

\$T = 0\$でのギャップ方程式について

武藤 哲也

BCS 変分関数を用いた変分法を実行するため、BCS 変分関数による BCS ハミルトニアン の期待値 $E \equiv \langle \Psi_{\text{BCS}} | \mathcal{H} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle$ を、BCS 変分関数の規格化条件である、

$$u_{\mathbf{k}}^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \quad (1)$$

の条件の下で最小にする． $u_{\mathbf{k}}$ と $v_{\mathbf{k}}$ は、各々、BCS 変分関数

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle \quad (2)$$

における、電子対の対非占有状態と対占有状態の重みに相当する係数であり、正常状態では $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle$ が Fermi 縮退状態 $|\text{FS}\rangle$ に帰着するように定められる．Fermi 縮退状態 $|\text{FS}\rangle$ は、Fermi 波数を k_{F} として、

$$|\text{FS}\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| \leq k_{\text{F}}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (3)$$

と表されることから、正常な基底状態 ($T = 0$) では

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \begin{cases} 0 & (|\mathbf{k}| \leq k_{\text{F}}) \\ 1 & (|\mathbf{k}| > k_{\text{F}}) \end{cases} \quad (4)$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \begin{cases} 1 & (|\mathbf{k}| \leq k_{\text{F}}) \\ 0 & (|\mathbf{k}| > k_{\text{F}}) \end{cases} \quad (5)$$

となる必要がある．

上記の期待値 E については「BCS 変分関数による BCS ハミルトニアン の期待値について」で以下のよう に求められている．

$$E = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 - \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_1}^* v_{\mathbf{k}_2} \quad (6)$$

ここで、 $V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}$ は、

$$V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \equiv \begin{cases} V_0 & (|\xi_{\mathbf{k}_1}| \leq \hbar\omega_{\text{D}}, |\xi_{\mathbf{k}_2}| \leq \hbar\omega_{\text{D}}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (7)$$

と定義され (ω_{D} は Debye 周波数) , $V_0 (> 0)$ は BCS 相互作用定数である．

以下での議論では、 $v_{\mathbf{k}}$ を実数ととっても一般性を失わないので、 $u_{\mathbf{k}}$ と $v_{\mathbf{k}}$ を共に実数として、規格化条件 (1) を自動的に満たすように、以下のような実変数 $\theta_{\mathbf{k}}$ の三角関数で表すこととしよう．

$$u_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} \quad (8)$$

$$v_{\mathbf{k}} = \cos \theta_{\mathbf{k}} \quad (9)$$

以下の関係、

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} \quad (10)$$

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \cos^2 \theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} (1 + \cos 2\theta_{\mathbf{k}}) \quad (11)$$

に注意すると、(6) の E は、 $\theta_{\mathbf{k}}$ を用いて、

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (1 + \cos 2\theta_{\mathbf{k}}) - \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \sin 2\theta_{\mathbf{k}_1} \sin 2\theta_{\mathbf{k}_2} \quad (12)$$

と表される．この E を θ_k について最小にする条件は，以下のようになる．

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial E}{\partial \theta_k} \\
&= \sum_{k'} \xi_{k'} \frac{\partial}{\partial \theta_k} \cos 2\theta_{k'} - \sum_{k_1, k_2} V_{k_1 k_2} \frac{\partial}{\partial \theta_k} (\sin 2\theta_{k_1} \sin 2\theta_{k_2}) \\
&= \sum_{k'} \xi_{k'} (-2 \sin 2\theta_k) \delta_{kk'} - \sum_{k_1, k_2} V_{k_1 k_2} (2 \cos 2\theta_k \sin 2\theta_{k_2} \delta_{kk_1} + 2 \sin 2\theta_{k_1} \cos 2\theta_k \delta_{kk_2}) \\
&= -2\xi_k \sin 2\theta_k - \left\{ \left(\sum_{k_2} V_{k k_2} \sin 2\theta_{k_2} \right) 2 \cos 2\theta_k + \left(\sum_{k_1} V_{k_1 k} \sin 2\theta_{k_1} \right) 2 \cos 2\theta_k \right\} \quad (13)
\end{aligned}$$

ここで，(7) より $V_{kk'} = V_{k'k}$ であるので，

$$\Delta_k \equiv \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \sin 2\theta_{k'} = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k'k} \sin 2\theta_{k'} \quad (14)$$

と定義すれば，(13) は

$$(13) = -2\xi_k \sin 2\theta_k - 2\Delta_k \cos 2\theta_k \quad (15)$$

となる．

従って，求める条件式は，(13) と (15) から，

$$\frac{\sin 2\theta_k}{\cos 2\theta_k} = \tan 2\theta_k = -\frac{\Delta_k}{\xi_k} \quad (16)$$

となる．(16) を満たす $\sin 2\theta_k$ と $\cos 2\theta_k$ は，複号同順で

$$\sin 2\theta_k = \pm \frac{\Delta_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \quad (17)$$

$$\cos 2\theta_k = \mp \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \quad (18)$$

となるが，(8) と (9) から

$$\sin 2\theta_k = 2 \sin \theta_k \cos \theta_k = 2u_k v_k \quad (19)$$

$$\cos 2\theta_k = \cos^2 \theta_k - \sin^2 \theta_k = v_k^2 - u_k^2 \quad (20)$$

と表されるので，正常な基底状態で帰着するべき条件 (4) や (5) と整合するように， $\xi_k \rightarrow +\infty$ で， $u_k^2 \rightarrow 1$ と $v_k^2 \rightarrow 0$ となる極限を再現するためには，(17) と (18) では複号の上の符号を採用する必要がある．即ち，

$$\sin 2\theta_k = 2u_k v_k = \frac{\Delta_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \quad (21)$$

$$\cos 2\theta_k = v_k^2 - u_k^2 = -\frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \quad (22)$$

を得る． u_k^2 と v_k^2 は，(22) より，

$$u_k^2 = \sin^2 \theta_k = \frac{1}{2} (1 - \cos 2\theta_k) \stackrel{(22)}{=} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \right) \quad (23)$$

$$v_k^2 = \cos^2 \theta_k = \frac{1}{2} (1 + \cos 2\theta_k) \stackrel{(22)}{=} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \right) \quad (24)$$

と得られる．

Δ_k は (14) で定義されるが, (14) 右辺の $\sin 2\theta_k$ は (21) で与えられるので,

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \sin 2\theta_{k'} \stackrel{(21)}{=} \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\xi_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}} \quad (25)$$

となる. (25) は Δ_k の定義式に Δ_k 自体が含まれる形になっていて, 各 k の Δ_k についての連立方程式となっている. (25) の左辺の Δ_k を右辺の Δ_k と矛盾なく (自己無撞着に) 決定する必要があるので, (25) のような方程式を Δ_k についての**自己無撞着方程式**と呼ぶ.

実は, 後でわかるように, (21) と (22) の右辺の分母に共通して現れる

$$E_k \equiv \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2} \quad (26)$$

は, 超伝導基底状態からの 1 粒子励起エネルギーになっていて, (26) から明らかなように, $E_k \geq |\Delta_k|$ である. Δ_k が 1 粒子励起に必要な最小のエネルギーを与える量であるので, Δ_k をエネルギーギャップ, または単に**ギャップ**と呼び, Δ_k についての自己無撞着方程式 (25) を**ギャップ方程式**と呼ぶ.

ギャップ方程式 (25) は, 任意の k について $\Delta_k = 0$ という自明な解を持つ. 正常な基底状態では, u_k と v_k は (4) と (5) を満たすので, 任意の k について $u_k v_k = 0$ となり, Δ_k の定義式 (14) から, 必ず $\Delta_k = 0$ となる. つまり, ギャップ方程式 (25) における $\Delta_k = 0$ という自明な解は, 正常状態に対応していることがわかる.

(7) で定義される相互作用 $V_{kk'}$ について, 具体的にギャップ方程式の非自明な解を探してみよう. (14) で定義される Δ_k は, (7) を考慮すると,

$$\Delta_k = \begin{cases} \Delta & (|\xi_k| \leq \hbar\omega_D) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (27)$$

と表すことができる. ここで, 次のように Δ を定義した.

$$\Delta \equiv V_0 \sum'_k u_k v_k = \frac{V_0}{2} \sum'_k \sin 2\theta_k \quad (28)$$

和記号 $\sum'_k$ は $|\xi_k| \leq \hbar\omega_D$ の制限付きの k についての和である. (28) の最右辺の $\sin 2\theta_k$ に (21) を代入すると,

$$\Delta = \frac{V_0}{2} \sum'_k \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\xi_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}} \stackrel{(27)}{=} \frac{V_0}{2} \sum'_k \frac{\Delta}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \quad (29)$$

となる.

(29) において, $\Delta \neq 0$ の非自明な解を求めるため, (29) の両辺を $\Delta (\neq 0)$ で割ると,

$$1 = \frac{V_0}{2} \sum'_k \frac{1}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \quad (30)$$

となる. ここで,

$$D(\xi) \equiv \sum_k \delta(\xi - \xi_k)$$

で定義される状態密度 $D(\xi)$ を用いて, (30) 右辺の k の和を ξ の積分に直す. $\sum'_k$ が $|\xi_k| \leq \hbar\omega_D$ に制限された和であることに注意すると,

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{V_0}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} D(\xi) \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \\ &\simeq \frac{V_0}{2} D_0 \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \\ &= V_0 D_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \\ &= V_0 D_0 \sinh^{-1} \frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \end{aligned} \quad (31)$$

(31) の第2等号 (近似等号) では, $\hbar\omega_D \ll \varepsilon_F$ であるので, $|\xi| \leq \hbar\omega_D$ では $D(\xi)$ を一定値と見做し, $D(\xi)$ を Fermi 準位 ($\xi = 0$) での値 $D_0 \equiv D(0)$ で近似した. また, 同式最終等号では, 不定積分

$$\int \frac{1}{\sqrt{x^2 + a^2}} dx = \sinh^{-1} \frac{x}{a} \quad (a > 0)$$

を用いた.

(31) から, 同式の近似等号を反映させて

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

となるので, Δ について解けば,

$$\Delta \simeq \hbar\omega_D / \sinh \frac{1}{V_0 D_0} \quad (32)$$

を得る. 特に $V_0 D_0 \ll 1$ (弱結合近似) が成り立つ場合には

$$\Delta \simeq 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{V_0 D_0}\right) \quad (33)$$

となる. (33) 右辺は $V_0 = 0$ が真正特異点であり, $V_0 = 0$ の周りで V_0 について冪級数展開できない形になっている. つまり, (33) は V_0 についての摂動論では決して得られないことに注意しよう.