Gor'kov 方程式の行列表示 part2

永井佑紀

平成 18 年 10 月 3 日

Gor'kov 方程式を行列表示する。以前行ったものは少し普遍性が低いので改めてまとめなおす。triplet でも singlet でも共通の 4x4 の行列微分方程式になることを確認する。また、singlet の場合と、unitary な triplet の場合には、4x4 の Gor'kov 方程式からスピンインデックスを取り除いて 2x2 の Gor'kov 方程式に次数を落とすことができることを示す。以前のノートでは singlet とカイラル p 波の場合のみの導出であったが、今回のノートの導出では unitary な triplet のペアポテンシャルであればすべて適用可能である。

1 Gor'kov 方程式

Green 関数と異常 Green 関数と、その複素共役に対応するものもすべて書き下すと

$$G_{\alpha\beta}(x,x') \equiv -\langle T_{\tau}\psi_{\alpha}(x)\psi_{\beta}^{\dagger}(x')\rangle$$
 (1)

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(x,x') \equiv \langle T_{\tau}\psi_{\alpha}^{\dagger}(x)\psi_{\beta}(x')\rangle \tag{2}$$

$$F_{\alpha\beta}(x, x') \equiv \langle \mathcal{T}_{\tau}[\psi_{\alpha}(x)\psi_{\beta}(x')] \rangle \tag{3}$$

$$F_{\alpha\beta}^{\dagger}(x,x') \equiv \langle \mathcal{T}_{\tau}[\psi_{\alpha}^{\dagger}(x)\psi_{\beta}^{\dagger}(x')] \rangle$$
 (4)

である。また、pair potential を

$$\Delta_{\alpha\beta}(x) \equiv |g|F_{\alpha\beta}(x,x) \tag{5}$$

と定義する。このとき、BCS 近似におけるこれらの運動方程式は

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) G_{\alpha\beta}(x, x') + \Delta_{\alpha\gamma}(x) F_{\gamma\beta}^{\dagger}(x, x') = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(x - x') \tag{6}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \bar{G}_{\alpha\beta}(x, x') + \Delta_{\alpha\gamma}^*(x) F_{\gamma\beta}(x, x') = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(x - x') \tag{7}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) F_{\alpha\beta}^{\dagger}(x, x') - \Delta_{\alpha\gamma}^*(x) G_{\gamma\beta}(x, x') = 0 \tag{8}$$

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) F_{\alpha\beta}(x, x') - \Delta_{\alpha\gamma}(x) \bar{G}_{\gamma\beta}(x, x') = 0 \tag{9}$$

(10)

と書ける。これらの方程式を 4x4 の行列方程式に整理する。

2 Green 関数の行列表示

スピンを考慮して、2x2 の行列形式:

$$\hat{G}(x,x') \equiv \begin{pmatrix} G_{\uparrow\uparrow}(x,x') & G_{\uparrow\downarrow}(x,x') \\ G_{\downarrow\uparrow}(x,x') & G_{\downarrow\downarrow}(x,x') \end{pmatrix}$$
(11)

$$\hat{F}(x,x') \equiv \begin{pmatrix} F_{\uparrow\uparrow}(x,x') & F_{\uparrow\downarrow}(x,x') \\ F_{\downarrow\uparrow}(x,x') & F_{\downarrow\downarrow}(x,x') \end{pmatrix}$$

$$\hat{\bar{G}}(x,x') \equiv \begin{pmatrix} \bar{G}_{\uparrow\uparrow}(x,x') & \bar{G}_{\uparrow\downarrow}(x,x') \\ \bar{G}_{\downarrow\uparrow}(x,x') & \bar{G}_{\downarrow\downarrow}(x,x') \end{pmatrix}$$
(12)

$$\hat{\bar{G}}(x,x') \equiv \begin{pmatrix} \bar{G}_{\uparrow\uparrow}(x,x') & \bar{G}_{\uparrow\downarrow}(x,x') \\ \bar{G}_{\downarrow\uparrow}(x,x') & \bar{G}_{\downarrow\downarrow}(x,x') \end{pmatrix}$$
(13)

$$\hat{\bar{F}}(x,x') \equiv \begin{pmatrix} F_{\uparrow\uparrow}^{\dagger}(x,x') & F_{\uparrow\downarrow}^{\dagger}(x,x') \\ F_{\downarrow\uparrow}^{\dagger}(x,x') & F_{\downarrow\downarrow}^{\dagger}(x,x') \end{pmatrix}$$
(14)

$$\hat{\Delta}(x) \equiv \begin{pmatrix} \Delta_{\uparrow\uparrow}(x) & \Delta_{\uparrow\downarrow}(x) \\ \Delta_{\downarrow\uparrow}(x) & \Delta_{\downarrow\downarrow}(x) \end{pmatrix}$$
(15)

を導入する。これらを用いると各スピン成分ごとの Gor'kov 方程式は

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\hat{G}(x, x') + \hat{\Delta}(x)\hat{\bar{F}}(x, x') = \hat{\sigma}_0 \delta^{(4)}(x - x')$$
(16)

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\bar{G}}(x, x') + \hat{\Delta}^*(x) \hat{F}(x, x') = \hat{\sigma}_0 \delta^{(4)}(x - x') \tag{17}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\bar{F}}(x, x') - \hat{\Delta}^*(x)\hat{G}(x, x') = \hat{0}$$
(18)

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\hat{F}(x, x') - \hat{\Delta}(x)\hat{\bar{G}}(x, x') = \hat{0}$$
(19)

(20)

4本の 2x2 の行列微分方程式にまとめることができる。これをさらにまとめると

$$\begin{pmatrix}
\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\sigma}_0 & -\hat{\Delta}(x) \\
\hat{\Delta}^* & \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\sigma}_0
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\hat{G}(x, x') & \hat{F}(x, x') \\
-\hat{F}(x, x') & \hat{G}(x, x')
\end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix}
\hat{\sigma}_0 & \hat{0} \\
\hat{0} & \hat{\sigma}_0
\end{pmatrix} (21)$$

となり、4x4の Gor'kov 方程式を得ることができる。ここで、4x4の Green 関数の行列表示:

$$\check{G}^{-1}(x) \equiv \begin{pmatrix} \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \hat{\sigma}_0 & -\hat{\Delta}(x) \\ \hat{\Delta}^* & \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix}$$
(22)

$$\check{G}(x,x') \equiv \begin{pmatrix} \hat{G}(x,x') & \hat{F}(x,x') \\ -\hat{\bar{F}}(x,x') & \hat{\bar{G}}(x,x') \end{pmatrix}$$
(23)

を導入すれば、Gor'kov 方程式は

$$\check{G}^{-1}(x)\check{G}(x,x') = \check{1}\delta^{(4)}(x-x') \tag{24}$$

と書くことができる。

この式は 2x2 と 4x4 の違いはあるが singlet の Gor'kov 方程式と同様な形式をしている。 2x2 の singlet の Eilenberger 方程式の導出は行列の成分の詳細に依らない形となっているので、全く同様の手法で triplet の Eilenberger 方程式を導出できることがわかる。

3 singlet-pairing の場合

4x4 の行列形式の Gor'kov 方程式を用いて、singlet の Gor'kov 方程式を導出する。singlet-pairing においては、pair potential は spin 添え字に対して反対称である。したがって、

$$\Delta_{\alpha\beta}(x) = -\Delta_{\beta\alpha}(x) \tag{25}$$

が成り立つ。ここで、Pauli 行列

$$\hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{26}$$

を導入する。このとき、

$$\hat{\Delta}(x) = i\hat{\sigma}^y \Delta(x) \tag{27}$$

$$\hat{\Delta}^{\dagger}(x) = -i\hat{\sigma}^y \Delta^*(x) \tag{28}$$

を導入すれば、spin 添え字を持たない量を定義できる。また、異常 Green 関数は pair potential と関連しているので、同様な表現を用いることができて、

$$\hat{F}(x,x') = i\hat{\sigma}^y F(x,x') \tag{29}$$

$$\hat{\bar{F}}(x,x') = -i\hat{\sigma}^y F^{\dagger}(x,x') \tag{30}$$

とすることができる。これらを式 (21) に代入すると

$$\begin{pmatrix}
\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\sigma}_0 & -i\hat{\sigma}^y \Delta(x) \\
i\hat{\sigma}^y \Delta^* & \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\sigma}_0
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\hat{G}(x, x') & i\hat{\sigma}^y F(x, x') \\
-i\hat{\sigma}^y F^{\dagger}(x, x') & \hat{G}(x, x')
\end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix}
\hat{\sigma}_0 & \hat{0} \\
\hat{0} & \hat{\sigma}_0
\end{pmatrix} (31)$$

となり、さらに整理すれば

$$\begin{pmatrix}
\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\hat{\sigma}_0 & -i\hat{\sigma}_0\Delta(x) \\
i\hat{\sigma}_0\Delta^* & \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)\hat{\sigma}_0
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\hat{G}(x, x') & i\hat{\sigma}_0F(x, x') \\
-i\hat{\sigma}_0F^{\dagger}(x, x') & \hat{G}(x, x')
\end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x')\begin{pmatrix}
\hat{\sigma}_0 & \hat{0} \\
\hat{0} & \hat{\sigma}_0
\end{pmatrix} (32)$$

となるから、正常 Green 関数は $\hat{\sigma}$ に比例し、

$$\hat{G}(x, x') = \hat{\sigma}_0 G(x, x') \tag{33}$$

$$\hat{\bar{G}}(x,x') = \hat{\sigma}_0 \bar{G}(x,x') \tag{34}$$

とならなければならない。以上より運動方程式はスピン成分を持たない Green 関数で書くことができて

$$\begin{pmatrix}
\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) & -\Delta(x) \\
\Delta^*(x) & \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
G(x, x') & F(x, x') \\
-F^{\dagger}(x, x') & \bar{G}(x, x')
\end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(35)

となる。この表式は式(21)を2x2にそのまま直したような形をしている。

4 triplet-pairing の場合

以前のノートでは、triplet としてカイラル p 波のみを考えたが、unitary なペアポテンシャルであるならすべて スピンインデックスを消去した形の Gor'kov 方程式を得ることができることを示す。triplet のペアポテンシャルは

$$\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = i(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\sigma}_y \tag{36}$$

$$= \begin{pmatrix} -d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) & d_z(\mathbf{k}) \\ d_z(\mathbf{k}) & d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$
(37)

と書くことができる。また、 $q = i(d \times d^*)$ とすると

$$\hat{\Delta}\hat{\Delta}^{\dagger} = |\mathbf{d}|^2 \hat{\sigma}_0 + \mathbf{q} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \tag{38}$$

である。ペアポテンシャルが unitary であるというのは、 $\mathbf{q} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = 0$ であるとき、つまり、

$$\hat{\Delta}\hat{\Delta}^{\dagger} = |\boldsymbol{d}|^2 \hat{\sigma}_0 \tag{39}$$

を満たすペアポテンシャルのときである。 $\hat{\Delta}(\mathbf{k})$ のフーリエ変換を

$$\hat{\Delta}(x) = \int d\mathbf{k} \hat{\Delta}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tag{40}$$

とすれば、

$$\hat{\Delta}(x) = \int d\mathbf{k}i(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\sigma}_y e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$$
(41)

であるので、 $d(\mathbf{k})$ のフーリエ変換 d(x) を用いることで

$$\hat{\Delta}(x) = i(\mathbf{d}(x) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\sigma}_y \tag{42}$$

と書くことができる(ベクトル表記は簡略化のため省略)。ここで、dベクトルの方向が実空間に依存しないと仮定して $d(x)=\vec{d}d(x)$ とすれば 1

$$\hat{\Delta}(x) = i(\vec{d} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\sigma}_{u}d(x) \tag{43}$$

となる。このような仮定のもとではスピンインデックスを消去することができる。このとき、座標に依存しない 行列 $\hat{\Delta}$ を導入すれば

$$\hat{\Delta}(x) = \hat{\Delta}d(x) \tag{44}$$

となり、この $\hat{\Delta}$ はペアポテンシャルが unitary の場合は

$$\hat{\Delta}\hat{\Delta}^{\dagger} = \hat{\sigma}_0 \tag{45}$$

である。

また、異常 Green 関数はペアポテンシャルと同様の行列の成分を持つので

$$\hat{F}(x,x') = i(\vec{d} \cdot \hat{\vec{\sigma}})\hat{\sigma}_y F(x.x') \tag{46}$$

$$= \hat{\Delta}\tilde{F}(x, x') \tag{47}$$

$$\hat{\bar{F}}(x,x') = \hat{\Delta}^{\dagger} F^{\dagger}(x.x') \tag{48}$$

と書くことができる。よって、ペアポテンシャルと異常 Green 関数は

$$\hat{\Delta}(x)\hat{F}(x,x') = d(x)F^{\dagger}(x,x')\hat{\sigma}_0 \tag{49}$$

$$\hat{\Delta}^*(x)\hat{F}(x,x') = d^*(x)F(x,x')\hat{\sigma}_0 \tag{50}$$

という関係を満たす。この関係に注意して、得られた異常 Green 関数とペアポテンシャルを式 (21) に代入して整理すると

$$\begin{pmatrix}
\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\sigma}_0 & -\hat{\sigma}_0 d(x) \\
\hat{\sigma}_0 d^* & \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) \hat{\sigma}_0
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\hat{G}(x, x') & \hat{\sigma}_0 F(x, x') \\
-\hat{\sigma}_0 F^{\dagger}(x, x') & \hat{G}(x, x')
\end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_0 & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} (51)$$

という前節で得られたような形式の方程式が得られ、正常 Green 関数 $\hat{\sigma}_0$ に比例することがわかる。よって、スピンインデックスを持たない Gor'kov 方程式:

$$\begin{pmatrix}
\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) & -d(x) \\
d^*(x) & \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
G(x, x') & F(x, x') \\
-F^{\dagger}(x, x') & \bar{G}(x, x')
\end{pmatrix} = \delta^{(4)}(x - x') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(52)

を得る。これは singlet のときの Gor'kov 方程式と形式的には同じであり、以前導出したカイラル p 波の場合の Gor'kov 方程式とも矛盾しない。

 $^{1|\}vec{d}|=1$ を満たすベクトル。

参考文献

高野文彦、「多体問題」(培風館 新物理学シリーズ 18)

J. M. ザイマン、"現代量子論の基礎" (丸善プラネット株式会社)

Richard D. Mattuck. "A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem" 2nd (Dover)

Nikolai Kopnin."Theory of Nonequilibrium Superconductivity" (Oxford Science Publications)

A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I.E. Dzyaloshinski "Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics" (Dover)

M. Sigrist and K. Ueda: Rev. Mod. Phys. 63 239 (1991).