Eliashberg 方程式の導出

永井佑紀

平成 18 年 9 月 11 日

BCS 理論においては、電子間に正味の引力相互作用が生じているとして超伝導状態を論じた。このとき、電子間相互作用の原因は全く問わなかった。通常の典型的超伝導体においては引力相互作用の起源はフォノンを媒介としたものであることがわかっている。これは物質をその物質の同位体に置き換えたときに現れる同位体効果の存在等によって示されている。一般的な説明においては、電子がクーロン相互作用で格子を歪ませ、その結果一時的に電荷が正に偏り、そのポテンシャルに次の電子が引き寄せられるとして説明されている。では、ハミルトニアンに実際に electron-phonon 相互作用を取り込んだ場合、それは通常の BCS 理論とどのように違ってくるのだろうか。この問いに答えたのが強結合理論である。強結合理論でのギャップ方程式は弱結合極限で BCS のギャップ方程式に一致する。また、鉛や水銀のように電子-格子相互作用が強い系においては BCS 理論が定量的に正しい結果を与えないことが知られており、これらの物質の超伝導状態の振る舞いは強結合理論によって説明される。

このノートでは BCS 理論における Gor'kov 方程式に相当する、電子-格子系強結合理論における Green 関数の方程式「Eliashberg 方程式」を導出する。

1 電子-格子相互作用が存在する系での運動方程式

1.1 ハミルトニアン

electron-phonon coupling のハミルトニアンとして

$$\mathcal{H}_{\mathrm{e-p}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\sigma} \alpha(\boldsymbol{q})(a_{\boldsymbol{q}} + a_{\boldsymbol{q}}^\dagger) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \tag{1}$$

を採用する。ここで $a_{\mathbf{q}}$ はフォノンの消滅演算子、$c_{\mathbf{k}}$ は電子の消滅演算子である。用いるハミルトニアンとしては

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{\mathrm{e}} + \mathcal{H}_{\mathrm{p}} + \mathcal{H}_{\mathrm{e-p}} \qquad (2)\\ &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q}) a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\sigma} \alpha(\boldsymbol{q})(a_{\boldsymbol{q}} + a_{\boldsymbol{q}}^\dagger) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \qquad (3) \end{aligned}$$

を採用する。このハミルトニアンには electron-electron 相互作用 (クーロン斥力) は含まれていない。

1.2 電子に対する Green 関数の運動方程式

電子の Green 関数は

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, \tau - \tau') &= -\langle T c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau') \rangle \qquad (4)\\ &= -\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau') \theta(\tau - \tau') - c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(\tau') c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) \theta(\tau' - \tau) \rangle \qquad (5) \end{aligned}$$

と定義されていた。この Green 関数に対する運動方程式を求める。Green 関数を τ で微分すると、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\tau}G(\mathbf{k},\tau-\tau') &= -\langle\delta(\tau-\tau')[c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau),c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')]_+ + T[\mathcal{H},c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)]c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle & (6)\\
-\frac{\partial}{\partial\tau}G(\mathbf{k},\tau-\tau') &= \delta(\tau-\tau') + \langle T[\mathcal{H},c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)]c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle & (7)
\end{aligned}$$

となる。ここで

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H},c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)] &= \mathcal{H}e^{\mathcal{H}\tau}c_{\mathbf{k}\uparrow}e^{-\mathcal{H}\tau} - e^{\mathcal{H}\tau}c_{\mathbf{k}\uparrow}e^{-\mathcal{H}\tau}\mathcal{H} & (8)\\
&= e^{\mathcal{H}\tau}(\mathcal{H}c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\uparrow}\mathcal{H})e^{-\mathcal{H}\tau} & (9)\\
&= e^{\mathcal{H}\tau}[\mathcal{H}_{\mathrm{e}},c_{\mathbf{k}\uparrow}]e^{-\mathcal{H}\tau} + e^{\mathcal{H}\tau}[(\mathcal{H}_{\mathrm{p}}+\mathcal{H}_{\mathrm{e-p}}),c_{\mathbf{k}\uparrow}]e^{-\mathcal{H}\tau} & (10)
\end{aligned}$$

として交換関係に τ が含まれないようにし、

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_{\mathrm{e}},c_{\mathbf{k}\uparrow}] &= \sum_{\mathbf{k}',\sigma'}\xi(\mathbf{k}')c^\dagger_{\mathbf{k}'\sigma'}c_{\mathbf{k}\sigma'}c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\uparrow}\sum_{\mathbf{k}',\sigma'}\xi(\mathbf{k}')c^\dagger_{\mathbf{k}'\sigma'}c_{\mathbf{k}\sigma'} & (11)\\
&= \xi(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}\uparrow} & (12)
\end{aligned}$$

と

$$[\mathcal{H}_{\mathrm{p}},c_{\mathbf{k}\uparrow}] = 0 \tag{13}$$

を用いると交換関係は

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_{\mathrm{e-p}},c_{\mathbf{k}\uparrow}] &= \frac{-1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}}\alpha(\mathbf{q})(a_{\mathbf{q}}+a^\dagger_{-\mathbf{q}})c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow} & (14)\\
&= \frac{-1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}}\alpha(\mathbf{q})(a^\dagger_{\mathbf{q}}+a_{-\mathbf{q}})c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} & (15)
\end{aligned}$$

となる。$\alpha(\mathbf{q}) = \alpha(-\mathbf{q})$ とした。よって τ が含まれた交換関係は

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H},c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)] &= -e^{\mathcal{H}\tau}\xi(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}\uparrow}e^{-\mathcal{H}\tau} - e^{\mathcal{H}\tau}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}}\alpha(\mathbf{q})(a^\dagger_{\mathbf{q}}+a_{-\mathbf{q}})c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}e^{-\mathcal{H}\tau} & (16)\\
&= -\xi(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) - \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}}\alpha(\mathbf{q})(a^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau)+a_{-\mathbf{q}}(\tau))c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau) & (17)
\end{aligned}$$

と書くことができるので、以上より

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial}{\partial\tau}G(\mathbf{k},\tau-\tau') &= \delta(\tau-\tau') - \xi(\mathbf{k})\langle Tc_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle - \langle T\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}}\alpha(\mathbf{q})\phi_{\mathbf{q}}(\tau)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau)c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle & (18)\\
\phi_{\mathbf{q}}(\tau) &\equiv a^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau) + a_{-\mathbf{q}}(\tau) & (19)
\end{aligned}$$

となる。ここで

$$\Gamma(\mathbf{q},\mathbf{k},\tau,\tau'',\tau') \equiv -\langle T\phi_{\mathbf{q}}(\tau)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau'')c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \tag{20}$$

を定義すれば

$$\left[-\frac{\partial}{\partial\tau} - \xi(\mathbf{k})\right]G(\mathbf{k},\tau-\tau') = \delta(\tau-\tau') + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}}\alpha(\mathbf{q})\Gamma(\mathbf{q},\mathbf{k},\tau,\tau,\tau') \tag{21}$$

を得る。これが Green 関数の運動方程式である。このままでは Γ がわからなければ解く事ができない。そこで、Γ に関する運動方程式がどのようになるかを考える。その前に準備として様々な演算子に対する運動方程式を導いておく。

1.3 様々な演算子に対する運動方程式

$a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ に対する運動方程式は

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\tau}a_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau) &= [\mathcal{H}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau)] \quad (22)\\ &= e^{\mathcal{H}\tau}[\mathcal{H}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}]e^{-\mathcal{H}\tau} \quad (23)\end{aligned}$$

と書くことができる。ここで

$$\begin{aligned}[\mathcal{H}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}] &= [\mathcal{H}_{\rm e} + \mathcal{H}_{\rm p} + \mathcal{H}_{\rm e-p}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}] \quad (24)\\ &= [\mathcal{H}_{\rm p} + \mathcal{H}_{\rm e-p}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}] \quad (25)\end{aligned}$$

である。フォノンの生成演算子と $\mathcal{H}_{\rm e}$ の交換関係は $\mathcal{H}_{\rm e}$ にフォノンの演算子が含まれないためゼロになる。つまり、

$$\begin{aligned}[\mathcal{H}_{\rm p}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}] &= \sum_{\mathbf{q}'}\omega(\mathbf{q}')a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}a_{\mathbf{q}'}a_{\mathbf{q}}^{\dagger} - a_{\mathbf{q}}^{\dagger}\sum_{\mathbf{q}'}\omega(\mathbf{q}')a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}a_{\mathbf{q}'} \quad (26)\\ &= \omega(\mathbf{q})a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \quad (27)\end{aligned}$$

と

$$[\mathcal{H}_{\rm e-p}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}] = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\alpha(\mathbf{q})c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (28)$$

を用いることによって、$a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ に対する運動方程式は

$$\frac{\partial}{\partial\tau}a_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau) = \omega(\mathbf{q})a_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau) + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\alpha(\mathbf{q})c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}(\tau)c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \quad (29)$$

となる。同様に計算すると、$a_{\mathbf{q}}$ に対する運動方程式は、

$$\frac{\partial}{\partial\tau}a_{\mathbf{q}}(\tau) = -\omega(\mathbf{q})a_{\mathbf{q}}(\tau) - \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\alpha(-\mathbf{q})c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}(\tau)c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \quad (30)$$

となる。

次に、$\phi_{\mathbf{q}}(\tau)$ に対する運動方程式を求める。式 (29)、(30) を整理すると

$$\begin{aligned}\left[\frac{\partial}{\partial\tau} - \omega(\mathbf{q})\right]a_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\alpha(\mathbf{q})c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}(\tau)c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \quad (31)\\ \left[\frac{\partial}{\partial\tau} + \omega(\mathbf{q})\right]a_{-\mathbf{q}}(\tau) &= -\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\alpha(\mathbf{q})c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}(\tau)c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \quad (32)\end{aligned}$$

となる。ここで式 (30) において $\mathbf{q} \to -\mathbf{q}$ と付け替え、$\omega(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q})$ と仮定した。式 (31) の両辺に左から $[\partial/\partial\tau + \omega(\mathbf{q})]$ をかけると、

$$\begin{aligned}\left[\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} - \omega^2(\mathbf{q})\right]a_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\alpha(\mathbf{q})\left(\frac{\partial}{\partial\tau} + \omega(\mathbf{q})\right)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}(\tau)c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \quad (33)\\ &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\alpha(\mathbf{q})\left(e^{\mathcal{H}\tau}[\mathcal{H}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}c_{\mathbf{k}\sigma}]e^{-\mathcal{H}\tau} + \omega(\mathbf{q})c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}(\tau)c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)\right) \quad (34)\end{aligned}$$

となり、同様に式 (32) の両辺に左から $[\partial/\partial\tau - \omega(\mathbf{q})]$ をかけると、

$$\begin{aligned}\left[\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} - \omega^2(\mathbf{q})\right]a_{-\mathbf{q}}(\tau) &= -\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\alpha(\mathbf{q})\left(\frac{\partial}{\partial\tau} - \omega(\mathbf{q})\right)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}(\tau)c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \quad (35)\\ &= -\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\alpha(\mathbf{q})\left(e^{\mathcal{H}\tau}[\mathcal{H}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}c_{\mathbf{k}\sigma}]e^{-\mathcal{H}\tau} - \omega(\mathbf{q})c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger}(\tau)c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)\right) \quad (36)\end{aligned}$$

となる。式 (34)、(36) の和を取ると、$\phi_{\mathbf{q}}(\tau)$ に対する運動方程式：

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}-\omega^2(\mathbf{q})\right]\phi_{\mathbf{q}}(\tau)=\frac{2\omega(qv)\alpha(\mathbf{q})}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{l},\sigma}c^{\dagger}_{\mathbf{l}\sigma}(\tau)c_{\mathbf{l}-\mathbf{q}\sigma}(\tau) \tag{37}$$

が得られる[1]。

1.4 Γ に対する運動方程式

式 (37) を用いれば、Γ に対する運動方程式は容易に得ることができて、

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}-\omega^2(\mathbf{q})\right]\Gamma(\mathbf{q},\mathbf{k},\tau,\tau'',\tau')=-\frac{2\omega(\mathbf{q})\alpha(\mathbf{q})}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{l},\sigma}\langle Tc^{\dagger}_{\mathbf{l}\sigma}(\tau)c_{\mathbf{l}-\mathbf{q}\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau'')c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \tag{38}$$

となることがわかる。この式は Γ に対する微分方程式である。これを自由フォノンの Green 関数を用いて形式的に積分表示で表すことを考える。実際に用いるべきフォノンの Green 関数は相互作用により繰り込まれたフォノンの Green 関数であるが、いまは近似として自由フォノンの Green 関数を用いる。この近似は Migdal の定理によって正当化される。

1.5 自由フォノンの Green 関数に対する運動方程式

フォノンの Green 関数を

$$D(\mathbf{q},\tau-\tau')=-\langle T\phi_{\mathbf{q}}(\tau)\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')\rangle \tag{39}$$

と定義する。このときの T 積はボソンに対するものであるので

$$D(\mathbf{q},\tau-\tau')=-\langle\phi_{\mathbf{q}}(\tau)\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')\theta(\tau-\tau')+\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')\phi_{\mathbf{q}}(\tau)\theta(\tau'-\tau)\rangle \tag{40}$$

である。電子との相互作用を無視した自由なフォノンを考えると、このとき

$$\frac{\partial}{\partial\tau}a^{\dagger}_{\mathbf{q}}(\tau) = \omega(\mathbf{q})a^{\dagger}_{\mathbf{q}}(\tau) \tag{41}$$

$$\frac{\partial}{\partial\tau}a_{-\mathbf{q}}(\tau) = -\omega(\mathbf{q})a_{-\mathbf{q}}(\tau) \tag{42}$$

である。Green 関数を τ で微分すると

$$\frac{\partial}{\partial\tau}D(\mathbf{q},\tau-\tau') = -\langle T\frac{\partial}{\partial\tau}\phi_{\mathbf{q}}(\tau)\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')\rangle-\langle\phi_{\mathbf{q}}(\tau)\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')-\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')\phi_{\mathbf{q}}(\tau)\rangle\delta(\tau-\tau') \tag{43}$$

$$= -\langle T\frac{\partial}{\partial\tau}\phi_{\mathbf{q}}(\tau)\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')\rangle-\langle[\phi_{\mathbf{q}}(\tau),\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')]\rangle\delta(\tau-\tau') \tag{44}$$

$$= -\langle T\frac{\partial}{\partial\tau}\phi_{\mathbf{q}}(\tau)\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')\rangle \tag{45}$$

となる。ここで、

$$\langle[\phi_{\mathbf{q}}(\tau),\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')]\rangle\delta(\tau-\tau') = \langle[\phi_{\mathbf{q}}(\tau),\phi_{-\mathbf{q}}(\tau)]\rangle\delta(\tau-\tau') \tag{46}$$

$$= \langle e^{\mathcal{H}\tau}[\phi_{\mathbf{q}},\phi_{-\mathbf{q}}]e^{-\mathcal{H}\tau}\rangle\delta(\tau-\tau') \tag{47}$$

$$= 0 \tag{48}$$

[1] $\mathbf{k}$ はダミーインデックスなので $\mathbf{k}+\mathbf{q}\to\mathbf{l}$ と置き換えた。

という関係を用いた[2]。さらに τ で微分すると

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}D(\mathbf{q},\tau-\tau') &= -\langle T\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}\phi_{\mathbf{q}}(\tau)\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')\rangle - \langle[\frac{\partial}{\partial\tau}\phi_{\mathbf{q}}(\tau),\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')]\rangle\delta(\tau-\tau') &(49)\\
&= -\langle T\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}\phi_{\mathbf{q}}(\tau)\phi_{-\mathbf{q}}(\tau')\rangle + 2\omega(\mathbf{q})\delta(\tau-\tau') &(50)\\
&= -\omega^2(\mathbf{q})D(\mathbf{q},\tau,\tau') + 2\omega(\mathbf{q})\delta(\tau-\tau') &(51)
\end{aligned}$$

となり、自由フォノンに対する Green 関数の運動方程式は

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+\omega^2(\mathbf{q})\right]D(\mathbf{q},\tau-\tau') = 2\omega(\mathbf{q})\delta(\tau-\tau') \tag{52}$$

となる。

1.6 電子に対する Green 関数の最終形

式 (38)、(52) を用いて Γ の積分表示を求める。式 (38) の右辺を変形すると、

$$(\text{右辺}) = -\frac{\alpha(\mathbf{q})}{\sqrt{N}}\int_0^\beta d\tau_1 2\omega(\mathbf{q})\delta(\tau-\tau_1)\sum_{\mathbf{l},\sigma}\langle Tc^\dagger_{\mathbf{l}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{l}-\mathbf{q}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau'')c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \tag{53}$$

となり、式 (52) を用いると

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+\omega^2(\mathbf{q})\right]\left(-\frac{\alpha(\mathbf{q})}{\sqrt{N}}\right)\int_0^\beta d\tau_1 D(\mathbf{q},\tau-\tau_1)\sum_{\mathbf{l},\sigma}\langle Tc^\dagger_{\mathbf{l}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{l}-\mathbf{q}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau'')c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \tag{54}$$

となる。この式と式 (38) を比較すれば

$$\Gamma(\mathbf{q},\mathbf{k},\tau',\tau''.\tau') = -\frac{\alpha(\mathbf{q})}{\sqrt{N}}\int_0^\beta d\tau_1 D(\mathbf{q},\tau-\tau_1)\sum_{\mathbf{l},\sigma}\langle Tc^\dagger_{\mathbf{l}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{l}-\mathbf{q}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau'')c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \tag{55}$$

となる。この積分表示は、ある線形微分方程式と Green 関数が

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}f(x) &= \rho(x) &(56)\\
\mathcal{L}G(x,x') &= \delta(x-x') &(57)\\
f(x) &= \int G(x,x')\rho(x')dx' &(58)
\end{aligned}$$

を満たすことを利用して導くこともできる。

式 (55) を式 (21) に代入すると、

$$\left[-\frac{\partial}{\partial\tau}-\xi(\mathbf{k})\right]G(\mathbf{k},\tau-\tau') = \delta(\tau-\tau') - \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}\alpha(\mathbf{q})^2\int_0^\beta d\tau_1 D(\mathbf{q},\tau-\tau_1)\sum_{\mathbf{l},\sigma}\langle Tc^\dagger_{\mathbf{l}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{l}-\mathbf{q}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau'')c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \tag{59}$$

という電子に対する Green 関数の運動方程式が得られる。これは以前のノートで導出した Gor'kov 方程式の途中形に似ており[3]、二体の Green 関数が現れている。ここでは、以前と同様に Wick の定理を用いて一体の Green 関数の積に直す。これはすなわち平均場近似を行うということである。

[2] $\phi_{\mathbf{q}}$ はボソンの演算子であるから交換関係を満たす。
[3]「BCS 理論と Gor'kov 方程式」ノートの式 (6)。

2 Eliashberg 方程式の導出

平均場近似：

$$\sum_{\mathbf{l},\sigma}\langle Tc^\dagger_{\mathbf{l}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{l}-\mathbf{q}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau'')c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \rightarrow \langle Tc_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau_1)\rangle\langle Tc_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau_1)c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \tag{60}$$

$$-\langle Tc_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau)c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}(\tau_1)\rangle\langle Tc_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau_1)c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \tag{61}$$

を導入する。このとき、異常 Green 関数を

$$F^*(\mathbf{k},\tau-\tau') \equiv -\langle Tc^\dagger_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau_1)c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \tag{62}$$

と定義しておくと、

$$\sum_{\mathbf{l},\sigma}\langle Tc^\dagger_{\mathbf{l}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{l}-\mathbf{q}\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}(\tau'')c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau')\rangle \rightarrow G(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau-\tau_1)G(\mathbf{k},\tau_1-\tau')-F(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau-\tau_1)F^*(\mathbf{k},\tau_1-\tau') \tag{63}$$

となり、運動方程式は

$$\begin{aligned}\left[-\frac{\partial}{\partial\tau}-\xi(\mathbf{k})\right]G(\mathbf{k},\tau-\tau') &= \delta(\tau-\tau')-\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}\alpha^2(\mathbf{q})\int_0^\beta d\tau_1 D(\mathbf{q},\tau-\tau_1)\\ &\quad\times[G(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau-\tau_1)G(\mathbf{k},\tau_1-\tau')-F(\mathbf{k}+q,\tau-\tau_1)F^*(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau_1-\tau')]\end{aligned} \tag{64}$$

となる。ここで、Green 関数のフーリエ変換は

$$G(\tau-\tau') = \frac{1}{\beta}\sum_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}G(\omega_n) \tag{65}$$

であるから、

$$\begin{aligned}\int_0^\beta d\tau_1 D(\mathbf{q},\tau-\tau_1)G(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau-\tau_1)G(\mathbf{k},\tau_1-\tau') &= \int_0^\beta d\tau_1\frac{1}{\beta^3}\sum_{l,m,n}e^{-i\omega_l(\tau-\tau_1)}D(\mathbf{q},\omega_l)\\ &\quad\times e^{-i\omega_m(\tau-\tau_1)}G(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_m)e^{-i\omega_n(\tau_1-\tau')}G(\mathbf{k},\omega_n) &(66)\\ &= \sum_{l,m,n}e^{-i(\omega_l+\omega_m)\tau+i\omega_n\tau'}D(\mathbf{q},\omega_l)G(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_m)G(\mathbf{k},\omega_n)\\ &\quad\times\frac{1}{\beta^3}\int_0^\beta d\tau_1 e^{i(\omega_l+\omega_m-\omega_n)\tau_1} &(67)\\ &= \frac{1}{\beta^3}\sum_{l,m,n}\delta(\omega_l+\omega_m-\omega_n)e^{-i(\omega_l+\omega_m)\tau+i\omega_n\tau'}\\ &\quad\times D(\mathbf{q},\omega_l)G(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_m)G(\mathbf{k},\omega_n) &(68)\\ &= \frac{1}{\beta^2}\sum_{m,n}e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\\ &\quad\times D(\mathbf{q},\omega_n-\omega_m)G(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_m)G(\mathbf{k},\omega_n) &(69)\end{aligned}$$

となる。よって式 (64) の第二項は

$$\frac{-1}{N}\sum_{\mathbf{q}}\alpha^2(\mathbf{q})\frac{1}{\beta^2}\sum_{m,n}e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}D(\mathbf{q},\omega_n-\omega_m)G(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_m)G(\mathbf{k},\omega_n) \tag{70}$$

$$= \frac{-1}{N\beta^2}\sum_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\sum_{m,\mathbf{q}}\alpha^2(\mathbf{q})D(\mathbf{q},\omega_n-\omega_m)G(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_m)G(\mathbf{k},\omega_n) \tag{71}$$

$$= \frac{-1}{N\beta^2}\sum_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\sum_{m,\mathbf{q}}\alpha^2(\mathbf{q}-\mathbf{k})D(\mathbf{q}-\mathbf{k},\omega_n-\omega_m)G(\mathbf{q},\omega_m)G(\mathbf{k},\omega_n) \tag{72}$$

$$= \frac{-1}{N\beta^2}\sum_n e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\sum_{m,\mathbf{q}}\alpha^2(\mathbf{k}-\mathbf{q})D(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega_n-\omega_m)G(\mathbf{q},\omega_m)G(\mathbf{k},\omega_n) \tag{73}$$

となる[4]。したがって、正常自己エネルギーとして

$$\Sigma(\mathbf{k},\omega_n) = -\frac{k_BT}{N}\sum_{\mathbf{q},m}\alpha^2(\mathbf{k}-\mathbf{q})D(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega_n-\omega_m)G(\mathbf{q},\omega_m) \tag{74}$$

と異常自己エネルギーとして

$$\Delta(\mathbf{k},\omega_n) = \frac{k_BT}{N}\sum_{\mathbf{q},m}\alpha^2(\mathbf{k}-\mathbf{q})D(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega_n-\omega_m)F(\mathbf{q},\omega_m) \tag{75}$$

を導入して運動方程式を書き下すと

$$[i\omega_n-\xi(\mathbf{k})-\Sigma(\mathbf{k},\omega_n)]G(\mathbf{k},\omega_n)-\Delta(\mathbf{k},\omega_n)F^*(\mathbf{k},\omega_n)=1 \tag{76}$$

となる。同様に異常 Green 関数 F^* の定義式を τ で微分することでもう一つの運動方程式：

$$[i\omega_n+\xi(\mathbf{k})-\Sigma(\mathbf{k},-\omega_n)]F^*(\mathbf{k},\omega_n)-\Delta^*(\mathbf{k},\omega_n)G(\mathbf{k},\omega_n)=0 \tag{77}$$

を得ることができる。また、通常よく使われる記法 (ω_n ではなく ε_n を用いた記法) にしてこれら四本の連立方程式を書き下すと

$$\begin{aligned}
\Sigma(\mathbf{k},i\varepsilon_n) &= -\frac{k_BT}{N}\sum_{\mathbf{q},m}\alpha^2(\mathbf{k}-\mathbf{q})D(\mathbf{k}-\mathbf{q},i\varepsilon_n-i\varepsilon_m)G(\mathbf{q},i\varepsilon_m) && (78)\\
\Delta(\mathbf{k},i\varepsilon_n) &= \frac{k_BT}{N}\sum_{\mathbf{q},m}\alpha^2(\mathbf{k}-\mathbf{q})D(\mathbf{k}-\mathbf{q},i\varepsilon_n-i\varepsilon_m)F(\mathbf{q},i\varepsilon_m) && (79)\\
1 &= [i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{k})-\Sigma(\mathbf{k},i\varepsilon_n)]G(\mathbf{k},i\varepsilon_n)-\Delta(\mathbf{k},i\varepsilon_n)F^*(\mathbf{k},i\varepsilon_n) && (80)\\
0 &= [i\varepsilon_n+\xi(\mathbf{k})+\Sigma(\mathbf{k},-i\varepsilon_n)]F^*(\mathbf{k},i\varepsilon_n)-\Delta^*(\mathbf{k},i\varepsilon_n)G(\mathbf{k},i\varepsilon_n) && (81)
\end{aligned}$$

となる。これらを Eliashberg(エリアシュベルグ) 方程式と呼び、常伝導状態における Dyson（ダイソン）方程式を超伝導状態に拡張したものになっている。

Eliashberg 方程式が Gor'kov 方程式と比べて異なるのは、正常自己エネルギー Σ の効果が取り込まれていることと、電子間の有効引力がフォノンの Green 関数によって表現されてそこに τ 依存性が入っていることである。この結果は、フォノンを媒介とする電子間相互作用が有限の時間で伝わること（遅延効果）が取り込まれたことによる。

3 ギャップ方程式

T_c を求めるため、Eliashberg 方程式を F と Δ が小さいとして線形化する。このとき、式 (80) より

$$G(\mathbf{k},i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{k})-\Sigma(\mathbf{k},i\omega_n)} \tag{82}$$

となる。このとき、異常 Green 関数 F^* は式 (81) を用いれば

$$\begin{aligned}
F^*(\mathbf{k},i\varepsilon_n) &= \frac{\Delta^*(\mathbf{k},i\varepsilon_n)G(\mathbf{k},i\varepsilon_n)}{i\varepsilon_n+\xi(\mathbf{k})+\Sigma(\mathbf{k},-i\varepsilon_n)} && (83)\\
&= -\frac{\Delta^*(\mathbf{k},i\varepsilon_n)G(\mathbf{k},i\varepsilon_n)}{-i\varepsilon_n-\xi(\mathbf{k})-\Sigma(\mathbf{k},-i\varepsilon_n)} && (84)\\
&= G(\mathbf{k},-i\varepsilon_n)\Delta^*(\mathbf{k},i\varepsilon_n)G(\mathbf{k},i\varepsilon_n) && (85)
\end{aligned}$$

[4]最後の変形では、実際上 $\mathbf{k}$ に関しては大きさのみに依ることを用いて符号の付け替えを行った。

と書くことができる。ここで、時間反転対称性から

$$
\begin{aligned}
G(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) &= \bar{G}(-\mathbf{k}, -i\varepsilon_n) && (86)\\
&= \bar{G}(\mathbf{k}, -i\varepsilon_n) && (87)\\
F^*(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) &= F^\dagger(-\mathbf{k}, -i\varepsilon_n) && (88)\\
&= F^\dagger(\mathbf{k}, -i\varepsilon_n) && (89)
\end{aligned}
$$

が成り立つので[5]、式 (85) を用いて異常 Green 関数 F は

$$
\begin{aligned}
F(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) &= \left(F^\dagger(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)\right)^\dagger && (90)\\
&= \left(F^*(\mathbf{k}, -i\varepsilon_n)\right)^\dagger && (91)\\
&= \left(G(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)\Delta^*(\mathbf{k}, -i\varepsilon_n)G(\mathbf{k}, -i\varepsilon_n)\right)^\dagger && (92)\\
&= \bar{G}(-\mathbf{k}, i\varepsilon_n)\Delta(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)\bar{G}(\mathbf{k}, -i\varepsilon_n) && (93)\\
&= G(-\mathbf{k}, -i\varepsilon_n)\Delta(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)G(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) && (94)
\end{aligned}
$$

と書くことができる。よって、式 (79) に代入すると

$$
\Delta(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{k_B T}{N}\sum_{\mathbf{q},m}\alpha^2(\mathbf{k}-\mathbf{q})D(\mathbf{k}-\mathbf{q}, i\varepsilon_n - i\varepsilon_m)G(-\mathbf{k}, -i\varepsilon_m)G(\mathbf{k}, i\varepsilon_m)\Delta(\mathbf{k}, i\varepsilon_m) \tag{95}
$$

となる。これが臨界温度近傍における強結合理論でのギャップ方程式である。

参考文献

黒木和彦・青木秀夫、「多体電子論 II　超伝導」(東京大学出版会)
中島貞雄、「超伝導入門」(培風館)
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)
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)

[5]以前のノート「空間的に一様な場合の Green 関数と準古典 Green 関数」でも用いた。