量子物性特論Ｂ　演習問題 (III)「超伝導」

担当：加藤雄介　2010.07.04

問題 III-１ BCS 波動関数における粒子数揺らぎ

BCS 波動関数

$$|\tilde{\phi}\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}} (u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} \hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}})|\mathrm{vac}\rangle$$

における全粒子数の揺らぎについて

$$\langle\tilde{\phi}|\hat{N}^2|\tilde{\phi}\rangle - \langle\tilde{\phi}|\hat{N}|\tilde{\phi}\rangle^2 = 4\sum_{\boldsymbol{k}} u^2_{\boldsymbol{k}} v^2_{\boldsymbol{k}}$$

が成り立つことを示せ。

問題 III-2 BCS 波動関数の凝集エネルギー

BCS 基底状態のエネルギーとフェルミ球状態のエネルギーの差を凝集エネルギーとよぶ。凝集エネルギーが ($\Delta \ll \hbar\omega_{\mathrm{D}}$ の条件下で)

$$E_0(\Delta) - E_0(\Delta = 0) = -\frac{\Omega N(0)\Delta^2}{2} \tag{1}$$

で与えられることを示せ。Ω は体積、$N(0)$ は単位体積、上向きスピンあたりの一粒子状態密度のフェルミ面における値を表すものとする。

問題 III-3 BCS 理論における励起状態

N 粒子基底状態 $|\phi_N\rangle$ から一粒子状態 $(-m, \downarrow)$ にある電子を抜いて $N-1$ 粒子状態

$$c\hat{a}_{-m,\downarrow}|\phi_N\rangle$$

を作る。c は正の実数であるとする。

1. 規格化定数 c を求めよ。
2. この励起状態の励起エネルギーが $\sqrt{\xi_m^2 + \Delta_m^2}$ で与えられることを示せ。
3. BCS 理論における一粒子状態密度

   $$N_{\mathrm{s}}(\epsilon) = \frac{1}{\Omega}\sum_k \delta\left(\epsilon - \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k}\right)$$

   を求め、図示せよ。但し常伝導状態における状態密度

   $$N_{\mathrm{n}}(\epsilon) = \frac{1}{\Omega}\sum_k \delta\left(\epsilon - \xi_k\right)$$

   のエネルギー依存性は無視できるものとし、フェルミ面における値 $N_{\mathrm{n}}(0)$ で置き換えてよいとせよ。

問題 III-4 Thomas-Reiche-Kuhn の総和則

内部自由度のない一次元一粒子系における総和則

$$\sum_b (E_b - E_a)|\langle b|x|a\rangle|^2 = \hbar^2/(2m)$$

を示せ。a, b は一粒子状態（一粒子軌道）のインデックスであり、b についての和はすべての一粒子状態についてとるものとする。

この問題は一粒子系の量子力学に関するものであり、次の設問のための準備である。なお以下の関係式を用いても良い。

$$\sum_b \{\langle a|\hat{p}|b\rangle\langle b|\hat{x}|a\rangle - \langle a|\hat{x}|b\rangle\langle b|\hat{p}|a\rangle\} = -\mathrm{i}\hbar$$

$$\langle a|\hat{p}|b\rangle = \langle a|m\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t}|b\rangle = \mathrm{i}\frac{m}{\hbar}\langle a|[\hat{H}, \hat{x}]|b\rangle$$

問題 III-5 バンド絶縁体の電磁応答関数

バンド絶縁体において

$$\lim_{q\to 0} Q_{\mathrm{T}}^{(\mathrm{e})}(\boldsymbol{q}) = e^2 \lim_{q\to 0} Q_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}) = -\frac{Ne^2}{\Omega m}$$

となることを自分のやり方または以下の手順に従って示せ。

バンド絶縁体においては、エネルギー分母 $E_l - E_{\mathrm{g}}$ はバンドギャップより小さくなることはないので、あらかじめ $q \to 0$ とおいても計算結果に支障はない。$\boldsymbol{\eta_q} = \boldsymbol{\eta}$ とおいて、

$$\begin{aligned}\lim \boldsymbol{\eta_q}\cdot\hat{j}_{\mathrm{p}}(\boldsymbol{q}) &= -\frac{e}{m\sqrt{\Omega}}\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\boldsymbol{\eta}\cdot(\hbar\boldsymbol{k})\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ &= -\frac{e}{m\sqrt{\Omega}}\sum_{\sigma}\boldsymbol{\eta}\cdot\int\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla})\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} \qquad (2)\end{aligned}$$

と書き換えておく。(2) の最右辺に現れる $\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})$, $\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})$ は電子の場の演算子である。

一粒子状態として Bloch 状態 $\phi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\alpha(\sigma)$, $\phi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\beta(\sigma)$ をとる。それらは、バンド n, 結晶運動量 (を $\hbar$ で割ったもの)$\boldsymbol{k}$, スピンで指定される。対応する生成消滅演算子 $\hat{c}^\dagger_{n,\boldsymbol{k},\sigma}$, $\hat{c}_{n,\boldsymbol{k},\sigma}$ ($\sigma =\uparrow,\downarrow$) を用いると、場の演算子は

$$\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r}) = \sum_n\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}}\phi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\hat{c}_{n,\boldsymbol{k},\sigma} \qquad (3)$$

$$\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r}) = \sum_n\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}}\phi^*_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\hat{c}^\dagger_{n,\boldsymbol{k},\sigma} \qquad (4)$$

と表される。n についての和はすべてのバンドに関してとる。$\boldsymbol{k}$ についてはブリルアンゾーン (BZ) についてとるものとする。これを用いて

$$\sum_\sigma\int\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla})\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \sum_\sigma\sum_{n',\boldsymbol{k}'}\sum_{n,\boldsymbol{k}}\hat{c}^\dagger_{n',\boldsymbol{k}',\sigma}\hat{c}_{n,\boldsymbol{k},\sigma}\langle n',\boldsymbol{k}'|\boldsymbol{p}|n,\boldsymbol{k}\rangle \qquad (5)$$

$$\langle n',\boldsymbol{k}'|\boldsymbol{p}|n,\boldsymbol{k}\rangle = \int\phi_{n',\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla})\phi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} \qquad (6)$$

を得ることができる。(5) において $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k'}$ のとき以外には寄与はないが、後の便宜上その選択則を使わない表式のままにしておく。ハミルトニアンは

$$\hat{H}=\sum_{n,\boldsymbol{k},\sigma}\epsilon_{n,\boldsymbol{k}}\hat{c}^{\dagger}_{n,\boldsymbol{k},\sigma}\hat{c}_{n,\boldsymbol{k},\sigma} \tag{7}$$

と表されるものとする。$\epsilon_{n,\boldsymbol{k}}$ は一粒子状態のエネルギーを表す。バンド絶縁体を考えるので、バンドを"ob"は基底状態において占有されているバンド、"uob"は基底状態において空のバンドにわけて、基底状態を

$$|\mathrm{g}\rangle=\prod_{n\in\mathrm{ob}}\prod_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}}\prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{n,\boldsymbol{k},\sigma}|\mathrm{vac}\rangle \tag{8}$$

と表す。全粒子数が偶数 N で与えられるとすると

$$\sum_{n\in\mathrm{ob}}\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}}1=N/2 \tag{9}$$

が成り立つ (スピン 1/2 の粒子系であることに注意)。(5) について基底状態と行列要素を持つ励起状態 $|l\rangle$ としては

$$|l\rangle=\hat{c}^{\dagger}_{n',\boldsymbol{k}',\sigma}\hat{c}_{n,\boldsymbol{k},\sigma}|\mathrm{g}\rangle,\quad n'\in\mathrm{uob},\quad n\in\mathrm{ob} \tag{10}$$

$$E_l-E_{\mathrm{g}}=\epsilon_{n',\boldsymbol{k}'}-\epsilon_{n,\boldsymbol{k}} \tag{11}$$

に限られる。

1. $$Q^{(\mathrm{e})}_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}=0)=-\frac{4e^2}{m^2\Omega}\sum_{n'\in\mathrm{uob}}\sum_{\boldsymbol{k}'\in\mathrm{BZ}}\sum_{n\in\mathrm{ob}}\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}}\frac{\langle n',\boldsymbol{k'}|\boldsymbol{\eta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|n,\boldsymbol{k}\rangle\langle n,\boldsymbol{k}|\boldsymbol{\eta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|n',\boldsymbol{k'}\rangle}{\epsilon_{n',\boldsymbol{k}'}-\epsilon_{n,\boldsymbol{k}}} \tag{12}$$

   を示せ。

2. さらに

   $$\hat{\boldsymbol{p}}=\frac{\mathrm{i}m}{\hbar}[\hat{H},\hat{\boldsymbol{r}}] \tag{13}$$

   を用いて

   $$Q^{(\mathrm{e})}_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q})=-\frac{4e^2}{\hbar^2\Omega}\sum_{n'\in\mathrm{uob}}\sum_{\boldsymbol{k}'\in\mathrm{BZ}}\sum_{n\in\mathrm{ob}}\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}}(\epsilon_{n',\boldsymbol{k}'}-\epsilon_{n,\boldsymbol{k}})\langle n',\boldsymbol{k'}|\boldsymbol{\eta}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}|n,\boldsymbol{k}\rangle\langle n,\boldsymbol{k}|\boldsymbol{\eta}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}|n',\boldsymbol{k'}\rangle \tag{14}$$

   を示せ。

3. $$\sum_{n'\in\mathrm{ob}}\sum_{\boldsymbol{k}'\in\mathrm{BZ}}\sum_{n\in\mathrm{ob}}\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}}(\epsilon_{n',\boldsymbol{k}'}-\epsilon_{n,\boldsymbol{k}})\langle n',\boldsymbol{k'}|\boldsymbol{\eta}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}|n,\boldsymbol{k}\rangle\langle n,\boldsymbol{k}|\boldsymbol{\eta}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}|n',\boldsymbol{k'}\rangle=0 \tag{15}$$

   を用いて

   $$Q^{(\mathrm{e})}_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}=0)=-\frac{4e^2}{\hbar^2\Omega}\sum_{n'\in\text{all bands}}\sum_{\boldsymbol{k}'\in\mathrm{BZ}}\sum_{n\in\mathrm{ob}}\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}}(\epsilon_{n',\boldsymbol{k}'}-\epsilon_{n,\boldsymbol{k}})\langle n',\boldsymbol{k'}|\boldsymbol{\eta}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}|n,\boldsymbol{k}\rangle\langle n,\boldsymbol{k}|\boldsymbol{\eta}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}|n',\boldsymbol{k'}\rangle \tag{16}$$

   を示せ。(14) と (16) では n' についての和をとる領域が異なることに注意せよ。

4. 総和則 (Thomas-Reiche-Kuhn)(前問参照)

$$\sum_{n' \in \text{all bands}} \sum_{\boldsymbol{k}' \in \text{BZ}} (\epsilon_{n',\boldsymbol{k}'} - \epsilon_{n,\boldsymbol{k}}) |\langle n', \boldsymbol{k}' | \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{r}} | n, \boldsymbol{k} \rangle|^2 = \hbar^2/(2m) \tag{17}$$

を用いて

$$Q_{\mathrm{T}}^{(\mathrm{e})}(\boldsymbol{q} = 0) = -\frac{Ne^2}{m\Omega} \tag{18}$$

を示せ。