

非平衡超伝導の物理

— 物性若手夏の学校2024 講義ノート —

辻直人

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻

2024年8月5日

概要

超伝導は物質の電気抵抗がゼロになり物質中の磁場を完全に排除するような「秩序立った状態」であり、ミクロな世界を支配する量子力学の性質がマクロな世界に現れる現象の一種である。超伝導体に強い光などを照射して非平衡状態にすると何が起こるだろうか？一見すると非平衡にすることで秩序が乱され、外から加えたエネルギーが熱に変わって、量子多体系の面白い性質が掻き消えてしまうように思われる。ところが、非平衡にすることで平衡状態では実現できなかった秩序や物性が発現する例が実験的、理論的に見つかってきている。例えば、平衡状態では Mermin-Wagner の定理によって 2 次元以下で有限温度で超伝導転移は存在しないが、非平衡ではそのような制限は存在せず原理的には任意の次元で超伝導状態が存在可能である。実際に、超伝導秩序を保つような非平衡多体状態の例が理論的に知られている。また、光によって超伝導秩序の振幅を振動させる励起モードを誘起することが可能であり、素粒子の Higgs 粒子との対応から Higgs モードと呼ばれている。Higgs モードは通常、平衡状態から離れた非線形応答領域でのみ現れると考えられており、近年のテラヘルツ光の実験の進歩によって観測できるようになった。本講義では、このような近年進展の著しい非平衡超伝導の物理を基礎から解説したい。

目次

第 1 章	はじめに	4
第 2 章	マクロからの非平衡超伝導	5
2.1	Ginzburg-Landau 理論	5
2.1.1	電磁場に対する応答	6
2.2	時間依存 Ginzburg-Landau 理論	8
2.2.1	集団励起モード	8
2.2.2	集団励起モードと電磁場の結合	13
2.2.3	複数の秩序パラメーターが存在する場合	15
2.2.4	Lifshitz 不変量	17
2.2.5	時間依存 GL 理論にまつわる問題	20
第 3 章	ミクロからの非平衡超伝導	22
3.1	BCS 理論	22
3.2	時間依存 BCS 理論	25
3.2.1	線形化された擬スピンの運動方程式	27
3.2.2	相互作用クエンチ	29
3.2.3	振動電場による駆動	31
3.2.4	3 次高調波の共鳴	33
第 4 章	量子多体傷跡状態と非平衡超伝導	36
4.1	η ペアリング超伝導	37
4.1.1	Hubbard 模型と対称性	37
4.1.2	非対角長距離秩序	39

4.1.3	エンタングルメントエントロピー	41
4.2	非従来型超伝導ペアリングへの拡張	44
4.2.1	スピンレス η ペアリング状態	45
4.2.2	ペアリングの対称性	45
4.2.3	スピンレス Hubbard 模型	52
4.2.4	p 波、 d 波 η ペアリング状態	55
4.2.5	スピニフル Hubbard 模型	56
4.2.6	多体相互作用の導入	58
4.2.7	模型と固有状態の性質	61
第 5 章	まとめ	64
付録 A	ミクロからの GL 理論の導出	65
付録 B	時間依存 BCS 理論の数値解法	70
付録 C	2 粒子密度行列の固有値の上限	73
参考文献		81

第1章 はじめに

超伝導は物性物理学の中で最も興味を持たれている相転移現象の一つであり、その物理的性質の解明や新しい超伝導体の発見は常に物理学の進歩を促してきた。超伝導は通常、物質を極低温まで冷やすとある温度で相転移が起こり、電気抵抗がゼロになり磁場を完全に排除するようなある種の秩序立った状態になる。より高い温度の環境下で超伝導を実現したいというのが物理学の長年の夢であるが、常圧下ではいまだに極低温が必要なのが現状である。

そこで近年、光を使って超伝導状態を制御したり超伝導を誘起することができないかという研究が現れてきた [1, 2, 3, 4]。レーザー光を使って物質を非平衡状態へ駆動することで、平衡状態では実現できないような量子多体状態を作ることが可能になると期待されている。非平衡量子多体系に注目する理由の一つとして、平衡状態で知られている様々な制限を (原理的には) 超えることができることがあげられる。例えば、平衡状態では Mermin-Wagner の定理によって 2 次元以下で有限温度で超伝導転移は存在し得ないことが知られているが、非平衡状態では任意の次元で超伝導相関を保った定常状態が存在できることが理論的に知られている (Sec. 4 を参照)。また、レーザー光の実験技術の発展によって、テラヘルツを含む様々な周波数を持った高強度のレーザー光で物質を駆動し、時間分解して電子状態のダイナミクスを観測することができるようになったのも非平衡量子多体系を研究する動機の一つである。

本講義では、非平衡量子多体系の中でも超伝導に関するトピックに絞って基礎から解説する。ちょうど今回の物性若手夏の学校のテーマが“マイクロからマクロへ、マクロから世界へ”ということなので、マクロな立場 (第 2 章) とマイクロな立場 (第 3, 4 章) から非平衡超伝導の物理を眺めてみたい。本講義ノートを準備するに当たってレビュー論文 [5, 6] や解説記事 [7] を参考にしたので、興味がある人はそちらも合わせて参照していただきたい。

第2章 マクロからの非平衡超伝導

超伝導体の非平衡ダイナミクスは、定性的にマクロに粗視化された現象論によって大雑把に理解することができ。まずはそれを見てみよう。

2.1 Ginzburg-Landau 理論

超伝導体の低エネルギー有効場の理論は、Ginzburg-Landau (GL) 理論によって与えられる [8]。それによると、超伝導体は複素数の秩序パラメーター $\psi(\mathbf{r})$ によって特徴づけられる。超伝導状態では、物質中の電子同士が引力を感じてペアを作り (Cooper ペア)、マクロな数の Cooper ペアが凝縮することで発現していると考えられる。 $\psi(\mathbf{r})$ は、凝縮した電子の波動関数がマクロな世界に顔を出したものと捉えることができ、「巨視的波動関数」などとも呼ばれることがある。ただしこの言い方は少々不正確なので、あまり真に受ける必要はない。よりミクロな理論から出発することで $\psi(\mathbf{r})$ の正体は明らかになるのだが、ここでは単に超伝導体は複素数のスカラー場 $\psi(\mathbf{r})$ を秩序パラメーターとして持つと仮定したと考えよう。

GL 理論によると超伝導体の自由エネルギーは以下のように与えられる。

$$f = a|\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{b}{2}|\psi(\mathbf{r})|^4 + \frac{1}{2m^*}|(-i\nabla - e^*\mathbf{A})\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.1)$$

ここで、 a, b は何らかの定数である。Landau の相転移の一般論と同様に、自由エネルギーを秩序パラメーターで展開して 4 次の項まで取ってある。最後の項は凝縮体の運動エネルギーを表しており、1 粒子の量子力学と同じような形をとっている。ここで m^* と e^* は凝縮体の有効質量と有効電荷であり、 \mathbf{A} は電磁場のベクトルポテンシャルである。 $\hbar = 1$ とおいている。自由エネルギーは大局的な位相回転 $\psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\theta}\psi(\mathbf{r})$ に対して不変になっている (U(1) 対称性)。また、粒子正孔対称性 $\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi^\dagger(\mathbf{r}), e^* \rightarrow -e^*$ も持っている。超伝導体は BCS 理論のところで見るように、低エネルギーにおいて近似的な粒子正孔対称性を示すことが知られており、そのことと整合する。

係数 a は温度に依存し、超伝導転移の前後で符号を変えよう。臨界温度を T_c とおき、 $a = a_0(T - T_c)$ とする。平衡状態では秩序パラメーターは一様であるとする、自由エネルギーが最小になる条件から秩

序パラメーターは次の値をとる。

$$|\psi| = \begin{cases} \sqrt{-\frac{a}{b}} & T < T_c \\ 0 & T \geq T_c \end{cases} \quad (2.2)$$

特に T_c 付近の低温側で秩序パラメーターは $|\psi| \propto (T_c - T)^{1/2}$ のように立ち上がる。

2.1.1 電磁場に対する応答

この理論が超伝導を記述することを確認するには、電磁場に対する応答を見ればよい。そのために、カレントを次のように定義する。

$$\mathbf{j} = -\frac{\partial f}{\partial \mathbf{A}} = -\frac{ie^*}{2m^*}[\psi^\dagger \nabla \psi - (\nabla \psi^\dagger)\psi] - \frac{e^{*2}}{m^*} \mathbf{A} \psi^\dagger \psi \quad (2.3)$$

平衡状態で秩序パラメーターが空間的に一様であればカレントは

$$\mathbf{j} = -\frac{e^{*2}}{m^*} |\psi|^2 \mathbf{A} \quad (2.4)$$

と表される。これは超伝導体の電磁応答を記述する現象論的方程式である London 方程式

$$\mathbf{j} = -\frac{e^{*2} n_s}{m^*} \mathbf{A} \quad (2.5)$$

と同じ形をしている。ここで n_s は超流動密度を表している。この二つの式が一致するためには

$$|\psi|^2 = n_s \quad (2.6)$$

となる必要がある。すなわち秩序パラメーターの振幅 (の 2 乗) は超流動密度に対応するのである。元々、GL 理論は London 方程式を再現するように作られている。

超伝導体中では磁場が完全に排除される (Meissner 効果)。式 (2.5) を Maxwell 方程式

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} \quad (\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}) \quad (2.7)$$

(μ_0 は真空の透磁率) に代入し、両辺の回転を取ると、

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{B} = -\frac{\mu_0 e^{*2} n_s}{m^*} \mathbf{B} \quad (2.8)$$

となる。例えば磁場が x 方向にしか依存しないとすると、

$$\partial_x^2 \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B}, \quad \lambda = \sqrt{\frac{m^*}{\mu_0 e^{*2} n_s}} \quad (2.9)$$

が得られ、超伝導体の内部では磁場が指数関数的に減衰する ($B \propto e^{-x/\lambda}$)。 λ は London の侵入長であり、磁場が超伝導体に侵入できる長さスケールを表す。侵入長 λ は臨界温度に近づくにつれて発散する ($\lambda \propto (T_c - T)^{-1/2}$)。

超伝導体の電気抵抗がゼロになることも以下のようにして理解できる。周波数 ω で振動する電場 $\mathbf{E} = E_0 e^{-i\omega t}$ をかけたときに流れる電流は

$$\mathbf{j} = \sigma(\omega) \mathbf{E} \quad (2.10)$$

のように表される。ここで $\sigma(\omega)$ は光学伝導度である。時間ゲージ ($\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A}$) をとると、 $\mathbf{A} = \frac{1}{i\omega} \mathbf{E}$ であるので、London 方程式 (2.5) より

$$\mathbf{j} = i \frac{e^{*2} n_s}{m^* \omega} \mathbf{E} \quad (2.11)$$

が成り立つ。式 (2.10) と比較すると

$$\sigma(\omega) = i \frac{e^{*2} n_s}{m^* \omega} \quad (2.12)$$

となる。実は $\sigma(\omega)$ の解析性から実部と虚部の間には関係があり (Kramers-Kronig の関係式)¹、 $\frac{1}{\omega+i\epsilon} = P\frac{1}{\omega} - i\pi\delta(\omega)$ (ϵ は正の微小量、 P は積分した時に主値をとることを表す) という公式を思い出すと、 $\sigma(\omega)$ が解析的に正しく振る舞うようにするためには

$$\sigma(\omega) = \frac{\pi e^{*2} n_s}{m^*} \delta(\omega) + i \frac{e^{*2} n_s}{m^* \omega} \quad (2.13)$$

とする必要がある。すなわち実部はデルタ関数的になっており、dc 伝導度 $\sigma(\omega = 0)$ は発散する (電気抵抗がゼロになる) ことがわかる。

$$\text{Re } \sigma(\omega) = D \delta(\omega), \quad D = \frac{\pi e^{*2} n_s}{m^*} \quad (2.14)$$

係数 D は Drude の重みと呼ばれる。一方で光学伝導度の虚部は $1/\omega$ に比例して dc 極限 ($\omega \rightarrow 0$) でやはり発散する。このような光学伝導度の虚部が $1/\omega$ に比例する振る舞いは、光誘起超伝導の実験において超伝導が誘起されたかどうかを判別するのに用いられることがある²。

¹ ω を複素数だと思って $\sigma(\omega)$ を複素関数とみなすと、複素平面の上半平面で $\sigma(\omega)$ は正則であるべしという性質を持つ。このことから Kramers-Kronig の関係式 $\text{Re } \sigma(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int d\omega' \frac{\text{Im } \sigma(\omega')}{\omega' - \omega}$, $\text{Im } \sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int d\omega' \frac{\text{Re } \sigma(\omega')}{\omega' - \omega}$ が従う。

²ただし実際の実験では dc 極限で光学伝導度の虚部が本当に発散しているのかどうかを示すのは難しい場合が多い。

2.2 時間依存 Ginzburg-Landau 理論

超伝導体のダイナミクスを理解するためには、秩序パラメーター $\psi(\mathbf{r})$ が時間にも依存する状況を考えることになる。前節で議論した GL 理論に秩序パラメーターの時間依存性を取り込んだものを、時間依存 Ginzburg-Landau 理論と呼ぶ。実は超伝導体の場合には、時間依存 GL 理論をミクロから正当化するのは難しいという問題がある [9]³。なぜ問題が起こるかは後ほど説明するが、当面の間は現象論だと思っておおらかに扱うことにしよう。

時間依存性を考えるために、自由エネルギーではなくラグランジアンを出発的にする。ラグランジアンは秩序パラメーターの局所的な関数になっていると仮定し、低次数の微分項をとってくと以下のような形になる。

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & - \left[a|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{b}{2}|\psi(\mathbf{r}, t)|^4 + \frac{1}{2m^*}|(-i\nabla - e^*\mathbf{A})\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \\ & + c_1\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)(i\partial_t - e^*\phi)\psi(\mathbf{r}, t) + c_2|(i\partial_t - e^*\phi)\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \end{aligned} \quad (2.15)$$

ここで第一項は GL 理論の自由エネルギー (2.1) に負符号をつけたものになっている。第二項と第三項はそれぞれ時間微分を一個、二個含む項になっていて、前者は非相対論的な Gross-Pitaevskii 方程式、後者は相対論的な Klein-Gordon 方程式の時間微分項と同じ形をしている。 ϕ は電磁場のスカラーポテンシャルを表す。電磁場と秩序パラメーターの結合の仕方は、ゲージ変換 $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi$, $\phi \rightarrow \phi' = \phi - \partial_t\chi$, $\psi \rightarrow \psi' = e^{ie^*\chi}\psi$ で不変になるように決めている。

2.2.1 集団励起モード

秩序パラメーター $\psi(\mathbf{r})$ を基底状態の値 ψ_0 からのずれが小さいとして、次のように表すことにしよう。

$$\psi(\mathbf{r}) = (\psi_0 + H(\mathbf{r}))e^{i\theta(\mathbf{r})} \quad (2.16)$$

ここで $H(\mathbf{r}), \theta(\mathbf{r})$ はそれぞれ秩序パラメーターの振幅、位相の揺らぎに対応する。集団励起モードの言葉で言うと、前者は Higgs モード [10, 11]、後者は南部 Goldstone モード [12, 13] に相当する (図 2.1)。集団

³ミクロから真面目に時間依存 GL 理論を導出しようとする、多くの場合かなり厳しい条件を仮定することになる。例えば準粒子の緩和時間が超伝導ギャップの逆数 $(2\Delta)^{-1}$ より十分短いなど。このような仮定が満たされるのは、磁性不純物によってギャップが閉じているギャップレス超伝導体など、限られた場合しかない。しかもミクロから正当化できたとしても、得られる方程式は時間微分項が減衰項 ($\propto -\partial_t\psi$) になり、秩序パラメーターの振動などの現象を記述することはできない。

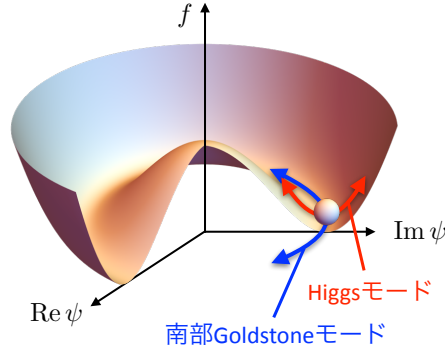


図 2.1: GL 理論における自由エネルギーポテンシャルの概念図。複素の秩序変数 ψ の振幅と位相の揺らぎが、それぞれ Higgs モードと南部 Goldstone モードに対応する。

励起モードの研究は、物性物理と素粒子物理の間の相互作用によって進展してきたという歴史がある。表 2.1 に物性物理側の発展を中心に時系列をまとめた。

ψ_0 は前節で求めた基底状態の値 (2.2) を取るとし、一般性を失わず正の実数であると仮定する ($\psi_0 = \sqrt{-a/b}$ ($T < T_c$)). するとラグランジアンは次のように展開される。

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & 2aH^2 - \frac{1}{2m^*}(\nabla H)^2 - \frac{e^{*2}}{2m^*} \left(\mathbf{A} - \frac{1}{e^*} \nabla \theta \right)^2 (\psi_0 + H)^2 \\ & - c_1 e^* \left(\phi + \frac{1}{e^*} \partial_t \theta \right) (\psi_0 + H)^2 + c_2 (\partial_t H)^2 + c_2 e^{*2} \left(\phi + \frac{1}{e^*} \partial_t \theta \right)^2 (\psi_0 + H)^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.17)$$

初項は Higgs モードの質量項であり、Higgs モードは有限のエネルギーギャップ $\propto (-2a)^{1/2} \propto (T_c - T)^{1/2}$ を持つことを意味する。第二項は Higgs モードの運動項である。位相場 θ は質量項 ($\propto \theta^2$) を持たないため、ギャップレスの励起モードのように見える。実際に電荷中性 ($e^* = 0$) の超流動体の場合には、そのようなギャップレスの励起モードが存在する (Anderson-Bogoliubov モード [10, 15])。これは連続的な対称性が自発的に破れた時には必ずギャップレスモードが現れるという Goldstone の定理 [17] の結果そのものである。位相モードと振幅モードは (2.17) の第四項から出てくる $-2c_1 \partial_t \theta \psi_0 H$ の形で互いに線形に混成する。位相モードと振幅モードが独立なモードとなるためには $c_1 = 0$ である必要がある。 c_1 項は粒子正孔対称性 ($\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi^\dagger(\mathbf{r}, t), e^* \rightarrow -e^*$) を破るため、位相モードと振幅モードの結合を抑制するときに粒子正孔対称性を要求することがある [28]⁴。ボーズ粒子の冷却原子気体の実験では、粒子正孔対称性が成り立つ領域付近で振幅モードが観測されている [29]。

⁴粒子正孔対称性が存在すると、有効的なローレンツ対称性も創発する。そのため、振幅モードは有効的なローレンツ対称性によって守られると言ったりする。

表 2.1: Higgs の物理の (物性関連を中心とした) 発展 [7]。

1950	Ginzburg-Landau 理論 [8]
1957	BCS 理論 [14]
1958	超伝導体の集団励起モード [15, 10]
1960-61	自発的対称性の破れの概念の導入 [16, 12]
1961-62	Goldstone の定理 [13, 17]
1963	物性物理における Higgs 機構 [18]
1964	相対論的場の理論における Higgs 機構 [11, 19, 20]
1980-82	超伝導 + CDW 共存系における Higgs モードの観測 [21, 22, 23]
2012	LHC 実験で Higgs 粒子を発見 [24, 25]
2013-14	超伝導体で Higgs モードを観測 [26, 27]

一方、超伝導体 ($e^* \neq 0$) の場合には事情が異なる。 θ は $A - \frac{1}{e^*} \nabla \theta$ 、または $\phi + \frac{1}{e^*} \partial_t \theta$ の形でしか現れないため、ゲージ変換 $A \rightarrow A' = A - \frac{1}{e^*} \nabla \theta$, $\phi \rightarrow \phi' = \phi + \frac{1}{e^*} \partial_t \theta$ (ユニタリーゲージ) によって表面上消すことができる。 A', ϕ' を再び A, ϕ と書くことにすれば、ラグランジアンを

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & 2aH^2 - \frac{1}{2m^*} (\nabla H)^2 - \frac{e^{*2}}{2m^*} A^2 (\psi_0 + H)^2 \\ & - c_1 e^* \phi (\psi_0 + H)^2 + c_2 (\partial_t H)^2 + c_2 e^{*2} \phi^2 (\psi_0 + H)^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.18)$$

と書き直せる。このようにして位相モード θ が消え、代わりに電磁場の質量項 ($\propto A^2$) が第三項に現れる。ここで示した電磁場が質量を獲得する機構のことを Anderson-Higgs 機構 [18, 11, 19, 20] と呼ぶ。電磁場の質量を持つということは、超伝導体中では電磁場が真空中のように自由に伝搬することができなくなることを意味し、Meissner 効果に対応している。電磁場が質量を持つと横成分だけでなく縦成分 (伝搬する方向に偏極した成分) も現れることに注意する。Anderson-Higgs 機構が起こる前と後で、励起モードの数の勘定は次のようになっている。

$$2(\text{電磁場の横成分}) + 2(\psi \text{ の実部と虚部}) \rightarrow 3(\text{電磁場の縦成分と横成分}) + 1(\text{Higgs モード}) \quad (2.19)$$

物理的には位相モードは電磁場と結合してプラズマ周波数程度の高エネルギーに押し上げられてしまい、低エネルギーには生き残らない。残されたモードは Higgs モードのみであり、これが通常低エネルギーで現れる超伝導体の唯一の集団励起モードである (図 2.2)。ただし、臨界温度近傍では常伝導状態の電子が多

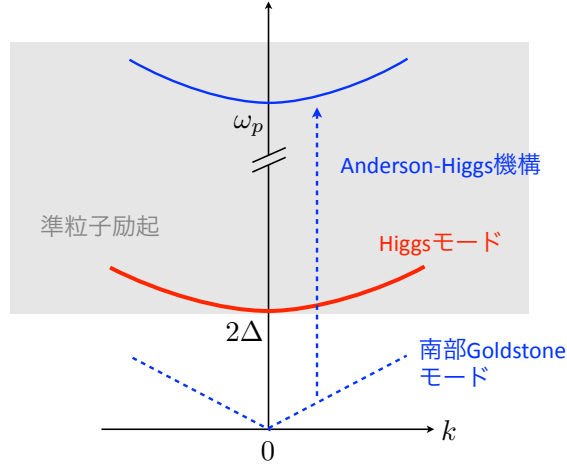


図 2.2: 超伝導体の典型的な励起スペクトル。南部 Goldstone モードは Anderson-Higgs 機構によってプラズマ周波数 ω_p 程度の高エネルギーに押し上げられる。低エネルギー (超伝導ギャップ 2Δ のスケール) で生き残る集団励起モードは Higgs モードのみである。

数熱励起されて電磁場を遮蔽することによって位相モードが復活する可能性がある。そのようなモードは Carlson-Goldman モードと呼ばれている [30]。

超伝導体では近似的に粒子正孔対称性が低エネルギーで成り立つため、 c_1 項は無視することができる。そうすると、式 (2.18) より Higgs モードと電磁場 (A と ϕ) の間には線形な結合はないことがわかる。これが、Higgs モードを線形応答によって電磁場で励起できない所以である。言い換えれば、Higgs モードは電荷や磁化といった量子数を持っていないことを意味する。Higgs モードを電磁場で励起するには非線形応答を使う必要があり、式 (2.18) を見ると Higgs モードと電磁場の間に非線形な結合 ($A^2 H$ や $\phi^2 H$ に比例する項) があることがわかる。これは 2 光子吸収のプロセスに対応しており、周波数 ω_1 のフォトンと ω_2 のフォトンが入ってくると周波数 $\omega_1 + \omega_2$ の Higgs モードが生成されることになる。ダイアグラムで表したものを図 2.3 に示した。

ラグランジアン (2.18) から Higgs 場 H の運動方程式を導くことができる。そのために Euler-Lagrange 方程式を書き下す。

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial H} - \partial_t \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t H)} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla H)} \right) = 0 \tag{2.20}$$

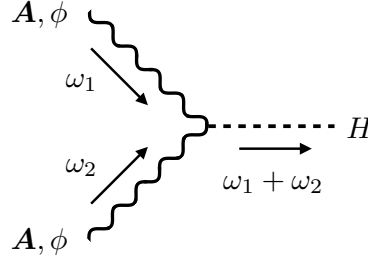


図 2.3: 電磁場 A, ϕ と Higgs モード H の間の非線形相互作用を表すダイアグラム。

以下では $c_1 = 0$ とおく。得られる運動方程式は次のような形になる。

$$\left(c_2 \partial_t^2 - \frac{1}{2m^*} \nabla^2 \right) H = 2aH + e^{*2} \psi_0 \left(c_2 \phi^2 - \frac{1}{2m^*} \mathbf{A}^2 \right) \quad (2.21)$$

特に電磁場がない場合 ($A = \phi = 0$) を考えて $H(\mathbf{r}, t) \sim e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - i\omega t}$ という平面波解を仮定すると、Higgs モードの分散関係

$$\omega^2 = -\frac{2a}{c_2} + \frac{q^2}{2c_2 m^*} \quad (2.22)$$

が得られる。ここからただちに Higgs モードがエネルギーギャップ

$$\omega_H = \sqrt{-\frac{2a}{c_2}} \quad (2.23)$$

を持つことが結論される。Higgs モードを励起するには有限のエネルギーが必要になる。前にも述べたように、相転移点付近では ω_H は $(T_c - T)^{1/2}$ に比例してゼロに近づく。時間依存 GL 理論からはエネルギーギャップの値が具体的にいくらになるかはわからないが、後で示すようにミクロな計算から超伝導ギャップ 2Δ (準粒子励起が起きはじめるエネルギー) に等しいことが知られている。

$$\sqrt{-\frac{2a}{c_2}} = 2\Delta \quad (2.24)$$

さらに GL 理論をミクロから導くことで係数 b について以下の関係式が成り立つことが知られている [31] (付録を A 参照)。

$$b \left(\frac{\psi_0}{\Delta} \right)^2 = \frac{3}{4\varepsilon_F} \quad (2.25)$$

ここで ε_F は Fermi エネルギーを表す。式 (2.24) と (2.25) に ψ_0 の表式 (2.2) を組み合わせることで、係数 c_2 の値を決めることができる。

$$c_2 = -\frac{2a}{(2\Delta)^2} = \frac{2b\psi_0^2}{(2\Delta)^2} = \frac{3}{8\varepsilon_F} \quad (2.26)$$

超伝導体は Cooper 対の凝縮でできていることを知っているの、有効質量は $m^* = 2m$ (m は電子の質量) である。また、Fermi エネルギーは $\varepsilon_F = \frac{1}{2}mv_F^2$ で与えられる (v_F は Fermi 速度)。これらを用いることで、Higgs モードの分散関係のミクロな表式を得ることができる。

$$\omega^2 = (2\Delta)^2 + \frac{1}{3}v_F^2q^2 \quad (2.27)$$

この結果は、時間依存 GL 理論を経由せずに、ミクロな計算に基づいて Varma と Littlewood によって求められた [23]。

2.2.2 集団励起モードと電磁場の結合

さて、Higgs モードの運動方程式が導けたので、電磁場を加えたときに何が起こるかを見ておこう。レーザー光の電磁場を想定して、単一の周波数を持つ一様な外場 $A(t) = A_0 e^{-i\Omega t}$, $\phi = 0$ を仮定する。運動方程式は

$$c_2 \partial_t^2 H = 2aH - \frac{e^{*2}\psi_0}{2m^*} A_0^2 e^{-2i\Omega t} \quad (2.28)$$

となる。これを解くことで

$$H(t) = \frac{1}{(2\Omega)^2 - \omega_H^2} \frac{e^{*2}\psi_0 A_0^2}{2c_2 m^*} e^{-2i\Omega t} \quad (2.29)$$

という解が得られる。Higgs 場 H は周波数 2Ω で振動することがわかる。2 光子吸収のプロセスによって Higgs モードが励起されることに対応している。また、 $2\Omega = \omega_H = 2\Delta$ のところで共鳴が起きて、Higgs 場の振動の振幅が発散することも見てとれる。2 光子吸収で得られるエネルギー 2Ω が Higgs モードの固有エネルギー $\omega_H = 2\Delta$ に一致するとき共鳴が起こる。

観測量にどのような影響があるかを見るために、カレントを求める。ラグランジアン (2.18) より

$$j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A} = -\frac{2e^{*2}\psi_0}{m^*} AH + \dots \quad (2.30)$$

という展開が得られる。主要項は A と H に比例する。これは London 方程式 (2.4) で秩序パラメーターの振幅の揺らぎ $|\psi| = \psi_0 + H$ を代入したときのカレントの平衡値からの変化分に対応している。カレントの表式に運動方程式の解 (2.29) を代入すると

$$j = -\frac{1}{(2\Omega)^2 - \omega_H^2} \frac{e^{*4}\psi_0^2}{c_2 m^{*2}} A_0^3 e^{-3i\Omega t} \quad (2.31)$$

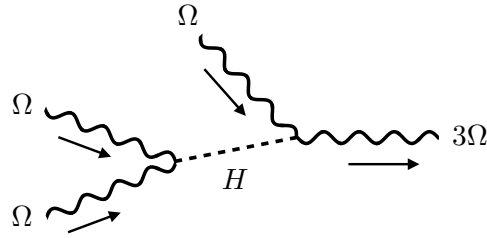


図 2.4: Higgs モードを媒介にして 3 次高調波が発生する様子。

となる。カレントが A と H に比例していることからわかるように、外場 A が持つ周波数 Ω と 2 光子吸収によって誘起された Higgs モードの周波数 2Ω が合わさって、カレントは 3Ω の周波数を持って振動する。これによって入射した周波数の 3 倍の周波数の光が放出されることになる。この現象は、3 次高調波発生と呼ばれる非線形光学応答の一種である。Higgs モードを媒介して発生するため、Higgs モードの共鳴が起こると 3 次高調波成分の振幅も発散的に増大する。 $j = \chi^{(3)}(\Omega)A_0^3$ で非線形感受率 $\chi^{(3)}(\Omega)$ を定義すると、 $\chi^{(3)}(\Omega)$ は共鳴付近で $|2\Omega - \omega_H|^{-1} = |2\Omega - 2\Delta|^{-1}$ に比例して発散する。

3 次高調波発生に対応するダイアグラムを図 2.4 に示した。周波数 Ω の光子が 2 個入ってきて周波数 2Ω の Higgs モードに変わり、さらに周波数 Ω の別の光子 1 個と衝突して周波数 3Ω の光子が出ていく。超伝導体における 3 次高調波の共鳴は、薄膜の NbN 超伝導体に対するテラヘルツ分光の実験によって最近観測された [27]。温度を変えながら 3 次高調波の強度の変化を見ると、共鳴条件 ($2\Omega = 2\Delta$) が成り立つところで 3 次高調波の強度が顕著に増大する振る舞いが見られた。これは Higgs モードが共鳴的に励起されたことを強く示唆するが、本当に Higgs モードの共鳴励起に由来するかどうかはさらに議論が必要であり、後ほど述べる。

超伝導体を示す非線形光学応答は 3 次高調波だけでなく、他にも様々なものが考えられる。例えば、3 次の非線形応答の中でも、 $+\omega - \omega + \omega = \omega$ という周波数の組み合わせによって入射した光と放出される光が同じ周波数を持つ過程も存在する。これは非線形 Kerr 効果の一種であり、最近 2 次元テラヘルツ分光の実験によって観測されている。秩序パラメーターが空間的に非一様なパターン (vortex など) を持つ場合や、複数の秩序パラメーターが存在する場合なども面白いトピックである (次の節で取り上げる)。

また、より高次の非線形応答を考えることもできる。一般に空間反転対称性のある物質では奇数次の高次高調波が発生する。超伝導体の場合にも 5 次, 7 次, \dots , $(2n+1)$ 次高調波が現れると考えられている。実験では 5 次高調波まで観測された例がある [32]。そのような高次の高調波に Higgs モードがどのように関係

するかを調べるのは面白いだろう。さらに、非線形の次数をどんどん上げていくと、あるところで外場についての摂動論が破綻して非摂動的な領域に入ることがあると予想されている。一般に n 次の非線形応答の振幅は、摂動論が成り立てば外場の n 乗 (A^n) に比例するはずである。 n が大きくなれば非線形応答の振幅は指数関数的に減少していくはずだが、ある次数近辺を境に指数関数的な減少が止まり、次数 n にほとんどよらないプラトー領域が現れることがあり、非摂動的な効果によるものと考えられている。超伝導体ではそのような超高次高調波の振る舞いはまだ観測されていないが、今後の実験の発展によって見えるようになるかもしれない。

2.2.3 複数の秩序パラメーターが存在する場合

複数の超伝導秩序パラメーターが存在する場合にどうなるか見てみよう。ここでは簡単のために秩序パラメーターが2つ (ψ_1 と ψ_2) 存在するケースを考えてみる。例えば、 MgB_2 などのマルチバンド超伝導体がある。そのような場合に対応する。このときにも GL 理論を応用することができる。GL 自由エネルギーは次のような形をとることができる。

$$f = \sum_{i=1}^2 \left[a_i |\psi_i|^2 + \frac{b_i}{2} |\psi_i|^4 + \frac{1}{2m_i^*} |\mathbf{D}\psi_i|^2 \right] + \epsilon (\psi_1^\dagger \psi_2 + \text{h.c.}) + [\eta (\mathbf{D}^\dagger \psi_1^\dagger) \cdot (\mathbf{D}\psi_2) + \text{h.c.}] \quad (2.32)$$

ここで $\mathbf{D} = -i\nabla - e^* \mathbf{A}$ は共変微分である。式 (2.32) の初項は各秩序パラメーターの GL 自由エネルギー (2.1) を足したものである。第2項と第3項が異なる秩序パラメーター間の相互作用を表す。第2項は2つの秩序パラメーターの位相を同じ向き、もしくは逆向きに揃える働きがあり、一種の Josephson 効果に対応する。通常は、位相が同じ向きに揃った方がエネルギーが下がるので $\epsilon < 0$ である (以下これを仮定する)。第3項はドラッグ効果 (引きつり効果) の一種であり、 ψ_1 の空間変化と ψ_2 の空間変化の間の相関に関する。その係数 η は一般に複素数である。この自由エネルギーはゲージ対称性 ($\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi, \psi_i \rightarrow \psi'_i = e^{ie^*\chi}\psi_i$)、粒子正孔対称性 ($\psi_i \rightarrow \psi_i^\dagger, e^* \rightarrow -e^*$) を持っている。

この自由エネルギーを最小にする秩序パラメーター $\psi_i = \psi_{i0}$ は空間的に一様であり、正の実数と仮定できる。それらは次の関係を満たす。

$$\frac{\partial f}{\partial \psi_1} = 2a_1\psi_1 + 2b_1\psi_1^3 + 2\epsilon\psi_2 = 0 \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \psi_2} = 2a_2\psi_2 + 2b_2\psi_2^3 + 2\epsilon\psi_1 = 0 \quad (2.34)$$

この解の一つが基底状態に対応する。基底状態からの揺らぎを次のように表そう。

$$\psi_i = (\psi_{i0} + H_i)e^{i\theta_i} \quad (2.35)$$

ここで H_i と θ_i はそれぞれ秩序パラメーター ψ_i の振幅と位相の揺らぎである。期待状態のまわりで自由エネルギー (2.32) を展開して揺らぎの 2 次までとると次のようになる。

$$\begin{aligned} f \approx & \sum_{i=1,2} \left[(a_i + 3b_i\psi_{i0}^2)H_i^2 + \frac{1}{2m_i^*}(\nabla H_i)^2 + \frac{1}{2m_i^*}(\nabla\theta_i - e^*\mathbf{A})^2(\psi_{i0} + H_i)^2 \right] \\ & - \epsilon\psi_{10}\psi_{20}(\theta_1 - \theta_2)^2 + 2\epsilon H_1 H_2 \\ & + \eta(\nabla H_1 - i(\psi_{10} + H_1)(\nabla\theta_1 - e^*\mathbf{A}))(\nabla H_2 + i(\psi_{20} + H_2)(\nabla\theta_2 - e^*\mathbf{A}))e^{-i(\theta_1 - \theta_2)} + \text{h.c.} \quad (2.36) \end{aligned}$$

以下ではさらに簡単のために $a_i, b_i, m_i^*, \psi_{i0}$ は i によらないとしよう。 $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla \frac{\theta_1 + \theta_2}{2e^*}$ とゲージ変換することで重心位相の自由度を除くことができる。 \mathbf{A}' を改めて \mathbf{A} とおくと、自由エネルギーの展開は以下の形になる。

$$\begin{aligned} f \approx & \sum_{i=1,2} \left[(a + 3b\psi_0^2)H_i^2 + \frac{1}{2m^*}(\nabla H_i)^2 \right] + \frac{\psi_0^2}{m^*}(\nabla\theta_L)^2 + \frac{\psi_0^2}{m^*}(e^*\mathbf{A})^2 + \frac{\psi_0}{m^*}(e^*\mathbf{A})^2(H_1 + H_2) \\ & - 4\epsilon\psi_0^2\theta_L^2 + 2\epsilon H_1 H_2 \\ & + 2\eta'\nabla H_1\nabla H_2 + 2\eta''\psi_0(\nabla H_1 + \nabla H_2)(\nabla\theta_L) \\ & + 2\eta'(\psi_0^2 + \psi_0(H_1 + H_2))(e^*\mathbf{A})^2 + 4\eta''\psi_0^2(e^*\mathbf{A})^2\theta_L - 2\eta'\psi_0^2(\nabla\theta_L)^2 \quad (2.37) \end{aligned}$$

ここで

$$\theta_L = \frac{1}{2}(\theta_1 - \theta_2) \quad (2.38)$$

は位相差のモード (Leggett モード [33]) を表し、複数の秩序パラメーターが存在する系で初めて出てくる集団励起モードである。また $\eta = \eta' + i\eta''$ ($\eta', \eta'' \in \mathbb{R}$) とおき、 \mathbf{A} と揺らぎの空間微分の積を無視する近似をした。

秩序パラメーターが一つしかない場合と同様に、 A^2 に比例する電磁場の質量項、 H_i^2 に比例する Higgs モードの質量項、 $A^2 H_i$ に比例する Higgs モードと電磁場の非線形結合項が現れる。それ以外に θ_L^2 に比例する Leggett モードの質量項が存在し、一般に Leggett モードはエネルギーギャップを持つことがわかる。 $(\nabla\theta_L)^2$ に比例する Leggett モードの運動項の係数が正でないと同様な基底状態は安定ではないので、 $\frac{1}{m^*} > 2\eta'$ が満たされる必要がある。また、 $H_1 H_2$ に比例する項があるため、二つの Higgs モードは一般に混

成する。揺らぎの空間変化を無視すれば、Higgs モードと Leggett モードの間の混成はない。さらに $A^2\theta_L$ に比例する項があるため、Leggett モードと電磁場は非線形に結合する [34]。このことからわかるように、Leggett モードは通常線形応答で励起することはできない。この点は Higgs モードと同様である。カレントは

$$\begin{aligned} j \approx -\frac{\partial f}{\partial \mathbf{A}} = & -\frac{2e^{*2}\psi_0^2}{m^*}\mathbf{A} - \frac{2e^{*2}\psi_0}{m^*}\mathbf{A}(H_1 + H_2) \\ & - 4e^{*2}\eta'(\psi_0^2 + \psi_0(H_1 + H_2))\mathbf{A} - 8e^{*2}\eta''\psi_0^2\mathbf{A}\theta_L \end{aligned} \quad (2.39)$$

で与えられる。Leggett モードからの寄与として $A\theta_L$ に比例する項が現れ、Higgs モードと同様に 3 次高調波の共鳴によって Leggett モードを検出できる可能性がある [34]。

2.2.4 Lifshitz 不変量

秩序パラメーターが複数存在する系では、GL 自由エネルギーは (2.32) で示した形以外に 1 階の空間微分を含むような項が対称性から許される場合がある。そこで次の形の自由エネルギーを考えてみよう。

$$\begin{aligned} f = \sum_{i=1}^2 \left[a_i |\psi_i|^2 + \frac{b_i}{2} |\psi_i|^4 + \frac{1}{2m_i^*} |\mathbf{D}\psi_i|^2 \right] + \epsilon(\psi_1^\dagger \psi_2 + \text{h.c.}) + [\eta(\mathbf{D}^\dagger \psi_1^\dagger) \cdot (\mathbf{D}\psi_2) + \text{h.c.}] \\ + \mathbf{d} \cdot (\psi_1^\dagger \mathbf{D}\psi_2) - \mathbf{d} \cdot (\psi_2^\dagger \mathbf{D}\psi_1) \end{aligned} \quad (2.40)$$

\mathbf{d} に比例する項が新しく加わった項である。自由エネルギーが実数になるためには係数ベクトル \mathbf{d} は純虚数である必要があるので、以下では $\mathbf{d} = i\mathbf{d}_I$ とおく。自由エネルギー (2.40) はゲージ対称性と粒子正孔対称性を持っている。電磁場が存在しない場合 ($\mathbf{A} = 0$) に、 \mathbf{d} に比例する項は次のようになる。

$$\mathbf{d}_I \cdot (\psi_1^\dagger \nabla \psi_2 - \psi_2^\dagger \nabla \psi_1) \quad (2.41)$$

このように空間微分を一つだけ含んで、秩序パラメーターに関して反対称になっている項は Lifshitz 不変量 [35] と呼ばれる。不変量と呼ばれる由来は、系の持つ対称性に対して不変になっている項だからである。そもそも自由エネルギーに現れる項だとすれば系の対称性に対して不変になっているのは当たり前なのであるが、空間微分を一つしか含んでいないためとても不変になっているようには見えないため、「不変量」と強調するようになったのかもしれない。Lifshitz によって 2 次相転移の安定性の観点からこのような項が考察された。空間微分を一つしか含まないため、空間反転対称性の破れた超伝導体や液晶、Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用を持つ磁性体において Lifshitz 不変量が現れる。

Lifshitz 不変量が存在すると Leggett モードが電磁場と線形に結合するようになる [36, 37]。その様子を見てみよう。基底状態では秩序パラメーターは一樣だとして (2.35) (ただし $\psi_{i0} = \psi_0$ とする) のように振幅と位相の揺らぎに関して展開すると、揺らぎの 2 次までで

$$\mathbf{d}_I \cdot (\psi_1^\dagger \nabla \psi_2 - \psi_2^\dagger \nabla \psi_1) \approx -4\mathbf{d}_I \cdot e^* \mathbf{A}(\psi_0 + H_1)(\psi_0 + H_2)\theta_L + \mathbf{d}_I \cdot (H_1 \nabla H_2 - H_2 \nabla H_1) \quad (2.42)$$

となる。ここで注目すべきは Leggett モードと電磁場が線形に結合する項 ($\propto A\theta_L$) が現れていることである。Lifshitz 不変量があると Leggett モードは線形応答によって励起することが可能になる。一方で Higgs モードは依然として線形応答では励起できない。

以上の議論では基底状態において秩序パラメーターは空間的に一樣であると仮定したが、Lifshitz 不変量があると非一樣な解が実現する可能性がある。これは Lifshitz 不変量が空間微分を一つだけ含むため、秩序パラメーターに空間的な変化がある方がエネルギーが低くなりやすいためである。一方で空間微分を二つ含む項や Josephson 結合の項など、空間的な変化がエネルギーを増加させる方向に働くものもあるため、その両者が競合して空間的に一樣な解から非一樣な解への転移が起こり得る。

その様子を見るために、基底状態における秩序パラメーターが次のような非一樣な解となる場合を考える。

$$\psi_1 = \psi_0 e^{i\theta_{1,0}} e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}} \quad (2.43)$$

$$\psi_2 = \psi_0 e^{i\theta_{2,0}} e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}} \quad (2.44)$$

これを自由エネルギー (2.40) に代入すると、

$$\begin{aligned} f = \sum_{i=1,2} \left[a\psi_0^2 + \frac{b}{2}\psi_0^4 + \frac{1}{2m^*} \mathbf{q}_i^2 \psi_0^2 \right] \\ + 2\epsilon\psi_0^2 \cos(\theta_{1,0} - \theta_{2,0} + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{r}) \\ + 2\eta'(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2)\psi_0^2 \cos(\theta_{1,0} - \theta_{2,0} + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{r}) + 2\eta''(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2)\psi_0^2 \sin(\theta_{1,0} - \theta_{2,0} + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{r}) \\ + 2\mathbf{d}_I \cdot (\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)\psi_0^2 \sin(\theta_{1,0} - \theta_{2,0} + (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.45)$$

となる。ここで電磁場はないと仮定した ($\mathbf{A} = 0$)。もし $\mathbf{q}_1 \neq \mathbf{q}_2$ であれば、 f を全空間で積分すると空間的に振動する項は相殺して消えるので、全自由エネルギーは

$$F = \int d\mathbf{r} f = \int d\mathbf{r} \sum_i \left[a\psi_0^2 + \frac{b}{2}\psi_0^4 + \frac{1}{2m^*} \mathbf{q}_i^2 \psi_0^2 \right] \quad (2.46)$$

となり、 $q_i = 0$ が最もエネルギーの低い状態になる。これは $q_1 \neq q_2$ と仮定したと矛盾するから、 $q_1 = q_2$ でなければならない。以下では $q_1 = q_2 = q$ とおく。このとき自由エネルギーは、

$$\begin{aligned} f = & 2 \left(a\psi_0^2 + \frac{b}{2}\psi_0^4 + \frac{1}{2m^*}q^2\psi_0^2 \right) + 2\epsilon\psi_0^2 \cos(\theta_{1,0} - \theta_{2,0}) \\ & + 2\eta'q^2\psi_0^2 \cos(\theta_{1,0} - \theta_{2,0}) + 2\eta''q^2\psi_0^2 \sin(\theta_{1,0} - \theta_{2,0}) \\ & + 4\mathbf{d}_I \cdot \mathbf{q}\psi_0^2 \sin(\theta_{1,0} - \theta_{2,0}) \end{aligned} \quad (2.47)$$

と表される。 $\phi = \theta_{1,0} - \theta_{2,0}$ において、 ϕ について自由エネルギーを最小化しよう。

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = -2(\epsilon + \eta'q^2)\psi_0^2 \sin \phi + 2(\eta''q^2 + 2\mathbf{d}_I \cdot \mathbf{q})\psi_0^2 \cos \phi = 0 \quad (2.48)$$

ここから

$$\tan \phi = \frac{\eta''q^2 + 2\mathbf{d}_I \cdot \mathbf{q}}{\epsilon + \eta'q^2} \quad (2.49)$$

となることがわかる。 $q \neq 0$ の解を実現しようとする、必ず 2 つの秩序パラメーターの位相に差が生じることになる。Josephson 結合があると位相差によってエネルギーが増加することになるので、 $q = 0$ の解の方が安定になる可能性がある。これをもとの表式に戻すと、

$$\begin{aligned} f = & 2 \left(a\psi_0^2 + \frac{b}{2}\psi_0^4 + \frac{1}{2m^*}q^2\psi_0^2 \right) + 2\psi_0^2 \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\eta''q^2 + 2\mathbf{d}_I \cdot \mathbf{q}}{\epsilon + \eta'q^2} \right)^2}} \frac{(\epsilon + \eta'q^2)^2 + (\eta''q^2 + 2\mathbf{d}_I \cdot \mathbf{q})^2}{\epsilon + \eta'q^2} \\ = & 2 \left(a\psi_0^2 + \frac{b}{2}\psi_0^4 + \frac{1}{2m^*}q^2\psi_0^2 \right) + 2\psi_0^2(\epsilon + \eta'q^2) \sqrt{1 + \left(\frac{\eta''q^2 + 2\mathbf{d}_I \cdot \mathbf{q}}{\epsilon + \eta'q^2} \right)^2} \end{aligned} \quad (2.50)$$

という関係を得る。自由エネルギーが最も低くなるのは q と d_I が同じ方向、もしくは反対方向を向いているときである。 $|q|$ が十分小さいとすると、自由エネルギーは

$$\begin{aligned} f \approx & 2 \left(a\psi_0^2 + \frac{b}{2}\psi_0^4 + \frac{1}{2m^*}q^2\psi_0^2 \right) + 2\psi_0^2(\epsilon + \eta'q^2) \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{2d_I q}{\epsilon} \right)^2 \right] \\ \approx & 2 \left(a\psi_0^2 + \frac{b}{2}\psi_0^4 + \epsilon\psi_0^2 \right) + \left(\frac{1}{m^*} + 2\eta' + \frac{4d_I^2}{\epsilon} \right) \psi_0^2 q^2 \end{aligned} \quad (2.51)$$

と近似できる。 q^2 の前の係数の符号が正ならば $q = 0$ の解が安定である。一方、係数が負になると $q = 0$ の解が不安定になり $q \neq 0$ の解が実現することになる。 $\epsilon < 0$ の場合は、

$$d_I^2 > -\frac{\epsilon}{4} \left(\frac{1}{m^*} + 2\eta' \right) \longrightarrow q \neq 0 \quad (2.52)$$

$$d_I^2 < -\frac{\epsilon}{4} \left(\frac{1}{m^*} + 2\eta' \right) \longrightarrow q = 0 \quad (2.53)$$

という分類を得ることができる。すなわち Lifshitz 不変量の係数 d_I が十分小さければ $q = 0$ の解が安定になる。 d_I が閾値 $\sqrt{-\frac{\epsilon}{4} \left(\frac{1}{m^*} + 2\eta' \right)}$ を超えると $q \neq 0$ の解に転移する。このような $q \neq 0$ の状態は、ペア密度波と呼ばれる。

Lifshitz 不変量は空間微分を一つしか含まないため、通常は空間反転対称性が破れた系で現れると考えられている。空間反転対称性があると、空間反転によって $\nabla \rightarrow -\nabla$ となり Lifshitz 項は不変にならず、自由エネルギーに現れることはないと思われる。しかし、例えば空間反転によって秩序パラメーターが $\psi_1 \rightarrow \psi_2, \psi_2 \rightarrow \psi_1$ のように入れ替わることが起きるとすると、Lifshitz 項は空間反転に対して不変になる。

$$\mathbf{d} \cdot (\psi_1^\dagger \nabla \psi_2 - \psi_2^\dagger \nabla \psi_1) \rightarrow \mathbf{d} \cdot (\psi_2^\dagger (-\nabla) \psi_1 - \psi_1^\dagger (-\nabla) \psi_2) = \mathbf{d} \cdot (\psi_1^\dagger \nabla \psi_2 - \psi_2^\dagger \nabla \psi_1) \quad (2.54)$$

実際に、秩序パラメーター ψ_1 と ψ_2 が空間反転で入れ替わるようなミクロな模型を作ることができる [36, 37]。この例は、系に空間反転対称性があったとしても Lifshitz 不変量は存在する場合があることを示している。Lifshitz 不変量が存在するかどうかは群論によって分類することができる [37]。系の対称性 (群) が与えられたときに、秩序パラメーターがどのような群の表現に属するかを同定する。また、空間微分 ∇ がどのような表現に従っているかも調べることができる。それぞれの表現を $[\psi_1], [\psi_2], [\nabla]$ とおいたときに、もし $[\psi_1] \otimes [\nabla] \otimes [\psi_2]$ が自明表現を含んでいれば Lifshitz 不変量が存在する可能性があり、自明表現を含んでいなければ Lifshitz 不変量は存在し得ないことがいえる。全ての空間点群に対してこの分類は調べられており、秩序パラメーター ψ_1, ψ_2 がどのような表現の組 $[\psi_1], [\psi_2]$ に属していれば Lifshitz 不変量が存在し得るかがわかっている [37]。応用例として、カゴメ格子上の超伝導体は空間反転対称性があり Lifshitz 不変量は存在しないが、カゴメ格子超伝導体に 3Q パターンと呼ばれる電荷密度波状態 (あるいはボンド秩序状態) が共存すると空間反転対称性を保ちつつ Lifshitz 不変量が存在できるようになる。

2.2.5 時間依存 GL 理論にまつわる問題

最後に時間依存 GL 理論の問題点について触れておく。時間依存 GL 理論をミクロから正当化するには、励起された準粒子が素早く緩和して秩序パラメーターのみのダイナミクスで系の時間発展が記述される状況を考える必要がある。要は時間依存 GL 理論には秩序パラメーターの時間変化しか情報として入っていないので、そこに含まれない準粒子の励起などが現れると困るのである。ところが、秩序パラメーターの時間変化のスケールはちょうど Higgs モードの固有エネルギー $\omega_H = 2\Delta$ (の逆数) で与えられる。秩序パラメーターを時間変化させようとする 2Δ くらいエネルギースケールの励起を考えることになり、エ

エネルギーが 2Δ を超えると準粒子励起が始まるので、秩序パラメーターのダイナミクスと準粒子励起は切っても切り離せない関係にある。また、励起された準粒子の緩和時間は通常 $(2\Delta)^{-1}$ よりも長くなるので、秩序パラメーターが振動する間に準粒子が緩和し切ることもない。こうして秩序パラメーターのダイナミクスを考えようとする、どうしても準粒子励起の効果を取り込んだ理論を考える必要が出てくる。そこで、ミクロな視点からは問題のある時間依存 GL 理論に取って代わって、より微視的な理論によって非平衡超伝導を理解しようとする動機が湧いてきて、次の章で議論することになる。

ところで、集団励起モードである Higgs モードのギャップ ω_H と、個別励起モードである準粒子励起のギャップ 2Δ が一致するのはなぜだろうか？ミクロな計算をするとそうなるというのはわかっているが、それ以上の深い理由は実は知られていない。南部先生が昔この関係に注目されたことがあり、Higgs モードはボソンであり準粒子はフェルミオンなので、統計性の異なる粒子の質量 (ギャップ) に関係があるということで、超対称性の文脈で議論された [38](南部関係式や南部総和則と呼ばれる)。最近では $\omega_H = 2\Delta$ という関係は平均場近似に由来する偶然的なものであり、平均場近似を超えて強相関効果を取り込むと ω_H は 2Δ からずれる場合があるという報告もある [39]。いずれにせよ、Higgs モードのギャップがどのような機構で決まっているのかをもっと深く理解する必要があるだろう。

第3章 ミクロからの非平衡超伝導

ここまではマクロに粗視化された時間依存 GL 理論の現象論に基づいて超伝導体のダイナミクスを議論してきたが、前章で述べたように不満な点があるため、次に微視的な理論でどのように記述されるかを見ていこう。

3.1 BCS 理論

非平衡状態を議論する前に、平衡状態の話をも復習しておく。超伝導体の微視的な記述は BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) 理論によって与えられる [14]。BCS 理論によると、超伝導状態ではフォノンなどに媒介されて電子間に有効的な引力相互作用が働き、運動量 k 、スピン \uparrow の電子と $-k$ 、 \downarrow の電子がペア (Cooper 対) を作って凝縮する。BCS に従い、電子間の相互作用としてペアとペアの間の散乱の行列要素だけをとると、

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \frac{V}{N} \sum_{kk'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \quad (3.1)$$

というハミルトニアンになる。ここで ε_k は Fermi エネルギーから測った電子の運動エネルギー (分散関係)、 $-V (< 0)$ は引力相互作用の大きさ、 N は離散化された波数 k の個数、 $c_{k\sigma}^\dagger$ ($c_{k\sigma}$) は電子の生成 (消滅) 演算子を表し、反交換関係 $\{c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{k,k'} \delta_{\sigma\sigma'}$, $\{c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}\} = \{c_{k\sigma}^\dagger, c_{k'\sigma'}^\dagger\} = 0$ を満たす。本当は引力相互作用が働くエネルギースケールはフォノンのカットオフ周波数程度までであるため、ハミルトニアンの第二項の波数の和は波数空間全体ではなく Fermi エネルギーからフォノンの周波数ほど離れた領域までに制限すべきであるが、ここでは簡略化のために波数空間全体で和を取ることにする。

平均場近似をすると、ハミルトニアンは次のように変形される。

$$H_{\text{BCS}} \simeq \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \frac{V}{N} \sum_{kk'} [\langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} + c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle] + \frac{V}{N} \sum_{kk'} \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \quad (3.2)$$

$\langle \dots \rangle$ は平衡状態での演算子の期待値を表す。最後の項は定数なので (エネルギーの絶対値を議論しない限り) は無視して構わない。ここで超伝導ギャップ関数を

$$\Delta = \frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \quad (3.3)$$

で定義する。 Δ は波数に依存しない定数であり、超伝導体の秩序パラメーターとみなせる。実際に $\Delta/V = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle$ は Cooper 対の凝縮密度を表し、Ginzburg-Landau 理論の $\psi(\mathbf{r})$ に相当する。 Δ を用いるとハミルトニアンは

$$H_{\text{BCS}} \simeq \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta^* c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \quad (3.4)$$

と表せる。これはまた、2成分南部スピノル

$$\psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

を使って

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \quad (3.6)$$

と書くこともできる。ここで $h_{\mathbf{k}}$ は 2×2 行列であり、

$$h_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta^* \\ -\Delta & -\varepsilon_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

と定義される。南部スピノルの成分 $\psi_{\mathbf{k}\alpha}$ ($\alpha = 1, 2$) が反交換関係 $\{\psi_{\mathbf{k}\alpha}, \psi_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\alpha\beta}$, $\{\psi_{\mathbf{k}\alpha}, \psi_{\mathbf{k}'\beta}\} = \{\psi_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger, \psi_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger\} = 0$ を満たすことを確認せよ。系が空間反転対称性を持つ場合は $\varepsilon_{-\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}$ を満たすので、以下ではこれを仮定しよう。 Δ の位相は自由に選ぶことができるので、 Δ は正の実数であるとする。

$h_{\mathbf{k}}$ を対角化することで準粒子のエネルギースペクトルを求めることができる。その固有値を $E_{\mathbf{k}\pm}$ とすると、

$$E_{\mathbf{k}\pm} = \pm \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2} \quad (3.8)$$

と与えられる。スペクトルは Fermi エネルギーの上下に二つに分離し、間にエネルギーギャップ 2Δ が開いていることになる。

Δ は自己無撞着に決めることができる。定義 (3.3) より

$$\Delta = \frac{\Delta + \Delta^*}{2} = \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr}[\rho \psi_{\mathbf{k}}^\dagger \tau_x \psi_{\mathbf{k}}] \quad (3.9)$$

である。ここで ρ は平衡状態の密度行列であり、

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_{\text{BCS}}} \quad (3.10)$$

で与えられる ($Z = \text{Tr} e^{-\beta H_{\text{BCS}}}$ は分配関数、 $\beta = 1/(k_B T)$ は逆温度)。また τ_x は Pauli 行列の x 成分である。式 (3.6) を代入すると

$$\Delta = \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{Z} \text{Tr} [e^{-\beta \sum_{\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'}^\dagger h_{\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger \tau_x \psi_{\mathbf{k}}] \quad (3.11)$$

となる。 $h_{\mathbf{k}}$ をユニタリー行列 $U_{\mathbf{k}}$ を用いて $h_{\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}} D_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}^\dagger$ と対角化すると ($D_{\mathbf{k}} = \text{diag}(E_{\mathbf{k}+}, E_{\mathbf{k}-})$ は対角行列)、ハミルトニアンは

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger D_{\mathbf{k}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}} \quad (3.12)$$

と表示される。ここでユニタリー変換されたスピノル演算子を

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}}^\dagger \psi_{\mathbf{k}} \quad (3.13)$$

と定義した。対角化された基底に移るとギャップ関数は

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\text{Tr} [e^{-\beta \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger D_{\mathbf{k}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger U_{\mathbf{k}}^\dagger \tau_x U_{\mathbf{k}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}]}{\text{Tr} [e^{-\beta \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger E_{\mathbf{k}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}}]}]} \\ &= \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ij=\pm} \frac{e^{-\beta D_{\mathbf{k}i}}}{1 + e^{-\beta D_{\mathbf{k}i}}} \delta_{ij} (U_{\mathbf{k}}^\dagger \tau_x U_{\mathbf{k}})_{ij} \\ &= \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} [f(D_{\mathbf{k}}) U_{\mathbf{k}}^\dagger \tau_x U_{\mathbf{k}}] \end{aligned} \quad (3.14)$$

と評価される。ここで $f(D_{\mathbf{k}}) = \text{diag}(f(E_{\mathbf{k}+}), f(E_{\mathbf{k}-}))$ は対角行列、 $f(\varepsilon) = 1/(e^{\beta\varepsilon} + 1)$ は Fermi 分布関数である。あとはトレースの中身を成分計算することで以下のギャップ方程式を得る。

$$\Delta = \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right) \quad (3.15)$$

ただし

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2} \quad (3.16)$$

とおいた。

絶対零度 ($T = 0$) ではギャップ関数は状態密度 $D(\varepsilon)$ を用いると

$$\Delta = \frac{V}{2} \int_{-\varepsilon_c}^{\varepsilon_c} d\varepsilon D(\varepsilon) \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \quad (3.17)$$

を満たす。ここでエネルギーのカットオフ ε_c (フォノンのカットオフ周波数に対応する) を導入した。Fermi エネルギー付近で状態密度は一定 ($D(\varepsilon) = D(\varepsilon_F)$) だと仮定すると、

$$\Delta = VD(\varepsilon_F)\Delta \sinh^{-1}\left(\frac{\varepsilon_c}{\Delta}\right) \quad (3.18)$$

と評価される。これを Δ について解くと

$$\Delta = \frac{\varepsilon_c}{\sinh\left(\frac{1}{VD(\varepsilon_F)}\right)} \quad (3.19)$$

という解を得る。引力が十分弱ければ ($VD(\varepsilon_F) \ll 1$)

$$\Delta \simeq 2\varepsilon_c \exp\left(-\frac{1}{VD(\varepsilon_F)}\right) \quad (3.20)$$

という近似式が得られる。 $V = 0$ の点で非解析的な関数になっていることに注意する。フォノンのカットオフ周波数が $\omega_c \approx$ 数 10 meV 程度であるので、ギャップ関数の大きさは \exp の因子で一桁ほど下がって $\Delta \approx$ 数 meV \approx 1 THz ほどになる。

有限温度の場合も同様に自己無撞着方程式を解くことができ、ある臨界温度 T_c 以下からギャップ関数が非ゼロの値をとる相転移現象が起こる。 T_c のスケールは $T = 0$ でのギャップ関数の値と同程度である。BCS 理論は超伝導体を持っている物理的性質の多くを説明することができる。特に電磁場に対する応答を記述することができて、電気抵抗がゼロになることや、マイスナー効果を示すことがいえる。また、臨界点近傍の領域において GL 理論を導出することも可能である (付録 A を参照)。

3.2 時間依存 BCS 理論

超伝導体のダイナミクスを微視的に扱うために、前述の BCS 理論に時間依存性を取り込むことを考えよう。出発点は南部スピノルの時間発展を記述する時間依存 Bogoliubov-de Gennes 方程式である¹。

$$i\partial_t\psi_{\mathbf{k}}(t) = h_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}(t) \quad (3.21)$$

南部スピノルが時間変化するのに伴ってギャップ関数 Δ も時間変化すると考えられるので、 $h_{\mathbf{k}}$ に含まれる Δ も時間に依存するとしよう。ただし、各時刻でギャップ関数は自己無撞着条件 (3.3) を満たしているべき

¹式 (3.21) を導出するにはラグランジアン $L = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger i\partial_t c_{\mathbf{k}\sigma} - H_{\text{BCS}}$ に立ち帰る必要がある。南部スピノルで時間微分項を書き直すとフェルミオンの反交換関係に注意して $L = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger i\partial_t \psi_{\mathbf{k}} - H_{\text{BCS}}$ となるので、あとは $\psi_{\mathbf{k}}$ に関して Euler-Lagrange 方程式を立てればよい。

である。このように各時刻で秩序パラメーターを自己無撞着に決めながら時間発展させる方法が時間依存平均場理論の考え方である。

ギャップ関数の時間発展を求めるために、以下のような同時刻の2点相関関数を用意しておくとお利便である。

$$\sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t) = \frac{1}{2} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \tau_{\alpha} \psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle \quad (\alpha = x, y, z) \quad (3.22)$$

ここで $\langle \dots \rangle$ は初期時刻の密度行列に関する平均を表す (Heisenberg 描像をとっている)。時間発展していくと τ_x の成分だけでなく τ_y, τ_z の成分も絡んでくるので²、全ての成分の時間発展を同時に追う必要がある。 $\sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}$ はちょうど南部スピノルで定義されるスピン演算子の期待値の形をしているので、Anderson の擬スピンと呼ばれている。

擬スピンの時間発展は

$$\partial_t \sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha} = \frac{1}{2} \langle \partial_t \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \tau_{\alpha} \psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \tau_{\alpha} \partial_t \psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle = \frac{i}{2} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) [h_{\mathbf{k}}(t), \tau_{\alpha}] \psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle \quad (3.23)$$

で与えられる。ギャップ関数 $\Delta(t)$ の実部を $\Delta'(t)$ 、虚部を $\Delta''(t)$ とおくと、 $h_{\mathbf{k}}(t)$ (3.7) は

$$h_{\mathbf{k}}(t) = \varepsilon_{\mathbf{k}} \tau_z - \Delta'(t) \tau_x - \Delta''(t) \tau_y \quad (3.24)$$

と表せる。Pauli 行列が満たす交換関係 $[\tau_{\alpha}, \tau_{\beta}] = 2i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \tau_{\gamma}$ を用いると、擬スピンの運動方程式は

$$\partial_t \sigma_{\mathbf{k}}(t) = 2\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) \times \sigma_{\mathbf{k}}(t) \quad (3.25)$$

とコンパクトにまとめられる。ここで

$$\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) = (-\Delta'(t), -\Delta''(t), \varepsilon_{\mathbf{k}}) \quad (3.26)$$

と定義した。式 (3.25) は、擬スピン $\sigma_{\mathbf{k}}(t)$ に有効磁場 $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t)$ が働いたときに起きる歳差運動を表す Bloch 方程式の形をしている。ただし有効磁場 $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t)$ にはギャップ関数 $\Delta(t)$ が含まれており、自己無撞着に決める必要がある。自己無撞着条件 (3.3) は擬スピンの言葉で書くと

$$\Delta'(t) = \frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sigma_{\mathbf{k}}^x(t), \quad \Delta''(t) = \frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sigma_{\mathbf{k}}^y(t) \quad (3.27)$$

²南部スピノルが2成分を持つことに対応して、本当は2点相関関数は $2 \times 2 = 4$ 成分を持つ。残りの独立な成分は $\sigma_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{2} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \tau_0 \psi_{\mathbf{k}} \rangle$ (ただし τ_0 は 2×2 の単位行列) であるが、実は $\sigma_{\mathbf{k}}^0$ は時間依存平均場近似の範囲では保存量になっていて、他の成分と混じることはない。そのため3成分の擬スピンで十分なのである。

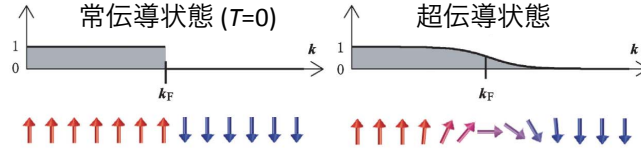


図 3.1: 常伝導状態と超伝導状態における擬スピンの構造と電子の運動量分布関数。

となる。擬スピンの運動方程式 (3.25) は一見すると時間に関する線形の微分方程式に見えるが、自己無撞着条件のために非線形な方程式になっていて、一般的に解くのは簡単ではない³。数値的に解く方法については付録 B を参照のこと。

3.2.1 線形化された擬スピンの運動方程式

ここでは擬スピンの平衡状態からのずれが十分小さいとして、ずれに関して方程式を線形化して解くことにしよう。まず平衡状態の擬スピンの解 $\sigma_{\mathbf{k},\text{eq}}$ を求めておく。前節の計算と同様のことをすると、

$$\sigma_{\mathbf{k},\text{eq}}^x = \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right) \quad (3.28)$$

$$\sigma_{\mathbf{k},\text{eq}}^y = 0 \quad (3.29)$$

$$\sigma_{\mathbf{k},\text{eq}}^z = -\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right) \quad (3.30)$$

という表示が得られる。ここで Δ は平衡状態におけるギャップ関数であり、自己無撞着条件 (3.15) によって決まっている。擬スピン $\sigma_{\mathbf{k},\text{eq}}$ を $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ の関数だと思って $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ の軸に沿って擬スピンを並べると、常伝導状態では図 reffig: pseudospin のようなドメイン構造の配置をとる。電子が占有されているエネルギーでは擬スピンは z 軸の上向きに揃っており、非占有のエネルギーでは下向きに揃っている。超伝導状態になると、ドメイン壁の近くで擬スピンが x 軸方向に傾いてねじれた構造になる。一般に擬スピンの z 成分は各波数 \mathbf{k} に対する準粒子の占有密度 (運動量分布関数) を表し、 x, y 成分は位相の情報も含めた Cooper 対の密度に相当する。

擬スピンの平衡状態からのずれを $\sigma_{\mathbf{k}}(t) = \sigma_{\mathbf{k},\text{eq}} + \delta\sigma_{\mathbf{k}}(t)$ 、ギャップ関数の平衡値からのずれを $\Delta(t) = \Delta + \delta\Delta(t)$ と書くことにする。簡単のため、平衡状態は絶対零度 ($T = 0$) にとっておく。ギャップ関数の位相の変化はゲージ変換によって吸収することができるので、ここでは $\Delta(t)$ は常に実数であるとする。初期

³実はこの方程式は可積分構造を持つことが知られており、線形化せずに厳密に解くこともできる [40, 41]。

時刻に擬スピンの配位が平衡状態のものから少しだけずれたとしよう ($\sigma_{\mathbf{k}}(0) = \sigma_{\mathbf{k},\text{eq}} + \delta\sigma_{\mathbf{k}}(0)$)。その後の時間発展は、ずれに関して線形化した以下の方程式に従う。

$$\partial_t \delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t) = -2\varepsilon_{\mathbf{k}} \delta\sigma_{\mathbf{k}}^y(t) \quad (3.31)$$

$$\partial_t \delta\sigma_{\mathbf{k}}^y(t) = 2\varepsilon_{\mathbf{k}} \delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t) + 2\Delta \delta\sigma_{\mathbf{k}}^z(t) - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \delta\Delta(t) \quad (3.32)$$

$$\partial_t \delta\sigma_{\mathbf{k}}^z(t) = -2\Delta \delta\sigma_{\mathbf{k}}^y(t) \quad (3.33)$$

(3.31) と (3.32) から $\delta\sigma_{\mathbf{k}}^y(t)$ を消去すると

$$\partial_t^2 \delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t) = -2\varepsilon_{\mathbf{k}} \partial_t \delta\sigma_{\mathbf{k}}^y(t) = -2\varepsilon_{\mathbf{k}} \left(2\varepsilon_{\mathbf{k}} \delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t) + 2\Delta \delta\sigma_{\mathbf{k}}^z(t) - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \delta\Delta(t) \right) \quad (3.34)$$

となる。さらに (3.31) と (3.33) から $\Delta \delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t) = \varepsilon_{\mathbf{k}} \delta\sigma_{\mathbf{k}}^z(t)$ が成り立つことがわかるので、 $\delta\sigma_{\mathbf{k}}^z(t)$ を消去して $\delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t)$ に関する

$$\partial_t^2 \delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t) = -4E_{\mathbf{k}}^2 \delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t) + \frac{2\varepsilon_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \delta\Delta(t) \quad (3.35)$$

という方程式が導かれる。これと自己無撞着条件 $\delta\Delta(t) = \frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t)$ を連立して解けばよい。そのためフーリエ変換 $\delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(\omega) = \int dt e^{i\omega t} \delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t)$, $\delta\Delta(\omega) = \int dt e^{i\omega t} \delta\Delta(t)$ を行うと、

$$\delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(\omega) = \frac{2\varepsilon_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}(4E_{\mathbf{k}}^2 - \omega^2)} \delta\Delta(\omega) \quad (3.36)$$

という関係が得られる。これと自己無撞着条件 $\delta\Delta(\omega) = \frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(\omega)$ を組み合わせると、非自明な解が存在するためには

$$\frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{2\varepsilon_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}(4E_{\mathbf{k}}^2 - \omega^2)} = 1 \quad (3.37)$$

という条件が満たされる必要がある。この条件は Anderson によって指摘されたものと等価である。式 (3.37) に $\omega = 2\Delta$ を代入するとギャップ方程式 (3.15) と一致するので、周波数 $\omega = 2\Delta$ の固有振動モードが存在することがわかる。この振動モードはギャップ関数の振幅の振動に対応するので、Ginzburg-Landau 理論の章で議論した Higgs モードに相当する。このように Higgs モードの存在については 1958 年に Anderson によって指摘されており、素粒子物理の文脈で Higgs 粒子の存在を予言した 1964 年の Higgs の論文よりも先ということになる。

3.2.2 相互作用クエンチ

Higgs モードの振動の様子を見るために、もう少し具体的な設定を考えよう。簡単な設定として、平衡状態 ($T = 0$) からスタートして相互作用パラメーターの値を突然 $t = 0$ で時間的に変化 (クエンチ) させて ($V(t) = V(0) + \delta V$ ($t > 0$)) ダイナミクスを誘起することを考える。擬スピンの運動方程式は (3.31)-(3.33) と同じであるが、自己無撞着条件が以下のように少し変わる。

$$\delta\Delta(t) = \frac{\Delta}{V}\delta V(t) + \frac{V}{N}\sum_{\mathbf{k}}\delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(t) \quad (3.38)$$

Volkov-Kogan の方法 [42] に基づいて、ラプラス変換を用いて方程式を解くことにする。 $\delta\sigma_{\mathbf{k}}(s) = \int_0^\infty dt e^{-st}\delta\sigma_{\mathbf{k}}(t)$ 、 $\delta\Delta(s) = \int_0^\infty dt e^{-st}\delta\Delta(t)$ とおくと、フーリエ変換の場合と同様に

$$s^2\delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(s) = -4E_{\mathbf{k}}^2\delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(s) + \frac{2\varepsilon_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}}\delta\Delta(s) \quad (3.39)$$

$$\delta\Delta(s) = \frac{\Delta}{V}\frac{\delta V}{s} + \frac{V}{N}\sum_{\mathbf{k}}\delta\sigma_{\mathbf{k}}^x(s) \quad (3.40)$$

という関係が得られる。これを $\delta\Delta(s)$ について解くと、

$$\delta\Delta(s) = \left(1 - \frac{V}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{2\varepsilon_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}(s^2 + 4E_{\mathbf{k}}^2)}\right)^{-1}\frac{\Delta}{V}\frac{\delta V}{s} \quad (3.41)$$

となる。上式の “1” にギャップ方程式 $1 = \frac{V}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{2E_{\mathbf{k}}}$ を代入すると、

$$\delta\Delta(s) = \left(\frac{V}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{2E_{\mathbf{k}}(s^2 + 4E_{\mathbf{k}}^2)}\right)^{-1}\frac{\Delta\delta V}{s(s^2 + 4\Delta^2)V} \quad (3.42)$$

という表式が得られる。ここで積分公式

$$\begin{aligned} \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{2E_{\mathbf{k}}(s^2 + 4E_{\mathbf{k}}^2)} &= D(\varepsilon_F)\int_{-\varepsilon_c}^{\varepsilon_c}d\varepsilon\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}(s^2 + 4\varepsilon^2 + 4\Delta^2)} \\ &= D(\varepsilon_F)\frac{1}{s\sqrt{s^2 + 4\Delta^2}}\sinh^{-1}\left(\frac{s}{2\Delta}\right) \end{aligned} \quad (3.43)$$

を用いると

$$\frac{\delta\Delta(s)}{\Delta} = \frac{1}{\sqrt{s^2 + 4\Delta^2}\sinh^{-1}\left(\frac{s}{2\Delta}\right)}\frac{1}{VD(\varepsilon_F)}\frac{\delta V}{V} \quad (3.44)$$

と表せる。最後にラプラス逆変換をすることで $\delta\Delta(t)$ を求めることができる。この部分は省略するが、鞍点法を使うことで長時間における振る舞いを評価することができる。

$$\frac{\delta\Delta(t)}{\Delta} \simeq \frac{1}{VD(\varepsilon_F)}\frac{\delta V}{V}\left(1 - \frac{2}{\pi^{3/2}\sqrt{\Delta t}}\cos\left(2\Delta t + \frac{\pi}{4}\right)\right) \quad (3.45)$$

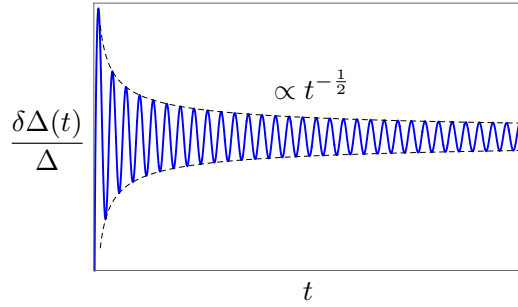


図 3.2: 相互作用パラメーターをクエンチした時に誘起される超伝導ギャップの振動が減衰していく様子。

この結果より、超伝導ギャップの振幅が相互作用クエンチ後に周波数 2Δ で振動することがわかる。これは前節で見たように Higgs モードの固有エネルギーが 2Δ であることと整合する。振動中心は相互作用クエンチの変化に伴って平衡値からずれる。振動の振幅は長時間領域で $t^{-1/2}$ に比例して冪的にゆっくり減衰していく (図 3.2)。実験的にはテラヘルツポンプ・プローブ分光によって、ポンプ光の効果クエンチとみなすことで超伝導ギャップが 2Δ の周期で振動しながら減衰していく様子が観測されている [26]。

物理的には、プラズマ物理における Landau 減衰の類似として理解することができる。時間依存 BCS 方程式には衝突項がないため準粒子散乱による緩和は存在しないように見えるが、各擬スピンは波数 k に依存した周波数 $2E_k = 2\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}$ で振動する。準粒子励起に必要なエネルギーが $2E_k$ であり、その中で最も低いエネルギーが Higgs モードの周波数 2Δ に等しい。ギャップ関数は擬スピンを各波数について和をとったものであるため、位相緩和によってギャップの振動が減衰する。このように衝突なしに緩和が起こる機構は、Landau 減衰として知られているものがある。ただし、ギャップ関数の振動が緩和してもシステム全体としては熱平衡化しない。これは時間依存 BCS 理論が可積分性を持つことに由来しており [40, 41]、保存量がたくさん存在することで長時間経っても熱平衡化が妨げられる。

ここまでは擬スピンの平衡状態からのずれが十分小さいことを仮定したが、相互作用クエンチ ($V = V_i \rightarrow V_f$) が微小ではなく有限の値になるとさらに豊富なダイナミクスを示す。そのような振る舞いを解析するには、可積分性を利用して厳密解を調べるか、数値計算によって非線形方程式を解く必要がある。

V_i を固定して V_f を増加させていくと ($V_f > V_i$)、最初は微小クエンチの場合と同様に擬スピンの振動の位相がずれてギャップ関数の振動は減衰する。ところが、ある点 ($V_f = V_{c1}$) を超えると擬スピンの振動が同期してギャップ関数の振動が減衰せずに持続する。古典系で非線形振動子が同期現象を示すことがよく知られているが、量子系においても非線形方程式が現れて似たような同期現象が起こる。

一方で V_i を固定して V_f を減少させていくと ($V_f < V_i$)、やはり最初は微小クエンチと同様にギャップ関数は振動しながら減衰していく。特に、系がクエンチ後に熱平衡化したとしたらギャップ関数の値はゼロに漸近するはずなのに、ギャップ関数の値が非ゼロの値にとどまり続ける領域 (非熱的固定点) が存在する。ある点 ($V_f = V_{c2}$) を超えるとギャップ関数は過減衰の振る舞いを示すようになり、長時間極限でギャップ関数はゼロに近づく。このときギャップ関数 (すなわち秩序パラメーター) は消えるにも関わらず、超流動成分に対応する相関関数の非対角要素 (擬スピンの xy 成分) は有限の値をとることが起きる。これも、長時間で系が熱平衡化せず非平衡特有の相が存在することを意味する。

3.2.3 振動電場による駆動

次に光などの振動電場によって超伝導体が駆動された場合を見てみよう。振動電場 $E(t)$ をベクトルポテンシャル $A(t) = A_0 \sin \Omega t$ ($E(t) = -\partial_t A(t)$) によって導入する。振動電場と電子の間の相互作用はゲージ変換で不変になることを要請すると Peierls 位相の形になり、BCS ハミルトニアンは時間に依存した以下の式で与えられる。

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}-A(t)} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta(t) c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta^*(t) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \quad (3.46)$$

ここから南部スピノルの運動方程式を求めると時間依存 BdG 方程式 (3.21) になるが、 $h_{\mathbf{k}}(t)$ は

$$h_{\mathbf{k}}(t) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}-A(t)} & -\Delta^*(t) \\ -\Delta(t) & -\varepsilon_{\mathbf{k}+A(t)} \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

に置き換わる。この物理的な意味は以下の通りである。南部スピノルの第一成分は \uparrow スピンの電子に、第二成分は \downarrow スピンの正孔に対応する。電子と正孔は互いに逆符号の電荷を持っているため、 $h_{\mathbf{k}}$ の対角要素に含まれる $A(t)$ の前の符号が (1, 1) 成分と (2, 2) 成分で逆になっている。超伝導状態においては電子と正孔が混成し、その強さが $h_{\mathbf{k}}(t)$ の非対角成分に表れている。

時間依存 BdG 方程式から Anderson 擬スピン σ_k に対する運動方程式を導くとやはり Bloch 方程式 (3.25) の形になるが、擬スピんに働く有効磁場は

$$\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) = (-\Delta'(t), -\Delta''(t), \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}-A(t)} + \varepsilon_{\mathbf{k}+A(t)}}{2}) \quad (3.48)$$

となる。振動電場の効果は有効磁場の z 成分に表れる。 $b_{\mathbf{k}}^z(t)$ は $A(t)$ について偶関数のため、電場に線形な項は出てこないことがわかる。主要な結合は電場の 2 乗の形になっており、GL 理論で見たように秩序パラメーターが 2 光子吸収のプロセスを介して電場と非線形に結合することと整合する。

Bloch 方程式 (3.25) を電場の 2 乗に関して線形化することで、クエンチの問題と同様に運動方程式を解析的に解くことができる。詳細は省略するが、十分長時間の領域で以下のような結果が得られる [43]。

$$\begin{aligned} \frac{\delta\Delta(t)}{\Delta A_0^2} \simeq & \frac{1}{4VD(\varepsilon_F)} \left(1 - \frac{2}{\pi^{3/2}\sqrt{\Delta t}} \frac{\Omega^2}{\Omega^2 - \Delta^2} \cos(2\Delta t + \frac{\pi}{4}) \right) \\ & + \frac{1}{4} (\cos 2\Omega t - 1) - \frac{1}{4VD(\varepsilon_F)} \begin{cases} \frac{\Omega}{\sqrt{\Delta^2 - \Omega^2}} \frac{\cos(2\Omega t)}{\sin^{-1}(\frac{\Omega}{\Delta})} & (\Omega < \Delta) \\ \frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 - \Delta^2}} \frac{\cos(2\Omega t - \varphi)}{\sqrt{[\cosh^{-1}(\frac{\Omega}{\Delta})]^2 + (\frac{\pi}{2})^2}} & (\Omega > \Delta) \end{cases} \end{aligned} \quad (3.49)$$

ここで $\varphi = \tan^{-1} \left(\frac{\pi/2}{\cosh^{-1}(\frac{\Omega}{\Delta})} \right)$ は位相シフトを表す。

ギャップ関数の平衡値からのずれ $\delta\Delta(t)$ は電場の 2 乗 (A_0^2) に比例している。式 (3.49) の右辺第一項は相互作用クエンチの効果を表している。実際、高周波数の極限 ($\Omega \rightarrow \infty$) を考えると、相互作用パラメータを $V \rightarrow V + \frac{1}{4}A_0^2V$ のように変化させた時のクエンチの結果 (3.45) と等価になる。一般に振動電場によって駆動された電子は Floquet 状態と呼ばれる電場の衣を着た準粒子に変化する [44]。cos 型の分散を持つ単一バンドの自由電子系では、Floquet 状態になると電子のホッピングは Bessel 関数の因子 $J_0(A_0)$ 倍になることが知られている。ホッピングの大きさが減少するため相対的に引力の大きさが増大し、相互作用をクエンチした効果に読み替えることができる。

時間が十分経過するとクエンチの寄与は $t^{-1/2}$ に比例して減衰していく。長時間後に到達する定常状態においては式 (3.49) の右辺第二項と第三項が生き残り、 $\delta\Delta(t)$ は 2Ω の周波数で振動する。特に $2\Omega = 2\Delta$ のときに第三項が発散的に増幅し、Higgs モードと振動電場の間で共鳴が起こる。これは GL 理論の結果と定性的に同様である。図 3.3 に $\delta\Delta(t)$ の振幅と位相を $2\Omega/2\Delta$ の関数としてプロットした。2 光子吸収で得られるエネルギー 2Ω が Higgs モードのエネルギー 2Δ に近づくにつれて、ギャップ関数の振動の振幅が $|2\Omega - 2\Delta|^{-1/2}$ に比例して発散する。GL 理論では $|2\Omega - 2\Delta|^{-1}$ に比例していたので、発散の冪が少し弱まったことになる。これは、BCS 理論では秩序パラメータだけではなく準粒子が励起される効果も取り込まれ、Higgs モードが Landau 減衰と類似の形で準粒子に緩和することで発散が弱められたと解釈することができる。 2Ω 振動の位相は共鳴点 ($2\Omega = 2\Delta$) を境に $\pi/2$ だけジャンプする。これらの振る舞いは、Higgs モードが BCS 理論においては極ではなく分岐点に対応することを意味する。

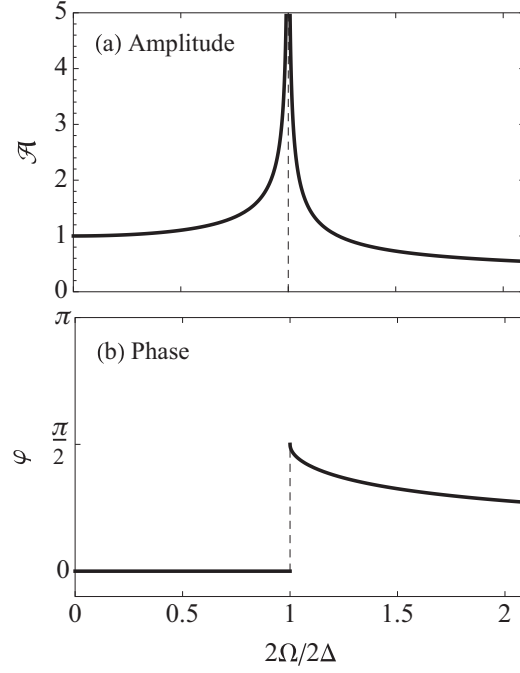


図 3.3: 超伝導ギャップの 2Ω 振動の振幅 (a) と位相シフト (b) を $2\Omega/2\Delta$ の関数でプロットしたもの [43]。

3.2.4 3 次高調波の共鳴

Higgs モードの共鳴がカレントにどのような影響があるかを見ておこう。カレント $j(t) = \sum_{k\sigma} v_{k-A(t)} \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle$ は擬スピンを使って次のように表せる。

$$\begin{aligned}
 j(t) &= \sum_{\mathbf{k}} [v_{\mathbf{k}-A(t)} - v_{\mathbf{k}+A(t)}] \sigma_{\mathbf{k}}^z(t) \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{k}} [v_{\mathbf{k}-A(t)} + v_{\mathbf{k}+A(t)}] \sigma_{\mathbf{k}}^0(t)
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

ここで $v_{\mathbf{k}} = \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}$ は群速度、 $\sigma_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{2} \langle \psi_{\mathbf{k}}^\dagger \tau_0 \psi_{\mathbf{k}} \rangle$ は保存量であり $A(t)$ には依存しない。簡単のために 3 次元の立方格子上で tight-binding 模型を考えて、分散 $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t_{\text{hop}} \sum_{\alpha} \cos k_{\alpha}$ を持つとしよう (t_{hop} はホッピングパラメーター)。さらに $A(t)$ は $(1, 1, 1)$ 方向を向いているとして $A(t) = A(t)(1, 1, 1)$ 、 $j(t) = j(t)(1, 1, 1)$ とおく。カレント $j(t)$ を $A(t)$ について 3 次まで展開する ($j(t) = j^{(1)}(t) + j^{(3)}(t) + O(A^5)$)。線形応答成分は London 方程式 (2.5) と同じ形で与えられる。

$$j^{(1)}(t) = 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \sigma_{\mathbf{k}}^z(0) A(t) = -KA(t) \tag{3.51}$$

ここで K は Meissner の重みである。3 次の非線形成分は

$$\begin{aligned} j^{(3)}(t) &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \delta \sigma_{\mathbf{k}}^z(t) A(t) + \frac{K}{6} A(t)^3 \\ &= \frac{2}{V} \Delta \delta \Delta(t) A(t) + \frac{K}{6} A(t)^3 \end{aligned} \quad (3.52)$$

となる。最後の行を得るために $\varepsilon_{\mathbf{k}} \delta \sigma_{\mathbf{k}}^z(t) = \Delta \delta \sigma_{\mathbf{k}}^x(t)$ という関係を使った。GL 理論において 3 次のカレントの成分が AH に比例していた (式 (2.30) を参照) のと同様に $j^{(3)}(t)$ の初項が $\delta \Delta(t)$ に比例しているの、 $2\Omega = 2\Delta$ において Higgs モードの共鳴が起こるとその振幅は $|2\Omega - 2\Delta|^{-1/2}$ に比例して発散的に増大する。この現象は、超伝導体 NbN に対してテラヘルツ光を照射して透過光を測定をすることで実験的に観測されている [27]。

発散の冪の違いを除いて GL 理論と定性的に同じ結果が得られるので、これでめでたしと言いたいところだが、実は話はまだ終わらない。上の議論では立方格子を例にとり、光の電場が $(1, 1, 1)$ 方向に偏光していることを仮定したが、違う偏光方向を考えたり別の格子構造を考えたりするとカレントの 3 次成分は式 (3.52) のように $\delta \Delta(t)$ だけを用いた形には書けない。一般にカレントの非線形成分には秩序パラメータの振幅の変化 $\delta \Delta(t)$ 以外に、Cooper 対破壊による個別の準粒子励起の寄与も含まれる。準粒子励起は Higgs モードと同じギャップ 2Δ を持ち 2 光子吸収で活性のため、 $2\Omega = 2\Delta$ に 3 次高調波の共鳴を引き起こす。さらに、一般の格子構造や偏光方向を考えると、3 次高調波の共鳴に対して準粒子励起の方が Higgs モードより圧倒的に大きな寄与を与えるということが指摘された [45]。

それでは実験で観測された 3 次高調波の共鳴は準粒子励起の寄与によって支配されているのだろうか？ 準粒子励起の寄与が支配的だとすると、3 次高調波の強度は光の偏光方向に大きく依存するはずである。準粒子は結晶中で非等方的な分散関係を持っているためである。一方で Higgs モード由来だとすると、3 次高調波の強度は偏光方向に依らず等方的になる。実際に実験で 3 次高調波の偏光方向依存性を測ると、その強度はほとんど偏光方向には依らないという結果が得られた [46]。ここで理論と実験の間の齟齬が露わになった。

この問題は不純物効果を考えることによって解決される [5]。電子と光の間の相互作用は常磁性結合 ($p \cdot A$ 型) と反磁性結合 (A^2 型) に分けることができる。不純物がない clean 極限では常磁性結合はなくなり、反磁性結合のみからくる Higgs モードの寄与は準粒子に対して大きく抑制される。一方、不純物が存在する場合は常磁性結合からくる準粒子、Higgs モードの寄与が増加し、第一原理計算とモデル計算を組み合わせる方法によって超伝導体 NbN については 3 次高調波の共鳴は主に Higgs モードが担っていることがわかつ

ている [47]。

それでは他の超伝導体の場合はどうだろうか？不純物があるときに、何が Higgs モードと準粒子の寄与の比率を決めているのだろうか？物質の詳細に依らない普遍的な法則はあるのだろうか？これらの問いに対しては未だに満足な答えが得られていない。物質ごとにケースバイケースで数値計算をするだけでなく、解析的に 3 次高調波の感受率を評価をすることが望まれるが、将来課題になっている。

第4章 量子多体傷跡状態と非平衡超伝導

非平衡状態において超伝導を誘起することを考える時には、熱化の問題を避けて通ることはできない。一般的な量子多体系のハミルトニアンを考えると、その固有状態は物理量の期待値を見る限りにおいては熱平衡状態と区別できないと期待されており、固有状態熱化仮説と呼ばれている [48, 49, 50]。これが正しいとすると、どんな励起状態を作ったとしてもいずれは熱平衡化してしまい、温度が上昇するだけで超伝導相関は抑えられる方向に向かう。長時間経っても熱平衡化せずに超伝導相関を保つような非平衡定常状態を作ることはいくらだろうか？

近年、非可積分なハミルトニアンにも関わらずその固有状態の中に熱平衡状態とは異なる非熱的な状態が存在する場合があることが見つかってきている [51, 52, 53, 54]。古典的なカオス系で見られる例外的な周期軌道との類似から量子多体傷跡状態と呼ばれている。その中には超伝導相関を示すものがあることが知られており、非平衡特有の超伝導状態が可能になる。ここではそれらのいくつかの例を紹介したい。

超伝導状態以外では、量子多体傷跡状態を持つ模型の代表例として以下が挙げられる。

- PXP 模型 [53, 55, 56]

$$H_{\text{PXP}} = \sum_j P_{j-1} X_j P_{j+1} \quad (4.1)$$

ただし $X_j = \sigma_j^x$, $P_j = (1 - \sigma_j^z)/2$, σ_j^x, σ_j^y はサイト j に作用する Pauli 行列 (スピン $\frac{1}{2}$ の演算子) である。

- AKLT 模型 [57, 58]

$$H_{\text{AKLT}} = \sum_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} + \frac{1}{3} \sum_j (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1})^2 \quad (4.2)$$

ただし $\mathbf{S}_j = (S_j^x, S_j^y, S_j^z)$ はサイト j に作用するスピン 1 の演算子。

- Spin-1 XY 模型 [59]

$$H_{\text{XY}} = J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + h \sum_j S_j^z + D \sum_j (S_j^z)^2 \quad (4.3)$$

ただし S_j^x, S_j^y, S_j^z はサイト j に作用するスピン 1 の演算子。

4.1 η ペアリング超伝導

4.1.1 Hubbard 模型と対称性

格子上で相互作用するフェルミオンの典型的なモデルである Hubbard 模型を考えよう。ハミルトニアンは以下で与えられる。

$$H = -t_{\text{hop}} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (4.4)$$

t_{hop}, U はそれぞれホッピング、相互作用パラメーターである。格子構造としては、 d 次元の立方格子を考える。 $\langle ij \rangle$ は最近接サイトのペアを表す。このモデルは 1 次元では可積分であるが、2 次元以上では非可積分であると考えられている。

ハミルトニアン (4.4) は粒子数保存に関する $U(1)$ 対称性とスピンの回転に関する $SU(2)$ 対称性を持っている。実はそれ以外に隠れた連続対称性が存在する。それを見るために η 演算子を導入する [60]。

$$\eta^+ = \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \quad (4.5)$$

$$\eta^- = \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \quad (4.6)$$

$$\eta^z = \frac{1}{2} \sum_j (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} - 1) \quad (4.7)$$

ここで $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \dots)$ 、 \mathbf{R}_j はサイト j の位置を表す。 $e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} = \pm 1$ (サイト一つおきに符号が反転する) となるので $e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} = e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j}$ であることに注意する。スピン演算子と同様に x, y 成分を $\eta^x = (\eta^+ + \eta^-)/2$, $\eta^y = (\eta^+ - \eta^-)/(2i)$ で定義する。 η 演算子は $SU(2)$ 代数を満たす。

$$[\eta^\alpha, \eta^\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \eta^\gamma \quad (\alpha, \beta, \gamma = x, y, z) \quad (4.8)$$

Hubbard 模型のハミルトニアンと η 演算子の間には次の交換関係が成り立つ。

$$\left[H - \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma}, \eta^\alpha \right] = 0 \quad (\alpha = x, y, z) \quad (4.9)$$

すなわち化学ポテンシャルが $\mu = \frac{U}{2}$ (half filling) の Hubbard 模型は η $SU(2)$ 対称性を持つ。それ以外の化学ポテンシャルの場合も粒子数を固定したセクターを考えればハミルトニアンと η 演算子は交換するため、やはり η $SU(2)$ 対称性を持つとしてよい。

交換関係 (4.9) は直接計算して確かめることができる¹ が、次のように説明することもできる。まず、Hubbard 模型はスピンの回転に関する SU(2) 対称性を持っている。

$$\left[H - \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma}, S^\alpha \right] = 0 \quad (\alpha = x, y, z) \quad (4.10)$$

後の便利のために化学ポテンシャル $\mu = \frac{U}{2}$ の項を含めておく。ここでス波変換を次のように定義する。

$$V c_{j\uparrow} V^\dagger = c_{j\uparrow} \quad (4.11)$$

$$V c_{j\downarrow} V^\dagger = e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} c_{j\downarrow}^\dagger \quad (4.12)$$

これはユニタリー変換の一種であり、下向きスピンの粒子だけを粒子正孔変換している。この変換によって Hubbard 模型のハミルトニアン $H = H(U)$ は

$$V \left[H(U) - \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma} \right] V^\dagger = H(-U) + \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma} - \frac{U}{2} L \quad (4.13)$$

と変換される。ここで L はサイト数を表す定数である。すなわちス波変換によって Hubbard 模型は (定数項を除いて) 相互作用パラメーターの符号が変わるのみで、その形は保たれる。一方、ス波変換によってスピン演算子は η スピン演算子に変化する。

$$V S^\alpha V^\dagger = \eta^\alpha \quad (\alpha = x, y, z) \quad (4.14)$$

このことから、ス波変換を用いて H とスピンの交換関係を η スピンの交換関係にうつすことができる。

$$0 = V \left[H(U) - \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma}, S^\alpha \right] V^\dagger = \left[H(-U) + \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma}, \eta^\alpha \right] \quad (4.15)$$

$-U$ を改めて U と置き直せば、交換関係 (4.9) を得ることができる。

η SU(2) は粒子数保存に関する U(1) 対称性を含んでいる。また、 η スピンの演算子とスピンの演算子は互いに可換である ($[S^\alpha, \eta^\beta] = 0$ ($\alpha, \beta = x, y, z$))。 η スピンとスピンの対称性を合わせれば、Hubbard 模型は全体として $\text{SO}(4) \simeq (\text{SU}(2) \times \text{SU}(2))/\mathbb{Z}_2$ の対称性を持つ [61]。ここで \mathbb{Z}_2 で割ったのは、 S^z と η^z の量子数の間に関係があるため $\text{SU}(2) \times \text{SU}(2)$ の表現のうち半分だけが実現できるためである²。

¹ $H_{\text{kin}} = -t_{\text{hop}} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.})$, $H_{\text{int}} = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ とおくと、 $[H_{\text{kin}}, \eta^+] = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{Q}-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger (\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{Q}-\mathbf{k}})$, $[H_{\text{int}}, \eta^+] = U \eta^+$, $[\sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \eta^+] = 2\eta^+$ が成り立つ。ここで $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t_{\text{hop}} \sum_{\alpha=1}^d \cos k_\alpha$ は 1 粒子の分散関係を表す。 $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \dots)$ のとき $\epsilon_{\mathbf{Q}-\mathbf{k}} = -\epsilon_{\mathbf{k}}$ であることに注意すると、 $[H_{\text{kin}} + H_{\text{int}} - \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \eta^+] = 0$ がいえる。 η^- についても同様である。 $\eta^z = \frac{1}{2}(N - L)$ であり、粒子数は保存するので $[H, \eta^z] = 0$ である。

² $S^z + \eta^z = \sum_j (n_{j\uparrow} - 1/2) = N_\uparrow - L/2$ (N_\uparrow は上向きスピンの数) であるため、例えばサイト数 L が偶数のときスピンと η スピンの z 成分の量子数の和は必ず整数値をとる。すなわち $\text{SU}(2) \times \text{SU}(2)$ の表現のうち Hubbard 模型で実現できるのはその半分ということになる。

次に η ペアリング状態を

$$|\psi_N\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_N}(\eta^+)^{N/2}|0\rangle \quad (4.16)$$

と定義する [60]。ここで $|0\rangle$ は真空であり、 N は粒子数、 $\mathcal{N}_N = \left(\frac{N}{2}\right)! \sqrt{\left(\frac{L}{N/2}\right)}$ は規格化定数である ($\langle\psi_N|\psi_N\rangle = 1$)。 η ペアリング状態は、 η スピンの大きさ $\eta^2 = (\eta^x)^2 + (\eta^y)^2 + (\eta^z)^2$ とその z 成分 η^z について次の値をもつ。

$$\eta^2|\psi_N\rangle = \frac{L}{2} \left(\frac{L}{2} + 1\right) |\psi_N\rangle \quad (4.17)$$

$$\eta^z|\psi_N\rangle = \frac{1}{2}(N - L)|\psi_N\rangle \quad (4.18)$$

各サイトに η スピン $\frac{1}{2}$ が並んでいるので、合成すると η スピンは最大で $\frac{L}{2}$ となる。 η ペアリング状態 $|\psi_N\rangle$ (4.16) は、この最大の η スピンを持つ状態ということになる (η スピンの強磁性状態)。

交換関係 (4.9) より、

$$\left(H - \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma}\right)|\psi_N\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_N}(\eta^+)^{N/2} \left(H - \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma}\right)|0\rangle = 0 \quad (4.19)$$

が成り立つことがわかる。 $|\psi_N\rangle$ は粒子数演算子 $N = \sum_{j\sigma} n_{j\sigma}$ の固有状態のため、 η ペアリング状態 (4.16) は厳密な固有状態になる。

$$H|\psi_N\rangle = \frac{1}{2}NU|\psi_N\rangle \quad (4.20)$$

その固有値は一般に基底状態のエネルギーよりもはるかに高いため、 η ペアリング状態は高エネルギー領域に存在する励起状態ということになる。関係式 (4.20) は任意の d 次元において成り立つ。このことは、2次元以上において Hubbard 模型の基底状態が厳密に求まっていないことと対照的である。 η ペアリング状態が Hubbard 模型の厳密な固有状態であることは 1989 年に C. N. Yang によって指摘された [60]。

4.1.2 非対角長距離秩序

物理的には η ペアリング状態は、重心運動量 Q を持った Cooper 対が凝縮した状態とみなすことができる。 η^+ の定義 (4.5) を見ると、位相因子 $e^{iQ \cdot R_j}$ を持ったダブロンが生成されていることからわかる。 η ペアリング状態 (4.16) が超伝導相関を示すことは、非対角長距離秩序を持つことから従う。超伝導相関関数

は以下のように厳密に評価することができる。各サイトでの η 演算子を以下のように定義する。

$$\eta_j^+ = e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_j} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \quad (4.21)$$

$$\eta_j^- = e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_j} c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} \quad (4.22)$$

$$\eta_j^z = \frac{1}{2}(n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} - 1) \quad (4.23)$$

内積 $\boldsymbol{\eta}_i \cdot \boldsymbol{\eta}_j$ が η SU(2) の回転で不変であることから、

$$\langle \psi_N | \boldsymbol{\eta}_i \cdot \boldsymbol{\eta}_j | \psi_N \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_N} \langle \psi_N | (\eta^+)^{N/2} \boldsymbol{\eta}_i \cdot \boldsymbol{\eta}_j | 0 \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_N} \langle \psi_N | (\eta^+)^{N/2} \left(-\frac{1}{2} \right)^2 | 0 \rangle = \frac{1}{4} \quad (i \neq j) \quad (4.24)$$

が成り立つ。超伝導相関は $\boldsymbol{\eta}_i \cdot \boldsymbol{\eta}_j$ の xy 成分に対応するため、 z 成分の相関を差し引くことを考える。 $\eta_i^z \eta_j^z$ はサイト i と j における粒子数で決まる。 η ペアリング状態 $|\psi_N\rangle$ は

$$|\psi_N\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_N} \sum_{j_1, \dots, j_{N/2}} e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}_{j_1} + \dots + \mathbf{R}_{j_{N/2}})} c_{j_1\uparrow}^\dagger c_{j_1\downarrow}^\dagger \dots c_{j_{N/2}\uparrow}^\dagger c_{j_{N/2}\downarrow}^\dagger | 0 \rangle \quad (4.25)$$

のようにあらわに書ける。この和の中で、サイト i と j にペアがいる項は $\binom{L-2}{N/2-2}$ 個、 i にペアがいるが j にはいない項は $\binom{L-2}{N/2-1}$ 個、 j にペアがいるが i にはいない項は $\binom{L-2}{N/2-1}$ 個、 i にも j にもペアがいない項は $\binom{L-2}{N/2}$ 個存在する。 η_j^z はサイト j にペアがいるときに $+\frac{1}{2}$ 、いないときに $-\frac{1}{2}$ の値を取ることに注意すると、 η^z の相関は

$$\langle \psi_N | \eta_i^z \eta_j^z | \psi_N \rangle = \frac{1}{\binom{L}{N/2}} \left[\frac{1}{4} \binom{L-2}{N/2-2} - \frac{1}{2} \binom{L-2}{N/2-1} + \frac{1}{4} \binom{L-2}{N/2} \right] = \frac{1}{4} - \frac{N(2L-N)}{4L(L-1)} \quad (4.26)$$

と評価される。よって xy 成分の相関は

$$\langle \psi_N | \frac{1}{2} (\eta_i^+ \eta_j^- + \eta_i^- \eta_j^+) | \psi_N \rangle = \frac{N(2L-N)}{4L(L-1)} \quad (4.27)$$

で与えられる。 η_j^\pm の定義 (4.21), (4.22) を代入すると、超伝導相関関数について以下の結果を得ることができる [60]。

$$\frac{1}{2} \langle \psi_N | (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} + c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}) | \psi_N \rangle = e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \frac{N(2L-N)}{4L(L-1)} \quad (4.28)$$

ここで L はサイトの数を表す。ペアの密度 $(N/2)/L = \nu$ を固定して熱力学極限 ($N, L \rightarrow \infty$) をとると、

$$\frac{1}{2} \langle \psi_N | (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} + c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}) | \psi_N \rangle \rightarrow e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \nu(1-\nu) \quad (4.29)$$

を得る。長距離極限 ($|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| \rightarrow \infty$) において非対角長距離秩序の大きさは有限の値をとる。またその値は $\nu = \frac{1}{2}$ (half filling) の時に最大値 $\frac{1}{4}$ をとる。

非対角長距離秩序 (4.28) は 2 粒子密度行列 $(\rho_2)_{i\sigma_1 j\sigma_2, k\sigma_3 l\sigma_4} = \text{Tr}(\rho c_{j\sigma_2}^\dagger c_{i\sigma_1}^\dagger c_{k\sigma_3} c_{l\sigma_4})$ の非対角成分に対応する。2 粒子密度行列の最大固有値が Cooper 対の凝縮の有無と関係する [62]。2 粒子密度行列の最大固有値 Λ_2 には上限

$$\Lambda_2 \leq \frac{N(2L - N + 2)}{2L} \quad (4.30)$$

が存在することが知られている [62]。この不等式により、2 粒子密度行列の固有値は最大で $O(N)$ になることがわかる。これは、Cooper 対が Bose-Einstein 凝縮できることを表している³。付録 C に (4.30) の証明を載せた。実は η ペアリング状態はこの上限を達成していることがわかり [64]、その意味で η ペアリング状態は最も大きな凝縮度を示す状態といえる。

4.1.3 エンタングルメントエントロピー

η ペアリング状態がどれくらい熱平衡状態からかけ離れているかは、その状態が持つエンタングルメント (量子もつれ) を見ることで測ることができる。エンタングルメントはエンタングルメントエントロピーによって評価することができる。そのために、系を二つの部分系 A と B に分けることを考えよう。全系の密度行列 ρ に対して部分系 A の縮約密度行列を $\rho_A = \text{Tr}_B \rho$ と定義する。ここで Tr_B は部分系 B に関して部分トレースをとることを意味する。部分系 A のエンタングルメントエントロピー S_A は、縮約密度行列 ρ_A の von Neumann エントロピーで与えられる: $S_A = -\text{Tr}_A(\rho_A \log \rho_A)$ 。 $S_A = S_B$ という対称性が成り立っている。固有状態熱化仮説によれば、エネルギースペクトルの端付近にある状態を除くエネルギー固有状態 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ に対して、エンタングルメントエントロピーは部分系の体積に比例すると期待される (体積則: $S_A \propto L_A$ 、 L_A は部分系 A のサイト数)。これは、固有状態 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ が対応する熱平衡状態とマクロに見て区別できないとすると、エンタングルメントエントロピーは部分系の熱力学エントロピーと等価であると考えことができ、熱力学エントロピーは示量変数であるため体積に比例することから理解できる。もしある固有状態に対してエンタングルメントエントロピーが体積則に従わなければ、固有状態熱化仮説が成り立っていないことを示しており、その固有状態はマクロに見ても熱平衡状態とは異なるものであるといえる。

³ボソン系の 1 粒子密度行列 $(\rho_1^b)_{ij} = \text{Tr}(b_i^\dagger b_j \rho)$ について、最大固有値 Λ_1^b が $O(N)$ になることが Bose-Einstein 凝縮の一般的な定義である [63]。ちなみに不等式 $\Lambda_1^b \leq N$ が常に成り立つ。また、フェルミオン系では 1 粒子密度行列 $(\rho_1)_{i\sigma_1, j\sigma_2} = \text{Tr}(\rho c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2})$ の最大固有値 Λ_1 について $\Lambda_1 \leq 1$ が成り立つ。これは Pauli の排他律からの直接的な帰結である。

それでは η ペアリング状態のエンタングルメントエントロピーを評価しよう。ここでの議論は [65] に従った。まず Goursat の公式⁴ を用いて $|\psi_N\rangle$ (4.16) を複素積分で表示する。

$$|\psi_N\rangle = \frac{(\frac{N}{2})!}{\mathcal{N}_N} \oint_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{z^{\frac{N}{2}+1}} e^{z\eta^+} |0\rangle \quad (4.31)$$

ここで C は原点を囲む経路である。全系の密度行列は

$$\rho = |\psi_N\rangle\langle\psi_N| = \frac{((\frac{N}{2})!)^2}{\mathcal{N}_N^2} \oint_C \frac{dz_1}{2\pi i} \oint_C \frac{dz_2}{2\pi i} \frac{1}{(z_1 z_2)^{\frac{N}{2}+1}} e^{z_1 \eta^+} |0\rangle\langle 0| e^{z_2 \eta^-} \quad (4.32)$$

である。全系を部分系 A と B に分けて $\eta^+ = \eta_A^+ + \eta_B^+$ とかく。ただし $\eta_A^+ = \sum_{j \in A} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger$ 、 η_B^+ についても同様である。すると、

$$\begin{aligned} e^{z_1 \eta^+} |0\rangle\langle 0| e^{z_2 \eta^-} &= e^{z_1 \eta_A^+} |0_A\rangle\langle 0_A| e^{z_2 \eta_A^-} \otimes e^{z_1 \eta_B^+} |0_B\rangle\langle 0_B| e^{z_2 \eta_B^-} \\ &= e^{z_1 \eta_A^+} |0_A\rangle\langle 0_A| e^{z_2 \eta_A^-} \otimes e^{z_1 \sum_{j \in B} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger} |0_B\rangle\langle 0_B| e^{z_2 \sum_{k \in B} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_k} c_{k\downarrow} c_{k\uparrow}} \\ &= e^{z_1 \eta_A^+} |0_A\rangle\langle 0_A| e^{z_2 \eta_A^-} \otimes \prod_{j \in B} \left(1 + z_1 e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger\right) |0_B\rangle\langle 0_B| \prod_{k \in B} \left(1 + z_2 e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_k} c_{k\downarrow} c_{k\uparrow}\right) \end{aligned} \quad (4.33)$$

と表せる。ここで $|0_A\rangle, |0_B\rangle$ はそれぞれ部分系 A と B の真空状態であり、ペアが同じサイトに 2 個以上占有することはできないことを使った。部分系 B についてトレースをとると、

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B \prod_{j \in B} \left(1 + z_1 e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger\right) |0_B\rangle\langle 0_B| \prod_{k \in B} \left(1 + z_2 e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_k} c_{k\downarrow} c_{k\uparrow}\right) \\ = \text{Tr}_B \prod_{j \in B} \left(|0\rangle_j + z_1 e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} |\uparrow\downarrow\rangle_j\right) \left(\langle 0|_j + z_2 e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} \langle\uparrow\downarrow|_j\right) = (1 + z_1 z_2)^{L_B} \end{aligned} \quad (4.34)$$

を得る。ただし $|0\rangle_j, |\uparrow\downarrow\rangle_j$ はそれぞれサイト j にペアがない状態という状態を表し、 L_B は部分系 B のサイト数を表す。このことを使うと、部分系 A の縮約密度行列 ρ_A は次のように評価できる。

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}_B |\psi_N\rangle\langle\psi_N| \\ &= \frac{((\frac{N}{2})!)^2}{\mathcal{N}_N^2} \oint_C \frac{dz_1}{2\pi i} \oint_C \frac{dz_2}{2\pi i} \frac{(1 + z_1 z_2)^{L_B}}{(z_1 z_2)^{\frac{N}{2}+1}} e^{z_1 \eta_A^+} |0_A\rangle\langle 0_A| e^{z_2 \eta_A^-} \\ &= \frac{((\frac{N}{2})!)^2}{\mathcal{N}_N^2} \oint_C \frac{dz_1}{2\pi i} \oint_C \frac{dz_2}{2\pi i} \sum_{l=0}^{L_B} \binom{L_B}{l} \frac{1}{(z_1 z_2)^{\frac{N}{2}-l+1}} e^{z_1 \eta_A^+} |0_A\rangle\langle 0_A| e^{z_2 \eta_A^-} \\ &= \frac{((\frac{N}{2})!)^2}{\mathcal{N}_N^2} \sum_{l=0}^{\min\{L_B, \frac{N}{2}\}} \binom{L_B}{l} \frac{1}{(\frac{N}{2}-l)!} (\eta_A^+)^{\frac{N}{2}-l} |0_A\rangle \frac{1}{(\frac{N}{2}-l)!} \langle 0_A| (\eta_A^-)^{\frac{N}{2}-l} \\ &= \frac{((\frac{N}{2})!)^2}{\mathcal{N}_N^2} \sum_{l=0}^{\min\{L_B, \frac{N}{2}\}} \binom{L_B}{l} \frac{(\mathcal{N}_{N-2l}^A)^2}{((\frac{N}{2}-l)!)^2} |\psi_{N-2l}^A\rangle\langle\psi_{N-2l}^A| \end{aligned} \quad (4.35)$$

⁴ z_0 を囲む経路 C について、 $f(z)$ が C 内で正則なとき $n! \oint_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{f(z)}{(z-z_0)^{n+1}} = f^{(n)}(z_0)$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) が成り立つ。

ここで $|\psi_N^A\rangle$ は部分系 A 上で定義された規格化された η ペアリング状態であり、 N_N^A はその規格化定数である。ちょうど ρ_A は対角化された形で表されている。

$$\rho_A = \sum_{l=0}^{\min\{L_B, \frac{N}{2}\}} \lambda_l |l\rangle\langle l| \quad (4.36)$$

ただし $|l\rangle = |\psi_{N-2l}^A\rangle$ とおいた。固有値 λ_l は

$$\lambda_l = \frac{\binom{L_B}{l} \binom{L_A}{\frac{N}{2} - l}}{\binom{L}{\frac{N}{2}}} \quad (4.37)$$

で与えられる。二項係数に関する Vandermonde の畳み込み⁵を使うと $\sum_l \lambda_l = 1$ であることが確かめられる。固有値 λ_l (4.37) は、ちょうど部分系 B にペアを l 個並べて部分系 A にペアを $\frac{N}{2} - l$ 個並べる場合の数を全系にペアを $\frac{N}{2}$ 個並べる場合の数で割ったものに対応している。固有値の組 $\{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots\}$ はエンタングルメントスペクトルと呼ばれる。 λ_l を確率分布 ($P(X = l) = \lambda_l$) とみなせば、その分布は超幾何分布と呼ばれる⁶。エンタングルメントエントロピーは

$$S_A = - \sum_{l=0}^{\min\{L_B, \frac{N}{2}\}} \lambda_l \log \lambda_l \quad (4.38)$$

と求まる。

熱力学極限におけるエンタングルメントエントロピーの振る舞いを見てみよう。超幾何分布 $P(X = l) = \lambda_l$ は、平均が

$$l_* = \frac{L_B N}{2L} \quad (4.39)$$

であり、分散が

$$\kappa = \frac{N}{2} \frac{L_B}{L} \frac{L_A}{L} \frac{L - \frac{N}{2}}{L - 1} \quad (4.40)$$

で与えられる。 $L_A/L, L_B/L, (N/2)/L$ を固定して $L \rightarrow \infty$ とすると、超幾何分布は平均が l_* 、分散が κ の正規分布に漸近する。すなわち

$$\lambda_l \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\kappa}} e^{-\frac{(l-l_*)^2}{2\kappa}} \quad (4.41)$$

⁵恒等式 $\sum_{l=0}^{\min\{r,m\}} \binom{m}{l} \binom{n}{r-l} = \binom{m+n}{r}$ のこと。

⁶超幾何分布の母関数を $f(z) = \sum_l \lambda_l z^l$ と定義すると、 $f(z)$ は超幾何関数 ${}_2F_1(a, b, ; c; z)$ を用いて $f(z) = \frac{\binom{L_A}{N/2}}{\binom{L}{N/2}} {}_2F_1(-L_B, -\frac{N}{2}; L_A - \frac{N}{2} + 1; z)$ と表せる。このことから超幾何分布の名前がある。

となる。 L を大きくしていくと、分布は $l = l_*$ を中心に鋭く突き立った形になる。エンタングルメントエントロピーは

$$\begin{aligned} S_A &\approx - \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x-l_*/\sqrt{\kappa})^2} \log \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\kappa}} e^{-\frac{1}{2}(x-l_*/\sqrt{\kappa})^2} \right) \quad (x = \frac{l}{\sqrt{\kappa}}) \\ &= \frac{1}{2} (1 + \log(2\pi\kappa)) \end{aligned} \quad (4.42)$$

と評価される。ペアの filling を $\nu = \frac{N/2}{L}$ とおくと、

$$S_A \approx \frac{1}{2} \left(1 + \log \left(2\pi\nu(1-\nu) \frac{L_A L_B}{L} \right) \right) \quad (4.43)$$

を得る。部分系 A のエンタングルメントエントロピーはその体積 L_A ではなく、体積の対数 $\log L_A$ におよそ比例することがわかる。この結果は系の次元によらず、さらに部分系 A と B の分け方にもよらないことに注意しよう。

このように η ペアリング状態は非可積分系のエネルギー固有状態であるにも関わらず、熱平衡状態からかけ離れた性質を持つ非熱的状态である。これは量子多体傷跡状態と似ているが、厳密には区別されることがある。量子多体傷跡状態というときには、ヒルベルト空間を系の対称性からくる量子数でラベル付けされた部分空間に分けたときに、非熱的状态が属する部分空間に十分に多くの熱的状态が存在していることが前提になる。 η ペアリング状態は η スピンに関する強磁性状態に対応するので、 η ペアリング状態の属する部分空間には η ペアリング状態しかない。その意味で η ペアリング状態は「本当の」量子多体傷跡状態とはいえないが、ハミルトニアンを変形するなどして量子多体傷跡状態にすることもできる [66]。

4.2 非従来型超伝導ペアリングへの拡張

前節で述べた Yang の η ペアリング状態はスピンのシングレットで軌道が s 波のペアリング対称性を持っている。これを他のペアリング対称性に拡張することはできるだろうか？平衡状態では実現できないような非平衡特有の超伝導固有状態が他に存在するだろうか？最近の研究で、非可積分なハミルトニアンを持つ系で非従来型のペアリング対称性（スピンのトリプレットや軌道が p 波、 d 波など）を持ったエネルギー固有状態を厳密に構成する方法が知られてきている [67, 68]。それらについて紹介しよう。

4.2.1 スピンレス η ペアリング状態

まず1次元のスピンレスフェルミオンの模型を考えよう。スピン自由度を持たないフェルミオンというのは一見するとスピンと統計性の関係に反するように見えるが、磁場がかかっていて全てのフェルミオンのスピンの方向を向いて(例えば上向きに)固まっていると考えることもできる。そのようなスピンレスフェルミオンがペアを組んで凝縮する状況を考えてみる。スピン自由度を持たない(あるいは同じスピンを持った)2個のフェルミオンは Pauli の排他律により同じサイトを占有することはできないので、ペアは異なるサイトの間で組むことになる。前節の η ペアリング状態 (4.16) を参考にして、隣り合うサイトでペアを作る次のような演算子を導入する。

$$\eta_{\text{sl}}^{\dagger} = \sum_j e^{iQj} c_j^{\dagger} c_{j+1}^{\dagger} \quad (4.44)$$

ここで $Q = \pi$ 、 c_j^{\dagger} はスピンレスフェルミオンをサイト j に生成する演算子である。位相因子 e^{iQj} は η ペアリング状態 (4.16) の $e^{iQ \cdot R_j}$ に対応するものであり、ペアが重心運動量 $Q = \pi$ を持っていることを表す。スピンレス η ペアリング状態を

$$|\Psi_{\text{sl}}^N\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_{\text{sl}}^N} (\eta_{\text{sl}}^{\dagger})^{N/2} |0\rangle \quad (4.45)$$

と定義しよう。ここで N はフェルミオンの粒子数(ただし偶数であると仮定する)、 $\mathcal{N}_{\text{sl}}^N$ は規格化因子であり $\langle \Psi_{\text{sl}} | \Psi_{\text{sl}} \rangle = 1$ となるように決めている ($\mathcal{N}_{\text{sl}}^N = \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)! \frac{L(L-\frac{N}{2}-1)!}{(L-N)!}}$)。

4.2.2 ペアリングの対称性

このようにして定義されたペアリング状態の対称性を確認しておく。サイトを中心とした反転操作の演算子を \mathcal{P} とおくと、

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{-1} \eta_{\text{sl}}^{\dagger} \mathcal{P} &= \sum_j (-1)^j c_{-j}^{\dagger} c_{-j-1}^{\dagger} \\ &= \sum_k (-1)^{-k} c_k^{\dagger} c_{k-1}^{\dagger} \quad (k = -j) \\ &= \sum_k (-1)^l c_l^{\dagger} c_{l+1}^{\dagger} \quad (l = k-1) \\ &= \eta_{\text{sl}}^{\dagger} \end{aligned} \quad (4.46)$$

が成り立つ。 η_{el}^+ によって生成されるペアはパリティが偶の対称性を持っていることがわかる (その量子数も \mathcal{P} と書くことにすると $\mathcal{P} = +1$)。あるいは s 波の軌道の対称性を持っているということもできる。一方スピンについてはスピンレスフェルミオンであるために、ペアの 2 粒子のスピンを入れ換え操作 (対応する演算子を S とおく) に関して偶の対称性を持っている (その量子数も S と書いて $S = +1$)。あるいはスピントリプレットの対称性を持っているとも言える。式 (4.44) で生成されるペアは s 波でスピントリプレットという聞きなれない対称性を持っている。一般にフェルミオン同士は反交換するため、 $\mathcal{P} \times S = -1$ となっているはずである。例えば s 波でスピンシングレット ($\mathcal{P} = +1, S = -1$)、 p 波でスピントリプレット ($\mathcal{P} = -1, S = +1$) のペア対称性がよくある例である。フェルミオンの反交換関係と整合するようにするためには、どのように考えればよいだろうか？

実は、ペアを構成するフェルミオンは軌道とスピンだけでなく副格子の自由度も持っていると考えられる。副格子の偶奇性を反映する演算子 Λ を次のように定義する。

$$\Lambda^{-1}c_j\Lambda = \begin{cases} +c_j & (\mathbf{R}_j \in A) \\ -c_j & (\mathbf{R}_j \in B) \end{cases} \quad (4.47)$$

スピンレス η ペアリング演算子 (4.44) に対しては

$$\Lambda^{-1}\eta_{\text{sl}}^+\Lambda = -\eta_{\text{sl}}^+ \quad (4.48)$$

となる。これは、ペアを作っている 2 粒子が異なる副格子に上にいることを意味する (その量子数も Λ と書いて $\Lambda = -1$)。この場合は、1 サイトだけ並進させることでペアを作る 2 粒子の副格子を入れ換えることができる。1 次元鎖に沿った x 方向に 1 サイトだけ並進させる演算子を \mathcal{T}_x とおくと、 η_{sl}^+ への作用は

$$\mathcal{T}_x^{-1}\eta_{\text{sl}}^+\mathcal{T}_x = e^{iQ}\eta_{\text{sl}}^+ \quad (4.49)$$

となる。よって副格子を入れ換えたときの位相の変化はペアの重心運動量 $Q = \pi$ を用いて $e^{iQ} = -1$ となり、副格子の入れ換えに関して奇の対称性を持っていることがわかる。もし $\Lambda = +1$ であれば、ペアを作っている 2 粒子が同じ副格子に上ることになるので、ペアを作る 2 粒子の副格子を入れ換えても符号は変わらない。両方の場合を合わせて、副格子を入れ換えに対して符号の変化は $\frac{1+\Lambda}{2} + e^{iQ}\frac{1-\Lambda}{2}$ と表すことができる。ペアの 2 粒子を入れ換えるということは、粒子の持つ軌道、スピン、副格子の自由度を同時に入れ換えることに対応するから、それらの量子数が $\mathcal{P}S(\frac{1+\Lambda}{2} + e^{iQ}\frac{1-\Lambda}{2}) = -1$ という関係を満たしていればよい。この関係はすぐ後で見ると $Q = 0$ の場合にも適用できる。スピンレス η ペア (4.44) の場合は

$\mathcal{P} = +1, \mathcal{S} = +1, \Lambda = -1, Q = \pi$ となり、フェルミオンの反交換関係と整合している。また、Yang の η ペアリング状態の場合 (4.16) は $\mathcal{P} = +1, \mathcal{S} = -1, \Lambda = +1, Q = \pi$ であり、 s 波、スピンシングレット、副格子が偶の対称性を持っている。

これらの考察は、より一般のペアリング状態に拡張することができる。格子構造は d 次元の立方格子を考えよう。サイト中心の反転対称性があることに注意する。2 粒子間が \mathbf{a} だけ離れたペアを生成する演算子を

$$B_{\mathbf{a}, Q, \sigma_1 \sigma_2}^+ = \sum_j f_Q(\mathbf{R}_j) c_{\mathbf{R}_j, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{R}_j + \mathbf{a}, \sigma_2}^\dagger \quad (4.50)$$

と定義する。ここで

$$f_Q(\mathbf{R}_j) = \begin{cases} +1 & (\mathbf{R}_j \in \text{A}) \\ e^{iQ} & (\mathbf{R}_j \in \text{B}) \end{cases} \quad (4.51)$$

とおいた。ただし $Q = 0, \pi$ である。Yang の η 演算子 (4.5) は $\eta^+ = B_{\mathbf{0}, \pi, \uparrow \downarrow}^+$ 、スピンレス η 演算子 (4.44) は $\eta_{\text{sl}}^+ = B_{e_x, \pi, \sigma \sigma}^+$ と書くことができる (e_x は 1 次元鎖に沿った x 方向の単位ベクトル)。 $B_{\mathbf{a}, Q, \sigma_1 \sigma_2}^+$ に対する $\mathcal{P}, \mathcal{S}, \Lambda, \mathcal{T}_x$ の作用はそれぞれ

$$\mathcal{P}^{-1} B_{\mathbf{a}, Q, \sigma_1 \sigma_2}^+ \mathcal{P} = B_{-\mathbf{a}, Q, \sigma_1 \sigma_2}^+ \quad (4.52)$$

$$\mathcal{S}^{-1} B_{\mathbf{a}, Q, \sigma_1 \sigma_2}^+ \mathcal{S} = B_{\mathbf{a}, Q, \sigma_2 \sigma_1}^+ \quad (4.53)$$

$$\Lambda^{-1} B_{\mathbf{a}, Q, \sigma_1 \sigma_2}^+ \Lambda = \begin{cases} +B_{\mathbf{a}, \sigma_1 \sigma_2}^+ & (\mathbf{R}_j \text{ と } \mathbf{R}_j - \mathbf{a} \text{ が同じ副格子に属する}) \\ -B_{\mathbf{a}, \sigma_1 \sigma_2}^+ & (\mathbf{R}_j \text{ と } \mathbf{R}_j - \mathbf{a} \text{ が異なる副格子に属する}) \end{cases} \quad (4.54)$$

$$\mathcal{T}_x^{-1} B_{\mathbf{a}, Q, \sigma_1 \sigma_2}^+ \mathcal{T}_x = e^{iQ} B_{\mathbf{a}, Q, \sigma_1 \sigma_2}^+ \quad (4.55)$$

で与えられる⁷。一方で、(4.50) でフェルミオンの演算子を交換すると

$$B_{\mathbf{a}, Q, \sigma_1 \sigma_2}^+ = \begin{cases} -B_{-\mathbf{a}, Q, \sigma_2 \sigma_1}^+ & [f_Q(\mathbf{R}_j - \mathbf{a}) = +f_Q(\mathbf{R}_j)] \\ +B_{-\mathbf{a}, Q, \sigma_2 \sigma_1}^+ & [f_Q(\mathbf{R}_j - \mathbf{a}) = -f_Q(\mathbf{R}_j)] \end{cases} \quad (4.56)$$

が成り立つことがわかる。このことから、 $Q = 0$ のときは

$$(\mathcal{P}\mathcal{S})^{-1} B_{\mathbf{a}, \sigma_1 \sigma_2}^+ (\mathcal{P}\mathcal{S}) = -B_{\mathbf{a}, \sigma_1 \sigma_2}^+ \quad (4.57)$$

⁷ \mathcal{S} については正確には 2 粒子の空間、もしくは 2 粒子縮約密度行列の表現に作用する演算子と考えた方がよい。

表 4.1: 様々な軌道、スピン、副格子の対称性を持った η ペアリング状態の分類 [68]。NN、NNN はそれぞれ最近接 (nearest-neighbor)、次近接 (next-nearest-neighbor) のペアを表す。

Type of pairs	Lattice structure	Q	Orbital	Parity (\mathcal{P})	Spin (\mathcal{S})	Sublattice (Λ)
On-site pairs	1D chain, square, cubic	π	s wave	Even	Singlet	Even
NN pairs	1D chain	π	s wave	Even	Triplet	Odd
		π	p wave	Odd	Singlet	Odd
	Square	π	s wave	Even	Triplet	Odd
		π	p_x, p_y wave	Odd	Singlet	Odd
		π	$d_{x^2-y^2}$ wave	Even	Triplet	Odd
NNN pairs	Square	π	d_{xy} wave	Even	Singlet	Even

が成り立ち、 $Q = \pi$ のときは

$$(\mathcal{P}\mathcal{S}\Lambda)^{-1}B_{\mathbf{a},\sigma_1\sigma_2}^+(\mathcal{P}\mathcal{S}\Lambda) = -B_{\mathbf{a},\sigma_1\sigma_2}^+ \quad (4.58)$$

が成り立つことがわかる。両方の場合を合わせると、

$$(\mathcal{P}\mathcal{S}(\frac{1+e^{iQ}}{2} + \frac{1-e^{iQ}}{2}\Lambda))^{-1}B_{\mathbf{a},\sigma_1\sigma_2}^+(\mathcal{P}\mathcal{S}(\frac{1+e^{iQ}}{2} + \frac{1-e^{iQ}}{2}\Lambda)) = -B_{\mathbf{a},\sigma_1\sigma_2}^+ \quad (4.59)$$

と書くことができる。量子数の間には

$$\mathcal{P}\mathcal{S}\left(\frac{1+e^{iQ}}{2} + \frac{1-e^{iQ}}{2}\Lambda\right) = 1 \quad (4.60)$$

という関係がある。 $Q = \pi$ の場合は量子数の間の関係はより簡単に $\mathcal{P}\mathcal{S}\Lambda = -1$ と書ける。本稿では $Q = \pi$ の場合を一般に η ペアリング状態と呼ぶことにする。

この関係を使うと、例えば軌道が p 波でスピンスingレットで副格子が奇の対称性を持った状態や、軌道が d 波でスピントリプレットで副格子が奇の対称性を持った η ペアリング状態が存在し得ることがわかる。表 4.1 に様々な軌道、スピン、副格子の対称性を持った η ペアリング状態の分類を示した。一行目が Yang の η ペアリング状態 (4.16)、二行目がスピンレス η ペアリング状態 (4.45) に対応している。

さて、スピンレス η ペアリング状態 (4.45) の性質をいくつか見ていこう。最近接ペアの超伝導相関関数を以下のように定義する。

$$C_{ij} = \langle \Psi_{\text{sl}}^N | c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger c_{j+1} c_j | \Psi_{\text{sl}}^N \rangle \quad (4.61)$$

i と j は十分離れているとする。また、系のサイト数を L とする。

まずペアが一つ ($N = 2$) の場合を考える。 $c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger c_{j+1} c_j$ を作用させると $(j, j+1)$ にペアがいる場合はペアが $(i, i+1)$ の位置に移動する。

$$c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger c_{j+1} c_j | \circ \circ \cdots \circ \underset{j}{\bullet} \underset{j+1}{\bullet} \circ \circ \cdots \circ \rangle = | \circ \circ \cdots \circ \underset{i}{\bullet} \underset{i+1}{\bullet} \circ \circ \cdots \circ \rangle \quad (4.62)$$

$|\Psi_{\text{sl}}^N\rangle$ のうち、ペアが $(j, j+1)$ にいる場合は 1 通りある。よって $\langle \Psi_{\text{sl}}^N | c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger c_{j+1} c_j | \Psi_{\text{sl}}^N \rangle = 1 \times e^{i\theta_{ij}} / (\mathcal{N}_{\text{sl}}^{N=2})^2$ である。 $e^{i\theta_{ij}}$ は i, j に依存する位相因子であり $e^{i\theta_{ij}} = (-1)^{i+j}$ である。

次にペアが二つ ($N = 4$) の場合を考える。ペアのうち一つが $(j, j+1)$ にいて、残りのペアが $(i, i+1)$ にいない場合が相関関数に寄与する。

$$| \circ \circ \cdots \circ \underset{i}{\circ} \underset{i+1}{\circ} \circ \circ \cdots \circ \underset{j}{\bullet} \underset{j+1}{\bullet} \circ \circ \cdots \circ \rangle \quad (4.63)$$

ペアのうちの一つを $(j, j+1)$ に固定する。残りのペアを $\bullet\bullet = \odot$ とおくと、

$$| \circ \circ \cdots \circ \underset{i}{\circ} \underset{i+1}{\circ} \circ \circ \cdots \circ \odot \circ \cdots \circ \underset{j}{\bullet} \underset{j+1}{\bullet} \circ \circ \cdots \circ \rangle \quad (4.64)$$

ペアの並び方は、区別できる \odot が 1 個と区別できない \circ が $L-6$ 個の並びかえなので、 $(L-6+1)/(L-6)! = L-5$ 通りある。しかし、これは数え過ぎであり、

$$| \circ \circ \cdots \circ \underset{i}{\circ} \underset{i+1}{\circ} \circ \circ \cdots \circ \underset{j}{\bullet} \underset{j+1}{\bullet} \circ \circ \cdots \circ \rangle \quad (4.65)$$

のような場合 (一つのペアが分裂して $\circ \circ$ にまたがっている場合) を含めてしまっている。よって正しくは $L-5-1 = L-6$ 通りである。さらに、 $(j, j+1)$ に固定するペアの選び方が 2 通りあり、ケットとブラのペアの組み合わせが 2! 通りあるので、 $\langle \Psi_{\text{sl}}^N | c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger c_{j+1} c_j | \Psi_{\text{sl}}^N \rangle = 4(L-6) \times e^{i\theta_{ij}} / (\mathcal{N}_{\text{sl}}^{N=4})^2$ である。

一般に $N/2$ 個のペアがある場合も同様で、ペアの一つを $(j, j+1)$ に固定すると、残りのペアが $(i, i+1)$ にいない場合は、区別できる \odot が $N/2 - 1$ 個と区別できない \circ が $L - N - 2$ 個の並びかえなので、 $(L - N - 2 + N/2 - 1)/(L - N - 2)!$ 通りある。しかし、やはり数え過ぎがあり、一つのペアが分裂して $\circ \circ$ にまたがっている場合を含めてしまっている。 $\circ \circ$ にまたがるペアの選び方が $N/2 - 1$ 通り、残りのペアの並びは、区別できる \odot が $N/2 - 2$ 個と区別できない \circ が $L - N - 2$ 個の並びかえなので、

$$\left(\frac{N}{2} - 1 \right) \frac{(L - N - 2 + N/2 - 2)!}{(L - N - 2)!} \quad (4.66)$$

通りある。 $(j, j+1)$ に固定するペアの選び方が $N/2$ 通りあるので、結局、相関関数に寄与するペアの並びは

$$\frac{N}{2} \left(\frac{(L - N - 2 + N/2 - 1)!}{(L - N - 2)!} - \left(\frac{N}{2} - 1 \right) \frac{(L - N - 2 + N/2 - 2)!}{(L - N - 2)!} \right) \quad (4.67)$$

通りとなる。しかし、これでは引き過ぎであり、二つのペアが分裂して $\circ \circ_{i \ i+1}$ にまたがっている場合、すなわち

$$|\circ \circ \cdots \circ \bullet \bullet \circ \circ_{i \ i+1} \bullet \bullet \cdots \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots \circ \rangle \quad (4.68)$$

のような場合を引いてしまっている。その補正を考慮すると、

$$\begin{aligned} & \frac{N}{2} \left(\frac{(L-N-2+N/2-1)!}{(L-N-2)!} - \left(\frac{N}{2}-1\right) \left(\frac{(L-N-2+N/2-2)!}{(L-N-2)!} - \left(\frac{N}{2}-2\right) \frac{(L-N-2+N/2-3)!}{(L-N-2)!} \right) \right) \\ &= \sum_{k=0}^2 (-1)^k \frac{(N/2)!}{(N/2-k-1)!} \frac{(L-N-2+N/2-k-1)!}{(L-N-2)!} \end{aligned} \quad (4.69)$$

となる。実はこの補正を、分裂するペアが $N/2-1$ 個の場合まで続ける必要があるので、

$$\sum_{k=0}^{N/2-1} (-1)^k \frac{(N/2)!}{(N/2-k-1)!} \frac{(L-N-2+N/2-k-1)!}{(L-N-2)!} \quad (4.70)$$

が最終的なペアの並び方の数になるはずである。ケットとブラのペアの組み合わせ方が $(N/2)!$ 通りあるので、

$$\langle \Psi_{sl}^N | c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger c_{j+1} c_j | \Psi_{sl}^N \rangle = \frac{e^{i\theta_{ij}}}{(\mathcal{N}_{sl}^N)^2} \left(\frac{N}{2}\right)! \sum_{k=0}^{N/2-1} (-1)^k \frac{(N/2)!}{(N/2-k-1)!} \frac{(L-N-2+N/2-k-1)!}{(L-N-2)!} \quad (4.71)$$

が得られる。規格化まで考慮すると、超伝導相関関数は

$$\begin{aligned} C_{ij} &= e^{i\theta_{ij}} \frac{(L-N)!}{L(L-\frac{N}{2}-1)!} \sum_{k=0}^{N/2-1} (-1)^k \frac{(N/2)!}{(N/2-k-1)!} \frac{(L-N-2+N/2-k-1)!}{(L-N-2)!} \\ &= e^{i\theta_{ij}} \frac{(L-N)! (N/2)!}{L(L-\frac{N}{2}-1)!} \sum_{k=0}^{N/2-1} (-1)^k \frac{(L-\frac{N}{2}-k-3)!}{(N/2-k-1)! (L-N-2)!} \end{aligned} \quad (4.72)$$

となる。 $N=2$ のときは $C_{ij} = e^{i\theta_{ij}} \frac{1}{L}$ 、 $N=4$ のときは $C_{ij} = e^{i\theta_{ij}} \frac{2(L-6)}{L(L-3)}$ となっている。超幾何関数を用いると

$$\sum_{k=0}^{N/2-1} (-1)^k \frac{(L-\frac{N}{2}-k-3)!}{(N/2-k-1)!} = \frac{(L-\frac{N}{2}-3)!}{(N/2-1)!} {}_2F_1\left(1, 1-\frac{N}{2}; 3-L+\frac{N}{2}; -1\right) \quad (4.73)$$

と表すことができる。この結果を用いると

$$\begin{aligned} C_{ij} &= e^{i\theta_{ij}} \frac{(L-N)(L-N-1)(N/2)! (L-\frac{N}{2}-3)!}{L(L-\frac{N}{2}-1)! (N/2-1)!} {}_2F_1\left(1, 1-\frac{N}{2}; 3-L+\frac{N}{2}; -1\right) \\ &= e^{i\theta_{ij}} \frac{(L-N)(L-N-1)\frac{N}{2}}{L(L-\frac{N}{2}-1)(L-\frac{N}{2}-2)} {}_2F_1\left(1, 1-\frac{N}{2}; 3-L+\frac{N}{2}; -1\right) \end{aligned} \quad (4.74)$$

という表示を得る。

熱力学極限 ($L, N \rightarrow \infty, \nu = (N/2)/L$: fixed) は次のようにしてとることができる。超幾何関数のべき級数展開より

$$\begin{aligned} {}_2F_1\left(1, 1 - \frac{N}{2}; 3 - L + \frac{N}{2}; -1\right) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1)_n (1 - \frac{N}{2})_n}{(3 - L + \frac{N}{2})_n n!} (-1)^n \quad ((a)_n = a(a+1)(a+2)\cdots(a+n-1)) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1 - \frac{N}{2})_n}{(3 - L + \frac{N}{2})_n} (-1)^n \\ &\rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\frac{N}{2})^n}{(-L + \frac{N}{2})^n} (-1)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\nu}{-1 + \nu}\right)^n = 1 - \nu \end{aligned} \quad (4.75)$$

がわかる。これをもとの表式に代入することで

$$C_{ij} \rightarrow e^{i\theta_{ij}} \frac{\nu(1-2\nu)^2}{1-\nu} \quad (0 \leq \nu \leq \frac{1}{2}) \quad (4.76)$$

となる。超伝導相関は熱力学極限で有限の値をとることが言えた。 $\nu = \frac{3-\sqrt{5}}{4}$ のとき $|C_{ij}|$ は最大値 $\frac{5\sqrt{5}-11}{4}$ をとる。

スピンレス η ペアリング状態 (4.45) に対してエンタングルメントエントロピーを評価することもできる。こちらについては導出は文献 [67] に譲ることにして結果だけを述べることにしよう。サイト数 L の 1 次元鎖をサイト数 $L/2$ の部分系 A と B に分ける。部分系 A の縮約密度行列は $\rho_A = \text{Tr}_B |\Psi_{\text{sl}}^N\rangle \langle \Psi_{\text{sl}}^N|$ である。ここでは簡単のために、von Neumann エントロピーではなく 2 次の Rényi エントロピーを使ってエンタングルメントエントロピーを定義することにする⁸。

$$S_A^{(2)} = -\log \text{Tr}_A(\rho_A^2) \quad (4.77)$$

この量は解析的に評価することができて、

$$S_A^{(2)} = -\log \left\{ \sum_{l=\max\{0, \lceil \frac{N-L/2}{2} \rceil\}}^{\min\{\frac{N}{2}, \lfloor \frac{L/2}{2} \rfloor\}} \left(\frac{(\frac{l}{2} - \frac{N}{2} + l)(\frac{l}{2} - l)}{\binom{L - \frac{N}{2}}{\frac{N}{2}}} \right)^2 + \sum_{l=\max\{0, \lceil \frac{N-L/2-1}{2} \rceil\}}^{\min\{\frac{N}{2}-1, \lfloor \frac{L/2-1}{2} \rfloor\}} \left(\frac{(\frac{l}{2} - \frac{N}{2} + l)(\frac{l}{2} - l - 1)}{\binom{L - \frac{N}{2}}{\frac{N}{2}}} \right)^2 \right\} \quad (4.78)$$

という結果が知られている [67]。特に $N/L = 2/3$ に固定した場合に熱力学極限の値を得ることができて、

$$S_A^{(2)} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \log \left(\frac{6\pi L}{25} \right) \quad (4.79)$$

となる。エンタングルメントエントロピーは系の体積ではなく体積の対数に比例することがわかる。数値計算により、他の N/L の値の場合にも対数則を示すことが確認されている [67]。この振る舞いは、Yang の η

⁸ n 次の Rényi エントロピーは $S_A^{(n)} = \frac{1}{1-n} \log \text{Tr}(\rho_A^n)$ と定義される。 $n \rightarrow 1$ の極限で von Neumann エントロピーで定義されたエンタングルメントエントロピーに漸近する ($\lim_{n \rightarrow 1} S_A^{(n)} = S_A$)。

ペアリング状態と共通の性質である。スピンレス η ペアリング状態 (4.45) が有限の超伝導相関をもつことと、エンタングルメントエントロピーが体積の対数に比例することから、このような状態がエネルギー固有状態になるような系があったとしてもその状態は非熱的な状態であることが示唆される。

4.2.3 スピンレス Hubbard 模型

ここからは、スピンレス η ペアリング状態 (4.45) がエネルギー固有状態になるようなハミルトニアンを構成していく。試しに最近接相互作用をするスピンレス Hubbard 模型を考えよう。

$$H = H_t + H_V \quad (4.80)$$

$$H_t = -t \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + \text{h.c.}) \quad (4.81)$$

$$H_V = V \sum_j n_j n_{j+1} \quad (4.82)$$

ここで $n_j = c_j^\dagger c_j$ 、 H_t はハミルトニアン of 運動項、 H_V は相互作用項であり、 t, V はそれぞれホッピング振幅、相互作用パラメーターである。境界条件としては周期境界条件を考える。Yang の η ペアリング状態のときと同様に、ハミルトニアン of 運動項とスピンレス η ペアリング演算子 (4.44) は可換になる: $[H_t, \eta_{sl}^\dagger] = 0$ 。そのためスピンレス η ペアリング状態 $|\Psi_{sl}^N\rangle$ (4.45) は運動項 of 固有状態となる。

$$H_t |\Psi_{sl}^N\rangle = 0 \quad (4.83)$$

ところが、 $|\Psi_{sl}^N\rangle$ は相互作用項 H_V の固有状態にはならない。なぜなら、ペアが互いに離れていれば相互作用はペアの中だけで起こるのに対しペアが隣り合うとペアの間で相互作用 V を感じるため、ペアの配置によってエネルギーが変わってしまうためである。例えば、すべてのペアが 1 サイト以上離れている状態の場合、

$$H_V |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle = \frac{N}{2} V |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle \quad (4.84)$$

であるが、一組のペアが隣り合うと、

$$H_V |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle = \left(\frac{N}{2} V + V\right) |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle \quad (4.85)$$

となる。

このようなペアの相互作用の増加を相殺するために、スピンレス Hubbard 模型 (4.80) に三体相互作用の項をハミルトニアンに追加してみよう。

$$H_W = W \sum_j n_j n_{j+1} n_{j+2} \quad (4.86)$$

すなわち、3つの粒子が互いに隣り合う位置に来たときに相互作用 W を感じるとする。全てのペアが互いに離れていれば3体相互作用は働かない。

$$(H_V + H_W) |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle = \frac{N}{2} V |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle \quad (4.87)$$

隣り合うペアが一組生じると、相互作用エネルギーは

$$(H_V + H_W) |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle = \left(\frac{N}{2} V + V + 2W \right) |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle \quad (4.88)$$

となる。もう一組隣り合うペアが増えると、

$$(H_V + H_W) |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle = \left(\frac{N}{2} V + 2V + 4W \right) |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle \quad (4.89)$$

となる。また、3つのペアが隣り合うと、

$$H_{\text{int}} |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle = \left(\frac{N}{2} V + 2V + 4W \right) |\cdots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \cdots\rangle \quad (4.90)$$

となる。このように隣り合うペアが一つ増えるごとに相互作用エネルギーは $V + 2W$ だけ増加していく。よって $V + 2W = 0$ であれば、ペアの配置によらずに相互作用エネルギーが一定 ($\frac{N}{2}V$) になって、 $|\Psi_{\text{sl}}^N\rangle$ は $H_V + H_W$ の固有状態になる。

以上をまとめると、スピンレス η ペアリング状態 $|\Psi_{\text{sl}}^N\rangle$ は3体相互作用を加えた Hubbard 模型

$$H = H_t + H_V + H_W \quad (V + 2W = 0) \quad (4.91)$$

の厳密な固有状態になっていることがわかった。

$$(H_t + H_V + H_W) |\Psi_{\text{sl}}^N\rangle = \frac{N}{2} V |\Psi_{\text{sl}}^N\rangle \quad (W = -\frac{V}{2}) \quad (4.92)$$

相互作用項は次のようにも書き換えられる。

$$H_V + H_W = \frac{V}{2} \sum_j n_j [1 - (1 - n_{j-1})(1 - n_{j+1})] \quad (4.93)$$

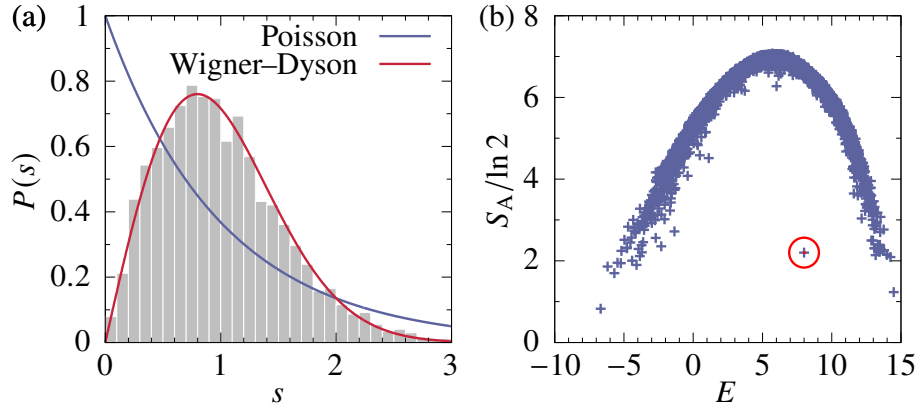


図 4.1: (a) 3 体相互作用を含んだ 1 次元スピンレス Hubbard 模型 (4.91) ($L = 20$) に対するエネルギー準位間隔の分布 $P(s)$ 。パリティが奇で全運動量が π の部分空間をとっている。青線と赤線はそれぞれ Poisson 分布と Wigner-Dyson 分布を表す。(b) 同模型 ($L = 16$) の各固有状態に対するエンタングルメントエントロピー。赤丸はスピンレス η ペアリング状態 (4.45) を表す。パラメータは $t = 1$, $V = 2$, $W = -V/2$, $N = L/2$ である。文献 [68] より。

カッコ $[\dots]$ の中身はサイト j と隣り合うサイトに粒子がいるときに 1、いないときに 0 を返す演算子になっている。これに n_j がかかることで、サイト j に粒子が来たときに隣り合う粒子がいる場合は必ず相互作用エネルギーが $\frac{V}{2}$ だけ加算されるようになっている。このためスピンレス η ペアリング状態 (4.45) のように全ての粒子に必ず隣り合う粒子が存在するような状態に対しては $H_V + H_W$ の固有状態になるようになっている。それ以外の一般の状態に対しては、隣り合う粒子がない孤立した粒子が存在すると $H_V + H_W$ の固有状態にならない。

3 体相互作用を持つ 1 次元スピンレス Hubbard 模型 (4.91) は、非従来型のペアリング対称性 (s 波スピンシングレット以外) を持った超伝導状態が固有状態になる簡単な模型の一つである。それではこの模型の他の固有状態はどのように振る舞うだろうか？ 図 4.1(a) に、各固有状態のエネルギー固有値の間隔の分布 $P(s)$ を数値計算した結果をプロットした。一般に、系が可積分性を持つ場合は Poisson 分布 ($P(s) = e^{-s}$) に、非可積分の場合は Wigner-Dyson 分布 ($P(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2}$) になることが期待される。大雑把に言うと、可積分の場合は保存量がたくさんあるので対応する量子数ごとにハミルトニアンをブロック対角にでき、異なるブロックに属するエネルギー固有値は互いに相関がないのでバラバラに分布することで Poisson 分布に近づく。一方で非可積分の場合は保存量が豊富にないためハミルトニアンをブロック対角にできず、各エネルギー固有値を相関を持つ。特にハミルトニアン非対角要素の存在のために、エネルギー固有値同士

が近づくと準位反発する。そのため $s \sim 0$ 付近で準位間隔の分布は抑えられる傾向にある ($P(s) \sim 0$)。図 4.1(a) の結果は、1 次元スピンレス Hubbard 模型 (4.91) が非可積分であることを示唆する。スピンレス η ペアリング状態 (4.45) は、非可積分の模型に含まれる非熱的な固有状態のため、量子多体傷跡状態の例になっている。

図 4.1(b) には、開放境界条件⁹のもとで系を二つのサイト数 $L/2$ の部分系に分けたときの各固有状態のエンタングルメントエントロピーをプロットした。赤丸で囲った状態がスピンレス η ペアリング状態に対応し、他の固有状態に比べて低いエンタングルメントエントロピーを持つことがわかる。これは、前節で示したようにエンタングルメントエントロピーが系の体積ではなくその対数に比例することと整合している。他の固有状態は体積則を示し、より大きなエンタングルメントエントロピーを持つ。

4.2.4 p 波、 d 波 η ペアリング状態

これまで見てきたスピンレス η ペアリング状態 (4.45) は軌道が s 波でスピントリプレットの対称性を持っていた。それでは軌道が p 波や d 波などの非従来型ペアリング対称性を持った固有状態を構成するにはどうすればよいだろうか？

ここでは 2 次元正方格子上的スピン有りのフェルミオン模型を例にとって考えてみよう。サイト間隔 a だけ離れた 2 粒子のペアを生成する η ペアリング演算子を

$$\eta_{\mathbf{a}}^{\dagger} = \sum_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} c_{\mathbf{R}_j \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{R}_j + \mathbf{a} \downarrow}^{\dagger} \quad (4.94)$$

と定義する。ペアの重心運動量は $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ である。これによって作られるペアは、正方格子の点群の既約表現によって分類することができる。特に最近接ペアの場合に既約表現で分類した η ペアリング演算子は以下ようになる。

$$\eta_s^{\dagger} = \eta_{+\mathbf{e}_x}^{\dagger} + \eta_{+\mathbf{e}_y}^{\dagger} + \eta_{-\mathbf{e}_x}^{\dagger} + \eta_{-\mathbf{e}_y}^{\dagger} \quad (4.95)$$

$$\eta_{p_x}^{\dagger} = \eta_{+\mathbf{e}_x}^{\dagger} - \eta_{-\mathbf{e}_x}^{\dagger} \quad (4.96)$$

$$\eta_{p_y}^{\dagger} = \eta_{+\mathbf{e}_y}^{\dagger} - \eta_{-\mathbf{e}_y}^{\dagger} \quad (4.97)$$

$$\eta_d^{\dagger} = \eta_{+\mathbf{e}_x}^{\dagger} - \eta_{+\mathbf{e}_y}^{\dagger} + \eta_{-\mathbf{e}_x}^{\dagger} - \eta_{-\mathbf{e}_y}^{\dagger} \quad (4.98)$$

⁹開放境界条件の場合にもスピンレス η ペアリング状態は 3 体相互作用を持つ Hubbard 模型の固有状態になる。

ここで e_x, e_y は x, y 方向の単位ベクトルである。各々、 s 波、 p_x 波、 p_y 波、 $d_{x^2-y^2}$ 波 (以下では d 波と省略する) の軌道の対称性に対応している。これらの演算子を用いて非従来型のペアリング対称性を持った η ペアリング状態を定義できる。

以下では特に d 波のペアリング状態に注目しよう。 d 波 η ペアリング状態は

$$|\Psi_d^N\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}_d^N} (\eta_d^+)^{N/2} |0\rangle \quad (4.99)$$

で与えられる。 \mathcal{N}_d^N は規格化定数である ($\langle \Psi_d^N | \Psi_d^N \rangle = 1$)。このペアリング状態が持つ対称性は以下の通りである。

$$\mathcal{P}^{-1} \eta_d^+ \mathcal{P} = +\eta_d^+ \quad (4.100)$$

$$\mathcal{S}^{-1} \eta_d^+ \mathcal{S} = +\eta_d^+ \quad (4.101)$$

$$\Lambda^{-1} \eta_d^+ \Lambda = -\eta_d^+ \quad (4.102)$$

$$\mathcal{T}_x^{-1} \eta_d^+ \mathcal{T}_x = e^{iQ} \eta_d^+ \quad (4.103)$$

つまり d 波 η ペアリング状態 (4.99) は d 波スピントリプレットで副格子が奇の対称性を持っている。これは Sec. 4.2.2 で見た通りである。

4.2.5 スピンプル Hubbard 模型

d 波 η ペアリング状態 (4.99) が固有状態になるようなハミルトニアンを探すために、スピンプルの Hubbard 模型を考えてみる。そのハミルトニアンは

$$H = H_{\text{kin}} + H_U \quad (4.104)$$

$$H_{\text{kin}} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) \quad (4.105)$$

$$H_U = U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \quad (4.106)$$

で与えられる。 H_{kin}, H_U はそれぞれ運動項、相互作用項であり、 t はホッピング、 U はオンサイトの相互作用パラメータを表す。

これまで見てきた η ペアリング状態と同様に、 d 波 η ペアリング状態 (4.99) はハミルトニアンの運動項 H_{kin} の固有状態になっている。

$$H_{\text{kin}} |\Psi_d^N\rangle = 0 \quad (4.107)$$

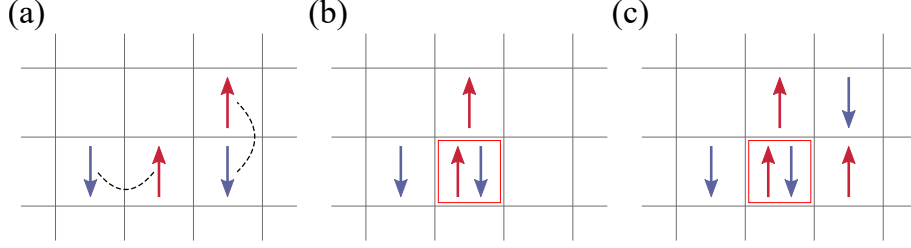


図 4.2: d 波 η ペアリング状態 (4.99) に含まれるペアの配置の例。(a) 2つのペアが重なっていない場合。(b) 2つのペアが重なっている場合。(c) 3つのペアが存在する場合。文献 [68] より。

これは直接計算によって確かめることができる。フェルミオンの消滅演算子の Fourier 変換を

$$c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} c_{j\sigma} \quad (4.108)$$

で定義する。 L_x, L_y は 2 次元正方格子の x 方向と y 方向のサイズを表す。Fourier 変換した演算子を用いると

$$H_{\text{kin}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.109)$$

$$\eta_a^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} c_{\mathbf{Q}-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (4.110)$$

と表すことができる。ただし $\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$ は 1 粒子の分散関係である。これらの交換関係を計算すると

$$[H_{\text{kin}}, \eta_a^\dagger] = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} [\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{Q} - \mathbf{k})] c_{\mathbf{Q}-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (4.111)$$

となり、分散関係は $\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{Q} - \mathbf{k}) = 0$ を満たすので $[H_{\text{kin}}, \eta_a^\dagger] = 0$ である。ここから d 波 η ペアリング状態 (4.99) が H_{kin} の固有状態であることが直ちに従う。この計算からも分かるように、 H_{kin} と η_a^\dagger の可換性はペアの粒子間隔 a に依らずに成り立つ。

次に相互作用項 H_U について見ていく。 d 波 η ペアリング状態 (4.99) は最近接ペアが正方格子上に様々な配置で置かれた状態の重ね合わせでできている。例えば二つのペアの配置の例を図 4.2(a) に示した。ペアが重なり合っていないければ、オンサイトの相互作用はペアに働かない。しかしペアが図 4.2(b) のように重なると 1 つのサイトが二重占有された状態 (ダブルロン) が作られ、相互作用 U だけエネルギーが増加する。このようにペアの配置によって相互作用エネルギーの値が変わるので、一般に d 波 η ペアリング状態 (4.99) は H_U の固有状態にはならない。

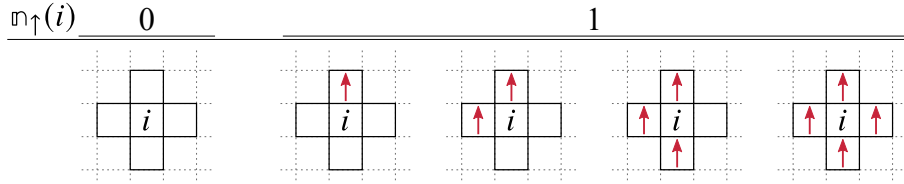


図 4.3: 各 \uparrow スピン粒子の配置に対する隣接粒子演算子 $n_{i\sigma}$ ($\sigma = \uparrow$) のとり得る値。文献 [68] より。

それでは前節のように 3 体相互作用を追加すれば、 d 波 η ペアリング状態 (4.99) を相互作用項の固有状態にできるだろうか。ダブロンによる過剰エネルギーを相殺するために、例えば次のような項を加えることが考えられる。

$$-\frac{U}{2} \sum_i \sum_{j \in \text{nn}(i), \sigma} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} n_{j\sigma} \tag{4.112}$$

ここで $\text{nn}(i)$ はサイト i に隣接するサイトの集合を表す。このようにすると図 4.2(b) の場合は 2 体相互作用と 3 体相互作用が確かに相殺して相互作用エネルギーは 0 になる。このよううまく相殺できるのは、ダブロンの隣にスピン \uparrow と \downarrow の粒子が一つずつ存在する場合である。一方で図 4.2(c) の場合はダブロンの隣に粒子が合計 3 個いるので、2 体相互作用と 3 体相互作用の和は $U - \frac{U}{2} \times 3 = -\frac{U}{2}$ となって相殺しない。このように素朴に 3 体相互作用を含めるだけでは d 波 η ペアリング状態 (4.99) を固有状態にすることは難しい。

4.2.6 多体相互作用の導入

ここでスピンレスフェルミオンの模型でなぜ η ペアリング状態 (4.45) を固有状態にすることができたか思い出してみよう。式 (4.93) で示したように、相互作用項はサイト j と隣り合うサイトに粒子がいるときに 1、いないときに 0 を返す演算子を使って表される。これを高次元でスピン有りの系に拡張することを考えてみる。サイト i と隣り合うサイトにスピン σ の粒子がいるときに 1、いないときに 0 を返す演算子として

$$n_{i\sigma} = \begin{cases} 1 & [\sum_{j \in \text{nn}(i), \sigma} n_{j\sigma} \neq 0] \\ 0 & [\sum_{j \in \text{nn}(i), \sigma} n_{j\sigma} = 0] \end{cases} \tag{4.113}$$

となるものを導入する。ここで j についての和はサイト i と隣接する全てのサイトに渡ってとるものとする。図 4.3 に各粒子の配置に対する演算子 $n_{i\sigma}$ (4.113) のとり得る値を示した。

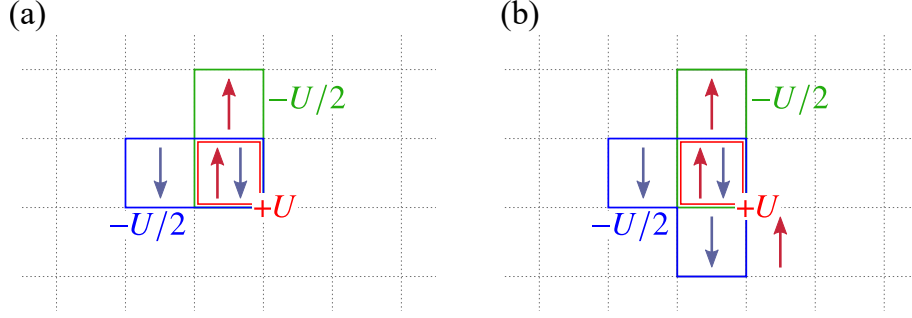


図 4.4: d 波 η ペアリング状態 (4.99) に含まれるペアの間の相互作用の例。(a) ペアが 2 つの場合。(b) ペアが 3 つの場合。文献 [68] より。

このような演算子は、粒子数演算子 $n_{j\sigma}$ を使って次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} n_{i\sigma} &= 1 - \prod_{j \in \text{nn}(i)} (1 - n_{j\sigma}) \\ &= - \sum_{m=1}^z (-1)^m \sum'_{j_1, \dots, j_m \in \text{nn}(i)} n_{j_1\sigma} \cdots n_{j_m\sigma} \end{aligned} \quad (4.114)$$

ここで z はサイト i に隣接するサイトの数、 \sum' は互いに異なる $j_1, \dots, j_m \in \text{nn}(i)$ について順序の違いを除いて和をとることを表す。このように定義することで、 $n_{i\sigma}$ (4.113) は確かにサイト i と隣り合うサイトにスピン σ の粒子がいるときに 1、いないときに 0 を返す演算子になっていることがわかる。2 次元正方格子だけでなく、任意の次元で任意の格子で同様に定義することができる。 $n_{i\sigma}$ (4.113) は m 体 ($1 \leq m \leq z$) の演算子を含んでいる。粒子正孔変換 ($c_{j\sigma} \rightarrow \tilde{c}_{j\sigma} = e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} c_{j\sigma}^\dagger$) をすると、 $n_{i\sigma} \rightarrow 1 - \prod_{j \in \text{nn}(i)} \tilde{n}_{j\sigma}$ (ただし $\tilde{n}_{j\sigma} = \tilde{c}_{j\sigma} \tilde{c}_{j\sigma}$) となり、少し形が簡単になる。本稿では $n_{i\sigma}$ (4.113) のことを隣接粒子演算子と呼ぶことにしよう。

隣接粒子演算子 $n_{i\sigma}$ (4.113) を用いることで、ダブロン形成によるエネルギー変化を相殺することができるようになる。そのために、3 体相互作用 (4.112) の代わりに次のような多体相互作用を考えてみる。

$$-\frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} n_{i\sigma} \quad (4.115)$$

このような相互作用があると、サイト i にダブロンがいるときに、ダブロンの隣にスピン \uparrow の粒子がいれば $-\frac{U}{2}$ 、ダブロンの隣にスピン \downarrow の粒子がいれば $-\frac{U}{2}$ だけ相互作用エネルギーが加算される。ダブロンがいるとオンサイトの相互作用 U だけエネルギーが増加するが、 d 波 η ペアリング状態 (4.99) ではダブロンができるときには必ずその隣に \uparrow と \downarrow の粒子が 1 つずつ以上はいるので、相互作用エネルギーは合計で $U - \frac{U}{2} - \frac{U}{2} = 0$ と相殺される。図 4.4 に d 波 η ペアリング状態 (4.99) におけるペアの配置の例を示した。

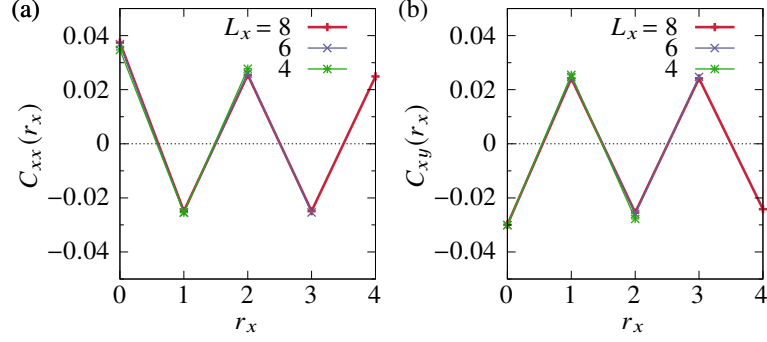


図 4.5: d 波 η ペアリング状態 (4.99) におけるペア間の相関関数 $C_{\alpha\beta}(r_x)$ (4.119)。(a) x 方向を向いた 2 つのペアの間の相関。(b) x 方向を向いたペアと y 方向を向いたペアの間の相関。システムサイズは $L_x \times L_y$ ($L_x = 4, 6, 8, L_y = 4$)。文献 [68] より。

いずれの場合も相互作用エネルギーが相殺されることが見てとれる。このような相互作用エネルギーの相殺は各ダブルトンごとに起こり、任意のペアの配置で相殺することがわかる。

以上の考察をもとに、多体相互作用を含むように拡張された Hubbard 模型を考える。

$$H = H_{\text{kin}} + H_{\text{int}} \quad (4.116)$$

$$H_{\text{int}} = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \left(1 - \frac{1}{2} \sum_{\sigma} n_{i\sigma} \right) \quad (4.117)$$

この模型は M 体相互作用 ($2 \leq M \leq z+2$) を含んでいるが、いずれも粒子密度の積の形をしており、相互作用の局所性を満たす。この模型に対して d 波 η ペアリング状態 (4.99) は厳密なゼロエネルギー固有状態になっている。

$$(H_{\text{kin}} + H_{\text{int}})|\Psi_d^N\rangle = 0 \quad (4.118)$$

実は、 d 波 η ペアリング状態だけでなく、 η ペアリング演算子 $\eta_{\vec{a}}^+$ で生成される任意の状態が拡張された Hubbard 模型 (4.116) のゼロエネルギー固有状態になる。そのため、マクロな数だけ縮退した状態がゼロエネルギーに存在することになる。ここでの模型の構成法は、任意の次元で任意の bipartite な格子 (例えば honeycomb 格子や diamond 格子など) に適用することができる。

4.2.7 模型と固有状態の性質

d 波 η ペアリング状態 (4.99) を厳密な固有状態に持つ模型を構成できたので、その性質について見ていこう。まず、 d 波 η ペアリング状態が非対角長距離秩序を持つことを確かめる。最近接粒子のペアの間の相関関数を

$$C_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \langle \Psi_d^N | c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_\alpha}^\dagger c_{\mathbf{r}}^\dagger c_{\mathbf{0}\uparrow} c_{\mathbf{e}_\beta\downarrow} | \Psi_d^N \rangle \quad (4.119)$$

と定義する。ここで $\alpha, \beta (= x, y)$ はペアの向きを表し、 \mathbf{r} はスピン \uparrow の粒子間の相対位置を表す。ペアの向き依存性からペアリング対称性を読み取ることができる。粒子数は $N/L = 1/4$ に固定し、システムサイズ $L = L_x \times L_y$ は $L_x = 4, 6, 8, L_y = 4$ ととって数値計算により相関関数 (4.119) を評価する。

図 4.5 に得られた結果をプロットした。横軸をペア間の x 方向の距離 r_x にとり、縦軸は相関関数の値を示している。図 4.5(a) は両方のペアが x 方向を向いている場合、図 4.5(b) は x 方向を向いたペアと y 方向を向いたペアの間の相関を表している。この結果からわかる通り、相関関数はシステムサイズの範囲内でペア間の距離 r_x を大きくしても減衰しない。しかも、システムサイズに関して相関関数の値はほぼ収束している。これは d 波 η ペアリング状態が非対角長距離秩序を持つことを示唆している。相関関数の符号が r_x に関して振動しているが、これはペアが重心運動量 $Q = (\pi, \pi)$ を持っていることを反映している。また、 $C_{xx}(r_x)$ と $C_{xy}(r_x)$ が反対の符号を持っていてペアの向きに依存しているが、これはペアリングの対称性が d 波であることを意味している。

d 波 η ペアリング状態のエンタングルメントエントロピーについても数値計算によって評価することができる。周期境界条件を仮定して、 $L_x \times L_y$ の格子上で考える。全系を部分系 A と B に分けて、 A はシステムサイズ $r_x \times L_y$ を持つとする。エンタングルメントエントロピーは $S_A = -\text{Tr}_A(\rho_A \log \rho_A)$ で与えられる。ここで $\rho_A = \text{Tr}_B(|\Psi_d^N\rangle\langle\Psi_d^N|)$ である。 S_A を体積比 $f = V_A/V = (2r_x L_y)/(2L_x L_y)$ の関数としてプロットしたものを図 4.6 に青線で示している。ここで $V = 2L_x L_y, V_A = 2r_x L_y$ はスピン自由度を含んだ全系と部分系 A のシステムサイズを表す。体積比に関するエンタングルメントエントロピーの振る舞いは Page 曲線と呼ばれるものの一種で、 $f = 0$ から $f = \frac{1}{2}$ まで単調に増加していき、 $f = \frac{1}{2}$ から $f = 1$ に近づくにつれて減少していく。

非可積分系における典型的な固有状態のエンタングルメントエントロピーは、ランダムに抽出した純粋状態のエンタングルメントエントロピーの平均に近いと期待される。粒子数 N を固定した Hilbert 空間に

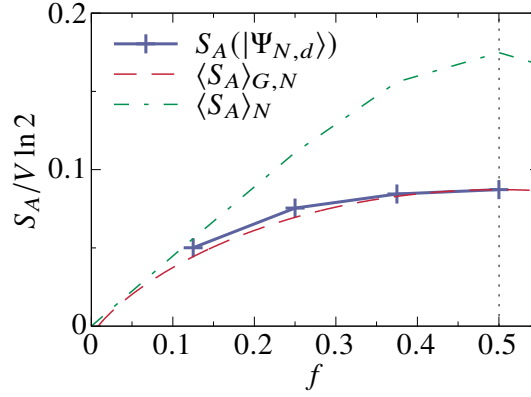


図 4.6: d 波 η ペアリング状態 (4.99) のエンタングルメントエントロピー S_A (青線) と、可積分系、非可積分系の固有状態の典型的なエンタングルメントエントロピー $\langle S_A \rangle_{G,N}$ (赤の破線)、 $\langle S_A \rangle_N$ (緑の点鎖線) の比較。文献 [68] より。

において一様に分布した純粋状態のエンタングルメントエントロピーの平均は

$$\langle S_A \rangle_N = \sum_{N_A=0}^{\min(N, V_A)} [\langle S_A \rangle + \psi(d_N + 1) - \psi(d_A d_B + 1)] \frac{d_A d_B}{d_N} \quad (4.120)$$

与えられる。ここで N, N_A は全系と部分系 A の粒子数、 d_N, d_A, d_B は全系、部分系 A と B の Hilbert 空間の次元、 $\psi(x)$ はディガンマ関数、 $\langle S_A \rangle = \psi(d_A d_B + 1) - \psi(d_A + 1) - \frac{d_B - 1}{2d_A}$ ($d_A > d_B$) は N を固定しない空間におけるエンタングルメントエントロピーの平均 (Page 公式) である。一方で、可積分系の場合のエンタングルメントエントロピーは、ガウシアン純粋状態のエンタングルメントエントロピーの平均に近いと期待される。熱力学極限におけるガウシアン純粋状態のエンタングルメントエントロピーの平均は、

$$\langle S_A \rangle_{G,N} = V \{ (n-1) \log(1-n) + n[(f-1) \log(1-f) - f \log f - 1] \} \quad (4.121)$$

となる。ここで $n = N/V$ はスピン \uparrow (またはスピン \downarrow) 粒子の数密度である。図 4.6 に $\langle S_A \rangle_N$ や $\langle S_A \rangle_{G,N}$ との比較を示したが、 d 波 η ペアリング状態のエンタングルメントエントロピーは非可積分系の典型的な値 ($\langle S_A \rangle_N$) より小さく、可積分系の典型的なエンタングルメントエントロピーの値 ($\langle S_A \rangle_{G,N}$) に近いことがわかる。このことは d 波 η ペアリング状態が非熱的な性質を持つことを意味する。

d 波 η ペアリング状態が固有状態となる拡張 Hubbard 模型 (4.116) のエネルギー準位間隔の分布についても見ておく。周期境界条件の課された正方格子 $L_x = L_y = 4$ で、粒子数 $N = 8$ の場合を考える。ハミルトニアン (4.116) はいくつかの対称性を持っている。まず時間反転 (\mathcal{T})、スピン回転、 x 方向と y 方向に沿った並進の対称性がある。多体相互作用のために粒子正孔対称性は持たないことに注意する。正方格子は点

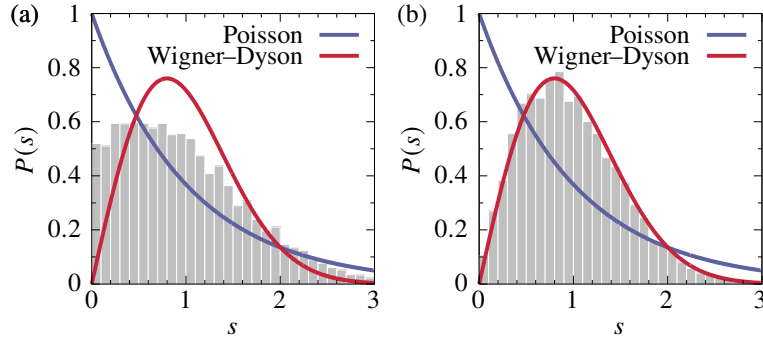


図 4.7: 多体相互作用を含んだ拡張 Hubbard 模型 (4.116) におけるエネルギー準位間隔の分布 $P(s)$ 。量子数が (a) $(P_x, P_y, P_d) = (+1, +1, +1)$ 、(b) $(+1, +1, -1)$ の空間で計算したもの。他の量子数は時間反転 $\mathcal{T} = +1$ 、全運動量 $(0, 0)$ 、全スピン $S = 0$ である。パラメータは $U/t = 2, N = 8, L_x = L_y = 4$ ととっている。文献 [68] より。

群 C_{4v} の対称性も持つが、その中でも x 軸、 y 軸、対角軸に関する鏡映 $\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y, \mathcal{P}_d$ を考える。 $N = 8$ の場合、 d 波 η ペアリング状態は $\mathcal{T} = +1$ 、全運動量 $(0, 0)$ 、全スピン $S = 0, 2, 4$ 、 $(P_x, P_y, P_d) = (+1, +1, +1)$ の空間に属している。周期境界条件を持つ 4×4 の正方格子には、上記以外に偶発的な対称性として 4 次元の超立方体の対称性も存在することが知られている。

図 4.7 に、拡張 Hubbard 模型 (4.116) におけるエネルギー準位間隔の分布 $P(s)$ を数値計算で求めたものをプロットした。(a) は $(P_x, P_y, P_d) = (+1, +1, +1)$ の部分空間、(b) は $(+1, +1, -1)$ の部分空間の結果に対応する。これを見てわかる通り、どちらの場合にも Poisson 分布からの有意なずれが見られる。(a) の場合は Wigner-Dyson 分布からもずれているが、(b) の場合は Wigner-Dyson 分布とよい一致を示すことがわかる。(a) で Wigner-Dyson 分布からずれるのは、隠れた対称性である 4 次元超立方体の対称性を取り込んでいないためと考えられる。対称性を見落とすと Poisson 分布と Wigner-Dyson 分布の中間の分布になってしまう場合がある。このような中間の分布は、独立した 2 つのランダム行列のスペクトルを重ねたときの準位間隔分布としてよく再現される。このような場合、全ての対称性を考慮すれば Wigner-Dyson 分布に近づくことが期待される。これらの結果は、拡張 Hubbard 模型 (4.116) が非可積分系であることを示唆しており、 d 波 η ペアリング状態 (4.99) は量子多体傷跡状態と見なすことができる。

第5章 まとめ

この講義では非平衡超伝導の物理について、最近の研究の話題と絡めながらマクロなスケールからミクロなスケールまで視点を変えながら眺めてきた。こうしてみると、非平衡超伝導について大体のことは理解されたと思いがちであるが、実はわかっていないことの方が多いのが現状である。そこで最後に、今後の課題について列挙してこの講義の締めくくりとしたい。興味を持った人は、ぜひ考えてみてください。新しい研究を始めるきっかけになったら幸いです。

- 実験で何を観測したら、非平衡で超伝導になったと言えるか¹? 光誘起超伝導の実験では、瞬間的に光誘起された状態がピコ秒程度の時間スケールで緩和して超伝導ではない状態に移っていく。そのような有限時間の中で超伝導かどうかを判別する方法はあるだろうか? dc 伝導度を測るには十分長い時間をかけて観測する必要がある。最近になって、時間分解、空間分解しながら Meissner 効果を測定する実験が現れた [69]。今後、非平衡超伝導を特徴づける決定的な方法となるかもしれない。
- Higgs モードと準粒子励起は同じエネルギーギャップ 2Δ を持っている。ところが、3 次高調波などの応答を計算すると Higgs モードの寄与が優勢になることが多い。何が Higgs モードの寄与と準粒子励起の寄与の比を決めているのだろうか? Higgs モードの効果だけを選択的に抜き出すことはできるだろうか?
- 現実に近い状況で高温の常伝導状態から始めて、非平衡にすることで超伝導状態に移させることはできるだろうか? できるとすれば、どのような機構で起こるだろうか?
- 仮に非平衡で超伝導状態を作り出せるとして、そのような状態を長時間保つにはどうしたらよいだろうか? いずれ系は熱平衡化していくことになるが、熱化を避けるような現実的な方法はあるだろうか?

¹これは理論側への問いでもある。

付録 A ミクロからの GL 理論の導出

ミクロな BCS 理論からどのようにしてマクロな GL 理論が導出されるかを見てみる。ここでの議論は Gor'kov の方法 [31] に基づいている。その準備として、温度 Green 関数

$$G_{ab}(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\langle \mathcal{T} \psi_a(\tau, \mathbf{r}) \psi_b^\dagger(0, \mathbf{r}') \rangle \quad (a, b = 1, 2) \quad (\text{A.1})$$

を定義する。ここで

$$\psi_a(\tau, \mathbf{r}) = e^{\tau H} \psi_a(\mathbf{r}) e^{-\tau H} \quad (\text{A.2})$$

は虚時間発展させた南部スピノル $\psi_a(\mathbf{r}) = (c_{r\uparrow}, c_{r\downarrow}^\dagger)^T$ であり、 \mathcal{T} は虚時間方向に沿った時間順序積を表す。 $\langle \dots \rangle = \text{Tr}(\rho \dots)$ は有限温度の平衡状態 $\rho = e^{-\beta H} / Z$ ($Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$) に関する統計平均を表し、 $\beta = 1/(k_B T)$ は逆温度である。南部スピノルは虚時間の運動方程式

$$-\partial_\tau \psi(\tau, \mathbf{r}) = (\varepsilon(-i\nabla_{\mathbf{r}} - e\mathbf{A}\tau_3)\tau_3 - \Delta'(\mathbf{r})\tau_1 - \Delta''(\mathbf{r})\tau_2)\psi(\tau, \mathbf{r}) \quad (\text{A.3})$$

に従っている。 $\varepsilon(\mathbf{k})$ ($\mathbf{k} = -i\nabla_{\mathbf{r}} - e\mathbf{A}\tau_3$) は電子の分散関係であり、ここでは自由空間の分散を仮定する。

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \mu \quad (\text{A.4})$$

m は電子の質量、 μ は化学ポテンシャルである。また、 τ_α ($\alpha = 1, 2, 3$) は Pauli 行列である。超伝導ギャップ $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta'(\mathbf{r}) + i\Delta''(\mathbf{r})$ は一般に位置に依存するとする。運動方程式 (A.3) は実時間 BdG 方程式 (3.21) の虚時間版であり、 $t \rightarrow -i\tau$ と置き換えると対応する。

運動方程式 (A.3) より、温度 Green 関数は以下の方程式を満たす。

$$(-\partial_\tau - \varepsilon(-i\nabla_{\mathbf{r}} - e\mathbf{A}\tau_3)\tau_3 + \Delta'(\mathbf{r})\tau_1 + \Delta''(\mathbf{r})\tau_2)G(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\tau) \quad (\text{A.5})$$

これは Dyson 方程式、あるいは Gor'kov 方程式と呼ばれる。成分ごとに書き下すと、

$$(-\partial_\tau - \varepsilon(-i\nabla - e\mathbf{A}))G_{11}(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') + \Delta^*(\mathbf{r})G_{21}(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\tau) \quad (\text{A.6})$$

$$(-\partial_\tau + \varepsilon(-i\nabla + e\mathbf{A}))G_{21}(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') + \Delta(\mathbf{r})G_{11}(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0 \quad (\text{A.7})$$

となる。超伝導ギャップ関数は自己無撞着条件

$$\Delta(\mathbf{r}) = V \langle c_{\mathbf{r}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger \rangle = V G_{21}(-0; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \quad (\text{A.8})$$

を満たす。

まずは $A = 0$ の場合を考える。 $\Delta = 0$ に対する温度 Green 関数を $G^{(0)}(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ とおくと、

$$(-\partial_\tau - \varepsilon(-i\nabla))G_{11}^{(0)}(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\tau) \quad (\text{A.9})$$

$$(-\partial_\tau + \varepsilon(-i\nabla))G_{22}^{(0)}(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\tau) \quad (\text{A.10})$$

$$G_{12}^{(0)}(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{21}^{(0)}(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0 \quad (\text{A.11})$$

が成り立っている。この $G^{(0)}$ を用いると、 G は

$$G_{11}(i\omega_n; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \mathbf{r}') - \int d\bar{\mathbf{r}} G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) \Delta^*(\bar{\mathbf{r}}) G_{21}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{r}') \quad (\text{A.12})$$

$$G_{21}(i\omega_n; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = - \int d\bar{\mathbf{r}} G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) \Delta(\bar{\mathbf{r}}) G_{11}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{r}') \quad (\text{A.13})$$

と表すことができる。ここで温度 Green 関数の Fourier 変換を

$$G(i\omega_n; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{A.14})$$

$$G(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G(i\omega_n; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{A.15})$$

と定義した。 $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$ ($n \in \mathbb{Z}$) は松原周波数である。このように Fourier 変換できるのは、温度 Green 関数に (反) 周期性があるためである。

$$G(\tau + \beta; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -G(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{A.16})$$

関係式 (A.12), (A.13) を使うことで、 G を逐次的に Δ に関して展開していくことができる。 G_{21} について Δ の 3 次まで展開すると、

$$\begin{aligned} G_{21}(i\omega_n; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= - \int d\bar{\mathbf{r}} G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) \Delta(\bar{\mathbf{r}}) G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{r}') \\ &\quad - \int d\bar{\mathbf{r}} d\bar{\mathbf{r}}' d\bar{\mathbf{r}}'' G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) \Delta(\bar{\mathbf{r}}) G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \bar{\mathbf{r}}') \Delta^*(\bar{\mathbf{r}}') G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}', \bar{\mathbf{r}}'') \Delta(\bar{\mathbf{r}}'') G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}'', \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

これを自己無撞着条件 (A.8) に代入することで、

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{r}) = & -\frac{V}{\beta} \sum_n \int d\bar{\mathbf{r}} G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) \Delta(\bar{\mathbf{r}}) G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{r}) \\ & - \frac{V}{\beta} \sum_n \int d\bar{\mathbf{r}} d\bar{\mathbf{r}}' d\bar{\mathbf{r}}'' G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) \Delta(\bar{\mathbf{r}}) G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \bar{\mathbf{r}}') \Delta^*(\bar{\mathbf{r}}') G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}', \bar{\mathbf{r}}'') \Delta(\bar{\mathbf{r}}'') G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}'', \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

が得られる。

さらに超伝導ギャップの空間変化は十分ゆっくりであるとして、積分内の $\Delta(\bar{\mathbf{r}})$ を次のように展開する。

$$\Delta(\bar{\mathbf{r}}) = \Delta(\mathbf{r}) + (\bar{\mathbf{r}} - \mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \Delta(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{r}} - \mathbf{r})^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2 \Delta(\mathbf{r}) + \dots \quad (\text{A.19})$$

これを式 (A.18) の右辺第一項に代入する。右辺第二項については Δ の高次の項なので Δ の空間変化は無視することにする。すると、

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{r}) = & -\frac{V}{\beta} \sum_n \Delta(\mathbf{r}) \int d\bar{\mathbf{r}} G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{r}) \\ & - \frac{V}{\beta} \sum_n \frac{1}{6} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \Delta(\mathbf{r}) \int d\bar{\mathbf{r}} (\bar{\mathbf{r}} - \mathbf{r})^2 G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{r}) \\ & - \frac{V}{\beta} \sum_n |\Delta(\mathbf{r})|^2 \Delta(\mathbf{r}) \int d\bar{\mathbf{r}} d\bar{\mathbf{r}}' d\bar{\mathbf{r}}'' G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \bar{\mathbf{r}}') G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}', \bar{\mathbf{r}}'') G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}'', \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

という近似を得ることができる。上式の第二項については、 $\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \nabla_{\mathbf{r}_i} \nabla_{\mathbf{r}_j} \Delta(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r} (\bar{\mathbf{r}} - \mathbf{r})_i (\bar{\mathbf{r}} - \mathbf{r})_j \dots$ としたときに積分は $i \neq j$ で消えるので $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 \Delta(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r} (\bar{\mathbf{r}} - \mathbf{r})_i^2 \dots$ となり、さらに系は等方的なので積分は i に依らないはずなので積分内の i について対称化して $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 \Delta(\mathbf{r}) \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 \int d\mathbf{r} (\bar{\mathbf{r}} - \mathbf{r})_j^2 \dots$ という変形をした。

式 (A.20) の各係数について評価していく。まず第一項については

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \int d\bar{\mathbf{r}} G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{(i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}})(i\omega_n + \varepsilon_{\mathbf{k}})} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}\right) \quad (\text{A.21})$$

となる。ここで、ギャップ方程式 (3.15) で $T \rightarrow T_c$ ($\beta \rightarrow \beta_c$) とすると、

$$\Delta = \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta_c \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}\right) \quad (\text{A.22})$$

となることを使う。 $T = T_c$ の近傍では

$$-\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}\right) = -\left(\frac{1}{V} + D(\varepsilon_F) \log \frac{T_c}{T}\right) \quad (\text{A.23})$$

と評価することができる。ここで $D(\varepsilon_F)$ は Fermi エネルギーにおける状態密度である。(A.20) の第二項の係数は

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \int d\bar{\mathbf{r}} (\bar{\mathbf{r}} - \mathbf{r})^2 G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{r}) = \frac{7}{8} D(\varepsilon_F) \frac{\zeta(3)v_F^2}{(\pi k_B T)^2} \quad (\text{A.24})$$

となり (v_F は Fermi 速度)、第三項の係数は

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \int d\bar{\mathbf{r}} d\bar{\mathbf{r}}' d\bar{\mathbf{r}}'' G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}, \bar{\mathbf{r}}') G_{22}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}', \bar{\mathbf{r}}'') G_{11}^{(0)}(i\omega_n; \bar{\mathbf{r}}'', \mathbf{r}) = \frac{7}{8} D(\varepsilon_F) \frac{\zeta(3)}{(\pi k_B T)^2} \quad (\text{A.25})$$

となる。これらの結果を合わせると、

$$\Delta(\mathbf{r}) = \left(1 + V D(\varepsilon_F) \log \frac{T_c}{T}\right) \Delta(\mathbf{r}) - \frac{V}{6} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \Delta(\mathbf{r}) \frac{7}{8} D(\varepsilon_F) \frac{\zeta(3)v_F^2}{(\pi k_B T)^2} - V |\Delta(\mathbf{r})|^2 \Delta(\mathbf{r}) \frac{7}{8} D(\varepsilon_F) \frac{\zeta(3)}{(\pi k_B T)^2} \quad (\text{A.26})$$

となる。さらに式変形をすると

$$0 = \log \frac{T_c}{T} \Delta(\mathbf{r}) - \frac{7\zeta(3)v_F^2}{48(\pi k_B T)^2} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \Delta(\mathbf{r}) - \frac{7\zeta(3)}{8(\pi k_B T)^2} |\Delta(\mathbf{r})|^2 \Delta(\mathbf{r}) \quad (\text{A.27})$$

である。 $v_F^2 = k_F^2/m^2 = 2\varepsilon_F/m$ という関係を使い、 $T = T_c$ の近傍で考えると Δ は

$$\left[\frac{1}{4m} (-i\nabla_{\mathbf{r}})^2 + \frac{6(\pi k_B T_c)^2}{7\zeta(3)\varepsilon_F} \left(\frac{T - T_c}{T_c} + \frac{7\zeta(3)}{8(\pi k_B T_c)^2} |\Delta(\mathbf{r})|^2 \right) \right] \Delta^*(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{A.28})$$

という関係を満たすことがわかる。 Δ^* と GL 理論の ψ が比例していると考えれば、 $A = 0$ のときの GL 方程式と同一視することができる。

$A \neq 0$ の場合は、次のように考えることができる。ゲージ変換 $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi(\mathbf{r})$ をすると $c_{r\sigma} \rightarrow e^{ie\chi(\mathbf{r})} c_{r\sigma}$ となるので、 $\Delta^*(\mathbf{r}) \rightarrow e^{2ie\chi(\mathbf{r})} \Delta^*(\mathbf{r})$ と変換される。(A.28) をゲージ不変な形にするには A を

$$\left[\frac{1}{4m} (-i\nabla_{\mathbf{r}} - 2e\mathbf{A})^2 + \frac{6(\pi k_B T_c)^2}{7\zeta(3)\varepsilon_F} \left(\frac{T - T_c}{T_c} + \frac{7\zeta(3)}{8(\pi k_B T_c)^2} |\Delta(\mathbf{r})|^2 \right) \right] \Delta^*(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{A.29})$$

のように導入する必要がある。GL 理論における有効質量 m^* 、有効電荷は e^* は、クーパー対の凝縮を反映して $m^* = 2m, e^* = 2e$ となる。

カレントについては Green 関数を用いて

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 2 \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \left[-\frac{ie}{2m} (\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'} + \frac{e^2}{m} \mathbf{A}) G_{11}(-0; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \right] \quad (\text{A.30})$$

と表すことができる。導出は省略するが、これも Δ による展開によって $T = T_c$ 近傍で評価することできて、以下のようなになる。

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{7\zeta(3)n}{16(\pi k_B T_c)^2} \left[-\frac{ie}{m} (\Delta(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \Delta^*(\mathbf{r}) - \Delta^*(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \Delta(\mathbf{r})) - \frac{4e^2}{m} |\Delta(\mathbf{r})|^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right] \quad (\text{A.31})$$

ここで n は粒子数密度である。これが GL 理論のカレントの表式 (2.3) に一致するためには

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{7\zeta(3)n}{8(\pi k_B T_c)^2} \right)^{\frac{1}{2}} \Delta^*(\mathbf{r}) \quad (\text{A.32})$$

とおく必要がある。超流動密度 $n_s = |\psi|^2$ は $T = T_c$ の近傍で

$$n_s = \frac{7\zeta(3)|\Delta|^2}{8(\pi k_B T_c)^2} n \quad (\text{A.33})$$

となることがわかる。また、(A.29) が GL 方程式

$$\frac{\partial f}{\partial \psi^*} = a\psi(\mathbf{r}) + b|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m^*} (-i\nabla_{\mathbf{r}} - e^* \mathbf{A})\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{A.34})$$

と一致するためには、GL 理論のパラメーターを

$$a = \frac{6(\pi k_B T_c)^2}{7\zeta(3)\varepsilon_F} \frac{T - T_c}{T_c} \quad (\text{A.35})$$

$$b = \frac{6(\pi k_B T_c)^2}{7\zeta(3)n\varepsilon_F} \quad (\text{A.36})$$

とおく必要がある。特に、

$$b \left(\frac{\psi}{\Delta} \right)^2 = \frac{3}{4\varepsilon_F} \quad (\text{A.37})$$

である。

付録 B 時間依存BCS理論の数値解法

時間依存 BCS 理論では、擬スピンについての時間発展方程式 (3.23) を解くことになる。

$$\partial_t \sigma_{\mathbf{k}}^\alpha(t) = \frac{i}{2} \langle \psi_{\mathbf{k}}^\dagger(t) [h_{\mathbf{k}}(t), \tau_\alpha] \psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle \quad (\text{B.1})$$

超伝導ギャップ関数に関する自己無撞着条件 (3.27) と合わせると、解くべき方程式は擬スピンについての非線形方程式になるため、解析的に解くことは容易ではない。しかし数値的には精度よく解くことができるので、その解法例を紹介する。

2×2 のハミルトニアン $h_{\mathbf{k}}(t)$ (3.7) は次のように Pauli 行列で展開できる。

$$h_{\mathbf{k}}(t) = \sum_{\beta} h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t) \tau_{\beta} \quad (\text{B.2})$$

展開係数は

$$h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t) = (-\Delta'(t), -\Delta''(t), \varepsilon_{\mathbf{k}}) \quad (\text{B.3})$$

で与えられる。 $h_{\mathbf{k}}^{\beta}$ は擬スピんに働く有効磁場 $b_{\mathbf{k}}^{\beta}(t)$ (3.26) そのものである。この表記を用いると、時間発展方程式は

$$\begin{aligned} \partial_t \sigma_{\mathbf{k}}^\alpha(t) &= \frac{i}{2} \sum_{\beta} h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t) \langle \psi_{\mathbf{k}}^\dagger(t) [\tau_{\beta}, \tau_{\alpha}] \psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\beta\gamma} 2i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t) \langle \psi_{\mathbf{k}}^\dagger(t) \tau_{\gamma} \psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle \\ &= 2 \sum_{\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t) \sigma_{\mathbf{k}}^{\gamma}(t) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

と表せる。ここで時間を離散化して微分方程式を微小区間 $[t, t+\Delta t]$ で積分し、積分を台形公式 $\int_t^{t+\Delta t} d\bar{t} f(\bar{t}) \approx$

$\frac{\Delta t}{2}[f(t) + f(t + \Delta t)] + O(\Delta t^3)$ で近似すると、

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t + \Delta t) - \sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t) &= \int_t^{t+\Delta t} dt \partial_t \sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t) \\ &\approx \frac{\Delta t}{2} [\partial_t \sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t) + \partial_t \sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t + \Delta t)] \\ &= \Delta t \sum_{\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} [h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t) \sigma_{\mathbf{k}}^{\gamma}(t) + h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t + \Delta t) \sigma_{\mathbf{k}}^{\gamma}(t + \Delta t)]\end{aligned}\quad (\text{B.5})$$

となる。ここで $h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t + \Delta)$ は $\Delta(t + \Delta t)$ に依存し、自己無撞着条件 (3.27) から $\sigma_{\mathbf{k}}(t + \Delta t)$ にも依存することに注意する。

実際に時間発展を求めるには、次のアルゴリズムで計算を進める。まず、初期条件を設定する。例えば、擬スピンの初期状態 $\sigma_{\mathbf{k}}(0)$ とギャップ関数の初期値 $\Delta(0)$ として平衡状態の解を持ってくる。時刻 t まで解が求まったときに $t + \Delta t$ の解を求めるには、 $\sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t + \Delta t) = \sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t)$, $\Delta(t + \Delta t) = \Delta(t)$ を最初の試行解とし、関係式

$$\sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t + \Delta t) = \sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t) + \Delta t \sum_{\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} [h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t) \sigma_{\mathbf{k}}^{\gamma}(t) + h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t + \Delta t) \sigma_{\mathbf{k}}^{\gamma}(t + \Delta t)] \quad (\text{B.6})$$

$$\Delta(t + \Delta t) = \frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}} [\sigma_{\mathbf{k}}^x(t + \Delta t) + i \sigma_{\mathbf{k}}^y(t + \Delta t)] \quad (\text{B.7})$$

を用いて $\sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t + \Delta t) \rightarrow \Delta(t + \Delta t) \rightarrow h_{\mathbf{k}}^{\beta}(t + \Delta t) \rightarrow \sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t + \Delta t)$ の順に反復代入を行い、解が収束するまで代入を繰り返す。適当に決めた収束条件が満たされたら、次の時刻に進む。このように各時刻ごとに自己無撞着に解いていくことで、効率よく解を求めることができる。通常は、各時刻で数回の反復代入を繰り返すだけで十分収束する。ここで示した方法は、2 次の陰的 Runge-Kutta 法と等価なものになっている。台形公式を Simpson 公式などのより精度の高い近似法に置き換えることで近似精度を向上させることもできる。

計算が正しく行われているかを確認するには、ハミルトニアンが時間に依存しないときに全エネルギーが保存されているかどうかを見るとよい。全エネルギー密度は BCS 理論では次のように与えられる。

$$\begin{aligned}E_{\text{tot}}(t) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) h_{\mathbf{k}}(t) \psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle + \frac{V(t)}{N} \sum_i \langle c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} \rangle \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle \\ &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} h_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t) \sigma_{\mathbf{k}}^{\alpha}(t) + \frac{|\Delta(t)|^2}{V(t)}\end{aligned}\quad (\text{B.8})$$

ハミルトニアンが時間に依存しなければ、数値誤差の範囲内で全エネルギーは保存するはずである。時間に依存する部分が数値誤差かどうかは、 Δt を変えることで判別できる。

プログラム言語 Julia を用いたサンプルコード (quench.jl) を用意したので、それを使って実際に計算してみましょう。図 B.1 のような結果が出れば成功です。

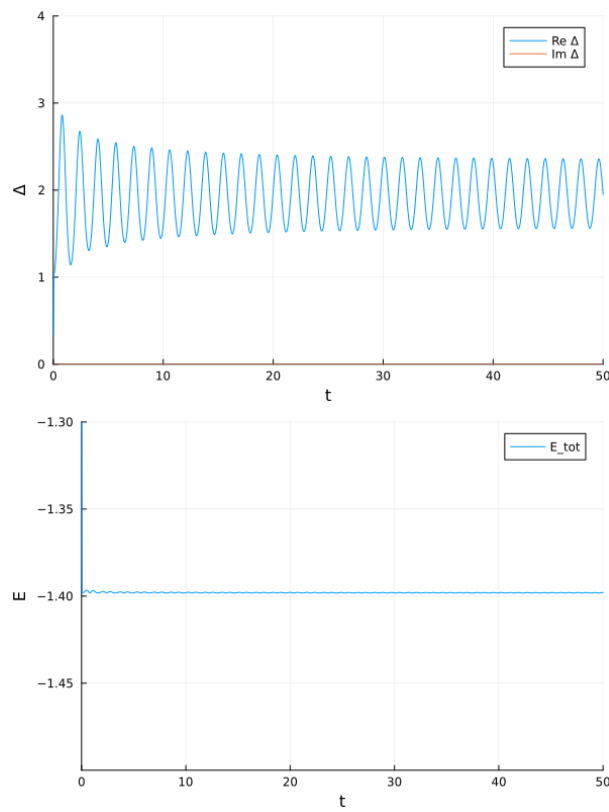


図 B.1: 超伝導ギャップ関数 (上) と全エネルギー密度 (下) の時間発展の数値解。1次元格子の分散関係 $\varepsilon_k = -2 \cos k$ を用い、相互作用パラメーターを $V_i = 2$ から $V_f = 6$ にクエンチした場合の結果。初期状態は温度 $T = 0.05$ の平衡状態である。

付録 C 2粒子密度行列の固有値の上限

第4章の不等式 (4.30) を証明する。ここでの議論は Yang の1962年の論文 [62] および中川大也さんのノート [70] を参考にしている。

まず次の補題を準備する。

補題 C.1. X を複素反对称行列 ($X^T = -X$) としたときに、あるユニタリー行列 U が存在して

$$UXU^T = \begin{pmatrix} 0 & a_1 & & & & & & & \\ -a_1 & 0 & & & & & & & \\ & & 0 & a_2 & & & & & \\ & & -a_2 & 0 & & & & & \\ & & & & \ddots & & & & \\ & & & & & 0 & a_n & & \\ & & & & & -a_n & 0 & & \\ & & & & & & & 0 & \\ & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & 0 \end{pmatrix} \tag{C.1}$$

の形にできる。ここで a_j ($j = 1, 2, \dots, n$) は正の実数である。

証明. $X^\dagger X$ は非負のエルミート行列なので、非負の固有値と対応する固有ベクトルからなる正規直交基底を取れる。一つの固有値を a^2 とおき (ただし $a \geq 0$)、対応する規格化された固有ベクトルを v とおくと ($(v, v) = 1$)、

$$X^\dagger X v = a^2 v \tag{C.2}$$

である。 $X^\dagger = (X^T)^* = -X^*$ より

$$X^* X v = -a^2 v \tag{C.3}$$

である。 $a > 0$ と仮定すると、 $u := -(1/a)X^*v^*$ とおけば、

$$X^\dagger X u = -\frac{1}{a}X^\dagger X X^*v^* = -\frac{1}{a}X^\dagger(X^*Xv)^* = -\frac{1}{a}(-X^*)(-a^2v)^* = a^2u \quad (\text{C.4})$$

なので、 u も $X^\dagger X$ の固有値 a^2 の固有ベクトルである。さらに

$$X u = -\frac{1}{a}(X^*Xv)^* = av^* \quad (\text{C.5})$$

$$X v = (X^*v^*)^* = -au^* \quad (\text{C.6})$$

が成り立つ。 u と v の内積は

$$(u, v)^* = u^T v^* = \frac{1}{a}u^T X u = \frac{1}{a} \sum_{i,j} X_{ij} u_i u_j = 0 \quad (\because X_{ij} = -X_{ji}) \quad (\text{C.7})$$

となり、互いに直交する。また、

$$(u, u)^* = u^T u^* = \frac{1}{a^2}v^\dagger X^\dagger X v = v^\dagger v = (v, v) = 1 \quad (\text{C.8})$$

なので u は規格化された固有ベクトルである。すなわち、 $X^\dagger X$ のゼロでない固有値は必ず 2 重縮退する。 $a = 0$ のときは $(v, X^\dagger X v) = \|Xv\|^2 = 0$ 、つまり $Xv = 0$ であり v は X のゼロ固有値に対応する固有ベクトルになる。

$X^\dagger X$ のゼロでない固有値に属する正規直交化された固有ベクトルを全て並べたものを $\{v_1, u_1, \dots, v_n, u_n\}$ 、ゼロ固有値に属する正規直交化された固有ベクトルを全て並べたものを $\{w_1, \dots, w_m\}$ とおく。ユニタリー行列 U を $U^T = (v_1, u_1, \dots, v_n, u_n, w_1, \dots, w_m)$ で定義すると (C.1) の形になる。 \square

それでは (4.30) を証明する。証明すべき事柄を再掲する。

定理 C.1. サイト数 L 、粒子数 N 、スピン成分数 2 (つまり $\sigma = \uparrow, \downarrow$) のフェルミ粒子系を考える。2 粒子密度行列 $(\rho_2)_{i\sigma_1, j\sigma_2, k\sigma_3, l\sigma_4} = \text{Tr}(\rho c_{j\sigma_2}^\dagger c_{i\sigma_1}^\dagger c_{k\sigma_3} c_{l\sigma_4})$ の最大固有値を Λ_2 とすると、

$$\Lambda_2 \leq \frac{N(2L - N + 2)}{2L} \quad (\text{C.9})$$

が成り立つ。

証明. $c_{j\sigma}$ の足をひとまとめに $\alpha := (j, \sigma)$ として、 $c_{j\sigma} = c_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, \dots, 2L$) と書くことにする。 $W = \sum_{\alpha, \beta=1}^{2L} w_{\alpha\beta} c_\alpha c_\beta$ とおく。ここで $w_{\alpha\beta}$ は複素反対称行列 ($w_{\alpha\beta} = -w_{\beta\alpha}$) であり、規格化条件 $(w, w) = \sum_{\alpha, \beta=1}^{2L} |w_{\alpha\beta}|^2 = 1$ を満たしているとする。次の量を考える。

$$(w, \rho_2 w) = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta=1}^{2L} w_{\alpha\beta}^* (\rho_2)_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} w_{\gamma\delta} = \text{Tr}(W^\dagger W \rho) \quad (\text{C.10})$$

ρ_2 の最大固有値が Λ_2 なので、 $(w, \rho_2 w) = \text{Tr}(W^\dagger W \rho) \leq \Lambda_2$ である。よって $\text{Tr}(W^\dagger W \rho)$ の上限を求めれば Λ_2 の上限が得られる。さらに ρ は純粋状態と仮定してよい。なぜなら、任意の純粋状態 $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ について

$$\langle\Psi|W^\dagger W|\Psi\rangle \leq \frac{N(2L - N + 2)}{2L} \quad (\text{C.11})$$

が示しているとする、任意の混合状態 $\rho = \sum_n p_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$ に対して

$$\text{Tr}(W^\dagger W \rho) = \sum_n p_n \langle\Psi_n|W^\dagger W|\Psi_n\rangle \leq \left(\sum_n p_n\right) \frac{N(2L - N + 2)}{2L} = \frac{N(2L - N + 2)}{2L} \quad (\text{C.12})$$

が言えるためである。そこで以下では (C.11) を示す。

まず、ユニタリ行列 $U_{\beta,\alpha}$ を使って $c_\alpha = \sum_\beta U_{\beta,\alpha} c'_\beta$ と変数変換すると、

$$W = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\gamma,\delta} w_{\alpha\beta} U_{\gamma,\alpha} c'_\gamma U_{\delta,\beta} c'_\delta = \sum_{\gamma,\delta} (UwU^T)_{\gamma,\delta} c'_\gamma c'_\delta \quad (\text{C.13})$$

となる。 $w \rightarrow UwU^T$ と変換することに注目すると、 w は反対称行列なので補題 (C.1) より UwU^T は (C.1) の形にできる。そこで

$$\begin{aligned} W &= \mu_1(c_1 c_2 - c_2 c_1) + \mu_2(c_3 c_4 - c_4 c_3) + \cdots + \mu_L(c_{2L-1} c_{2L} - c_{2L} c_{2L-1}) \\ &= 2\mu_1 c_1 c_2 + 2\mu_2 c_3 c_4 + \cdots + 2\mu_L c_{2L-1} c_{2L} \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

とおいてよい。ここで $\mu_n \geq 0$ である。また、規格化条件は

$$\sum_{\alpha,\beta} |w_{\alpha,\beta}|^2 = \sum_{n=1}^L 2\mu_n^2 = 1 \quad (\text{C.15})$$

である。一般性を失うことなく $\mu_1 > 0$ としよ。

ここで

$$G := W - 2\mu_1 c_1 c_2 = 2\mu_2 c_3 c_4 + \cdots + 2\mu_L c_{2L-1} c_{2L} \quad (\text{C.16})$$

$$K := \sum_{\alpha=3}^{2L} c_\alpha^\dagger c_\alpha = N - c_1^\dagger c_1 - c_2^\dagger c_2 \quad (\text{C.17})$$

とおく。 G, K はともに $\alpha = 3, 4, \dots, 2L$ の自由度のみに作用する演算子である。自由度 1, 2 の状態の基底 $\{|0\rangle, c_1^\dagger|0\rangle, c_2^\dagger|0\rangle, c_1^\dagger c_2^\dagger|0\rangle\}$ に関して $|\Psi\rangle$ を

$$|\Psi\rangle = (|\phi_{00}\rangle, |\phi_{10}\rangle, |\phi_{01}\rangle, |\phi_{11}\rangle)^T \quad (\text{C.18})$$

とベクトル表示する¹。 $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ より

$$\langle \phi_{00} | \phi_{00} \rangle + \langle \phi_{10} | \phi_{10} \rangle + \langle \phi_{01} | \phi_{01} \rangle + \langle \phi_{11} | \phi_{11} \rangle = 1 \quad (\text{C.19})$$

が満たされる必要がある。

演算子 W , $W^\dagger W$ を自由度 1, 2 の基底に関して行列表示すると、

$$W = \begin{pmatrix} G & & & 2\mu_1 \\ & G & & \\ & & G & \\ & & & G \end{pmatrix} \quad (\text{C.20})$$

$$W^\dagger W = \begin{pmatrix} G^\dagger G & & & 2\mu_1 G^\dagger \\ & G^\dagger G & & \\ & & G^\dagger G & \\ 2\mu_1 G & & & G^\dagger G + 4\mu_1^2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.21})$$

と表される。また K は自由度 3 から $2L$ までの全粒子数演算子であり、 $|\phi_{00}\rangle, |\phi_{10}\rangle, |\phi_{01}\rangle, |\phi_{11}\rangle$ はそれぞれ K の固有状態になっている。

$$K|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} N & & & \\ & N-1 & & \\ & & N-1 & \\ & & & N-2 \end{pmatrix} |\Psi\rangle \quad (\text{C.22})$$

今、 $\langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle \leq B(L, N)$ という形の上限が現在考えている L よりも小さい場合に示されていると仮定し、 L についての帰納法を用いる²。条件 (C.15), (C.19), (C.22) を満たしながら μ_n ($n = 1, 2, \dots, L$) と

¹自由度 3 から $2L$ の状態については省略して表記している。

² $L = 1$ のときは 2 粒子密度行列は $\rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & d & -d & \\ & -d & d & \\ & & & 0 \end{pmatrix}$ となる。ただし $d = \text{Tr}(\rho n_\uparrow n_\downarrow)$ は 2 重占有数を表す。 ρ_2 の最大

固有値 Λ_2 は $2d \leq 0, 0, 2$ ($N = 0, 1, 2$) であり、確かに $\Lambda_2 \leq N(4 - N)/2$ を満たしている。等号は $\rho = |0\rangle\langle 0|, |\uparrow\downarrow\rangle\langle \uparrow\downarrow|$ のときに成立する。

$|\phi_{00}\rangle, |\phi_{10}\rangle, |\phi_{01}\rangle, |\phi_{11}\rangle$ を動かして $\langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle$ を最大化することを考える。

$$\begin{aligned} \langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle &= \langle \phi_{00} | G^\dagger G | \phi_{00} \rangle + \langle \phi_{11} | (G^\dagger G + 4\mu_1^2) | \phi_{11} \rangle + 2\mu_1 \langle \phi_{00} | G^\dagger | \phi_{11} \rangle + 2\mu_1 \langle \phi_{11} | G | \phi_{00} \rangle \\ &\quad + \langle \phi_{10} | G^\dagger G | \phi_{10} \rangle + \langle \phi_{01} | G^\dagger G | \phi_{01} \rangle \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

$\{|\phi_{00}\rangle, |\phi_{11}\rangle\}$ と $\{|\phi_{10}\rangle, |\phi_{01}\rangle\}$ は混成しないことに注意する。 $\langle \phi_{00} | \phi_{00} \rangle + \langle \phi_{11} | \phi_{11} \rangle = \alpha$, $\langle \phi_{10} | \phi_{10} \rangle + \langle \phi_{01} | \phi_{01} \rangle = \beta$ (ただし $\alpha + \beta = 1, \alpha \geq 0, \beta \geq 0$) とおいて、 $|\tilde{\phi}_{00}\rangle = \alpha^{-1/2} |\phi_{00}\rangle$, $|\tilde{\phi}_{11}\rangle = \alpha^{-1/2} |\phi_{11}\rangle$, $|\tilde{\phi}_{10}\rangle = \beta^{-1/2} |\phi_{10}\rangle$, $|\tilde{\phi}_{01}\rangle = \beta^{-1/2} |\phi_{01}\rangle$ と規格化しなおす。

$$\begin{aligned} \langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle &= \alpha \left(\langle \tilde{\phi}_{00} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{00} \rangle + \langle \tilde{\phi}_{11} | (G^\dagger G + 4\mu_1^2) | \tilde{\phi}_{11} \rangle + 2\mu_1 \langle \tilde{\phi}_{00} | G^\dagger | \tilde{\phi}_{11} \rangle + 2\mu_1 \langle \tilde{\phi}_{11} | G | \tilde{\phi}_{00} \rangle \right) \\ &\quad + \beta \left(\langle \tilde{\phi}_{10} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{10} \rangle + \langle \tilde{\phi}_{01} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{01} \rangle \right) \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

上式の右辺の丸カッコの中は α, β によらないので、それぞれ $\{|\tilde{\phi}_{00}\rangle, |\tilde{\phi}_{11}\rangle\}$ と $\{|\tilde{\phi}_{10}\rangle, |\tilde{\phi}_{01}\rangle\}$ について $\langle \tilde{\phi}_{00} | \tilde{\phi}_{00} \rangle + \langle \tilde{\phi}_{11} | \tilde{\phi}_{11} \rangle = 1$ を満たしながら最大化すると、

$$\begin{aligned} &\alpha \max_{|\tilde{\phi}_{00}\rangle, |\tilde{\phi}_{11}\rangle} \left(\langle \tilde{\phi}_{00} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{00} \rangle + \langle \tilde{\phi}_{11} | (G^\dagger G + 4\mu_1^2) | \tilde{\phi}_{11} \rangle + 2\mu_1 \langle \tilde{\phi}_{00} | G^\dagger | \tilde{\phi}_{11} \rangle + 2\mu_1 \langle \tilde{\phi}_{11} | G | \tilde{\phi}_{00} \rangle \right) \\ &+ \beta \max_{|\tilde{\phi}_{10}\rangle, |\tilde{\phi}_{01}\rangle} \left(\langle \tilde{\phi}_{10} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{10} \rangle + \langle \tilde{\phi}_{01} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{01} \rangle \right) \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

となる。もし

$$\begin{aligned} &\max_{|\tilde{\phi}_{00}\rangle, |\tilde{\phi}_{11}\rangle} \left(\langle \tilde{\phi}_{00} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{00} \rangle + \langle \tilde{\phi}_{11} | (G^\dagger G + 4\mu_1^2) | \tilde{\phi}_{11} \rangle + 2\mu_1 \langle \tilde{\phi}_{00} | G^\dagger | \tilde{\phi}_{11} \rangle + 2\mu_1 \langle \tilde{\phi}_{11} | G | \tilde{\phi}_{00} \rangle \right) \\ &\leq \max_{|\tilde{\phi}_{10}\rangle, |\tilde{\phi}_{01}\rangle} \left(\langle \tilde{\phi}_{10} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{10} \rangle + \langle \tilde{\phi}_{01} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{01} \rangle \right) \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

が成り立つとすると、(C.24) の右辺が最大になるのは $\alpha = 0, \beta = 1$ のとき。すなわち $\langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle = \langle \tilde{\phi}_{10} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{10} \rangle + \langle \tilde{\phi}_{01} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{01} \rangle$ であるが、右辺は μ_1 をあらわに含まないのだから μ_1 を小さくして μ_2, \dots, μ_L を大きくすることで $\langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle$ を大きくできる。 $\langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle$ が最大になるのは $\mu_1 = 0$ のときであるが、これは $\mu_1 > 0$ と仮定していたことと矛盾する。よって

$$\begin{aligned} &\max_{|\tilde{\phi}_{00}\rangle, |\tilde{\phi}_{11}\rangle} \left(\langle \tilde{\phi}_{00} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{00} \rangle + \langle \tilde{\phi}_{11} | (G^\dagger G + 4\mu_1^2) | \tilde{\phi}_{11} \rangle + 2\mu_1 \langle \tilde{\phi}_{00} | G^\dagger | \tilde{\phi}_{11} \rangle + 2\mu_1 \langle \tilde{\phi}_{11} | G | \tilde{\phi}_{00} \rangle \right) \\ &> \max_{|\tilde{\phi}_{10}\rangle, |\tilde{\phi}_{01}\rangle} \left(\langle \tilde{\phi}_{10} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{10} \rangle + \langle \tilde{\phi}_{01} | G^\dagger G | \tilde{\phi}_{01} \rangle \right) \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

が成り立ち、(C.24) の右辺が最大になるのは $\alpha = 1, \beta = 0$ (つまり $|\phi_{10}\rangle = |\phi_{01}\rangle = 0$) のとき。以下では $|\phi_{10}\rangle = |\phi_{01}\rangle = 0$ とおいて話を進める。

Cauchy-Schwarz の不等式³ を使うと

$$\langle \phi_{00} | G^\dagger | \phi_{11} \rangle \leq \sqrt{\langle \phi_{00} | G^\dagger G | \phi_{00} \rangle \langle \phi_{11} | \phi_{11} \rangle} \quad (\text{C.28})$$

$$\langle \phi_{11} | G | \phi_{00} \rangle \leq \sqrt{\langle \phi_{00} | G^\dagger G | \phi_{00} \rangle \langle \phi_{11} | \phi_{11} \rangle} \quad (\text{C.29})$$

を得るので、

$$\langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle \leq \langle \phi_{00} | G^\dagger G | \phi_{00} \rangle + \langle \phi_{11} | G^\dagger G | \phi_{11} \rangle + 4\mu_1^2 \langle \phi_{11} | \phi_{11} \rangle + 4\mu_1 \sqrt{\langle \phi_{00} | G^\dagger G | \phi_{00} \rangle \langle \phi_{11} | \phi_{11} \rangle} \quad (\text{C.30})$$

となる。さらに帰納法の仮定を用いると

$$\frac{\langle \phi_{00} | G^\dagger G | \phi_{00} \rangle}{\langle \phi_{00} | \phi_{00} \rangle (1 - 2\mu_1^2)} \leq B(L - 1, N) \quad (\text{C.31})$$

$$\frac{\langle \phi_{11} | G^\dagger G | \phi_{11} \rangle}{\langle \phi_{11} | \phi_{11} \rangle (1 - 2\mu_1^2)} \leq B(L - 1, N - 2) \quad (\text{C.32})$$

である ($\sum_{n=2}^L 2\mu_n^2 = 1 - 2\mu_1^2$ に注意) ので、

$$\begin{aligned} \langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle &\leq x(1 - 2\mu_1^2)B(L - 1, N) + (1 - x)(1 - 2\mu_1^2)B(L - 1, N - 2) + 4\mu_1^2(1 - x) \\ &\quad + 4\mu_1 \sqrt{x(1 - x)(1 - 2\mu_1^2)B(L - 1, N)} \end{aligned} \quad (\text{C.33})$$

を得る。ここで $x = \langle \phi_{00} | \phi_{00} \rangle$ とおき、 $\langle \phi_{11} | \phi_{11} \rangle = 1 - \langle \phi_{00} | \phi_{00} \rangle = 1 - x$ を使った。 $B(L - 1, N) = N(2L - N)/2(L - 1)$ などを代入すると、

$$\begin{aligned} \langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle &\leq x(1 - 2\mu_1^2) \frac{N(2L - N)}{2(L - 1)} + (1 - x)(1 - 2\mu_1^2) \frac{(N - 2)(2L - N + 2)}{2(L - 1)} + 4\mu_1^2(1 - x) \\ &\quad + 4\mu_1 \sqrt{x(1 - x)(1 - 2\mu_1^2) \frac{N(2L - N)}{2(L - 1)}} \end{aligned} \quad (\text{C.34})$$

が成り立つ。右辺を x と μ_1 について最大化すると⁴、

$$x = \frac{2L - N}{2L}, \quad \mu_1 = \frac{1}{\sqrt{2L}} \quad (\text{C.35})$$

³不等式 $\langle x|y \rangle^2 \leq \langle x|x \rangle \langle y|y \rangle$ のこと。 $|x\rangle = G|\phi_{00}\rangle$, $|y\rangle = |\phi_{11}\rangle$ などを代入して使っている。

⁴[62] には “After some straightforward algebra, one finds ...” と書かれているが、この計算はそれほど簡単ではない。

のときに最大になり、最大値は

$$\begin{aligned}
 & \frac{2L-N}{2L} \frac{L-1}{L} \frac{N(2L-N)}{2(L-1)} + \frac{N}{2L} \frac{L-1}{L} \frac{(N-2)(2L-N+2)}{2(L-1)} + 4 \frac{1}{2L} \frac{N}{2L} \\
 & + 4 \sqrt{\frac{1}{2L} \frac{2L-N}{2L} \frac{N}{2L} \frac{L-1}{L} \frac{N(2L-N)}{2(L-1)}} \\
 & = \frac{1}{(2L)^2} ((2L-N)N(2L-N) + N(N-2)(2L-N+2) + 4N + 4N(2L-N)) \\
 & = \frac{N(2L-N+2)}{2L} = B(L, N)
 \end{aligned} \tag{C.36}$$

である。帰納法により題意が示された。 \square

不等式 (4.30) の等号が成立するのは、上記の証明から

$$\mu_1 = \mu_2 = \cdots = \mu_L = \frac{1}{\sqrt{2L}} \tag{C.37}$$

のときであることがわかる。これは規格化条件 (C.15) を満たしている。さらに c_α を適当にラベル付けすると、演算子 W を η 演算子 (4.6) を用いて

$$W = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{j=1}^L 2e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_j} c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2L}} 2\eta^- \tag{C.38}$$

と表すことができる。よって

$$W^\dagger W = \frac{2}{L} \eta^+ \eta^- = \frac{2}{L} (\eta^2 - (\eta^z)^2 + \eta^z) \tag{C.39}$$

となる。 $\eta^z = (N-L)/2$ であることを用いると、

$$W^\dagger W = \frac{2}{L} \left(\eta^2 - \frac{(N-L)(N-L-2)}{2} \right) \tag{C.40}$$

である。 $\langle \Psi | W^\dagger W | \Psi \rangle$ が最大になるのは η スピンの大きさ η^2 が最大になるときであることがわかる。各サイトに η スピン $\frac{1}{2}$ が 1 個ずつ存在するので、サイト数 L の系では η スピン $\frac{L}{2}$ ($\eta^2 = \frac{L}{2}(\frac{L}{2} + 1)$) が最大となる。このとき

$$W^\dagger W = \frac{2}{L} \left(\frac{L}{2} \left(\frac{L}{2} + 1 \right) - \frac{(N-L)(N-L-2)}{2} \right) = \frac{N(2L-N+2)}{2L} = B(L, N) \tag{C.41}$$

であることが確認できる。 η ペアリング状態 $|\psi_N\rangle$ (4.16) は η スピン $\frac{L}{2}$ を持つので (η スピンの強磁性状態)、2 粒子密度行列の最大固有値 Λ_2 の上限を達成する状態であることがわかる。

Λ_2 の上限を達成する状態の構成は Yang の 1962 年の論文 [62](の Appendix A) ですすでに触れられている。 η ペアリング状態がこの上限を達成することは Yang 自身は認識していたと思われるが、1989 年の η ペアリングの論文 [60] では “The eigenstate $|\psi_N\rangle$ is of a standard form for a state with ODLRO (cf. Appendix A of Ref. [62]).” と手短かに述べられているのみである。

参考文献

- [1] D. Fausti, R. I. Tobey, N. Dean, S. Kaiser, A. Dienst, M. C. Hoffmann, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, and A. Cavalleri, *Science* **331**, 189 (2011).
- [2] S. Kaiser, C. R. Hunt, D. Nicoletti, W. Hu, I. Gierz, H. Y. Liu, M. Le Tacon, T. Loew, D. Haug, B. Keimer, et al., *Phys. Rev. B* **89**, 184516 (2014).
- [3] W. Hu, S. Kaiser, D. Nicoletti, C. R. Hunt, I. Gierz, M. C. Hoffmann, M. Le Tacon, T. Loew, B. Keimer, and A. Cavalleri, *Nature Materials* **13**, 705 (2014).
- [4] M. Mitrano, A. Cantaluppi, D. Nicoletti, S. Kaiser, A. Perucchi, S. Lupi, P. Di Pietro, D. Pontiroli, M. Riccò, S. R. Clark, et al., *Nature* **530**, 461 (2016).
- [5] R. Shimano and N. Tsuji, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **11**, 103 (2020).
- [6] N. Tsuji, I. Danshita, and S. Tsuchiya, *Encyclopedia of Condensed Matter Physics (2nd ed.)*, edited by T. Chakraborty (Academic Press, Oxford, 2024), pp. 174–186.
- [7] 松永隆佑, 辻直人, 青木秀夫, 島野亮, *固体物理*, Vol. 50, No. 8, 1(411), 2015.
- [8] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**, 1064 (1950).
- [9] N. B. Kopnin, *Theory of Nonequilibrium Superconductivity* (Oxford University Press, Oxford, 2001).
- [10] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **112**, 1900 (1958).
- [11] P. W. Higgs, *Phys. Rev. Lett.* **13**, 508 (1964).
- [12] Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, *Phys. Rev.* **122**, 345 (1961).
- [13] J. Goldstone, *Il Nuovo Cimento* **19**, 154 (1961).

-
- [14] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [15] N. N. Bogoliubov, V. V. Tolmachev, and D. V. Shirkov, *A New Method in the Theory of Superconductivity* (Academy of Sciences of USSR, Moscow, 1958).
- [16] Y. Nambu, *Phys. Rev.* **117**, 648 (1960).
- [17] J. Goldstone, A. Salam, and S. Weinberg, *Phys. Rev.* **127**, 965 (1962).
- [18] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **130**, 439 (1963).
- [19] F. Englert and R. Brout, *Phys. Rev. Lett.* **13**, 321 (1964).
- [20] G. S. Guralnik, C. R. Hagen, and T. W. B. Kibble, *Phys. Rev. Lett.* **13**, 585 (1964).
- [21] R. Sooryakumar and M. V. Klein, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 660 (1980).
- [22] P. B. Littlewood and C. M. Varma, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 811 (1981).
- [23] P. B. Littlewood and C. M. Varma, *Phys. Rev. B* **26**, 4883 (1982).
- [24] ATLAS Collaboration, *Phys. Lett. B* **716**, 1 (2012).
- [25] CMS Collaboration, *Phys. Lett. B* **716**, 30 (2012).
- [26] R. Matsunaga, Y. I. Hamada, K. Makise, Y. Uzawa, H. Terai, Z. Wang, and R. Shimano, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 057002 (2013).
- [27] R. Matsunaga, N. Tsuji, H. Fujita, A. Sugioka, K. Makise, Y. Uzawa, H. Terai, Z. Wang, H. Aoki, and R. Shimano, *Science* **345**, 1145 (2014).
- [28] D. Pekker and C. M. Varma, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6**, 269 (2015).
- [29] M. Endres, T. Fukuhara, D. Pekker, M. Cheneau, P. Schauß, C. Gross, E. Demler, S. Kuhr, and I. Bloch, *Nature* **487**, 454 (2012).
- [30] R. V. Carlson and A. M. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* **34**, 11 (1975).
- [31] L. P. Gor'kov, *Sov. Phys. JETP* **9**, 1364 (1959).

-
- [32] C. Reinhoffer, P. Pilch, A. Reinold, P. Derendorf, S. Kovalev, J.-C. Deinert, I. Ilyakov, A. Ponomaryov, M. Chen, T.-Q. Xu, et al., *Phys. Rev. B* **106**, 214514 (2022).
- [33] A. J. Leggett, *Prog. Theor. Phys.* **36**, 901 (1966).
- [34] Y. Murotani, N. Tsuji, and H. Aoki, *Phys. Rev. B* **95**, 104503 (2017).
- [35] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, Oxford, 1969).
- [36] T. Kamatani, S. Kitamura, N. Tsuji, R. Shimano, and T. Morimoto, *Phys. Rev. B* **105**, 094520 (2022).
- [37] R. Nagashima, S. Tian, R. Haenel, N. Tsuji, and D. Manske, *Phys. Rev. Res.* **6**, 013120 (2024).
- [38] Y. Nambu, *Physica D* **15**, 147 (1985).
- [39] J. A. Sauls and T. Mizushima, *Phys. Rev. B* **95**, 094515 (2017).
- [40] R. A. Barankov, L. S. Levitov, and B. Z. Spivak, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 160401 (2004).
- [41] E. A. Yuzbashyan, B. L. Altshuler, V. B. Kuznetsov, and V. Z. Enolskii, *Phys. Rev. B* **72**, 220503 (2005).
- [42] A. F. Volkov and S. M. Kogan, *Sov. Phys. JETP* **38**, 1018 (1974).
- [43] N. Tsuji and H. Aoki, *Phys. Rev. B* **92**, 064508 (2015).
- [44] N. Tsuji, *Encyclopedia of Condensed Matter Physics (2nd ed.)*, edited by T. Chakraborty (Academic Press, Oxford, 2024), pp. 967–980.
- [45] T. Cea, C. Castellani, and L. Benfatto, *Phys. Rev. B* **93**, 180507 (2016).
- [46] R. Matsunaga, N. Tsuji, K. Makise, H. Terai, H. Aoki, and R. Shimano, *Phys. Rev. B* **96**, 020505 (2017).
- [47] N. Tsuji and Y. Nomura, *Phys. Rev. Res.* **2**, 043029 (2020).
- [48] J. M. Deutsch, *Phys. Rev. A* **43**, 2046 (1991).

-
- [49] M. Srednicki, Phys. Rev. E **50**, 888 (1994).
- [50] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii, Nature **452**, 854 (2008).
- [51] H. Bernien, S. Schwartz, A. Keesling, H. Levine, A. Omran, H. Pichler, S. Choi, A. S. Zibrov, M. Endres, M. Greiner, et al., Nature **551**, 579 (2017).
- [52] N. Shiraishi and T. Mori, Phys. Rev. Lett. **119**, 030601 (2017).
- [53] C. J. Turner, A. A. Michailidis, D. A. Abanin, M. Serbyn, and Z. Papić, Nat. Phys. **14**, 745 (2018).
- [54] M. Serbyn, D. A. Abanin, and Z. Papić, Nat. Phys. **17**, 675 (2021).
- [55] C. J. Turner, A. A. Michailidis, D. A. Abanin, M. Serbyn, and Z. Papić, Phys. Rev. B **98**, 155134 (2018).
- [56] C.-J. Lin and O. I. Motrunich, Phys. Rev. Lett. **122**, 173401 (2019).
- [57] S. Moudgalya, S. Rachel, B. A. Bernevig, and N. Regnault, Phys. Rev. B **98**, 235155 (2018).
- [58] S. Moudgalya, N. Regnault, and B. A. Bernevig, Phys. Rev. B **98**, 235156 (2018).
- [59] M. Schechter and T. Iadecola, Phys. Rev. Lett. **123**, 147201 (2019).
- [60] C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. **63**, 2144 (1989).
- [61] C. N. Yang and S. Zhang, Mod. Phys. Lett. B **04**, 759 (1990).
- [62] C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962).
- [63] O. Penrose and L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).
- [64] M. Nakagawa, N. Tsuji, N. Kawakami, and M. Ueda, arXiv:2103.13624.
- [65] O. Vafek, N. Regnault, and B. A. Bernevig, SciPost Phys. **3**, 043 (2017).
- [66] D. K. Mark and O. I. Motrunich, Phys. Rev. B **102**, 075132 (2020).
- [67] L. Gotta, L. Mazza, P. Simon, and G. Roux, Phys. Rev. B **106**, 235147 (2022).
- [68] S. Imai and N. Tsuji, arXiv:2404.02914.

[69] S. Fava, G. De Vecchi, G. Jotzu, M. Buzzi, T. Gebert, Y. Liu, B. Keimer, and A. Cavalleri, *Nature* **632**, 75 (2024).

[70] 中川大也, “ η -pairing superfluid induced by spontaneous emission” (2020).