空間的に一様な場合の Green 関数と準古典 Green 関数

永井佑紀

平成 17 年 10 月 20 日

磁場がなく空間的に一様な系の Gor'kov 方程式は容易に解ける。その結果を用いて、定義から準古典 Green 関数の表式を求める。Green 関数を用いると、ギャップ方程式が簡単に導かれるのを見る。

1 Green 関数

singlet-pairing で磁場がなく空間的な一様な系での Gor'kov 方程式は、ノート「Gor'kov 方程式の行列表示」ですでに解いている。その結果は、

$$G(\boldsymbol{p}; i\omega_n) = -\frac{i\omega_n + \xi_{\boldsymbol{p}}}{\omega_n^2 + \xi_{\boldsymbol{p}}^2 + |\Delta|^2} \tag{1}$$

$$F^\dagger(\boldsymbol{p}; i\omega_n) = \frac{\Delta^*}{\omega_n^2 + \xi_{\boldsymbol{p}}^2 + |\Delta|^2} \tag{2}$$

である。また、時間反転対称性を持つことから、

$$G(\boldsymbol{p}; i\omega_n) = \bar{G}(-\boldsymbol{p}; -i\omega_n) \tag{3}$$

$$= \bar{G}(\boldsymbol{p}; -i\omega_n) \tag{4}$$

$$F^*(\boldsymbol{p}; i\omega_n) = F^\dagger(-\boldsymbol{p}; -i\omega_n) \tag{5}$$

$$= F^\dagger(\boldsymbol{p}; -i\omega_n) \tag{6}$$

が成り立つので、

$$\bar{G}(\boldsymbol{p}; i\omega_n) = -\frac{-i\omega_n + \xi_{\boldsymbol{p}}}{\omega_n^2 + \xi_{\boldsymbol{p}}^2 + |\Delta|^2} \tag{7}$$

$$F(\boldsymbol{p}; i\omega_n) = \frac{\Delta}{\omega_n^2 + \xi_{\boldsymbol{p}}^2 + |\Delta|^2} \tag{8}$$

となる。

1.1 ギャップ方程式

pair-potential は

$$\Delta = g\langle \psi_\uparrow(\boldsymbol{r})\psi_\downarrow(\boldsymbol{r})\rangle \tag{9}$$

であり、ψ は

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} a_{\boldsymbol{k}} \tag{10}$$

であるから、

$$\Delta = \frac{g}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\boldsymbol{k}} \langle a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle \tag{11}$$

となる。ここで、異常 Green 関数 F の Fourier 変換の用いて上式を表せば

$$\Delta = \frac{g}{\sqrt{\Omega}}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\sum_{\boldsymbol{p}} F(\boldsymbol{p}; i\omega_n)e^{i\omega_n 0+} \tag{12}$$

となる。この式に式 (8) を代入すると、

$$\Delta = \frac{g}{\sqrt{\Omega}}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\sum_{\boldsymbol{p}} \frac{\Delta}{\omega_n^2 + \xi_{\boldsymbol{p}}^2 + |\Delta|^2} \tag{13}$$

となる。これがギャップ方程式である。

2 準古典 Green 関数

準古典 Green 関数の定義は

$$\oint \frac{d\xi_{\boldsymbol{p}}}{\pi i} G(\boldsymbol{p}_+, \boldsymbol{p}_-; i\omega_n) \equiv g(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{k}; i\omega_n) \tag{14}$$

$$\oint \frac{d\xi_{\boldsymbol{p}}}{\pi i} \bar{G}(\boldsymbol{p}_+, \boldsymbol{p}_-; i\omega_n) \equiv \bar{g}(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{k}; i\omega_n) \tag{15}$$

$$\int \frac{d\xi_{\boldsymbol{p}}}{\pi i} F(\boldsymbol{p}_+, \boldsymbol{p}_-; i\omega_n) = \oint \frac{d\xi_{\boldsymbol{p}}}{\pi i} F(\boldsymbol{p}_+, \boldsymbol{p}_-; i\omega_n) \equiv f(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{k}; i\omega_n) \tag{16}$$

$$\int \frac{d\xi_{\boldsymbol{p}}}{\pi i} F^\dagger(\boldsymbol{p}_+, \boldsymbol{p}_-; i\omega_n) = \oint \frac{d\xi_{\boldsymbol{p}}}{\pi i} F^\dagger(\boldsymbol{p}_+, \boldsymbol{p}_-; i\omega_n) \equiv f^\dagger(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{k}; i\omega_n) \tag{17}$$

である。磁場のない空間的に一様な場合の Green 関数を用いれば、

$$g(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{r}; i\omega_n) \equiv -\oint \frac{d\xi_{\boldsymbol{p}}}{\pi i} \frac{i\omega_n + \xi_{\boldsymbol{p}}}{\omega_n^2 + \xi_{\boldsymbol{p}}^2 + |\Delta|^2} \tag{18}$$

$$= -\frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}} \tag{19}$$

$$\bar{g}(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{r}; i\omega_n) \equiv -\oint \frac{d\xi_{\boldsymbol{p}}}{\pi i} \frac{-i\omega_n + \xi_{\boldsymbol{p}}}{\omega_n^2 + \xi_{\boldsymbol{p}}^2 + |\Delta|^2} \tag{20}$$

$$= \frac{\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}} \tag{21}$$

$$f(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{r}; i\omega_n) \equiv \oint \frac{d\xi_{\boldsymbol{p}}}{\pi i} \frac{\Delta}{\omega_n^2 + \xi_{\boldsymbol{p}}^2 + |\Delta|^2} \tag{22}$$

$$= \frac{\Delta}{i\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}} \tag{23}$$

$$f^\dagger(\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{r}; i\omega_n) \equiv \oint \frac{d\xi_{\boldsymbol{p}}}{\pi i} \frac{\Delta^*}{\omega_n^2 + \xi_{\boldsymbol{p}}^2 + |\Delta|^2} \tag{24}$$

$$= \frac{\Delta^*}{i\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta|^2}} \tag{25}$$

となる。

ここで注意しなければならないのは、周回積分の範囲である。この積分は上半分と下半分の積分を足して 2 で割るかたちとなっている。以下に理由を示す。G を $\xi_{\boldsymbol{p}}$ は常伝導で値が零にならず、$\xi_{\boldsymbol{p}}$ で積分すると発散してしまうため、

$$\int_{-\infty}^{\infty} G d\xi_{\boldsymbol{p}} = \int_{-\infty}^{\infty} G^{(n)} d\xi_{\boldsymbol{p}} + \int_{-\infty}^{\infty} (G - G^{(n)}) d\xi_{\boldsymbol{p}} \tag{26}$$

のように、常伝導成分 $G^{(n)}$ と超伝導成分 $(G - G^{(n)})$ に分けていた。超伝導部分は十分遠方で 0 になるので、複素積分として

$$\int_{-\infty}^{\infty} (G - G^{(n)}) d\xi_{\boldsymbol{p}} = \frac{1}{2}\left[2\int_{-\infty}^{\infty} (G - G^{(n)}) d\xi_{\boldsymbol{p}} + \int_{\mathrm{C}_1} (G - G^{(n)}) d\xi_{\boldsymbol{p}} + \int_{\mathrm{C}_2} (G - G^{(n)}) d\xi_{\boldsymbol{p}}\right] \tag{27}$$

としてもよい。ここで、C_1、C_2 は図.1 のように定義されている。さらに、整理すれば

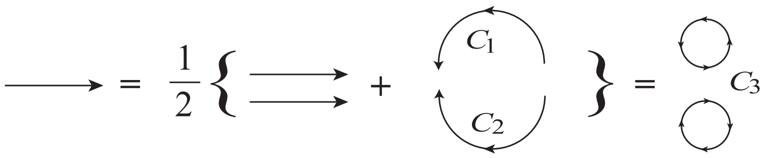

図 1: 複素平面における積分範囲。

$$\int_{-\infty}^{\infty}(G-G^{(n)})d\xi_{\boldsymbol{p}} = \frac{1}{2}\left[\int_{C_3}(G-G^{(n)})d\xi_{\boldsymbol{p}}\right] = \frac{1}{2}\int_{C_3} G\, d\xi_{\boldsymbol{p}} - \frac{1}{2}\int_{C_3} G^{(n)} d\xi_{\boldsymbol{p}} \tag{28}$$

となる。したがって、準古典 Green 関数の積分範囲は C_3 であることがわかる。次の節で述べるように、積分範囲を C_3 のようにとることで、準古典 Green 関数による状態密度が BCS 理論の状態密度が厳密に一致する。

3 状態密度の計算

3.1 Green 関数のスペクトル表示

Green 関数を用いて状態密度を表すために、Green 関数のスペクトル表示を知る必要がある。まず、Green 関数を

$$G(\boldsymbol{r}_1,\tau_1;\boldsymbol{r}_2,\tau_2) = -\langle T_\tau[\psi(\boldsymbol{r}_1,\tau_1)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_2,\tau_2)\rangle \tag{29}$$

と置く。また、$\tau_1-\tau_2<0$ のときの Green 関数 $G(\tau_1-\tau_2<0)$ は

$$G(\tau_1-\tau_2<0) = -G(\tau_1-\tau_2+\beta>0) \tag{30}$$

である。これは以前のノートで導出している。これらを用いれば、Green 関数の Fourier 変換は

$$G(i\omega_n) = \int_0^\beta d(\tau_1-\tau_2)e^{i\omega_n(\tau_1-\tau_2)}G(\tau_1,\tau_2) \tag{31}$$

と書くことができる。

さて、式 (29) の $\langle\rangle$ を具体的に書き下すことにする。$\langle\rangle$ は統計平均であるから、

$$G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n) = -\frac{1}{\Xi}\int_0^\beta d(\tau_1-\tau_2)e^{i\omega_n(\tau_1-\tau_2)}\sum_{n,m}e^{-\beta k_n}\langle n|\psi(\boldsymbol{r}_1,\tau_1)|m\rangle\langle m|\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_2,\tau_2)|n\rangle \tag{32}$$

と書くことができる。ここで K_n は $\hat{K}=\hat{H}-\mu\hat{N}$ の固有値である。また、

$$\psi(\boldsymbol{r},\tau) = e^{\hat{K}\tau}\psi(\boldsymbol{r})e^{-\hat{K}\tau} \tag{33}$$

を用いれば、

$$G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n) = -\frac{1}{\Xi}\int_0^\beta d(\tau_1-\tau_2)e^{i\omega_n(\tau_1-\tau_2)}\sum_{n,m}e^{-\beta k_n}e^{(K_n-K_m)(\tau_1-\tau_2)}\langle n|\psi(\boldsymbol{r}_1)|m\rangle\langle m|\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_2)|n\rangle \tag{34}$$

となる。これは $\tau_1-\tau_2$ で積分できるので、

$$G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;i\omega_n) = -\frac{1}{\Xi}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta k_n}\langle n|\psi(\boldsymbol{r}_1)|m\rangle\langle m|\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_2)|n\rangle}{i\omega_n+(K_n-K_m)}\left[e^{i\omega_n\beta}e^{(K_n-K_m)\beta}-1\right] \tag{35}$$

となり、$\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{r}_2$ として、$\omega_n=2\pi(l+1/2)/\beta$ を用いれば

$$G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1;i\omega_n) = \frac{1}{\Xi}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta k_n}|\langle m|\psi(\boldsymbol{r}_1)^\dagger|n\rangle|^2}{i\omega_n+(K_n-K_m)}\left[e^{(K_n-K_m)\beta}+1\right] \tag{36}$$

となる。これは Green 関数のスペクトル表示のある表現方法のひとつである。

3.2 状態密度

状態密度 $\nu(\epsilon)$ は

$$\nu(\epsilon) = \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k) \tag{37}$$

で定義されている。ϵ_k は一粒子のエネルギー準位であり、$\nu(\epsilon)$ は一粒子状態密度である。状態密度は、相互作用のない粒子系でのみ定義されている。いま、Green 関数を用いて状態密度を表したい。状態密度は $G^R(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon) - G^A(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon)$ で表現される。ここで、$G^{R(A)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon)$ はスペクトル表示の遅延（先進）Green 関数である。この節では確認のため、$G^R(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon) - G^A(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon)$ を計算して上式を導くことを行う。

スペクトル表示の遅延（先進）Green 関数は、

$$\begin{aligned} G^R(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon) &= G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; i\omega_n \to \epsilon + i\delta) && (38) \\ G^A(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon) &= G(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; i\omega_n \to \epsilon - i\delta) && (39) \end{aligned}$$

で表すことができる。では、以下、具体的に計算をしていくことにする。遅延 Green 関数と先進 Green 関数との差は

$$\begin{aligned} G^R(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon) - G^A(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon) &= \frac{1}{\Xi} \sum_{n,m} e^{-\beta k_n} (e^{(K_n - K_m)\beta} + 1) |\langle m|\psi(\boldsymbol{r}_1)^\dagger|n\rangle|^2 && (40) \\ &\times \left[\frac{1}{\epsilon + (K_n - K_m) + i\delta} - \frac{1}{\epsilon + (K_n - K_m) - i\delta} \right] && (41) \end{aligned}$$

となる。また、

$$\frac{1}{x \pm i\eta} = \frac{\mathcal{P}}{x} \mp i\pi\delta(x) \tag{42}$$

を用いると（$\mathcal{P}$ は主値積分)、

$$G^R(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon) - G^A(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon) = \frac{1}{\Xi} \sum_{n,m} e^{-\beta k_n} (e^{(K_n - K_m)\beta} + 1) |\langle m|\psi(\boldsymbol{r}_1)^\dagger|n\rangle|^2 \left[-2\pi i \delta(\epsilon - (K_m - K_n))\right] \tag{43}$$

となる。

さて、絶対零度におけるふるまいを考える。基底状態を g と書く。$T \to 0$ で $\beta \to \infty$ であり、$\Xi \sim e^{-\beta k_g}$ であるから、$e^{-\beta k_n}/\Xi \sim 1$ である。n が基底状態であるときと、m が基底状態であるときの二通りがあるので、

$$\begin{aligned} G^R(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon) - G^A(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1; \epsilon) &= -2\pi i \sum_m |\langle m|\psi(\boldsymbol{r}_1)^\dagger|g\rangle|^2 \delta(\epsilon - (K_m - K_g)) && (44) \\ &- 2\pi i \sum_n |\langle n|\psi(\boldsymbol{r}_1)|g\rangle|^2 \delta(\epsilon - (K_g - K_n)) && (45) \end{aligned}$$

である。第一項と第二項はそれぞれ、N 粒子系にひとつ粒子を加えたとき、取り去ったときの局所状態密度に対応する量である。粒子同士の相互作用がない系であれば、$|\langle m|\psi(\boldsymbol{r}_1)^\dagger|g\rangle|^2$ は全空間で積分すると 1 になる。したがって、

$$\int d\boldsymbol{r} \left[G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}; \epsilon) - G^A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}; \epsilon)\right] = -2\pi i \left\{ \sum_m \delta(\epsilon - (K_m - K_g)) + \sum_n \delta(\epsilon - (K_g - K_n)) \right\} \tag{46}$$

は状態密度に対応している。結局、N が大きい巨視的な系において $N+1$ 粒子系も $N-1$ 粒子系も同じ状態密度の値を示すとすれば、

$$\nu(\epsilon) = -\frac{1}{4\pi i} \int d\boldsymbol{r} \left[G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}; \epsilon) - G^A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}; \epsilon)\right] \tag{47}$$

となる。

3.3　具体的な計算

まだ工事中。上の状態密度の数ファクターが違う気がする。

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)

植野洋介、東京大学修士論文 (2002)