異方的超伝導に拡張された Gor'kov 方程式とその解

岡田 大 (Okada Masaru)

October 10, 2025

1　異方的に拡張された Gor'kov 方程式の導出の概略

超伝導ギャップの対称性が非 s 波の場合にも拡張された BCS 理論を基に Green 関数法を導入する。
まず始めに、ハミルトニアンは BCS のものに拘らず、より一般的な次のものを用いる。

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\mathrm{pair}} \\
&= \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',s,s'} \langle \boldsymbol{k}s|\mathcal{H}_0|\boldsymbol{k}'s'\rangle a^\dagger_{\boldsymbol{k}s} a_{\boldsymbol{k}'s'} \\
&+ \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\boldsymbol{q},s_1,s_2,s_3,s_4} V_{s_1s_2s_3s_4}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') a^\dagger_{(\boldsymbol{q}/2)-\boldsymbol{k},s_1} a^\dagger_{(\boldsymbol{q}/2)+\boldsymbol{k},s_2} a_{(\boldsymbol{q}/2)+\boldsymbol{k},s_3} a_{(\boldsymbol{q}/2)-\boldsymbol{k},s_4} \quad .
\end{aligned} \tag{1}
$$

第一項 $\mathcal{H}_0$ は一粒子のハミルトニアンを表す。この第一項は不純物散乱や界面での散乱といった不均一効果も含んでいる。第二項の対相互作用に関しては輸送運動量を $\boldsymbol{q}$ としていて、運動量の保存則以外を課していない。

有限温度の Green 関数を松原形式で次のように導入する。

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

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

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。この量は $c-$数であることに注意する。

通常の Minkowski 空間の計量は diag(-1,1,1,1) であり計算に不便である。そこで時間軸を Wick 回転して、すなわち複素平面上 $\pi/2$ だけ回転させ、diag(-1,1,1,1)→diag(1,1,1,1) とした。すなわち Euclidean 空間化している。このとき第 0 成分は虚時間 $\tau = it$ であり、生成消滅演算子の時間依存性は Heisenberg 描像で導入されている。

$$
a_{\boldsymbol{k}s}(\tau) = e^{\mathcal{H}\tau} a_{\boldsymbol{k}s} e^{-\mathcal{H}\tau} \quad .
$$

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

$$
\begin{aligned}
G_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';\tau) &= k_B T \sum_n G_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';i\omega_n) e^{-i\omega_n\tau} \quad , \\
F^{(\dagger)}_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';\tau) &= k_B T \sum_n F^{(\dagger)}_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';i\omega_n) e^{-i\omega_n\tau} \quad .
\end{aligned} \tag{4}
$$

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。
演算子の運動方程式、例えば

$$\partial_\tau a_{\boldsymbol{k}s} = [\mathcal{H}, a_{\boldsymbol{k}s}] \quad ,$$

などを用いて $G_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';i\omega_n)$ と $F^{(\dagger)}_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';i\omega_n)$ に対する Gor'kov 方程式を得る。

$$\sum_{\boldsymbol{k}'',s''} \Big[\langle \boldsymbol{k}s | i\omega_n - \mathcal{H}_0 | \boldsymbol{k}''s'' \rangle G_{s''s'}(\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{k}';i\omega_n) \tag{5}$$

$$- \sum_{\boldsymbol{q}''} \Delta_{ss'}(\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{q}'') F^{\dagger}_{s''s'}(\frac{\boldsymbol{q}''}{2} - \boldsymbol{k}'',\boldsymbol{k}';i\omega_n)\delta_{(\boldsymbol{q}''/2)+\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{k}} \Big] \;=\; \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{s,s'} \quad , \tag{6}$$

$$\sum_{\boldsymbol{k}'',s''} \Big[\langle \boldsymbol{k}''s'' | i\omega_n + \mathcal{H}_0 | \boldsymbol{k}'s' \rangle F^{\dagger}_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';i\omega_n) \tag{7}$$

$$- \sum_{\boldsymbol{q}''} \Delta^{\dagger}_{ss'}(\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{q}'') G_{s''s'}(\frac{\boldsymbol{q}''}{2} + \boldsymbol{k}'',\boldsymbol{k}';i\omega_n)\delta_{(\boldsymbol{q}''/2)-\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{k}} \Big] \;=\; 0 \quad , \tag{8}$$

$$\sum_{\boldsymbol{k}'',s''} \Big[\langle \boldsymbol{k}s | i\omega_n - \mathcal{H}_0 | \boldsymbol{k}''s'' \rangle F^{\dagger}_{s''s'}(\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{k}';i\omega_n) \tag{9}$$

$$- \sum_{\boldsymbol{q}''} \Delta^{\dagger}_{ss'}(\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{q}'') G_{s's'}(\boldsymbol{k}',\frac{\boldsymbol{q}''}{2} - \boldsymbol{k}'';i\omega_n)\delta_{(\boldsymbol{q}''/2)+\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{k}} \Big] \;=\; 0 \quad . \tag{10}$$

$\mathcal{H}_{\mathrm{pair}}$ に含まれる演算子の 4 次形式は超伝導平均場の手法で切断した。このときに出てくる対ポテンシャルは、

$$\begin{aligned}
\Delta_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}) &= -\sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2} V_{s'ss_1s_2}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\langle a_{(\boldsymbol{q}/2)+\boldsymbol{k}',s_1} a_{(\boldsymbol{q}/2)-\boldsymbol{k}',s_1}\rangle \quad , \\
&= -k_B T \sum_n \sum_{\boldsymbol{k}',s_1,s_2} V_{s'ss_1s_2}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\, F_{s_1s_2}(\frac{\boldsymbol{q}}{2}+\boldsymbol{k}',\frac{\boldsymbol{q}}{2}-\boldsymbol{k}';i\omega_n) \quad .
\end{aligned} \tag{11}$$

2 系が一様な場合の Gor'kov 方程式の解

系が一様な場合、Green 関数 $G_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';\tau)$ の 2 つの運動量の変数は等しい。すなわち、$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}'$ である。異常 Green 関数 $F_{ss'}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}';\tau)$ 場合は符号が変わって $\boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k}'$ となる。

このとき式 (11) を見ると、対ポテンシャルの南部空間における表現行列 $\hat{\Delta}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q})$ は $\boldsymbol{q}$ に依存しなくなる。また、一粒子ハミルトニアンの項は、運動量空間とスピン空間の表現行列に対する要素の対角成分のみ抽出して次のように置ける。

$$\langle \boldsymbol{k}s | \mathcal{H}_0 | \boldsymbol{k}'s' \rangle = \varepsilon(\boldsymbol{k})\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{s,s'}$$

これらを用いると Gor'kov 方程式は単純に表現できて、

$$\Big[i\omega_n - \varepsilon(\boldsymbol{k})\Big] G_{ss'}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) \ - \ \sum_{s''} \Delta_{ss''}(\boldsymbol{k}) F^\dagger_{s''s}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \delta_{s,s'} \quad , \tag{12}$$

$$\Big[i\omega_n + \varepsilon(\boldsymbol{k})\Big] F^\dagger_{ss'}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) \ - \ \sum_{s''} \Delta^\dagger_{ss''}(\boldsymbol{k}) G_{s''s}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = 0 \quad , \tag{13}$$

$$\Big[i\omega_n - \varepsilon(\boldsymbol{k})\Big] F_{ss'}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) \ - \ \sum_{s''} \Delta_{ss''}(\boldsymbol{k}) G_{s's''}(-\boldsymbol{k}, -i\omega_n) = 0 \quad . \tag{14}$$

それぞれの方程式は加減乗除するだけで解ける。南部空間の表現で、スピン一重項対の場合、

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

$$\hat{F}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \frac{\hat{\Delta}(\boldsymbol{k})}{\omega_n^2 + E_{\boldsymbol{k}}^2} \quad . \tag{15}$$

また、スピン三重項対の場合、非ユニタリー状態（$\boldsymbol{q}(\boldsymbol{k}) = i\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) \times \boldsymbol{d}^*(\boldsymbol{k}) \neq 0$）の場合も含めて、

$$\hat{G}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \frac{\Big[\omega_n^2 + \varepsilon^2(\boldsymbol{k}) + |\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})|^2\Big]\hat{\sigma}_0 + \boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{(\omega_n^2 + E_{\boldsymbol{k}+}^2)(\omega_n^2 + E_{\boldsymbol{k}-}^2)} \Big[i\omega_n + \varepsilon(\boldsymbol{k})\Big] \quad ,$$

$$\hat{F}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \frac{\Big[\omega_n^2 + \varepsilon^2(\boldsymbol{k}) + |\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})|^2\Big]\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k}) - i\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})}{(\omega_n^2 + E_{\boldsymbol{k}+}^2)(\omega_n^2 + E_{\boldsymbol{k}-}^2)} \cdot (i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\sigma}_y) \quad . \tag{16}$$

ただし、$E_{\boldsymbol{k}\pm} = \sqrt{\varepsilon^2(\boldsymbol{k}) + |\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})|^2 \pm |\boldsymbol{q}(\boldsymbol{k})|^2}$ と略記した。$|\boldsymbol{d}(\boldsymbol{k})|^2$ は拡張されたギャップの大きさ、$|\boldsymbol{q}(\boldsymbol{k})|^2$ は時間反転対称性が破れた場合に出現するギャップの分裂の大きさをそれぞれ表している。（$\mathcal{H}_{\mathrm{pair}}$ に含まれていた $\boldsymbol{q}$ と、時間反転対称性が破れた場合に出現する q ベクトルは異なる。そもそも前者の $\boldsymbol{q}$ は和を取ると消えるダミー変数であった。）

3 系が一般に非一様な場合の Gor'kov 方程式の解

式 (10) まで遡る。異常 Green 関数に関して解くと、

$$F_{ss'}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}'; i\omega_n) = \sum_{\boldsymbol{k}'', \boldsymbol{q}'', s_1, s_2} \Delta_{s_1 s_2}(\boldsymbol{k}'', \boldsymbol{q}'') G^{(0)}_{ss'}(\boldsymbol{k}, \frac{\boldsymbol{q}''}{2} + \boldsymbol{k}''; i\omega_n) G_{s's_2}(\boldsymbol{k}', \frac{\boldsymbol{q}''}{2} - \boldsymbol{k}''; -i\omega_n) \tag{17}$$

ここで関数 $\hat{G}^{(0)}$ は一体のハミルトニアン $\mathcal{H}_0$ に対する Green 関数であり次で定義されている。

$$\sum_{\boldsymbol{k}'', s''} \langle \boldsymbol{k}s | i\omega_n - \mathcal{H}_0 | \boldsymbol{k}'' s'' \rangle G^{(0)}_{s''s'}(\boldsymbol{k}'', \boldsymbol{k}'; i\omega_n) = \delta_{s,s'} \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tag{18}$$

Work in Progress...

References

[1] M. Sigrist and K. Ueda (1991) Rev. Mod. Phys.