一般的な Bogoliubov 変換

永井佑紀

平成 17 年 11 月 10 日

超伝導の Hamiltonian を Bogoliubov 変換を用いて対角化する。singlet であろうが triplet であろうが同様の手順で対角化できる方法をまとめるのが目的である。triplet の場合にはどのように対角化されるかを見て、triplet の場合の Gor'kov 方程式を求めるための足がかりにする。

1 Hamiltonian

第二量子化の方法を用いると、Hamiltonian は

$$\mathcal{H} = \sum_{\boldsymbol{k},s} \varepsilon(\boldsymbol{k}) a^\dagger_{\boldsymbol{k}s} a_{\boldsymbol{k}s} + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',s_1,s_2,s_3,s_4} V_{s_1,s_2,s_3,s_4}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') a^\dagger_{-\boldsymbol{k}s_1} a^\dagger_{\boldsymbol{k}s_2} a_{\boldsymbol{k}'s_3} a_{-\boldsymbol{k}'s_4} \tag{1}$$

と書ける。ここで、s は spin index であり、$\uparrow$ か $\downarrow$ をとる。この時点では、s_i の組み合わせに制限はなく、どのようなスピンの電子もペアを組みうるとしている。また、ε は化学ポテンシャル μ から測ったエネルギーである。そして $V_{s_1,s_2,s_3,s_4}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$ は演算子 $\hat{V}$ の行列要素

$$V_{s_1,s_2,s_3,s_4}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \langle -\boldsymbol{k}, s_1; \boldsymbol{k}, s_2 | \hat{V} | -\boldsymbol{k}', s_4; \boldsymbol{k}', s_3 \rangle \tag{2}$$

であり、Fermi 面付近の電子にのみ働く電子間の引力相互作用である。このとき、Fermi 粒子系の反対称性から、

$$V_{s_1,s_2,s_3,s_4}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = -V_{s_2,s_1,s_3,s_4}(-\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = -V_{s_1,s_2,s_4,s_3}(\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}') = V_{s_4,s_3,s_2,s_1}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}) \tag{3}$$

である。

1.1 平均場近似

以前のノートで Hartree-Fock 近似の Hamiltonian を導出したときと同様に、平均場を導入する。このとき導入する平均場は、$\langle a^\dagger_{\boldsymbol{k}s} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'} \rangle$ と $\langle a_{\boldsymbol{k}s} a_{-\boldsymbol{k}s'} \rangle$ とする。Hartree と Fock の平均場は超伝導状態では主要な寄与をしないので無視することにする。つまり、

$$a^\dagger_{\boldsymbol{k}s} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'} = a^\dagger_{\boldsymbol{k}s} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'} + \left(\langle a^\dagger_{\boldsymbol{k}s} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'} \rangle - a^\dagger_{\boldsymbol{k}s} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'} \right) \tag{4}$$

$$a_{\boldsymbol{k}s} a_{-\boldsymbol{k}s'} = a_{\boldsymbol{k}s} a_{-\boldsymbol{k}s'} + \left(\langle a_{\boldsymbol{k}s} a_{-\boldsymbol{k}s'} \rangle - a_{\boldsymbol{k}s} a_{-\boldsymbol{k}s'} \right) \tag{5}$$

を Hamiltonian に代入する。平均場同士の積、つまり演算子のない項は基底状態のエネルギーに寄与するだけなので無視し、上式の第二項同士の積は小さいとして無視すると、

$$\mathcal{H} = \sum_{\boldsymbol{k},s} \varepsilon(\boldsymbol{k}) a^\dagger_{\boldsymbol{k}s} a_{\boldsymbol{k}s} + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',s_1,s_2,s_3,s_4} V_{s_1,s_2,s_3,s_4}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') \left[-\langle a_{\boldsymbol{k}'s_3} a_{-\boldsymbol{k}'s_4} \rangle a^\dagger_{-\boldsymbol{k}s_1} a^\dagger_{\boldsymbol{k}s_2} + \langle a^\dagger_{-\boldsymbol{k}s_1} a^\dagger_{\boldsymbol{k}s_2} \rangle a_{\boldsymbol{k}'s_3} a_{-\boldsymbol{k}'s_4} \right] \tag{6}$$

となる。ここで、pair-potential として

$$\begin{aligned}\Delta_{ss'}(\boldsymbol{k}) &= -\sum_{\boldsymbol{k}',s_3,s_4} V_{s'ss_3s_4}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\langle a_{\boldsymbol{k}'s_3} a_{-\boldsymbol{k}'s_4}\rangle \quad (7)\\ \Delta^*_{ss'}(-\boldsymbol{k}) &= \sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2} V_{s_1s_2ss'}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})\langle a^\dagger_{-\boldsymbol{k}'s_1} a^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_2}\rangle \quad (8)\end{aligned}$$

を定義し、s、$\boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{k}'$ がダミーインデックスであることを用いてまとめると、結局 Hamiltonian は

$$\mathcal{H} = \sum_{\boldsymbol{k},s} \varepsilon(\boldsymbol{k}) a^\dagger_{\boldsymbol{k}s} a_{\boldsymbol{k}s} + \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k},s_1,s_2}\left[\Delta_{s_1,s_2}(\boldsymbol{k}) a^\dagger_{\boldsymbol{k}s_1} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}s_2} - \Delta^*_{s_1,s_2}(-\boldsymbol{k}) a_{-\boldsymbol{k}s_1} a_{\boldsymbol{k}s_2}\right] \quad (9)$$

となる。

1.2 行列表示

ここで

$$\boldsymbol{a}_k = (a_{k\uparrow}, a_{k\downarrow}, a^\dagger_{-k\uparrow}, a^\dagger_{-k\downarrow}) \quad (10)$$

というベクトルを導入する。また、以後特に断りがない限り生成消滅演算子の添え字のベクトル $\boldsymbol{k}$ は k と表記することにする。

ある状態 $\boldsymbol{k}$ の Hamiltonian は s_1、s_2 それぞれの和を含む。スピンは $\uparrow$ と $\downarrow$ の二種類あるから、結局 Hamiltonian はスピンの組み合わせで言えば 4 種類あることになる。そこで、Hamiltonian はベクトル $\boldsymbol{a}_k$ と行列を用いて

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \sum_{\boldsymbol{k}} \begin{pmatrix} a^\dagger_{k\uparrow} & a^\dagger_{k\downarrow} & a_{-k\uparrow} & a_{-k\downarrow}\end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\varepsilon & 0\\ 0 & 0 & 0 & -\varepsilon\end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k\uparrow}\\ a_{k\downarrow}\\ a^\dagger_{-k\uparrow}\\ a^\dagger_{-k\downarrow}\end{pmatrix}\\ &\quad + \sum_{\boldsymbol{k}} \begin{pmatrix} a^\dagger_{k\uparrow} & a^\dagger_{k\downarrow} & a_{-k\uparrow} & a_{-k\downarrow}\end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \Delta_{\uparrow\uparrow}(\boldsymbol{k}) & \Delta_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{k})\\ 0 & 0 & \Delta_{\downarrow\uparrow}(\boldsymbol{k}) & \Delta_{\downarrow\downarrow}(\boldsymbol{k})\\ -\Delta^*_{\uparrow\uparrow}(-\boldsymbol{k}) & -\Delta^*_{\uparrow\downarrow}(-\boldsymbol{k}) & 0 & 0\\ -\Delta^*_{\downarrow\uparrow}(-\boldsymbol{k}) & -\Delta^*_{\downarrow\downarrow}(-\boldsymbol{k}) & 0 & 0\end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k\uparrow}\\ a_{k\downarrow}\\ a^\dagger_{-k\uparrow}\\ a^\dagger_{-k\downarrow}\end{pmatrix} \quad (11)\\ &= \sum_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{a}^\dagger_k \begin{pmatrix} \varepsilon\hat{\sigma}_0 & \hat{\Delta}(\boldsymbol{k})\\ -\hat{\Delta}^*(-\boldsymbol{k}) & -\varepsilon\hat{\sigma}_0\end{pmatrix} \boldsymbol{a}_k \quad (12)\\ &= \sum_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{a}^\dagger_k \hat{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{a}_k \quad (13)\end{aligned}$$

と表記できる。ここで $\hat{\sigma}_0$ は単位ベクトルである。

2 Bogoliubov 変換

式 (13) で表される Hamiltonian を対角化することを考える。行列 $\hat{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}$ は、$\hat{E}_{\boldsymbol{k}} = U^\dagger_{\boldsymbol{k}} \hat{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}} U_{\boldsymbol{k}}$ と対角化できるとする。このとき $U_{\boldsymbol{k}}$ は

$$U_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \hat{u}_{\boldsymbol{k}} & \hat{v}_{\boldsymbol{k}}\\ \hat{v}^*_{-\boldsymbol{k}} & \hat{u}^*_{-\boldsymbol{k}}\end{pmatrix} \quad \text{and} \quad U_{\boldsymbol{k}} U^\dagger_{\boldsymbol{k}} = 1 \quad (14)$$

という 4×4 の行列であるとする。そうすれば、新たな生成消滅演算子のベクトル $\boldsymbol{\alpha}_k = (\alpha_{k\uparrow}, \alpha_{k\downarrow}, \alpha^\dagger_{-k\uparrow}\alpha^\dagger_{-k\downarrow})$ を

$$\boldsymbol{a}_k = U_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{\alpha}_k \quad (15)$$

となるように用意すれば、Hamiltonian は

$$\mathcal{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{\alpha}_k^\dagger \hat{E}_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{\alpha}_{\boldsymbol{k}} \tag{16}$$

と対角化できる。このとき $\hat{E}_{\boldsymbol{k}}$ は

$$\hat{E}_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} E_{\boldsymbol{k}+} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{\boldsymbol{k}-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_{-\boldsymbol{k}+} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_{-\boldsymbol{k}-} \end{pmatrix} \tag{17}$$

という 4×4 の行列である。

ここで導入した $\boldsymbol{\alpha}_k$ は反交換関係を満たし、Fermi 粒子の生成消滅演算子となっている。また、通常の表示では

$$a_{ks} = \sum_{s'} (u_{kss'} \alpha_{ks'} + v_{kss'} \alpha_{-ks'}^\dagger) \tag{18}$$

と書ける。これを Bogoliubov 変換と呼ぶ。

実際に $U_{\boldsymbol{k}}$ を求めるためには、$\hat{\Delta}(\boldsymbol{k})$ の具体形を知らなければならない。

3 pair-potential の対称性

式 (3) のポテンシャルの対称性から、式 (7) で定義される pair-potential は

$$\hat{\Delta}(\boldsymbol{k}) = -\hat{\Delta}^T(-\boldsymbol{k}) \tag{19}$$

という対称性を持つ。

3.1 singlet-pairing の場合

singlet の場合、spin index に対して pair-potential は反対称であるから、$\boldsymbol{k}$ に対して偶関数である $\Delta(\boldsymbol{k})$ を用いて

$$\hat{\Delta}(\boldsymbol{k}) = i\hat{\sigma}_y \Delta(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\boldsymbol{k}) \\ -\Delta(\boldsymbol{k}) & 0 \end{pmatrix} \tag{20}$$

と書ける。ここで $\hat{\sigma}_y$ は Pauli 行列で

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{21}$$

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{22}$$

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{23}$$

である。

3.2　triplet-pairing の場合

triplet の場合は、spin index に対して pair-potential が対称である。ここで、Balian と Werthamer(1963) の表記に従い、$\boldsymbol{k}$ に対して奇関数である $\boldsymbol{d}$ ベクトルを導入して pair-potential を表現する。すなわち、

$$\hat{\Delta}(\boldsymbol{k}) = (\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \cdot \hat{\sigma}) i\hat{\sigma}_y \tag{24}$$

$$= \begin{pmatrix} -d_x(\boldsymbol{k}) + id_y(\boldsymbol{k}) & d_z(\boldsymbol{k}) \\ d_z(\boldsymbol{k}) & d_x(\boldsymbol{k}) + id_y(\boldsymbol{k}) \end{pmatrix} \tag{25}$$

とする。ここで、$\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ である。

4　Unitary 変換 $U_{\boldsymbol{k}}$ の導出

$\hat{E}_{\boldsymbol{k}}$ と $\hat{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}$ は

$$U_{\boldsymbol{k}} \hat{E}_{\boldsymbol{k}} = \hat{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}} U_{\boldsymbol{k}} \tag{26}$$

の関係がある。具体的に行列の積をとると、

$$\hat{u}_k(\hat{E}_k - \varepsilon\hat{\sigma}_0) = \hat{\Delta}(\boldsymbol{k})\hat{v}^*_{-k} \tag{27}$$

$$-\hat{v}_k(\hat{E}_{-k} + \varepsilon\hat{\sigma}_0) = \hat{\Delta}(\boldsymbol{k})\hat{u}^*_{-k} \tag{28}$$

$$\hat{v}^*_{-k}(\hat{E}_k + \varepsilon\hat{\sigma}_0) = -\hat{\Delta}^*(-\boldsymbol{k})\hat{u}_k \tag{29}$$

$$\hat{u}^*_{-k}(-\hat{E}_{-k} + \varepsilon\hat{\sigma}_0) = -\hat{\Delta}^*(-\boldsymbol{k})\hat{v}_k \tag{30}$$

となる。また、式 (19) より

$$\hat{\Delta}^*(\boldsymbol{k}) = -\hat{\Delta}^\dagger(-\boldsymbol{k}) \tag{31}$$

である。上式を用いると、

$$\hat{u}_k(\hat{E}_k^2 - \varepsilon^2\hat{\sigma}_0) = \hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{u}_k \tag{32}$$

となる。

$$\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger = |\boldsymbol{d}|^2\hat{\sigma}_0 + i(\boldsymbol{d} \times \boldsymbol{d}^*) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \tag{33}$$

であるから、式 (32) を用いて $\hat{u}_k$ を求める際に場合わけが必要になることがわかる。その場合わけは

- $\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger$ が unitary であるとき:$i(\boldsymbol{d} \times \boldsymbol{d}^*) = 0$ のとき
- $\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger$ が nonunitary であるとき:$i(\boldsymbol{d} \times \boldsymbol{d}^*) \neq 0$ のとき

となる。以下にそれぞれの場合についての $\hat{u}_k$ を示す。

4.1　unitary な場合

unitary な場合というのは、spin-singlet な場合と、spin-triplet で $i(\boldsymbol{d} \times \boldsymbol{d}^*) = 0$ の場合である。このとき、式 (32) は

$$\hat{u}_k(\hat{E}_k^2 - \varepsilon^2\hat{\sigma}_0) = |\boldsymbol{d}|^2\hat{u}_k \tag{34}$$

となり、$\hat{u}_k$ がどのような行列であっても上式を満たす。したがって、$\hat{u}_k$ が $\hat{\sigma}_0$ に比例するように選んでもよい。また、

$$\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger = \begin{pmatrix} d_x d_x^* + i(d_x d_y^* - d_x^* d_y) + d_y d_y^* + d_z d_z^* & 0 \\ 0 & d_x d_x^* - i(d_x d_y^* - d_x^* d_y) + d_y d_y^* + d_z d_z^* \end{pmatrix} \tag{35}$$

$$= |\boldsymbol{d}|^2\hat{\sigma}_0 \tag{36}$$

$$= \frac{1}{2}\mathrm{tr}\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger\sigma_0 \tag{37}$$

であるから、

$$\begin{pmatrix} E_{k+}^2-\varepsilon^2 & 0 \\ 0 & E_{k-}^2-\varepsilon^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\mathrm{tr}\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\mathrm{tr}\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger \end{pmatrix} \tag{38}$$

$$E_{k\pm} = \left(\varepsilon^2 - \frac{1}{2}\mathrm{tr}\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger\right)^{1/2} \tag{39}$$

となる。ここで、

$$\hat{u}_k = D(\boldsymbol{k})\hat{\sigma}_0 \tag{40}$$

$$\hat{v}_{-k}^* = -\hat{\Delta}^\dagger D(\boldsymbol{k})(E_k\hat{\sigma}_0+\varepsilon(\boldsymbol{k})\hat{\sigma}_0)^{-1} \tag{41}$$

と置き、式 (14) の unitary condition:

$$\hat{u}_k\hat{u}_k^* + \hat{v}_k\hat{v}_k^* = \hat{1} \tag{42}$$

$$\hat{u}_k\hat{v}_{-k} + \hat{v}_k\hat{u}_{-k} = 0 \tag{43}$$

$$\hat{v}_{-k}^*\hat{u}_k^* + \hat{u}_{-k}^*\hat{v}_k^* = 0 \tag{44}$$

$$\hat{v}_{-k}^*\hat{v}_{-k} + \hat{u}_{-k}\hat{u}_{-k}^* = \hat{1} \tag{45}$$

から

$$\hat{u}_{-k} = -\hat{v}_k^{-1}\hat{u}_k\hat{v}_{-k} \tag{46}$$

$$\hat{u}_{-k}^* = -\hat{v}_{-k}^*\hat{u}_k^*\hat{v}_k^{-1*} \tag{47}$$

$$\hat{v}_k^{-1*} = (\hat{1}-\hat{u}_k\hat{u}_k^*)^{-1}\hat{v}_k \tag{48}$$

と変形し、式 (45) に代入して

$$\hat{v}_{-k}^*\hat{v}_{-k} + \hat{v}_{-k}^*\hat{u}_k^*(\hat{1}-\hat{u}_k\hat{u}_k^*)^{-1}\hat{u}_k\hat{v}_{-k} = \hat{1} \tag{49}$$

とする。式 (40) と式 (41) を上式に代入して変形し、$\hat{\Delta}^{\dagger *} = \hat{\Delta}$ を用いれば

$$D(\boldsymbol{k}) = \frac{(E_k+\varepsilon)}{\left[(E_k+\varepsilon)^2 + \frac{1}{2}\mathrm{tr}\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger(\boldsymbol{k})\right]^{1/2}} \tag{50}$$

となり、結局

$$\hat{u}_k = \frac{(E_k+\varepsilon)\hat{\sigma}_0}{\left[(E_k+\varepsilon)^2 + \frac{1}{2}\mathrm{tr}\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger(\boldsymbol{k})\right]^{1/2}} \tag{51}$$

$$\hat{v}_k = \frac{-\hat{\Delta}(\boldsymbol{k})}{\left[(E_k+\varepsilon)^2 + \frac{1}{2}\mathrm{tr}\hat{\Delta}\hat{\Delta}^\dagger(\boldsymbol{k})\right]^{1/2}} \tag{52}$$

となる。

4.2 nonunitary の場合

工事中。

参考文献

高野文彦、「多体問題」(培風館　新物理学シリーズ 18)
中嶋貞雄、「超伝導入門」（培風館　新物理学シリーズ 9）
恒藤敏彦、「超伝導・超流動」（岩波書店　現代の物理学 17）
M. Sigrist and K. Ueda, ”Phenomenological theory of unconventional superconductivity”, Rev. Mod. Phys. **63** (1991)
田村弘徳、東京大学修士論文 (2003)