8 BCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer) 理論

8.1 クーパー不安定性

超伝導：電子間の引力が起源　他の可能性も
元々は電子-格子相互作用

金属に重心運動量0の電子を付け加えた際の次のような相互作用する2粒子の問題を Cooper に従って議論しよう (L.N.Cooper, Phys.Rev.104, 1189 (1956))。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + V(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$$

$$H\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = E\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$$

重心運動量を0として，次の平面波の二粒子波動関数を重ね合わせて，波動関数をつくろう ($V = L^3$ の系を周期的境界条件で考える)。

$$\Psi_k(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_2}$$

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \sum_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}}\Psi_k(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)}$$

ここで二粒子の波動関数のスピン部分はスピン一重項のような反対称状態であることを仮定すれば，この空間部分の波動関数はパウリの原理から対称であるので，$a_{-\boldsymbol{k}} = a_{\boldsymbol{k}}$ である。

これをシュレディンガー方程式に代入すれば，$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$，相対座標 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1$ として

$$\sum_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}} (2\epsilon_k + V(\boldsymbol{r})) e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = E \sum_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

$$\sum_{\boldsymbol{k}'} a_{\boldsymbol{k}'} V(\boldsymbol{r}) e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} = \sum_{\boldsymbol{k}'} (E - 2\epsilon_{k'}) a_{\boldsymbol{k}'} e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}$$

となり，$e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ を書けて全空間で積分すれば $(1/V)\int d^3r\, e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}} = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}$ だから

$$(E - 2\epsilon_k) a_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{k}'} \int dr^3\, V(\boldsymbol{r}) e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}} a_{\boldsymbol{k}'} = \sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}'}$$

$$\boxed{a_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{E - 2\epsilon_k} \sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}'} \quad (*)}$$

ここで

$$V_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}} = \frac{1}{V} \int dr^3\, V(\boldsymbol{r}) e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}}$$

であるが，更にこの相互作用がフェルミエネルギー E_F 付近 $\hbar\omega_D$ 内でのみ有限でかつ引力と仮定しよう。

$$V_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}} = \begin{cases} -\dfrac{g}{V},\ g > 0 & |\epsilon_k - \epsilon_E|, |\epsilon_{k'} - \epsilon_E|, < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}$$

よって (*) で $\boldsymbol{k}$ でフェルミ面付近幅 $\hbar\omega_D$ での和をとれば

$$\sum_{\boldsymbol{k}}{}' a_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{k}}{}' \frac{1}{E - 2\epsilon_k} \sum_{\boldsymbol{k}'}{}' \frac{-g}{V} a_{\boldsymbol{k}'}$$

これは，単位体積当たりの状態密度を $D(\epsilon) = D_F$(定数) として

$$1 = \frac{g}{V} \sum_{\boldsymbol{k}}{}' \frac{1}{2\epsilon_k - E} = \frac{g}{V} \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} d\epsilon \, (V D_F) \frac{1}{2\epsilon - E}$$

$$= g D_F \log(2\epsilon - E) \Big|_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D}$$

$$= g D_F \log \frac{2E_F + 2\hbar\omega_D - E}{2E_F - E}$$

$$e^{\frac{1}{gD_F}} = \frac{2E_F + 2\hbar\omega_D - E}{2E_F - E}$$

$\int^x \frac{1}{x} dx = \log x$

//

十分に引力が弱く $E \sim 2E_F$ とすれば，

$$e^{\frac{1}{gD_F}} \sim \frac{2\hbar\omega_D}{2E_F - E}$$

$2E_F - E = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{gD_F}}$

$$E \sim 2E_F - 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{gD_F}}$$

非摂動的な振舞い

すなわちどんなに小さな引力 $(g > 0)$ でも g 二電子のエネルギーはフェルミ面上の二電子のエネルギー $2E_F$ より小さい，つまりフェルミ面は不安定であることとなる。これをクーパー不安定性と呼び，BCS 理論の重要な部分である。