# BCS 変分関数による BCS ハミルトニアンの期待値について

武藤　哲也

BCS 変分関数による BCS ハミルトニアンの期待値 $\langle\Psi_{\mathrm{BCS}}|\mathcal{H}|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle$ を考える．BCS ハミルトニアン $\mathcal{H}$ は，次式で定義される．

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\xi_{\boldsymbol{k}}a^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}a_{\boldsymbol{k}\sigma} - \sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2}V_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2}a^\dagger_{\boldsymbol{k}_1\uparrow}a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow}a_{\boldsymbol{k}_2\uparrow} \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}}\xi_{\boldsymbol{k}}(a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}+a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) - V_0{\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2}}'a^\dagger_{\boldsymbol{k}_1\uparrow}a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow}a_{\boldsymbol{k}_2\uparrow}\end{aligned} \tag{1}$$

ここで，$\xi_{\boldsymbol{k}}=\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu=\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu$ で，$\mu$ は化学ポテンシャルであり，(1) の第 2 等号の第 1 項では，$\downarrow$ スピンの項のみ，波数についての和のダミー変数を $-\boldsymbol{k}$ としている（$\xi_{-\boldsymbol{k}}=\xi_{\boldsymbol{k}}$ に注意）．引力相互作用エネルギー $V_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2}$ は

$$V_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2}\equiv\begin{cases}V_0 & (|\xi_{\boldsymbol{k}_1}|\le\hbar\omega_{\mathrm{D}},\ |\xi_{\boldsymbol{k}_2}|\le\hbar\omega_{\mathrm{D}}) \\ 0 & (\text{それ以外})\end{cases} \tag{2}$$

と定義される（$\omega_{\mathrm{D}}$ は Debye 周波数）．$V_0(>0)$ は BCS 相互作用定数である．和記号 ${\sum}'_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2}$ の意味は，

$${\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2}}' = \sum_{\substack{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2 \\ |\xi_{\boldsymbol{k}_1}|\le\hbar\omega_{\mathrm{D}},\ |\xi_{\boldsymbol{k}_2}|\le\hbar\omega_{\mathrm{D}}}} \tag{3}$$

である．

また，BCS 変分関数 $|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle$ は，

$$|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle=\prod_{\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}}+v_{\boldsymbol{k}}a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow})\,|0\rangle \tag{4}$$

で定義される．$|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle$ は，電子対の対非占有状態と対占有状態の重ね合わせ状態となっており，$u_{\boldsymbol{k}}$ と $v_{\boldsymbol{k}}$ は，各々の状態の重みに相当する係数である．$u_{\boldsymbol{k}}$ と $v_{\boldsymbol{k}}$ の相対的な位相差の自由度を残せば，$u_{\boldsymbol{k}}$ は一般性を失うことなく実数ととれるので，$u_{\boldsymbol{k}}\in\mathbb{R}$，$v_{\boldsymbol{k}}\in\mathbb{C}$ とすると，$|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle$ の規格化条件は，

$$u_{\boldsymbol{k}}^2+|v_{\boldsymbol{k}}|^2=1 \tag{5}$$

とすることで満たされる（後述の (iv) 付録参照）．(5) の条件下で $u_{\boldsymbol{k}}$ と $v_{\boldsymbol{k}}$ を変分パラメータとして，$\langle\Psi_{\mathrm{BCS}}|\mathcal{H}|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle$ について変分法を適用する．以下では，(i)〜(iii) の手順で $\langle\Psi_{\mathrm{BCS}}|\mathcal{H}|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle$ を計算する．

(i) $\langle\Psi_{\mathrm{BCS}}|a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle$ について

$$\langle\Psi_{\mathrm{BCS}}|a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle=\langle 0|\prod_{\boldsymbol{k}'}(u_{\boldsymbol{k}'}+v^*_{\boldsymbol{k}'}a_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}a_{\boldsymbol{k}'\uparrow})a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}\prod_{\boldsymbol{k}''}(u_{\boldsymbol{k}''}+v_{\boldsymbol{k}''}a^\dagger_{\boldsymbol{k}''\uparrow}a^\dagger_{-\boldsymbol{k}''\downarrow})|0\rangle \tag{6}$$

今，$B^\dagger_{\boldsymbol{k}}\equiv a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}$，$B_{\boldsymbol{k}}\equiv a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}$ として，$A^\dagger_{\boldsymbol{k}}\equiv u_{\boldsymbol{k}}+v_{\boldsymbol{k}}B^\dagger_{\boldsymbol{k}}$，$A_{\boldsymbol{k}}\equiv u_{\boldsymbol{k}}+v^*_{\boldsymbol{k}}B_{\boldsymbol{k}}$ を定義する．$B_{\boldsymbol{k}}$ や $B^\dagger_{\boldsymbol{k}}$ が偶数個（2 個）の Fermi 演算子の積なので，異なる $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}'$ について $[A_{\boldsymbol{k}},A_{\boldsymbol{k}'}]=[A^\dagger_{\boldsymbol{k}},A^\dagger_{\boldsymbol{k}'}]=0$（$\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{k}'$）となるため，$\boldsymbol{k}'$ 積や $\boldsymbol{k}''$ 積の内部の積の順序に意味はなく，積の順序は自由に変えられることに注意する．さらに，電子の反交換関係

$$\{a_{\boldsymbol{k}\sigma},a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\}=\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'} \tag{7}$$

に注意すると，交換子と反交換子の公式

$$[AB,C]=A\{B,C\}-\{A,C\}B \tag{8}$$

を用いて,

$$\left[B_{\boldsymbol{k}}^\dagger, a_{\boldsymbol{k}'\uparrow}\right] \overset{(8)}{=} a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger \left\{a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger, a_{\boldsymbol{k}'\uparrow}\right\} - \left\{a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger, a_{\boldsymbol{k}'\uparrow}\right\} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger \overset{(7)}{=} -a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger \delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \tag{9}$$

となるので,

$$\left[a_{\boldsymbol{k}\uparrow}, A_{\boldsymbol{k}'}^\dagger\right] = v_{\boldsymbol{k}'} \left[a_{\boldsymbol{k}\uparrow}, B_{\boldsymbol{k}'}^\dagger\right] = -v_{\boldsymbol{k}'} \left[B_{\boldsymbol{k}'}^\dagger, a_{\boldsymbol{k}\uparrow}\right] \overset{(9)}{=} v_{\boldsymbol{k}'} a_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}^\dagger \delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \tag{10}$$

が成り立つ．さらに，Hermite 共役演算子の性質 $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ から導かれる Hermite 共役演算子の交換子の公式

$$[A^\dagger, B^\dagger] = A^\dagger B^\dagger - B^\dagger A^\dagger = (BA)^\dagger - (AB)^\dagger = (BA - AB)^\dagger = [B, A]^\dagger = -[A, B]^\dagger \tag{11}$$

を用いて,

$$\left[A_{\boldsymbol{k}'}, a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger\right] \overset{(11)}{=} -\left[A_{\boldsymbol{k}'}^\dagger, a_{\boldsymbol{k}\uparrow}\right]^\dagger = \left[a_{\boldsymbol{k}\uparrow}, A_{\boldsymbol{k}'}^\dagger\right]^\dagger \overset{(10)}{=} v_{\boldsymbol{k}'}^* a_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} \delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \tag{12}$$

が成り立つ．(10) や (12) より，$\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}'$ や $\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}''$ の時に，$[A_{\boldsymbol{k}'}, a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger] = 0$ や $[a_{\boldsymbol{k}\uparrow}, A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger] = 0$ となるので，$a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger$ を $\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}$ となる $A_{\boldsymbol{k}'}$ と交換し，$a_{\boldsymbol{k}\uparrow}$ を $\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}$ となる $A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger$ と交換することで，(6) は次のように書くことができる．

$$(6) = \langle 0| A_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\uparrow} A_{\boldsymbol{k}}^\dagger |0\rangle \tag{13}$$

ここで，(10) から $a_{\boldsymbol{k}\uparrow} A_{\boldsymbol{k}}^\dagger = v_{\boldsymbol{k}} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger + A_{\boldsymbol{k}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\uparrow}$，また，(12) から $A_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger = v_{\boldsymbol{k}}^* a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger A_{\boldsymbol{k}}$ を，各々(13) に用いれば,

$$(13) = \langle 0| (v_{\boldsymbol{k}}^* a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger A_{\boldsymbol{k}}) \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger (v_{\boldsymbol{k}} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger + A_{\boldsymbol{k}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\uparrow}) |0\rangle \tag{14}$$

となる．ここで電子の真空の定義

$$a_{\boldsymbol{k}\sigma} |0\rangle = \langle 0| a_{\boldsymbol{k}\sigma}^\dagger = 0 \tag{15}$$

を用いれば,

$$(14) = |v_{\boldsymbol{k}}|^2 \langle 0| a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle \tag{16}$$

となる．さらに，$[a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}, A_{\boldsymbol{k}'}] = 0$ であることから,

$$\left[a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}, \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'}\right] = 0$$

が成り立ち，$\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}$ となる $\boldsymbol{k}''$ については，$[a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}, A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger]$ であることから,

$$\left[a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}, \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger\right] = 0$$

が成り立つことを用いて，$a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}$ を $\prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'}$ や $\prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger$ と交換させて，以下のような変形を行う．

$$\begin{aligned}
(16) \quad &= \quad |v_{\boldsymbol{k}}|^2 \langle 0| \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle \\
&\overset{(7)}{=} \quad |v_{\boldsymbol{k}}|^2 \langle 0| \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger (1 - a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) |0\rangle \\
&\overset{(15)}{=} \quad |v_{\boldsymbol{k}}|^2 \langle 0| \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}''}^\dagger |0\rangle \\
&= \quad |v_{\boldsymbol{k}}|^2 \left\| \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'}^\dagger |0\rangle \right\|^2 \\
&= \quad |v_{\boldsymbol{k}}|^2
\end{aligned} \tag{17}$$

ここで，ケットのノルム $\||\psi\rangle\|$ の定義

$$\||\psi\rangle\| \equiv \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$$

を用いた．(17) の最終等号で，$\prod_{\boldsymbol{k}'\neq\boldsymbol{k}} A^\dagger_{\boldsymbol{k}'}|0\rangle$ のノルムが 1 となるのは，BCS 変分関数の規格化（後述の (iv) 付録を参照）と同様に示される．この (i) での議論と同様にして，$\langle\Psi_{\mathrm{BCS}}|\, a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\,|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle = |v_{\boldsymbol{k}}|^2$ となることも容易に示される．

(ii) $\langle\Psi_{\mathrm{BCS}}|\, a^\dagger_{\boldsymbol{k}_1\uparrow}a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow}a_{\boldsymbol{k}_2\uparrow}\,|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle$ について

$|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle$ に，(4) を代入して，$B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} = a^\dagger_{\boldsymbol{k}_1\uparrow}a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow}$，$B_{\boldsymbol{k}_2} = a_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow}a_{\boldsymbol{k}_2\uparrow}$ を用いれば，

$$\langle\Psi_{\mathrm{BCS}}|\, a^\dagger_{\boldsymbol{k}_1\uparrow}a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow}a_{\boldsymbol{k}_2\uparrow}\,|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle = \langle 0|\prod_{\boldsymbol{k}'} A_{\boldsymbol{k}'}B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1}B_{\boldsymbol{k}_2}\prod_{\boldsymbol{k}''} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''}|0\rangle \tag{18}$$

となる．ここで，

$$\left[B_{\boldsymbol{k}}, a^\dagger_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\right] \overset{(8)}{=} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\left\{a_{\boldsymbol{k}\uparrow}, a^\dagger_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\right\} - \left\{a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}, a^\dagger_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\right\}a_{\boldsymbol{k}\uparrow} \overset{(7)}{=} -a_{\boldsymbol{k}\uparrow}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \tag{19}$$

$$\left[B_{\boldsymbol{k}}, a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\uparrow}\right] \overset{(11)}{=} -\left[B^\dagger_{\boldsymbol{k}}, a_{\boldsymbol{k}'\uparrow}\right]^\dagger \overset{(9)}{=} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \tag{20}$$

となることから，$B_{\boldsymbol{k}}$ と $B^\dagger_{\boldsymbol{k}'}$ の交換子は，

$$\begin{aligned}
\left[B_{\boldsymbol{k}}, B^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\right] &= a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\uparrow}\left[B_{\boldsymbol{k}}, a^\dagger_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\right] + \left[B_{\boldsymbol{k}}, a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\uparrow}\right]a^\dagger_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} \\
&\overset{(19),(20)}{=} -a^\dagger_{\boldsymbol{k}'\uparrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} + a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a^\dagger_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \\
&\overset{(7)}{=} (1 - a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow} - a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}\downarrow})\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}
\end{aligned} \tag{21}$$

と表され，$B_{\boldsymbol{k}}$ と $A^\dagger_{\boldsymbol{k}'}$ の交換子は，

$$\left[B_{\boldsymbol{k}}, A^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\right] = v_{\boldsymbol{k}'}\left[B_{\boldsymbol{k}}, B^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\right] \overset{(21)}{=} v_{\boldsymbol{k}}(1 - a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow} - a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}\downarrow})\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \tag{22}$$

となる．つまり，$\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_2$ となる $\boldsymbol{k}''$ については，$\left[B_{\boldsymbol{k}_2}, A^\dagger_{\boldsymbol{k}''}\right] \overset{(22)}{=} 0$ であるので，(18) は次のように変形できる．

$$(18) = \langle 0|\prod_{\boldsymbol{k}'} A_{\boldsymbol{k}'}B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1}\prod_{\boldsymbol{k}''\neq\boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''}B_{\boldsymbol{k}_2}A^\dagger_{\boldsymbol{k}_2}|0\rangle \tag{23}$$

ここで，(22) から，$B_{\boldsymbol{k}_2}A^\dagger_{\boldsymbol{k}_2} = v_{\boldsymbol{k}_2}(1 - a^\dagger_{\boldsymbol{k}_2\uparrow}a_{\boldsymbol{k}_2\uparrow} - a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow}) + A^\dagger_{\boldsymbol{k}_2}B_{\boldsymbol{k}_2}$ と表されることを用いれば，(23) は，さらに次のように変型できる．

$$\begin{aligned}
(23) &= v_{\boldsymbol{k}_2}\langle 0|\prod_{\boldsymbol{k}'} A_{\boldsymbol{k}'}B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1}\prod_{\boldsymbol{k}''\neq\boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''}(1 - a^\dagger_{\boldsymbol{k}_2\uparrow}a_{\boldsymbol{k}_2\uparrow} - a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow})|0\rangle + \langle 0|\prod_{\boldsymbol{k}'} A_{\boldsymbol{k}'}B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1}\prod_{\boldsymbol{k}''\neq\boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''}A^\dagger_{\boldsymbol{k}_2}B_{\boldsymbol{k}_2}|0\rangle \\
&\overset{(15)}{=} v_{\boldsymbol{k}_2}\langle 0|\prod_{\boldsymbol{k}'} A_{\boldsymbol{k}'}B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1}\prod_{\boldsymbol{k}''\neq\boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''}|0\rangle
\end{aligned} \tag{24}$$

また，(23) の変形と同様，$A_{\boldsymbol{k}}$ と $B^\dagger_{\boldsymbol{k}'}$ の交換子は，

$$\left[A_{\boldsymbol{k}}, B^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\right] = v^*_{\boldsymbol{k}}\left[B_{\boldsymbol{k}}, B^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\right] \overset{(21)}{=} v^*_{\boldsymbol{k}}(1 - a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow} - a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}\downarrow})\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \tag{25}$$

となる．つまり，$\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1$ となる $\boldsymbol{k}'$ については，$\left[A_{\boldsymbol{k}'}, B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1}\right] \overset{(25)}{=} 0$ であるので，(24) は次のように変形できる．

$$(24) = v_{\boldsymbol{k}_2}\langle 0|\, A_{\boldsymbol{k}_1}B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1}\prod_{\boldsymbol{k}'\neq\boldsymbol{k}_1} A_{\boldsymbol{k}'}\prod_{\boldsymbol{k}''\neq\boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''}|0\rangle \tag{26}$$

ここで，(25) から，$A_{\boldsymbol{k}_1} B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} = v^*_{\boldsymbol{k}_1} (1 - a^\dagger_{\boldsymbol{k}_1\uparrow} a_{\boldsymbol{k}_1\uparrow} - a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow} a_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow}) + B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} A_{\boldsymbol{k}_1}$ と表されることを用いれば，(26) は，さらに次のように変型できる．

$$\begin{aligned}
(26) &= v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2} \langle 0| (1 - a^\dagger_{\boldsymbol{k}_1\uparrow} a_{\boldsymbol{k}_1\uparrow} - a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow} a_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow}) \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} |0\rangle + v_{\boldsymbol{k}_2} \langle 0| B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} A_{\boldsymbol{k}_1} \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} |0\rangle \\
&\overset{(15)}{=} v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2} \langle 0| \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} |0\rangle
\end{aligned} \tag{27}$$

(27) の $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k}_1$ を除く $A_{\boldsymbol{k}'}$ の積について，さらに $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k}_2$ も区別して，$\prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1} A_{\boldsymbol{k}'} = \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A_{\boldsymbol{k}'} A_{\boldsymbol{k}_2}$ と表せば，$\prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''}$ の積には $\boldsymbol{k}'' = \boldsymbol{k}_2$ は含まれていないので，

$$\left[ A_{\boldsymbol{k}_2}, \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} \right] = 0 \tag{28}$$

であり，

$$A_{\boldsymbol{k}_2} |0\rangle \overset{(15)}{=} u_{\boldsymbol{k}_2} |0\rangle \tag{29}$$

に注意すれば，(27) は

$$\begin{aligned}
(27) &= v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2} \langle 0| \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A_{\boldsymbol{k}'} A_{\boldsymbol{k}_2} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} |0\rangle \\
&\overset{(28)}{=} v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2} \langle 0| \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} A_{\boldsymbol{k}_2} |0\rangle \\
&\overset{(29)}{=} u_{\boldsymbol{k}_2} v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2} \langle 0| \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} |0\rangle
\end{aligned} \tag{30}$$

となる．また，(30) の $\boldsymbol{k}'' = \boldsymbol{k}_2$ を除く $A^\dagger_{\boldsymbol{k}''}$ の積について，さらに $\boldsymbol{k}'' = \boldsymbol{k}_1$ も区別して，$\prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} = A^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''}$ と表せば，$\prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A_{\boldsymbol{k}'}$ の積には $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k}_1$ は含まれていないので，

$$\left[ \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A_{\boldsymbol{k}'}, A^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \right] = 0 \tag{31}$$

であり，

$$\langle 0| A^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \overset{(15)}{=} u_{\boldsymbol{k}_1} \langle 0| \tag{32}$$

に注意すれば，(30) は

$$\begin{aligned}
(30) &= u_{\boldsymbol{k}_2} v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2} \langle 0| \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A_{\boldsymbol{k}'} A^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} |0\rangle \\
&\overset{(31)}{=} u_{\boldsymbol{k}_2} v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2} \langle 0| A^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} |0\rangle \\
&\overset{(32)}{=} u_{\boldsymbol{k}_1} u_{\boldsymbol{k}_2} v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2} \langle 0| \prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A_{\boldsymbol{k}'} \prod_{\boldsymbol{k}'' \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}''} |0\rangle \\
&= u_{\boldsymbol{k}_1} u_{\boldsymbol{k}_2} v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2} \left\| \prod_{\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}} |0\rangle \right\|^2 \\
&= u_{\boldsymbol{k}_1} u_{\boldsymbol{k}_2} v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2}
\end{aligned} \tag{33}$$

となる．(33) の最後の等号で，$\prod_{\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}} |0\rangle$ のノルムが 1 であることを用いている．これも，BCS 変分関数の規格化（後述の (iv) 付録を参照）と同様に示せる．

(iii) 最終的な結果

以上の (i) と (ii) の結果をまとめると，求める期待値は次のようになる．

$$\langle \Psi_{\mathrm{BCS}} | \, \mathcal{H} \, | \Psi_{\mathrm{BCS}} \rangle = 2 \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 - \sum_{\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} V_{\boldsymbol{k}_1 \boldsymbol{k}_2} u_{\boldsymbol{k}_1} u_{\boldsymbol{k}_2} v^*_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_2} \tag{34}$$

(iv) 付録：$|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}} (u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) \, |0\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}} A^\dagger_{\boldsymbol{k}} \, |0\rangle$ が規格化されていることについて

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\mathrm{BCS}} | \, \Psi_{\mathrm{BCS}} \rangle &= \langle 0 | \prod_{\boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}} \prod_{\boldsymbol{k}'} A^\dagger_{\boldsymbol{k}'} \, |0\rangle = \langle 0 | \prod_{\boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}} A^\dagger_{\boldsymbol{k}} \, |0\rangle \\ &= \langle 0 | \prod_{\boldsymbol{k}} (u_{\boldsymbol{k}} + v^*_{\boldsymbol{k}} B_{\boldsymbol{k}})(u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} B^\dagger_{\boldsymbol{k}}) \, |0\rangle \\ &= \langle 0 | \prod_{\boldsymbol{k}} (u^2_{\boldsymbol{k}} + u_{\boldsymbol{k}} v^*_{\boldsymbol{k}} B_{\boldsymbol{k}} + u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} B^\dagger_{\boldsymbol{k}} + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 B_{\boldsymbol{k}} B^\dagger_{\boldsymbol{k}}) \, |0\rangle \end{aligned} \tag{35}$$

ここでも，$\boldsymbol{k}$ 積の順番には意味がなく，内部の積の順序は自由であることを用いた．(21) から，

$$B_{\boldsymbol{k}} B^\dagger_{\boldsymbol{k}} \overset{(21)}{=} (1 - a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} a_{\boldsymbol{k}\uparrow} - a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) + B^\dagger_{\boldsymbol{k}} B_{\boldsymbol{k}}$$

であり，真空の定義 (15)，および，同式から，任意の $\boldsymbol{k}$ について $\langle 0 | \, B^\dagger_{\boldsymbol{k}} = 0$ や $B_{\boldsymbol{k}} \, |0\rangle = 0$ であることに注意すれば，

$$\begin{aligned} (35) &= \langle 0 | \prod_{\boldsymbol{k}} (u^2_{\boldsymbol{k}} + |v_{\boldsymbol{k}}|^2) |0\rangle \\ &= \prod_{\boldsymbol{k}} (u^2_{\boldsymbol{k}} + |v_{\boldsymbol{k}}|^2) \, \langle 0 | 0 \rangle \\ &= 1 \end{aligned} \tag{36}$$

となって，BCS 変分関数が規格化されていることが示される．ここで，真空が規格化されていること $\langle 0|0\rangle = 1$ と，変分パラメータ $u_{\boldsymbol{k}}$ と $v_{\boldsymbol{k}}$ に課せられる条件，$u^2_{\boldsymbol{k}} + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 = 1$ を用いた．

(i) の (17) における $\prod_{\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}} A^\dagger_{\boldsymbol{k}'} \, |0\rangle$ や (ii) の (33) における $\prod_{\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} A^\dagger_{\boldsymbol{k}} \, |0\rangle$ のノルムについても，$A_{\boldsymbol{k}}$ や $A^\dagger_{\boldsymbol{k}}$ の $\boldsymbol{k}$ 積の順序に制限がないことに注意すれば，ここでの議論が同様に成り立つことがわかる．