スピン三重項超伝導の解析の工夫

Koki Shimura

2025年6月6日

本ノートでは、Normal stateでのハミルトニアンにスピン自由度がなく、スピン三重項超伝導秩序変数がnon-unitary、すなわち$\boldsymbol{d} \times \boldsymbol{d}^* = 0$の場合に、適当なユニタリ変換によってスピン三重項超伝導秩序変数をスカラーとみなしてよいことを示す。

1 dベクトル

まず任意のベクトル$\boldsymbol{a}$及び$\boldsymbol{b}$に対して成り立つ次のような一般公式を示す[1]。

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}) &= (a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z)(b_x\sigma_x + b_y\sigma_y + b_z\sigma_z) \\
&= a_xb_x\,\sigma_x^2 + a_yb_y\,\sigma_y^2 + a_zb_z\,\sigma_z^2 + a_xb_y\,\sigma_x\sigma_y + a_yb_x\,\sigma_y\sigma_x \\
&\quad + a_yb_z\,\sigma_y\sigma_z + a_zb_y\,\sigma_z\sigma_y + a_zb_x\,\sigma_z\sigma_x + a_xb_z\,\sigma_x\sigma_z \\
&= a_xb_x\ \cdot\mathbb{I} + a_yb_y\ \cdot\mathbb{I} + a_zb_z\ \cdot\mathbb{I} + (a_xb_y - a_yb_x)\ \cdot(i\sigma_z) \\
&\quad (a_yb_z - a_zb_y)\cdot(i\sigma_x)\ + (a_zb_x - a_xb_z)\ \cdot(i\sigma_y) \\
&= a_xb_x\ \cdot\mathbb{I} + a_yb_y\ \cdot\mathbb{I} + a_zb_z\ \cdot\mathbb{I} + (\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})_z\ \cdot(i\sigma_z) \\
&\quad (\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})_x\cdot(i\sigma_x)\ + (\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})_y\ \cdot(i\sigma_y) \\
&= (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\,\mathbb{I} + i\,(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{\sigma}.
\end{aligned} \tag{1}$$

ここで$\mathbb{I}$は2×2の単位行列であり、$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$の各成分はパウリ行列である。

以下超伝導秩序変数$\hat{\Delta} = i(\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{\sigma})\sigma_y$に対して$\hat{\Delta}\hat{\Delta}^T$を計算する。このとき

$$\hat{\Delta}\hat{\Delta}^T = \big[i(\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{\sigma})\sigma_y\big]\big[-i\,\sigma_y\,(\boldsymbol{d}^*\cdot\boldsymbol{\sigma})\big] = (\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{d}^*\cdot\boldsymbol{\sigma}) = (\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{d}^*)\,\mathbb{I} + i\,(\boldsymbol{d}\times\boldsymbol{d}^*)\cdot\boldsymbol{\sigma}. \tag{2}$$

がいえる。なお式(1)で$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{d}, \boldsymbol{b} = \boldsymbol{d}^*$とした。

2 non-unitaryである場合

$\boldsymbol{d}\times\boldsymbol{d}^* = 0$であるような場合をnon-unitaryという。このときある定数λが存在して$\boldsymbol{d}^* = \lambda\boldsymbol{d}$と書ける。従って$\lambda^*\boldsymbol{d}^* = \lambda^*\lambda\boldsymbol{d} = \boldsymbol{d}$ゆえに$\lambda^*\lambda = 1$である。これは$\boldsymbol{d}$と$\boldsymbol{d}^*$が位相因子$\lambda = e^{i\theta}$分しか違わないことを示すため、適当に位相をとることによりdベクトルを実に取ることが出来る。

3　ユニタリ行列UによるBdGハミルトニアンの変換

3.1　dベクトルの回転

まず、ユニタリ変換によってdベクトルの方向を変えてy軸の正の方向に向けられることを示す。スピン回転演算子を

$$U = \exp\Bigl(-\frac{i\phi}{2}\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\Bigr), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{d}\times\mathbf{e}_y}{\|\mathbf{d}\times\mathbf{e}_y\|}, \quad \phi = \arccos\frac{\mathbf{d}\cdot\mathbf{e}_y}{\|\mathbf{d}\|} \tag{3}$$

と定義しよう。$\mathbf{e}_y$ はy方向への単位ベクトルである。目的は

$$U\,(\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\sigma})\,U^\dagger = \bigl(R(\mathbf{n},\phi)\,\mathbf{d}\bigr)\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{4}$$

を示すことである。なお

$$\bigl(R(\mathbf{n},\phi)\,\mathbf{d}\bigr) = \mathbf{d}\cos\phi + (1-\cos\phi)\,(\mathbf{n}\cdot\mathbf{d})\,\mathbf{n} + \sin\phi\,(\mathbf{n}\times\mathbf{d}) \tag{5}$$

は、3次元空間内でベクトル$\boldsymbol{d}$を$\boldsymbol{n}$軸周りにϕだけ回転させたときのベクトルの表式であり、ロドリゲスの公式と言われる。ここで

$$A = -\tfrac{\phi}{2}\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \quad B = \mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{6}$$

とおき、Baker-Campbell-Hausdorffの公式 [1]

$$U\,B\,U^\dagger = e^{A}Be^{-A} = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}\,\underbrace{[A,[A,\ldots,[A}_{m\text{ 回}},B]\ldots]] \tag{7}$$

を用いて計算する。$m=0$の場合はBに対応する。第1項は$\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{\sigma}$である。第2項、第3項はそれぞれ

$$\begin{gathered}[-\tfrac{i\phi}{2}\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{\sigma}] = \phi\,(\mathbf{n}\times\mathbf{d})\cdot\boldsymbol{\sigma}, \\ \frac{1}{2!}[-\tfrac{i\phi}{2}\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \phi\,(\mathbf{n}\times\mathbf{d})\cdot\boldsymbol{\sigma}] = \frac{1}{2}\phi^2\bigl((\mathbf{n}\cdot\mathbf{d})\,\mathbf{n}-\mathbf{d}\bigr)\cdot\boldsymbol{\sigma},\end{gathered}$$

となる。$\mathbf{n}\times\bigl((\mathbf{n}\cdot\mathbf{d})\,\mathbf{n}-\mathbf{d}\bigr) = -\mathbf{n}\times\mathbf{d}$であることに着目すると、第$k(\geq 2)$項は

$$\begin{cases}(-1)^{\frac{k+1}{2}}\,\frac{\phi^{k-1}}{(k-1)!}\,\bigl((\mathbf{n}\cdot\mathbf{d})\,\mathbf{n}-\mathbf{d}\bigr)\cdot\boldsymbol{\sigma}, & \text{k: odd,}\\ (-1)^{\frac{k+2}{2}}\,\frac{\phi^{k-1}}{(k-1)!}\,(\mathbf{n}\times\mathbf{d})\cdot\boldsymbol{\sigma}, & \text{k: even.}\end{cases} \tag{8}$$

であることが分かる。あとは各項を足し合わせればよいが、kがoddの場合、$k\geq 2$よりϕの級数から$(1-\cos\phi)$が出てくることに注意する。従って

$$\begin{aligned}U(\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\sigma})U^\dagger &= \mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\sigma} - (\cos\phi-1)\bigl((\mathbf{n}\cdot\mathbf{d})\,\mathbf{n}-\mathbf{d}\bigr)\cdot\boldsymbol{\sigma} + \sin\phi(\mathbf{n}\times\mathbf{d})\cdot\boldsymbol{\sigma}\\ &= \cos\phi\,(\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\sigma}) + (1-\cos\phi)\,\bigl((\mathbf{n}\cdot\mathbf{d})\,\mathbf{n}\bigr)\cdot\boldsymbol{\sigma} + \sin\phi\,(\mathbf{n}\times\mathbf{d})\cdot\boldsymbol{\sigma}\\ &= \bigl(R(\mathbf{n},\phi)\,\mathbf{d}\bigr)\cdot\boldsymbol{\sigma}\\ &= |\boldsymbol{d}|\sigma_y\end{aligned} \tag{9}$$

となり、ユニタリ変換Uによってdベクトルをyの正の方向に向けられることが示せた。

3.2 BdG ハミルトニアンの回転

次に適当な変換によって、スピン三重項超伝導秩序変数をスカラーとみなせることを示す。4×4 行列の BdG ハミルトニアン

$$\mathcal{H}_{BCS} = \begin{pmatrix} H_0(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^\dagger(\mathbf{k}) & -H_0^T(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \tag{10}$$

を変換するユニタリ行列が

$$\mathcal{U}_{BCS} = \begin{pmatrix} U_1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{pmatrix} \tag{11}$$

と書けると仮定しよう。なお U_1,U_2 ともに 2×2 のユニタリ行列である。この時

$$\mathcal{U}_{BCS}\mathcal{H}_{BCS}\mathcal{U}_{BCS}^\dagger = \begin{pmatrix} U_1\, H_0(\mathbf{k})\, U_1^\dagger & U_1\, \Delta(\mathbf{k})\, U_2^\dagger \\ U_2\, \Delta^\dagger(\mathbf{k})\, U_1^\dagger & -\, U_2\, H_0^T(-\mathbf{k})\, U_2^\dagger \end{pmatrix} \tag{12}$$

である。

ここで U_1 および U_2 の条件を考える。まず (1,2) 成分に着目すると

$$U_1\, \Delta(\mathbf{k})\, U_2^\dagger = i\, U_1\, (\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\sigma})\, \sigma_y\, U_2^\dagger \tag{13}$$

となっている。ここで

$$U\, \sigma_y\, U^T = \sigma_y \tag{14}$$

をヒントに[1]、$U_2^\dagger = U^T$, $U_1 = U$ と置いてみる。ここで U は 2.1 節で扱ったように

$$U\, (\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\sigma})\, U^\dagger = |\mathbf{d}|\, \sigma_y \tag{15}$$

を満たすようなユニタリ行列である。これより

$$i\, U\, (\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\sigma})\, \sigma_y\, U^T = i\, U\, (\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{\sigma}) U^\dagger U\, \sigma_y\, U^T = i|\mathbf{d}|\, \sigma_y^2 = i|\mathbf{d}|\mathbb{I} \tag{16}$$

と変換できることが分かる。すなわちエルミート性を要求すれば

$$\begin{pmatrix} U\, H_0(\mathbf{k})\, U^\dagger & i|\mathbf{d}|\, \mathbb{I} \\ -i|\mathbf{d}|\, \mathbb{I} & -\, U^*\, H_0^T(-\mathbf{k})\, U^T \end{pmatrix} \tag{17}$$

である。ハミルトニアンはスピン自由度を持たない、つまり $[H_0, \sigma_i] = 0$ であるから、

$$U\, H_0(\mathbf{k})\, U^\dagger = H_0(\mathbf{k}), \quad U^*\, H_0^T(-\mathbf{k})\, U^T = (U H_0(-\mathbf{k}) U^\dagger)^T = H_0^T(-\mathbf{k}) \tag{18}$$

となるはずである。従って

$$\mathcal{U}_{\mathrm{BCS}} = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & U^* \end{pmatrix} \tag{19}$$

[1] $\det(U) = 1$ ゆえに成立する。

となるようなユニタリ行列を用いて

$$\mathcal{H}'_{\mathrm{BCS}} = \mathcal{U}_{BCS}\mathcal{H}_{BCS}\mathcal{U}^{\dagger}_{BCS} = \begin{pmatrix} H_0(\mathbf{k}) & i|\mathbf{d}|\,\mathbb{I} \\ -i|\mathbf{d}|\,\mathbb{I} & -H_0^T(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi(\mathbf{k}) & i|\mathbf{d}| \\ -i|\mathbf{d}| & -\xi(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \otimes \mathbb{I} \tag{20}$$

と変換することができる。これが指し示すのは、$\mathcal{H}_{\mathrm{BCS}}$ の固有値の set は

$$\begin{pmatrix} \xi(\mathbf{k}) & i|\mathbf{d}| \\ -i|\mathbf{d}| & -\xi(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \tag{21}$$

あるいは相似変換によって

$$\begin{pmatrix} \xi(\mathbf{k}) & |\mathbf{d}| \\ |\mathbf{d}| & -\xi(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \tag{22}$$

の固有値の set と同一であり、従って式 (21) のハミルトニアンをもとに解析すれば十分だということである。

以上より、Normal state でのハミルトニアンにスピン自由度がなく、スピン三重項超伝導秩序変数が non-unitary である場合に、適当なユニタリ変換によってスピン三重項超伝導秩序変数をスカラー $|\mathbf{d}|$ とみなしてよいことが示された。

参考文献

[1] 現代の量子力学 (上), J. J. Sakurai, 吉岡書店