

転移温度直下でのギャップの温度変化

武藤 哲也

転移温度直下 ($T \simeq T_c$ だが $T < T_c$, 即ち, $T \lesssim T_c$) でのギャップの温度変化を調べる. 「ギャップ方程式と転移温度」(以降, 「資料 1」とする) p.1 の (5) で導いたギャップ方程式を, 同 p.2 の (8) と同様の近似で表すと,

$$1 = V_0 D_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}{2k_B T} d\xi \quad (1)$$

となる (ここでは, $\beta = (k_B T)^{-1}$ を用い, さらに近似等式でなく等式として表した). (1) の右辺の被積分関数に, 敢えて $\tanh(\xi/(2k_B T))/\xi$ を引いて足すことで, 定積分を 2 つに分けると, (1) は,

$$1 = V_0 D_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \left(\frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}{2k_B T} - \frac{1}{\xi} \tanh \frac{\xi}{2k_B T} \right) d\xi + V_0 D_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\xi} \tanh \frac{\xi}{2k_B T} d\xi \quad (2)$$

と表される.

(2) の右辺第 2 項については, 資料 1 の p.2 の (8) の右辺が¹, $\hbar\omega_D \gg k_B T_c$ の下で, 同 p.4 の (23) の右辺のように近似されるのと同様の計算により,

$$V_0 D_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\xi} \tanh \frac{\xi}{2k_B T} d\xi \simeq V_0 D_0 \log \left(\frac{2e^\gamma}{\pi} \frac{\hbar\omega_D}{k_B T} \right) \quad (3)$$

と近似される (ここで考えている温度は $T \lesssim T_c$ であるから, $\hbar\omega_D \gg k_B T$ の仮定は妥当である)¹. さらに, (2) の左辺の 1 を, 資料 1 の p.4 の (23) の T_c を定める式を用いて書き換えれば, (1) は,

$$V_0 D_0 \log \left(\frac{2e^\gamma}{\pi} \frac{\hbar\omega_D}{k_B T_c} \right) \simeq V_0 D_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \left(\frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}{2k_B T} - \frac{1}{\xi} \tanh \frac{\xi}{2k_B T} \right) d\xi + V_0 D_0 \log \left(\frac{2e^\gamma}{\pi} \frac{\hbar\omega_D}{k_B T} \right)$$

となる. この式の両辺を $V_0 D_0 (\neq 0)$ で割り, 対数関数を左辺にまとめて $\log(T/T_c)$ と表すと,

$$\log \frac{T}{T_c} \simeq \int_0^{\hbar\omega_D} \left(\frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}{2k_B T} - \frac{1}{\xi} \tanh \frac{\xi}{2k_B T} \right) d\xi \quad (4)$$

と変形することができる.

(4) の右辺においては, $\hbar\omega_D \gg |\Delta|$ であるので, $\xi \gg \hbar\omega_D$ の領域では被積分関数の第 1 項と第 2 項が相殺するため, 定積分の上限を $\hbar\omega_D$ から ∞ に変えることは妥当な近似である. この近似の下で, (4) は,

$$\log \frac{T}{T_c} \simeq \int_0^\infty \left(\frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}{2k_B T} - \frac{1}{\xi} \tanh \frac{\xi}{2k_B T} \right) d\xi \quad (5)$$

となる. (5) の右辺について, 資料 1 の p.2 の (9) と同様の級数表示

$$\tanh \frac{\xi}{2k_B T} = 4k_B T \xi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon_n^2 + \xi^2} \quad \left(\because \tanh \frac{x}{2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4x}{(2n+1)^2 \pi^2 + x^2} \right) \quad (6)$$

$$\varepsilon_n \equiv \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (7)$$

¹(3) の右辺の Euler の定数 γ の定義は, 資料 1 の p.4 の (20) を参照せよ.

を用いれば,

$$\begin{aligned}
(5) &\stackrel{(6)}{=} 4k_B T \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{\varepsilon_n^2 + \xi^2 + |\Delta|^2} - \frac{1}{\varepsilon_n^2 + \xi^2} \right) d\xi \\
&= 4k_B T \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{\varepsilon_n^2 + \xi^2} \frac{1}{1 + \frac{|\Delta|^2}{\varepsilon_n^2 + \xi^2}} - \frac{1}{\varepsilon_n^2 + \xi^2} \right) d\xi \\
&= 4k_B T \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \left\{ \frac{1}{\varepsilon_n^2 + \xi^2} \left(1 - \frac{|\Delta|^2}{\varepsilon_n^2 + \xi^2} + O(|\Delta|^4) \right) - \frac{1}{\varepsilon_n^2 + \xi^2} \right\} d\xi \\
&= -4k_B T \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{|\Delta|^2}{(\varepsilon_n^2 + \xi^2)^2} d\xi + O(|\Delta|^4)
\end{aligned} \tag{8}$$

となる. さらに, 複素積分を用いて,

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{(\varepsilon_n^2 + \xi^2)^2} d\xi = \frac{\pi}{4\varepsilon_n^3} \stackrel{(7)}{=} \frac{1}{4(2n+1)^3 \pi^2 (k_B T)^3}$$

となるので,

$$(8) = -\frac{|\Delta|^2}{\pi^2 (k_B T)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^3} + O(|\Delta|^4) = -\frac{|\Delta|^2}{\pi^2 (k_B T)^2} \frac{7}{8} \zeta(3) + O(|\Delta|^4) \tag{9}$$

と計算することができる. ここで, Riemann の zeta 関数 $\zeta(s) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s}$ を用いて,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^3} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^3} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(2m)^3} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} - \frac{1}{2^3} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^3} = \frac{7}{8} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} = \frac{7}{8} \zeta(3)$$

と表されることを用いた (上式の第 2 等号では, 正奇数の立方数の逆数和を, 自然数の立方数の逆数和から正偶数の立方数の逆数和を差し引いたものとして表している).

(5) の左辺と (9) の右辺から, 転移温度直下でのギャップの温度変化を,

$$|\Delta(T)|^2 \simeq -\pi^2 (k_B T)^2 \frac{8}{7\zeta(3)} \log \frac{T}{T_c} \tag{10}$$

と表すことができる. 転移温度直下での温度を $T = T_c - \delta T$ と表して, $\delta T/T_c \ll 1$ の場合に $\delta T/T_c$ の 1 次までで近似すれば,

$$\begin{aligned}
\log \frac{T}{T_c} &= \log \frac{T_c - \delta T}{T_c} = \log \left(1 - \frac{\delta T}{T_c} \right) \simeq -\frac{\delta T}{T_c} \\
T^2 &= (T_c - \delta T)^2 = T_c^2 \left(1 - \frac{\delta T}{T_c} \right)^2 \simeq T_c^2 \left(1 - 2\frac{\delta T}{T_c} \right) \\
\therefore T^2 \log \frac{T}{T_c} &\simeq -T_c^2 \frac{\delta T}{T_c} = -T_c^2 \frac{T_c - T}{T_c}
\end{aligned}$$

となるので, (10) は, $T \lesssim T_c$ では, $T_c - T$ の 1 次までで,

$$|\Delta(T)|^2 \simeq \pi^2 (k_B T_c)^2 \frac{8}{7\zeta(3)} \frac{T_c - T}{T_c} \tag{11}$$

と近似される. 即ち, 転移温度直下では, エネルギーギャップは $|\Delta(T)| \propto \sqrt{T_c - T}$ となることがわかる (これは, 平均場近似による 2 次相転移の一般的な特徴である).