BCS 理論と Gor'kov 方程式

永井佑紀

平成 17 年 9 月 30 日

超伝導の BCS 理論は、Hartree-Fock 近似を一般化したものといえる。このノートでは、BCS 理論における Green 関数を求める方程式（Gor'kov 方程式) を導出する。これは、BCS 理論の枠組みの中で Green 関数の運動方程式を求めることと等しい。このノートにおける Green 関数とは、特に断りがなければ、すべて温度 Green 関数を表すことにし、その表記を G とする。また、$\hbar = 1$ である単位系を用いる。

温度 Green 関数は

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}_1, \tau_1; \boldsymbol{r}_2, \tau_2) = -\langle \mathrm{T}_\tau [\tilde{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r}_1, \tau_1) \tilde{\psi}^\dagger_\beta(\boldsymbol{r}_2, \tau_2)] \rangle \tag{1}$$

と定義することにする。

1 Gor'kov 方程式

1.1 BCS ハミルトニアン

まず、ハミルトニアンを

$$\hat{\mathcal{H}} = \int \psi^\dagger(\boldsymbol{r}) h(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r}) d^3\boldsymbol{r} + \frac{1}{2} \int\int \psi^\dagger_\alpha(\boldsymbol{r}) \psi^\dagger_\beta(\boldsymbol{r'}) v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}) \psi_\beta(\boldsymbol{r'}) \psi_\alpha(\boldsymbol{r}) d^3\boldsymbol{r} d^3\boldsymbol{r'} \tag{2}$$

とおく。BCS 理論においては、ポテンシャルは波数に依存せず定数 V と置けた。したがって、実空間で考えればポテンシャルは δ 関数と置けるはずである。（ただし、相互作用がフェルミエネルギーやカットオフ周波数よりも十分に小さいときのみに成り立つ。）よって、

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{BCS}} = \int \left[-\psi^\dagger_\alpha \frac{\nabla^2}{2m} \psi_\alpha + \frac{g}{2} \psi^\dagger_\beta \psi^\dagger_\alpha \psi_\alpha \psi_\beta \right] d^3\boldsymbol{r} \tag{3}$$

となる。ここで $g < 0$ である。また、粒子数演算子を

$$\hat{\mathcal{N}} = \int \psi^\dagger_\alpha \psi_\alpha d^3\boldsymbol{r} \tag{4}$$

とおく。これらはすべて Heisenberg 形式の演算子であるとし、チルダをはぶく。

1.2 超伝導状態における Wick の定理

一般のポテンシャル v に対する Green 関数の運動方程式は

$$\begin{aligned}\left[-\frac{\partial}{\partial \tau} - (h(\boldsymbol{r}) - \mu) \right] G_{\alpha\beta}(x, x') = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(x - x') - \int d^3\boldsymbol{r}_1 v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_1) \\ \times \langle \mathrm{T}_\tau [\psi^\dagger_\gamma(\boldsymbol{r}_1, \tau) \psi_\gamma(\boldsymbol{r}_1, \tau) \psi_\alpha(x) \psi^\dagger_\beta(x')] \rangle\end{aligned} \tag{5}$$

である。$h(\boldsymbol{r}) = -\frac{\nabla^2}{2m}$、$v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}) = g\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'})$ とすれば、

$$\left[-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right] G_{\alpha\beta}(x, x') = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(x - x') - g \langle \mathrm{T}_\tau [\psi^\dagger_\gamma(\boldsymbol{r}, \tau) \psi_\gamma(\boldsymbol{r}, \tau) \psi_\alpha(x) \psi^\dagger_\beta(x')] \rangle \tag{6}$$

となる。

　ここで、右辺第二項の 2 体の Green 関数を 1 体の Green 関数の積で近似する。このとき、BCS ハミルトニアンはなんらかの平均場近似によって相互作用のないハミルトニアンに近似されているとする。そうすれば、Wick の定理を用いることができる。以前のノートを見ればわかるように、Wick の定理とは、「複数の時間順序積の統計平均が、もとの行列要素が零ではない演算子二つの時間順序積の統計平均の積で書ける」というものであった。通常の状態では、行列要素が零ではない演算子二つのペアは $\psi\psi^\dagger$ のみであった。しかし、超伝導状態では Cooper pair を作るので $\psi^\dagger\psi^\dagger$、$\psi\psi$ の行列要素も零ではない。このことを踏まえて Wick の定理を用いると、2 体の Green 関数は

$$\begin{aligned}
& \langle \mathrm{T}_\tau[\psi^\dagger_\gamma(\boldsymbol{r},\tau)\psi_\gamma(\boldsymbol{r},\tau)\psi_\alpha(x)\psi^\dagger_\beta(x')]\rangle \\
= \ & -\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\gamma(\boldsymbol{r},\tau)\psi^\dagger_\gamma(\boldsymbol{r},\tau)]\rangle\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\alpha(x)\psi^\dagger_\beta(x')]\rangle \\
& +\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\alpha(\boldsymbol{r},\tau)\psi^\dagger_\gamma(\boldsymbol{r},\tau)]\rangle\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\gamma(x)\psi^\dagger_\beta(x')]\rangle \\
& -\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\alpha(\boldsymbol{r},\tau)\psi_\gamma(\boldsymbol{r},\tau)]\rangle\langle \mathrm{T}_\tau[\psi^\dagger_\gamma(x)\psi^\dagger_\beta(x')]\rangle
\end{aligned} \tag{7}$$

となる。

1.3　Gor'kov 方程式

　式 (7) の第一項と第二項は Green 関数を用いて

$$-\sum\nolimits_{\gamma\gamma}(x)G_{\alpha\beta}(x,x') + \sum\nolimits_{\alpha\gamma}(x)G_{\gamma\beta}(x,x') \tag{8}$$

と書き直すことができる。ここで、

$$\sum\nolimits_{\alpha\beta}(x) = -\langle \mathrm{T}_\tau\psi_\alpha(x)\psi^\dagger_\beta(x)\rangle \equiv G_{\alpha\beta}(x,x) \tag{9}$$

は self-energy と呼ばれるものである。これらの項は左辺に移項してくくることができ、化学ポテンシャル μ に若干の補正を与えていることがわかる。BCS 理論においては、Cooper pair を作る相互作用以外は無視するので、第一項第二項を無視することになる。

　第三項は Hartree-Fock 近似のときと同様に

$$-\lim_{\epsilon\to+0}\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\alpha(\boldsymbol{r},\tau+\epsilon)\psi_\gamma(\boldsymbol{r},\tau-\epsilon)]\rangle\langle \mathrm{T}_\tau[\psi^\dagger_\gamma(x)\psi^\dagger_\beta(x')]\rangle \tag{10}$$

という形にかえると、

$$-\lim_{\epsilon\to+0}\langle \psi_\alpha(\boldsymbol{r},\tau+\epsilon)\psi_\gamma(\boldsymbol{r},\tau-\epsilon)\rangle\langle \mathrm{T}_\tau[\psi^\dagger_\gamma(x)\psi^\dagger_\beta(x')]\rangle = -\langle\psi_\alpha(\boldsymbol{r},\tau)\psi_\gamma(\boldsymbol{r},\tau)\rangle\langle \mathrm{T}_\tau[\psi^\dagger_\gamma(x)\psi^\dagger_\beta(x')]\rangle \tag{11}$$

となる。Hartree-Fock 近似のときとの類推で考えると、$\langle\psi_\alpha(\boldsymbol{r},\tau)\psi_\gamma(\boldsymbol{r},\tau)\rangle$ は何らかの平均場であるということがわかる。これが零になれば常伝導状態になると考えられるので、これが秩序パラメータ Δ である。したがって、

$$\Delta_{\alpha\beta}(x) = g\langle\psi_\alpha(\boldsymbol{r},\tau)\psi_\beta(\boldsymbol{r},\tau)\rangle \tag{12}$$

とし、異常 Green 関数 $F_{\alpha\beta}$ を

$$F_{\alpha\beta}(x,x') \equiv \langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\alpha(x)\psi_\beta(x')]\rangle \tag{13}$$

$$F^\dagger_{\alpha\beta}(x,x') \equiv \langle \mathrm{T}_\tau[\psi^\dagger_\alpha(x)\psi^\dagger_\beta(x')]\rangle \tag{14}$$

と定義すれば、式 (6) は

$$\left[-\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right]G_{\alpha\beta}(x,x') + \Delta_{\alpha\gamma}(x)F^\dagger_{\gamma\beta}(x,x') = \delta_{\alpha\beta}\delta^{(4)}(x-x') \tag{15}$$

となる。

この方程式は未定関数 $F^{\dagger}_{\alpha\beta}(x,x')$ が含まれており、単独では解けない。したがって、もうひとつ方程式が欲しい。以前のノートにおいて Green 関数に関する運動方程式を導いた。同様の手順で異常 Green 関数 $F^{\dagger}_{\alpha\beta}(x,x')$ に関する運動方程式も導けるはずである。まず、

$$\frac{\partial}{\partial\tau}F^{\dagger}_{\alpha\beta}(x,x') = -\langle \mathrm{T}_\tau[[K,\psi^\dagger(x)]\psi^\dagger(x')]\rangle \tag{16}$$

が成り立っているのは容易にわかる。G のときとの大きな違いは、同じ演算子による交換関係、反交換関係を用いたために δ 関数は零になっているという点である。次に Heisenberg の運動方程式から

$$-[K,\psi^\dagger(\boldsymbol{r})] = (h(\boldsymbol{r})-\mu)\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t) + \int \psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1,t)v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\psi(\boldsymbol{r}_1,t)d\boldsymbol{r}_1\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t) \tag{17}$$

が成り立っているので、これを用いると、

$$\left[\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right]F^{\dagger}_{\alpha\beta}(x,x') = -g\langle \mathrm{T}_\tau[\psi^\dagger_\gamma(\boldsymbol{r},\tau)\psi_\gamma(\boldsymbol{r},\tau)\psi^\dagger_\alpha(x)\psi^\dagger_\beta(x')]\rangle \tag{18}$$

となる。2 体の Green 関数の右から三番目の演算子が変更を受けている以外は G に関する運動方程式とほとんどかわらない。Hartree 項と Fock 項の平均場は零であるとすれば、

$$\left[\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right]F^{\dagger}_{\alpha\beta}(x,x') - \Delta^*_{\alpha\gamma}(x)G_{\gamma\beta}(x,x') = 0 \tag{19}$$

という方程式を得ることができる。

これで二つの運動方程式（Gor'kov 方程式）を得ることができた。

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)