BCSハミルトニアンに対する平均場近似とBogoliubov変換

武藤　哲也

「BCS変分関数によるBCSハミルトニアンの期待値について」で定義したBCSハミルトニアン$\mathcal{H}$

$$\mathcal{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}} (a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} a_{\boldsymbol{k}\uparrow} + a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) - \sum_{\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} V_{\boldsymbol{k}_1 \boldsymbol{k}_2} a^\dagger_{\boldsymbol{k}_1\uparrow} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow} a_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow} a_{\boldsymbol{k}_2\uparrow} \tag{1}$$

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

に平均場近似と呼ばれる近似を適用する．(1)の第２項に現れる演算子を「BCS変分関数によるBCSハミルトニアンの期待値について」で定義した対生成演算子・対消滅演算子

$$B^\dagger_{\boldsymbol{k}} \equiv a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \tag{3}$$

$$B_{\boldsymbol{k}} \equiv a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{\boldsymbol{k}\uparrow} \tag{4}$$

を用いて

$$a^\dagger_{\boldsymbol{k}_1\uparrow} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow} a_{-\boldsymbol{k}_2\downarrow} a_{\boldsymbol{k}_2\uparrow} = B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} B_{\boldsymbol{k}_2} \tag{5}$$

と表す．各々の演算子のそれらの統計平均からのずれ（揺らぎ）$B_{\boldsymbol{k}} - \langle B_{\boldsymbol{k}} \rangle$が十分小さいとして，

$$0 \simeq (B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} - \langle B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \rangle)(B_{\boldsymbol{k}_2} - \langle B_{\boldsymbol{k}_2} \rangle) = B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} B_{\boldsymbol{k}_2} - \langle B_{\boldsymbol{k}_2} \rangle B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} - \langle B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \rangle B_{\boldsymbol{k}_2} + \langle B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \rangle \langle B_{\boldsymbol{k}_2} \rangle \tag{6}$$

のように揺らぎを無視すると，(5)の右辺は，(6)を用いて

$$B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} B_{\boldsymbol{k}_2} \overset{(6)}{\simeq} \langle B_{\boldsymbol{k}_2} \rangle B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} + \langle B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \rangle B_{\boldsymbol{k}_2} - \langle B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \rangle \langle B_{\boldsymbol{k}_2} \rangle \tag{7}$$

と近似される．(7)は，$B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1}$と$B_{\boldsymbol{k}_2}$の演算子の積について，一方の演算子をその統計平均で置き換える近似と見做すことができるので，このような近似を**平均場近似**と呼ぶ．

(7)を用いて，(1)のハミルトニアン$\mathcal{H}$を，以下のような**平均場ハミルトニアン**$\mathcal{H}_{\mathrm{MF}}$で近似する．

$$\mathcal{H} \simeq \mathcal{H}_{\mathrm{MF}} = \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}} (a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} a_{\boldsymbol{k}\uparrow} + a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) - \sum_{\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2} V_{\boldsymbol{k}_1 \boldsymbol{k}_2} \left\{ \langle B_{\boldsymbol{k}_2} \rangle B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} + \langle B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \rangle B_{\boldsymbol{k}_2} - \langle B^\dagger_{\boldsymbol{k}_1} \rangle \langle B_{\boldsymbol{k}_2} \rangle \right\} \tag{8}$$

$$\langle A \rangle \equiv \frac{1}{\Xi} \mathrm{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_{\mathrm{MF}}} A; \quad \Xi = \mathrm{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_{\mathrm{MF}}} \tag{9}$$

平均場近似は揺らぎが小さい場合に妥当となる近似だが，その揺らぎの計算には演算子の統計平均$\langle \cdots \rangle$が必要となる．(8)に現れる統計平均(9)は，(8)の平均場ハミルトニアン$\mathcal{H}_{\mathrm{MF}}$自体で定義されるので，$\mathcal{H}_{\mathrm{MF}}$とその下での統計平均を自己無撞着に決定する必要がある．即ち，平均場近似の妥当性は自己無撞着にしか保証されない（近似の妥当性は「やってみなければわからない」という意味）．

(8)の$\langle B^\dagger_{\boldsymbol{k}} \rangle$について，統計平均(9)のTrを，$\mathcal{H}_{\mathrm{MF}}$の固有状態の完全系$\{|n\rangle\}$による対角和によって

$$\mathrm{Tr} A = \sum_n \langle n | A | n \rangle \tag{10}$$

と表して，対応する$\mathcal{H}_{\mathrm{MF}}$の固有値の組$\{K_n\}$を用いた固有方程式

$$\mathcal{H}_{\mathrm{MF}} |n\rangle = K_n |n\rangle; \quad \langle n| \mathcal{H}_{\mathrm{MF}} = K_n \langle n| \tag{11}$$

により，以下のように計算する．Hermite共役演算子の定義から成り立つ性質

$$\langle m | A^\dagger | n \rangle = \langle n | A | m \rangle^* \tag{12}$$

を用いれば，$\langle B_{\boldsymbol{k}}^\dagger \rangle$ は，

$$
\begin{aligned}
\langle B_{\boldsymbol{k}}^\dagger \rangle &\overset{(9)}{=} \frac{1}{\Xi}\mathrm{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}_{\mathrm{MF}}} B_{\boldsymbol{k}}^\dagger \\
&\overset{(10)}{=} \frac{1}{\Xi}\sum_n \langle n|e^{-\beta\mathcal{H}_{\mathrm{MF}}} B_{\boldsymbol{k}}^\dagger|n\rangle \\
&\overset{(11)}{=} \frac{1}{\Xi}\sum_n \langle n|e^{-\beta K_n} B_{\boldsymbol{k}}^\dagger|n\rangle = \frac{1}{\Xi}\sum_n e^{-\beta K_n}\,\langle n|B_{\boldsymbol{k}}^\dagger|n\rangle \\
&\overset{(12)}{=} \frac{1}{\Xi}\sum_n e^{-\beta K_n}\,\langle n|B_{\boldsymbol{k}}|n\rangle^* = \frac{1}{\Xi}\sum_n \langle n|e^{-\beta K_n} B_{\boldsymbol{k}}|n\rangle^* = \left(\frac{1}{\Xi}\sum_n \langle n|e^{-\beta K_n} B_{\boldsymbol{k}}|n\rangle\right)^* \\
&\overset{(11)}{=} \left(\frac{1}{\Xi}\sum_n \langle n|e^{-\beta\mathcal{H}_{\mathrm{MF}}} B_{\boldsymbol{k}}|n\rangle\right)^* \overset{(10)}{=} \left(\frac{1}{\Xi}\mathrm{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}_{\mathrm{MF}}} B_{\boldsymbol{k}}\right)^* \overset{(9)}{=} \langle B_{\boldsymbol{k}}\rangle^*
\end{aligned}
\tag{13}
$$

となって，$\langle B_{\boldsymbol{k}}^\dagger \rangle = \langle B_{\boldsymbol{k}}\rangle^*$ がわかる．ここで，

$$
\Delta_{\boldsymbol{k}} \equiv \sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\langle B_{\boldsymbol{k}'}\rangle \tag{14}
$$

を定義すると，$V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \in \mathbb{R}$ であり，$V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} = V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}$ であることから，

$$
\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}\langle B_{\boldsymbol{k}'}^\dagger\rangle \overset{(13)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}\langle B_{\boldsymbol{k}'}\rangle^* = \left(\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\langle B_{\boldsymbol{k}'}\rangle\right)^* \overset{(14)}{=} \Delta_{\boldsymbol{k}}^* \tag{15}
$$

が成り立つので，(8) の第 2 項について，

$$
\begin{aligned}
\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2} V_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2}\langle B_{\boldsymbol{k}_2}\rangle B_{\boldsymbol{k}_1}^\dagger &\overset{(14)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}_1}\Delta_{\boldsymbol{k}_1}B_{\boldsymbol{k}_1}^\dagger = \sum_{\boldsymbol{k}}\Delta_{\boldsymbol{k}}B_{\boldsymbol{k}}^\dagger \\
\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2} V_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2}\langle B_{\boldsymbol{k}_1}^\dagger\rangle B_{\boldsymbol{k}_2} &\overset{(15)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}_2}\Delta_{\boldsymbol{k}_2}^* B_{\boldsymbol{k}_2} = \sum_{\boldsymbol{k}}\Delta_{\boldsymbol{k}}^* B_{\boldsymbol{k}} \\
\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2} V_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2}\langle B_{\boldsymbol{k}_1}^\dagger\rangle\langle B_{\boldsymbol{k}_2}\rangle &\overset{(15)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}_2}\Delta_{\boldsymbol{k}_2}^*\langle B_{\boldsymbol{k}_2}\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}}\Delta_{\boldsymbol{k}}^*\langle B_{\boldsymbol{k}}\rangle
\end{aligned}
$$

と表すことができる（全て，最終等号では和のダミー変数を $\boldsymbol{k}$ に統一した）．特に，最後の項については，

$$
\sum_{\boldsymbol{k}}\Delta_{\boldsymbol{k}}^*\langle B_{\boldsymbol{k}}\rangle \overset{(15)}{=} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}\langle B_{\boldsymbol{k}'}\rangle^*\langle B_{\boldsymbol{k}}\rangle = \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\langle B_{\boldsymbol{k}}\rangle^*\langle B_{\boldsymbol{k}'}\rangle \overset{(14)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}}\Delta_{\boldsymbol{k}}\langle B_{\boldsymbol{k}}\rangle^* \tag{16}
$$

となるが（(16) の第 2 等号ではダミー変数の $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}'$ を入れ替えた），(16) の最左辺と最右辺は互いに複素共役であり，(16) の最左辺が自身の複素共役に等しいことから，(16) で与えられる量が実数であることがわかる．以降では，実定数である上記の量を W と表す：

$$
W \equiv \sum_{\boldsymbol{k}}\Delta_{\boldsymbol{k}}^*\langle B_{\boldsymbol{k}}\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}}\Delta_{\boldsymbol{k}}\langle B_{\boldsymbol{k}}\rangle^* \in \mathbb{R}
$$

以上をまとめて，(8) を次のように表そう．

$$
\mathcal{H}_{\mathrm{MF}} = \sum_{\boldsymbol{k}}\xi_{\boldsymbol{k}}(a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\uparrow} + a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) - \sum_{\boldsymbol{k}}\left(\Delta_{\boldsymbol{k}}B_{\boldsymbol{k}}^\dagger + \Delta_{\boldsymbol{k}}^* B_{\boldsymbol{k}}\right) + W \tag{17}
$$

この (17) を以降の議論の出発点とする（Hartree-Fock-Gor'kov ハミルトニアン）．(17) は $B_{\boldsymbol{k}} \overset{(4)}{=} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}$ や $B_{\boldsymbol{k}}^\dagger \overset{(3)}{=} a_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger$ を含んでおり，電子数を保存しないハミルトニアンになっているが，電子の生成・消滅

演算子の 2 次形式になっているので，適切なユニタリ変換で対角化することができる．ここでは，天下り的に，次の Bogoliubov（ボゴリューボフ）変換と呼ばれるユニタリ変換を考える．

$$\left\{\begin{array}{lcl}\alpha_{\boldsymbol{k}} & \equiv & u_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}\uparrow} - v_{\boldsymbol{k}} a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \\ \beta_{\boldsymbol{k}} & \equiv & v_{\boldsymbol{k}} a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow} + u_{\boldsymbol{k}} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\end{array}\right. \tag{18}$$

(18) の逆変換は，

$$\left\{\begin{array}{lcl}a_{\boldsymbol{k}\uparrow} & = & u_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} \\ a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} & = & -v^{*}_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + u_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\end{array}\right. \tag{19}$$

で与えられる．ここで，$u_{\boldsymbol{k}}$ と $v_{\boldsymbol{k}}$ は，

$$u^2_{\boldsymbol{k}} + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 = 1 \tag{20}$$

を満たす変換係数であり，$u_{\boldsymbol{k}}$ は実数に取ることができる．

Bogoliubov 変換 (18) で定義される新しい演算子（Bogoliubov 演算子）の $\alpha_{\boldsymbol{k}}$ や $\beta_{\boldsymbol{k}}$ は，実は，(20) の条件下で，それぞれ Fermi 統計に従う演算子であること，

$$\{\alpha_{\boldsymbol{k}}, \alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}\} = \delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'};\quad \{\alpha_{\boldsymbol{k}}, \alpha_{\boldsymbol{k}'}\} = 0;\quad \{\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}, \alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}\} = 0 \tag{21}$$

$$\{\beta_{\boldsymbol{k}}, \beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}\} = \delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'};\quad \{\beta_{\boldsymbol{k}}, \beta_{\boldsymbol{k}'}\} = 0;\quad \{\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}, \beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}\} = 0 \tag{22}$$

を示すことができる（$\alpha_{\boldsymbol{k}}$ と $\beta_{\boldsymbol{k}}$ は，生成・消滅によらず，互いに反可換である：$\{\alpha_{\boldsymbol{k}}, \beta_{\boldsymbol{k}'}\} = 0$ など）．つまり，Bogoliubov 演算子の $\alpha_{\boldsymbol{k}}$ や $\beta_{\boldsymbol{k}}$ は，新しい Fermi 粒子を定義していることになる．このように，電子のような真の素粒子ではないが，粒子と見做すことができるものを，**準粒子**（quasi-particle）と呼ぶ．特に，Bogoliubov 変換 (18) で定義される $\alpha_{\boldsymbol{k}}$ や $\beta_{\boldsymbol{k}}$ で記述される準粒子を **Bogoliubov 準粒子**と呼ぶことがある．

(17) の電子の演算子に Bogoliubov 逆変換 (19) を代入することで，(17) を Bogoliubov 演算子で書き換えよう．まず，運動エネルギーの項については，

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}}(a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow} + a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) &\overset{(19)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}}\left\{(u_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} + v^{*}_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}})(u_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}) + (-v^{*}_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + u_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}})(-v_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} + u_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}})\right\} \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}}\left\{u^2_{\boldsymbol{k}}(\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}}) + |v_{\boldsymbol{k}}|^2(\alpha_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} + \beta_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}) + 2u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} + 2u_{\boldsymbol{k}}v^{*}_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}}\right\} \\ &\overset{(21)(22)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}}\left\{(u^2_{\boldsymbol{k}} - |v_{\boldsymbol{k}}|^2)(\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}}) + 2|v_{\boldsymbol{k}}|^2 + 2u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} + 2u_{\boldsymbol{k}}v^{*}_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}}\right\}\end{aligned} \tag{23}$$

となる．次に，$\Delta_{\boldsymbol{k}}$ や $\Delta^{*}_{\boldsymbol{k}}$ に比例する項（対生成・対消滅演算子を含む項）については，

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}} B^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} \overset{(3)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}} a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow}a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} &\overset{(19)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} + v^{*}_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}})(-v^{*}_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + u_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}) \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}}\left\{-u_{\boldsymbol{k}}v^{*}_{\boldsymbol{k}}(\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} - \beta_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}) + u^2_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} - (v^{*}_{\boldsymbol{k}})^2\beta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}}\right\} \\ &\overset{(22)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}}\left\{-u_{\boldsymbol{k}}v^{*}_{\boldsymbol{k}}(\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}}) + u_{\boldsymbol{k}}v^{*}_{\boldsymbol{k}} + u^2_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} - (v^{*}_{\boldsymbol{k}})^2\beta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}}\right\}\end{aligned} \tag{24}$$

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{k}} \Delta^{*}_{\boldsymbol{k}} B_{\boldsymbol{k}} \overset{(4)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta^{*}_{\boldsymbol{k}} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow} &\overset{(19)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta^{*}_{\boldsymbol{k}}(-v_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} + u_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}})(u_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}) \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta^{*}_{\boldsymbol{k}}\left\{-u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}(\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} - \beta_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}) + u^2_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} - v^2_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\right\} \\ &\overset{(21)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta^{*}_{\boldsymbol{k}}\left\{-u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}(\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}}) + u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}} + u^2_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} - v^2_{\boldsymbol{k}}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\beta^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\right\}\end{aligned} \tag{25}$$

となる．以上より，Bogoliubov 演算子で (17) を書き換えた結果をまとめると，

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\mathrm{MF}} &= \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ \xi_{\boldsymbol{k}} (u_{\boldsymbol{k}}^2 - |v_{\boldsymbol{k}}|^2) + \Delta_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}^* + \Delta_{\boldsymbol{k}}^* u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \right\} (\alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta_{\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}}) \\
&\quad + \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ (2\xi_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} - \Delta_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}}^2 + \Delta_{\boldsymbol{k}}^* v_{\boldsymbol{k}}^2) \alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}}^\dagger + (2\xi_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}^* - \Delta_{\boldsymbol{k}}^* u_{\boldsymbol{k}}^2 + \Delta_{\boldsymbol{k}} (v_{\boldsymbol{k}}^*)^2) \beta_{\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}} \right\} \\
&\quad + \sum_{\boldsymbol{k}} \left(2\xi_{\boldsymbol{k}} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 - \Delta_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}^* - \Delta_{\boldsymbol{k}}^* u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \right) + W
\end{aligned}
\tag{26}
$$

が得られる．

ここで，(26) を見ると，$u_{\boldsymbol{k}}$ と $v_{\boldsymbol{k}}$ を (20) の条件下で適切に選んで，(26) の 2 段目の $\alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ や $\beta_{\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}}$ の係数を 0 とすることができれば，(26) は Bogoliubov 演算子の数演算子（$\alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \alpha_{\boldsymbol{k}}$ や $\beta_{\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}}$）のみで表すことができることがわかる．即ち，そのような $u_{\boldsymbol{k}}$ と $v_{\boldsymbol{k}}$ を選ぶことで (26) が対角化できることになる．(26) の 2 段目の $\alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ や $\beta_{\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}}$ の係数を 0 として対角化されたハミルトニアンは，

$$
\mathcal{H}_{\mathrm{MF}} = \sum_{\boldsymbol{k}} \tilde{E}_{\boldsymbol{k}} (\alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta_{\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}}) + E_0 \tag{27}
$$

$$
\tilde{E}_{\boldsymbol{k}} \equiv \xi_{\boldsymbol{k}} (u_{\boldsymbol{k}}^2 - |v_{\boldsymbol{k}}|^2) + \Delta_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}^* + \Delta_{\boldsymbol{k}}^* u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \tag{28}
$$

$$
E_0 \equiv \sum_{\boldsymbol{k}} \left(2\xi_{\boldsymbol{k}} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 - \Delta_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}^* - \Delta_{\boldsymbol{k}}^* u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \right) + W \tag{29}
$$

と表すことができる．(28) は Bogoliubov 準粒子の運動エネルギーを表し，(29) は Bogoliubov 準粒子の数演算子の固有値が 0，即ち，Bogoliubov 準粒子が存在しない場合の系のエネルギーであり，系の基底エネルギーを表す．

(26) の 2 段目の $\alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ や $\beta_{\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}}$ の係数を 0 とする方程式は，

$$
2\xi_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} - \Delta_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}}^2 + \Delta_{\boldsymbol{k}}^* v_{\boldsymbol{k}}^2 = 0 \tag{30}
$$

$$
2\xi_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}^* - \Delta_{\boldsymbol{k}}^* u_{\boldsymbol{k}}^2 + \Delta_{\boldsymbol{k}} (v_{\boldsymbol{k}}^*)^2 = 0 \tag{31}
$$

となるが，(30) と (31) は互いに複素共役の関係にあるので（$\because \xi_{\boldsymbol{k}}, u_{\boldsymbol{k}} \in \mathbb{R}$），独立な方程式ではない．ここでは，(30) に着目し，(30) の両辺に $1/u_{\boldsymbol{k}}^2$ を掛けて得られる $v_{\boldsymbol{k}}/u_{\boldsymbol{k}}$ についての 2 次方程式

$$
\Delta_{\boldsymbol{k}}^* \left(\frac{v_{\boldsymbol{k}}}{u_{\boldsymbol{k}}} \right)^2 + 2\xi_{\boldsymbol{k}} \frac{v_{\boldsymbol{k}}}{u_{\boldsymbol{k}}} - \Delta_{\boldsymbol{k}} = 0 \tag{32}
$$

を考えよう．2 次方程式の解の公式を用いれば，$v_{\boldsymbol{k}}/u_{\boldsymbol{k}}$ について，

$$
\frac{v_{\boldsymbol{k}}}{u_{\boldsymbol{k}}} = \frac{1}{\Delta_{\boldsymbol{k}}^*} \left(-\xi_{\boldsymbol{k}} \pm \sqrt{\xi_{\boldsymbol{k}}^2 + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2} \right) \equiv \frac{-\xi_{\boldsymbol{k}} \pm E_{\boldsymbol{k}}}{\Delta_{\boldsymbol{k}}^*} = \pm \frac{E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}}}{\Delta_{\boldsymbol{k}}^*} \quad \text{(複号同順)} \tag{33}
$$

$$
E_{\boldsymbol{k}} \equiv \sqrt{\xi_{\boldsymbol{k}}^2 + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2} \tag{34}
$$

と解くことができる．ここで，(33) の両辺の絶対値の 2 乗を計算すれば，(33) と複号を同順にして，

$$
\left| \frac{v_{\boldsymbol{k}}}{u_{\boldsymbol{k}}} \right|^2 = \frac{|v_{\boldsymbol{k}}|^2}{u_{\boldsymbol{k}}^2} = \frac{(E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}})^2}{|\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2} \overset{(34)}{=} \frac{(E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}})^2}{E_{\boldsymbol{k}}^2 - \xi_{\boldsymbol{k}}^2} = \frac{(E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}})^2}{(E_{\boldsymbol{k}} + \xi_{\boldsymbol{k}})(E_{\boldsymbol{k}} - \xi_{\boldsymbol{k}})} = \frac{E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}} \pm \xi_{\boldsymbol{k}}} \quad \text{(複号同順)} \tag{35}
$$

を得る．さらに，(20) を用いれば，複号を (35) と同順に取ることとして，

$$
\frac{1}{u_{\boldsymbol{k}}^2} \overset{(20)}{=} \frac{u_{\boldsymbol{k}}^2 + |v_{\boldsymbol{k}}|^2}{u_{\boldsymbol{k}}^2} = 1 + \frac{|v_{\boldsymbol{k}}|^2}{u_{\boldsymbol{k}}^2} \overset{(35)}{=} 1 + \frac{E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}} \pm \xi_{\boldsymbol{k}}} = \frac{2E_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}} \pm \xi_{\boldsymbol{k}}} \quad \text{(複号同順)} \tag{36}
$$

が得られる．(36) の逆数や，その (35) との積から，

$$
\left\{
\begin{array}{rcl}
u_{\boldsymbol{k}}^2 & = & \dfrac{E_{\boldsymbol{k}} \pm \xi_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}} \\
|v_{\boldsymbol{k}}|^2 & = & \dfrac{E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}}
\end{array}
\right. \quad \text{(複号同順)} \tag{37}
$$

を得ることができる．また，これまでと同順の複号を用いて，

$$\begin{aligned}
\Delta_{\boldsymbol{k}}^* u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} &= \Delta_{\boldsymbol{k}}^* u_{\boldsymbol{k}}^2 \frac{v_{\boldsymbol{k}}}{u_{\boldsymbol{k}}} \overset{(33)}{=} \pm \Delta_{\boldsymbol{k}}^* u_{\boldsymbol{k}}^2 \frac{E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}}}{\Delta_{\boldsymbol{k}}^*} = \pm u_{\boldsymbol{k}}^2 (E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}}) \\
&\overset{(37)}{=} \pm \frac{(E_{\boldsymbol{k}} \pm \xi_{\boldsymbol{k}})(E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}})}{2E_{\boldsymbol{k}}} = \pm \frac{E_{\boldsymbol{k}}^2 - \xi_{\boldsymbol{k}}^2}{2E_{\boldsymbol{k}}} \\
&\overset{(34)}{=} \pm \frac{|\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}{2E_{\boldsymbol{k}}} \quad (\text{複号同順})
\end{aligned} \tag{38}$$

と表されるので，(28) の $\tilde{E}_{\boldsymbol{k}}$ を，

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_{\boldsymbol{k}} &\overset{(28)(37)(38)}{=} \xi_{\boldsymbol{k}} \left(\frac{E_{\boldsymbol{k}} \pm \xi_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}} - \frac{E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}} \right) \pm \frac{|\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}{2E_{\boldsymbol{k}}} \pm \frac{|\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}{2E_{\boldsymbol{k}}} \\
&= \frac{\pm \xi_{\boldsymbol{k}}^2 \pm |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}{2E_{\boldsymbol{k}}} = \pm \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}^2 + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}{2E_{\boldsymbol{k}}} \overset{(34)}{=} \pm E_{\boldsymbol{k}} \quad (\text{複号同順})
\end{aligned} \tag{39}$$

と表すことができる．

最終的に (37)，(38)，(39) の複号のどちらの符号を採用するべきかを決めるのは，(29) で定義される系の基底エネルギー E_0 である．E_0 は，

$$\begin{aligned}
E_0 &\overset{(29)(37)(38)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}} \left(2\xi_{\boldsymbol{k}} \frac{E_{\boldsymbol{k}} \mp \xi_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}} \mp \frac{|\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}{2E_{\boldsymbol{k}}} \mp \frac{|\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}{2E_{\boldsymbol{k}}} \right) + W \\
&= \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ \xi_{\boldsymbol{k}} \left(1 \mp \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}} \right) \mp \frac{|\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}{E_{\boldsymbol{k}}} \right\} + W \\
&= \sum_{\boldsymbol{k}} \left(\xi_{\boldsymbol{k}} \mp \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}^2 + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}{E_{\boldsymbol{k}}} \right) + W \\
&\overset{(34)}{=} \sum_{\boldsymbol{k}} (\xi_{\boldsymbol{k}} \mp E_{\boldsymbol{k}}) + W \quad (\text{複号同順})
\end{aligned} \tag{40}$$

と計算されるが，基底エネルギーである E_0 を低く取るためには，(40) の最右辺の複号は負符号を採用しなければならない．即ち，基底エネルギー E_0 は，

$$E_0 = \sum_{\boldsymbol{k}} (\xi_{\boldsymbol{k}} - E_{\boldsymbol{k}}) + W \tag{41}$$

$$W = \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}}^* \langle B_{\boldsymbol{k}} \rangle \tag{42}$$

と決定される．(41) により，(40) で採用するべき複号が決定したので，(39) で与えられる Bogoliubov 準粒子の運動エネルギー $\tilde{E}_{\boldsymbol{k}}$ の複号も，

$$\tilde{E}_{\boldsymbol{k}} = E_{\boldsymbol{k}}$$

と定まる．

以上をまとめると，(17) の平均場ハミルトニアン（Hartree-Fock-Gor'kov ハミルトニアン）を Bogoliubov 演算子により，以下のように表すことができる．

$$\mathcal{H}_{\mathrm{MF}} = \sum_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}} (\alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta_{\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}}) + E_0 \tag{43}$$

$$E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\xi_{\boldsymbol{k}}^2 + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2} \tag{44}$$

$$E_0 = \sum_{\boldsymbol{k}} (\xi_{\boldsymbol{k}} - E_{\boldsymbol{k}}) + W \quad \left(W = \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}}^* \langle B_{\boldsymbol{k}} \rangle \right) \tag{45}$$

また，Bogoliubov 変換の変換係数については，(37) と (38) から，

$$u_{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{E_{\boldsymbol{k}} + \xi_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}} \tag{46}$$

$$|v_{\boldsymbol{k}}|^2 = \frac{E_{\boldsymbol{k}} - \xi_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}} \tag{47}$$

$$u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} = \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}} \tag{48}$$

と定まる．(43) を見ると，(43) は (44) で与えられる運動エネルギー $E_{\boldsymbol{k}}$ で運動する自由 Fermi 気体のハミルトニアンになっていて，その自由 Fermi 粒子が Bogoliubov 準粒子であり，Bogoliubov 準粒子が存在しない状態，即ち，Bogoliubov 準粒子にとっての「真空状態」のエネルギーが，(45) で与えられる系の基底エネルギー E_0 となっていることがわかる．