2．超伝導の BCS (Bardeen, Cooper, Schrieffer) 理論

＜電子対凝縮＞：電子のもつ波動性がマクロなスケールで出現することが本質.

粒子性⇨1 個，2 個，3 個，　. . .　数えられる：n

波動性⇨位相. . .　　干渉，回折：　　　　　　θ

n，θ 互いに共役な量

不確定性：$\Delta n \cdot \Delta\theta \geq 1$

例えば，光子が 1 個あるとき，その位相を議論することは意味がない.

（n=1，Δn=0，$\Delta\theta=\infty$）

しかし，あるエネルギーE と運動量 p をもつ粒子数 n が 1 よりはるかに大きなマクロな量のとき $n \gg \Delta n \gg 1$ なら $\Delta\theta \sim 1/(\Delta n) \ll 2\pi$ が可能になる！

＜Bose-Einstein 凝縮＞⇨Fermion でも対凝縮によって 1 つの状態を占める粒子数がいくらでも大きくなれる！

＜Bose 粒子系の量子力学＞

$$\left.\begin{aligned}&\left[b_k, b_{k'}^{+}\right] = \delta_{kk'}\\ &\left[b_k, b_{k'}\right] = \left[b_k^{+}, b_{k'}^{+}\right] = 0\end{aligned}\right\}\quad \text{交換関係}$$

ハミルトニアン：$H_B = \sum_k \hbar\omega_k b_k^{+} b_k$

最低エネルギー状態を占める粒子数 N_0

$$N_0 = \left\langle \phi(N) \middle| b_0^{+} b_0 \middle| \phi(N) \right\rangle$$

$$\left\langle \phi(N-1) \middle| b_0 \middle| \phi(N) \right\rangle = \sqrt{N_0}\exp(i\theta),\quad \Delta N \approx \sqrt{N}$$

ハミルトニアン H のかわりに

$$\Im = H - \mu N$$

（N：粒子数を表す演算子，μ：化学ポテンシャル）

＜位相表示＞N^*：平均，n：ゆらぎ

$$\phi_\theta = \sqrt{\frac{1}{\Delta N}} \sum_{-\Delta N/2 < n < \Delta N/2} e^{in\theta} \phi\left(N^* + n\right),\quad \theta = \left(\frac{2\pi}{\Delta N}\right) l,\quad l = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots, \pm\frac{1}{2}\Delta N$$

$$\left\langle \phi_\theta \middle| b_0 \middle| \phi_\theta \right\rangle = (\Delta N)^{-1} \sum_n \left\langle \phi\left(N^* + n - 1\right) \middle| b_0 \middle| \phi\left(N^* + n\right) \right\rangle \approx N_0^{1/2} e^{i\theta}$$

電子と同じように Bose 粒子を量子化された波と見なし, 空間の各点 r で定義された演算子

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{ik\cdot r} b_k$$

で記述することもできる.

$$\langle\psi(r)\rangle=\langle\phi_\theta|\psi(r)|\phi_\theta\rangle\approx\left(\frac{N_0}{V}\right)^{1/2}e^{i\theta}=\rho^{1/2}e^{i\theta}$$

＜電子対＞

↑↑triplet　↑↓singlet

重心が静止し逆向きのスピンをもった電子対の消滅・生成

$B_k=a_{k\uparrow}a_{-k\downarrow}$，$B_k^+=a_{-k\downarrow}^+a_{k\uparrow}^+$

フェルミガス状態：$\phi_F=\prod_{k<k_F}B_k^+\phi_V$，　ϕ_Vは真空状態を表す.

＜超伝導状態（BCS 状態）＞

問題 3

BCS 理論では，超伝導状態（BCS 状態）として

$$\phi_\theta=\Pi_k\left(u_k+\exp(i\theta)v_kB_k{}^+\right)\phi_v$$

$$u_k{}^2+v_k{}^2=1 \qquad (16)$$

を見出した．ただし，

$$u_k=\begin{cases}0 & (k<<k_F)\\ 1 & (k>>k_F)\end{cases}\qquad v_k=\begin{cases}1 & (k<<k_F)\\ 0 & (k>>k_F)\end{cases} \qquad (17)$$

である．ここで，$B_k{}^+=a_{-k\downarrow}{}^+a_{k\uparrow}{}^+$，$B_k=a_{k\uparrow}a_{-k\downarrow}$である．

このモデルでは，ハミルトニアンとして粒子の数の変化も考慮した次式を採用している．

$$\Im=\sum_{k,\sigma}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)a_{k\sigma}{}^+a_{k\sigma}-\frac{g}{V}\sum_{k_1-k_2=k_3-k_4}{}'\cdot\sum{}'a_{k_1\uparrow}{}^+a_{-k_2\downarrow}{}^+a_{-k_4\downarrow}a_{k_3\uparrow} \qquad (18)$$

ここで，μは化学ポテンシャル，g は電子間に働くフォノン引力とクーロン反発力の差を表す．（フォノンを媒介にした引力モデルは Frölich によって提唱された）

$\xi_k=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}-\dfrac{\hbar^2k_F{}^2}{2m}$で定義されるエネルギー差$\xi_k$を考えると，フォノンの平均的なエ

ネルギーを$\hbar\omega_0$として$|\xi_k| \le \hbar\omega_0$であると考えられる．上式で，$\sum'$は引力がフェルミ面近くの電子にだけ働くとして$|\xi_k| \le \hbar\omega_0$の領域のみの和をとることを意味する．(したがって，(17)の関係が成り立つのは$|k-k_F| >> 0$というよりも，より限定された$|\xi_k| \ge \hbar\omega_0$の領域である．）(18)式を$\phi_\theta$で挟み込んで積分しエネルギー平均値を求める際には，式(16)の性質上，(18)式の第2項中，$k_1 = k_2, k_3 = k_4$だけが寄与するが，そのようにして求められる超伝導状態と常伝導状態（こちらが基準）のエネルギー差$\Delta\Omega$は，

$$\Delta\Omega = \sum_{k>k_F}{}' 2\xi_k {v_k}^2 + \sum_{k<k_F}{}' 2|\xi_k| {u_k}^2 - \frac{g}{V}\sum_k{}' \sum_l{}' u_k v_k u_l v_l \tag{19}$$

となる．ここで凝縮電子対（クーパー対）を壊すエネルギー2ΔのエネルギーギャップΔを以下のように導入する．

$$\Delta = \frac{g}{V}\sum_k{}' \left\langle \phi_\theta \middle| a_{k\uparrow} a_{-k\downarrow} \middle| \phi_\theta \right\rangle = \frac{g}{V}\exp(i\theta)\sum_k{}' u_k v_k \tag{20}$$

問1.　このBCSモデルの熱平衡状態の条件を求めるために，式(19)をv_kで偏微分し$\partial\Delta\Omega/\partial v_k = 0$を考え，平均場近似（(19)式第3項の4つの積の2つを(20)式のΔで置き換える近似）を用いてエネルギー最小の条件を求めると以下の(21)式のようになることを示せ．

$$2\xi_k u_k v_k - |\Delta|\left({u_k}^2 - {v_k}^2\right) = 0 \tag{21}$$

（解）$u_k = \sqrt{1-v_k^2}$ だから

$$\frac{\partial}{\partial v_k}(u_k v_k) = \frac{\partial}{\partial v_k}\left(v_k\sqrt{1-v_k^2}\right) = \sqrt{1-v_k^2} + \frac{1}{2}(-2v_k)\frac{1}{\sqrt{1-v_k^2}}v_k = \frac{1-2v_k^2}{\sqrt{1-v_k^2}}$$

$$0 \equiv \frac{\partial}{\partial v_k}\Delta\Omega = 4\xi_k v_k - 2|\Delta|\left(1-2v_k^2\right)\left(1-v_k^2\right)^{-1/2}$$

(21)式の解で$\xi_k \to +\infty$の時，$v_k \to 0$を与えるものは以下のようになる．

$$v_k{}^2 = \frac{1}{2}\left(1-\frac{\xi_k}{E_k}\right), \quad u_k{}^2 = \frac{1}{2}\left(1+\frac{\xi_k}{E_k}\right) \tag{22}$$

$$E_k = \left(\xi_k{}^2 + |\Delta|^2\right)^{1/2} \tag{23}$$

実際の$|\Delta|$は式(22)を式(20)に代入して得られる次の方程式によって決定される．

＜ギャップ方程式＞：超伝導ギャップ

$$1 = \frac{g}{V}\sum_k{}' \frac{1}{2\left(\xi_k{}^2 + |\Delta|^2\right)^{1/2}} \tag{24}$$

これが解を持つためには，g>0 で引力が勝らなければならない．

問2.　式(22), (23)が(21)を満たしていることを確認し，(24)を求めよ．

問3.　上の関係式を用いて，次式を導出せよ．

$$u_k v_k = \frac{|\Delta|}{2E_k} \tag{25}$$

問4.　式(24)を弱結合近似（g が非常に小さく$|\Delta| << \hbar\omega_0$となる場合）を用いて$\Sigma$を積分に置き換えて（$\sum_k \cdots \to \frac{V}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k} = \frac{V}{(2\pi)^3}\left(4\pi k_F{}^2\right)\int dk$）解くと，

$$|\Delta| = 2\hbar\omega_0 \exp\left(-\frac{1}{gN_F}\right) \tag{26}$$

が導出できることを示せ．ただし，適当な不定積分の公式を用い，積分範囲

は弱結合近似に従って$\xi_k = -\hbar\omega_0 \to \hbar\omega_0$として解け．また，$N_F$は自由電子モデルのフェルミ面の状態密度$N_F = \dfrac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2}$である．

（解）

$$1 = gN_F \int_{-\hbar\omega_0}^{\hbar\omega_0} \frac{d\xi}{2\left(\xi^2 + |\Delta|^2\right)^{1/2}} = gN_F \int_0^{\hbar\omega_0} \frac{d\xi}{\left(\xi^2 + |\Delta|^2\right)^{1/2}}$$

$$= gN_F \ln\left[\left(\frac{\hbar\omega_0}{|\Delta|}\right) + \left\{\left(\frac{\hbar\omega_0}{|\Delta|}\right)^2 + 1\right\}^{1/2}\right] \approx gN_F \ln\left(\frac{2\hbar\omega_0}{|\Delta|}\right)$$

ただし，不定積分$\displaystyle\int \frac{dx}{\left(x^2 + a^2\right)^{1/2}} = \ln\left[\frac{x}{|a|} + \sqrt{\left(\frac{x}{|a|}\right)^2 + 1}\right] + C$　を利用．

$|\Delta| << \hbar\omega_0$のためには，$gN_F << 1$ならば良い（弱結合近似）

＜平均場近似＞：Bogoliubov 変換
BCS モデルのハミルトニアン(18)は平均場近似によって

$$\Im_m = \sum_{k,\sigma} \xi_k a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} - \sum_k{}' \left(\Delta^* a_{k\uparrow} a_{-k\downarrow} + \Delta a^+_{-k\downarrow} a^+_{k\uparrow}\right) + \frac{V}{g}|\Delta|^2 \qquad (27)$$

と表されるが，Bogoliubov は Bogoliubov 変換

$$a_{k\uparrow} = u_k \alpha_{k\uparrow} - v_k e^{i\theta} \alpha^+_{-k\downarrow},\quad a_{k\downarrow} = u_k \alpha_{k\downarrow} + v_k e^{i\theta} \alpha^+_{-k\uparrow} \qquad (28)$$

を発見しそれを用いて平均場近似の範囲で BCS 理論の一般化に成功した．その変換によって，式(27)は次のように対角化される．

$$\Im_m = \Omega_0 + \sum_k E_k \left(\alpha^+_{k\uparrow}\alpha_{k\uparrow} + \alpha^+_{k\downarrow}\alpha_{k\downarrow}\right)$$

$$\Omega_0 = \sum_k 2\xi_k {v_k}^2 - \sum_k{}' 2u_k v_k |\Delta| + \frac{V}{g}|\Delta|^2 \qquad (29)$$

ここで，$\alpha^+_{k\sigma}\alpha_{k\sigma}$の固有値は 0, 1 であり，$(k,\sigma)$状態にある準粒子（ボゴロン）の数を表し，$E_k=\left(\xi_k{}^2+|\Delta|^2\right)^{1/2}$はこの準粒子のエネルギーを表すと考えることができ，(29)式は，凝縮電子系がこのような準粒子からできた気体であるとみなしてよいことを示している．

今，熱平衡状態（ある一定温度では準粒子の数が一定に保たれる）を考えると，Bogoliubov 変換によって

$$a_{k\uparrow}a_{-k\downarrow}=e^{i\theta}u_kv_k\left(1-\alpha^+_{k\uparrow}\alpha_{k\uparrow}-\alpha^+_{-k\downarrow}\alpha_{-k\downarrow}\right) \tag{30}$$

となる．絶対零度では，$\alpha^+_{k\sigma}\alpha_{k\sigma}$の期待値（準粒子の個数）はゼロと考えられるので，

$$\left\langle\phi_\theta\middle|a_{k\uparrow}a_{-k\downarrow}\middle|\phi_\theta\right\rangle=e^{i\theta}u_kv_k \tag{31}$$

となって，これを(20)に代入し，(25)に注意すると，絶対零度のエネルギーギャップΔ_0として，

$$\Delta_0=\frac{g}{V}{\sum_k}'\frac{|\Delta|}{2E_k}e^{i\theta} \tag{32}$$

が得られる．

有限温度 T においては，$\alpha^+_{k\sigma}\alpha_{k\sigma}$の期待値$\left\langle\alpha^+_{k\sigma}\alpha_{k\sigma}\right\rangle$は Fermi 分布$f(E_k)=\left\{\exp(E_k/k_BT)+1\right\}^{-1}$に従い，このことから，(30), (20)式より有限温度でギャップを決める方程式として次式が求まる．

$$\Delta=\frac{g}{V}{\sum_k}'\frac{\Delta}{2E_k}\left\{1-2f(E_k)\right\} \tag{33}$$

問5.　$T\to T_c$では$|\Delta|\to 0$であるとして式(33)を積分形に変換し積分を問 7 同様に実

行すると，転移温度T_cとして

$$T_c = \frac{2\gamma\hbar\omega_0}{\pi k_B}\exp\left(-\frac{1}{gN_F}\right) \tag{34}$$

となることを示せ．ただし，$\int_0^a \frac{dx}{x}\tanh\left(\frac{x}{b}\right) \approx \ln\left(\frac{4\gamma a}{\pi b}\right)$ （$a >> b$のとき）を用いよ．（ちなみに$\ln\gamma$はEulerの定数で，$\ln\gamma \approx 0.577$である．）

（解）

$T \to T_c$では$|\Delta| \to 0$だから，

$$1 = gN_F\int_0^{\hbar\omega_0}\frac{d\xi}{\xi}\tanh\left(\frac{\xi}{2k_BT_c}\right) \approx gN_F\ln\left(\frac{2\gamma\hbar\omega_0}{\pi k_BT_c}\right)$$ 　ただし，$k_BT_c << \hbar\omega_0$

また，絶対零度でのΔをΔ_0とすると，$|\Delta| = 2\hbar\omega_0\exp\left(-\frac{1}{gN_F}\right)$ だから

$2|\Delta_0| = \frac{2\pi}{\gamma}k_BT_c \approx 3.5k_BT_c$ と求まる．