

Fetter Walecka memo

高原 賢都

2026年6月11日

目次

1	Canonical Transformations	2
1.1	Interaction Bose gas	2
1.2	Cooper Pairs	8

1 Canonical Transformations

前章までは、場の量子論とグリーン関数の枠組みに重点を置いて相互作用する量子多体系を議論してきた。しかし、多くの系においては第二量子化された Hamiltonian を簡略化し、厳密に解くことが可能な近似問題へつなげることで、より直接的で物理的な見通しが良くなることもある。

この章では、Fock 空間にいける生成消滅演算子の正準変換によって解くことができる一連の問題について学ぶ。最初の例として、Bogoliudov の手法に沿って相互作用する Bose 気体を考え、次に相互作用する Fermi 気体について学ぶ。

1.1 Interaction Bose gas

絶対零度における相互作用する Bose 気体については、以前に場の量子論の枠組みの中で考察した。ここでは、厳密に対角化可能な Hamiltonian の例として、本質的に同じ問題を扱う。

希薄な気体では粒子の大半は運動量ゼロの状態を占めるので、運動量移行が小さい 2 体衝突が支配的であると考えられる。このような衝突では、 s 波散乱長 a というパラメータによって特徴づけることができる。

このような衝突を記述するために、次の Hamiltonian を考える。

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^0 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{g}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \quad (35.1)$$

ここで、実際のポテンシャル $V(\mathbf{k})$ は実空間でいうデルタ関数 $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ に相当する擬ポテンシャル g に置き換えられている。希薄な気体では、詳細なポテンシャルの形状は重要ではなく、 s 波散乱長 a だけが物理に寄与するため、後の式 (35.4) にあるように $g \approx 4\pi\hbar^2 a/m$ と置き換えて議論を単純化している。

また、接触型の相互作用項は運動量 $\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4$ を持つ 2 つの粒子が衝突し、運動量 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ に散乱されるプロセスを表している。この Hamiltonian に対して大部分の粒子が運動量ゼロの状態を占めると仮定して近似することをひとまずの目標にする。

散乱振幅に対する Lippmann-Schwinger 方程式を逐次的に解くことによって、

$$\tilde{f}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -4\pi f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{mg}{\hbar^2} + \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{(mg/\hbar^2)^2}{k^2 - q^2 + i\eta} + \dots \quad (35.2)$$

を得る。低エネルギー極限では、散乱振幅は s 波散乱長 a によって特徴づけられるので、 $\tilde{f}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \approx -4\pi a$ と置くことができる。この関係を式 (35.2) に代入すると、 g と a の関係

$$\frac{4\pi a\hbar^2}{m} = g - \frac{mg^2}{\hbar^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2} + \dots \quad (35.3)$$

となり、1 次の近似で

$$g \approx \frac{4\pi a\hbar^2}{m} \quad (35.4)$$

となる。対照的に、2 次の積分は $\log \Lambda$ で発散する。この発散をくりこむために、積分範囲を有限のカットオフ Q で制限して基底状態の発散と合わせることで有限の値を得ることができる。

ボース粒子は同種粒子であり、その波動関数は粒子の交換に対して対称である必要がある。2 粒子散乱において、重心系での散乱角を θ とすると、粒子 1 が角度 θ に散乱されるイベントと粒子 2 が角度 θ に散乱されるイベントは区別できないため、個々の粒子の散乱振幅 $f(\theta)$ を用いて、全振幅 f_B は

$$f_B(\theta) = f(\theta) + f(\pi - \theta)$$

となる。よって、微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \quad (35.5)$$

となる. $f(\theta) \rightarrow -a$ ($k \rightarrow 0$) となるので, 低エネルギー極限では

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \rightarrow |2a|^2 \quad k \rightarrow 0 \quad (35.6)$$

となり, これは区別可能な粒子のためのものの4倍である. パラメータ g はこれで観測可能な量と結び付けられたので, 元の多粒子ハミルトニアンである式 (35.1) に戻る.

大部分の粒子が運動量ゼロの状態にあると仮定し, 演算子 a_0, a_0^\dagger を単なる数 (c 数) $\sqrt{N_0}$ として扱う. (コヒーレント状態) 相互作用 Hamiltonian の各項は a_0 と a_0^\dagger が現れる回数に従って分類することができ, ここでは N_0^2 と N_0 のオーダーの項のみを残すことにする.

$$\hat{H}_{\text{int}} \approx g(2V)^{-1} \{a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0 + \sum_{\mathbf{k}}' [2(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} a_0^\dagger a_0 + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}} a_0^\dagger a_0) + a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_0 + a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}]\} \quad (35.8)$$

ここで, ダッシュは $\mathbf{k} = 0$ の項を省略することを意味する. この切り捨てられた Hamiltonian は, 凝縮体外の粒子間の相互作用を明らかに無視している. しかしながら, 省略された項は摂動論の3次以上のオーダーでのみエネルギーに寄与し得るので, 良い近似を提供するはずである.

式 (35.7) と (35.8) を組み合わせると, 次の近似された Hamiltonian が得られる.

$$\hat{H}_{\text{int}} = g(2V)^{-1} [N_0^2 + 2N_0 \sum_{\mathbf{k}}' (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}) + N_0 \sum_{\mathbf{k}}' (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}})] \quad (35.9)$$

一方で, 数演算子は次のようになる.

$$\hat{N} = N_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}' (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}) \quad (35.10)$$

ここでは $N = \langle \hat{N} \rangle$ を与えられたものと考え, N_0 を explicit に消去することを考える. N^2 と N のオーダーの項のみを残す場合, 式 (35.10) を式 (35.9) に代入すると, 最終的な Hamiltonian が得られる.

$$\hat{H} = \frac{1}{2} V g n^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}' [(\epsilon_{\mathbf{k}}^0 + n g)(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}) + n g(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}})] \quad (35.11)$$

$\mathbf{k} \neq 0$ の粒子の2次項 ($\sum' a^\dagger a$)² は微小として無視した. ここで, $n = N/V$ は粒子密度である.

この式は, 相互作用する多体系が, \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ のペアを作り, 互いに干渉しない独立な振動子の集合体としての Hamiltonian に帰着したことを意味している.

(35.11) は演算子の2次形式であるため厳密に解くことができ, 正準変換によって対角化できる. \hat{H} の対角化は, 新しい生成・消滅演算子の組を定義することによって行われる.

$$a_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad a_{\mathbf{k}}^\dagger = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} \quad (35.12)$$

この変換を Bogoliubov 変換と呼ぶ. 新しい演算子もまた正準交換関係

$$[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad [\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}] = [\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 0 \quad (35.13)$$

に従うならば, この変換は正準変換であるといえる. 各 \mathbf{k} に対して, $u_{\mathbf{k}}$ と $v_{\mathbf{k}}$ は

$$u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1 \quad (35.14)$$

という制限を課すことによって, この条件が満たされる. 実際に

$$\begin{aligned} [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] &= [u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger, u_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger - v_{\mathbf{k}'} \alpha_{-\mathbf{k}'}] \\ &= u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} [\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger] + v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} [\alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{-\mathbf{k}'}] \\ &= (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \end{aligned}$$

のように直接代入を行えばよい. (35.12) を直接 \hat{H} に代入すると, 次のような式が得られる.

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2}Vgn^2 + \sum_k' [(\epsilon_k^0 + ng)v_k^2 - ngu_kv_k] \\ &+ \frac{1}{2}\sum_k' \{[(\epsilon_k^0 + ng)(u_k^2 + v_k^2) - 2u_kv_kng](\alpha_k^\dagger\alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger\alpha_{-k})\} \\ &+ \frac{1}{2}\sum_k' \{[ng(u_k^2 + v_k^2) - 2u_kv_k(\epsilon_k^0 + ng)](\alpha_k^\dagger\alpha_{-k}^\dagger + \alpha_k\alpha_{-k})\} \quad (35.15)\end{aligned}$$

パラメータ u_k と v_k は式 (35.14) の制限を満たすが, その比は任意であり, 式 (35.15) を簡略化するために使用できる. ここでは \hat{H} の最後の行を消去するために選ぶ. 結果として得られる Hamiltonian は, 準粒子の数演算子 $\alpha_k^\dagger\alpha_k$ において明示的に対角化され, すべての固有ベクトルと固有値を決定することができる.

パラメータ u_k と v_k に対する条件は次のようになる.

$$ng(u_k^2 + v_k^2) = 2u_kv_k(\epsilon_k^0 + ng) \quad (35.16)$$

制約 (35.14) はパラメータによる表現

$$u_k = \cosh \varphi_k \quad v_k = \sinh \varphi_k$$

によって組み込むことができ, 式 (35.16) は次のように帰着できる.

$$\tanh 2\varphi_k = \frac{ng}{\epsilon_k^0 + ng}$$

左辺は开区間 $(-1, 1)$ にあるため, この方程式はポテンシャルが斥力 ($g > 0$) の場合にのみ, すべての k について解くことができる. 標準的な双曲線関数の恒等式を用いると, 次のような式が得られる.

$$v_k^2 = u_k^2 - 1 = \frac{1}{2}[E_k^{-1}(\epsilon_k^0 + ng) - 1] \quad (35.17)$$

proof of (35.17)

計算を簡略化するために $A_k = \epsilon_k^0 + ng$ と置く. 式 (35.16) の両辺を 2 乗して各項を v_k^2 の関数として整理すると, 次のような式が得られる.

$$\begin{aligned}n^2g^2(u_k^2 + v_k^2)^2 &= 4u_k^2v_k^2A_k^2 \\ \Leftrightarrow n^2g^2(1 + 2v_k^2)^2 &= 4v_k^2(1 + v_k^2)A_k^2 \\ \Leftrightarrow (ng)^2 &= (4v_k^4 + 4v_k^2)(A_k^2 - (ng)^2) \\ \Leftrightarrow \frac{(ng)^2}{E_k^2} + 1 &= 4v_k^4 + 4v_k^2 + 1 \\ \Leftrightarrow v_k^2 &= \frac{1}{2}[E_k^{-1}A_k - 1] \quad (\text{証明終})\end{aligned}$$

ここで,

$$E_k \equiv [(\epsilon_k^0 + ng)^2 - (ng)^2]^{\frac{1}{2}} \quad (35.18)$$

で定義した. 式 (35.14) から (35.18) を組み合わせると

$$\hat{H} = \frac{1}{2}Vgn^2 - \frac{1}{2}\sum_k' (\epsilon_k^0 + ng - E_k) + \frac{1}{2}\sum_k' E_k(\alpha_k^\dagger\alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger\alpha_{-k}) \quad (35.19)$$

を得る. 演算子 $\alpha_k^\dagger\alpha_k$ は $0, 1, 2, \dots$ の固有値を持つ. したがって, \hat{H} の基底状態 $|\mathbf{0}\rangle$ は次の条件によって決定され,

$$\alpha_k|\mathbf{0}\rangle = 0 \quad \text{for all } k \neq 0 \quad (35.20)$$

準粒子の真空として解釈される. a_k も a_k^\dagger も $|\mathbf{O}\rangle$ を消滅させないため, $|\mathbf{O}\rangle$ は摂動を受けていない固有状態の組み合わせで表せる. その場合, 基底状態のエネルギーは次で与えられる.

$$E = \langle \mathbf{O} | \hat{H} | \mathbf{O} \rangle = \frac{1}{2} V n^2 g + \frac{1}{2} \sum_k' (E_k - \epsilon_k^0 - ng) \quad (35.21)$$

さらに, すべての励起状態は様々な数の相互作用しない Bose 粒子に対応し, それぞれが励起エネルギー E_k を持つ. このスペクトルは, 希薄な剛体球ボース気体に対して第 22 節で得られたものと同じ形をしている.

$$E_k = \sqrt{(\epsilon_k^0 + ng)^2 - (ng)^2} = \sqrt{(\epsilon_k^0)^2 + 2\epsilon_k^0 ng}$$

であり, 自由粒子のエネルギーは $\epsilon_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ である. 低エネルギー極限を考えると

$$E_k \approx \sqrt{2ng\epsilon_k^0} = \hbar k \sqrt{\frac{4\pi a n \hbar^2}{m^2}} \quad (35.22)$$

となる. このスペクトルは線形であり, 分散関係は $(4\pi a n \hbar^2 / m^2)^{1/2}$ で与えられる速度を持つフォノンと同じ形式である.

高エネルギー極限を考えると

$$\begin{aligned} E_k &= \sqrt{(\epsilon_k^0 + ng)^2 - (ng)^2} \\ &= (\epsilon_k^0 + ng) \sqrt{1 - \left(\frac{ng}{\epsilon_k^0 + ng}\right)^2} \\ &\approx \epsilon_k^0 + ng - \frac{(ng)^2}{2\epsilon_k^0} \\ &\approx \epsilon_k^0 + ng = \epsilon_k^0 + \frac{4\pi a n \hbar^2}{m} \quad (35.23) \end{aligned}$$

となる. 基底状態 $|\mathbf{O}\rangle$ における分布関数は

$$n_k = \langle \mathbf{O} | a_k^\dagger a_k | \mathbf{O} \rangle = v_k^2 \langle \mathbf{O} | \alpha_k \alpha_k^\dagger | \mathbf{O} \rangle = v_k^2 \quad (35.23)$$

となる. $k \rightarrow 0$ に対して k^{-1} として変化して, $k \rightarrow \infty$ では, $v_k^2 \propto k^{-4}$ となるので, 凝縮体から外れた粒子の総数が有限にとどまることが保証される.

相互作用によって, 運動量ゼロの凝縮体から粒子が取り除かれることがわかる. 実際, 任意に高い運動量を持つ粒子が見つかる確率は 0 でない. 次のように定義される depletion を考える.

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{1}{N} \sum_k' v_k^2 = \frac{1}{n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_k^2$$

無次元変数 $x = \hbar k / \sqrt{2mng}$ を導入して, この積分を評価すると

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{1}{n} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \left(\frac{2mng}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{1}{2} \int_0^\infty x^2 \left[\frac{x^2 + 1}{x\sqrt{x^2 + 2}} - 1 \right] dx$$

となる. $x = \sqrt{2} \sinh \theta$ と置換すると, 積分部分の値は $\frac{\sqrt{2}}{3}$ となるので, 最終的な結果は

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} (na^3)^{1/2} \quad (35.24)$$

を得ることができる.

単純な摂動論を用いて基底状態のエネルギーを計算しようとする, 高運動量側で和が無限大に発散してしまう. これは「相互作用ポテンシャルが運動量によらず一定である」という, 計算を簡略化するための物理的仮定に起因する問

題である。より現実的なポテンシャルを用いれば計算は収束すると思われるが、その必要はなく、結合定数を散乱長で書き直す際の展開式の中にエネルギー計算時と全く同じ発散が含まれているため、この見かけの発散をくりこむことができる。

結果として、理論上の結合定数を消去して観測可能な散乱長 a を用いて基底状態のエネルギーを表すことができる。これらの主張を検証するために、2次のエネルギーシフトを足し引きすることで式 (35.21) を次のように書き換えることができる。

$$E = \frac{1}{2}Vn^2g - \frac{1}{2}(ng)^2 \sum_k \frac{1}{\hbar^2 k^2/m} + \frac{1}{2} \sum_k \left(E_k - \epsilon_k^0 - ng + \frac{mn^2g^2}{\hbar^2 k^2} \right)$$

最後の和が収束することは $\epsilon_k^0 \gg ng$ での展開でオーダーを評価することでわかる。さらに最初の2つの項は、散乱長 a に対する式 (35.3) の展開における項そのものである。よって、

$$\begin{aligned} \frac{E}{N} &= \frac{1}{2}n \left(g - \frac{mg^2}{\hbar^2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2} \right) + \frac{1}{2}g \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(\frac{E_k}{ng} - \frac{\epsilon_k^0}{ng} - 1 + \frac{ng}{2\epsilon_k^0} \right) \\ &= \frac{2\pi a \hbar^2 n}{m} \left\{ 1 + 8 \left(\frac{2na^3}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty y^2 dy \left[(y^4 + 2y^2)^{\frac{1}{2}} - y^2 - 1 + \frac{1}{2y^2} \right] \right\} \\ &= \frac{2\pi a \hbar^2 n}{m} \left[1 + \frac{128}{15} \left(\frac{na^3}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (35.25) \end{aligned}$$

これはまさに式 (22.19) である。しかしこれら2つの計算は全く異なることに注意されたい。なぜなら、第22節では $E - \frac{1}{2}\mu N$ を評価したのに対し、ここでは E を直接評価しているからである。

式 (35.25) から省略された代表的な項の大きさを調べることは興味深い。まず、凝縮体外の粒子間の相互作用を考える。この寄与の見積もりとして、相互作用の強さにペアの数をかける。

$$\frac{g}{2V} \frac{1}{2} (N - N_0)^2 = \frac{1}{4} ngN \left[\frac{8}{3} \left(\frac{na^3}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2 = N \frac{2\pi \hbar^2 an}{m} \frac{1}{2} \left[\frac{8}{3} \left(\frac{na^3}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2$$

式 (35.11) では、凝縮体から外れた粒子の数の2乗を無視するという以下の置き換えによって近似が行われている。

$$\frac{gN_0^2}{2V} \rightarrow \frac{gN^2}{2V} - \frac{gN(N - N_0)}{V}$$

この表式は、次のオーダーの項を省略している。

$$\frac{g}{2V} (N - N_0)^2 = N \frac{2\pi \hbar^2 an}{m} \left[\frac{8}{3} \left(\frac{na^3}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2$$

この項は、粒子の平均間隔 $d \sim n^{-1/3}$ が散乱長 a よりも十分に長いという希薄な系において非常に小さくなるため、近似は正当化される。

最後に、 g を消去して a に置き換えるための式 (35.3) の使用について考える。エネルギーの主要項は

$$\frac{E}{N} = \frac{gN}{2V} + \dots = \frac{2\pi a \hbar^2 n}{m} + \dots \quad (35.26)$$

という形をしている。この項は、希薄フェルミ気体に対する1次の補正

$$\frac{E}{N} - \frac{3}{5}\epsilon_F^0 = \frac{2}{3\pi} k_F a \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\pi \hbar^2 an}{m} (2 - 1) \quad (35.28)$$

と比較することができる。異なるスピンの対する縮退因子を除けばこれは同じである。式 (35.26) への補正には、式 (35.21) の追加項に加えて、式 (35.3) の2次の項が必要となる。しかし、一旦発散を消去してしまえば、残りの補正項において $g = 4\pi a \hbar^2/m$ と置くことが許される。この最後の近似によって導入される誤差は高次であり、本アプローチ

では無視できる.

基底状態エネルギーと凝縮体の枯渇に関する上記の結果は, 第 22 節で QFT の手法を用いて得られた結果を再現している. 正準変換は, 基底状態と励起状態のより物理的な描像を提供するものの, 高次の計算にはあまり適していない. もちろん, 原理的には相互作用ハミルトニアン (35.8) における全ての高次項を保持することは可能である. その場合, これら 2 つのアプローチは同じ物理的近似に基づいているため, 同一の結果に導かれるはずであるが, 実際の計算には一般にグリーン関数を用いた方法に依存している.

1.2 Cooper Pairs

超伝導体で最も注目すべき性質は電磁場に関連するものであるが、超伝導体は微視的理論の発展において中心的な役割を果たした顕著な熱力学的効果も示す。

電子比熱 C_{el} は低温 ($k_B T \ll \Delta$) において以下のように指数関数的に変化する。これは、基底状態と励起状態を隔てるエネルギーギャップ Δ を持つ集団に典型的なものである。

$$C_{el} \propto \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right) \quad T \rightarrow 0 \quad (1)$$

導出

2 状態系の分配関数 $z = 1 + e^{-\beta\Delta}$ から、系全体の分配関数 $Z = z^N$ を考えると、

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = N \frac{\Delta e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}} \approx N \Delta e^{-\beta\Delta} \quad (2)$$

となることから、比熱 $C_{el} = \frac{\partial U}{\partial T}$ は

$$C_{el} = \frac{N \Delta^2}{k_B T^2} \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right) \propto \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right) \quad T \rightarrow 0 \quad (3)$$

と計算できる。

もう一つの重要な実験的観測は同位体効果であり、同じ元素の異なる同位体の相転移温度 T_c は、イオン質量 M の関数として次のように変化する。

$$T_c \propto M^{-\alpha} \quad \alpha \approx 0.5 \quad (4)$$

本節では、Cooper による単純なモデルを調べることによって、2 つのフェルミ粒子の間の引力相互作用が束縛対の出現につながることを示す。

ポテンシャル $\lambda V(x_1, x_2)$ を介して相互作用するフェルミ海における 2 つのフェルミ粒子のシュレディンガー方程式を考える。運動エネルギー項を T とすると、

$$[T_1 + T_2 + \lambda V(1, 2)]\psi(1, 2) = E\psi(1, 2) \quad (5)$$

となる。摂動論を考えると、 $H_0 = T_1 + T_2$ の固有状態 φ_n と固有値 E_n を用いて、

$$E - E_0 = \langle \varphi_0 | \lambda V | \psi(1, 2) \rangle \quad (6)$$

$$\psi(1, 2) = \varphi_0(1, 2) + \sum_{n \neq 0} \varphi_n(1, 2) \frac{1}{E - E_n} \langle \varphi_n | \lambda V | \psi(1, 2) \rangle \quad (7)$$

と書くことができる。系が体積 V の大きな箱に閉じ込められている場合、摂動のない波動関数は周期境界条件を満たす平面波となる。

$$\varphi_{k_1, k_2}(1, 2) = \frac{1}{V} e^{i(k_1 \cdot x_1 + k_2 \cdot x_2)} \quad (8)$$

真空中に 2 つの電子しか存在しないのであれば、散乱後の運動量 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ には何の制限もない。しかし、絶対零度付近においてはフェルミ海が形成されているので、 $k \leq k_F$ の領域には別の電子が状態を占有している。よって、式 (36.4) に出てくる中間状態の和 \sum_n は $k > k_F$ の領域のみに制限されるため、

$$\sum_n \rightarrow \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 > k_F} \quad (9)$$

のように置き換えることができる. 2つの電子を取り出して議論しているものの, その運動は背景にある多体系 (フェルミ海) の存在によって影響を受けており, この制限がクーパー対の形成に重要な役割を果たす. 均質な媒質中では対 1, 2 の全運動量は保存されるため, 以下の定義を導入する.

$$\mathbf{P} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \quad \mathbf{k} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \quad (10)$$

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2) \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \quad (11)$$

$$v = mV\hbar^{-2} \quad E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} + \frac{\hbar^2 P^2}{4m} \quad (12)$$

これによって,

$$\mathbf{k}_1 = \frac{\mathbf{P}}{2} + \mathbf{k}, \quad \mathbf{k}_2 = \frac{\mathbf{P}}{2} - \mathbf{k} \quad (13)$$

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2}, \quad \mathbf{x}_2 = \mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2} \quad (14)$$

となるので,

$$\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}_1 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}_2 = \left(\frac{\mathbf{P}}{2} + \mathbf{k}\right) \cdot \left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{x}}{2}\right) + \left(\frac{\mathbf{P}}{2} - \mathbf{k}\right) \cdot \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{x}}{2}\right) = \mathbf{P} \cdot \mathbf{R} + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \quad (15)$$

より, 式 (36.8) の自由粒子の波動関数は重心運動と相対運動の平面波の積として完全に分離できる.

$$\varphi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}(1, 2) = V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}} V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (16)$$

均質な媒質であるとは, 系が空間的に一様であり並進対称性を持つことを意味するので, 2粒子間の相互作用ポテンシャル $\lambda V(1, 2)$ は相対距離のみの関数 $\lambda V(\mathbf{x})$ と書ける. このとき, 系の全ハミルトニアン $H = T_1 + T_2 + \lambda V(\mathbf{x})$ は全運動量演算子 $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{R}}$ と交換するので, $[H, \hat{\mathbf{P}}] = 0$ となり, 波動関数 $\psi(1, 2)$ も全運動量 \mathbf{P} の固有状態にならなければならない. 全運動量は保存するため, 散乱で変化するのは相対運動量 \mathbf{k} だけである. したがって, 波動関数 $\psi(1, 2)$ は重心の平面波因子 $V^{-1/2} e^{i\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}}$ を括り出すことができ, 残った相対座標 \mathbf{x} にのみ依存する部分を内部波動関数 $V^{-1/2} \psi_{\mathbf{P}, \mathbf{k}}(\mathbf{x})$ と定義することによって,

$$\psi(1, 2) = V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}} V^{-\frac{1}{2}} \psi_{\mathbf{P}, \mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad \kappa^2 - k^2 = \lambda V^{-1} \langle \mathbf{k} | v | \psi_{\mathbf{P}, \mathbf{k}} \rangle \quad (17)$$

のように書くことができる.

式 (36.14) を式 (36.4) および (36.5) に代入すると, 次のようになる.

$$\psi_{\mathbf{P}, \mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \lambda \int_{\Gamma} \frac{d^3 t}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{t} \cdot \mathbf{x}} \frac{1}{\kappa^2 - t^2} \langle \mathbf{t} | v | \psi_{\mathbf{P}, \mathbf{k}} \rangle \quad (18)$$

ここで, $|\frac{1}{2}\mathbf{P} \pm \mathbf{k}| < k_F$, $\Gamma \equiv |\frac{1}{2}\mathbf{P} \pm \mathbf{t}| > k_F$ となる. これは Bethe-Goldstone 方程式として知られており, 単にフェルミ気体中の2つのフェルミ粒子の対に対する Schrödinger 方程式であり, Pauli の排他律によって他のフェルミ粒子で占有されている中間粒子の出現が禁じられている. 相互作用する対は初期状態においてフェルミ海の内側にいるため, 実遷移を起こすことはできない. しかし, 式 (36.15) の最後の項に見られるように Fermi 海の外側のすべての状態への仮想遷移を起こすことは可能である. 結果として, この方程式の解は元の成分 $\frac{1}{2}\mathbf{P} + \mathbf{k}$ と $\frac{1}{2}\mathbf{P} - \mathbf{k}$ に加えて満たされていないすべての状態に対応する運動量成分を持つ.

一般に Bethe-Goldstone 方程式は数値計算の手法を用いないと解くことができないので, ここでは厳密解を得ることができるモデル的な2粒子ポテンシャルを導入する. ポテンシャルの概念はまず非局所ポテンシャルを含むように一般化される.

$$v(\mathbf{x}) \rightarrow v(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \quad \int d^3 x e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} v(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \rightarrow \int d^3 x d^3 x' e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \quad (19)$$

局所ポテンシャルは次の極限として得られる.

$$v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \rightarrow v(|\mathbf{x}|)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (20)$$

ここで, 非局所可分ポテンシャルを考える. これは次の形を取る.

$$v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = u(|\mathbf{x}|)u(|\mathbf{x}'|)^* \quad (21)$$

Fourier 変換は次のようになる.

$$\int d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}u(\mathbf{x}) = u(\mathbf{k}) \quad (36.19) \quad (22)$$

可分ポテンシャルを用いると式 (36.16) は次のようになる.

$$\kappa^2 - k^2 = \lambda V^{-1}u(\mathbf{k}) \int d^3x u(\mathbf{x})^* \psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (23)$$

導出

非局所ポテンシャルにおける行列要素 $\langle \mathbf{k}|v|\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}} \rangle$ を具体的に計算すると,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}|v|\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}} \rangle &= \int d^3x \int d^3x' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}v(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \\ &= \int d^3x \int d^3x' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}u(\mathbf{x})u(\mathbf{x}')^*\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \\ &= u(\mathbf{k}) \int d^3x u(\mathbf{x})^*\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (24)$$

より, 式 (36.20) が得られる.

右辺に式 (36.15) を代入すると, 次のようになる.

$$\kappa^2 - k^2 = \frac{\lambda|u(\mathbf{k})|^2}{V} + \lambda \int_{\Gamma} \frac{d^3t}{(2\pi)^3} u(\mathbf{t})^* \frac{1}{\kappa^2 - t^2} u(\mathbf{t})(\kappa^2 - k^2) \quad (25)$$

導出

任意の中間状態の運動量 \mathbf{t} に対する行列要素 $\langle \mathbf{t}|v|\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}} \rangle$ も同様に計算できる.

$$\langle \mathbf{t}|v|\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}} \rangle = u(\mathbf{t}) \int d^3x' u(\mathbf{x}')^*\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \quad (26)$$

これを式 (36.15) の右辺の行列要素に代入すると, 波動関数 $\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ は次のように書ける.

$$\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \lambda \int_{\Gamma} \frac{d^3t}{(2\pi)^3} e^{it\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\kappa^2 - t^2} u(\mathbf{t}) \left(\int d^3x' u(\mathbf{x}')^*\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \right) \quad (27)$$

式 (36.20) の右辺にある積分の形を作るため, この式の両辺に $u(\mathbf{x})^*$ を掛けて全空間 \mathbf{x} で積分を実行すると, 次のようになる.

左辺

$$\int d^3x u(\mathbf{x})^*\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{V(\kappa^2 - k^2)}{\lambda u(\mathbf{k})} \quad (28)$$

右辺第 1 項

$$\int d^3x u(\mathbf{x})^* e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \left(\int d^3x u(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right)^* = u(\mathbf{k})^* \quad (29)$$

右辺第 2 項

$$\begin{aligned} \text{右辺第 2 項} &= \lambda \int_{\Gamma} \frac{d^3t}{(2\pi)^3} \left(\int d^3x u(\mathbf{x})^* e^{it\cdot\mathbf{x}} \right) \frac{1}{\kappa^2 - t^2} u(\mathbf{t}) \left(\int d^3x' u(\mathbf{x}')^*\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \right) \\ &= \lambda \int_{\Gamma} \frac{d^3t}{(2\pi)^3} u(\mathbf{t})^* \frac{1}{\kappa^2 - t^2} u(\mathbf{t}) \left(\int d^3x' u(\mathbf{x}')^*\psi_{\mathbf{P},\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \right) \end{aligned} \quad (30)$$

これをまとめると、次のようになる。

$$\frac{V(\kappa^2 - k^2)}{\lambda u(\mathbf{k})} = u(\mathbf{k})^* + \lambda \int_{\Gamma} \frac{d^3t}{(2\pi)^3} \frac{|u(\mathbf{t})|^2}{\kappa^2 - t^2} \left(\frac{V(\kappa^2 - k^2)}{\lambda u(\mathbf{k})} \right) \quad (31)$$

この方程式の両辺に $\frac{\lambda u(\mathbf{k})}{V}$ を掛けると、式 (36.22) が得られる。

これは次のように整理できる。

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{V} \frac{|u(\mathbf{k})|^2}{\kappa^2 - k^2} + \int_{\Gamma} \frac{d^3t}{(2\pi)^3} \frac{|u(\mathbf{t})|^2}{\kappa^2 - t^2} \equiv f(\kappa^2) \quad (32)$$

この方程式から、 κ^2 を決定することができ、関係式

$$\Delta E = E - E_{\text{free}} = \left(\frac{\hbar^2 P^2}{4m} + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} \right) - \left(\frac{\hbar^2 P^2}{4m} + \frac{\hbar^2 k^2}{m} \right) = \frac{\hbar^2}{m} (\kappa^2 - k^2) \quad (33)$$

からエネルギーシフトを得ることができる。

$f(\kappa^2)$ を図示すると、Fig36.2 のようになる。これは $\kappa^2 = k^2$ で特異性を持ち、 $\kappa^2 = k_F^2 - \frac{1}{4}P^2$ で発散を起こす。引力ポテンシャル $\lambda < 0$ の場合には κ^2 は解 k_1^2 と k_2^2 として、 $k_1^2 = k_c^2 < k^2$ と、 $k_2^2 \gtrsim k^2$ の 2 つを持ち、斥力ポテンシャル $\lambda > 0$ の場合には $k^2 \gtrsim k_1^2$ の 1 つを持つ。斥力ポテンシャルの場合には、 $\kappa^2 - k^2 \approx \lambda V^{-1} |u(\mathbf{k})|^2 + O(\lambda^2)$ か

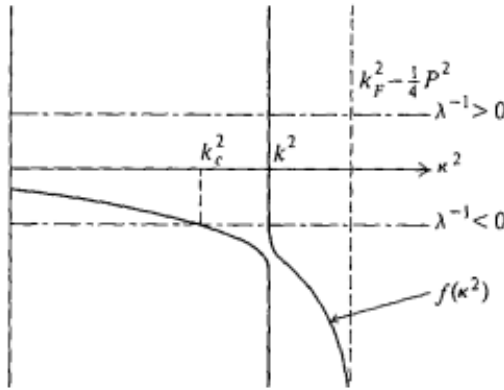


Fig. 36.2 Eigenvalue condition Eq. (36.22) for Bethe-Goldstone equation.

図1 $f(\kappa^2)$ のグラフ

ら、 $|u(\mathbf{k})|^2 V^{-1}$ に比例する小さな量だけエネルギーがシフトするが、引力相互作用の場合には、 k_c という k より明らかに低い解が存在してエネルギーは大きくシフトする。式 (36.22) の第 1 項は k がちょうど k_c に等しくない限り無視できるため、 k_c の近似値は次の方程式の解から得られる。

$$\frac{1}{\lambda} = \int_{\Gamma} \frac{d^3t}{(2\pi)^3} \frac{|u(\mathbf{t})|^2}{k_c^2 - t^2} \quad (34)$$

よって、 $k > k_c$ である限り、対の基底状態エネルギーはその初期の相対波長ベクトル \mathbf{k} に依存せず、 $\kappa^2 \approx k^2$ となる通常の解の振る舞いとは大きく異なる。この解について積分を評価することで解析をする。

$$\frac{1}{|\lambda|} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\Gamma} d^3t \frac{|u(\mathbf{t})|^2}{(t^2 - \kappa^2)} \quad (35)$$

$P = 0$ の場合を考える。 Γ を半径 k_F の球の外側の領域となるので、この積分は次のように書き換えることができる。

$$\frac{1}{|\lambda|} = \int_{k_F}^{\infty} \frac{t^2 dt}{2\pi^2} \frac{|u(\mathbf{t})|^2}{t^2 - \kappa^2} = \frac{k_F}{2\pi^2} \int_1^{\infty} x^2 dx \frac{|u(k_F x)|^2}{x^2 - (\kappa/k_F)^2} \quad (36)$$

$c = \kappa/k_F$ と置き, $f(x) = x^2|u(k_F x)|^2$, $g'(x) = \frac{1}{x^2 - c^2}$ と置くと,

$$g(x) = \int \frac{1}{x^2 - c^2} dx = \frac{1}{2c} \ln \left| \frac{x - c}{x + c} \right| \quad (37)$$

より, 部分積分をすると,

$$\begin{aligned} \int_1^\infty f(x)g'(x)dx &= \left[x^2|u(k_F x)|^2 \frac{1}{2c} \ln \left| \frac{x - c}{x + c} \right| \right]_1^\infty - \int_1^\infty \frac{d}{dx} (x^2|u(k_F x)|^2) \frac{1}{2c} \ln \left| \frac{x - c}{x + c} \right| dx \\ &\approx \frac{|u(k_F)|^2}{2c} \ln \left(\frac{1 + c}{1 - c} \right) \approx \frac{|u(k_F)|^2}{2} \left(\ln \frac{k_F^2}{k_F^2 - \kappa^2} + \ln 4 \right) \end{aligned} \quad (38)$$

となる. ここで $c = \kappa/k_F \approx 1$ と近似し, ポテンシャルは運動量の滑らかな関数であると仮定されているため, 残りの有限な積分は無視した. 式 (36.27) の全体にかかる係数 $\frac{k_F}{2\pi^2}$ をかけると,

$$\frac{1}{|\lambda|} \approx \frac{k_F}{4\pi^2} |u(k_F)|^2 \ln \frac{k_F^2}{k_F^2 - \kappa^2} \quad (39)$$

が得られる. $P = 0$ の場合なので, 相互作用に関与する電子対はフェルミ面上に存在する. したがって, 初期の相対運動量は $k = k_F$ となるので, エネルギーシフトは次のようになる.

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{m} (\kappa^2 - k_F^2) \quad (40)$$

束縛対が形成されることによるエネルギーの低下分 (結合エネルギー) を Δ と定義すると, エネルギーシフトは $\Delta E = -\Delta$ となるので,

$$\kappa^2 = k_F^2 - m\Delta\hbar^{-2} \quad (41)$$

となる. $k_F^2 - \kappa^2 = \frac{m\Delta}{\hbar^2}$ を式 (36.28) に代入すると, 次のようになる.

$$\frac{1}{|\lambda|} = \frac{k_F}{4\pi^2} |u(k_F)|^2 \ln \left(\frac{\hbar^2 k_F^2}{m\Delta} \right) \quad (42)$$

この方程式から, 束縛対の結合エネルギー Δ は次のように得られる.

$$\Delta = \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \exp \left[-\frac{4\pi^2}{k_F |\lambda| |u(k_F)|^2} \right] \quad (43)$$

実際に図からも, λ が小さい場合には Δ は非常に小さくなるのがわかり, この式の結果と一致する.

式 (36.29) は, $k > k_c$ であるときにはいつでも対の基底状態エネルギーを決定することができる. 対応する Δ の表現にはいくつかの非常に注目すべき特徴がある.

1. 対のエネルギーシフト ΔE は体積に依存しない.
2. Δ は摂動論では決して得ることができない.
3. $\Delta(P)$ は $P = 0$ の対に対して最大になる. (今回の計算では $P = 0$ としたが, これは一般に選べるのでギャップに引数を付けた.)

4. 任意の弱い有限範囲の引力ポテンシャルに対して束縛対が出現することは媒質の存在に決定的に依存している. 自由空間にある2つの粒子はポテンシャルの強さがある臨界値を超えない限り束縛状態を形成しない.

フェルミ面付近で反対向きの運動量とスピンを持つ2つの粒子が, 引力相互作用が存在する限り束縛対を形成することを意味している. このようにして, 系はそのエネルギーを Δ だけ低下させ基底状態は明らかに不安定になる. このCooperのモデルは2つの粒子に制限されているので, 多くのクーパー対を巻き込んでいであろう新しい基底状態を記述することはまだできない. それにも関わらず, この計算は不安定性の定性的な記述を提供し, 新しい基底状態が摂動展開によって得られないことを示している. 次節では, Bogoliubovの正準変換によって, このような系の多体基底状態をどのように調べられるかを示す.