

ギャップ方程式と転移温度

武藤 哲也

[1] ギャップ方程式の導出

Δ の定義式に戻って、ギャップ方程式を導く。「BCS 変分関数による BCS ハミルトニアン」の期待値について（以降、「資料 1」とする）p.1 の (2) を仮定すると、「BCS ハミルトニアンに対する平均場近似と Bogoliubov 変換」（以降、「資料 2」とする）p.2 の (14) で定義されるエネルギーギャップ（単に「ギャップ」とも呼ぶ）は波数 $\mathbf{k}$ に依存しない定数となり、 $\Delta = V_0 \sum'_{\mathbf{k}} \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ で与えられる（ $\sum'_{\mathbf{k}}$ は、これまでと同様、 $|\xi_{\mathbf{k}}| \leq \hbar\omega_D$ に制限された $\mathbf{k}$ 和を意味する）。この式に、資料 2 の p.3 の (19) で与えた Bogoliubov 逆変換を代入すれば、

$$\begin{aligned}\Delta &= V_0 \sum'_{\mathbf{k}} \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = V_0 \sum'_{\mathbf{k}} \left\langle \left(-v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}} \right) \left(u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \right\rangle \\ &= V_0 \sum'_{\mathbf{k}} \left(-u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \langle \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle - v_{\mathbf{k}}^2 \langle \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle + u_{\mathbf{k}}^2 \langle \beta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \langle \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle \right)\end{aligned}\quad (1)$$

を得る。ここで、統計平均 $\langle \dots \rangle$ は、資料 1 の p.1 の (9) で定義された平均場ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{MF}}$ の下での統計平均であり、同 p.5 の (43)・(44)・(45) で導出したように、 $\mathcal{H}_{\text{MF}}$ が、エネルギー $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}$ を持つ Bogoliubov 準粒子の自由 Fermi 気体を記述するハミルトニアンとなることから、 $\langle \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle$ は、波数 $\mathbf{k}$ でエネルギー $E_{\mathbf{k}}$ の α -Bogoliubov 準粒子の数密度（の統計平均）を与える。即ち、温度 T ($\beta = (k_B T)^{-1}$) での Fermi 分布関数

$$f(x) = \frac{1}{e^{\beta x} + 1}$$

を用いて、

$$\langle \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = f(E_{\mathbf{k}}) \quad (2)$$

と表される。同様に、 $\langle \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle$ については、

$$\langle \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle = \langle 1 - \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}} \rangle = 1 - \langle \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}} \rangle = 1 - f(E_{\mathbf{k}}) \quad (\because \langle 1 \rangle = 1) \quad (3)$$

を得る。(3) の第 1 等号では、Fermi 演算子としての Bogoliubov 演算子の反交換関係（資料 2 の p.3 の (33)）を用いた。一方、自由 Fermi 気体を記述する $\mathcal{H}_{\text{MF}}$ の下では、粒子数を保存しない演算子である $\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ や $\beta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}$ の統計平均は 0 であり、(1) の $\langle \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle$ や $\langle \beta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle$ は各々 0 となる： $\langle \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle = \langle \beta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = 0$ 。

以上をまとめると、(1) の Δ は、(2) と (3) を用いて、

$$\begin{aligned}\Delta &= V_0 \sum'_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (1 - 2f(E_{\mathbf{k}})) = V_0 \sum'_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} (1 - 2f(E_{\mathbf{k}})) = \frac{V_0 \Delta}{2} \sum'_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \\ &= \frac{V_0 \Delta}{2} \sum'_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}} \tanh \frac{\beta \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}}{2} \quad (\because E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2})\end{aligned}\quad (4)$$

と表される。(4) の第 2 等号では資料 2 の p.6 の (48) を用い、同じく第 3 等号では Fermi 分布関数を含めた式変形

$$1 - 2f(x) = 1 - \frac{2}{e^{\beta x} + 1} = \frac{(e^{\beta x} + 1) - 2}{e^{\beta x} + 1} = \frac{e^{\beta x/2} - e^{-\beta x/2}}{e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2}} = \tanh \frac{\beta x}{2}$$

を用いた。(4) は、左辺の Δ を計算するための式の最右辺にも Δ が含まれており、「左辺の Δ と右辺の Δ を矛盾なく定める」という意味で、**自己無撞着方程式**になっている（「無撞着」とは「無矛盾」という意味である）。

(4) の Δ についての自己無撞着方程式は、 $\Delta = 0$ という自明な解以外に、(4) の両辺を $\Delta \neq 0$ で割って得られる方程式

$$1 = \frac{V_0}{2} \sum'_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}} \tanh \frac{\beta \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}}{2} \quad (5)$$

を満たす、 $\Delta \neq 0$ の解を持つ可能性がある。この方程式 (5) を狭義の**ギャップ方程式**と呼ぶ。 $T \rightarrow \infty$ ($\beta \rightarrow 0$) の時の $\tanh \frac{\beta x}{2}$ の漸近形が、 $\tanh \frac{\beta x}{2} \sim \frac{\beta x}{2}$ となることから、 $T \rightarrow \infty$ でのギャップ方程式 (5) の漸近形が、

$$1 \sim \frac{V_0}{2} \sum_k' \frac{\beta}{2}$$

となって、十分高温では右辺が限りなく 0 に漸近するため、方程式が成り立たなくなる。即ち、十分高温では (5) は $\Delta \neq 0$ の解を持ち得ない。言い換えれば、 $\Delta \neq 0$ となる温度に上限があること（転移温度の存在）が推測できる。転移温度を T_c と書くことにする。

[2] $T = 0$ でのギャップ方程式

$T = 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) では、 $\lim_{\beta \rightarrow \infty} \tanh(\beta E_k) = 1$ であるので、 $T = 0$ でのギャップを Δ_0 と書くと、ギャップ方程式 (5) は、

$$1 = \frac{V_0}{2} \sum_k' \frac{1}{\sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_0|^2}} \quad (6)$$

となる。この時の Δ_0 が、弱結合極限 ($V_0 D_0 \ll 1$) の下で、

$$|\Delta_0| \simeq 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{V_0 D_0}\right) \quad (7)$$

となることは、「 $T = 0$ でのギャップ方程式について」（以降、「資料 3」とする）p.4 の (33) で導出したとおりである。

[3] 転移温度 T_c

転移温度 $T = T_c$ では $\Delta = 0$ となるので、ギャップ方程式 (5) は、資料 3 の p.3 の (31) と同様の近似を用いて、

$$1 \simeq V_0 D_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\xi} \tanh \frac{\beta_c \xi}{2} d\xi \quad (8)$$

となる ($\beta_c \equiv 1/(k_B T_c)$)。ここで、 $\tanh(x/2)$ の級数表示

$$\tanh \frac{x}{2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4x}{(2n+1)^2 \pi^2 + x^2}$$

を用いて、(8) の右辺の被積分関数に含まれる $\tanh(\beta_c \xi/2)$ を、

$$\begin{aligned} \tanh \frac{\beta_c \xi}{2} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4\beta_c \xi}{(2n+1)^2 \pi^2 + (\beta_c \xi)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4\xi/\beta_c}{(2n+1)^2 \pi^2 / \beta_c^2 + \xi^2} \\ &\equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4\xi/\beta_c}{(\varepsilon_n^c)^2 + \xi^2} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\varepsilon_n^c \equiv \frac{(2n+1)\pi}{\beta_c} \quad (10)$$

と表しておく、(8) の右辺は、

$$(8) = \frac{4V_0 D_0}{\beta_c} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{(\varepsilon_n^c)^2 + \xi^2} d\xi \quad (11)$$

と表される。

(11) の右辺においては、 ξ と ε_n^c の被積分関数への寄与が同じなので (ξ も ε_n^c も共に被積分関数の分母に 2 乗の形で含まれている)、 ξ についての積分と n についての和の役目を入れ替えて、 $0 \leq \xi \leq \hbar\omega_D$ の定積分の積分上限を $\hbar\omega_D$ から ∞ に変える代わりに、 n の和の上限を ∞ から $\varepsilon_{n_D}^c \sim \hbar\omega_D$ となるような自然数 n_D に変えるという近似を行う。具体的には、 $\varepsilon_{n_D}^c \sim \hbar\omega_D$ となるような自然数 n_D として、 n_D を、

$$\varepsilon_{n_D-1}^c \leq \hbar\omega_D < \varepsilon_{n_D}^c$$

即ち、

$$n_D - \frac{1}{2} \leq \frac{\hbar\omega_D}{2\pi k_B T_c} < n_D + \frac{1}{2} \quad (12)$$

を満たす自然数として定義しよう。この時、通常金属では $\hbar\omega_D \gg k_B T_c$ なので、 $n_D \gg 1$ である。このように定めた n_D を用いると、

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{(\varepsilon_n^c)^2 + \xi^2} d\xi &\simeq \sum_{n=0}^{n_D-1} \int_0^{\infty} \frac{1}{(\varepsilon_n^c)^2 + \xi^2} d\xi = \sum_{n=0}^{n_D-1} \left[\frac{1}{\varepsilon_n^c} \tan^{-1} \frac{\xi}{\varepsilon_n^c} \right]_0^{\infty} = \frac{\pi}{2} \sum_{n=0}^{n_D-1} \frac{1}{\varepsilon_n^c} \\ &\stackrel{(10)}{=} \frac{\beta_c}{2} \sum_{n=0}^{n_D-1} \frac{1}{2n+1} \end{aligned} \quad (13)$$

を得る。(13) の第 2 等号では、不定積分

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

を用いた。(13) を用いれば、(11) を次のように近似できる。

$$(11) \simeq 2V_0 D_0 \sum_{n=0}^{n_D-1} \frac{1}{2n+1} = V_0 D_0 \sum_{n=1}^{n_D} \frac{1}{n - \frac{1}{2}} \quad (14)$$

(14) の右辺の和を計算するために、

$$\psi(z) \equiv \frac{d}{dz} \log \Gamma(z) \quad (15)$$

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt \quad (16)$$

で定義されるディガンマ (digamma) 関数 $\psi(z)$ を用いる ((16) はガンマ (gamma) 関数の積分表示)。 $\psi(z)$ には、

$$\psi(z+1) = \psi(z) + \frac{1}{z}$$

という性質があるので、自然数 m に対して、

$$\begin{aligned} \psi(z+m+1) &= \psi(z+m) + \frac{1}{z+m} \\ &= \psi(z+m-1) + \frac{1}{z+m-1} + \frac{1}{z+m} \\ &= \psi(z+m-2) + \frac{1}{z+m-2} + \frac{1}{z+m-1} + \frac{1}{z+m} \\ &= \cdots = \psi(z+1) + \frac{1}{z+1} + \frac{1}{z+2} + \cdots + \frac{1}{z+m-1} + \frac{1}{z+m} \\ &= \psi(z+1) + \sum_{n=1}^m \frac{1}{z+n} \end{aligned} \quad (17)$$

が成り立つ。(17) の最左辺と最右辺から、

$$\sum_{n=1}^m \frac{1}{n+z} = \psi(m+z+1) - \psi(z+1)$$

の関係式を得るので、この関係式において、 m を n_D 、 $z = -1/2$ とすれば、(14) の右辺の和を、

$$\sum_{n=1}^{n_D} \frac{1}{n - \frac{1}{2}} = \psi\left(n_D + \frac{1}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \quad (18)$$

と表すことができる。 $\psi(z)$ の $z \gg 1$ での漸近形は、 $\psi(z) \sim \log z + 1/z$ と知られているので、 $n_D \gg 1$ では、

$$\psi\left(n_D + \frac{1}{2}\right) = \log n_D + O\left(\frac{1}{n_D}\right) \stackrel{(12)}{\simeq} \log\left(\frac{\hbar\omega_D}{2\pi k_B T_c}\right) \quad (19)$$

となる。また、 $\psi(1/2)$ については、

$$\gamma \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \cdots + \frac{1}{n} - \log n\right) \quad (20)$$

で定義される Euler の定数¹と呼ばれる γ を用いて、

$$\psi\left(\frac{1}{2}\right) = -\gamma - 2 \log 2 \quad (21)$$

と表されることが知られている。

(19) と (21) を (18) の右辺の和に用いることで、結局、

$$1 \simeq V_0 D_0 \left\{ \log\left(\frac{\hbar\omega_D}{2\pi k_B T_c}\right) + \gamma + 2 \log 2 \right\} \quad (22)$$

を得る。(22) の右辺の $\{ \}$ の中を、

$$\log\left(\frac{\hbar\omega_D}{2\pi k_B T_c}\right) + \gamma + 2 \log 2 = \log\left(\frac{\hbar\omega_D}{2\pi k_B T_c}\right) + \log e^\gamma + \log 4 = \log\left(\frac{2e^\gamma}{\pi} \frac{\hbar\omega_D}{k_B T_c}\right)$$

とまとめると、(22) は、

$$1 \simeq V_0 D_0 \log\left(\frac{2e^\gamma}{\pi} \frac{\hbar\omega_D}{k_B T_c}\right)$$

となるので、この式を $k_B T_c$ について解けば、

$$k_B T_c \simeq \frac{2e^\gamma}{\pi} \hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{V_0 D_0}\right) \doteq 1.13 \hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{V_0 D_0}\right) \quad (23)$$

を得る。(23) より、転移温度 T_c がミクロな量から得られたことになる ((23) の最終的な近似値は、 γ の近似値 $\gamma \doteq 0.577$ などを用いたものである)。

[4] 転移温度 T_c と $T = 0$ でのギャップの比

[2] で得られた $T = 0$ でのギャップ $|\Delta_0|$ の表式 (7) と [3] で得られた転移温度 T_c の表式 (23) を見ると、それらが、個々の物質に依存する定数である V_0 、 D_0 、 $\hbar\omega_D$ を含んだ共有因子を持っていることに気づく。つまり、両者の比を取れば、それらの共通因子が相殺されて、物質に依らない普遍定数が得られることがわかる。両者の比は、

$$\frac{2|\Delta_0|}{k_B T_c} = 4 \frac{\pi}{2e^\gamma} \doteq \frac{4}{1.13} \doteq 3.54 \quad (24)$$

となり、自然定数すら含まれない無次元の定数となる。実際、多くの超伝導体において、この比が 3.5 程度の値となることが確認されている²。これは、超伝導のミクロな理論としての BCS 理論から得られる非自明な成果の一つである。

¹ $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n \frac{1}{k}$ は調和級数と呼ばれ、 $n \rightarrow \infty$ で発散することが知られているが、(20) は収束することが Euler によって証明されている。その近似値は $\gamma \doteq 0.577$ だが、 γ が無理数か否かは現在も未解明である。

²両者の比として、 $\frac{|\Delta_0|}{k_B T_c} \doteq 1.76$ の値が参照されることも多い