135**, A550 (1964).
- [4] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 1136 (1964), [Sov. Phys. JETP **20**, 762 (1965)].
- [5] Y. Matsuda and H. Shimahara, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 051005 (2007).
- [6] E. Bauer, G. Hilscher, H. Michor, C. Paul, E. W. Scheidt, A. Gribanov, Y. Seropgin, H. Noël, M. Sigrist, and P. Rogl, Phys. Rev. Lett. **92**, 027003 (2004).
- [7] E. I. Rashba, Sov. Phys. Solid State **1**, 368 (1959).
- [8] G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).
- [9] 柳瀬陽一, 播磨尚朝, 固体物理 **46**, 283 (2011).
- [10] 柳瀬陽一, 播磨尚朝, 固体物理 **47**, 101 (2012).
- [11] S. Fujimoto, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 051008 (2007).
- [12] Edited by E. Bauer and M. Sigrist, *Non-Centrosymmetric Superconductors: Introduction and Overview*, Vol. 847 of *Lecture Notes in Physics* (Springer, Berlin, 2012).
- [13] V. Édel'shtein, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **95**, 2151 (1989), [Sov. Phys. JETP **68**, 1244 (1989)].
- [14] O. V. Dimitrova and M. V. Feigel'man, JETP Lett. **78**, 637 (2003).
- [15] K. V. Samokhin, Phys. Rev. B **70**, 104521 (2004).
- [16] D. F. Agterberg and R. P. Kaur, Phys. Rev. B **75**, 064511 (2007).
- [17] Y. Matsunaga, N. Hiasa, and R. Ikeda, Phys. Rev. B **78**, 220508 (2008).
- [18] N. Hiasa, T. Saiki, and R. Ikeda, Phys. Rev. B **80**, 014501 (2009).
- [19] T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase, Phys. Rev. B **86**, 134514 (2012).
- [20] T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 074714 (2013).
- [21] 吉田智大, 局所的な空間反転対称性が欠如した系におけるエキゾチック超伝導の理論研究, Ph.D. thesis, 新潟大学大学院, 自然科学研究科, 2014.
- [22] D. Maruyama, M. Sigrist, and Y. Yanase, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 034702 (2012).
- [23] C. Schwartz, Phys. Rev. **97**, 380 (1955).
- [24] Y. Kuramoto, H. Kusunose, and A. Kiss, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 072001 (2009).

- [25] 楠瀬博明, 物性研究 **97**, 730 (2012).
- [26] N. A. Spaldin, M. Fiebig, and M. Mostovoy, J. Phys. Condens. Matter **20**, 434203 (2008).
- [27] Y. Yanase, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 014703 (2014).
- [28] T. Hitomi and Y. Yanase, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 114704 (2014).
- [29] S. Hayami, H. Kusunose, and Y. Motome, Phys. Rev. B **90**, 024432 (2014).
- [30] S. Hayami, H. Kusunose, and Y. Motome, Phys. Rev. B **90**, 081115 (2014).
- [31] S. Hayami, H. Kusunose, and Y. Motome, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 064717 (2015).
- [32] L. Fu, Phys. Rev. Lett. **115**, 026401 (2015).
- [33] T. Hitomi and Y. Yanase, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 124702 (2016).
- [34] S. Di Matteo and M. R. Norman, Phys. Rev. B **94**, 075148 (2016).
- [35] Y. Guo, S. J. Clark, and J. Robertson, J. Phys. Condens. Matter **24**, 325504 (2012).
- [36] M. Fiebig, D. Fröhlich, and H. J. Thiele, Phys. Rev. B **54**, R12681 (1996).
- [37] L. M. Corliss, J. M. Hastings, R. Nathans, and G. Shirane, J. Appl. Phys. **36**, 1099 (1965).
- [38] S. Foner, Phys. Rev. **130**, 183 (1963).
- [39] R. Yacovitch and Y. Shapira, Physica B+C **86**, 1126 (1977).
- [40] 有馬孝尚, マルチフェロイクス－物質中の電磁気学の新展開－, 基本法則から読み解く物理学最前線 第2巻 (共立出版, 2014).
- [41] V. J. Folen, G. T. Rado, and E. W. Stalder, Phys. Rev. Lett. **6**, 607 (1961).
- [42] T. Onimaru, K. T. Matsumoto, Y. F. Inoue, K. Umeo, T. Sakakibara, Y. Karaki, M. Kubota, and T. Takabatake, Phys. Rev. Lett. **106**, 177001 (2011).
- [43] M. Takigawa, H. Yasuoka, T. Tanaka, and Y. Ishizawa, J. Phys. Soc. Jpn. **52**, 728 (1983).
- [44] R. Shiina, H. Shiba, and P. Thalmeier, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 1741 (1997).
- [45] Y. Kuramoto and N. Fukushima, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 583 (1998).
- [46] M. Tsujimoto, Y. Matsumoto, T. Tomita, A. Sakai, and S. Nakatsuji, Phys. Rev. Lett. **113**, 267001 (2014).
- [47] M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
- [48] M. R. Norman, Phys. Rev. B **52**, 15093 (1995).
- [49] T. Micklitz and M. R. Norman, Phys. Rev. B **80**, 100506 (2009).
- [50] T. Nomoto and H. Ikeda, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 023703 (2017).
- [51] T. Micklitz and M. R. Norman, Phys. Rev. B **95**, 024508 (2017).
- [52] T. Micklitz and M. R. Norman, arXiv:1611.07590.
- [53] T. Nomoto, K. Hattori, and H. Ikeda, Phys. Rev. B **94**, 174513 (2016).
- [54] S. S. Saxena, P. Agarwal, K. Ahilan, F. M. Grosche, R. K. W. Haselwimmer, M. J. Steiner, E. Pugh, I. R. Walker, S. R. Julian, P. Monthoux, G. G. Lonzarich, A. Huxley,

- I. Sheikin, D. Braithwaite, and J. Flouquet, *Nature* **406**, 587 (2000).
- [55] D. Aoki, A. Huxley, E. Ressouche, D. Braithwaite, J. Flouquet, J.-P. Brison, E. Lhotel, and C. Paulsen, *Nature* **413**, 613 (2001).
- [56] N. T. Huy, A. Gasparini, D. E. de Nijs, Y. Huang, J. C. P. Klaasse, T. Gortenmulder, A. de Visser, A. Hamann, T. Görlach, and H. v. Löhneysen, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 067006 (2007).
- [57] D. Aoki and J. Flouquet, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 011003 (2012).
- [58] D. D. Khalyavin, A. D. Hillier, D. T. Adroja, A. M. Strydom, P. Manuel, L. C. Chapon, P. Peratheepan, K. Knight, P. Deen, C. Ritter, Y. Muro, and T. Takabatake, *Phys. Rev. B* **82**, 100405 (2010).
- [59] H. Tanida, D. Tanaka, M. Sera, S. Tanimoto, T. Nishioka, M. Matsumura, M. Ogawa, C. Moriyoshi, Y. Kuroiwa, J. E. Kim, N. Tsuji, and M. Takata, *Phys. Rev. B* **84**, 115128 (2011).
- [60] Y. Muro, J. Kajino, T. Onimaru, and T. Takabatake, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, SA021 (2011).
- [61] H. Kato, R. Kobayashi, T. Takesaka, T. Nishioka, M. Matsumura, K. Kaneko, and N. Metoki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 073701 (2011).
- [62] N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [63] B. J. Kim, H. Jin, S. J. Moon, J.-Y. Kim, B.-G. Park, C. S. Leem, J. Yu, T. W. Noh, C. Kim, S.-J. Oh, J.-H. Park, V. Durairaj, G. Cao, and E. Rotenberg, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 076402 (2008).
- [64] Y. K. Kim, O. Krupin, J. D. Denlinger, A. Bostwick, E. Rotenberg, Q. Zhao, J. F. Mitchell, J. W. Allen, and B. J. Kim, *Science* **345**, 187 (2014).
- [65] Y. J. Yan, M. Q. Ren, H. C. Xu, B. P. Xie, R. Tao, H. Y. Choi, N. Lee, Y. J. Choi, T. Zhang, and D. L. Feng, *Phys. Rev. X* **5**, 041018 (2015).
- [66] I. Battisti, K. M. Bastiaans, V. Fedoseev, A. d. l. Torre, N. Iliopoulos, A. Tamai, E. C. Hunter, R. S. Perry, J. Zaanen, F. Baumberger, and M. P. Allan, *Nat. Phys.* **13**, 21 (2017).
- [67] Y. K. Kim, N. H. Sung, J. D. Denlinger, and B. J. Kim, *Nat. Phys.* **12**, 37 (2016).
- [68] B. J. Kim, H. Ohsumi, T. Komesu, S. Sakai, T. Morita, H. Takagi, and T. Arima, *Science* **323**, 1329 (2009).
- [69] S. Boseggia, H. C. Walker, J. Vale, R. Springell, Z. Feng, R. S. Perry, M. M. Sala, H. M. Rønnow, S. P. Collins, and D. F. McMorrow, *J. Phys. Condens. Matter* **25**, 422202 (2013).
- [70] J. P. Clancy, A. Lupascu, H. Gretarsson, Z. Islam, Y. F. Hu, D. Casa, C. S. Nelson, S. C. LaMarra, G. Cao, and Y.-J. Kim, *Phys. Rev. B* **89**, 054409 (2014).
- [71] C. Dhital, T. Hogan, Z. Yamani, C. de la Cruz, X. Chen, S. Khadka, Z. Ren, and S. D.

- Wilson, Phys. Rev. B **87**, 144405 (2013).
- [72] F. Ye, X. Wang, C. Hoffmann, J. Wang, S. Chi, M. Matsuda, B. C. Chakoumakos, J. A. Fernandez-Baca, and G. Cao, Phys. Rev. B **92**, 201112 (2015).
- [73] L. Zhao, D. H. Torchinsky, H. Chu, V. Ivanov, R. Lifshitz, R. Flint, T. Qi, G. Cao, and D. Hsieh, Nat. Phys. **12**, 32 (2016).
- [74] T. Yoshida, M. Sigrist, and Y. Yanase, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 013703 (2014).
- [75] Q.-F. Liang, J. Zhou, R. Yu, Z. Wang, and H. Weng, Phys. Rev. B **93**, 085427 (2016).
- [76] Y. Yanase, Phys. Rev. B **94**, 174502 (2016).
- [77] K. Shiozaki, M. Sato, and K. Gomi, Phys. Rev. B **93**, 195413 (2016).
- [78] T. Watanabe, T. Yoshida, and Y. Yanase, Phys. Rev. B **92**, 174502 (2015).
- [79] M. Sato and S. Fujimoto, Phys. Rev. B **79**, 094504 (2009).
- [80] M. Sato, Y. Tanaka, K. Yada, and T. Yokoyama, Phys. Rev. B **83**, 224511 (2011).
- [81] K. Yada, M. Sato, Y. Tanaka, and T. Yokoyama, Phys. Rev. B **83**, 064505 (2011).
- [82] A. P. Schnyder and S. Ryu, Phys. Rev. B **84**, 060504 (2011).
- [83] S. Tewari and J. D. Sau, Phys. Rev. Lett. **109**, 150408 (2012).
- [84] C. L. M. Wong and K. T. Law, Phys. Rev. B **86**, 184516 (2012).
- [85] X. Wen and A. Zee, Nucl. Phys. B **316**, 641 (1989).
- [86] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. B **78**, 195125 (2008).
- [87] A. Kitaev, AIP Conf. Proc. **1134**, 22 (2009).
- [88] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, New J. Phys. **12**, 065010 (2010).
- [89] X.-L. Qi, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
- [90] M. Sato, Phys. Rev. B **81**, 220504 (2010).
- [91] A. Y. Kitaev, Phys. Usp. **44**, 131 (2001).
- [92] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **105**, 077001 (2010).
- [93] H.-Y. Hui, P. M. R. Brydon, J. D. Sau, S. Tewari, and S. D. Sarma, Sci. Rep. **5**, 8880 (2015).
- [94] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, Science **336**, 1003 (2012).
- [95] L. P. Rokhinson, X. Liu, and J. K. Furdyna, Nat. Phys. **8**, 795 (2012).
- [96] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. H. MacDonald, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, Science **346**, 602 (2014).
- [97] A. Bianchi, R. Movshovich, C. Capan, P. G. Pagliuso, and J. L. Sarrao, Phys. Rev. Lett. **91**, 187004 (2003).
- [98] M. Kenzelmann, T. Strässle, C. Niedermayer, M. Sigrist, B. Padmanabhan, M. Zolliker, A. D. Bianchi, R. Movshovich, E. D. Bauer, J. L. Sarrao, and J. D. Thompson, Science

- 321**, 1652 (2008).
- [99] S. Uji, T. Terashima, M. Nishimura, Y. Takahide, T. Konoike, K. Enomoto, H. Cui, H. Kobayashi, A. Kobayashi, H. Tanaka, M. Tokumoto, E. S. Choi, T. Tokumoto, D. Graf, and J. S. Brooks, Phys. Rev. Lett. **97**, 157001 (2006).
- [100] M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria, J. C. Campuzano, T. Yokoya, T. Takeuchi, T. Takahashi, T. Mochiku, K. Kadowaki, P. Guptasarma, and D. G. Hinks, Nature **392**, 157 (1998).
- [101] M. R. Norman, M. Randeria, H. Ding, and J. C. Campuzano, Phys. Rev. B **57**, R11093–R11096 (1998).
- [102] W. S. Lee, I. M. Vishik, K. Tanaka, D. H. Lu, T. Sasagawa, N. Nagaosa, T. P. Devreux, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, Nature **450**, 81 (2007).
- [103] F. Wang and T. Senthil, Phys. Rev. Lett. **106**, 136402 (2011).
- [104] H. Watanabe, T. Shirakawa, and S. Yunoki, Phys. Rev. Lett. **110**, 027002 (2013).
- [105] Y. Yang, W.-S. Wang, J.-G. Liu, H. Chen, J.-H. Dai, and Q.-H. Wang, Phys. Rev. B **89**, 094518 (2014).
- [106] Z. Y. Meng, Y. B. Kim, and H.-Y. Kee, Phys. Rev. Lett. **113**, 177003 (2014).
- [107] Q. Huang, J. Soubeyroux, O. Chmaissem, I. N. Sora, A. Santoro, R. J. Cava, J. J. Krajewski, and W. F. Peck Jr., J. Solid State Chem. **112**, 355 (1994).
- [108] M. K. Crawford, M. A. Subramanian, R. L. Harlow, J. A. Fernandez-Baca, Z. R. Wang, and D. C. Johnston, Phys. Rev. B **49**, 9198 (1994).
- [109] F. Ye, S. Chi, B. C. Chakoumakos, J. A. Fernandez-Baca, T. Qi, and G. Cao, Phys. Rev. B **87**, 140406 (2013).
- [110] D. H. Torchinsky, H. Chu, L. Zhao, N. B. Perkins, Y. Sizuk, T. Qi, G. Cao, and D. Hsieh, Phys. Rev. Lett. **114**, 096404 (2015).
- [111] E. P. Wigner, *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra* (Academic Press, New York, 1959).
- [112] 犬井鉄郎, 田辺行人, 小野寺嘉孝, 応用群論－群表現と物理学－(増補第14版) (裳華房, 2003).
- [113] C. J. Bradley and A. P. Cracknell, *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids* (Oxford University Press, Oxford, 1972).
- [114] C. J. Bradley and B. L. Davies, J. Math. Phys. **11**, 1536 (1970).
- [115] G. W. Mackey, Am. J. Math. **75**, 387 (1953).
- [116] C. J. Bradley, J. Math. Phys. **7**, 1145 (1966).

参考

発表論文

1. 著者 : Shuntaro Sumita, Takuya Nomoto, and Youichi Yanase
題名 : Multipole superconductivity in Sr_2IrO_4
掲載誌 : *to be submitted*
2. 著者 : Shuntaro Sumita and Youichi Yanase
題名 : Superconductivity in magnetic multipole states
掲載誌 : Physical Review B **93**, 224507 (2016)

国際会議

1. ポスター発表
著者 : Shuntaro Sumita and Youichi Yanase
題名 : Superconductivity in magnetic multipole state
会議名 : International Conference on Strongly Correlated Electron Systems
2. ポスター発表
著者 : Shuntaro Sumita and Youichi Yanase
題名 : Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov State Induced by Magnetic Quadrupole Order in Zigzag Chains
会議名 : CEMS Topical Meeting on Emergent 2D Materials
3. ポスター発表
著者 : Shuntaro Sumita and Youichi Yanase
題名 : Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov State in Zigzag Chains
会議名 : International Symposium on Present and Future of Material Sciences

国内会議

1. ポスター発表
著者 : 角田 峻太郎, 野本 拓也, 柳瀬 陽一
題名 : Multipole superconductivity in Sr_2IrO_4 : Symmetry-protected nodal superconductivity and FFLO superconductivity
会議名 : 第 10 回 物性科学領域横断研究会

2. ポスター発表

著者 : 角田 峻太郎, 野本 拓也, 柳瀬 陽一

題名 : イリジウム酸化物における非共型対称性に守られたラインノードと FFLO 超伝導
会議名 : 京都大学基礎物理学研究所研究会「超伝導研究の最先端：多自由度, 非平衡, 電
子相関, トポロジー」

3. ポスター発表

著者 : 角田 峻太郎, 柳瀬 陽一

題名 : 非共型結晶に対する超伝導対称性の分類

会議名 : 日本物理学会 2016 年秋季大会

4. ポスター発表

著者 : 角田 峻太郎, 柳瀬 陽一

題名 : 磁気多極子秩序と共に存する超伝導状態

会議名 : 「J-Physics: 多極子伝導系の物理」平成 28 年度領域全体会議

5. 口頭発表

著者 : 角田 峻太郎, 柳瀬 陽一

題名 : 磁気多極子状態における超伝導

会議名 : 日本物理学会第 71 回年次大会