多体系の理論, 講義資料 (非従来型超伝導): スピン三重項超伝導の d ベクトル表示、スピン回転と実空間回転

加藤雄介

2018 年 11 月 24 日

1 まとめと補足

- スピン 3 重項 Cooper 対の状態ベクトルは

$$|\Psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{k},\alpha,\beta} ((\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathrm{i}\sigma_2))_{\alpha\beta}\,\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle, \quad \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta} = \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{a}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\beta} \tag{1}$$

と表されることが多い（業界標準）。ここで $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ は Pauli 行列

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

を成分とするベクトルであり、

$$\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) = (d_x(\boldsymbol{k}), d_y(\boldsymbol{k}), d_z(\boldsymbol{k})) = -\boldsymbol{d}(-\boldsymbol{k}), \tag{3}$$

が d-vector と呼ばれる量である (注：多くの文献で d-vectorCooper は pair の波動関数ではなくエネルギーギャップ $\Delta_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}$ のスピン構造を表すのに用いられる)。

- 式 (3) のスピン空間での回転

スピン空間における回転演算子 $\hat{R}_S = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{\theta\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}}{\hbar}\right)$ が $|\Psi\rangle$ に作用するとき

$$\hat{R}_S|\Psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{k},\alpha,\beta} ((\boldsymbol{d}'(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathrm{i}\sigma_2))_{\alpha\beta}\,\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle, \quad d'_\mu(\boldsymbol{k}) = \sum_\nu R_{\mu\nu}d_\nu(\boldsymbol{k}) \equiv (R(\boldsymbol{d}))_\mu \tag{4}$$

となる ($\boldsymbol{n}$ は任意の方向の単位ベクトル)。行列 $R_{\mu\nu}$ はベクトルを $\boldsymbol{n}$ 軸回りに角度 θ だけ回転する行列である。微小回転 $|\theta| \ll 1$ において

$$R(\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})) = \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) + \theta\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) + O(\theta^2) \tag{5}$$

となる。

- 式 (3) へのスピン演算子の作用と d-vector の意味

$$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}|\Psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{k},\alpha,\beta} ((\boldsymbol{d}''(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathrm{i}\sigma_2))_{\alpha\beta}\,\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle, \quad \boldsymbol{d}''(\boldsymbol{k}) = \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \tag{6}$$

これより、$\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})$ が μ 成分しか持たない（それ以外の成分ゼロ）とき $\hat{S}^\mu|\Psi\rangle = 0$ すなわち、

$$\boldsymbol{d} = (1,0,0) \text{ のとき } \hat{S}^x|\Psi\rangle = 0 \quad \to |\Psi\rangle = |S^x = 0\rangle \tag{7}$$

$$\boldsymbol{d} = (0,1,0) \text{ のとき } \hat{S}^y|\Psi\rangle = 0 \quad \to |\Psi\rangle = |S^y = 0\rangle \tag{8}$$

$$\boldsymbol{d} = (0,0,1) \text{ のとき } \hat{S}^z|\Psi\rangle = 0 \quad \to |\Psi\rangle = |S^z = 0\rangle \tag{9}$$

となる。d-vector の方向とスピンの向きは直交している。

- 式 (3) のノルム

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 4\sum_{\boldsymbol{k}} |\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})|^2 \tag{10}$$

- 式 (3) のスピン期待値

$$\frac{\langle\Psi|\hat{S}^\mu|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\boldsymbol{d}^*(\boldsymbol{k})\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\right)_\mu}{\sum_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})|^2} \tag{11}$$

- 式 (3) のスピン空間での回転
  実空間における回転演算子 $\hat{R}_L = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{\theta\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{n}}{\hbar}\right)$ が $|\Psi\rangle$ に作用するとき

$$\hat{R}_L|\Psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{k},\alpha,\beta}\left((\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathrm{i}\sigma_2)\right)_{\alpha\beta}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle, \quad \boldsymbol{k}' = R^{-1}(\boldsymbol{k}) \tag{12}$$

  となる ($\boldsymbol{n}$ は任意の方向の単位ベクトル)。微小回転 $|\theta| \ll 1$ において

$$\boldsymbol{d}(R^{-1}\boldsymbol{k})) = \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}-\theta\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{k}+O(\theta^2)) = \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})-\theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})+O(\theta^2) = \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})-\theta\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}})\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})+O(\theta^2) \tag{13}$$

  となる。

- 式 (3) への軌道角運動量演算子の作用

$$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{n}|\Psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{k},\alpha,\beta}\left((\boldsymbol{d}'''(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathrm{i}\sigma_2)\right)_{\alpha\beta}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle, \quad \boldsymbol{d}'''(\boldsymbol{k}) = -\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{k}\times\nabla_{\boldsymbol{k}}))\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \equiv (\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \tag{14}$$

- 式 (3) の軌道角運動量期待値

$$\frac{\langle\Psi|\hat{L}^\mu|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{d}^*(\boldsymbol{k})\cdot(\boldsymbol{k}\times\nabla_{\boldsymbol{k}})^\mu\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})}{\sum_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})|^2} \tag{15}$$

2　準備

2.1　第二量子化でのスピン空間回転演算子の扱い

スピン 1/2 のフェルミオンの全スピン演算子は

$$\hat{S}^\mu = \frac{\hbar}{2}\sum_{\boldsymbol{k},s,s'}(\sigma^\mu)_{ss'}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},s}\hat{a}_{\boldsymbol{k}s'}, \quad \mu = x,y,z \tag{16}$$

で与えられる（量子力学 III、量子力学 GII での既習事項)。σ^μ は Pauli 行列（2）である。

生成消滅演算子とスピン演算子の交換関係は直接計算して

$$[\hat{S}^\mu, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}] = \frac{\hbar}{2}\sum_s(\sigma^\mu)_{s\alpha}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}s}, \quad [\hat{S}^\mu, \hat{a}_{\boldsymbol{k}\alpha}] = -\frac{\hbar}{2}\sum_s(\sigma^\mu)_{\alpha s}\hat{a}_{\boldsymbol{k}s} \tag{17}$$

となることを確かめることができる。この交換関係を用いれば

$$\hat{S}^\mu\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}|0\rangle = [\hat{S}^\mu, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}]|0\rangle + \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\underbrace{\hat{S}^\mu|0\rangle}_{0} = \frac{\hbar}{2}\sum_s(\sigma^\mu)_{s\alpha}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}s}|0\rangle \tag{18}$$

となることが確かめられる (**一粒子状態へのスピン演算子の作用**)。同様にして 2 粒子状態に対して

$$\hat{S}^\mu \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\beta}|0\rangle = \frac{\hbar}{2}\sum_s (\sigma^\mu)_{s\alpha}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\beta}|0\rangle + \frac{\hbar}{2}\sum_s (\sigma^\mu)_{s\beta}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'s}|0\rangle \tag{19}$$

となる。N 粒子状態に対しては

$$\hat{S}^\mu \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}(1)\alpha(1)}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}(2)\alpha(2)}\cdots\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}(N)\alpha(N)}|0\rangle = \frac{\hbar}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_s (\sigma^\mu)_{s\alpha(j)}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}(1)\alpha(1)}\cdots\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}(j)s}\cdots\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}(N)\alpha(N)}|0\rangle \tag{20}$$

となる (**多粒子状態へのスピン演算子の作用**)。

2.2 第二量子化での空間回転演算子の扱い

一粒子系量子力学では位置演算子の固有状態 $|\boldsymbol{r}\rangle$

$$\hat{r}|\boldsymbol{r}\rangle = |\boldsymbol{r}\rangle, \quad \langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{21}$$

に対する空間回転演算子 $\hat{R}_L = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{\theta\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{n}}{\hbar}\right)$ は

$$\hat{R}_L|\boldsymbol{r}\rangle = |R(\boldsymbol{r})\rangle, \quad (R(\boldsymbol{r}))_\mu = \sum_\nu R_{\mu\nu}r_\nu \tag{22}$$

となる演算子として定義される。$R(\boldsymbol{r})$ はベクトルを $\boldsymbol{n}$ 軸回りに角度 θ だけ回転して得られるベクトルであり、$\boldsymbol{n} = (0,0,1)$ のとき行列 $R_{\mu\nu}$ は

$$R_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} \cos\theta, & -\sin\theta, & 0 \\ \sin\theta, & \cos\theta, & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{23}$$

で与えられる。これを第二量子化の形式で扱う。

スピン $1/2(\sigma =\uparrow,\downarrow)$ のフェルミオン場の演算子 $\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})$ を用いて真空の状態ベクトル $|0\rangle$ を次の性質を満たす状態として定義する

- 任意の $\boldsymbol{r}$ と σ に対して $\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})|0\rangle = 0$
- $\langle 0|0\rangle = 1$

$\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})$ を用いて

$$|\boldsymbol{r},\sigma\rangle = \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})|0\rangle \tag{24}$$

と表される状態は位置 $\boldsymbol{r}$ に $\sigma =\uparrow,\downarrow$ のスピンを持つ粒子が一ついる状態である。実際に粒子数密度演算子やスピン密度演算子

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = \sum_\sigma \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r}), \quad \hat{S}^z(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{2}\sum_\sigma \sigma\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})\hat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r}) \tag{25}$$

(これらの表式の導出は量子力学 III（量子力学 GII）で既に扱った) に対して $|\boldsymbol{r}_1,\sigma_1\rangle$ は固有状態であり、固有値はそれぞれ $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)$, $\frac{\hbar\sigma_1}{2}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)$ である。(24) の両辺に $\hat{R}_L$ を作用させると

$$\underbrace{|R(\boldsymbol{r}),\sigma\rangle}_{\hat{\psi}^\dagger_\sigma(R(\boldsymbol{r}))|0\rangle} = \hat{R}_L\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})\hat{R}_L^{-1}\underbrace{\hat{R}_L|0\rangle}_{|0\rangle} \tag{26}$$

(真空は回転不変な状態として $\hat{R}_L|0\rangle = |0\rangle$ とした) となるので、

$$\hat{R}_L\hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})\hat{R}_L^{-1} = \hat{\psi}^\dagger_\sigma(R(\boldsymbol{r})) \tag{27}$$

となる (**場の演算子の変換則**)。

生成演算子

$$\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r}) \tag{28}$$

の変換則は

$$\hat{R}_L \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{R}_L^{-1} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \hat{\psi}^\dagger_\sigma(R(\boldsymbol{r})) \tag{29}$$

ここで $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{r}$ に同じ回転操作をすると内積は保存するから $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} = R(\boldsymbol{k})\cdot R(\boldsymbol{r})$ となる。ここで $\boldsymbol{r} = R(\boldsymbol{r})$ を新たな変数とおき、$\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \mathrm{d}\boldsymbol{r}'$ であることに注意すると、

$$\hat{R}_L \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{R}_L^{-1} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \mathrm{e}^{\mathrm{i}R(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}'} \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r}') = \hat{a}^\dagger_{R(\boldsymbol{k}),\sigma} \tag{30}$$

を得る (**生成演算子の変換則**)。

生成演算子を用いた基底で状態ベクトルを表したとき、展開係数（波動関数）の変換則を考える.

(一粒子状態)$|\Psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} c(\boldsymbol{k},\sigma)\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma}|0\rangle$ に対して

$$\hat{R}_L \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} c(\boldsymbol{k},\sigma)\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma}|0\rangle = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} c(\boldsymbol{k},\sigma) \underbrace{\hat{R}_L \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} \hat{R}_L^{-1}}_{\hat{a}^\dagger_{R(\boldsymbol{k}),\sigma}} \underbrace{\hat{R}_L|0\rangle}_{|0\rangle} = \sum_{\boldsymbol{k}',\sigma} c(R^{-1}(\boldsymbol{k}'),\sigma)\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}',\sigma}|0\rangle \tag{31}$$

最後の等号で $\boldsymbol{k}' = R(\boldsymbol{k})$ とした。これより空間回転演算子を状態ベクトルに作用させたとき、生成演算子はそのままにした場合、展開係数が $c(\boldsymbol{k},\sigma) \to c(R^{-1}(\boldsymbol{k}),\sigma)$ と変換される (**展開係数 (波動関数) の変換則：一粒子状態の場合**)。

(N 粒子状態)

$$|\Psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}_1,\sigma_1} \cdots \sum_{\boldsymbol{k}_N,\sigma_N} c(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1,\cdots,\boldsymbol{k}_N,\sigma_N)\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}_1,\sigma_1}\cdots\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}_N,\sigma_N}|0\rangle$$

に対して

$$\hat{R}_L|\Psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}_1,\sigma_1} \cdots \sum_{\boldsymbol{k}_N,\sigma_N} c(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1,\cdots,\boldsymbol{k}_N,\sigma_N)\hat{a}^\dagger_{R(\boldsymbol{k}_1),\sigma_1}\cdots\hat{a}^\dagger_{R(\boldsymbol{k}_N),\sigma_N}|0\rangle \tag{32}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k}'_1,\sigma_1} \cdots \sum_{\boldsymbol{k}'_N,\sigma_N} c(R^{-1}(\boldsymbol{k}'_1),\sigma_1,\cdots,R^{-1}(\boldsymbol{k}'_N),\sigma_N)\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'_1,\sigma_1}\cdots\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'_N,\sigma_N}|0\rangle \tag{33}$$

空間回転演算子を状態ベクトルに作用させたとき、生成演算子はそのままにした場合、展開係数が

$$c(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1,\cdots,\boldsymbol{k}_N,\sigma_N) \to c(R^{-1}(\boldsymbol{k}_1),\sigma_1,\cdots,R^{-1}(\boldsymbol{k}_N),\sigma_N) \tag{34}$$

と変換される (**展開係数 (波動関数) の変換則：N 粒子状態の場合**)。

軌道角運動量演算子 $\hat{L}$ は回転演算子から

$$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{n} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{R}_L}{\partial\theta}\Big|_{\theta=0} \tag{35}$$

の関係がある。(31) より一粒子系の状態ベクトルへの軌道角運動量の作用は

$$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{n}\sum_{\boldsymbol{k},\sigma} c(\boldsymbol{k},\sigma)\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma}|0\rangle = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial c(R^{-1}(\boldsymbol{k}),\sigma)}{\partial\theta}\Big|_{\theta=0}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma}|0\rangle \tag{36}$$

となる。

$$R^{-1}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{k} - \theta\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{k} + O(\theta^2) \tag{37}$$

より

$$c(R^{-1}(\boldsymbol{k}),\sigma) = c(\boldsymbol{k},\sigma) - \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}c(\boldsymbol{k},\sigma) + O(\theta^2) = c(\boldsymbol{k},\sigma) - \theta\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}})c(\boldsymbol{k},\sigma) + O(\theta^2) \tag{38}$$

となるので、

$$\hat{L}^\mu \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} c(\boldsymbol{k},\sigma)\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma}|0\rangle = -\mathrm{i}\hbar \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \left[(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}})^\mu c(\boldsymbol{k},\sigma)\right]\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma}|0\rangle \tag{39}$$

軌道角運動量演算子 $\hat{L}^\mu$ を状態ベクトルに作用させたとき、生成演算子はそのままにした場合、展開係数が

$$c(\boldsymbol{k},\sigma) \to -\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}})^\mu c(\boldsymbol{k},\sigma) \tag{40}$$

と変換される (**展開係数 (波動関数) に対する軌道角運動量演算子の作用：1 粒子状態の場合**)。

3 導出

3.1 スピン回転、スピン角運動量

Fermi sea の状態

$$|\mathrm{F}\rangle = \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\prod_{|\boldsymbol{k}|<k_\mathrm{F}} \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}|0\rangle \tag{41}$$

はスピン一重項状態だから

$$\hat{S}^\mu|\mathrm{F}\rangle = 0 \quad \mu = x,y,z \tag{42}$$

となる。これをを用いると、Fermi sea に 2 粒子加えた状態に対して

$$\hat{S}^\mu\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\beta}|\mathrm{F}\rangle = [\hat{S}^\mu,\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}]\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\beta}|\mathrm{F}\rangle + \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}[\hat{S}^\mu,\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\beta}]|\mathrm{F}\rangle + \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\beta}\underbrace{\hat{S}^\mu|\mathrm{F}\rangle}_{0} \tag{43}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sum_s(\sigma^\mu)_{s\alpha}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\beta}|\mathrm{F}\rangle + \frac{\hbar}{2}\sum_s(\sigma^\mu)_{s\beta}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'s}|\mathrm{F}\rangle \tag{44}$$

となる。

Cooper pair 状態

$$|\Psi\rangle = \sum_{|\boldsymbol{k}|>k_\mathrm{F}}\sum_{\alpha\beta} g_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle$$

へのスピン演算子の作用は

$$\hat{S}^\mu|\Psi\rangle = \sum_{|\boldsymbol{k}|>k_\mathrm{F}}\sum_{\alpha\beta} g_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}\hat{S}^\mu\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle = \frac{\hbar}{2}\sum_{|\boldsymbol{k}|>k_\mathrm{F}}\sum_{\alpha\beta}\left(\sum_s \sigma^\mu_{\alpha s}g_{\boldsymbol{k}s\beta} + \sum_s \sigma^\mu_{\beta s}g_{\boldsymbol{k}\alpha s}\right)\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle \tag{45}$$

となる（最右辺の表式にまとまるように dummy index の付け替えをしている)。$g_{\boldsymbol{k}ss'}$ を ss' 成分とする 2×2 行列を $g_{\boldsymbol{k}}$ と表すと

$$\hat{S}^\mu|\Psi\rangle = \frac{\hbar}{2}\sum_{|\boldsymbol{k}|>k_\mathrm{F}}\sum_{\alpha\beta}(\sigma^\mu g_{\boldsymbol{k}} + g_{\boldsymbol{k}}(\sigma^\mu)^\mathrm{T})_{\alpha\beta}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle \tag{46}$$

となる。この式は $\hat{S}^\mu$ を Cooper pair 状態に作用させると展開係数（波動関数）を

$$g_{\boldsymbol{k}} \to \frac{\hbar}{2}\left(\sigma^\mu g_{\boldsymbol{k}} + g_{\boldsymbol{k}}(\sigma^\mu)^\mathrm{T}\right) \tag{47}$$

と置き換えればよい (**スピン演算子の展開係数 (波動関数) への作用**)。ここで T は転置行列を表す。

行列 $g_{\boldsymbol{k}}$ へのスピン演算子の作用はやや複雑なので、より見通しの良い表し方へ書きかえていく。関係式

$$(\sigma^\mu)^\mathrm{T} = -\sigma^y\sigma^\mu\sigma^y \tag{48}$$

を用いると

$$\sigma^\mu g_{\boldsymbol{k}} + g_{\boldsymbol{k}}(\sigma^\mu)^{\mathrm{T}} = \sigma^\mu g_{\boldsymbol{k}} - g_{\boldsymbol{k}}\sigma^y\sigma^\mu\sigma^y = [\sigma^\mu, g_{\boldsymbol{k}}(-\mathrm{i}\sigma^y)](\mathrm{i}\sigma^y) \tag{49}$$

と表されるので、記号

$$\tilde{g}_{\boldsymbol{k}} = g_{\boldsymbol{k}}(-\mathrm{i}\sigma^y) \tag{50}$$

を導入すると、(47) は両辺はそれぞれ

$$\tilde{g}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\sigma^y) \to \frac{\hbar}{2}[\sigma^\mu, \tilde{g}_{\boldsymbol{k}}](\mathrm{i}\sigma^y) \tag{51}$$

すなわち

$$\tilde{g}_{\boldsymbol{k}} \to \frac{\hbar}{2}[\sigma^\mu, \tilde{g}_{\boldsymbol{k}}] \tag{52}$$

とあらわされる。Cooper pair 状態の展開係数（波動関数）への演算子の作用は、行列 $g_{\boldsymbol{k}}$ で見るより $g_{\boldsymbol{k}} = \tilde{g}_{\boldsymbol{k}}(\mathrm{i}\sigma^y)$ として $\tilde{g}_{\boldsymbol{k}}$ で見た方が見通しがよい。

2 × 2 行列は

$$\sigma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma^x, \sigma^y, \sigma^z \tag{53}$$

を基底とする 4 次元線形空間をなすから

$$\tilde{g}_{\boldsymbol{k}} = d_0(\boldsymbol{k})\sigma^0 + \underbrace{\sum_{\mu=x,y,z} d_\mu(\boldsymbol{k})\sigma^\mu}_{\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}} \tag{54}$$

とおくと、

$$\frac{\hbar}{2}[\sigma^\mu, \tilde{g}_{\boldsymbol{k}}] = \frac{\hbar}{2}\sum_{\nu=x,y,z} d_\nu(\boldsymbol{k}) \underbrace{[\sigma^\mu, \sigma^\nu]}_{2\mathrm{i}\epsilon^{\mu\nu\lambda}\sigma^\lambda} = \mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \times \boldsymbol{\sigma})^\mu \tag{55}$$

となる。スピン演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}$ の作用は $\tilde{g}_{\boldsymbol{k}} = d^0(\boldsymbol{k})$ のとき

$$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}: \quad d^0(\boldsymbol{k}) \to 0 \tag{56}$$

（つまりスピン一重項を表す）と表され、$\tilde{g}_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}$ のとき

$$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}: \quad \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma} \to \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{d}\times\boldsymbol{\sigma}) = \mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}))\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{57}$$

すなわち

$$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}: \quad \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \to \mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})) \tag{58}$$

と表される（式 (6) の導出）（これがスピン 3 重項状態を表す)。スピン空間における回転演算子 $\hat{R}_S$ は微小回転に対して、

$$\hat{R}_S = \hat{1} - \frac{\mathrm{i}\theta\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}}{\hbar} + O(\theta^2) \tag{59}$$

となるから、$\hat{R}_S$ の作用で、

$$\hat{R}_S : \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \to \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) + \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})) + O(\theta^2) \tag{60}$$

となる (式 (5) の導出)。式 (60) は $\boldsymbol{n}$ 軸回りに微小角度 θ だけベクトルを回転させる変換になっている。有限角度 θ の回転は微小角度回転を繰り返して得られるから

$$\hat{R}_S : \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \to R(\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})) \tag{61}$$

となる。$\boldsymbol{n}=(0,0,1)$ の場合を例にとると

$$(\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})+\theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})))_\mu=\tilde{R}(\theta)_{\mu\nu}d_\nu(\boldsymbol{k}),\quad \tilde{R}(\theta)=\begin{pmatrix}1 & -\theta, & 0\\ \theta, & 1, & 0\\ 0, & 0, & 1\end{pmatrix} \tag{62}$$

と表される。一方 $\hat{R}$ は θ/N 回転を N 回繰り返す変換とも言えるので

$$\hat{R}_S=\lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{\mathrm{i}\theta\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}}{N}\right)^N \tag{63}$$

と表すこともできる。これを用いて d ベクトルの変換は

$$\hat{R}_S:d_\mu(\boldsymbol{k})\to(\lim_{N\to\infty}(\tilde{R}(\theta/N))^N)_{\mu\nu}d_\nu(\boldsymbol{k}) \tag{64}$$

と表される。

$$\lim_{N\to\infty}(\tilde{R}(\theta/N))^N=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta, & 0\\ \sin\theta, & \cos\theta, & 0\\ 0, & 0, & 1\end{pmatrix} \tag{65}$$

より、式 (64) は z 軸回りの θ 回転を表している (式 (4) の導出)。このように見ていくと d-vector 表示がスピン 3 重項 Cooper pair 状態の記法のうち、スピン空間での対称性、変換性を見通しよく記述するものであることがわかる。

3.2 実空間回転、軌道角運動量

前節の結果を用いれば (12) は

$$\begin{aligned}\hat{R}_L|\Psi\rangle &= \sum_{\boldsymbol{k},\alpha,\beta}((\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathrm{i}\sigma_2))_{\alpha\beta}\underbrace{\hat{R}_L\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}\hat{R}_L^{-1}}_{\hat{b}^\dagger_{R(\boldsymbol{k})\alpha\beta}}\underbrace{\hat{R}_L|\mathrm{F}\rangle}_{|\mathrm{F}\rangle}\\ &= \sum_{\boldsymbol{k}',\alpha,\beta}\left(\boldsymbol{d}(R^{-1}(\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathrm{i}\sigma_2)\right)_{\alpha\beta}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle\end{aligned} \tag{66}$$

として導かれる (最後の等号で $\boldsymbol{k}'=R(\boldsymbol{k})$ と置いた)。ここで

$$\hat{R}_L|\mathrm{F}\rangle=\hat{R}_L\prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\prod_{|\boldsymbol{k}|<k_\mathrm{F}}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}|0\rangle=\prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\prod_{|\boldsymbol{k}|<k_\mathrm{F}}\hat{a}^\dagger_{R(\boldsymbol{k}),\sigma}\hat{R}_L|0\rangle=\prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\prod_{|\boldsymbol{k}'|<k_\mathrm{F}}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}',\sigma}|0\rangle=|\mathrm{F}\rangle \tag{67}$$

(Fermi sea 状態は回転不変）を用いた。式 (66) の最左辺と最右辺の式を θ について微分したあと $\theta=0$ と置くと式 (14) が導かれる。

3.3 ノルムと期待値

まずふたつの Cooper pair 状態

$$|\Psi\rangle=\sum_{|\boldsymbol{k}|>k_\mathrm{F}}\sum_{\alpha\beta}((\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathrm{i}\sigma^y)_{\alpha\beta}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle \tag{68}$$

$$|\tilde{\Psi}\rangle=\sum_{|\boldsymbol{k}'|>k_\mathrm{F}}\sum_{\alpha'\beta'}\left((\tilde{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathrm{i}\sigma^y\right)_{\alpha'\beta'}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\alpha'\beta'}|\mathrm{F}\rangle \tag{69}$$

の内積 $\langle\tilde{\Psi}|\Psi\rangle$ を求める。

$$\langle\mathrm{F}|\hat{b}_{\boldsymbol{k}'\alpha'\beta'}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha\beta}|\mathrm{F}\rangle=\delta_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}\delta_{\alpha',\alpha}\delta_{\beta',\beta}-\delta_{\boldsymbol{k}',-\boldsymbol{k}}\delta_{\alpha',\beta}\delta_{\beta',\alpha} \tag{70}$$

を用いると

$$\langle\tilde{\Psi}|\Psi\rangle = -\sum_{\boldsymbol{k},\alpha,\beta}\Big((\tilde{\boldsymbol{d}}^*(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}^*)\sigma^y\Big)_{\alpha\beta}((\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})\sigma^y)_{\alpha\beta} + \sum_{\boldsymbol{k},\alpha,\beta}\Big((\tilde{\boldsymbol{d}}^*(-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}^*)\sigma^y\Big)_{\beta\alpha}((\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})\sigma^y)_{\alpha\beta} \tag{71}$$

を得る。

$$((\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})\sigma^y)_{\alpha\beta} = ((\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})\sigma^y)_{\beta\alpha}$$

(スピン 3 重項では α,β について対称) と、$d(-\boldsymbol{k}) = -d(\boldsymbol{k})$ より上記の右辺の二つの項は等しく

$$\langle\tilde{\Psi}|\Psi\rangle = -2\sum_{\boldsymbol{k}}\mathrm{tr}\Big((\tilde{\boldsymbol{d}}^*(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}^*)\sigma^y(\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma})\sigma^y\Big) \tag{72}$$

となる (tr は 2×2 行列のトレース)。さらに

$$\boldsymbol{\sigma}^*\sigma^y = -\sigma^y\boldsymbol{\sigma}, \quad (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} + \mathrm{i}(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{73}$$

を用いると

$$\langle\tilde{\Psi}|\Psi\rangle = 4\sum_{\boldsymbol{k}}\tilde{\boldsymbol{d}}^*(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})) \tag{74}$$

ここで $\tilde{d}(\boldsymbol{k}) = d(\boldsymbol{k})$ とおくとノルムの式 (10) が得られる。つぎにスピン期待値を考える。内積の式 (74) で

$$\tilde{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{k}) \to \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}), \quad \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \to \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \tag{75}$$

として

$$\langle\Psi|\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}|\Psi\rangle = 4\mathrm{i}\hbar\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{d}^*(\boldsymbol{k})\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})) = -4\mathrm{i}\hbar\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{d}^*(\boldsymbol{k})\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}))\cdot\boldsymbol{n}, \tag{76}$$

$$\langle\Psi|\hat{\boldsymbol{S}}|\Psi\rangle = 4\mathrm{i}\hbar\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{d}^*(\boldsymbol{k})\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})) = -4\mathrm{i}\hbar\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{d}^*(\boldsymbol{k})\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \tag{77}$$

となる。これとノルムの式 (10) より、スピンの期待値の式 (11) が得られる。

軌道角運動量 $\hat{L}^\mu$ の期待値を求めるため内積の式 (74) で

$$\tilde{\boldsymbol{d}}(\boldsymbol{k}) \to \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}), \quad \boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \to -\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{k}\times\nabla_{\boldsymbol{k}})^\mu\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \tag{78}$$

とすると

$$\langle\Psi|\hat{\boldsymbol{L}}^\mu|\Psi\rangle = -4\mathrm{i}\hbar\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{d}^*(\boldsymbol{k})\cdot(\boldsymbol{k}\times\nabla_{\boldsymbol{k}})^\mu\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \tag{79}$$

を得る。これとノルムの式 (10) より、軌道角運動量の期待値の式 (15) が得られる。

問題

^{3}He の超流動相 B 相は（Balian-Werthamer）BW 相と考えられている。

$$\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{k} \tag{80}$$

の Cooper 対状態は合成角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}}$ の一重項状態であることを示せ。

(状態ベクトルが軌道とスピンの同時回転で不変 $\hat{R}_L\hat{R}_S|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$ であることを示せばいい。あるいは

$$\hat{J}^+|\Psi\rangle = 0, \quad \hat{J}^z|\Psi\rangle = 0$$

を示せば良い。)