

Bogoliubov-de Gennes 方程式の導出

永井佑紀

平成 22 年 2 月 7 日

Bogoliubov-de Gennes 方程式を導出する。その際、なるべく導出の過程がわかりやすくなるように、天下り的に Bogoliubov 変換を定義しないようにした。特に、なるべく教科書のたぐいを参考にせず、自分が納得のいく導出を目指した。

1 ハミルトニアン

電子間相互作用を取り入れた電子系のハミルトニアンは

$$H = H_0 + H_1 \quad (1)$$

$$= \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h_0(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

と書ける。ここで、 σ はスピンインデックス、 $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ は場所 \mathbf{r} 、スピン σ の電子を生成させる演算子である。 $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ は、場所 \mathbf{r} スピン σ の電子と場所 \mathbf{r}' スピン σ' の電子が受ける相互作用である。 h_0 は相互作用のない電子系での 1 電子のハミルトニアンであり、自由電子系であれば、

$$h_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla - i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right) + V(\mathbf{r}) - \mu \quad (3)$$

と書ける。結晶中などでは h_0 の形は変更を受ける。

一様系においては、ノート「一般的な Bogoliubov 変換」ですでに BCS ハミルトニアンを導出している。このノートでは、非一様系における BCS ハミルトニアンを導出する。

2 平均場近似

電子間相互作用に平均場近似を施す。今回考える平均場は

$$\langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle, \quad \langle \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle \quad (4)$$

のような Cooper ペアの期待値を表すものである。Hartree 項や Fock 項は今回は無視する。そして、演算子 $\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}')$ や $\Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \Psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ を

$$\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') = \langle \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle + \left[\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') - \langle \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle \right] \quad (5)$$

$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') = \langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle + \left[\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') - \langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle \right] \quad (6)$$

と書き換える。これらの演算子を利用すると、ハミルトニアン H の第二項 H_1 は

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \left(\langle \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle + \left[\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') - \langle \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle \right] \right) \\ \times g_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (-\langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle) - [\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') - \langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle] \quad (7)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \left(-g_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') - g_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \right. \\ \left. - g_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle \langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle \right. \\ \left. - g_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') - \langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle] [\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') - \langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle] \right) \quad (8)$$

となる。定数項である第3項と平均場からのずれの二次の項である第4項を無視して整理すると

$$H_1 \sim \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \left(\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) (-g_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \right. \\ \left. + \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) (-g_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \right) \quad (9)$$

となる。ここで、ベクトル

$$\vec{\Psi}(\mathbf{r}) \equiv \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (10)$$

を導入して H_1 の第2項をさらに書き換えると

$$\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) & \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -g_{\uparrow, \uparrow}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle & -g_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') \rangle \\ -g_{\downarrow, \uparrow}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle & -g_{\downarrow, \downarrow}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \\ \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} \quad (11)$$

となる。超伝導秩序変数として

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv -g_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle \quad (12)$$

$$\hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \begin{pmatrix} \Delta_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') & \Delta_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ \Delta_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') & \Delta_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \end{pmatrix} \quad (13)$$

を定義すれば、

$$\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \vec{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \vec{\Psi}^{\dagger T}(\mathbf{r}') \quad (14)$$

となる。ハミルトニアン H がエルミート行列であれば、 H_1 の第1項は第2項のエルミート共役なはずである。ハミルトニアン H は座標 $\mathbf{r}\mathbf{r}'$ とスピンインデックスを足に持つ無限次元行列とみなすことができるので、エルミート共役を取るためには座標 \mathbf{r} と \mathbf{r}' を取り替えてスピン行列に関して転置して複素共役をとればよい。実際、 H_1 の第2項のエルミート共役を取ると、

$$\frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r} \vec{\Psi}^T(\mathbf{r}) \hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \vec{\Psi}(\mathbf{r}') \quad (15)$$

となり、 $\hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ が

$$\hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \begin{pmatrix} -g_{\uparrow, \uparrow}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle & -g_{\downarrow, \uparrow}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle \\ -g_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \langle \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle & -g_{\downarrow, \downarrow}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \langle \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \rangle \end{pmatrix} \quad (16)$$

であり¹、 $g_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g_{\sigma', \sigma}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2$ を用いると H_1 の第1項と等しいことが確認できる。よって、 H_1 は結局

$$H_1 = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r} \vec{\Psi}^T(\mathbf{r}) \hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \vec{\Psi}(\mathbf{r}') + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \vec{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \vec{\Psi}^{\dagger T}(\mathbf{r}') \quad (17)$$

となる。なお、 $(\hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}))_{\sigma\sigma'} = -(\hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))_{\sigma\sigma'}$ が常に成り立っている。

¹ g は相互作用定数なので実数である。

²両方ともスピン σ 位置 \mathbf{r} の電子とスピン σ' 位置 \mathbf{r}' の電子の間に働く相互作用を意味しているので等しい。

3 Schrodinger 方程式の解を用いた変形

次に、ハミルトニアン H の第1項 H_0 を見通しをよくするために変形する。その際には、一般の h_0 においても対応が見つるように議論する。まず、第二量子化表示での電子間相互作用のないハミルトニアン H_0 を対角化することを考える。 H_0 は

$$H_0 = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h_0 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (18)$$

である。このハミルトニアンは h_0 の具体形がわからなければ解けないように思われる。しかし、Schrodinger 方程式：

$$h_0 f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}) = E_{\nu} f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}) \quad (19)$$

$$\int d\mathbf{r} f_{\nu,\sigma}^*(\mathbf{r}) f_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) = \delta_{\nu,\nu'} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (20)$$

$$\sum_{\nu} f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}) f_{\nu,\sigma'}^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (21)$$

を解いて固有値 E_{ν} と規格化された波動関数 $f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r})$ が得られていれば解ける。この得られた波動関数を用いることで演算子 $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ を

$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} c_{\nu,\sigma} f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}) \quad (22)$$

とユニタリ変換して H_0 に代入することにしよう。ここで、 $c_{\nu,\sigma}$ はスピン σ 固有値 ν の電子を消滅させる演算子である。その結果、 H_0 は

$$H_0 = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \sum_{\nu,\nu'} c_{\nu,\sigma}^{\dagger} c_{\nu',\sigma} f_{\nu,\sigma}^*(\mathbf{r}) h_0 f_{\nu',\sigma}(\mathbf{r}) \quad (23)$$

$$= \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \sum_{\nu,\nu'} c_{\nu,\sigma}^{\dagger} c_{\nu',\sigma} f_{\nu,\sigma}^*(\mathbf{r}) E_{\nu'} f_{\nu',\sigma}(\mathbf{r}) \quad (24)$$

$$= \sum_{\sigma} \sum_{\nu} c_{\nu,\sigma}^{\dagger} c_{\nu,\sigma} E_{\nu} \quad (25)$$

と対角化できる。

この結果を逆に戻す過程を用いて式の変形を行うと、

$$\sum_{\sigma} \sum_{\nu} c_{\nu,\sigma}^{\dagger} c_{\nu',\sigma} E_{\nu} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \sum_{\nu,\nu'} c_{\nu,\sigma}^{\dagger} c_{\nu',\sigma} E_{\nu} f_{\nu,\sigma}^*(\mathbf{r}) f_{\nu',\sigma}(\mathbf{r}) \quad (26)$$

$$= \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \sum_{\nu,\nu'} c_{\nu,\sigma}^{\dagger} c_{\nu',\sigma} (E_{\nu} f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}))^* f_{\nu',\sigma}(\mathbf{r}) \quad (27)$$

$$= - \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \sum_{\nu,\nu'} c_{\nu',\sigma} c_{\nu,\sigma}^{\dagger} (h_0 f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}))^* f_{\nu',\sigma}(\mathbf{r}) \quad (28)$$

$$= - \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) (h_0^* \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})) \quad (29)$$

$$= - \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) h_0^* \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \quad (30)$$

が得られる。この変形を用いて、

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h_0 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h_0 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (31)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h_0 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) h_0^* \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \quad (32)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h_0(\mathbf{r}') \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) h_0^*(\mathbf{r}') \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \quad (33)$$

と H_0 を変形し、先ほど導入したベクトルを使うと、

$$H_0 = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \vec{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 \vec{\Psi}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \vec{\Psi}^T(\mathbf{r}) h_0^*(\mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \vec{\Psi}^{\dagger T}(\mathbf{r}) \quad (34)$$

となる。ここで $\hat{\sigma}_0$ は単位行列である。

4 南部空間の導入

ここまでで、 H_0 も H_1 も比較的きれいな形で書くことができた。ここでさらにハミルトニアンをきれいな形で書くために、南部空間を導入する。導入するベクトルは

$$\vec{\Phi} \equiv \begin{pmatrix} \vec{\Psi}(\mathbf{r}) \\ \vec{\Psi}^{\dagger T}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (35)$$

$$= \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (36)$$

である。

式 (17)(34) をこのベクトルを使って書き下すと

$$H = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \vec{\Phi}(\mathbf{r})^{\dagger} \begin{pmatrix} h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 & \hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ \hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) & -h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \vec{\Phi}(\mathbf{r}') \quad (37)$$

となる。

5 Bogoliubov 変換の導入

前節で得られた式を対角化したい。そのためには、Schrodinger 方程式のような方程式を解くことで固有値と固有関数を得ることで、その固有関数を使ってユニタリー変換をすればよい。式 (19) を参考にすると、解くべき Schrodinger 方程式ライクな式は

$$\int d\mathbf{r}' \begin{pmatrix} h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 & \hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ \hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) & -h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{\nu}(\mathbf{r}') \\ \mathbf{g}_{\nu}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = E_{\nu} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{\nu}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{g}_{\nu}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (38)$$

となる。ここで、 $\mathbf{f}_{\nu}(\mathbf{r}')$ と $\mathbf{g}_{\nu}(\mathbf{r}')$ はスピン空間のベクトルである。この方程式は式 (19) と似ているけれども \mathbf{r}' の積分が入っているので少々違っているように見える。しかし、 \mathbf{r}' も行列の足だと思えば同じような対角化問題であることに気付く。つまり、

$$\begin{pmatrix} \check{h}_0 & \check{\Delta} \\ \check{\Delta}^{\dagger} & -\check{h}_0(\mathbf{r}') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{f}_{\nu} \\ \vec{g}_{\nu} \end{pmatrix} = E_{\nu} \begin{pmatrix} \vec{f}_{\nu} \\ \vec{g}_{\nu} \end{pmatrix} \quad (39)$$

のように \mathbf{r} とスピン σ の足を持つ無限次元ベクトル \vec{f}_ν, \vec{g}_ν を用意すると、どう見ても対角化問題になっている。ここでさらに、方程式を

$$\mathcal{H}\vec{\phi}_\nu = E_\nu\vec{\phi}_\nu \quad (40)$$

$$\mathcal{H} \equiv \begin{pmatrix} \check{h}_0 & \check{\Delta} \\ \check{\Delta}^\dagger & -\check{h}_0 \end{pmatrix} \quad (41)$$

$$\vec{\phi}_\nu \equiv \begin{pmatrix} \vec{f}_\nu \\ \vec{g}_\nu \end{pmatrix} \quad (42)$$

とすれば、ただの行列の固有値問題になっていることがよくわかる。この固有値問題が解けて、固有値 E_ν と規格化された固有ベクトル $\vec{\phi}_\nu$ が得られたとする。行列 \mathcal{H} はエルミート行列なので、固有ベクトルの組は完全系をなす。その時には、それぞれの規格化された固有ベクトルは直交するので³、

$$\vec{\phi}_\nu \cdot \vec{\phi}_\mu = \delta_{\nu\mu} \quad (43)$$

である。この式をもとの形式で書き直すと

$$\int d\mathbf{r}' \begin{pmatrix} \mathbf{f}_\nu^\dagger(\mathbf{r}') & \mathbf{g}_\nu^\dagger(\mathbf{r}') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_\mu(\mathbf{r}') \\ \mathbf{g}_\mu(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \delta_{\nu\mu} \quad (44)$$

$$\int d\mathbf{r}' \begin{pmatrix} f_{\nu\uparrow}^*(\mathbf{r}') & f_{\nu\downarrow}^*(\mathbf{r}') & g_{\nu\uparrow}^*(\mathbf{r}') & g_{\nu\downarrow}^*(\mathbf{r}') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{\mu\uparrow}(\mathbf{r}') \\ f_{\mu\downarrow}(\mathbf{r}') \\ g_{\mu\uparrow}(\mathbf{r}') \\ g_{\mu\downarrow}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = \delta_{\nu\mu} \quad (45)$$

となる。特に、 $\nu = \mu$ ならば

$$\int d\mathbf{r} \sum_\sigma (|f_{\nu\sigma}(\mathbf{r})|^2 + |g_{\nu\sigma}(\mathbf{r})|^2) = 1 \quad (46)$$

となるので、これは通常量子力学の確率が 1 である条件に似ている。

次に行列 \mathcal{H} がきれいな形をしているので、何らかの条件式が出せないかを考える。四本の式を具体的に書き下すと

$$\int d\mathbf{r}' \left(h_0(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')f_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}') + \sum_\sigma \Delta_{\uparrow\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')g_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}') \right) = E_\nu f_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}) \quad (47)$$

$$\int d\mathbf{r}' \left(h_0(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')f_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}') + \sum_\sigma \Delta_{\downarrow\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')g_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}') \right) = E_\nu f_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}) \quad (48)$$

$$\int d\mathbf{r}' \left(\sum_\sigma (-\Delta_{\uparrow,\sigma}^*)(\mathbf{r}, \mathbf{r}')f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}') - h_0(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')g_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}') \right) = E_\nu g_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}) \quad (49)$$

$$\int d\mathbf{r}' \left(\sum_\sigma (-\Delta_{\downarrow,\sigma}^*)(\mathbf{r}, \mathbf{r}')f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}') - h_0(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')g_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}') \right) = E_\nu g_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}) \quad (50)$$

となる。第 2 式と第 3 式は複素共役を取って両辺に -1 をかけると

$$\int d\mathbf{r}' \left(-h_0(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')f_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}') - \sum_\sigma \Delta_{\downarrow\sigma}^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}')g_{\nu,\sigma}^*(\mathbf{r}') \right) = -E_\nu f_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}) \quad (51)$$

$$\int d\mathbf{r}' \left(\sum_\sigma (\Delta_{\uparrow,\sigma})(\mathbf{r}, \mathbf{r}')f_{\nu,\sigma}^*(\mathbf{r}') + h_0(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')g_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}') \right) = -E_\nu g_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}) \quad (52)$$

³無限次元であるとかいろいろ細かい議論すべきことはあるが、ここでは物理的理解を優先させて省く。

となり、第2式は第4式、第3式は第1式に似ている。よく見ると、 $E_n \rightarrow -E_n$ 、 $f \rightarrow g^*$ 、 $g \rightarrow f^*$ の置き換えを行ったものと等しい。これはつまり、ある固有値 E_n を持つ固有関数 $(f_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}), f_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}), g_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}), g_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}))$ を見つけた場合、 $-E_n$ も必ず固有値でありそのときの固有関数は $(g_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}), g_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}), f_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}), f_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}))$ であることを意味している。実際、固有関数として $(g_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}), g_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}), f_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}), f_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}))$ を方程式の第1式の左辺に代入して式(52)を用いると、

$$\int d\mathbf{r}' \left(h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') g_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}') + \sum_{\sigma} \Delta_{\uparrow\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f_{\nu,\sigma}^*(\mathbf{r}') \right) = -E_n g_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}) \quad (53)$$

となり、確かに固有関数となっていることがわかる。よって、任意のベクトル $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ はこれらの固有ベクトルの線形結合：

$$\mathbf{a}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} \left[c_{\nu} \begin{pmatrix} f_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}) \\ f_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}) \\ g_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}) \\ g_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} + d_{\nu} \begin{pmatrix} g_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}) \\ g_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}) \\ f_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}) \\ f_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \right] \quad (54)$$

で書ける。

以上から、演算子からなるベクトル $\vec{\Phi}(\mathbf{r})$ をこれらの固有ベクトル（固有関数）を用いて展開したい。まず、

$$\vec{\Phi}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \sum_{\nu} \left[\alpha_{\nu} \begin{pmatrix} f_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}) \\ f_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}) \\ g_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}) \\ g_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} + \beta_{\nu} \begin{pmatrix} g_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}) \\ g_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}) \\ f_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}) \\ f_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \right] \quad (55)$$

ここで、 α_{ν} は固有状態 $(f_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}), f_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}), g_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}), g_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}))$ を消滅させる演算子であり、 β_{ν} は固有状態 $(g_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}), g_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}), f_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}), f_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}))$ を消滅させる演算子である。

次に、 $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ は二つの表現：

$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} \int [\alpha_{\nu} f_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) + \beta_{\nu} g_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r})] \quad (56)$$

$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = (\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}))^{\dagger} \quad (57)$$

$$= \sum_{\nu} [\alpha_{\nu} g_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) + \beta_{\nu} f_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r})]^{\dagger} \quad (58)$$

$$= \sum_{\nu} [\alpha_{\nu}^{\dagger} g_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}) + \beta_{\nu}^{\dagger} f_{\nu\sigma}(\mathbf{r})] \quad (59)$$

があることに着目する。よって、

$$\beta_{\nu} = \alpha_{\nu}^{\dagger} \quad (60)$$

という関係式が成り立つ。以上から、

$$\vec{\Phi}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} [\alpha_{\nu} \vec{a}_{\nu+}(\mathbf{r}) + \alpha_{\nu}^{\dagger} \vec{a}_{\nu-}(\mathbf{r})] \quad (61)$$

$$\vec{a}_{\nu+}(\mathbf{r}) \equiv \begin{pmatrix} f_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}) \\ f_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}) \\ g_{\nu,\uparrow}(\mathbf{r}) \\ g_{\nu,\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (62)$$

$$\vec{a}_{\nu-}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} g_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}) \\ g_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}) \\ f_{\nu,\uparrow}^*(\mathbf{r}) \\ f_{\nu,\downarrow}^*(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (63)$$

を用いればハミルトニアンを対角化できるはずである。

6 Bogoliubov-de Gennes 方程式

では、実際に代入してみよう。ハミルトニアンに式 (61) を代入すると

$$H = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \sum_{\nu} \left[\alpha_{\nu}^{\dagger} \bar{a}_{\nu+}^{\dagger}(\mathbf{r}) + \alpha_{\nu} \bar{a}_{\nu-}^{\dagger}(\mathbf{r}) \right] \begin{pmatrix} h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 & \hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ \hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) & -h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \sum_{\nu'} \left[\alpha_{\nu'} \bar{a}_{\nu'+}(\mathbf{r}') + \alpha_{\nu'}^{\dagger} \bar{a}_{\nu'-}(\mathbf{r}') \right] \quad (64)$$

$$= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \sum_{\nu, \nu'} \int d\mathbf{r}' \left[\alpha_{\nu}^{\dagger} \bar{a}_{\nu+}^{\dagger}(\mathbf{r}) + \alpha_{\nu} \bar{a}_{\nu-}^{\dagger}(\mathbf{r}) \right] \begin{pmatrix} h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 & \hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ \hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) & -h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \left[\alpha_{\nu'} \bar{a}_{\nu'+}(\mathbf{r}') + \alpha_{\nu'}^{\dagger} \bar{a}_{\nu'-}(\mathbf{r}') \right] \quad (65)$$

$$= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \sum_{\nu, \nu'} \left[\alpha_{\nu}^{\dagger} \bar{a}_{\nu+}^{\dagger}(\mathbf{r}) + \alpha_{\nu} \bar{a}_{\nu-}^{\dagger}(\mathbf{r}) \right] \left[\alpha_{\nu'} E_{\nu'} \bar{a}_{\nu'+}(\mathbf{r}) - \alpha_{\nu'}^{\dagger} E_{\nu'} \bar{a}_{\nu'-}(\mathbf{r}) \right] \quad (66)$$

となる。さらに、それぞれの固有関数は直交することを用いると⁴

$$H = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \sum_{\nu, \nu'} \left[\alpha_{\nu}^{\dagger} \bar{a}_{\nu+}^{\dagger}(\mathbf{r}) + \alpha_{\nu} \bar{a}_{\nu-}^{\dagger}(\mathbf{r}) \right] \left[\alpha_{\nu'} E_{\nu'} \bar{a}_{\nu'+}(\mathbf{r}) - \alpha_{\nu'}^{\dagger} E_{\nu'} \bar{a}_{\nu'-}(\mathbf{r}) \right] \quad (67)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\nu} \left[E_{\nu} \alpha_{\nu}^{\dagger} \alpha_{\nu} - E_{\nu} \alpha_{\nu} \alpha_{\nu}^{\dagger} \right] \quad (68)$$

となる。そして、 α_{ν} がフェルミオンの反交換関係を満たしていれば⁵

$$H = \sum_{\nu} E_{\nu} \alpha_{\nu}^{\dagger} \alpha_{\nu} \quad (69)$$

なり、ハミルトニアンが対角化できた。

結局、ハミルトニアンを対角化したい場合には、

$$\int d\mathbf{r}' \begin{pmatrix} h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 & \hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ \hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) & -h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{\nu}(\mathbf{r}') \\ \mathbf{g}_{\nu}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = E_{\nu} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_{\nu}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{g}_{\nu}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (70)$$

という方程式を解いて固有値を固有関数を求めればよいということになる。この方程式を Bogoliubov-de Gennes 方程式 (BdG 方程式) と呼ぶ。通常使われるような記法を用いると

$$\int d\mathbf{r}' \begin{pmatrix} h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 & \hat{\Delta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ \hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) & -h_0(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\nu}(\mathbf{r}') \\ \mathbf{v}_{\nu}(\mathbf{r}') \end{pmatrix} = E_{\nu} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\nu}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{v}_{\nu}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (71)$$

となる。

スピン一重項の s 波超伝導体の場合には、引力相互作用が接触型なので、BdG 方程式は

$$\begin{pmatrix} h_0(\mathbf{r}) & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -h_0(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\nu}(\mathbf{r}) \\ v_{\nu}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E_{\nu} \begin{pmatrix} u_{\nu}(\mathbf{r}) \\ v_{\nu}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (72)$$

となる。

参考文献

浅野泰寛「超伝導転移及び Andreev 反射と Josephson 効果」<http://zvine-ap.eng.hokudai.ac.jp/asano/pdf1/book2.pdf>

⁴式 (45) を用いる。

⁵証明は省く。