

$\Delta \neq 0$ の超伝導状態と正常状態のエネルギー比較

武藤 哲也

「 $T = 0$ でのギャップ方程式について」(以降では「資料」と呼ぶ) p.1 の (6) に基づいて, BCS 変分関数による BCS ハミルトニアン の期待値 (以降では系のエネルギーと呼ぶ) E を計算すると, 資料 p.2 の (14) を用いて,

$$E = \sum_{\mathbf{k}} (2\xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}) \quad (1)$$

と表される (資料での取り扱いと同様に, $v_{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}$ とするので, $\Delta_{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}$ である). ここで, 記述を簡便にするため, 資料 p.3 の (27) と同様に,

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv \begin{cases} \Delta & (|\xi_{\mathbf{k}}| \leq \hbar\omega_{\text{D}}) \\ 0 & (|\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_{\text{D}}) \end{cases} \quad (2)$$

を導入した. 資料 p.2 の (21) と (24) より,

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}} \quad (3)$$

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}} \right) \quad (4)$$

と表しておく. 資料で見たように $\Delta = 0$ は正常状態に対応するので, 正常状態では, (3) と (4) は, 各々,

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = 0 \quad (5)$$

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \right) \quad \left(\because \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2} = |\xi_{\mathbf{k}}| \right) \quad (6)$$

と表される.

$\Delta = 0$ の正常状態の系のエネルギーを E_{N} と表そう. 一方, $\Delta \neq 0$ の状態がどのような状態かは現時点ではわからないが, ここでは議論を先取りして, $\Delta \neq 0$ の状態を超伝導状態と考え, その状態のエネルギーを E_{S} と表すこととする. この時, (2) から, 超伝導状態であっても, $|\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_{\text{D}}$ となる $\mathbf{k}$ の範囲では $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$ となり, 正常状態と同じになるので, E_{S} と E_{N} の差を考えると, その差の表式に現れる $\mathbf{k}$ の和のうち, $|\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_{\text{D}}$ となる $\mathbf{k}$ の範囲の和は両者が相殺して, $|\xi_{\mathbf{k}}| \leq \hbar\omega_{\text{D}}$ の範囲のみの和が残ることになる. 即ち, $\mathbf{k}$ 和 $\sum_{\mathbf{k}}$ を, 資料 p.3 の (28) で定義した制限付きの $\mathbf{k}$ 和 $\sum'_{\mathbf{k}}$ で置き換えればよい.

従って, E_{S} と E_{N} の差は, (1) に, (3) $\cdot$ (4) $\cdot$ (5) $\cdot$ (6) を用いて,

$$\begin{aligned} E_{\text{S}} - E_{\text{N}} &= \sum'_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \right) - \frac{\Delta^2}{2} \sum'_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} - \sum'_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \right) \\ &= \sum'_{\mathbf{k}} \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{|\xi_{\mathbf{k}}|} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \right) - \frac{\Delta^2}{2} \sum'_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \end{aligned} \quad (7)$$

と表される. ここで,

$$\frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{|\xi_{\mathbf{k}}|} = |\xi_{\mathbf{k}}| = \begin{cases} \xi_{\mathbf{k}} & (\xi_{\mathbf{k}} > 0; |\mathbf{k}| > k_{\text{F}}) \\ -\xi_{\mathbf{k}} & (\xi_{\mathbf{k}} < 0; |\mathbf{k}| < k_{\text{F}}) \end{cases}$$

なので,

$$\sum'_{\mathbf{k}} \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{|\xi_{\mathbf{k}}|} = \sum'_{|\mathbf{k}| > k_{\text{F}}} \xi_{\mathbf{k}} + \sum'_{|\mathbf{k}| < k_{\text{F}}} (-\xi_{\mathbf{k}}) = 2 \sum'_{|\mathbf{k}| > k_{\text{F}}} \xi_{\mathbf{k}} \quad \left(\because \sum'_{|\mathbf{k}| < k_{\text{F}}} \xi_{\mathbf{k}} = - \sum'_{|\mathbf{k}| > k_{\text{F}}} \xi_{\mathbf{k}} \right)$$

となることと,

$$\begin{aligned} \sum_k' \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} &= \sum_{|k| > k_F}' \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} + \sum_{|k| < k_F}' \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} = 2 \sum_{|k| > k_F}' \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \\ &\left(\because \sum_{|k| < k_F}' \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} = \sum_{|k| > k_F}' \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \right) \end{aligned}$$

となることを用いれば, (7) は,

$$\begin{aligned} (7) &= 2 \sum_{|k| > k_F}' \left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \right) - \frac{\Delta^2}{2} \sum_k' \frac{1}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \\ &= 2 \sum_{|k| > k_F}' \left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \right) - \frac{\Delta^2}{V_0} \end{aligned} \quad (8)$$

と表すことができる. ただし, (8) の第2等号では, ギャップ方程式 (資料 p.3 の (30)) を用いた.

資料 p.3 の (31) と同様に, 状態密度 $D(\xi)$ を用いて, (8) の制限付きの k 和を, 積分上限 $\hbar\omega_D$ の ξ についての積分に置き換えると, k 和の条件である $|k| > k_F$ により, 積分下限は0となるので,

$$\begin{aligned} (8) &= 2 \int_0^{\hbar\omega_D} D(\xi) \left(\xi - \frac{\xi^2}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \right) d\xi - \frac{\Delta^2}{V_0} \\ &\simeq 2D_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \left(\xi - \frac{\xi^2}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \right) d\xi - \frac{\Delta^2}{V_0} \\ &= 2D_0 \left(\frac{\hbar^2\omega_D^2}{2} - \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\xi^2}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \right) - \frac{\Delta^2}{V_0} \end{aligned} \quad (9)$$

となる. (9) では, 資料 p.3 の (31) と同様に, $0 \leq \xi \leq \hbar\omega_D$ の積分範囲での被積分関数の $D(\xi)$ について, $D(\xi) \simeq D_0$ の近似を用いている. また, (9) の最終等号では, ξ についての定積分を実行した. (9) の最右辺の () 内第2項について, 不定積分

$$\int \frac{x^2}{\sqrt{x^2 + a^2}} dx = \frac{1}{2} \left(x\sqrt{x^2 + a^2} - a^2 \sinh^{-1} \frac{x}{a} \right)$$

を用いることで, E_S と E_N の差は次のように計算される.

$$\begin{aligned} E_S - E_N &\simeq 2D_0 \left\{ \frac{\hbar^2\omega_D^2}{2} - \frac{1}{2} \left(\hbar\omega_D \sqrt{\hbar^2\omega_D^2 + \Delta^2} - \Delta^2 \sinh^{-1} \frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \right) \right\} - \frac{\Delta^2}{V_0} \\ &= D_0 \left(\hbar^2\omega_D^2 - \hbar\omega_D \sqrt{\hbar^2\omega_D^2 + \Delta^2} \right) + D_0 \Delta^2 \sinh^{-1} \frac{\hbar\omega_D}{\Delta} - \frac{\Delta^2}{V_0} \\ &\simeq D_0 \left(\hbar^2\omega_D^2 - \hbar\omega_D \sqrt{\hbar^2\omega_D^2 + \Delta^2} \right) \end{aligned} \quad (10)$$

(10) の最終の近似等号では, 資料 p.3 の (31) より,

$$1 \simeq V_0 D_0 \sinh^{-1} \frac{\hbar\omega_D}{\Delta}$$

を用いた. 弱結合近似 $V_0 D_0 \ll 1$ が成り立つ場合には, $\Delta \ll \hbar\omega_D$ が成り立つので, (10) の最右辺では,

$$\hbar\omega_D \sqrt{\hbar^2\omega_D^2 + \Delta^2} = \hbar^2\omega_D^2 \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_D} \right)^2} \simeq \hbar^2\omega_D^2 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_D} \right)^2 \right\} = \hbar^2\omega_D^2 + \frac{1}{2}\Delta^2$$

が成り立つ. 従って, 最終的な E_S と E_N の差の表式は,

$$E_S - E_N \simeq -\frac{1}{2} D_0 \Delta^2 \quad (11)$$

となる. (11) は, $\Delta \neq 0$ となる状態 (この状態が超伝導状態であることは後に示される) は, $\Delta = 0$ の正常状態に比べてエネルギーが低く, $T = 0$ では $\Delta \neq 0$ となる状態が実現することを示している.