

# 論文の要旨

氏名 松崎智明

## 論文題目

Order Parameters and Phase Diagrams in Noncentrosymmetric Superconductors  
(空間反転対称性のない超伝導体における秩序変数と相図)

空間反転対称性のない超伝導体は、固体物理学において最も興味深い研究対象の一つであり、多くの理論的・実験的研究が行われている。その中でも秩序変数の構造は、対形成相互作用の微視的起源に深く関係し、また新奇現象の起源ともなり得るため、とくに重要な研究対象と考えられている。

この問題に対する実験的研究は、次のように総括される。まず、空間反転対称性のない超伝導体の最初の例であるCePt<sub>3</sub>Siにおいては、磁場侵入長や熱伝導度の実験結果より、ラインノードの存在が示唆されている。Li<sub>2</sub>Pd<sub>3</sub>BとLi<sub>2</sub>Pt<sub>3</sub>Bについては、結晶構造などが非常に類似した物質であるにもかかわらず、全く異なる構造、すなわち、フルギャップ構造とラインノード構造が示唆されている。一方、Mo<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>Cにおいては、比熱と磁場侵入長の実験結果が、それぞれフルギャップ構造とラインノード構造を示唆しており、一致していない。多くの物質では、フルギャップ構造もしくはラインノード構造が示唆されているが、LaNiC<sub>2</sub>やBiPdにおいては、それぞれポイントノード構造、異方的フルギャップ構造が示唆されている。以上のように、これらの物質群における秩序変数の構造は多様であり、未だ統一的には理解されていない。

一方、理論的な研究からは、次のことが知られている。空間反転対称性のない系では、電子のスピン軌道相互作用を起源として、反対称スピン軌道相互作用と呼ばれる項が1体のハミルトニアンに生じるため、電子のスピンを対角化する量子化軸の方向は運動量に依存し、電子のバンドは二つに分裂する。超伝導状態では、この項のため、スピン1重項と3重項による分類ができず、一般には秩序変数は混成する。これを反対称スピン軌道相互作用によるスピン空間での混成と呼ぶことにしよう。反対称スピン軌道相互作用が強いとき、二つのバンドのフェルミ面の分裂は大きくなり、クーパ対は同一のバンドのフェルミ面上でしか形成されなくなる。このようなクーパ対の波動関数はフェルミ統計により奇関数でなければならないが、上記のスピン量子化軸の回転の結果生じる奇関数の位相因子を取り除けば、残りの部分の運動量依存性は偶関数となる。従って、この関数では、s波及びd波的成分が主要となり、p波的成分はスピン3重項成分においても全く生じない。このように、反対称スピン軌道相互作用は、秩序変数の運動量及びスピン依存性に対して著しい影響を与えることが知られている。

以上の問題に対し、我々の研究の目的は、先行研究よりも基本的な模型に基づいて、秩序変数のふるまいを調べ、超伝導状態の相図を構築することである。超伝導の対形成相互作用としては、電荷的及び磁氣的な起源の相互作用の両方を調べ、その違いを議論した。とくに、超伝導転移点以下では、ギャップ方程式の非線形性に起因する秩序変数の混成（運動量空間

における混成と呼ぶ)が考えられることを理論的に指摘し、具体的な計算により新しい秩序変数の構造を予言した。このような混成効果は、(空間反転対称性をもつ)従来型の超伝導体において調べられた例はあるが、空間反転対称性のない超伝導体において調べられた例はない。上記のように、空間反転対称性のない超伝導体では、これまでの理論でも新奇な秩序変数の構造が予測されているが、その中で運動量空間における混成効果がどのような結果をもたらすか、非常に興味深いと考えられる。また、この混成効果は、従来から考えられてきたスピン空間における混成効果とは、全く異なる機構によるものであり、これら二つの混成効果の関係も非常に興味深い問題である。

以下に本論文の構成を述べる。第1章では、本研究の背景ならびに動機、目的を説明し、これに続く第2章では、本研究の基礎となる、空間反転対称性のない超伝導体の一般論を解説した。これらの章は、過去の研究の詳細な解説を含んでいる。第2章では、クーパー対の波動関数の構造の一般式、ギャップ方程式、転移温度、自由エネルギー、比熱の表式も提示した。

第3章では、第2章の基礎理論をラシュバ型の反対称スピン軌道相互作用(ラシュバ相互作用)のある系に適用した。結合定数空間の相図を構築し、転移温度における秩序変数の構造を調べた。p波の相互作用は、反対称スピン軌道相互作用を通して、スピン3重項s波対とスピン3重項d波対の両方に寄与するが、前者の状態への転移温度が、後者の状態への転移温度に比べて常に高いため、スピン3重項状態の範囲ではラインノード構造を生じることができない。従って、s波、p波、d波の対形成相互作用とラシュバ相互作用が存在する系では、実験的に観測されているようなラインノード構造が生じるとき、超伝導状態はスピン1重項d波であることが明らかになった。

これに加えて、ラシュバ相互作用をもつ超伝導体では、スピン3重項の超伝導状態では反平行なスピンをもつ電子の対は生じないことも、理論的に明らかにした。従って、磁氣的起源の相互作用では、プラナー型の対形成相互作用がスピン3重項の超伝導に寄与しないことがわかった。プラナー型の相互作用は、ラシュバ型の相互作用の対称軸に対して垂直な横方向の磁氣的な揺らぎに媒介されて生じるから、磁気揺らぎを媒介とした対形成相互作用の機構では、対称軸に平行な揺らぎのみが超伝導に寄与することがわかる。また、プラナー型の相互作用が超伝導に寄与しないことから、ラシュバ相互作用の場合には、磁氣的相互作用と電氣的相互作用は、定性的に似た結果を与えることになる。

第4章では、上述した運動量空間における混成効果を調べた。第3章で見たように、空間反転対称性のない超伝導体では、p波の相互作用はs波とd波のスピン3重項対に同時に寄与することができる。このことから、このような超伝導体では、s波とd波の対形成相互作用が同じオーダーで共存する状況が生じることが容易に考えられ、ギャップ方程式の非線形性に起因するこれらの対の混成を考慮する必要が生じる。我々は、この混成を考慮したギャップ方程式を導き、数値計算によってこれを解いた。一般には複数の解が存在するが、その解の自由エネルギーを比較することにより、各有限温度ならびに基底状態において、最終的に安定に存在する超伝導秩序変数を求めた。これにより、転移温度以下での二段転移の可能性を示し、これを示す物理量の候補として、比熱の温度依存性を示した。

とくに重要な結果は、スピン1重項のd + i s波と呼ばれる混成状態に加えて、スピン1重項d波対とスピン3重項s波対が、位相差 $\pi/2$ を伴って混成した状態を発見したことである。前者の状態は、従来型の(空間反転対称性のある)超伝導体で指摘されてきたものと類似であるが、空間反転対称性のない超伝導体においても同様の混成状態が安定であることは

自明ではなく、本研究によって初めて明らかにされたものである。また、後者の状態は、過去の研究では全く考えられたことのない新奇な混成状態であり、安定な状態として存在し得ることは、本研究によって初めて明らかになったことである。なお、この状態は、スピン1重項と3重項の混成という側面においては以前より指摘されてきたスピン空間における混成効果によって生じるものと似ているが、その安定化機構は全く異なる。我々はこれらの混成状態を考慮した相図を構築し、安定化されるパラメーター領域を明らかにした。

第5章では、バンド内相互作用とバンド間相互作用の差によるパリティの反転効果について調べた。ここで、バンド内相互作用及びバンド間相互作用は、それぞれ同一及び異なるバンドへのクーパー対のホッピングエネルギーのことである。反対称スピン軌道相互作用が強いとき、クーパー対は同一バンドのフェルミ面上でのみ形成され得るが、そのクーパー対は、同じバンドのフェルミ面もしくは異なるバンドのフェルミ面に飛び移ることができる。対形成相互作用の運動量依存性が弱いときには、その差は無視できるが、一般には有限に存在する。この項のもたらす顕著な効果は、相互作用の1重項ならびに3重項成分が、逆のスピン対称性のクーパー対に寄与することである。すなわち、スピン1重項相互作用が3重項対に、スピン3重項相互作用が1重項対に、対形成相互作用として寄与する。また、さらに興味深いことに、斥力相互作用であっても、引力相互作用としてはたらくこともある。この効果は、強い反対称スピン軌道相互作用によって分裂した二つのフェルミ面上の秩序変数の位相差によるものであるが、単純な説明が困難な、非自明な効果である。この章の研究では、このことを微視的な計算により明らかにした。また、より微視的な、電子格子系のモデルに基づいた計算による検証も行い、上記の新奇機構が起きる電子格子相互作用のパラメーター領域が存在することも示した。

第6章では以上の理論を総括した。

以上により、本研究は空間反転対称性のない超伝導体における超伝導秩序変数の理論を発展させた。その中でも、新しい構造の混成状態の秩序変数と、対形成相互作用が本来と逆のスピン対称性をもつ対形成に寄与する機構は、従来の理論では全く指摘されていない、定性的に新しい理論的発見と考えられる。