

# 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。

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

有限温度の Green 関数を松原形式で次のように導入する。

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

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

ここで慣例に従って  $F_{ss'}^\dagger$  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  $\tau \rightarrow i\omega_n$  への Fourier 変換は次で定義されている。

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

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  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ 、 $F^{(\dagger)}$  関数の場合  $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$  となり、1 つの運動量の値で指定できる。

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

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

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。

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

この算数には交換子と反交換子の関係

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

も有用である。 $\mathcal{H}_0$  に関して、

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

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

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{\text{BCS}}, c_{\mathbf{k}s}] &= \left[ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', s_1, s_2} \left( \Delta_{s_1 s_2}(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'s_1}^\dagger c_{-\mathbf{k}'s_2}^\dagger - \Delta_{s_1 s_2}^*(-\mathbf{k}') c_{-\mathbf{k}'s_1} c_{\mathbf{k}'s_2} \right), c_{\mathbf{k}s} \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', s_1, s_2} \Delta_{s_1 s_2}(\mathbf{k}') \left[ c_{\mathbf{k}'s_1}^\dagger c_{-\mathbf{k}'s_2}^\dagger, c_{\mathbf{k}s} \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', s_1, s_2} \Delta_{s_1 s_2}(\mathbf{k}') \left( c_{\mathbf{k}'s_1}^\dagger \left\{ c_{-\mathbf{k}'s_2}^\dagger, c_{\mathbf{k}s} \right\} - \left\{ c_{\mathbf{k}'s_1}^\dagger, c_{\mathbf{k}s} \right\} c_{-\mathbf{k}'s_2}^\dagger \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', s_1, s_2} \Delta_{s_1 s_2}(\mathbf{k}') \left( c_{\mathbf{k}'s_1}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \delta_{s, s_2} - c_{-\mathbf{k}'s_2}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{s, s_1} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

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くと良い。

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{\text{BCS}}, c_{\mathbf{k}s}] &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', s_1, s_2} \Delta_{s_1 s_2}(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'s_1}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \delta_{s, s_2} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', s_1, s_2} \Delta_{s_1 s_2}(-\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'s_2}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \delta_{s, s_1} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', s_1, s_2} \Delta_{s_1 s_2}(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'s_1}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \delta_{s, s_2} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', s_1, s_2} \Delta_{s_2 s_1}(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'s_2}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \delta_{s, s_1} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', s_1, s_2} \Delta_{s_1 s_2}(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'s_1}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \delta_{s, s_2} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}', s_1, s_2} \Delta_{s_1 s_2}(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'s_1}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \delta_{s, s_2} \\ &= \sum_{s'} \Delta_{s's}(-\mathbf{k}) c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger \\ &= - \sum_{s'} \Delta_{ss'}(\mathbf{k}) c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger. \end{aligned} \quad (11)$$

以上の二項より演算子の時間発展は、

$$\partial_\tau c_{\mathbf{k}s}(\tau) = -\varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}(\tau) - \sum_{s'} \Delta_{ss'}(\mathbf{k}) c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger(\tau). \quad (12)$$

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、

$$\begin{aligned}
\partial_\tau G_{ss'}(\mathbf{k}, \tau) &= \partial_\tau \left( -\theta(\tau) \langle c_{\mathbf{k}s}(\tau) c_{\mathbf{k}s'}^\dagger \rangle + \theta(-\tau) \langle c_{\mathbf{k}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}s}(\tau) \rangle \right) \\
&= -[\partial_\tau \theta(\tau)] \langle c_{\mathbf{k}s}(\tau) c_{\mathbf{k}s'}^\dagger \rangle - \theta(\tau) \langle [\partial_\tau c_{\mathbf{k}s}(\tau)] c_{\mathbf{k}s'}^\dagger \rangle \\
&\quad + [\partial_\tau \theta(-\tau)] \langle c_{\mathbf{k}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}s}(\tau) \rangle + \theta(-\tau) \langle c_{\mathbf{k}s'}^\dagger [\partial_\tau c_{\mathbf{k}s}(\tau)] \rangle \\
&= -\delta(\tau) \langle c_{\mathbf{k}s}(\tau) c_{\mathbf{k}s'}^\dagger \rangle + \theta(\tau) \varepsilon(\mathbf{k}) \langle c_{\mathbf{k}s}(\tau) c_{\mathbf{k}s'}^\dagger \rangle + \theta(\tau) \sum_{s''} \Delta_{ss''}(\mathbf{k}) \langle c_{-\mathbf{k}s''}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}s'}^\dagger \rangle \\
&\quad - \delta(\tau) \langle c_{\mathbf{k}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}s}(\tau) \rangle - \theta(-\tau) \varepsilon(\mathbf{k}) \langle c_{\mathbf{k}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}s}(\tau) \rangle - \theta(-\tau) \sum_{s''} \Delta_{ss''}(\mathbf{k}) \langle c_{\mathbf{k}s'}^\dagger c_{-\mathbf{k}s''}^\dagger(\tau) \rangle \\
&= \varepsilon(\mathbf{k}) G_{ss'}(\mathbf{k}, \tau) + \sum_{s''} \Delta_{ss''}(\mathbf{k}) F_{s's''}^\dagger(\mathbf{k}, \tau)
\end{aligned} \tag{13}$$

デルタ関数に比例する項は

$$\delta(\tau) \langle c_{\mathbf{k}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}s}(\tau) \rangle = \delta(0) \langle c_{\mathbf{k}s'}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \rangle = -\delta(0) \langle c_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s'}^\dagger \rangle = -\delta(\tau) \langle c_{\mathbf{k}s}(\tau) c_{\mathbf{k}s'}^\dagger \rangle$$

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

$$\begin{aligned}
\int_0^\beta d\tau \partial_\tau G_{ss'}(\mathbf{k}, \tau) e^{i\omega_n \tau} &= \int_0^\beta d\tau \varepsilon(\mathbf{k}) G_{ss'}(\mathbf{k}, \tau) e^{i\omega_n \tau} + \int_0^\beta d\tau \sum_{s''} \Delta_{ss''}(\mathbf{k}) F_{s's''}^\dagger(\mathbf{k}, \tau) e^{i\omega_n \tau} \\
\longleftrightarrow i\omega_n G_{ss'}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \varepsilon(\mathbf{k}) G_{ss'}(\mathbf{k}, i\omega_n) + \sum_{s''} \Delta_{ss''}(\mathbf{k}) F_{s's''}^\dagger(\mathbf{k}, i\omega_n)
\end{aligned} \tag{14}$$

この方程式は  $G_{ss'}(\mathbf{k}, i\omega_n)$  に関して閉じておらず、 $F_{ss'}^\dagger(\mathbf{k}, i\omega_n)$  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、

$$\partial_\tau c_{\mathbf{k}s}^\dagger(\tau) = -\varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger(\tau) - \sum_{s'} \Delta_{ss'}^*(\mathbf{k}) c_{-\mathbf{k}s'}(\tau) , \tag{15}$$

の関係式を用いる。

$$\begin{aligned}
\partial_\tau F_{ss'}^\dagger(\mathbf{k}, \tau) &= \partial_\tau \left( \theta(\tau) \langle c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}s}^\dagger \rangle - \theta(-\tau) \langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'}(\tau) \rangle \right) \\
&= [\partial_\tau \theta(\tau)] \langle c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}s}^\dagger \rangle + \theta(\tau) \langle [\partial_\tau c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger(\tau)] c_{\mathbf{k}s}^\dagger \rangle \\
&\quad - [\partial_\tau \theta(-\tau)] \langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'}(\tau) \rangle - \theta(-\tau) \langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger [\partial_\tau c_{-\mathbf{k}s'}(\tau)] \rangle \\
&= \delta(\tau) \langle c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}s}^\dagger \rangle - \varepsilon(\mathbf{k}) \theta(\tau) \langle c_{-\mathbf{k}s'}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}s}^\dagger \rangle - \sum_{s''} \Delta_{s's''}^*(-\mathbf{k}) \theta(\tau) \langle c_{\mathbf{k}s''}(\tau) c_{\mathbf{k}s}^\dagger \rangle \\
&\quad + \delta(\tau) \langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'}(\tau) \rangle + \theta(-\tau) \varepsilon(\mathbf{k}) \langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{-\mathbf{k}s'}(\tau) \rangle + \sum_{s''} \Delta_{s's''}^*(-\mathbf{k}) \theta(-\tau) \langle c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s''}(\tau) \rangle \\
&= -\varepsilon(\mathbf{k}) F_{ss'}^\dagger(\mathbf{k}, \tau) - \sum_{s''} \Delta_{s's''}^*(-\mathbf{k}) G_{s''s}(\mathbf{k}, \tau) ,
\end{aligned} \tag{16}$$

$$\longleftrightarrow i\omega_n F_{ss'}^\dagger(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\varepsilon(\mathbf{k}) F_{ss'}^\dagger(\mathbf{k}, i\omega_n) - \sum_{s''} \Delta_{s's''}^*(-\mathbf{k}) G_{s''s}(\mathbf{k}, i\omega_n) . \tag{17}$$

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。

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

$$F_{ss'}^\dagger(\mathbf{k}, i\omega_n) = - \sum_{s''} \frac{\Delta_{s's''}^*(-\mathbf{k})}{i\omega_n + \varepsilon(\mathbf{k})} G_{s''s}(\mathbf{k}, i\omega_n) . \quad (19)$$

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

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

と書いて、

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

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

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  $\nu_n = 2m\pi k_B T$ 、( $m \in \mathbb{Z}$ ) を用いて、

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

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、

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

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、

$$\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s_1, s_2} \gamma_{\mathbf{k}_1} \gamma_{\mathbf{k}_2} \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, s_1}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, s_2}^\dagger] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, s_1}(\tau) c_{\mathbf{k}_2, s_2}] \rangle \quad (25)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \gamma_{\mathbf{k}_1} \gamma_{\mathbf{k}_2} \left\{ \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}_2, \uparrow}] \rangle \right. \\ &\quad + \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}_2, \downarrow}] \rangle \\ &\quad + \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}_2, \uparrow}] \rangle \\ &\quad \left. + \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}_2, \downarrow}] \rangle \right\} . \quad (26) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s_1, s_2} \gamma_{\mathbf{k}_1} \gamma_{\mathbf{k}_2} \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, s_1}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, s_2}^\dagger] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, s_1}(\tau) c_{\mathbf{k}_2, s_2}] \rangle \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}} \left\{ \langle T_\tau [c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger] \rangle \langle T_\tau [c_{-\mathbf{k}, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}, \uparrow}] \rangle \right. \\
&\quad + \langle T_\tau [c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger] \rangle \langle T_\tau [c_{-\mathbf{k}, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}, \downarrow}] \rangle \\
&\quad + \langle T_\tau [c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger] \rangle \langle T_\tau [c_{-\mathbf{k}, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}, \uparrow}] \rangle \\
&\quad \left. + \langle T_\tau [c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger] \rangle \langle T_\tau [c_{-\mathbf{k}, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}, \downarrow}] \rangle \right\} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}} \left\{ F_{\uparrow\uparrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) F_{\uparrow\uparrow}(-\mathbf{k}, \tau) \right. \\
&\quad + F_{\downarrow\uparrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) F_{\uparrow\downarrow}(-\mathbf{k}, \tau) \\
&\quad + F_{\uparrow\downarrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) F_{\downarrow\uparrow}(-\mathbf{k}, \tau) \\
&\quad \left. + F_{\downarrow\downarrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) F_{\downarrow\downarrow}(-\mathbf{k}, \tau) \right\} . \tag{27}
\end{aligned}$$

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  $\mathbf{k}_2$  の和は  $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}$  の場合のみ残る。

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s_1, s_2} \gamma_{\mathbf{k}_1} \gamma_{\mathbf{k}_2} \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, s_1}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2, s_2}] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, s_1}(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, s_2}^\dagger] \rangle \\
&= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \gamma_{\mathbf{k}_1} \gamma_{\mathbf{k}_2} \left\{ \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2, \uparrow}] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger] \rangle \right. \\
&\quad + \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2, \downarrow}] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger] \rangle \\
&\quad + \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2, \uparrow}] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger] \rangle \\
&\quad \left. + \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}_2, \downarrow}] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}_1, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger] \rangle \right\} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \left\{ \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger] \rangle \right. \\
&\quad + \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}, \downarrow}] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger] \rangle \\
&\quad + \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger] \rangle \\
&\quad \left. + \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}] \rangle \langle T_\tau [c_{\mathbf{k}, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger] \rangle \right\} \\
&= - \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \left\{ G_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) G_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}, -\tau) \right. \\
&\quad \left. + G_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) G_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}, -\tau) \right\} . \tag{28}
\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、

$$\begin{aligned}
\chi_{\tilde{\rho}\tilde{\rho}}(\mathbf{q}, i\nu_m) &= - \int_0^\beta d\tau \langle T_\tau [\tilde{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger(\tau) \tilde{\rho}_{\mathbf{q}}] \rangle e^{i\nu_m \tau} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \int_0^\beta d\tau \left\{ \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}} \left[ F_{\uparrow\uparrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) F_{\uparrow\uparrow}(-\mathbf{k}, \tau) + F_{\downarrow\uparrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) F_{\downarrow\uparrow}(-\mathbf{k}, \tau) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + F_{\uparrow\downarrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) F_{\downarrow\uparrow}(-\mathbf{k}, \tau) + F_{\downarrow\downarrow}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \tau) F_{\downarrow\downarrow}(-\mathbf{k}, \tau) \right] \right. \\
&\quad \left. - \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \left[ G_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) G_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}, -\tau) + G_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) G_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}, -\tau) \right] \right\} e^{i\nu_m \tau} \quad (31)
\end{aligned}$$

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

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

同様にして、

$$\begin{aligned}
\int_0^\beta d\tau G_{ss}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \tau) G_{ss}(\mathbf{k}, -\tau) e^{i\nu_m \tau} &= \frac{1}{\beta^2} \int_0^\beta d\tau \sum_{n_1, n_2} G_{ss}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_{n_1}) G_{ss}(\mathbf{k}, i\omega_{n_2}) e^{i(\nu_m - \omega_{n_1} + \omega_{n_2})\tau} \\
&= \frac{1}{\beta^2} \sum_{n_1, n_2} G_{ss}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_{n_1}) G_{ss}(\mathbf{k}, i\omega_{n_2}) \beta \delta_{\omega_{n_1}, \nu_m + \omega_{n_2}} \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_n G_{ss}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\nu_m + i\omega_n) G_{ss}(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (33)
\end{aligned}$$

以上から応答関数は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\chi_{\tilde{\rho}\tilde{\rho}}(\mathbf{q}, i\nu_m) &= - \int_0^\beta d\tau \langle T_\tau [\tilde{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger(\tau) \tilde{\rho}_{\mathbf{q}}] \rangle e^{i\nu_m \tau} \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \\
&\quad \times \left[ \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}} F_{s's}^\dagger(\mathbf{k} - \mathbf{q}, i\nu_m - i\omega_n) F_{ss'}(-\mathbf{k}, i\omega_n) - \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} G_{ss}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\nu_m + i\omega_n) G_{s's'}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right] \quad (34)
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\chi_{\tilde{\rho}\tilde{\rho}}(i\nu_m) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \left[ \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}} F_{s's}^\dagger(\mathbf{k}, i\nu_m - i\omega_n) F_{ss'}(-\mathbf{k}, i\omega_n) - \gamma_{\mathbf{k}}^2 G_{ss}(\mathbf{k}, i\nu_m + i\omega_n) G_{s's'}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right] \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \left[ \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}} \sum_{ss'} \frac{\Delta_{s's}(\mathbf{k})}{(\nu_m - \omega_n)^2 + E_{\mathbf{k}}^2} \frac{\Delta_{ss'}(-\mathbf{k})}{\omega_n^2 + E_{-\mathbf{k}}^2} - \gamma_{\mathbf{k}}^2 \frac{i\omega_n + i\nu_m + \varepsilon(\mathbf{k})}{(\nu_m + \omega_n)^2 + E_{\mathbf{k}}^2} \frac{i\omega_n + \varepsilon(\mathbf{k})}{\omega_n^2 + E_{\mathbf{k}}^2} \right] \quad (36)
\end{aligned}$$