第 22 卷 第 3 期　　物 理 学 报　　Vol. 22. No. 3
1966 年 3 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　March, 1966

含磁性杂质超导体的热导率*

龚昌德　蔡建华
(南京大学物理系)

对于含磁性杂质的金属，电子的自旋在受杂质的散射过程中不守恆. 因此，在利用 Nambu 的超导理论[1]研究磁性杂质对超导体的热导率的影响时，二分量场函数的表述系统显然是不够的，需要推广为四分量形式

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{r}) \\ \psi_\downarrow(\mathbf{r}) \\ \psi^+_\downarrow(\mathbf{r}) \\ \psi^+_\uparrow(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad \text{或} \quad \Psi(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{p}) \\ \psi_\downarrow(\mathbf{p}) \\ \psi^+_\downarrow(-\mathbf{p}) \\ \psi^+_\uparrow(-\mathbf{p}) \end{pmatrix}. \tag{1}$$

引入下列矩阵

$$\left.\begin{aligned} &I = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad \gamma^{(i)} = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^{(4)} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma^{(5)} = i\gamma^{(1)}\gamma^{(2)}\gamma^{(3)}\gamma^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \\ &\gamma^{(5+i)} = \gamma^{(5)}\gamma^{(i)} = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i \end{pmatrix}, \quad \gamma^{(9)} = \gamma^{(5)}\gamma^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \\ &\gamma^{(12+i)} = \frac{1}{2}(\gamma^{(i)}\gamma^{(4)} - \gamma^{(4)}\gamma^{(i)}) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \\ &\gamma^{(9+i)} = \frac{i}{2}(\gamma^{(i)}\gamma^{(j)} - \gamma^{(j)}\gamma^{(i)}) = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} \quad (i, j, k) = (1, 2, 3)\text{轮换}. \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

以上 I 代表二行二列单位矩阵，$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 是泡利矩阵. 所引入的函数(1)满足下列对易规则

$$\{\Psi_\mu(\mathbf{r}), \Psi^+_\nu(\mathbf{r}')\} = \delta_{\mu\nu}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \text{或} \quad \{\Psi_\mu(\mathbf{p}), \Psi^+_\nu(\mathbf{p}')\} = \delta_{\mu\nu}\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \tag{3}$$

其他对易关系可以通过下面关系得出

$$\Psi^+(\mathbf{r}) = \gamma^{(13)}\Psi(\mathbf{r}), \quad \Psi^+(\mathbf{p}) = \gamma^{(13)}\Psi(-\mathbf{p}), \ (\gamma^{(13)})^2 = 1. \tag{4}$$

利用(1)及诸 γ 矩阵(2)，可以把电子与磁性杂质的相互作用哈密顿表为[2]

$$H_{杂} = \sum_a \int \frac{d^3\mathbf{p}d^3\mathbf{p}'}{(2\pi)^6} e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}_a}\Psi^+(\mathbf{p})\left\{\frac{1}{2}\left[u_{\mathbf{pp}'} + n_e\left(I_{\mathbf{pp}'} - \frac{1}{2}J_{\mathbf{pp}'}\right)\right]\gamma^{(4)} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2}J_{\mathbf{pp}'}\mathbf{S}_a \cdot \Sigma\right\}\Psi(\mathbf{p}'), \tag{5}$$

式中 $u_{\mathbf{pp}'}$ 是杂质所导致原子势的畸变的傅里叶分量，$I_{\mathbf{pp}'}$ 和 $J_{\mathbf{pp}'}$ 分别为直接积分和交换积分. $\mathbf{S}_a$ 和 $\mathbf{r}_a$ 各代表杂质原子的自旋和位矢. n_e 是杂质原子中未满 (d 或 f) 壳层自旋未补偿的电子数，而 Σ 代表下列矩阵

$$\Sigma = (\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3) \equiv (\gamma^{(6)}, -\gamma^{(7)}, -\gamma^{(12)}). \tag{6}$$

在(5)式中，我们假定了 $I_{-\mathbf{p}'-\mathbf{p}} = I_{\mathbf{pp}'}$, $J_{-\mathbf{p}'-\mathbf{p}} = J_{\mathbf{pp}'}$，类似的关系对 $u_{\mathbf{pp}'} = u(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ 自然成立. $H_{杂}$ 中含 u 的部分是杂质的非磁性效应，其余部分是杂质的磁性效应. 这里必须

* 1965 年 5 月 17 日收到；1965 年 10 月 18 日收到修改稿.

注意函数(1)中的四个分量实际上有重复,这反映在对易规则中,也反映在(5)式方括号內各项前均有系数 1/2. 在计算时应考虑到这点.

为了求热导率,定义含«温度»的能流密度矢量算符

$$\mathbf{u}(x)=\frac{1}{4im}\left[\left(\nabla'\frac{\partial}{\partial\tau}+\nabla\frac{\partial}{\partial\tau'}\right)\Psi^{+}(x')\gamma^{(4)}\Psi(x)\right]_{x'=x},$$

$$\Psi(x)\equiv\Psi(\mathbf{r},\tau)=e^{\tau H}\Psi(\mathbf{r},0)e^{-\tau H},$$

及温度顶点函数 $\mathbf{x}$

$$\mathbf{x}_{\mu\nu}(x_1-x_2,\ x_2-x_1')\equiv\overline{\langle T_\tau(\Psi_\mu(x_1)\mathbf{u}(x_2)\Psi_\nu^{+}(x_1'))\rangle}.$$

这里 τ 在区间 $(0,\beta)$ 內变化. $\beta=1/T$,而 $\langle\cdots\rangle$ 表示统计平均. 横线表示对杂质的无规分布和自旋平均 ($k=\hbar=1$). 可以证明, $\mathbf{x}$ 函数的傅里叶变换系数 $\mathbf{x}(\mathbf{p},\ \omega_m+\nu_n;\ \mathbf{p},\omega_n)$ 有谱表式[3]

$$\mathbf{x}(\mathbf{p},\ \omega_m+\nu_n;\mathbf{p},\ \omega_m)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx_1dx_2}{(2\pi)^2}\left\{\frac{\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(1)}(x_1,\ x_2)}{(x_1-i\omega_m)(x_2-i\nu_n)}+\frac{\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(2)}(x_1,\ x_2)}{(x_1-i\omega_m-i\nu_n)(x_2-i\nu_n)}\right\}.$$

谱函数 $\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(1)}$ 和 $\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(2)}$ 与热导率 κ 的关系可按与文献[3]相同的方法得到:

$$\begin{aligned}\kappa=\frac{-\beta}{24m}\int\frac{d^3\mathbf{p}\,dx}{(2\pi)^4}\,\mathbf{p}\cdot\Bigg\{&\frac{\beta x}{2}\operatorname{sech}^2\frac{\beta x}{2}\operatorname{Sp}[\gamma^{(4)}\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(2)}(x,\ 0)]+\\&+\frac{1}{2}\left(1+\operatorname{th}\frac{\beta x}{2}\right)\operatorname{Sp}\Big[\gamma^{(4)}(\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(1)}(x,\ 0)+\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(2)}(x,\ 0))+\\&+2x\left[\frac{\partial}{\partial\nu}(\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(1)}(x,\ \nu)+\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(2)}(x+\nu,\ \nu))\right]_{\nu=0}\Big]\Bigg\},\end{aligned}\tag{7}$$

但是这里的 $\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(1)}$ 和 $\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(2)}$ 所满足的积分方程可以利用哈密顿(5)在准确至 $1/p_Fl$ (p_F 是费米动量, l 是电子受杂质散射的平均自由程)数量级下得到

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(1)}(\omega,\ \nu)+\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(2)}(\omega+\nu,\ \nu)=n_I\int&\frac{d^3\mathbf{p}'\,dx\,dy_1dy_2}{(2\pi)^6}\times\\\times\Bigg[&\left|u_{\mathbf{pp}'}+n_e\left(I_{\mathbf{pp}'}-\frac{1}{2}J_{\mathbf{pp}'}\right)\right|^2a(\mathbf{p},\ y_1)\gamma^{(4)}\mathbf{M}\gamma^{(4)}a(\mathbf{p},\ y_2)+\\&+\frac{s(s+1)}{3}|J_{\mathbf{pp}'}|^2a(\mathbf{p},\ y_1)\sum\mathbf{M}\sum a(\mathbf{p},\ y_2)\Bigg],\end{aligned}\tag{8}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(1)}(\omega,\ \nu)=&\frac{\mathbf{p}}{4m}(2\omega+\nu)a(\mathbf{p},\ \omega+\nu)\gamma^{(4)}a(\mathbf{p},\ \omega)+\\&+n_I\int\frac{d^3\mathbf{p}'dx_1dx_2dy_1dy_2}{(2\pi)^7}\Bigg[\left|u_{\mathbf{pp}'}+n_e\left(I_{\mathbf{pp}'}-\frac{1}{2}J_{\mathbf{pp}'}\right)\right|^2\times\\&\times a(\mathbf{p},\ y_1)\gamma^{(4)}\mathbf{N}\gamma^{(4)}a(\mathbf{p},\ y_2)+\frac{s(s+1)}{3}|J_{\mathbf{pp}'}|^2a(\mathbf{p},y_1)\sum\mathbf{N}\sum a(\mathbf{p},\ y_2)\Bigg],\end{aligned}\tag{9}$$

其中

$$\begin{aligned}\mathbf{M}=&\mathbf{f}_{\mathbf{p}'}^{(1)}(x,\ \nu)\cdot 2\operatorname{Im}[(y_1-\nu-\omega+io^+)^{-1}(x-\omega-io^+)^{-1}(y_2-\omega-io^+)^{-1}]+\\&+\mathbf{f}_{\mathbf{p}'}^{(2)}(x,\ \nu)\cdot 2\operatorname{Im}[(y_1-\nu-\omega-io^+)^{-1}(x-\nu-\omega-io^+)^{-1}(y_2-\omega-io^+)^{-1}],\end{aligned}\tag{10}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{N}=&\mathbf{f}_{\mathbf{p}'}^{(1)}(x_1,\ x_2)\cdot 2\operatorname{Im}[(x_1-\omega-io^+)^{-1}(y_2-\omega-io^+)^{-1}]\cdot\\&\cdot 2\operatorname{Im}[(y_1-\nu-\omega-io^+)^{-1}(x_2-\nu-io^+)^{-1}]+\mathbf{f}_{\mathbf{p}'}^{(2)}(x_1,\ x_2)\cdot 2\pi\delta(y_2-\omega)\cdot\\&\cdot 2\operatorname{Im}[(y_1-\nu-\omega-io^+)^{-1}(x_1-\nu-\omega-io^+)^{-1}(x_2-\nu-io^+)^{-1}],\end{aligned}$$

式中 n_I 是杂质的浓度，$a(\mathbf{p},\ \omega)$ 是单粒子温度格林函数的谱表式

$$a(\mathbf{p},\ \omega) = \frac{1}{i}\left[\bar{G}(\mathbf{p},\ z=\omega+io^+) - \bar{G}(\mathbf{p}, z=\omega-io^+)\right]. \tag{11}$$

在目前情形下，$\bar{G}$ 由下面诸式决定[2]：

$$\bar{G}^{-1} = \bar{Z}(z)z - \bar{Z}(z)\bar{\Delta}(z)\gamma^{(15)} - \epsilon_p\gamma^{(4)}, \tag{12}$$

$$\bar{Z}(z) = Z(z) + \frac{1}{2\tau_m\sqrt{\bar{\Delta}^2(z)-z^2}},\quad \Delta(z) = \bar{\Delta}(z)\{1+[\tau_2 Z(z)\sqrt{\bar{\Delta}^2(z)-z^2}]^{-1}\}, \tag{13}$$

$$\left.\begin{aligned}
&\tau_m^{-1} = \tau_1^{-1} + \tau_2^{-1},\\
&\tau_1^{-1} = \frac{n_I m p_F}{(2\pi)^2}\int d\Omega'\left|u_{\mathbf{pp}'} + n_c\left(I_{\mathbf{pp}'} - \frac{1}{2}J_{\mathbf{pp}'}\right)\right|^2_{p=p'=p_F},\\
&\tau_2^{-1} = \frac{n_I m p_F}{(2\pi)^2}s(s+1)\int d\Omega'|J_{\mathbf{pp}'}|^2_{p=p'=p_F},
\end{aligned}\right\} \tag{14}$$

其中 $\bar{\Delta}$, $\bar{Z}$ 分别代表掺杂金属的能隙函数和重整化因子，而 Δ, Z 是纯金属的相应量. 这里略去了 $\bar{\Delta}$, $\bar{Z}$ 对动量的依赖性.

根据协变性的考虑，可以猜测 $\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(i)}(\omega,\ 0) = \dfrac{\mathbf{p}}{m}g^{(i)}(\epsilon_p,\ \omega)$. 令

$$\int d\epsilon_p g^{(i)}(\epsilon_p,\ \omega) \equiv g^{(i)}(\omega), \qquad i=1,\ 2.$$

$g^{(i)}(\omega)$ 是矩阵函数，如果按 γ 矩阵系统(2)展开，可以得到 16 个独立分量 $g_j^{(i)}$

$$g^{(i)}(\omega) = g_0^{(i)}(\omega) + \sum_{A=1}^{15} g_A^{(i)}(\omega)\gamma^{(A)}, \qquad i=1,\ 2.$$

注意(8)式右边被积函数是 y_1 和 y_2 的对称函数；$\bar{\Delta}$, $\bar{Z}$ 和动量无关，则利用诸 γ 矩阵的对易性质容易证明 $g_4^{(1)}(\omega) + g_4^{(2)}(\omega) = 0$，因此(7)式右方第二个求迹号下第一项为零. 将(8)式两边对 ν 微分后令 $\nu=0$，相似地可证明，(7)式右方第二个求迹号下第二项为零，因此热导率完全由 $g_4^{(1)}$ 分量确定. 令 $h(\omega) = (\pi\omega)^{-1}g_4^{(1)}(\omega)$，于是有

$$\kappa = \frac{N\beta^2}{16m}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\ \omega^2 h(\omega)\,\mathrm{sech}^2\frac{\beta\omega}{2}, \tag{15}$$

其中 $N = p_F^3/3\pi^2$ 是电子数密度.

利用(9)，(12)—(14)诸关系式可以得到 $h(\omega)$

$$h(\omega) = \frac{1 + \dfrac{\omega^2 - |\bar{\Delta}(\omega)|^2}{|\omega^2 - \bar{\Delta}^2(\omega)|}}{|\mathrm{Im}(\bar{Z}(\omega)\sqrt{\omega^2 - \bar{\Delta}^2(\omega)})| - \dfrac{1}{4\tau_m'}\left(1 + \dfrac{\omega^2 - |\bar{\Delta}(\omega)|^2}{|\omega^2 - \bar{\Delta}^2(\omega)|}\right)} + h'(\omega), \tag{16}$$

式中

$$\begin{aligned}
&\tau_m^{-1\prime} = \tau_1'^{-1} + \tau_2'^{-1},\\
&\tau_1'^{-1} = \frac{n_I m p_F}{(2\pi)^2}\int d\Omega\left|u_{\mathbf{pp}'} + n_c\left(I_{\mathbf{pp}'} - \frac{1}{2}J_{\mathbf{pp}'}\right)\right|^2_{p=p'=p_F}\cos\theta,\\
&\tau_2'^{-1} = \frac{n_I m p_F}{(2\pi)^2}s(s+1)\int d\Omega|J_{\mathbf{pp}'}|^2_{p=p'=p_F}\cos\theta,
\end{aligned}$$

$\theta = (\widehat{\mathbf{pp}'})$，$h'(\omega)$ 的具体形式不写出. 计算 $h'(\omega)$ 对 $h(\omega)$ 的贡献，知道它与(16)式右

方第一项相比属于数量级 $\mathrm{Im}\,\bar{\Delta}(\omega)/\omega$. 假如它是一小量1),并利用(13), 就得到热导率2)

$$\kappa=\frac{N\beta^2}{8m}\int_0^\infty d\omega\,\frac{\omega^2\left(1+\frac{\omega^2-|\bar{\Delta}(\omega)|^2}{|\omega^2-\bar{\Delta}^2(\omega)|}\right)\mathrm{sech}^2\frac{\beta\omega}{2}}{|\mathrm{Im}\,(Z(\omega)\sqrt{\omega^2-\bar{\Delta}^2(\omega)})|+\frac{1}{2\tau_m}-\frac{1}{4\tau'_m}\left(1+\frac{\omega^2-|\bar{\Delta}(\omega)|^2}{|\omega^2-\bar{\Delta}^2(\omega)|}\right)}.\quad(17)$$

这里 $\bar{\Delta}(\omega)$ 是掺杂后的能隙函数,因此与非磁性杂质情形不同,杂质的作用不仅仅表现在两个碰撞时间 τ_m 和 τ'_m 中. 当杂质是非磁性时, $\tau'_m=\tau'$, $\tau_m=\tau$,而 $\bar{\Delta}(\omega)=\Delta(\omega)$, 相应的表式可以和 Kadanoff 和 Martin 的结果[6]相比较; 在弱耦合情形, 声子散射效应可以由元激发的衰减 Γ 来描述,令 $\Delta(\omega)=\Delta_0(\omega)+i\Delta_1(\omega)$, 由单粒子格林函数极点可知,能隙的虚部 $\Delta_1(\omega)=\frac{\omega}{2\Delta_0(\omega)}\Gamma$,在 $\Gamma\ll\Delta_0$ 情形下,(17)式简化为

$$\kappa=\frac{N\beta^2}{2m}\int_{\Delta_0}^\infty d\omega\,\frac{\omega^2\,\mathrm{sech}^2\,\beta\omega/2}{\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2-\Delta_0^2(\omega)}}\Gamma+\tau_{t_r}^{-1}}.$$

这正是 Kadanoff 和 Martin 的结果,其中 $\tau_{t_r}(\tau_{t_r}^{-1}=\tau^{-1}-\tau'^{-1})$ 是输运碰撞时间.

在强耦合情形,可以计入声子散射的贡献. 对电声子作用作阶梯近似,并略去含有声子线与杂质线交叉的图形贡献(在 $1/p_Fl$ 数量级下),可以建立谱函数 $\mathbf{f}_{\mathbf{p}}^{(i)}$ 的相应的积分方程,按与上面类似的计算,可以得到热导率的表式, 它仍由(15)式给出,不过 $h(\omega)$ 应当代以由下列积分方程决定的 $h_1(\omega)$ 函数

$$h_1(\omega)=h(\omega)\left\{1-\frac{\pi}{2}\int\frac{d\nu}{2\pi}\left[\sum_\lambda\int d\omega_\lambda F_\lambda(\omega_\lambda)d_\lambda(\omega_\lambda,\nu)\right][f(\nu-\omega)+N(\nu)]h_1(\omega-\nu)\right\},$$

这里的 $h(\omega)$ 是(16)式右方的第一项, $f(\omega)$ 和 $N(\nu)$ 分别为 Fermi 和 Planck 函数, $\omega_\lambda(k)$ 为声子频率(λ 指谱支), $F_\lambda(\omega_\lambda)$ 确定声子的频率分布, 而 $d_\lambda(\omega_\lambda,\nu)=2\pi g_\lambda^2(\omega_\lambda)[\delta(\nu-\omega_\lambda)-\delta(\nu+\omega_\lambda)]$. 这里 g_λ 为电-声子耦合強度.

参　考　文　献

[1] Nambu,Y., *Phys. Rev.*, **117** (1960), 648.
[2] 龚昌德、蔡俊道,(未发表).
[3] Ambegaokar, V. and Tewordt, L., *Phys. Rev.*, **134** (1964), A805.
[4] Skalski, S., et al., *Phys. Rev.*, **136** (1964), A1500.
[5] Ambegaokar, V. and Griffin, A., *Phys. Rev.*, **137** (1965), A1151.
[6] Kadanoff, L. P. and Martin, P. C., *Phys. Rev.*, **124** (1961), 670.

1) 对于非磁性杂质, 这是不成问题的. 对于磁性杂质,在低浓度或转变温度附近的重要区域内, $\mathrm{Im}\,\bar{\Delta}/\omega\ll1$ 成立[4].

2) 本文完成后,见到 Ambegaokar 和 Griffin 的工作[5],他们得到了和(17)式一致的结果.