アンダーソン擬スピンに対する非磁性不純物散乱の効果

室谷悠太

2020 年 2 月 22 日

1　密度行列から擬スピンへ

以前の論文 [1] で非磁性不純物がある場合のヒッグスモードの光応答を考察したが、ここではその結果をアンダーソン擬スピンの運動に翻訳してみる。解説記事 [2] で軽く触れた描像である。

以下に出てくる記号は文献 [1]（MS と略す）の定義に準拠する。まず、MS(7) 式を

$$\langle|\mathbf{e}\cdot\mathbf{J}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2\rangle_{\mathrm{Av}} \equiv |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 = \frac{(ev_{\mathrm{F}})^2}{3\pi N(0)}\frac{\gamma}{(\epsilon_{\mathbf{k}}-\epsilon_{\mathbf{k}'})^2+\gamma^2} \tag{1}$$

と書いておく（バンド指数 i は無視する）。ヒッグスモードに関わる二次の応答は、MS(28)-(30)、(32)、(35)、(36)、(39) 式より

$$i\frac{\partial}{\partial t}r^{11}_{\mathbf{k}} = S^{11}_{\mathbf{k}}, \tag{2}$$

$$r^{22}_{\mathbf{k}} = -r^{11}_{\mathbf{k}}, \tag{3}$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}r^{21}_{\mathbf{k}} = 2E_{\mathbf{k}}r^{21}_{\mathbf{k}} - (1-2f_{\mathbf{k}})\left[(u^2_{\mathbf{k}}-v^2_{\mathbf{k}})\Delta'\big|_2 + i\Delta''\big|_2 - 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\frac{e^2A^2}{2m}\right] + S^{21}_{\mathbf{k}}, \tag{4}$$

$$r^{12}_{\mathbf{k}} = r^{21*}_{\mathbf{k}} \tag{5}$$

に従う。ただし、

$$S^{11}_{\mathbf{k}} = -2iA\,\mathrm{Im}\sum_{\mathbf{k}'}|M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2\left(l^2_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}F^{11}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - p^2_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}F^{21}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\right), \tag{6}$$

$$S^{21}_{\mathbf{k}} = -2A\sum_{\mathbf{k}'}|M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 l_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}p_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\left(F^{21}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - F^{22}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\right), \tag{7}$$

$$F^{11}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = F^{22*}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = i(f_{\mathbf{k}}-f_{\mathbf{k}'})\int_{-\infty}^{t}dt'\ A(t')\exp\left[-i(E_{\mathbf{k}'}-E_{\mathbf{k}})(t-t')\right], \tag{8}$$

$$F^{21}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = F^{12*}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = i(1-f_{\mathbf{k}}-f_{\mathbf{k}'})\int_{-\infty}^{t}dt'\ A(t')\exp\left[-i(E_{\mathbf{k}'}+E_{\mathbf{k}})(t-t')\right] \tag{9}$$

である。さて、ボゴリューボフ準粒子を基底として書かれた密度行列 $\rho^{ab}_{\mathbf{k}}$（MS の $\rho^{ab}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ で $\mathbf{k}=\mathbf{k}'$ としたもの）及び電子を基底として書かれた擬スピン $\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}}$ は

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(\rho^{11}_{\mathbf{k}}-\rho^{22}_{\mathbf{k}}) + (u^2_{\mathbf{k}}-v^2_{\mathbf{k}})(\rho^{21}_{\mathbf{k}}+\rho^{12}_{\mathbf{k}}) \\ i(\rho^{21}_{\mathbf{k}}-\rho^{12}_{\mathbf{k}}) \\ (u^2_{\mathbf{k}}-v^2_{\mathbf{k}})(\rho^{11}_{\mathbf{k}}-\rho^{22}_{\mathbf{k}}) + 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(\rho^{21}_{\mathbf{k}}+\rho^{12}_{\mathbf{k}}) \end{pmatrix} \tag{10}$$

という関係式によって結ばれている。外場について二次まででは

$$\rho^{ab}_{\mathbf{k}} = \rho^{ab}_{\mathbf{k}}\Big|_0 + r^{ab}_{\mathbf{k}} \tag{11}$$

が成り立つから、(2)-(5) 式は擬スピンの運動方程式に焼き直すことができる。実際に書き下せば、

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & -2\epsilon_{\mathbf{k}} & 0 \\ 2\epsilon_{\mathbf{k}} & 0 & 2\Delta'|_0 \\ 0 & -2\Delta'|_0 & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}}\big|_2 + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2\Delta''|_2 \\ e^2A^2/m & 0 & 2\Delta'|_2 \\ -2\Delta''|_2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}}\big|_0 + \begin{pmatrix} -2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \operatorname{Im} S^{11}_{\mathbf{k}} + (u^2_{\mathbf{k}} - v^2_{\mathbf{k}}) \operatorname{Im} S^{21}_{\mathbf{k}} \\ \operatorname{Re} S^{21}_{\mathbf{k}} \\ (u^2_{\mathbf{k}} - v^2_{\mathbf{k}}) \operatorname{Im} S^{11}_{\mathbf{k}} + 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \operatorname{Im} S^{21}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \tag{12}$$

となる。ここで、

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}}\big|_0 = \frac{1-2f_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} \Delta|_0 \\ 0 \\ -\epsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \tag{13}$$

を使った。$\Delta''|_0 = \sigma^y_{\mathbf{k}}|_0 = 0$ だから、

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & -2\epsilon_{\mathbf{k}} & 2\Delta''|_0 \\ 2\epsilon_{\mathbf{k}} & 0 & 2\Delta'|_0 \\ -2\Delta''|_0 & -2\Delta'|_0 & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}}\big|_2 + \begin{pmatrix} 0 & -e^2A^2/m & 2\Delta''|_2 \\ e^2A^2/m & 0 & 2\Delta'|_2 \\ -2\Delta''|_2 & -2\Delta'|_2 & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}}\big|_0 + \mathbf{s}_{\mathbf{k}} \tag{14}$$

と書いてもよい。ここで源

$$\mathbf{s}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} -2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \operatorname{Im} S^{11}_{\mathbf{k}} + (u^2_{\mathbf{k}} - v^2_{\mathbf{k}}) \operatorname{Im} S^{21}_{\mathbf{k}} \\ \operatorname{Re} S^{21}_{\mathbf{k}} \\ (u^2_{\mathbf{k}} - v^2_{\mathbf{k}}) \operatorname{Im} S^{11}_{\mathbf{k}} + 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \operatorname{Im} S^{21}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \tag{15}$$

を導入した。四次以上の項を無視すれば、(14) 式はさらに

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}} &= \begin{pmatrix} 0 & -2\epsilon_{\mathbf{k}} - e^2A^2/m & 2\Delta'' \\ 2\epsilon_{\mathbf{k}} + e^2A^2/m & 0 & 2\Delta' \\ -2\Delta'' & -2\Delta' & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}} + \mathbf{s}_{\mathbf{k}} \\ &= 2\mathbf{b}_{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}} + \mathbf{s}_{\mathbf{k}} \end{aligned} \tag{16}$$

と等価である。ここで、

$$\mathbf{b}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} -\Delta' \\ \Delta'' \\ \epsilon_{\mathbf{k}} + e^2A^2/2m \end{pmatrix}, \tag{17}$$

とおいた[*1]。具体的に $\mathbf{s}_{\mathbf{k}}$ を書き下すと

$$s^x_{\mathbf{k}} = A \operatorname{Im} \sum_{\mathbf{k}'} |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 \left[\frac{\Delta(E_{\mathbf{k}'} + E_{\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'}} F^{11}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - \frac{\Delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'}} F^{21}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right], \tag{18}$$

$$s^y_{\mathbf{k}} = A \operatorname{Re} \sum_{\mathbf{k}'} |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 \frac{\Delta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'}} \left(F^{11}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - F^{21}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right), \tag{19}$$

$$s^z_{\mathbf{k}} = A \operatorname{Im} \sum_{\mathbf{k}'} |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 \left(-\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'} + E_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'}} F^{11}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'}} F^{21}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right) \tag{20}$$

となる。$\epsilon_{\mathbf{k}} \to -\epsilon_{\mathbf{k}}$ と置き換えると、$s^x_{\mathbf{k}} \to s^x_{\mathbf{k}}$、$s^y_{\mathbf{k}} \to -s^y_{\mathbf{k}}$、$s^z_{\mathbf{k}} \to -s^z_{\mathbf{k}}$ と変換する。この変換性が $\mathbf{k}$ について和を取るときには重要である。

[*1] 文献によっては $b^y_{\mathbf{k}}$ に負号がつくが、これは Δ の定義によるもので、$\Delta \to \Delta^*$ と置き換えた場合に相当する。

フーリエ変換によって (16) 式を解くと、$\partial/\partial t \to -i\omega$ と置き換えて

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{k}}(\omega)\big|_2 = \frac{1}{i\omega(\omega^2-4E_{\mathbf{k}}^2)}\begin{pmatrix} -\omega^2+4\Delta^2 & 2i\omega\epsilon_{\mathbf{k}} & -4\epsilon_{\mathbf{k}}\Delta \\ -2i\omega\epsilon_{\mathbf{k}} & -\omega^2 & -2i\omega\Delta \\ -4\epsilon_{\mathbf{k}}\Delta & 2i\omega\Delta & -\omega^2+4\epsilon_{\mathbf{k}}^2 \end{pmatrix} \times \left[\begin{pmatrix} 2\sigma_{\mathbf{k}}^z\Delta''(\omega)|_2 \\ \sigma_{\mathbf{k}}^x e^2A^2(\omega)/m + 2\sigma_{\mathbf{k}}^z\Delta'(\omega)|_2 \\ -2\sigma_{\mathbf{k}}^x\Delta''(\omega)|_2 \end{pmatrix} + \mathbf{s}_{\mathbf{k}}(\omega)\right] \tag{21}$$

が得られる。ただし $A^2(\omega)$ は $A(t)^2$ のフーリエ変換を意味し、$A(t)$ のフーリエ変換の二乗ではない。(21) 式より、ギャップの実部に関しては

$$\begin{aligned}\Delta'(\omega)\big|_2 &= U\sum_{\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}^x(\omega)\big|_2 \\ &= U\sum_{\mathbf{k}}\frac{(-\omega^2+4\Delta^2)s_{\mathbf{k}}^x(\omega)+2i\omega\epsilon_{\mathbf{k}}[2\sigma_{\mathbf{k}}^z\Delta'(\omega)|_2+s_{\mathbf{k}}^y(\omega)]-4\epsilon_{\mathbf{k}}\Delta s_{\mathbf{k}}^z(\omega)}{i\omega(\omega^2-4E_{\mathbf{k}}^2)}\end{aligned} \tag{22}$$

が成り立つ。ギャップ方程式

$$\Delta = U\sum_{\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}^x \tag{23}$$

を使うことで、

$$\Delta'(\omega)\big|_2 = \frac{\displaystyle\sum_{\mathbf{k}}\frac{(-\omega^2+4\Delta^2)s_{\mathbf{k}}^x(\omega)+2i\omega\epsilon_{\mathbf{k}}s_{\mathbf{k}}^y(\omega)-4\epsilon_{\mathbf{k}}\Delta s_{\mathbf{k}}^z(\omega)}{i\omega(\omega^2-4E_{\mathbf{k}}^2)}}{\displaystyle\sum_{\mathbf{k}}\frac{\omega^2-4\Delta^2}{\omega^2-4E_{\mathbf{k}}^2}\frac{1-2f_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} \tag{24}$$

が導かれる。分母がヒッグスモードの共鳴因子を表しており、共鳴付近で $\sim\sqrt{\omega-2\Delta}$ という発散を示す。

ギャップの虚部については

$$\begin{aligned}\Delta''(\omega)\big|_2 &= -U\sum_{\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}^y(\omega)\big|_2 \\ &= -U\sum_{\mathbf{k}}\frac{(-4\epsilon_{\mathbf{k}}\sigma_{\mathbf{k}}^z+4\Delta\sigma_{\mathbf{k}}^x)\Delta''(\omega)|_2+i\omega\sigma_{\mathbf{k}}^x e^2A^2(\omega)/m}{\omega^2-4E_{\mathbf{k}}^2}\end{aligned} \tag{25}$$

より、

$$\Delta''(\omega)\big|_2 = \frac{\Delta}{i\omega}\frac{e^2A^2(\omega)}{m} \tag{26}$$

が得られる。これは、位相 $\phi = \Delta''|_2/\Delta$ を定義すれば

$$\begin{aligned}&\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\frac{e^2A^2}{m} \\ &\Rightarrow \quad \phi(t) = -\int_{-\infty}^{t}dt'\,\frac{e^2A(t')^2}{m}\end{aligned} \tag{27}$$

と解くことができる。量子力学において位相の時間微分が周波数またはエネルギーに対応することを思い出せば、これはクーパー対のポンデロモーティブエネルギー $e^2A^2/2m\times 2$ による位相シフトに他ならないことがわかる。

最後に、電荷密度に関しては

$$\sum_{\mathbf{k}} \sigma^z_{\mathbf{k}}\big|_2 = 0 \tag{28}$$

が得られ、電荷の保存が成り立っていることが確かめられる。実は $\Delta''|_2$ または位相 ϕ の運動を無視するとこれが満たされない。このことは南部・ゴールドストーンモードの存在が BCS 理論のゲージ不変性を担保していることと関係すると思われる。

2 モデルの限界

文献 [3] が指摘するように、(24) 式は $\omega \to 0$ の極限で誤った結果を与えるようだ。$\omega \to 0$ の極限、すなわち定ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0$ は定常的な超伝導電流が流れている状況を指す[*2]。これに対する応答を計算すると、絶対零度かつ dirty limit において、(24) 式は

$$\Delta'(t)\big|_2 = -De^2 A_0^2 \tag{29}$$

を与えるのに対して、グリーン関数を用いた方法は

$$\Delta'(t)\big|_2 = -\frac{\pi}{2} De^2 A_0^2 \tag{30}$$

を与える [4]。ただし $D = v_{\mathrm{F}}^2/3\gamma$ は拡散係数である。グリーン関数の方が正確と考えられるから、低周波では時間に依存した摂動論が破綻するのかもしれない[*3]。しかしオーダーは合っているため、大まかな振る舞いを考察する上では問題ないと思われる。

参考文献

[1] Y. Murotani and R. Shimano, "Nonlinear optical response of collective modes in multiband superconductors assisted by nonmagnetic impurities," Phys. Rev. B **99**, 224510 (2019).

[2] 島野亮、室谷悠太、勝見恒太、「超伝導のヒッグスモード—最近の研究から—」、固体物理＜高強度テラヘルツ・赤外パルスが拓く非平衡物性＞特集号、54 巻 623 頁（2019）。

[3] M. Silaev, "Nonlinear electromagnetic response and Higgs-mode excitation in BCS superconductors with impurities," Phys. Rev. B **99**, 224511 (2019).

[4] K. Maki, in *Superconductivity*, edited by R. D. Parks (Marcel Dekker, New York, 1969), p. 1035.

[*2] より正確に言うと、定電流を表現するために $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0$ となるゲージを選ぶことができる。

[*3] 時間に依存しない摂動論と時間に依存する摂動論が等価でないことはよく知られている。例えば後者はシュタルク効果の記述に向かない。