# 2018 年度多体系の理論, 第 7 回講義資料 (非従来型超伝導): Cooper の 2 体問題における角運動量がゼロでない解

加藤雄介

2018 年 12 月 4 日

## 1　Cooper の 2 体問題再考

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}, \quad \hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \xi_k \hat{n}_{\boldsymbol{k}\sigma}, \quad \hat{\mathcal{H}}_{\rm int} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}'} \hat{b}_{\boldsymbol{k}}, \quad \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}} \equiv \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \hat{a}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \tag{1}$$

ここで $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ において元の 2 体相互作用から、Pair-hopping の項のみを残した。これまでは相互作用 $V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}$ の $\boldsymbol{k}'$ と $\boldsymbol{k}$ に対する依存性として $\boldsymbol{k}'$ と $\boldsymbol{k}$ の相対角度に依らないものを考えていたが、以下では系（ハミルトニアン）の回転対称性を仮定し、相互作用は $\boldsymbol{k}$,$\boldsymbol{k}'$ の同時回転で不変であるとし、

$$V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} = V(\xi_{k'}, \xi_k, \hat{\boldsymbol{k}} \cdot \hat{\boldsymbol{k}}') \tag{2}$$

としたものを考える。ここで $\hat{\boldsymbol{k}}$,$\hat{\boldsymbol{k}}'$ はそれぞれ $\boldsymbol{k}$,$\boldsymbol{k}'$ 方向の単位ベクトルを表す。上記の $V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}$ は一般に

$$V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} V_\ell(\xi_{k'}, \xi_k) P_\ell(\hat{\boldsymbol{k}} \cdot \hat{\boldsymbol{k}}') = \sum_{\ell=0}^{\infty} V_\ell(\xi_{k'}, \xi_k) \sum_{m=-\infty}^{\infty} Y_\ell^m(\theta, \phi)^* Y_\ell^m(\theta', \phi') \tag{3}$$

と書ける。上記で $P_\ell$ は Legendre 多項式、$Y_\ell^m(\theta, \phi)$ は球面調和関数を表す。$\xi_{k'}, \xi_k$ に対する依存性として

$$V_\ell(\xi_{k'}, \xi_k) = \begin{cases} -|V_\ell|, & 0 < \xi_k, \xi_{k'} < \epsilon_{\rm c} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{4}$$

として、Cooper pair (single pair) 状態の状態ベクトル

$$|\psi\rangle = \sum_{|\boldsymbol{k}| > k_{\rm F}} g_{\boldsymbol{k}} \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}} |{\rm F}\rangle$$

を Schrödinger 方程式

$$(E - \hat{\mathcal{H}}_0)|\psi\rangle = \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}|\psi\rangle \tag{5}$$

に代入すると係数 $g_{\boldsymbol{k}}$ に対する固有値方程式

$$(E' - 2\xi_k)|g_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\Omega} \sum_{|\boldsymbol{k}'| > k_{\rm F}} V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}'}, \quad E' = E - \underbrace{2 \sum_{|\boldsymbol{k}| < k_{\rm F}} \xi_k}_{E_0} \tag{6}$$

を得る。ここで

$$g_{\boldsymbol{k}} = \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell,m}(k) Y_\ell^m(\hat{k}) \tag{7}$$

とおき、(6) における和を積分に置き換える

$$\frac{1}{\Omega}\sum_{|\boldsymbol{k}'|>k_{\mathrm{F}}}\to N(0)\int \mathrm{d}\xi_{k'}\int\frac{\mathrm{d}S_{\boldsymbol{k}'}}{4\pi} \tag{8}$$

ここで $\mathrm{d}S_{\boldsymbol{k}'}$ は立体各要素 $\mathrm{d}\cos\theta'\mathrm{d}\phi'$ を表す。その積分を実行し

$$\int\frac{\mathrm{d}S_{\boldsymbol{k}'}}{4\pi}Y_{\ell'}^{m'}(\hat{k}')^{*}Y_{\ell}^{m}(\hat{k}')=\delta_{\ell'\ell}\delta_{m'm} \tag{9}$$

(4) を用いると

$$(E'-2\xi_k)a_{\ell m}(k)=-N_0|V_\ell|\int_0^{\epsilon_{\mathrm{c}}}\mathrm{d}\xi_{k'}a_{\ell,m}(k') \tag{10}$$

となる。両辺を $(E'-2\xi_k)$ で割り、積分 $\int_0^{\epsilon_{\mathrm{c}}}\mathrm{d}\xi_k$ を実行すると、$a_{\ell m}(k)$ を消去することができ、$E'$ に対する式

$$1=-N(0)|V_\ell|\int_0^{\epsilon_{\mathrm{c}}}\frac{\mathrm{d}\xi_k}{E'-2\xi_k} \tag{11}$$

これは s-wave のときと同じやり方で

$$E'=-2\epsilon_{\mathrm{c}}\exp\left(-\frac{2}{N(0)|V_\ell|}\right) \tag{12}$$

となることがわかる。$V_\ell<0$ となる $\ell$ に対しては Cooper 対が存在する。そのうち最も強い引力を持つ $\ell$ の Cooper 対がもっとも安定（束縛状態が大きい）である。また与えられた $\ell$ の下で Cooper 対の波動関数は $2\ell+1$ 重に縮退している。

## 2　スピン 3 重項ユニタリー状態の BCS 理論

一重項なら粒子数確定の BCS 状態は

$$\left(\sum_{\boldsymbol{k}}g_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{\dagger}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^{\dagger}\right)^{\frac{N}{2}}|0\rangle,\quad g_{\boldsymbol{k}}=g_{-\boldsymbol{k}} \tag{13}$$

と書かれるが、スピン 3 重項であっても $|S_z=0\rangle$ の Cooper pair であれば

$$\left(\sum_{\boldsymbol{k}}g_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{\dagger}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^{\dagger}\right)^{\frac{N}{2}}|0\rangle,\quad g_{\boldsymbol{k}}=-g_{-\boldsymbol{k}} \tag{14}$$

と書けるし、より一般のユニタリー状態であれば

$$\left(\sum_{\boldsymbol{k}}g_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{\prime\dagger}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^{\prime\dagger}\right)^{\frac{N}{2}}|0\rangle,\quad g_{\boldsymbol{k}}=-g_{-\boldsymbol{k}},\quad \hat{a}_{\boldsymbol{k}s}^{\prime\dagger}\equiv\hat{R}_{\mathrm{S}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}s}^{\prime\dagger}\hat{R}_{\mathrm{S}}^{-1} \tag{15}$$

と表される。ここで $\hat{R}_{\mathrm{S}}$ はスピン $z$ 軸を $d$ ベクトルの方向に移すスピン回転演算子 $\hat{R}_{\mathrm{S}}=\exp(-\mathrm{i}\theta\hat{\boldsymbol{S}}_{\mathrm{tot}}\cdot\boldsymbol{n}/\hbar)$ である。$\hat{a}_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\prime\dagger}$ は $\hat{a}_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{\dagger},\hat{a}_{\boldsymbol{k}\downarrow}^{\dagger}$ を用いて

$$\hat{a}_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\prime\dagger}=\sum_{\sigma'}(R_{\mathrm{S}})_{\sigma'\sigma}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\sigma'}^{\dagger} \tag{16}$$

と表される (ハット ^ がない $R_{\mathrm{S}}$ は $2\times2$ 行列を表す )。これを用いて $\hat{B}_{\boldsymbol{k}}\equiv\hat{a}_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{\prime\dagger}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^{\prime\dagger}$ は

$$\hat{B}_{\boldsymbol{k}}=\sum_{\alpha,\beta}(R_{\mathrm{S}})_{\alpha,1}(R_{\mathrm{S}})_{\beta,2}\hat{b}_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}^{\dagger},\quad \hat{b}_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}^{\dagger}=\hat{a}_{\boldsymbol{k}\alpha}^{\dagger}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}\beta}^{\dagger}, \tag{17}$$

と表される。スピン一重項の時と同様に

$$|\Phi_N\rangle=u_{\boldsymbol{k}}|\Phi_N'\rangle+v_{\boldsymbol{k}}\hat{B}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}|\Phi_{N-2}'\rangle,\quad |u_{\boldsymbol{k}}|^2+|v_{\boldsymbol{k}}|^2=1 \tag{18}$$

と表す。

### 2.1　凝縮体波動関数

凝縮体波動関数のフーリエ成分

$$F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta} \equiv \langle \Phi_{N-2} | \hat{b}_{\boldsymbol{k}\alpha\beta} | \Phi_N \rangle \tag{19}$$

は

$$F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta} = \sum_{\sigma,\sigma'} (R_{\mathrm{S}}^{-1})_{\beta\sigma'} (R_{\mathrm{S}}^{-1})_{\alpha\sigma} \underset{\sim\sim\sim}{\langle \Phi_{N-2} | \hat{a}'_{-\boldsymbol{k}\sigma'} \hat{a}'_{\boldsymbol{k}\sigma} | \Phi_N \rangle} \tag{20}$$

となる。波線部は $\sigma' = -\sigma$ のときのみゼロでなく

$$\langle \Phi_{N-2} | \hat{a}'_{-\boldsymbol{k},-\sigma} \hat{a}'_{\boldsymbol{k}\sigma} | \Phi_N \rangle = \begin{cases} \langle \Phi_{N-2} | \hat{B}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} | \Phi_N \rangle = u^*_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} & \sigma = \uparrow, \\ -\langle \Phi_{N-2} | \hat{B}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}} | \Phi_N \rangle = -u^*_{-\boldsymbol{k}} v_{-\boldsymbol{k}} = u^*_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} & \sigma = \downarrow \end{cases} \tag{21}$$

となる。これらより

$$F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta} = \left( (R_{\mathrm{S}}^{-1})_{\beta,2} (R_{\mathrm{S}}^{-1})_{\alpha,1} + (R_{\mathrm{S}}^{-1})_{\beta,1} (R_{\mathrm{S}}^{-1})_{\alpha,2} \right) u^*_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \tag{22}$$

となる。この表式は一重項の時に比べれば簡潔さに劣り、扱いにくく見える。しかし以下に示すように基底状態でのエネルギー期待値を $F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}$ の関数（あるいは汎関数）として微分または変分をとり、結果をまとめていけば一重項のときと同様にエネルギーギャップに対する自己無撞着方程式（ギャップ方程式）を得ることができる。

### 2.2　ギャップ方程式

準備として (22) から

$$\sum_{\alpha\beta} |F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|^2 = 2|u_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}}|^2 = 2(1 - |v_{\boldsymbol{k}}|^2)|v_{\boldsymbol{k}}|^2 \tag{23}$$

を導いておく。これを $|v_{\boldsymbol{k}}|^2$ についての 2 次方程式とみなして解くと

$$2|v_{\boldsymbol{k}}|^2 = 1 \mp \sqrt{1 - 2\sum_{\alpha\beta} |F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|^2} \tag{24}$$

を得る。運動エネルギーの期待値は、一重項の時と同様に $\langle \hat{\mathcal{H}}_0 \rangle = 2\sum_{\boldsymbol{k}} \xi_k |v_{\boldsymbol{k}}|^2$ とかけるが、これを $F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}$ 用いて

$$\langle \hat{\mathcal{H}}_0 \rangle = \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_k \left( 1 \mp \sqrt{1 - 2\sum_{\alpha\beta} |F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|^2} \right) = (\sum_{\boldsymbol{k}} \xi_k) - \sum_{\boldsymbol{k}} |\xi_k| \sqrt{1 - 2\sum_{\alpha\beta} |F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|^2} \tag{25}$$

と表す。複号はエネルギーが低くなるようにとる。$\xi > 0$ のとき負符号をとり、$\xi < 0$ のとき正符号をとった。相互作用エネルギーの期待値は

$$\langle \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}} \rangle \sim \frac{1}{2\Omega} \sum_{\boldsymbol{l} \neq \boldsymbol{m}} \sum_{\alpha\beta} V_{\boldsymbol{m}\boldsymbol{\ell}} \langle \Phi_N | \hat{b}^{\dagger}_{\boldsymbol{m}\alpha\beta} \hat{b}_{\boldsymbol{\ell}\alpha\beta} | \Phi_N \rangle = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\boldsymbol{l} \neq \boldsymbol{m}} \sum_{\alpha\beta} V_{\boldsymbol{m}\boldsymbol{\ell}} F^*_{\boldsymbol{m}\alpha\beta} F_{\boldsymbol{\ell}\alpha\beta} \tag{26}$$

と書ける。停留条件

$$\frac{\partial}{\partial F^*_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}} \left( \langle \hat{\mathcal{H}}_0 \rangle + \langle \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}} \rangle \right) = \frac{|\xi_k| F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}}{\sqrt{1 - 2\sum_{\alpha\beta} |F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|^2}} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\boldsymbol{l}} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{l}} F_{\boldsymbol{l}\alpha\beta} = 0 \tag{27}$$

を変形していくとギャップ方程式が得られる。その手順は

1. まず $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \frac{|\xi_k|}{\sqrt{1 - 2\sum_{\alpha\beta} |F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|^2}}$ とおき

2. $\Delta_{\boldsymbol{k}\alpha\beta} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}$ とおくと

$$\Delta_{\boldsymbol{k}\alpha\beta} = -\frac{1}{2\Omega}\sum_{\boldsymbol{l}} V_{\boldsymbol{kl}} F_{\boldsymbol{l}\alpha\beta} = -\frac{1}{2\Omega}\sum_{\boldsymbol{l}} \frac{V_{\boldsymbol{kl}}\Delta_{\boldsymbol{l}\alpha\beta}}{\epsilon_{\boldsymbol{l}}} \tag{28}$$

   が得られる。

3. $|\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2 = 2\sum_{\alpha\beta}|\Delta_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|^2 = 2\epsilon_{\boldsymbol{k}}^2\sum_{\alpha\beta}|F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|^2$ を導入すると

$$\frac{|\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}{\epsilon_{\boldsymbol{k}}^2} = 2\sum_{\alpha\beta}|F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|^2 = \left(1 - \frac{|\xi_k|^2}{\epsilon_{\boldsymbol{k}}^2}\right) \tag{29}$$

   となる。これより

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2} \tag{30}$$

   が得られる。これらをまとめて

$$\Delta_{\boldsymbol{k}\alpha\beta} = -\frac{1}{2\Omega}\sum_{\boldsymbol{l}} \frac{V_{\boldsymbol{kl}}\Delta_{\boldsymbol{l}\alpha\beta}}{\sqrt{\xi_l^2 + |\Delta_{\boldsymbol{l}}|^2}} \tag{31}$$

   となる（スピン 3 重項ユニタリー状態に対するギャップ方程式)。

$\Delta_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}$ と $F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}$ のスピン構造の関係は

$$\Delta_{\boldsymbol{k}\alpha\beta} = \left(\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}\mathrm{i}\sigma^y\right)_{\alpha\beta}, \quad F_{\boldsymbol{k}\alpha\beta} = \left(\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}\mathrm{i}\sigma^y\right)_{\alpha\beta}, \tag{32}$$

とおくと、

$$\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) = \epsilon_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{k}) \tag{33}$$

となるので、スピン構造は等しい。(33) を (31) に代入すると d-vector に対するギャップ方程式

$$d_\mu(\boldsymbol{k}) = -\frac{1}{2\Omega}\sum_{\boldsymbol{l}} \frac{V_{\boldsymbol{kl}} d_\mu(\boldsymbol{l})}{\sqrt{\xi_l^2 + |\Delta_{\boldsymbol{l}}|^2}}, \quad \mu = x, y, z \tag{34}$$

分母にも $d$-vector があるので、この 3 本の方程式は非線形連立方程式である。d-vector の各成分 $(x, y, z)$ は $\boldsymbol{k}$ の関数として $\boldsymbol{k}$ の大きさについてはフェルミ面近傍 $|\xi_k| < \epsilon_{\mathrm{c}}$ のときのみゼロでない値をとり、それ以外のエネルギーではゼロになるとする。

$\boldsymbol{k}$ の方向については例えば $\ell = 1$ の場合を考えるとエネルギー球面調和関数 $Y_1^m(\hat{k})$, $m = -1, 0, 1$ で展開できる．その場合、状態を指定するのに、9 つのパラメターがあり、9 個の未知変数に対する非線形な連立方程式になる。解は複数存在し、そのうち凝縮エネルギーが最も大きい解が基底状態を与える。