不純物が存在するときのEilenberger方程式

永井佑紀

平成17年10月20日

以前までのノートでは、準古典Green関数が従う方程式（Eilenberger方程式)を導いた。導出したEilenberger方程式は、不純物がないCleanな系を考えていた。このノートでは、cleanな系に一つの不純物が存在するときの方程式を導く。また、その方程式を用いて、空間的に一様なs波の超伝導体においては不純物があろうとなかろうと同じGreen関数が得られるということを示す。

1 Born級数とGreen関数

不純物が作るポテンシャルは局所的（$V(\boldsymbol{r}) = V_0\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$）であり、十分に小さいとする。そのとき、摂動後のGreen関数がどのように無摂動Green関数で表されるかを考える。

1.1 Green関数に対する摂動

ポテンシャルVが小さければ摂動として扱うことができ、このとき摂動Green関数Gは

$$G = G_0 + G_0VG \tag{1}$$

と書ける。ここで、G_0は無摂動Green関数である。左辺に右辺を代入していくと級数が現れ

$$G = G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + \cdots \tag{2}$$

のように書くことができる。これはBorn級数と呼ばれる。Vに関するn次の項は、散乱中心による仮想的なn回の散乱過程に相当している[1]。

1.2 T行列

T行列というものを導入する。T行列は、状態$|\Phi_{\boldsymbol{k}}\rangle$から$|\Phi_{\boldsymbol{k}'}\rangle$への散乱振幅として

$$\langle\Phi_{\boldsymbol{k}'}|T|\Phi_{\boldsymbol{k}}\rangle \tag{3}$$

として定義されているものである。T行列も、Born級数のような演算子の方程式を書くことができる。

$$\begin{aligned} T &= V + VG_0T \qquad (4)\\ &= V + VG_0V + VG_0VG_0V + \cdots \qquad (5)\end{aligned}$$

この方程式に両側からG_0を作用させると、

$$\begin{aligned} G_0TG_0 &= G_0VG_0 + G_0VG_0TG_0 \qquad (6)\\ &= G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + G_0VG_0VG_0VG_0 + \cdots \qquad (7)\end{aligned}$$

[1]詳しくはJ. M. ザイマン、”現代量子論の基礎”等を参照。

となり、式 (2) の第二項以降と全く同じ形式をしていることがわかる。したがって、摂動後の Green 関数は

$$G = G_0 + G_0 T G_0 \tag{8}$$

と書くことができる。

1.3 実空間表示

実空間表示の摂動系の Green 関数は

$$G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) + \int G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}') V(\boldsymbol{r}') G(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}_2) d^3\boldsymbol{r}' \tag{9}$$

である。これにデルタ関数ポテンシャル

$$V(\boldsymbol{r}) = V_0 \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \tag{10}$$

を代入すれば、

$$G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) + G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0) V_0 G(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_2) \tag{11}$$

となる。さらに Born 級数のように表記すれば、

$$\begin{aligned} G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) &= G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) + G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0) V_0 G_0(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_2) + G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0) V_0 G_0(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0) V_0 G_0(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_2) + \cdots && (12) \\ &= G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) + G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0) \left[V_0 + V_0 G_0(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0) V_0 + \cdots \right] G_0(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_2) && (13) \end{aligned}$$

となり、右辺第二項の括弧内は等比級数になっているのでさらに変形ができ、

$$G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) + G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0) V_0 \left[1 - G_0(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0) V_0 \right]^{-1} G_0(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_2) \tag{14}$$

となる。ここで、$\bar{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ に関する Fourier 変換：

$$G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \int \frac{d\boldsymbol{p}^3}{(2\pi)^3} G(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) e^{i\boldsymbol{k}\cdot\bar{\boldsymbol{r}}} \tag{15}$$

を用いると、

$$\begin{aligned} G_0(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0) &= \lim_{\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2 \to \boldsymbol{r}_0} G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) && (16) \\ &= \lim_{\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2 \to \boldsymbol{r}_0} \int \frac{d\boldsymbol{p}^3}{(2\pi)^3} G(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) e^{i\boldsymbol{k}\cdot\bar{\boldsymbol{r}}} && (17) \\ &= \int \frac{d\boldsymbol{p}^3}{(2\pi)^3} G(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0) && (18) \\ &= \int \frac{p_F^2}{(2\pi)^3 v_F} d\Omega_{\boldsymbol{p}} d\xi_{\boldsymbol{p}} G(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0) && (19) \\ &= \int \frac{p_F^2}{(2\pi)^3 v_F} d\Omega_{\boldsymbol{p}} g(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0) && (20) \end{aligned}$$

となるので、式 (14) は

$$\begin{aligned} G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; i\omega_n) &= G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; i\omega_n) + G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0; i\omega_n) T G_0(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_2; i\omega_n) && (21) \\ T(\boldsymbol{r}_0; i\omega_n) &= V_0 \left[1 - V_0 \int \frac{p_F^2}{(2\pi)^3 v_F} d\Omega_{\boldsymbol{p}} g(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0; i\omega_n) \right]^{-1} && (22) \end{aligned}$$

と書くことができる。また、これは行列表示の Green 関数：

$$\check{G}(x, x') \equiv \begin{pmatrix} G(x, x') & F(x, x') \\ -F^\dagger(x, x') & \hat{G}(x, x') \end{pmatrix} \tag{23}$$

にも同様に適用することができ、そのときは

$$\check{G}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n) = \check{G}_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)+\check{G}_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)\check{t}\check{G}_0(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n) \tag{24}$$

$$\check{t}(\boldsymbol{r}_0;i\omega_n) = V_0\left[\check{1}-V_0\int\frac{p_F^2}{(2\pi)^3v_F}d\Omega\boldsymbol{p}\check{g}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)\right]^{-1} \tag{25}$$

と書くことができる。

この結果を用いて、以下の節で準古典 Green 関数が従う方程式を導く。また、ここでのポテンシャルの散乱は s 波散乱であるとした。

2 Eilenberger 方程式の拡張

2.1 不純物のない場合

前節の表式を用いて、Eilenberger 方程式の拡張を試みる。まず、不純物のない場合の Eilenberger 方程式は

$$-i\boldsymbol{v}_F\cdot\nabla\check{g}_{\rm imt}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r};i\omega_n) = \left[i\omega_n\sigma^z-\check{\Delta}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r})+\frac{e}{c}\boldsymbol{v}_F\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\sigma^z,\check{g}_{\rm imt}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p};i\omega_n)\right] \tag{26}$$

$$= \left[\begin{pmatrix} i\omega_n+\frac{e}{c}\boldsymbol{v}_F\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) & -\Delta(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r}) \\ \Delta^*(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r}) & -i\omega_n-\frac{e}{c}\boldsymbol{v}_F\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\end{pmatrix},\check{g}_{\rm imt}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p};i\omega_n)\right] \tag{27}$$

と書くことができる。Green 関数は式 (24) より

$$\check{G}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)=\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)+\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)\check{t}\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n) \tag{28}$$

と書けるとする。また、不純物がない場合の Gor'kov 方程式は

$$\check{G}^{-1}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,i\omega_n)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)=\check{1}\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) \tag{29}$$

が $\boldsymbol{r}_1$ に関する方程式であり、

$$\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)\check{G}^{-1}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_2,i\omega_n)=\check{1}\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) \tag{30}$$

が $\boldsymbol{r}_2$ に関する方程式である。

2.2 Left-Right Trick

いままでのノートで導出してきた Eilenberger 方程式は、Left-Right Trick というものを用いている。詳細は以前の導出に述べてある。この方法の特徴的なところは、ある方程式に演算子行列を左から掛けたものと、右から掛けたものを引いて方程式を構成するというところにある。デルタ関数的不純物ポテンシャルがある場合の Eilenberger 方程式も、同様に Left-Right Trick を用いて導出することにする。

基本となる方程式は式 (28) である。この方程式に左から $\check{G}^{-1}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1)$ を掛け、式 (29) を用いると

$$\check{G}^{-1}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1)G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)=\check{1}\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)+\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_0)\check{t}\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n) \tag{31}$$

右から $\check{G}^{-1}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_2)$ を掛け式 (30) を用いると

$$G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)\check{G}^{-1}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_2)=\check{1}\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)+\delta(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)\check{t} \tag{32}$$

となる。２式の差をとると、

$$\check{G}^{-1}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1)G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)-G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)\check{G}^{-1}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_2)=\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_0)\check{t}\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)-\delta(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)\check{t} \tag{33}$$

となる。左辺は形式的には Eilenberger 方程式を導出したときと全く同じであるから、今は右辺のみを考える。右辺は

$$\left[\check{t}, \frac{\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)+\delta(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)}{2}\right] \tag{34}$$

$$+\left[\check{t}, \frac{\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)-\delta(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)}{2}\right]_+ \tag{35}$$

となる。相対座標 $\bar{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ に関する振動の特徴的な長さスケールが他の変動スケールより小さいとして、重心座標での値に置き換えると、

$$\left[\check{t}, \frac{\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)+\delta(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)}{2}\right] \sim \left[\check{t},\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)\right] \tag{36}$$

$$\left[\check{t}, \frac{\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)+\delta(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_0)\check{G}_{\rm imt}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)}{2}\right]_+ \sim 0 \tag{37}$$

となる。したがって、相対座標に関する Fourier 変換：

$$\check{G}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n)=\int\frac{d\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\check{G}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r};i\omega_n)e^{i\boldsymbol{p}\cdot\bar{\boldsymbol{r}}} \tag{38}$$

を行い、$\xi_{\boldsymbol{p}}$ で周回積分することで、

$$\begin{aligned} i\boldsymbol{v}_F\cdot\nabla\check{g}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n) &+ \left[i\omega_n\sigma^z-\check{\Delta}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r})+\frac{e}{c}\boldsymbol{v}_F\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\sigma^z,\check{g}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n)\right] && (39)\\ &= \left[\check{t},\check{g}_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)\right]\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0) && (40)\end{aligned}$$

を得る。これが、不純物が存在する場合の Eilenberger 方程式である。不純物のない Eilenberger 方程式の右辺に source term がついている形をしていることがわかる。

2.3 t 行列

t 行列 (25) をもう少し使いやすいように書き直すことを考える。$\check{g}_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n)$ の定義は

$$\check{g}_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n) = \begin{pmatrix} g_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n) & f_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n) \\ -f^\dagger_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n) & -g_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n)\end{pmatrix} \tag{41}$$

であるから、式 (25) は

$$\check{t}(\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)=\frac{V_0}{D}\left[\check{1}+V_0\langle\check{g}_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r}_0;i\omega_n)\rangle_\Omega\right] \tag{42}$$

と書くことができる。ここで、$D=1-V_0^2\{\langle g\rangle_\Omega^2-\langle f\rangle_\Omega\langle f^\dagger\rangle_\Omega\}$ であり、$\langle\cdots\rangle_\Omega=\int\frac{p_F^2}{(2\pi)^3v_F}\cdots d\Omega_{\boldsymbol{p}}$ とした。

3 s 波の超伝導体の場合

不純物ポテンシャルがデルタ関数的に存在し、空間的に一様な s 波の超伝導体を考える。不純物のないときの準古典 Green 関数はすでに求めていて、

$$\begin{aligned} g_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n) &= -\frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2+|\Delta|^2}} && (43)\\ \bar{g}_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n) &= \frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2+|\Delta|^2}} && (44)\\ f_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n) &= \frac{\Delta}{i\sqrt{\omega_n^2+|\Delta|^2}} && (45)\\ f^\dagger_{\rm imt}(\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{r};i\omega_n) &= \frac{\Delta^*}{i\sqrt{\omega_n^2+|\Delta|^2}} && (46)\end{aligned}$$

である。これらを用いて t 行列を計算する。まず、$\check{g}_{\rm imt}$ は $\Omega_{\boldsymbol{p}}$ に依存していないので D は

$$D = 1 - V_0^2 \left\{ c^2 \left(\frac{\omega_n^2}{\omega_n^2 + |\Delta|^2} + \frac{|\Delta|^2}{\omega_n^2 + |\Delta|^2} \right) \right\} = 1 - c^2 V_0^2 \tag{47}$$

と書ける。ここで、$\int \frac{p_F^2}{(2\pi)^3 v_F} d\Omega_{\boldsymbol{p}} = c$ とおいた。よって、t 行列は

$$\check{t}(\boldsymbol{r}_0; i\omega_n) = \frac{V_0}{1 - c^2 V_0^2} \left[\check{1} + cV_0 \check{g}(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{r}_0; i\omega_n) \right] \tag{48}$$

となる。

$\check{t}$ には $\check{g}_{\rm imt}$ がそのままの形で含まれており、$\check{t}$ と $\check{g}_{\rm imt}$ は交換する。したがって、$[\check{t}, \check{g}_{\rm imt}] = 0$ である。以上より方程式は

$$i\boldsymbol{v}_F \cdot \nabla \check{g}(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{r}; i\omega_n) \quad + \quad \left[i\omega_n \sigma^z - \check{\Delta}(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{r}) + \frac{e}{c} \boldsymbol{v}_F \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \sigma^z, \check{g}(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{r}; i\omega_n) \right] \tag{49}$$

$$= \quad 0 \tag{50}$$

となり、不純物のない場合の Eilenberger 方程式と一致する。したがって $\check{g} = \check{g}_{\rm imt}$ が解である。つまり、不純物があろうがなかろうが、Green 関数は変わらないということである。

この結果は $\check{t}$ と $\check{g}_{\rm imt}$ が交換するために生じた。それはつまり、s 波の準古典 Green 関数が $\hat{\boldsymbol{p}}$ に依らず、$\langle \check{g}_{\rm imt} \rangle_{\Omega_{\boldsymbol{p}}} \propto \check{g}_{\rm imt}$ となったためである。p 波や d 波では準古典 Green 関数に方向依存性があるためにこのようにはならない。つまり、**調べている超伝導体が s 波かそうでないかを見分けるためには、不純物を入れて物理量を測定し、不純物がないときと同じ値となっているかを調べればよい**のである。もちろん、不純物をあまりに入れすぎないことは前提である。

参考文献

高野文彦、「多体問題」(培風館　新物理学シリーズ 18)

J. M. ザイマン、"現代量子論の基礎" (丸善プラネット株式会社)

Richard D. Mattuck. "A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem" 2nd (Dover)

Nikolai Kopnin."Theory of Nonequilibrium Superconductivity" (Oxford Science Publications)

A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I.E. Dzyaloshinski "Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics" (Dover)

植野洋介、東京大学修士論文 (2002)

N. Hayashi, Y. Kato, Physica C 41-45 (2002) 367.

E.V. Thuneberg, J. Kurkijarvi, D. Rainer, J. Phys. C: Solid State Phys. 14 (1981) 5615.

D. -C. Chen. "Impurity States in D-wave Superconductors" (Quasiclassical Methods in Superconductivity & Superfluidity;Verditz 96)