異方的超伝導に拡張された Gor'kov 方程式の解と電子 Raman 応答関数

岡田 大 (Okada Masaru)

2025 年 10 月 1 日

BCS 平均場ハミルトニアン $\mathcal{H}$ から出発する。

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 \ + \ \mathcal{H}_{\rm BCS} \quad , \\
\mathcal{H}_0 &= \sum_{\boldsymbol{k},s} \varepsilon(\boldsymbol{k}) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s} c_{\boldsymbol{k}s} \quad , \\
\mathcal{H}_{\rm BCS} &= \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k},s_1,s_2} \left[\Delta_{s_1 s_2}(\boldsymbol{k}) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s_1} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s_2} \ - \ \Delta^*_{s_1 s_2}(-\boldsymbol{k}) c_{-\boldsymbol{k}s_1} c_{\boldsymbol{k}s_2} \right] \quad ,
\end{aligned}
\tag{1}
$$

有限温度の Green 関数を松原形式で次のように導入する。

$$
G_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';\tau) = -\langle T_\tau \{ c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s'}(0) \} \rangle \quad , \tag{2}
$$

$$
F_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';\tau) = \langle T_\tau \{ c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) c_{\boldsymbol{k}'s'}(0) \} \rangle \quad , \quad F^\dagger_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';\tau) = \langle T_\tau \{ c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s'}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}(0) \} \rangle \quad . \tag{3}
$$

ここで慣例に従って $F^\dagger_{ss'}$ と書いたが、$F_{ss'}$ のエルミート共役を取っているわけではない。これらの Green 関数は $c-$ 数である。

座標変数 $\tau \to i\omega_n$ への Fourier 変換は次で定義されている。

$$
\begin{aligned}
G_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_n G_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \quad , \\
F^{(\dagger)}_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_n F^{(\dagger)}_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \quad .
\end{aligned}
\tag{4}
$$

ここで、$\omega_n = (2n+1)\pi k_B T$、$(n \in \mathbb{Z})$ は fermionic な松原周波数である。系が均一な場合、これらの Green 関数の運動量変数は G 関数の場合 $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}'$、$F^{(\dagger)}$ 関数の場合 $\boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k}'$ となり、1 つの運動量の値で指定できる。

$$
G_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n) = -\int_0^\beta d\tau \langle T_\tau \{ c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'}(0) \} \rangle e^{i\omega_n \tau} \quad , \tag{5}
$$

$$
F_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau \langle T_\tau \{ c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) c_{-\boldsymbol{k}s'}(0) \} \rangle e^{i\omega_n \tau} \quad , \quad F^\dagger_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau \langle T_\tau \{ c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}(0) \} \rangle e^{i\omega_n \tau} \quad . \tag{6}
$$

以下では均一な系に関してのみ考える。

Green 関数のスペクトル表現を求める為に演算子の時間発展を求める。Heisenberg の運動方程式を用いる。

$$\partial_\tau c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) = [\mathcal{H}\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}(\tau)]\ =\ e^{\mathcal{H}\tau}\,[\mathcal{H}\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}]\,e^{-\mathcal{H}\tau} \tag{7}$$

この算数には交換子と反交換子の関係

$$[AB\ ,\ C] = A\{B\ ,\ C\} - \{A\ ,\ C\}B\quad , \tag{8}$$

も有用である。$\mathcal{H}_0$ に関して、

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_0\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}] &= \sum_{\boldsymbol{k}',s'} \varepsilon(\boldsymbol{k}')\left[c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s'}c_{\boldsymbol{k}'s'}\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}\right] \\
&= -\sum_{\boldsymbol{k}',s'} \varepsilon(\boldsymbol{k}')\left\{c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s'}\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}\right\}c_{\boldsymbol{k}'s'} \\
&= -\varepsilon(\boldsymbol{k})c_{\boldsymbol{k}s}\quad .
\end{aligned} \tag{9}$$

であり、続いて $\mathcal{H}_{\mathrm{BCS}}$ に関して、

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_{\mathrm{BCS}}\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}] &= \left[\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2}\Big(\Delta_{s_1s_2}(\boldsymbol{k}')c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_1}c^\dagger_{-\boldsymbol{k}'s_2}\ -\ \Delta^*_{s_1s_2}(-\boldsymbol{k}')c_{-\boldsymbol{k}'s_1}c_{\boldsymbol{k}'s_2}\Big)\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}\right] \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2}\Delta_{s_1s_2}(\boldsymbol{k}')\left[c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_1}c^\dagger_{-\boldsymbol{k}'s_2}\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}\right] \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2}\Delta_{s_1s_2}(\boldsymbol{k}')\Big(c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_1}\left\{c^\dagger_{-\boldsymbol{k}'s_2}\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}\right\} - \left\{c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_1}\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}\right\}c^\dagger_{-\boldsymbol{k}'s_2}\Big) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2}\Delta_{s_1s_2}(\boldsymbol{k}')\Big(c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_1}\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}\delta_{s,s_2}\ -\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k}'s_2}\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{s,s_1}\Big)\quad .
\end{aligned} \tag{10}$$

添字を注意して入れ替えると右辺の二項はそれぞれ等しいことが分かる。すなわち、以下のように二項目に関してのみ添字の入れ替えの操作を注意深く行うと良い。

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_{\mathrm{BCS}}\ ,\ c_{\boldsymbol{k}s}] &= \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2}\Delta_{s_1s_2}(\boldsymbol{k}')c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_1}\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}\delta_{s,s_2}\ -\ \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2}\Delta_{s_1s_2}(-\boldsymbol{k}')c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_2}\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}\delta_{s,s_1} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2}\Delta_{s_1s_2}(\boldsymbol{k}')c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_1}\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}\delta_{s,s_2}\ +\ \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2}\Delta_{s_2s_1}(\boldsymbol{k}')c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_2}\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}\delta_{s,s_1} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2}\Delta_{s_1s_2}(\boldsymbol{k}')c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_1}\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}\delta_{s,s_2}\ +\ \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2}\Delta_{s_1s_2}(\boldsymbol{k}')c^\dagger_{\boldsymbol{k}'s_1}\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}\delta_{s,s_2} \\
&= \sum_{s'}\Delta_{s's}(-\boldsymbol{k})c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'} \\
&= -\sum_{s'}\Delta_{ss'}(\boldsymbol{k})c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}\quad .
\end{aligned} \tag{11}$$

以上の二項より演算子の時間発展は、

$$\partial_\tau c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) = -\varepsilon(\boldsymbol{k})c_{\boldsymbol{k}s}(\tau)\ -\ \sum_{s'}\Delta_{ss'}(\boldsymbol{k})c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau)\quad . \tag{12}$$

この関係を用いて Green 関数の運動方程式を導く。Green 関数の時間発展は、

$$\partial_\tau G_{ss'}(\boldsymbol{k},\tau) = \partial_\tau \left(-\theta(\tau)\langle c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'}\rangle \;+\; \theta(-\tau)\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'} c_{\boldsymbol{k}s}(\tau)\rangle \right)$$

$$= -[\partial_\tau\theta(\tau)]\langle c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'}\rangle \;-\; \theta(\tau)\langle [\partial_\tau c_{\boldsymbol{k}s}(\tau)] c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'}\rangle$$

$$+ [\partial_\tau\theta(-\tau)]\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'} c_{\boldsymbol{k}s}(\tau)\rangle \;+\; \theta(-\tau)\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'} [\partial_\tau c_{\boldsymbol{k}s}(\tau)]\rangle$$

$$= -\delta(\tau)\langle c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'}\rangle \;+\; \theta(\tau)\varepsilon(\boldsymbol{k})\langle c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'}\rangle \;+\; \theta(\tau)\sum_{s''}\Delta_{ss''}(\boldsymbol{k})\langle c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s''}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'}\rangle$$

$$- \delta(\tau)\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'} c_{\boldsymbol{k}s}(\tau)\rangle \;-\; \theta(-\tau)\varepsilon(\boldsymbol{k})\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'} c_{\boldsymbol{k}s}(\tau)\rangle \;-\; \theta(-\tau)\sum_{s''}\Delta_{ss''}(\boldsymbol{k})\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s''}(\tau)\rangle$$

$$= \varepsilon(\boldsymbol{k}) G_{ss'}(\boldsymbol{k},\tau) \;+\; \sum_{s''}\Delta_{ss''}(\boldsymbol{k}) F^\dagger_{s's''}(\boldsymbol{k},\tau) \tag{13}$$

デルタ関数に比例する項は

$$\delta(\tau)\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'} c_{\boldsymbol{k}s}(\tau)\rangle \;=\; \delta(0)\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'} c_{\boldsymbol{k}s}\rangle \;=\; -\delta(0)\langle c_{\boldsymbol{k}s} c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'}\rangle \;=\; -\delta(\tau)\langle c_{\boldsymbol{k}s}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s'}\rangle$$

の機構から相殺されている。両辺の変数が $\tau \to i\omega_n$ となるように Fourier 変換すると、

$$\int_0^\beta d\tau \partial_\tau G_{ss'}(\boldsymbol{k},\tau) e^{i\omega_n\tau} = \int_0^\beta d\tau \varepsilon(\boldsymbol{k}) G_{ss'}(\boldsymbol{k},\tau) e^{i\omega_n\tau} \;+\; \int_0^\beta d\tau \sum_{s''}\Delta_{s''s}(\boldsymbol{k}) F^\dagger_{s's''}(\boldsymbol{k},\tau) e^{i\omega_n\tau}$$

$$\longleftrightarrow \quad i\omega_n G_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n) = \varepsilon(\boldsymbol{k}) G_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n) \;+\; \sum_{s''}\Delta_{ss''}(\boldsymbol{k}) F^\dagger_{s's''}(\boldsymbol{k},i\omega_n) \tag{14}$$

この方程式は $G_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n)$ に関して閉じておらず、$F^\dagger_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n)$ に関しても同様に運動方程式を立てて、それぞれ連立して解く必要がある。式 12 のエルミート共役を返して、

$$\partial_\tau c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}(\tau) = -\varepsilon(\boldsymbol{k}) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}(\tau) \;-\; \sum_{s'}\Delta^*_{ss'}(\boldsymbol{k}) c_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau) \quad , \tag{15}$$

の関係式を用いる。

$$\partial_\tau F^\dagger_{ss'}(\boldsymbol{k},\tau) = \partial_\tau \left(\theta(\tau)\langle c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\rangle \;-\; \theta(-\tau)\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s} c_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau)\rangle \right)$$

$$= [\partial_\tau\theta(\tau)]\langle c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\rangle \;+\; \theta(\tau)\langle [\partial_\tau c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau)] c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\rangle$$

$$- [\partial_\tau\theta(-\tau)]\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau)\rangle \;-\; \theta(-\tau)\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s} [\partial_\tau c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau)]\rangle$$

$$= \delta(\tau)\langle c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\rangle \;-\; \varepsilon(\boldsymbol{k})\theta(\tau)\langle c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\rangle \;-\; \sum_{s''}\Delta^*_{s's''}(-\boldsymbol{k})\theta(\tau)\langle c_{\boldsymbol{k}s''}(\tau) c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}\rangle$$

$$+ \delta(\tau)\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau)\rangle \;+\; \theta(-\tau)\varepsilon(\boldsymbol{k})\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}s'}(\tau)\rangle \;+\; \sum_{s''}\Delta^*_{s's''}(-\boldsymbol{k})\theta(-\tau)\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}s} c_{\boldsymbol{k}s''}(\tau)\rangle$$

$$= -\varepsilon(\boldsymbol{k}) F^\dagger_{ss'}(\boldsymbol{k},\tau) \;-\; \sum_{s''}\Delta^*_{s's''}(-\boldsymbol{k}) G_{s''s}(\boldsymbol{k},\tau) \quad , \tag{16}$$

$$\longleftrightarrow \quad i\omega_n F^\dagger_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n) = -\varepsilon(\boldsymbol{k}) F^\dagger_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n) \;-\; \sum_{s''}\Delta^*_{s's''}(-\boldsymbol{k}) G_{s''s}(\boldsymbol{k},i\omega_n) \quad . \tag{17}$$

以上から、それぞれの Green 関数のスペクトル表示を得るために解くべき連立方程式は次のようになる。

$$G_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n)=\sum_{s''}\frac{\Delta_{ss''}(\boldsymbol{k})}{i\omega_n-\varepsilon(\boldsymbol{k})}F^{\dagger}_{s's''}(\boldsymbol{k},i\omega_n)\quad, \tag{18}$$

$$F^{\dagger}_{ss'}(\boldsymbol{k},i\omega_n)=-\sum_{s''}\frac{\Delta^{*}_{s's''}(-\boldsymbol{k})}{i\omega_n+\varepsilon(\boldsymbol{k})}G_{s''s}(\boldsymbol{k},i\omega_n)\quad. \tag{19}$$

対ポテンシャルの表現行列がユニタリーな場合の Gor'kov 方程式の解は、素励起のエネルギースペクトルを

$$E_{\boldsymbol{k}}=\sqrt{\varepsilon^2(\boldsymbol{k})+|\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})|^2}\quad, \tag{20}$$

と書いて、

$$\hat{G}(\boldsymbol{k},i\omega_n)=-\frac{i\omega_n+\varepsilon(\boldsymbol{k})}{\omega_n^2+E_{\boldsymbol{k}}^2}\hat{\sigma}_0\quad, \tag{21}$$

$$\hat{F}(\boldsymbol{k},i\omega_n)=\frac{i\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\sigma}_y}{\omega_n^2+E_{\boldsymbol{k}}^2}\;=\;\frac{\hat{\Delta}(\boldsymbol{k})}{\omega_n^2+E_{\boldsymbol{k}}^2}\quad. \tag{22}$$

と表現できる。これらを用いて電子ラマンの応答関数を計算する。Bosonic な松原周波数 $\nu_n=2m\pi k_BT$、$(m\in\mathbb{Z})$ を用いて、

$$\begin{aligned}
\chi_{\tilde{\rho}\tilde{\rho}}(\boldsymbol{q},i\nu_m)&=-\int_0^{\beta}d\tau\langle T_\tau[\tilde{\rho}^{\dagger}_{\boldsymbol{q}}(\tau)\tilde{\rho}_{\boldsymbol{q}}]\rangle e^{i\nu_m\tau}\\
&=-\int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,s_1,s_2}\gamma_{\boldsymbol{k}_1}\gamma_{\boldsymbol{k}_2}\langle T_\tau[c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},s_1}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_1,s_1}(\tau)c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},s_2}c_{\boldsymbol{k}_2,s_2}]\rangle e^{i\nu_m\tau}\\
&=-\int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,s_1,s_2}\gamma_{\boldsymbol{k}_1}\gamma_{\boldsymbol{k}_2}\Big\{\langle T_\tau[c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},s_1}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_1,s_1}(\tau)]\rangle\langle T_\tau[c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},s_2}c_{\boldsymbol{k}_2,s_2}]\rangle\\
&\qquad-\langle T_\tau[c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},s_1}(\tau)c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},s_2}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,s_1}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,s_2}]\rangle\\
&\qquad+\langle T_\tau[c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},s_1}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,s_2}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,s_1}(\tau)c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},s_2}]\rangle\Big\}e^{i\nu_m\tau}\quad.
\end{aligned} \tag{23}$$

最後の右辺一行目の括弧の中は同時刻の Green 関数であり、定数となるので落とす。符号も整理して、

$$\begin{aligned}
\chi_{\tilde{\rho}\tilde{\rho}}(\boldsymbol{q},i\nu_n)=\int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,s_1,s_2}\gamma_{\boldsymbol{k}_1}\gamma_{\boldsymbol{k}_2}\Big\{&\langle T_\tau[c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},s_1}(\tau)c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},s_2}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,s_1}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,s_2}]\rangle e^{i\nu_m\tau}\\
&-\langle T_\tau[c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},s_1}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,s_2}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,s_1}(\tau)c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},s_2}]\rangle\Big\}e^{i\nu_m\tau}\quad.
\end{aligned} \tag{24}$$

スピン s_1,s_2 に関する和を展開する。括弧の中の第一項は、

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,s_1,s_2} \gamma_{\boldsymbol{k}_1}\gamma_{\boldsymbol{k}_2}\langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},s_1}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},s_2}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,s_1}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,s_2}]\rangle && (25)\\
&= \sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2} \gamma_{\boldsymbol{k}_1}\gamma_{\boldsymbol{k}_2}\Big\{\langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},\uparrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},\uparrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,\uparrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,\uparrow}]\rangle\\
&+\langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},\uparrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},\downarrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,\uparrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,\downarrow}]\rangle\\
&+\langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},\downarrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},\uparrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,\downarrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,\uparrow}]\rangle\\
&+\langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},\downarrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},\downarrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,\downarrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,\downarrow}]\rangle\Big\} \quad . && (26)
\end{aligned}
$$

運動量に関する和は $\boldsymbol{k}_2 = -\boldsymbol{k}_1$ の場合のみ残り、$\boldsymbol{k}_2$ に対する和を実行すると、

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,s_1,s_2} \gamma_{\boldsymbol{k}_1}\gamma_{\boldsymbol{k}_2}\langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},s_1}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},s_2}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,s_1}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,s_2}]\rangle && (27)\\
&= \sum_{\boldsymbol{k}} \gamma_{\boldsymbol{k}}\gamma_{-\boldsymbol{k}}\Big\{\langle T_\tau[c^\dagger_{-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\uparrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\uparrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{-\boldsymbol{k},\uparrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k},\uparrow}]\rangle\\
&+\langle T_\tau[c^\dagger_{-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\uparrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\downarrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{-\boldsymbol{k},\uparrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k},\downarrow}]\rangle\\
&+\langle T_\tau[c^\dagger_{-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\downarrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\uparrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{-\boldsymbol{k},\downarrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k},\uparrow}]\rangle\\
&+\langle T_\tau[c^\dagger_{-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\downarrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\downarrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{-\boldsymbol{k},\downarrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k},\downarrow}]\rangle\Big\}\\
&= \sum_{\boldsymbol{k}} \gamma_{\boldsymbol{k}}\gamma_{-\boldsymbol{k}}\Big\{F^\dagger_{\uparrow\uparrow}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\tau)F_{\uparrow\uparrow}(-\boldsymbol{k},\tau)\\
&+F^\dagger_{\downarrow\uparrow}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\tau)F_{\uparrow\downarrow}(-\boldsymbol{k},\tau)\\
&+F^\dagger_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\tau)F_{\downarrow\uparrow}(-\boldsymbol{k},\tau)\\
&+F^\dagger_{\downarrow\downarrow}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\tau)F_{\downarrow\downarrow}(-\boldsymbol{k},\tau)\Big\} \quad . && (28)
\end{aligned}
$$

次に式 (24) の右辺第二項も同様に変形する。スピンの和を取った後、運動量 $\boldsymbol{k}_2$ の和は $\boldsymbol{k}_2 = \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{q}$ の場合のみ残る。

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,s_1,s_2} \gamma_{\boldsymbol{k}_1}\gamma_{\boldsymbol{k}_2}\langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},s_1}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,s_2}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,s_1}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},s_2}]\rangle \qquad (29)\\
&= \sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2} \gamma_{\boldsymbol{k}_1}\gamma_{\boldsymbol{k}_2}\Big\{\langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},\uparrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,\uparrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,\uparrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},\uparrow}]\rangle\\
&+ \langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},\uparrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,\downarrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,\uparrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},\downarrow}]\rangle\\
&+ \langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},\downarrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,\uparrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,\downarrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},\uparrow}]\rangle\\
&+ \langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q},\downarrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}_2,\downarrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k}_1,\downarrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q},\downarrow}]\rangle\Big\}\\
&= \sum_{\boldsymbol{k}} \gamma_{\boldsymbol{k}}\gamma_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}\Big\{\langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\uparrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\uparrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k},\uparrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k},\uparrow}]\rangle\\
&+ \langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k},\uparrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k},\downarrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k},\uparrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k},\downarrow}]\rangle\\
&+ \langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\downarrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\uparrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k},\downarrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k},\uparrow}]\rangle\\
&+ \langle T_\tau[c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\downarrow}(\tau)c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\downarrow}]\rangle\langle T_\tau[c_{\boldsymbol{k},\downarrow}(\tau)c^\dagger_{\boldsymbol{k},\downarrow}]\rangle\Big\}\\
&= -\sum_{\boldsymbol{k}} \gamma_{\boldsymbol{k}}\gamma_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}\Big\{G_{\uparrow\uparrow}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\tau)G_{\uparrow\uparrow}(\boldsymbol{k},-\tau)\\
&+ G_{\downarrow\downarrow}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\tau)G_{\downarrow\downarrow}(\boldsymbol{k},-\tau)\Big\} \quad . \qquad (30)
\end{aligned}
$$

ここでユニタリー条件 $G_{\uparrow\downarrow} = G_{\downarrow\uparrow} = 0$ を用いた。
まとめると、

$$
\begin{aligned}
\chi_{\tilde\rho\tilde\rho}(\boldsymbol{q}, i\nu_m) &= -\int_0^\beta d\tau \langle T_\tau[\tilde\rho^\dagger_{\boldsymbol{q}}(\tau)\tilde\rho_{\boldsymbol{q}}]\rangle e^{i\nu_m\tau}\\
= \sum_{\boldsymbol{k}}\int_0^\beta d\tau\Big\{&\gamma_{\boldsymbol{k}}\gamma_{-\boldsymbol{k}}\Big[F^\dagger_{\uparrow\uparrow}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\tau)F_{\uparrow\uparrow}(-\boldsymbol{k},\tau) \;+\; F^\dagger_{\downarrow\uparrow}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\tau)F_{\uparrow\downarrow}(-\boldsymbol{k},\tau)\\
&+ F^\dagger_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\tau)F_{\downarrow\uparrow}(-\boldsymbol{k},\tau) \;+\; F^\dagger_{\downarrow\downarrow}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\tau)F_{\downarrow\downarrow}(-\boldsymbol{k},\tau)\Big]\\
&- \gamma_{\boldsymbol{k}}\gamma_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}\Big[G_{\uparrow\uparrow}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\tau)G_{\uparrow\uparrow}(\boldsymbol{k},-\tau) \;+\; G_{\downarrow\downarrow}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\tau)G_{\downarrow\downarrow}(\boldsymbol{k},-\tau)\Big]\Big\}e^{i\nu_m\tau} \qquad (31)
\end{aligned}
$$

続いて時間に関して Fourier 変換を行う。異常 Green 関数に関して、

$$
\begin{aligned}
\int_0^\beta d\tau F^\dagger_{s's}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\tau)F_{ss'}(-\boldsymbol{k},\tau)e^{i\nu_m\tau} &= \frac{1}{\beta^2}\int_0^\beta d\tau \sum_{n_1,n_2} F^\dagger_{s's}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},i\omega_{n_1})F_{ss'}(-\boldsymbol{k},i\omega_{n_2})e^{i(\nu_m-\omega_{n_1}-\omega_{n_2})\tau}\\
&= \frac{1}{\beta^2}\sum_{n_1,n_2} F^\dagger_{s's}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},i\omega_{n_1})F_{ss'}(-\boldsymbol{k},i\omega_{n_2}) \;\; \beta\delta_{\omega_{n_1},\nu_m-\omega_{n_2}}\\
&= \frac{1}{\beta}\sum_n F^\dagger_{s's}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},i\nu_m-i\omega_n)F_{ss'}(-\boldsymbol{k},i\omega_n) \qquad (32)
\end{aligned}
$$

同様にして、

$$\int_0^\beta d\tau G_{ss}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\tau)G_{ss}(\boldsymbol{k},-\tau)e^{i\nu_m\tau} = \frac{1}{\beta^2}\int_0^\beta d\tau \sum_{n_1,n_2} G_{ss}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},i\omega_{n_1})G_{ss}(\boldsymbol{k},i\omega_{n_2})e^{i(\nu_m-\omega_{n_1}+\omega_{n_2})\tau}$$

$$= \frac{1}{\beta^2}\sum_{n_1,n_2} G_{ss}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},i\omega_{n_1})G_{ss}(\boldsymbol{k},i\omega_{n_2}) \quad \beta\delta_{\omega_{n_1},\nu_m+\omega_{n_2}}$$

$$= \frac{1}{\beta}\sum_n G_{ss}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},i\nu_m+i\omega_n)G_{ss}(\boldsymbol{k},i\omega_n) \tag{33}$$

以上から応答関数は次のようになる。

$$\chi_{\tilde{\rho}\tilde{\rho}}(\boldsymbol{q},i\nu_m) \;=\; -\int_0^\beta d\tau\langle T_\tau[\tilde{\rho}^\dagger_{\boldsymbol{q}}(\tau)\tilde{\rho}_{\boldsymbol{q}}]\rangle e^{i\nu_m\tau}$$

$$= \frac{1}{\beta}\sum_n\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{ss'}\Big[\gamma_{\boldsymbol{k}}\gamma_{-\boldsymbol{k}}F^\dagger_{s's}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},i\nu_m-i\omega_n)F_{ss'}(-\boldsymbol{k},i\omega_n)$$
$$-\gamma_{\boldsymbol{k}}\gamma_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}G_{ss}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},i\nu_m+i\omega_n)G_{s's'}(\boldsymbol{k},i\omega_n)\Big] \tag{34}$$

$\boldsymbol{q}\to\boldsymbol{0}$ の極限を考える。これ以降はこの場合のみ考えるので、$\chi_{\tilde{\rho}\tilde{\rho}}(\boldsymbol{0},i\nu_m)=\chi_{\tilde{\rho}\tilde{\rho}}(i\nu_m)$ と略記する。

$$\chi_{\tilde{\rho}\tilde{\rho}}(i\nu_m) = \frac{1}{\beta}\sum_n\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{ss'}\Big[\gamma_{\boldsymbol{k}}\gamma_{-\boldsymbol{k}}F^\dagger_{s's}(\boldsymbol{k},i\nu_m-i\omega_n)F_{ss'}(-\boldsymbol{k},i\omega_n)$$
$$-\gamma_{\boldsymbol{k}}^2G_{ss}(\boldsymbol{k},i\nu_m+i\omega_n)G_{s's'}(\boldsymbol{k},i\omega_n)\Big]$$
$$= \frac{1}{\beta}\sum_n\sum_{\boldsymbol{k}}\left[\gamma_{\boldsymbol{k}}\gamma_{-\boldsymbol{k}}\sum_{ss'}\frac{\Delta_{s's}(\boldsymbol{k})}{(\nu_m-\omega_n)^2+E_{\boldsymbol{k}}^2}\;\frac{\Delta_{ss'}(-\boldsymbol{k})}{\omega_n^2+E_{-\boldsymbol{k}}^2}\right.$$
$$\left.-\gamma_{\boldsymbol{k}}^2\frac{i\omega_n+i\nu_m+\varepsilon(\boldsymbol{k})}{(\nu_m+\omega_n)^2+E_{\boldsymbol{k}}^2}\;\frac{i\omega_n+\varepsilon(\boldsymbol{k})}{\omega_n^2+E_{\boldsymbol{k}}^2}\right] \tag{35}$$