

# BCS 理論に基づく超伝導状態での熱力学的物理量の導出

(作成日)2006/5/20  
物理講義室・改 管理人  
のまネコ(量産型)  
<http://shrcat.blog91.fc2.com/>

# 目次

1.背景・目的	1
2.BCS 理論	2
2.1 BCS 還元ハミルトニアン の導出について	2
2.2 平均場近似と対角化について	6
2.3 ギャップ関数・転移温度の導出	8
2.4 熱力学物理量の導出	11
3.ギャップ方程式の数値解法	15
3.1 数値計算方法の説明	15
4.結果	19
4.1 様々な金属のギャップ関数, 臨界磁場, 比熱の実験値	19
4.2 ギャップ方程式の数値計算結果	20
4.3 熱力学ポテンシャルの数値計算結果	21
4.4 臨界磁場の数値計算結果	22
4.5 エントロピーの数値計算結果	23
付録	26
参考文献	27

## 1.背景・目的

超伝導の歴史は、1911年に Kamerlingh-Onnes が特徴的な電気現象を発見したことに始まる。水銀を試料として用い、液体ヘリウムの温度まで冷却しながら電気抵抗を測定していったところ、4.2K で電気抵抗が突然ゼロになるという現象を発見しこの現象を「超伝導」と名づけた。水銀以外に錫や鉛などのような遷移金属でもそれらに固有な温度以下で超伝導を示すことが発見され、これら一群の物質は「超伝導体」と名づけられた。この超伝導体に固有な温度は転移温度あるいは臨界点と呼ばれる。Onnes は更に磁場下にある超伝導体の振る舞いを調べ、ある大きさ以上の磁場の下では、超伝導が破壊されることも実験的に見出した。この上限の磁場は臨界磁場と呼ばれ、温度の上昇とともにほぼ2次関数的に減少していくことが知られている。現象論ではなく、超伝導現象を電子の微視的振る舞いから理解しようとする試みもなされるようになった。1957年、Bardeen Cooper Schrieffer が結合した電子対の集合を記述する波動関数を案出し、超伝導の実験事実をすべて説明する理論を提出した。これは金属の超伝導に対する標準理論とみなされるもので本卒業研究でも中心核をなすものである、この理論は提案者の頭文字をとって「BCS 理論」と称されている。この成果によって、金属超伝導に関する微視的理論はほぼ完成されたと言われる。

本テキストの目的は BCS 理論を学びそれより導出されるギャップ方程式を数値的に解き、熱力学的物理量である。磁場、エントロピー、比熱の温度依存性を明らかにすることである。

## 2.BCS 理論

### 2.1BCS 還元ハミルトニアン の導出について

以下の手順を用いて還元ハミルトニアンを導出する。

- (A) 金属中には格子振動を媒介とした引力が働き得ることについて。
- (B) 電子間相互作用の第二量子化での表現について。

#### (A.1) 有効ポテンシャル (短距離型) の導出

外部電荷  $q(\vec{r})$  を与えたとき、電子のポテンシャルが  $\Delta U(r) = -e\Phi(\vec{r})$  だけ変化したとすると平衡状態では粒子数が一定となり化学ポテンシャルが  $\mu = \epsilon_F^0 = \epsilon_F(\vec{r}) - e\Phi(\vec{r})$  と書ける。  
( $\epsilon_F^0$  は  $T=0$  でのフェルミエネルギー  $\epsilon_F(\vec{r})$  は各点でのフェルミエネルギー) このとき電荷密度  $n(\vec{r})$  の変動は、 $\epsilon_F(\vec{r})$  の項に含まれる。電荷密度の変化を  $n(\vec{r}) = n_0 + \delta n(\vec{r})$  とし  $\epsilon_F(\vec{r})$  を具体的に書き下すと

$$\epsilon_F(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} [3\pi^2 (n_0 + \delta n(\vec{r}))]^{\frac{2}{3}}$$

よって外部電荷によるポテンシャル  $e\Phi(\vec{r})$  は  $e\Phi(\vec{r}) = \epsilon_F(\vec{r}) - \epsilon_F^0 \approx 2 \frac{\epsilon_F^0}{3n_0} \delta n(\vec{r})$

(マクローリン展開の1次まで計算)  $\therefore e\Phi(\vec{r}) = 2 \frac{\epsilon_F^0}{3n_0} \delta n(\vec{r}) \dots (2.1-1)$  (外部電荷のポテンシャル)

ポアソン方程式を作ると、 $\nabla^2 \Phi(\vec{r}) = -4\pi [q(\vec{r}) - e\delta(\vec{r})]$  (2.1-1)を用いてまとめると

$$\left(-\nabla^2 + \frac{6\pi e^2 n_0}{\epsilon_F^0}\right) \Phi(\vec{r}) = 4\pi q(\vec{r}) \quad \text{波数表示では、} \quad (k^2 + k_s^2) \Phi_k = 4\pi q_k \quad \left(k_s^2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{6\pi e_0^2 n_0}{\epsilon_F^0}\right)$$

また、有効ポテンシャルは外部ポテンシャル  $\Phi_k^{ext} = \frac{4\pi q_k}{k^2}$  を用いて  $\Phi_k = \frac{\Phi_k^{ext}}{\epsilon_k}$  と表せるので

誘電率は  $\epsilon(q) = 1 + \frac{k_s^2}{q^2}$  となる。

よって電荷分布を点電荷と仮定すると ( $q(\vec{r}) = Q\delta(\vec{r}) = \frac{Q}{\Omega} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ )

波空間での有効ポテンシャルは  $\Phi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \frac{4\pi Q}{k^2 + k_s^2}$  (5) このポテンシャルをフーリエ逆変換して実空間でのポテンシャルを導出する。

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} \Phi_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \frac{4\pi Q}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{k^2 + k_s^2} = \frac{4\pi Q}{(2\pi)^3} \int dk \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{k^2 + k_s^2} = \underline{\underline{Q \frac{e^{-k_s r}}{r}}}$$

遮蔽されたクーロンポテンシャル(湯川ポテンシャルともよばれる)が得られる。ここで  $k_s$  はトーマス・フェルミ波数で、遮蔽距離の目安となっている。

## (A.2) 格子振動による遮蔽

トーマス・フェルミ遮蔽のように系の誘電率を導出する。  
質量  $M$  と  $Ze$  の正電荷を持つ陽イオンの、電場  $\vec{E}$  の下での運動方程式は、

$$M \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = Ze \vec{E} \quad \text{である。今、電場が振動数 } \omega \text{ で振動するとすれば } \vec{x} \text{ は } \vec{x}(t) \sim e^{-i\omega t}$$

となるので上式に代入すると  $-M\omega^2 \vec{x} = Ze \vec{E}$  と表せる。

ここで、誘電率を  $\epsilon(\omega) \vec{E} = \vec{D} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} = \vec{E} \left(1 - \frac{NZ^2 e^2}{\omega^2 M}\right)$  ( $\vec{P}$  は分極  $\vec{P} = \frac{-NZ^2 e^2}{\omega^2 M} \vec{E}$ )

よって  $\epsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi NZ^2 e^2}{M} \frac{1}{\omega^2} \stackrel{\text{def}}{=} 1 - \frac{\Omega_P^2}{\omega^2}$  ( $\Omega_P$  プラズマ振動数)

### (A.3) 格子による電子間引力について

まず、金属の全誘電定数を(A.1)や(A.2)で求めた誘電関数を用いて表す。

今、電子系のみからなるポテンシャル  $\Phi^{ele}$  と陽イオン系のみから成るポテンシャル  $\Phi^{ion}$  それと外場ポテンシャル  $\Phi^{ext}$  を考えると有効ポテンシャル  $\Phi$  は  $\Phi = \Phi^{ext} + \Phi^{ele} + \Phi^{ion}$  と表せる。

また、 $\Phi^{ext} = \varepsilon \Phi$   $\varepsilon^{ele} \Phi = \Phi^{ext} + \Phi^{ion}$   $\varepsilon^{ion} \Phi = \Phi^{ext} + \Phi^{ele}$  の関係を定義すると

全誘電定数は  $\varepsilon = \varepsilon^{ele} + \varepsilon^{ion} - 1$  となる。

ここで、前述の遮蔽の計算結果より  $\varepsilon^{ele} = 1 + \frac{k_s^2}{q^2}$   $\varepsilon^{ion} = 1 - \frac{\Omega_P^2}{\omega^2}$  であるので

$$\varepsilon = 1 + \frac{k_s^2}{q^2} - \frac{\Omega_P^2}{\omega^2} = \left(1 + \frac{k_s^2}{q^2}\right) \left(1 - \frac{\omega_q^2}{\omega^2}\right) \quad \left(\text{ただし、} \omega_q = \frac{\Omega_P}{\sqrt{1 + \frac{k_s^2}{q^2}}}\right)$$

(A.1)~(A.3)より、2電子間の有効相互作用ポテンシャル  $v_{k,k'}^{eff}$  は

$$v_{k,k'}^{eff} = \frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \frac{4\pi e^2}{q^2} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_s^2} \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_q^2}$$

となり  $\omega = |\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}| < \hbar \omega_q$  のとき  $v_{k,k'}^{eff}$  の符号が負になり引力相互作用が働くことがわかる。

また、2電子のエネルギー授受は格子振動を媒介とするが格子振動によって電子に与えられるエネルギーの上限はデバイエネルギー  $\hbar \omega_D$  なので  $\omega = |\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}| \ll \hbar \omega_D$  の2電子間には引力が働くことが結論付けられる。

\*ここでの議論はあまり正確ではない。実際にはフォノンと電子との相互作用を二次摂動で扱う必要がある。

## (B.1) 電子の相互作用の項 $H_I$ を導出する

第二量子化(付録参照)を用いると2電子間の実空間でのハミルトニアンは一般的に

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int dr dr' \psi(r)_{\sigma}^{\dagger} \psi(r')_{\sigma'}^{\dagger} V(r-r') \psi(r')_{\sigma'} \psi(r)_{\sigma} \quad (2.1-2) \text{ と書ける。}$$

また、相互作用ポテンシャル

$$V(r-r') \text{ を } V(r-r') = \sum_q v(q) \exp(iq \cdot (r-r')) \text{ とフーリエ変換し}$$

デルタ関数の定義  $\frac{1}{\Omega} \int dr \exp(i(k-k') \cdot r) = \delta_{k,k'}$  を用いれば  $H_I$  は波数空間で

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{k, k', q} v(q) a_{k+q, \sigma}^{\dagger} a_{k-q, \sigma'}^{\dagger} a_{k', \sigma'} a_{k, \sigma}$$

ここで(A)の結論より2電子間の相互作用が短距離であることを用いると  $V(r-r') \approx g \delta(r-r')$  と書くことができる。(gは定数)

この結果は、波数空間では  $v(q)$  の波数依存性を無視することができることに対応する。

実空間で同じスピンの電子が同じ位置に来ることは出来ない(パウリの排他律)電子の固有状態が決定される。

また、電子対は全運動量がゼロの対を作ると、フェルミ面近傍で状態の組み合わせの数が多くなり最も有利である。これらの条件より  $(k, \uparrow)$ ,  $(-k, \downarrow)$  の電子対のみが残ることがわかる。

よって

$$2 \text{ 電子間の相互作用 } H_I \text{ は } H_I = -v_0 \sum_{k, k', q} ' a_{k+q, \uparrow}^{\dagger} a_{k-q, \downarrow}^{\dagger} a_{k', \downarrow} a_{k, \uparrow} \text{ となる。}$$

$(v(q) \approx -v_0 \quad |\xi| < \hbar \omega_D)$

以下のような仮定を基に、BCSは次のような還元ハミルトニアンを提案した。  
これをBCS還元ハミルトニアンと呼ぶ。

$$H_{BCS} = \sum_{k\sigma} \xi_k a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} - v_0 \sum_{k_1, k_2} ' a_{k_1, \uparrow}^{\dagger} a_{-k_1, \downarrow}^{\dagger} a_{-k_2, \downarrow} a_{k_2, \uparrow} \quad (\text{第一項は電子の運動エネルギー})$$

$$\text{ただし、} \xi_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \quad (k_1 = k+q, k_2 = k') \text{ であり}$$

$$\sum_{k_1, k_2} ' = \sum_{k_1, k_2} |\xi_{k_1}| < \hbar \omega_D, |\xi_{k_2}| < \hbar \omega_D \text{ を意味するものとする。} \quad (\omega_D \text{ はデバイ周波数})$$

## 2.2 平均場近似と対角化について

(A) 平均場近似の説明

(B) 平均場近似を用いたハミルトニアンに対角化(ボゴリューボフ・バラティン変換)

### (A.1)

導出されたハミルトニアンに「平均場近似」と呼ばれる近似を適用する。

まず、電子対演算子  $\hat{B}_k^\dagger, \hat{B}_k$  を定義しておく

$$\hat{B}_k^\dagger \stackrel{\text{def}}{=} \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \quad \hat{B}_k \stackrel{\text{def}}{=} \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\uparrow}$$

$\hat{B}_k^\dagger, \hat{B}_k$  は電子対の生成・消滅を表している。

今、考えている系は  $|\xi_k| < \hbar\omega_D$  の非常に狭い範囲のエネルギー状態で議論しているが、その範囲の電子数は総電子数の  $\frac{\hbar\omega_D}{\varepsilon_F}$  ( $\sim \frac{1}{100}$ ) と非常に多い。したがって平均場近似がほとんど正確に成り立つと言える。

よって、電子対の量子状態は平均値  $\langle \hat{B}_k^\dagger \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Xi} \text{Tr}[\exp(-\beta(H - \mu N) \hat{B}_k^\dagger)]$  にほぼ等しく平均値からのずれ  $\delta \hat{B}_k^\dagger, \delta \hat{B}_k$  を微小量として、その高次項を無視する近似が妥当となる。

以上のような近似方法を「平均場近似」と呼ぶ。

### (B.1)

平均場近似によってハミルトニアンの相互作用項を取り扱う。

今、ハミルトニアンは対演算子を用いて  $\hat{H}_{BCS} = \sum_{k\sigma} \xi_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} - v_0 \sum_{k_1, k_2} ' \hat{B}_{k_1}^\dagger \hat{B}_{k_2}$  となる。

上式に  $\hat{B}_{k_1}^\dagger = \langle \hat{B}_{k_1}^\dagger \rangle + \delta \hat{B}_{k_1}^\dagger$   $\hat{B}_{k_2} = \langle \hat{B}_{k_2} \rangle + \delta \hat{B}_{k_2}$  を代入し  $\delta \hat{B}_{k_1}^\dagger, \delta \hat{B}_{k_2}$  の二次以降の項を無視して平均場近似によるハミルトニアン

$$\hat{H}_{BCS} \approx \sum_k \xi_k (\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{k\downarrow} + \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-k\uparrow}) - \sum_{k_1} ' (\Delta^* \hat{a}_{-k_1\downarrow} \hat{a}_{k_1\uparrow} + \Delta \hat{a}_{k_1\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k_1\downarrow}^\dagger) + \frac{1}{2} \sum_{k_1} ' (\Delta^* \langle \hat{B}_{k_1} \rangle + \Delta \langle \hat{B}_{k_1}^\dagger \rangle)$$

が得られる。ただし、 $\Delta^* \stackrel{\text{def}}{=} -v_0 \sum_{k_2} ' \langle \hat{B}_{k_2}^\dagger \rangle$   $\Delta \stackrel{\text{def}}{=} -v_0 \sum_{k_2} ' \langle \hat{B}_{k_2} \rangle$  という量  $\Delta (\Delta^*)$  を定義した。

しかし、平均場近似によって得られたハミルトニアンには、粒子数演算子で表せない部分(非対角項)が存在が存在していて、ハミルトニアンが対角的になっていないこれを解消するためにボゴリューボフ・バラティン変換を行う。



[ボゴリューボフ・バラティン変換]

$$\begin{aligned}
 \hat{\gamma}_{k\uparrow}^\dagger &\stackrel{\text{def}}{=} u_k^* \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger - v_k^* \hat{a}_{-k\downarrow} & \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger &= u_k \hat{\gamma}_{k\uparrow}^\dagger + v_k^* \hat{\gamma}_{-k\downarrow} \\
 \hat{\gamma}_{k\uparrow} &\stackrel{\text{def}}{=} u_k \hat{a}_{k\uparrow} - v_k \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger & \hat{a}_{k\uparrow} &= u_k^* \hat{\gamma}_{k\uparrow} + v_k \hat{\gamma}_{-k\downarrow}^\dagger \\
 \hat{\gamma}_{-k\downarrow} &\stackrel{\text{def}}{=} u_k \hat{a}_{-k\downarrow} + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger & \hat{a}_{-k\downarrow} &= u_{-k\downarrow}^* \hat{\gamma}_{-k\downarrow} - v_k \hat{\gamma}_{-k\uparrow}^\dagger \\
 \hat{\gamma}_{-k\downarrow}^\dagger &\stackrel{\text{def}}{=} u_k^* \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger + v_k^* \hat{a}_{k\uparrow} & \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger &= u_k \hat{\gamma}_{-k\downarrow}^\dagger - v_k^* \hat{\gamma}_{k\uparrow}
 \end{aligned}
 \quad (\text{逆に解く}) \Rightarrow$$

[交換関係]  $\{\hat{\gamma}_{k\sigma}, \hat{\gamma}_{k'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'}$  ,  $\{\hat{\gamma}_{k\sigma}, \hat{\gamma}_{k'\sigma'}\} = \{\hat{\gamma}_{k\sigma}^\dagger, \hat{\gamma}_{k'\sigma'}^\dagger\} = 0$  を満たすことは容易に示せる。

つまり、 $\hat{\gamma}$  ,  $\hat{\gamma}^\dagger$  はフェルミ統計に従う粒子の生成・消滅演算子と考えることができる。

この演算子によって定義される粒子をボゴリューボフ準粒子と呼ぶことがある。

よって、ハミルトニアンに逆変換を代入すると

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{BCS} &= \sum_k [2\xi_k |v_k|^2 - (\Delta^* u_k^* v_k + \Delta u_k v_k) + \frac{1}{2} (\Delta^* \langle \hat{B}_k \rangle + \Delta \langle \hat{B}_k^\dagger \rangle)] \\
 &+ \sum_k' (\xi_k (|u_k|^2 - |v_k|^2) + \Delta^* u_k^* v_k + \Delta u_k v_k) (\hat{\gamma}_{k\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{k\uparrow} + \hat{\gamma}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-k\downarrow}) + \sum_k' (2\xi_k u_k v_k - \Delta u_k^2 + \Delta^* v_k^2) \hat{\gamma}_{k\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-k\downarrow}^\dagger \\
 &+ \sum_k' (2\xi_k u_k^* v_k^* - \Delta^* u_k^{*2} + \Delta v_k^2) \hat{\gamma}_{-k\downarrow} \hat{\gamma}_{k\uparrow}
 \end{aligned}$$

となる。(ただし、変換の際和の変数を  $k_1$  から  $k$  としてまとめた。)

3,4項は粒子数演算子の形で表せないので係数を0とする条件から、パラメータ  $u_k$  ,  $v_k$  を決定する。

これらの項の係数を0とすることでハミルトニアンを対角化する。

$$\text{第3項} = 2\xi_k u_k v_k - \Delta u_k^2 + \Delta^* v_k^2 = 0$$

これより、BCS 試行関数の未知パラメータ  $u_k$  ,  $v_k$  は

$$|u_k|^2 = \frac{E_k + \xi_k}{2 E_k} \quad |v_k|^2 = \frac{E_k - \xi_k}{2 E_k} \quad \Delta^* u_k^* v_k = \frac{|\Delta|^2}{2 E_k} \quad \Delta u_k v_k^* = \frac{|\Delta|^2}{2 E_k}$$

$u_k$  ,  $v_k$  について二次方程式の解のうち基底エネルギーが低くなる方を選んだ。

また、対角化されたハミルトニアンは上記の  $u_k$  ,  $v_k$  の関係式を用いて

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_k \left[ \xi_k - \left( \frac{2\xi_k^2 + |\Delta|^2}{2 E_k} \right) \right] + \sum_k E_k (\hat{\gamma}_{k\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{k\uparrow} + \hat{\gamma}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-k\downarrow}) \quad \text{と表される。}$$

第1項はボゴリューボフ準粒子の基底状態、第2項はボゴリューボフ準粒子の運動エネルギーとなっている。(ただし、 $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2}$ )

## 2.3 ギャップ関数・転移温度の導出

- (A) 一般の温度でのギャップ方程式の導出
- (B) 0度 or  $T_c$  近傍でのギャップ関数の温度依存性について
- (C) 転移温度  $T_c$  の導出, 普遍定数の導出

### (A.1)

今、ギャップは  $\Delta = -v_0 \sum_k' \langle \hat{B}_{k_2} \rangle$  と与えられている。

$\langle \hat{B}_{k_2} \rangle$  (対演算子の期待値)のボゴリューボフ準粒子の統計性を考えることによりギャップ方程式を導出する。

#### [フェルミ粒子の統計性]

(大正準分配関数)  $\Xi = \text{Tr} \left[ \exp \left\{ \frac{-(\hat{H} - \mu \hat{N})}{k_B T} \right\} \right]$

(フェルミ分布関数)  $f_F(E_k) \stackrel{\text{def}}{=} \langle \hat{N} \rangle = -k_B T \frac{\partial \Xi}{\partial \mu} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_k}{k_B T}\right)}$

ただし、 $\mu$  : 化学ポテンシャル       $N$  : 粒子数      である。

ボゴリューボフ準粒子はフェルミ統計に従うので

$$\langle \hat{B}_k \rangle = \langle \hat{a}_{-k\downarrow} \hat{a}_{k\downarrow} \rangle = u_k^* v_k (1 - \langle \hat{y}_{k\uparrow}^\dagger \hat{y}_{k\uparrow} \rangle - \langle \hat{y}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{y}_{-k\downarrow} \rangle) = u_k^* v_k \{1 - 2 f_F(E_k)\}$$

上記の式に前述の  $u_k^* v_k$  を代入し、フェルミ分布関数を  $\tanh$  を用いて書き換えると  
ギャップ方程式は

$$|\Delta| = v_0 \sum_k' \frac{|\Delta|}{2 E_k} \tanh\left(\frac{E_k(T)}{2 k_B T}\right) \quad \text{と表される。} \quad (|\Delta(T)| \stackrel{\text{def}}{=} |\Delta| \text{ とする})$$

(B.1)

零度や  $T_c$  近傍ではギャップ方程式を解析的に解くことができる。

(i) 低温領域でのギャップ方程式

まず、(A)で求めたギャップ関数の状態和を積分に置きなおす。

<b>[状態和→積分]</b>	
$\sum_k' F(\xi_k) \frac{\Delta n}{\Delta \xi} \Delta \xi = \int_{-\hbar \omega_D}^{\hbar \omega_D} F(\xi) \rho_3(\xi) d\xi$	
(3次元での状態密度)	$\rho_3(\xi) = \frac{V}{(2\pi \hbar)^3} 2\pi (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\xi} \sim \sqrt{\xi}$ <p style="text-align: right; margin-right: 50px;">(<math> \xi  &lt; \hbar \omega_D</math> では一次以降の近似が0)</p>
よって、状態密度は $\rho_3(\xi) \approx \rho_3(0)$ とみなせる。	

よって、ギャップ方程式は

$$|\Delta| = v_0 \rho_3(0) \int_{-\hbar \omega_D}^{\hbar \omega_D} \frac{|\Delta|}{2\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}{2k_B T}\right) d\xi \quad (*) \quad \text{となる。}$$

$\tanh$  を  $\exp$  で置き換え部分積分を実行することにより

$$|\Delta| = |\Delta_0| \left\{ 1 - \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{|\Delta_0|}} \exp\left(\frac{-|\Delta_0|}{k_B T}\right) \right\} \quad \text{となる。}$$

ただし、ここで零度のギャップ関数  $|\Delta(0)| \stackrel{\text{def}}{=} |\Delta_0| = 2\hbar \omega_D \exp\left(-\frac{1}{\rho_3(0) U_0}\right)$  を用いた。

(ii)  $T_c$  近傍でのギャップ関数

(\*)において  $\tanh$  を級数で表し計算することにより

$$|\Delta| = |\Delta_0| \exp(\gamma) \sqrt{\frac{8}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)} \quad \text{となる。} \quad \text{ただし、}\gamma \text{ はオイラーの定数 (付録参照)}$$

(C.1)

転移温度  $T_c$  をギャップ方程式(\*)に代入すると  $|\Delta(T_c)|=0$  なので

$$\frac{1}{v_0 \rho_3(0)} = \int_0^{\hbar \omega_D} \frac{1}{\xi} \tanh\left(\frac{\xi}{2k_B T_c}\right) d\xi \quad \text{となり解析的に計算できる。}$$

$$\underline{k_B T_c = \frac{2 \exp(\gamma) \hbar \omega_D}{\pi} \exp\left(\frac{-1}{\rho_3(0) v_0}\right)}$$

上記の転移温度は零度のギャップ関数を用いて

$$k_B T_c = \frac{\exp(\gamma)}{\pi} |\Delta_0| \quad \text{と書けるので両辺を } |\Delta_0| \text{ で割ると}$$

$$\underline{\frac{k_B T_c}{|\Delta_0|} = \frac{\exp(\gamma)}{\pi} \doteq 0.567} \quad \text{また、この逆数} \quad \underline{\frac{|\Delta_0|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{\exp(\gamma)} \doteq 1.76}$$

これらは物質によらない普遍定数であり、この普遍定数を予言できたことは、BCS理論の顕著な成果の一つである。

## 2.4 熱力学物理量の導出

(A) 大正準分配関数の導出

(B) 熱力学ポテンシャル、磁場、エントロピー、比熱の導出

(A.1)

平均場近似で得られたハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_k \left[ \xi_k - \sqrt{\xi_k^2 + |A|^2} + \frac{|A|}{2\sqrt{\xi_k^2 + |A|^2}} \tanh\left(\frac{\beta\sqrt{\xi_k^2 + |A|^2}}{2}\right) \right] + \sum_k \sqrt{\xi_k^2 + |A|^2} (\hat{n}_{k\uparrow} + \hat{n}_{-k\downarrow})$$

ただし、 $\hat{n}_{k\uparrow} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\gamma}_{k\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{k\uparrow}$ ,  $\hat{n}_{-k\downarrow} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\gamma}_{-k\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-k\downarrow}$  よって、大正準分配関数は

$$\Xi = \text{Tr}[\exp(-\beta \hat{H})] = \exp\left(-\beta \sum_k \left[ \xi_k - E_k + \frac{|A|^2}{2E_k} \tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right) \right]\right) \prod_k (1 + \exp(-\beta E_k))$$

となる。(  $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |A|^2}$  )

(B.1) 熱力学ポテンシャルの導出

よって、超伝導状態の熱力学ポテンシャルは定義より

$$\Omega_S = -k_B T \ln[\Xi] = \sum_k \left[ \xi_k - E_k + \frac{|A|^2}{2E_k} \tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right) \right] - \frac{2}{\beta} \sum_k \ln[1 + \exp(-\beta E_k)]$$

となる。また、 $|A|=0$  と置くことで常伝導状態の熱力学ポテンシャルも求まる。

$$\Omega_N = \sum_k (\xi_k - |\xi_k|) - \frac{2}{\beta} \sum_k \ln[1 + \exp(-\beta |\xi_k|)]$$

解析的に計算するために  $\Omega_S - \Omega_N$  の状態和を積分に書き直す。

$$\begin{aligned} \Omega_S - \Omega_N &= \frac{|A|^2}{U_0} - 2\rho_3(0) \int_0^{\hbar\omega_D} (\sqrt{\xi^2 + |A|^2} - \xi) d\xi - \frac{4\rho_3(0)}{\beta} \int_0^{\hbar\omega_D} \ln[1 + \exp(-\beta\sqrt{\xi^2 + |A|^2})] d\xi \\ &\quad + \frac{4\rho_3(0)}{\beta} \int_0^{\hbar\omega_D} \ln[1 + \exp(-\beta\xi)] d\xi \end{aligned}$$

(i) 低温領域での熱力学ポテンシャル

$$\Omega_S(T) \approx \Omega_N(0) - \frac{1}{2} \rho_3(0) |A|^2 - 2\rho_3(0) \sqrt{\frac{2\pi|A_0|}{\beta^3}} \exp(\Delta_0) \quad [\Omega_N(0) = \frac{1}{2} \rho_3(0) |A|^2]$$

(ii)  $T_c$  近傍での熱力学ポテンシャル

$$\Omega_S(T) \approx \Omega_N(T) - \frac{4\pi^2 \rho_3(0)}{7\beta^{2\zeta(3)}} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2 \quad [\Omega_N(T) = \frac{1}{2} \rho_3(0) |A|^2 - \frac{\pi^2}{3} \rho_3(0) (k_B T)^2]$$

## (B.2) 熱力学的臨界磁場の導出

臨界磁場と前述の熱力学ポテンシャルの関係は

$$\Omega_S(T) - \Omega_N(T) = -\frac{1}{8\pi} H_c^2(T) \quad \text{よって}$$

$$H_c^2(T) = 8\pi \sum_k' (E_k - |\zeta_k|) + \frac{2}{\beta} \sum_k' \ln \left[ \frac{1 + \exp(-E_k \beta)}{1 + \exp(-|\zeta_k| \beta)} \right] - |A|^2 \sum_k' \frac{\tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right)}{2 E_k}$$

状態和を積分に書き直すと

$$H_c^2(T) = 16\pi \rho_3(0) \int_0^{\hbar\omega_D} (\sqrt{\zeta^2 + |A|^2} - \zeta) d\zeta + \frac{32\pi \rho_3(0)}{\beta} \int_0^{\hbar\omega_D} \ln \left[ \frac{1 + \exp(-\beta \sqrt{\zeta^2 + |A|^2})}{1 + \exp(-\beta \zeta)} \right] d\zeta \\ - 16\pi \rho_3(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{|A|^2}{2\sqrt{\zeta^2 + |A|^2}} \tanh\left(\frac{\beta \sqrt{\zeta^2 + |A|^2}}{2}\right) d\zeta$$

(i) 低温領域での臨界磁場

$$H_c(T) \approx \sqrt{4\pi \rho_3(0) |A_0|^2} \left[ 1 - \frac{\exp(2\gamma)}{3} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \right]$$

(ii)  $T_c$  近傍での臨界磁場

$$H_c(T) \approx \sqrt{\frac{8}{7\zeta(3)}} \exp(\gamma) H_c(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)$$

### (B.3) 超伝導状態でのエントロピーの導出

エントロピーは定義式より

$$S_S(T) = -\frac{\partial \Omega_S(T)}{\partial T} = -\frac{2|\Delta|}{U_0} \frac{\partial |\Delta|}{\partial T} - \sum_k \left[ \frac{|\Delta|}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} \frac{\partial |\Delta|}{\partial T} + 2 \right]$$

状態和を積分に書き換えると

$$S_S(T) = -4k_B \rho_3(0) \int_0^{\hbar\omega_D} (1-f_F) \ln[1-f_F] + f_F \ln[f_F] d\xi$$

今、準粒子間の相互作用を無視した近似をとっているので自由フェルミ粒子系のエントロピーに一致している。

#### (i) 低温領域でのエントロピー

$$S_S(T) \approx 3k_B \rho_3(0) \sqrt{2\pi k_B T |\Delta_0|} \left(1 + \frac{2|\Delta_0|}{3k_B T}\right) \exp\left(-\frac{|\Delta_0|}{k_B T}\right)$$

#### (ii) $T_c$ 近傍でのエントロピー

$$S_S(T) \approx S_N(T) - \frac{8\pi^2 \rho_3(0) k_B^2 T_c}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \quad \left[ S_N(T) = \frac{2\pi^2 \rho_3(0) k_B^2 T}{3} \right]$$

## (B.4) 超伝導状態の定積比熱の導出

定積比熱はエントロピーを微分することにより得られる。

$$C_V^S = T \frac{\partial S_S(T)}{\partial T} = \frac{2}{T} \sum_k \left( \frac{-\partial f_F(E_k)}{\partial E_k} \right) (\xi_k^2 + |\Delta|^2) - \frac{T}{2} \frac{\partial |\Delta|^2}{\partial T}$$

(i) 低温領域での定積比熱

$$C_V^S \approx 2|\Delta_0|^2 \rho_3(0) \sqrt{\frac{2\pi|\Delta_0|}{k_B}} T^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{|\Delta_0|}{k_B T}\right)$$

(ii)  $T_c$  近傍での定積比熱

$$C_V^S \approx C_V^N(T) + \frac{8\pi^2 \rho_3(0) k_B^2}{7\zeta(3)} T \quad (C_V^N(T) = \frac{2}{3} (\pi k_B)^2 \rho_3(0) T)$$

超伝導は二次の相転移なので超伝導相の比熱と常伝導相の比熱にはギャップが生じる  
それは上式より  $\Delta C_V(T_c) = C_V^S - C_V^N = \frac{8\pi^2 \rho_3(0) k_B^2}{7\zeta(3)} T_c$  となることが分かる。

(第二・第三の普遍定数について)

$C_V^N(T_c) = \frac{2}{3} (\pi k_B)^2 \rho_3(0) T_c$  で  $\Delta C_V(T_c)$  を割ると、

$$\frac{\Delta C_V(T_c)}{C_V^N(T_c)} = \frac{12}{7\zeta(3)} \doteq 1.43 \quad (\text{第二の普遍定数})$$

$T=0$  における臨界磁場  $H_c(0)$  を  $T_c C_V^N(T_c)$  で割ると

$$\frac{H_c(0)}{T_c C_V^N(T_c)} = \frac{6}{\pi} \left( \frac{|\Delta_0|}{k_B T_c} \right)^2 = \frac{6\pi}{e^{2\gamma}} \doteq 5.94 \quad (\text{第三の普遍定数})$$

ただし、式変形の途中で第一の普遍定数  $\frac{|\Delta_0|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{e^\gamma}$  を用いた。

これらの普遍定数も、超伝導のミクロな理論としての BCS 理論から得られる自明でない成果の一つである。



### 3.ギャップ方程式の数値解法

#### 3.1 数値計算方法の説明

(A) ニュートン法について

(B) ギャップ関数、臨界磁場、エントロピー、定積比熱の無次元化

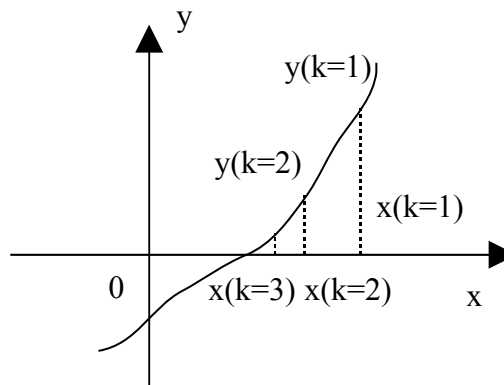
(A.1)

ギャップ方程式を解くためにニュートン法を用いた。

#### [ニュートン法]

適当な値  $x_1$  から出発して ( $k=1,2,\dots$ ) によって精度を高めていく。次式は、点  $(x_k, y_k)$  において、曲線  $y=f(x)$  の接線を引き、x 軸との交点を  $x_{k+1}$  とすることを意味する。

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$



誤差範囲 ( $x_{k+1} - x_k$ ) は  $10^{-6}$  として計算を行った。

## (B.1) ギャップ関数の無次元化

2.3-(B.1) で導出したギャップ方程式を  $\xi = |A_0|x$  ,  $\delta = \frac{\Delta}{|A_0|}$  ,  $t = \frac{T}{T_c}$

### [弱結合近似]

弱結合近似・・・フェルミ準位エネルギーに比べて、有効引力ポテンシャルが十分小さいと考えられる時に妥当となる近似

$$|A_0| = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh\left(\frac{1}{\rho_3(0)U_0}\right)} \approx 2\hbar\omega_D \exp\left(\frac{-1}{\rho_3(0)U_0}\right) \quad (\because 1 \gg \rho_3(0)U_0)$$

$$\therefore U_0\rho_3(0) = \frac{1}{\ln\left[\frac{2\hbar\omega_D}{|A_0|}\right]}$$

これらのパラメータを用いてギャップ方程式を無次元化する。

$$\delta = \frac{\delta}{\ln\left[\frac{2\hbar\omega}{|A_d|}\right]} \int_0^{\frac{\hbar\omega}{|A_0|}} \frac{1}{\sqrt{x^2 + \delta^2}} \tanh\left(\frac{\pi e^{-\gamma} \sqrt{x^2 + \delta^2}}{2t}\right) dx$$

また、零度と  $T_c$  近傍での展開式は

$$(T \approx 0) \quad \frac{|\Delta|}{|A_0|} = 1 - \sqrt{2} e^{\gamma} t \exp\left(-\frac{\pi e^{-\gamma}}{t}\right)$$

$$(T \approx T_c) \quad \frac{|\Delta|}{|A_0|} = e^{\gamma} \sqrt{\frac{8(1-t)}{7\zeta(3)}} \quad \text{と無次元化される。} \quad (\gamma \doteq 0.5772, \zeta(3) \doteq 1.202 \text{ 付録参照})$$

数値積分では  $\frac{\hbar\omega}{|A_d|} = 10$  , 刻み幅を  $10^{-4}$  として計算を行った。

同様にして以下の物理量に対しても無次元化を行う

## (B.2) 熱力学ポテンシャルの無次元化

$$\frac{\Omega_S(T) - \Omega_N(0)}{\Omega_N(0)} = 4 \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{4d}} x - \sqrt{x^2 + \delta^2} + \frac{\delta^2}{2\sqrt{x^2 + \delta^2}} \tanh\left(\frac{\pi e^{-\gamma} \sqrt{x^2 + \delta^2}}{2t}\right) - \frac{2te^\gamma}{\pi} \ln\left[1 + \exp\left(\frac{-\pi e^{-\gamma} \sqrt{x^2 + \delta^2}}{t}\right)\right]$$

(展開式)

$$(T \approx 0) \quad \frac{\Omega_S(T) - \Omega_N(0)}{\Omega_N(0)} = -\left[1 + 4\sqrt{2\pi\left(\frac{te^\gamma}{\pi}\right)^3} \exp\left(\frac{-\pi}{e^\gamma t}\right)\right]$$

$$(T \approx T_c) \quad \frac{\Omega_S(T) - \Omega_N(0)}{\Omega_N(0)} = -\frac{2}{3} e^\gamma t^2 - \frac{8e^{2\gamma}}{7\zeta(3)} (1-x)^2$$

## (B.3) 臨界磁場の無次元化

$$\left[\frac{H_c(T)}{H_c(0)}\right]^2 = 4 \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{4d}} \sqrt{x^2 + \delta^2} - x + \frac{2te^\gamma}{\pi} \ln\left[\frac{1 + \exp\left(-\pi e^{-\gamma} \frac{\sqrt{x^2 + \delta^2}}{t}\right)}{1 + \exp\left(\frac{-\pi x e^{-\gamma}}{t}\right)}\right] - \frac{\delta^2}{2\sqrt{x^2 + \delta^2}} \tanh\left(\frac{\pi e^{-\gamma} \sqrt{x^2 + \delta^2}}{2t}\right) dx$$

(展開式)

$$(T \approx 0) \quad \frac{H_c(T)}{H_c(0)} = 1 - \frac{e^{2\gamma}}{3} t^2$$

$$(T \approx T_c) \quad \frac{H_c(T)}{H_c(0)} = \sqrt{\frac{8}{7\zeta(3)}} e^\gamma (1-t)$$

#### (B.4) エントロピーの無次元化

$$X \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\pi}{e^\gamma} \frac{\sqrt{x^2 + \delta^2}}{t} \text{ として}$$

$$\frac{S_S(T)}{C_N(T_c)} = -\frac{6}{e^\gamma \pi} \int_0^{\frac{\hbar \omega_p}{|A_0|}} (1 + \exp(X))^{-1} e^X \ln \left[ \frac{e^X}{(1+e^X)^2} \right] dx$$

(展開式)

$$(T \approx 0) \quad \frac{S_S(T)}{C_N(T_c)} = \frac{9\sqrt{2}e^\gamma t}{2e^\gamma \pi} \left(1 + \frac{2\pi}{3e^\gamma}\right) \exp\left(\frac{\pi}{e^\gamma t}\right)$$

$$(T \approx T_c) \quad \frac{S_S(T)}{C_N(T_c)} = t - \frac{12}{7\zeta(3)}(1-t)$$

#### (B.5) 比熱

比熱は無次元化したエントロピーを数値微分して算出した。

$$\frac{C_S(T)}{C_N(T_c)} = T \frac{\partial}{\partial T} \frac{S_S(T)}{C_N(T_c)}$$

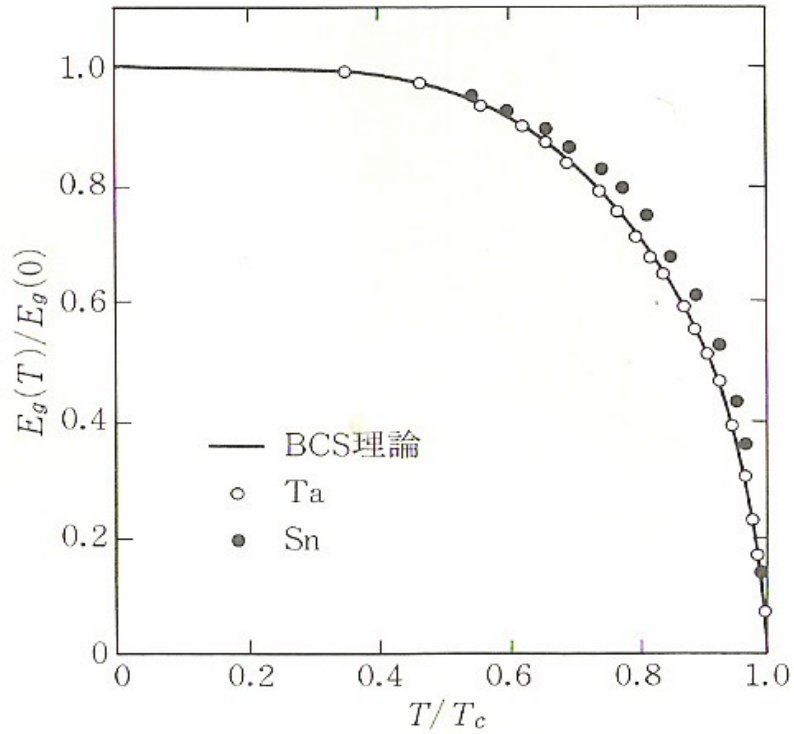
(展開式)

$$(T \approx 0) \quad \frac{C_S(T)}{C_N(T_c)} = \frac{3\sqrt{2}\pi}{e^\gamma \pi} \left(\frac{\pi}{te^\gamma}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{-\gamma}{e^\gamma t}\right)$$

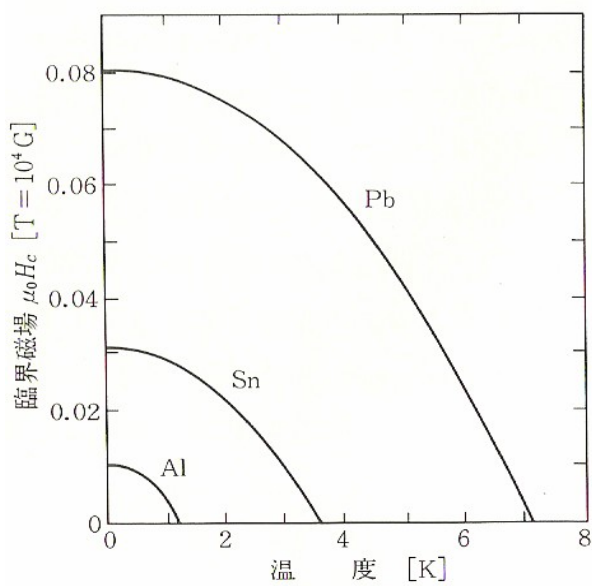
$$(T \approx T_c) \quad \frac{C_S(T)}{C_N(T_c)} = \left(1 + \frac{12}{7\zeta(3)}\right)t$$

## 4.結果

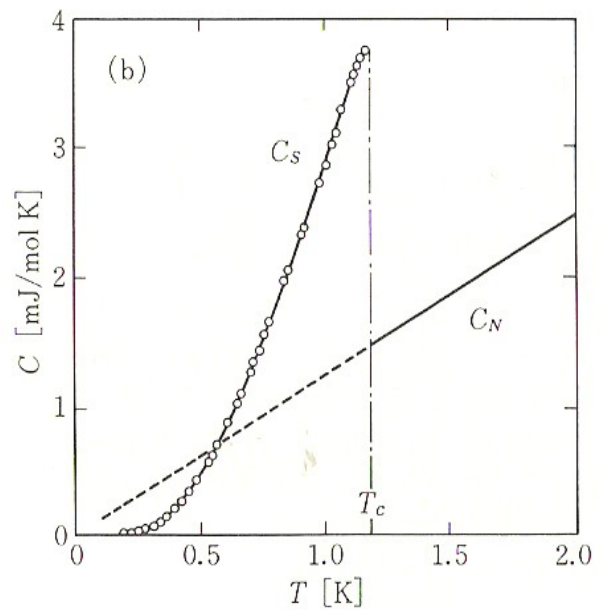
### 4.1 様々な金属のギャップ関数、臨界磁場、比熱の実験値



タンタル、スズのギャップ関数[1]

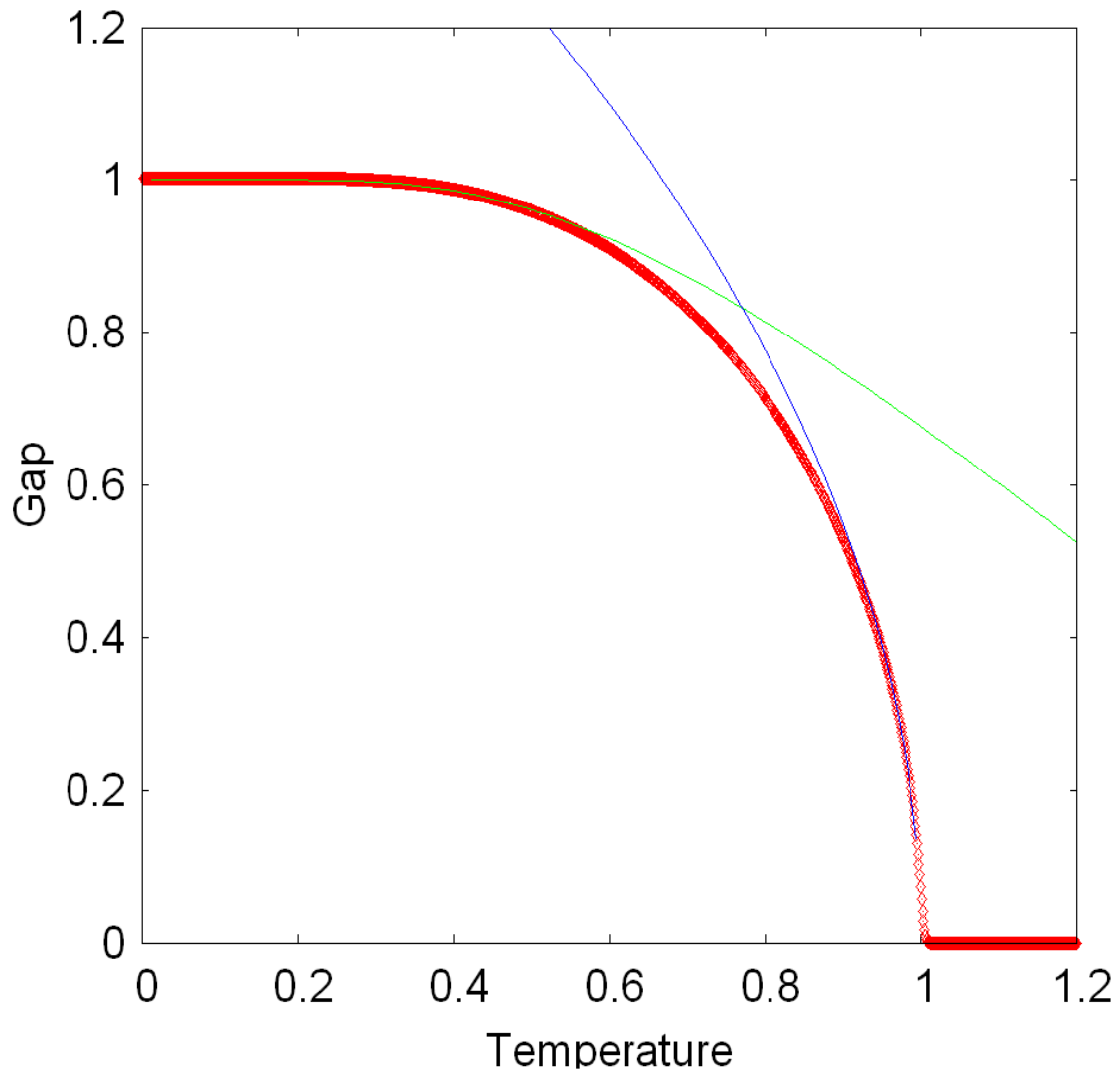


鉛、スズ、アルミニウムの臨界磁場[1]



アルミニウムの超伝導、常伝導状態の比熱[1]

## 4.2 ギャップ方程式の数値計算結果



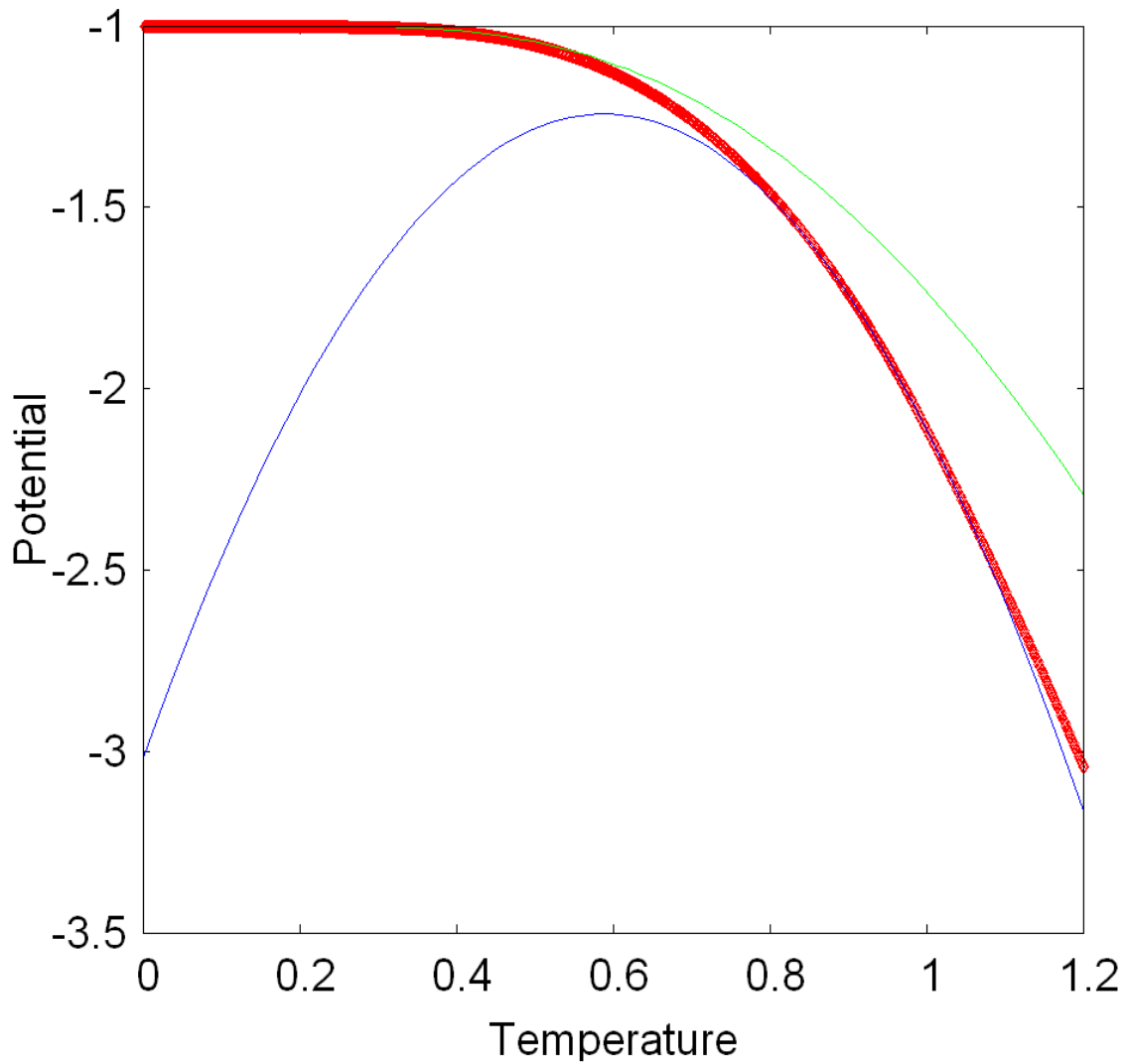
[横軸:  $T/T_c$  縦軸:  $\Delta/\Delta_0$ ]

(展開式)

緑の曲線: ( $T \approx 0$ )  $\frac{|\Delta|}{|\Delta_0|} = 1 - \sqrt{2e^{\gamma}t} \exp\left(\frac{-\pi}{e^{\gamma}t}\right)$

青の曲線: ( $T \approx T_c$ )  $\frac{|\Delta|}{|\Delta_0|} = e^{\gamma} \sqrt{\frac{8(1-t)}{7\zeta(3)}}$  [t = T/Tc]

### 4.3 熱力学ポテンシャルの数値計算結果

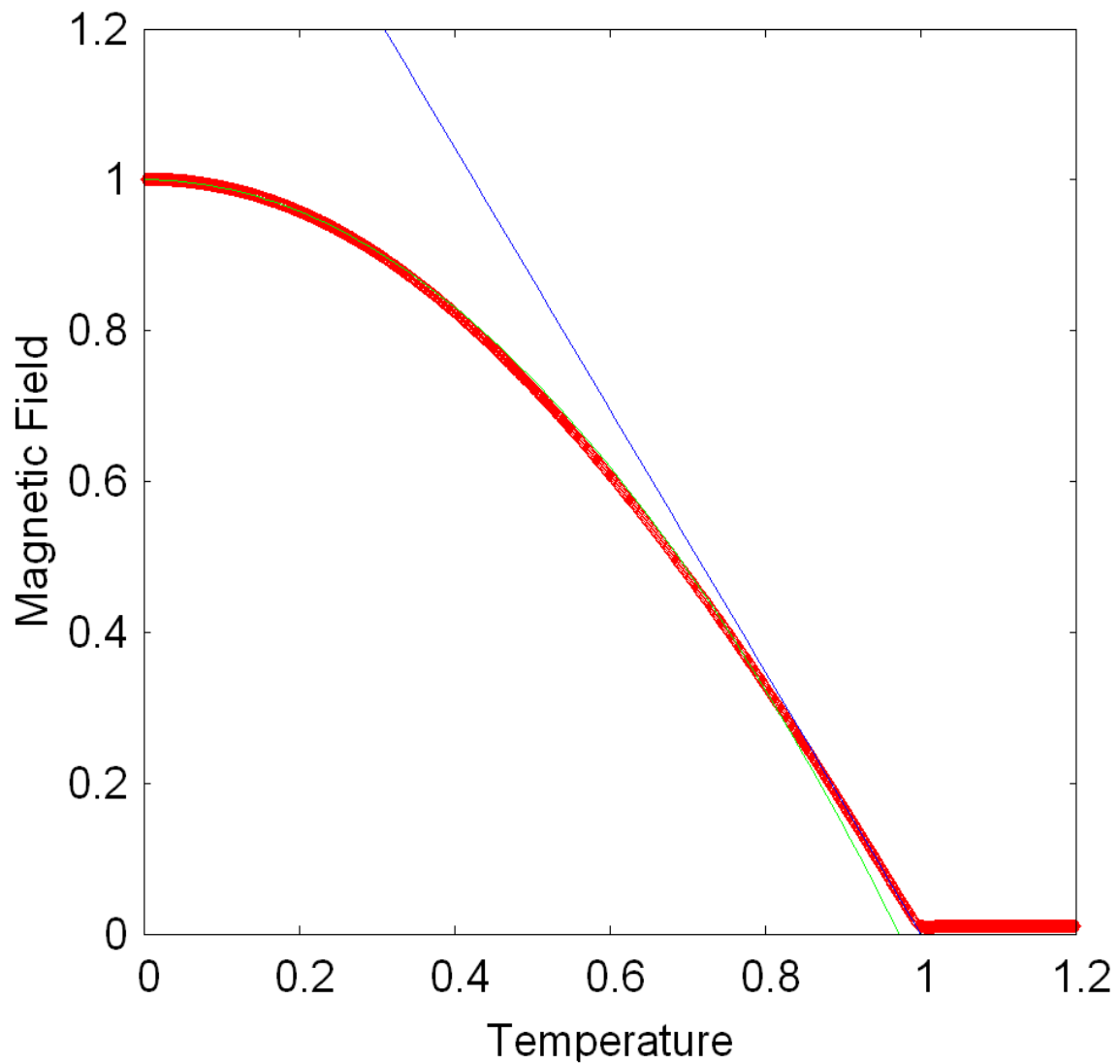


[横軸:  $T/T_c$  縦軸:  $(\Omega_S(T) - \Omega_N(0)) / \Omega_N(0)$ ]

緑の曲線: ( $T \approx 0$ ) 
$$\frac{\Omega_S(T) - \Omega_N(0)}{\Omega_N(0)} = -\left[1 + 4\sqrt{2\pi\left(\frac{e^\gamma t}{\pi}\right)^3 \exp\left(\frac{-\pi}{te^\gamma}\right)}\right]$$

青の曲線: ( $T \approx T_c$ ) 
$$\frac{\Omega_S(T) - \Omega_N(0)}{\Omega_N(0)} = \frac{-2}{3} e^\gamma t^2 - \frac{8 e^{2\gamma}}{7\zeta(3)} (1-t)^2$$

#### 4.4 臨界磁場の数値計算結果



[横軸:  $T/T_c$  縦軸:  $H_c(T)/H_c(0)$ ]

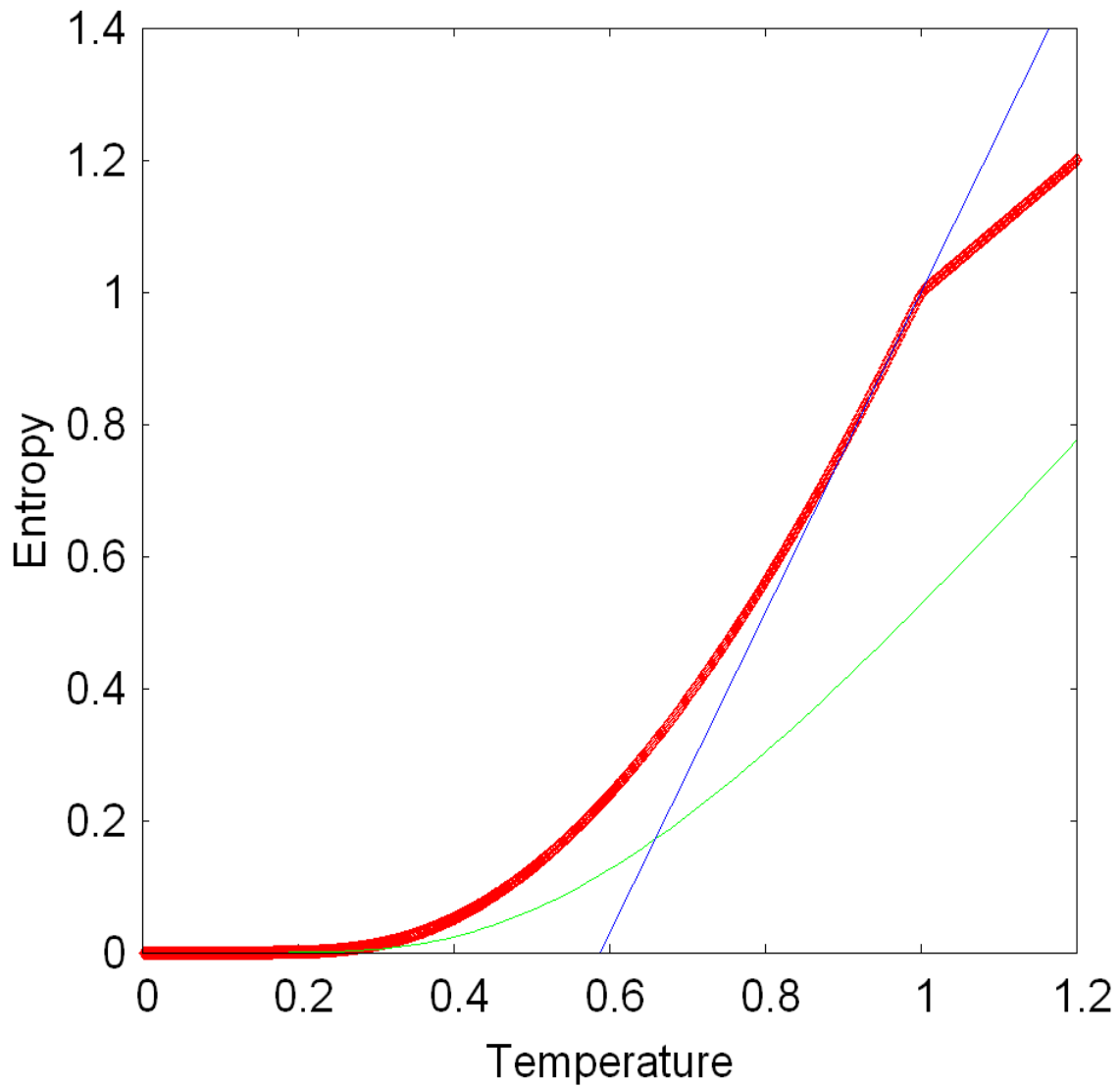
緑の曲線: ( $T \approx 0$ )  $\frac{H_c(T)}{H_c(0)} = 1 - \frac{e^{2\gamma}}{3} t^2$

青の曲線: ( $T \approx T_c$ )  $\frac{H_c(T)}{H_c(0)} = \sqrt{\frac{8}{7\zeta(3)}} e^{\gamma(1-t)}$

零度近傍では、 $t$ の二次関数、 $T_c$ 近傍では $t$ の一次関数である。



## 4.5 エントロピーの数値計算結果

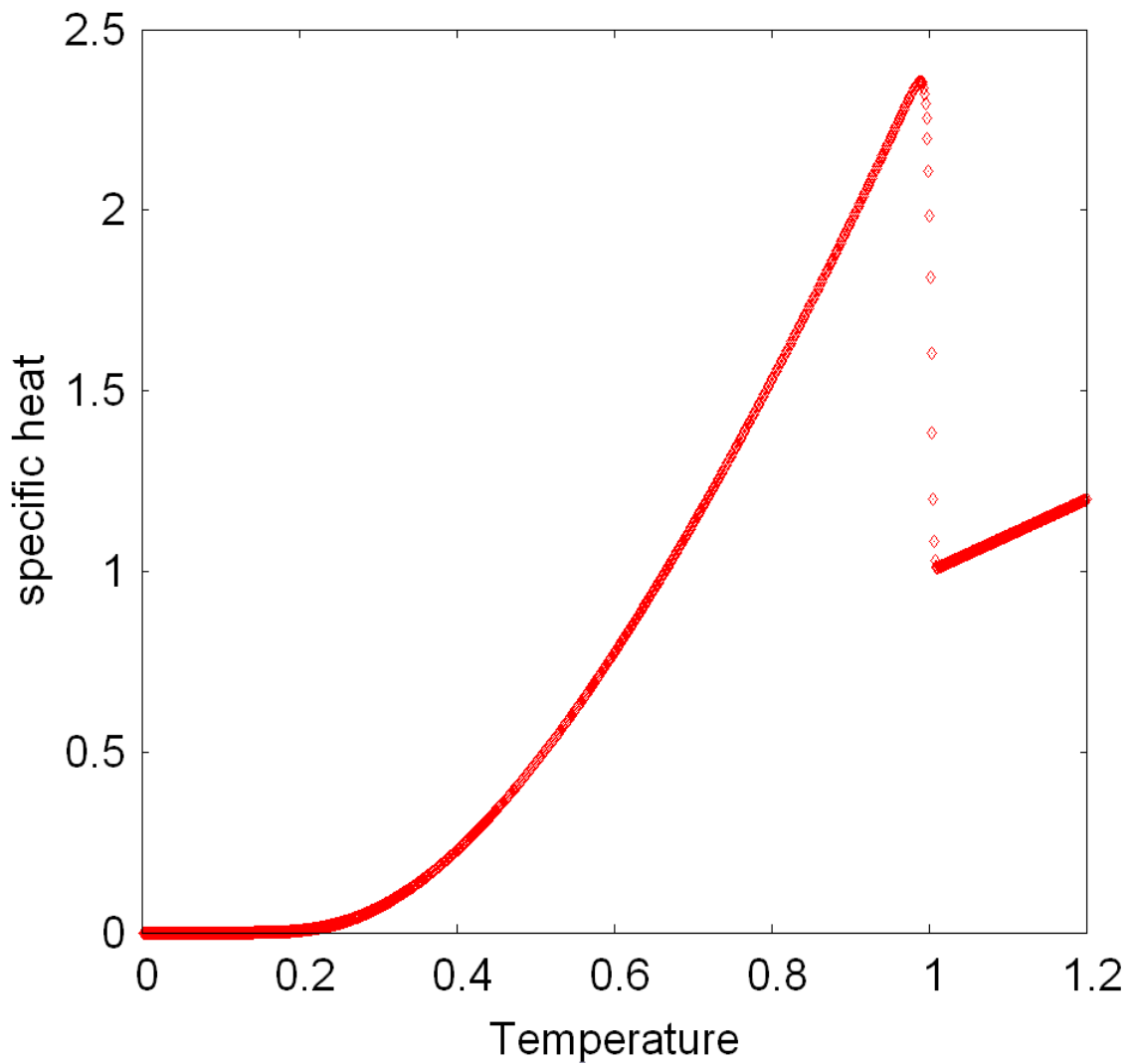


[横軸:  $T/T_c$  縦軸:  $S_s(T)/C_n(T_c)$ ]

緑の曲線: ( $T \approx 0$ ) 
$$\frac{S_s(T)}{C_N(T_c)} = \frac{9\sqrt{2e^\gamma t}}{2e^\gamma \pi} \left(1 + \frac{2\pi}{3e^\gamma}\right) \exp\left(\frac{-\pi}{e^\gamma t}\right)$$

青の曲線: ( $T \approx T_c$ ) 
$$\frac{S_s(T)}{C_N(T_c)} = t - \frac{12}{7\zeta(3)}(1-t)$$

## 4.6 比熱の数値計算結果



[横軸:  $T/T_c$  縦軸:  $C_s(T)/C_n(T_c)$ ]

超伝導相と常伝導相が不連続になっているため、二次の相転移であることがわかる。

また、数値計算での比熱の飛びは  $\frac{C_s(T_c) - C_n(T_c)}{C_n(T_c)} \doteq 1.42$  であった。(理論値: 約 1.43)

## 付録

### ・第二量子化について

N個の同一粒子系(多体系)の量子状態を表す波動関数は、各粒子の位置座  $r_1, r_2, \dots, r_N$  および共通の時間  $t$  を変数としてもつ関数  $\psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t)$  で与えられる。この状態はN次元空間(配位空間)における波動を表し、通常の1次元や3次元といった実空間内の波動と解釈することはできない。このような抽象的な配位空間の代わりに、実空間において多粒子系を記述する方法を第二量子化と呼ぶ。

また、この方法で基本となる考え方が、各状態を占有している粒子の個数で系の状態を記述する数表示である。

まず、フェルミ粒子の生成・消滅演算子  $a^\dagger, a$  について ( $n$  は粒子数で0または1とする)

$$a_\mu |n_1, n_2, \dots, n_\mu, \dots\rangle = (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{\mu-1}} \sqrt{n_\mu} |n_1, n_2, \dots, n_\mu-1, \dots\rangle$$

$$a_\mu^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_\mu, \dots\rangle = (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{\mu-1}} \sqrt{1-n_\mu} |n_1, n_2, \dots, n_\mu+1, \dots\rangle$$

(反交換関係)

$$\{a_\nu, a_\mu\} = a_\nu a_\mu + a_\mu a_\nu = 0 \quad \{a_\nu^\dagger, a_\mu^\dagger\} = a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger + a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger = 0$$

$$\{a_\nu, a_\mu^\dagger\} = \delta_{\nu\mu} \quad \text{という関係を定義する。}$$

次に、フェルミ場の演算子  $\hat{\psi}^\dagger(r), \hat{\psi}(r)$  を定義する。

$$\hat{\psi}^\dagger(r) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_k \hat{a}_k^\dagger \Phi_k^*(r) \quad \hat{\psi}(r) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_k \hat{a}_k \Phi_k(r)$$

また、 $r$  の位置にあるフェルミ粒子の数密度演算子  $\hat{n}(r)$  は  $\hat{n}(r) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\psi}^\dagger(r) \hat{\psi}(r)$  で  $\Phi$  は平面波で近似した電子の波動関数  $\Phi_k = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  である。

### ・オイラーの定数とゼータ関数について

$$\text{オイラーの定数定義: } \gamma \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \ln[n] \right) \doteq 5.772$$

$$\text{ゼータ関数定義: } \zeta(z) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^z} \quad \text{特に } \zeta(3) \doteq 1.202$$

## 参考文献

- [1] 「物質科学の基礎 物性物理学」 溝口 正 著 (裳華房)  
特に、実験データ(ギャップ関数, 臨界磁場, 比熱)を参照した
- [2] 「超伝導の基礎」 丹羽 雅昭 著 (東京電気大学出版局)
- [3] 「量子力学 II」 小出 昭一郎 著 (裳華房)  
特に、「第二量子化」を参考にした
- [4] 「固体の電子論」 斯波 弘行 著 (丸善)  
特に、「平均場近似」を参考にした
- [5] 「固体物理入門 上」 Charles Kittel 著 (丸善)
- [6] 「統計力学」 市村 浩 著 (裳華房)
- [7] 「物理のための 応用数学」 小野寺 嘉孝 著 (裳華房)
- [8] 「ザ・Fortran 90/95」 戸川 隼人 著 (サイエンス社)  
特に、「Newton 法」を参考にした