

## 相関の強い電子系の超伝導

講師 京都大学大学院理学研究科 山田耕作

### はじめに

本講義では 1986 年に発見された高温超伝導の理論について主に説明する。

この講義の構成は次の通りである。

第 1 章でフェルミ液体が説明される。このフェルミ液体を理解することが必ずしも容易でないことが説明される。なぜなら、高温超伝導は超伝導状態の理解以前にフェルミ液体か否かが世界の理論家を 2 分して問われてきたからである。この時、ランダウのフェルミ液体論の基礎である「連続性の原理」が重要である。1984 年にそれを有名な著書で強調した Anderson 自身が、1987 年には適用を誤っていると思われるのは理論と実践の統一の難しさを示すものとして教訓的である。あるいは、それほど、高温超伝導が衝撃的で、画期的であったといえよう。

第 2 章で線形応答理論が説明された後、伝導率を例にとって相関関数の表現式が導かれる。場の理論によって物理量の微細な応答が巧みに計算されることがわかるであろう。高温超伝導体のホール係数などボルツマン方程式では説明が困難な現象を巧みに説明できる有力な方法であることが説明される。特に、準粒子間の相互作用による補正項の重要性が強調される。これまでランダウのフェルミ液体論はヘリウムと言う等方的な液体を取り扱ってきた。現実の強相関電子系では格子の存在のために、運動量を保存しないウムクラップ散乱が起こることが運動量の保存を破る。このことが強相関電子系の輸送現象では本質的に重要である。例えば、反強磁性揺らぎが大きいとホール係数は増大する。これをキャリア数が減少したと解釈してはならない。擬ギャップができると反強磁性揺らぎが抑えられ、ホール係数は減少する。

第 3 章で超伝導の BCS 理論が紹介される。ただし、このテキストでは省略する。最後の第 4 章で相関の強い電子系の超伝導理論を紹介する。通常、私たちが電子系を取り扱う時、系のハミルトニアンは 1 eV のオーダーのエネルギーを持つ。このハミルトニアンから、1 万分の 1 のエネルギーに対応する 1 K の超伝導転移温度を導出できることは驚くべきことである。

この講義は相関の強い電子系の超伝導の解説を目的としているが、主題としてはフェルミ液体から、如何にして電子相関という斥力を起源とする超伝導が導出されるかを示すことにある。

### 第 1 章 フェルミ液体論

物性物理学においては、アンダーソン (P.W.Anderson) によって強調されている 2 つの基本原理が重要である [1]. その 2 つの原理とは (1) 不連続性の原理と (2) 連続性の原理である。(1) 「不連続性の原理」とは相転移であり、「対称性の破れ」とも呼ばれ、系が低温でハミルトニアンの持つ対称性より低い対称性の状態に自発的

に転移することを表わしている。このような相転移は巨視的（マクロ）な系を対象とする物性物理学の重要な側面である。もう1つの「連続性の原理」は相転移のない連続的な変化を表している。その代表例がフェルミ液体論である。一般に粒子間に相互作用が必ず存在するので、理解し易い相互作用のない一体的な系に対応させて、多体系を理解しようとするものである。一般的には相互作用の強さと共に系が連続的に変化するとは限らない。フェルミ液体はその「連続性」が保証された系の代表であり、物性物理学にとって大変重要な系である。ランダウ (L.D.Landau) によって導出されたので、ランダウのフェルミ液体論と呼ばれる [2]。

### 1.1. 自由フェルミ気体

一辺  $L$ 、体積  $V = L^3$  の立方体に  $N$  個の自由粒子（電子、ヘリウム原子など）があるとす。自由粒子の波動関数  $\varphi_k(r)$  は波数  $k$  をもつ平面波で与えられる。

$$\varphi_k = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} \quad (1)$$

さらに、次ぎのような周期的境界条件をとろう。

$$\varphi_k(x+L, y, z) = \varphi_k(x, y+L, z) = \varphi_k(x, y, z+L) = \varphi_k(x, y, z) \quad (2)$$

(1) 式を上式に代入して

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1 \quad (3)$$

を  $k$  は満たさなければならない。したがって、 $k$  の値は  $n_1, n_2, n_3$  を整数として、

$$k_x = \frac{2\pi n_1}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_2}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_3}{L} \quad (4)$$

と定められる。こうして、 $k$  は  $2\pi/L$  を単位とする格子点上の値のみが許される。波数  $k$  をもつ自由粒子のエネルギー  $\varepsilon_k$  は

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (5)$$

で与えられる。

箱の中に  $N$  個のフェルミ粒子を詰める時、パウリ原理によって、量子数  $k$  とスピン  $\sigma$  を指定した状態は1つのフェルミ粒子しか詰められない。多数のフェルミ粒子系の基底状態は、エネルギー  $\varepsilon_k$  の低い状態  $k$  に下から順に2個ずつフェルミ粒子を詰めていった状態である。その時の最大の  $\varepsilon_k$  の値  $\varepsilon_F$  をフェルミエネルギーという。それに対応する波数をフェルミ波数  $k_F$  という。

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \quad (6)$$

の関係にある。 $k$  は微小な  $2\pi/L$  の格子点上にあるから、 $(L/2\pi)^3 = V/(2\pi)^3$  の等密度で波数空間に分布している。したがって、粒子数  $N$  と  $k_F$  は次ぎの関係を満たす。

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \quad (7)$$

ここで因子2はフェルミ粒子のスピンの自由度を表わしている。(7)式から、 $k_F$ は粒子密度  $n = N/V$  を用いて

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (8)$$

と表わされる。フェルミ球を図1に示す。

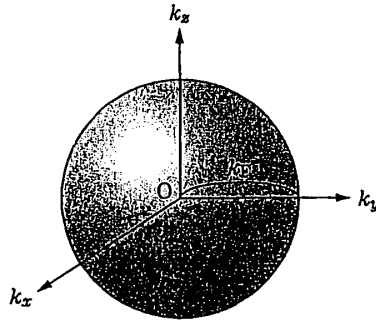


図1: フェルミ球. 半径  $k_F$  の球内の  $k$  に上, 下向きスピンのフェルミ粒子が1個ずつ詰まる.

$\Delta E$  を微小量として, エネルギー  $E$  と  $E + \Delta E$  の間にある1粒子状態の数を求めよう. エネルギー  $E$  以下の全状態数を  $N(E)$  とすると

$$N(E + \Delta E) - N(E) = \frac{dN(E)}{dE} \Delta E \quad (9)$$

である. ここで,

$$\frac{dN(E)}{dE} = \rho(E) \quad (10)$$

はフェルミ粒子のエネルギー状態密度である. それは

$$\rho(E) = \frac{dN(k)}{dk} \frac{dk}{dE} = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 \frac{m}{\hbar^2 k} = \frac{Vkm}{\pi^2 \hbar^2} = \frac{Vm}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2mE} \quad (11)$$

となる. 自由フェルミ粒子のエネルギー状態密度は  $\sqrt{E}$  に比例する.

現実の金属を例として考えると,  $n = 10^{22}/\text{cm}^3$  とし, (8)式から  $k_F$  を求めると  $k_F = 10^8 \text{cm}^{-1}$  となる.  $1/k_F$  は  $10^{-8} \text{cm}$  ほどの値で, 原子間距離程度の大きさである. この値から, フェルミエネルギー  $\varepsilon_F$  を求めると  $4\text{eV}$  位である.  $1\text{eV}$  はほぼ  $10^4 \text{K}$  の温度であるから, 室温の  $300\text{K}$  は  $\varepsilon_F$  に対応するフェルミ縮退温度  $T_F$  に比べて十分低温であることが分かる.

## 1.2. 連続の原理

相互作用するフェルミ粒子系の正常状態 (長距離秩序状態がない状態) はフェルミ液体と呼ばれ自由フェルミ気体から, 相互作用の強さと共に連続的に接続できる. その基本的な考え方を紹介しよう. フェルミ球の外に  $k_B T$  程度のエネルギー

をもつフェルミ粒子が励起されているとする。この粒子は準粒子と呼ばれる。この状態にゆっくりフェルミ粒子間に相互作用を導入することを考える。この導入の速度を分解能と考え  $R = \hbar/\tau_a$  としよう。  $\tau_a$  は相互作用を導入するのに要する時間である。導入する時間変化によるエネルギーの分解能  $R$  は準粒子の励起エネルギーより小さくないとエネルギーが決定できないから、

$$R < k_B T \quad (12)$$

一方、準粒子の相互作用による寿命を  $\tau$  として  $\tau$  より速く相互作用を導入しないと準粒子が消滅してしまうから、

$$R > \hbar/\tau \quad (13)$$

式 (12) と (13) が両立することがフェルミ液体の成立条件である。つまり、

$$k_B T > R > \hbar/\tau \quad (14)$$

となる  $R$  が存在することがフェルミ液体論の成立条件である。上式が成立するためには  $k_B T$  に比べ、  $\hbar/\tau$  が小さければ良い。これから示すように  $\hbar/\tau$  が  $(k_B T)^2/\epsilon_F$  なので温度  $T$  がフェルミ縮退温度より、十分低ければ良い。

このことは次ぎのようにして示すことができる。

今、粒子間の相互作用をフーリエ変換して、

$$U(q) = \int dr e^{iqr} U(r) \quad (15)$$

で相互作用するとする。

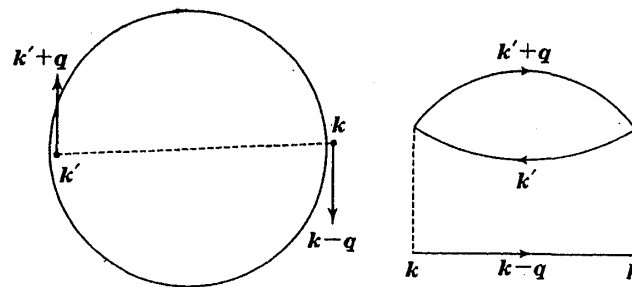


図 2: 2 次の自己エネルギー。破線は相互作用  $U(q)$  を表わし、実線は粒子と正孔を表わす。

減衰率  $1/\tau$  は黄金則より (図 2 参照)

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\pi}{\hbar} \int dq \int dk' \delta(\epsilon_k + \epsilon_{k'} - \epsilon_{k-q} - \epsilon_{k'+q}) |U(q)|^2 \quad (16)$$

ここでフェルミ粒子  $k$  がフェルミ球内の  $k'$  と  $U(q)$  で相互作用し、フェルミ球の外に粒子  $k-q$  と  $k'+q$  を、フェルミ球内に正孔  $k'$  を残す過程によって準粒子  $k$  が減衰する確率を計算している。それぞれの粒子のエネルギーをフェルミエネルギーを基準にして測ると次ぎの不等式が成り立つ。

$$\varepsilon_k > \varepsilon_{k-q} > 0, \quad (17)$$

$$\varepsilon_k > \varepsilon_{k'+q} > 0, \quad (18)$$

$$\varepsilon_k > -\varepsilon_{k'} > 0 \quad (19)$$

以上の不等式は散乱前の励起エネルギー  $\varepsilon_k$  を用いて相互作用するため、散乱後の個々の励起はエネルギーの保存のため、元の  $\varepsilon_k$  を超えられないことによる。これらの不等式のため、(16) 式の 2 変数  $q$  と  $k'$  による積分が、エネルギーとして積分した時、 $\varepsilon_k^2$  のオーダーになる。その結果、準粒子の減衰率は

$$\frac{\hbar}{\tau} = \pi U^2 \varepsilon_k^2 \rho^3 = \pi \rho U^2 \left( \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \quad (20)$$

となる。ただし、上式では状態密度  $\rho = 1/\varepsilon_F$  とし、フェルミ粒子の励起エネルギー  $\varepsilon_k = k_B T$  とした。このように減衰率が小さくなるのは衝突過程がエネルギー保存則とパウリ原理のために強い制限を受けるためである。低温ではこの減衰率 (20) は  $k_B T$  に比べて

$$\frac{\hbar}{\tau} / k_B T = \pi \left( \frac{U}{\varepsilon_F} \right)^2 \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \quad (21)$$

となる。  $k_B T \ll \varepsilon_F$  である限り (14) が成立する。この条件の下では準粒子の寿命の間に系を乱すことなくゆっくり相互作用を導入できる。こうして連続的に相互作用系に移行できる。系が相転移を起こさずフェルミ液体に留まる限りは相互作用の強さによらず連続性が成立する。このことは準粒子の連続性を通じて物理量の  $U$  に関する解析性を保証するものであり、大変重要である。

自由なフェルミ気体の 1 粒子状態  $(k, \sigma)$  と相互作用の入ったフェルミ液体の準粒子  $(k, \sigma)$  は 1 対 1 に対応し、相互作用によって連続的に移行する。今、簡単のためスピンを無視して、 $k$  という波数ベクトルをもつ準粒子をフェルミ球  $|0\rangle$  につけた状態を  $Q_k^\dagger |0\rangle$  と表わそう。この状態を元の自由粒子で表わすと、多数の粒子・正孔対を伴った状態の線形結合になる。その係数を簡単に  $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots$  と表わして、

$$\begin{aligned} Q_k^\dagger |0\rangle &= \sqrt{z_k} [C_k^\dagger + \sum_{k_1, k_2, k_3} \Gamma_1 C_{k_1}^\dagger C_{k_2}^\dagger C_{k_3} \\ &+ \sum_{k_1, k_2, \dots, k_5} \Gamma_2 C_{k_1}^\dagger C_{k_2}^\dagger C_{k_3}^\dagger C_{k_4}^\dagger C_{k_5} + \dots] |0\rangle \end{aligned} \quad (22)$$

このように裸の  $C_k^\dagger$  と  $Q_k^\dagger$  が対応する。準粒子の状態  $Q_k^\dagger |0\rangle$  は  $C_k^\dagger |0\rangle$  以外に相互作用によって生じた粒子・正孔対励起を伴った状態を含んでいる。個々の相互作用は運動量、電荷、粒子数、スピンを保存する。したがって、(22) 式の右辺の各項は全

粒子と正孔の和として1つの粒子と電荷を持ち、運動量としては $k$ をもつ。例えば、右辺の第2項、第3項ではそれぞれ、 $k_1 + k_2 - k_3 = k, k_1 + k_2 + k_3 - k_4 - k_5 = k$ が成立する。こうして、(22)式の右辺を規格化して1つの準粒子 $Q_k^\dagger$ に対応させることができる。 $z_k$ を波動関数の繰り込み因子 (wave-function renormalization factor) と呼んでいる。相互作用する前の裸の状態に占める相互作用後の準粒子の割合が $z_k$ である。これはまた、準粒子 $Q_k^\dagger$ の状態に占める裸の粒子 $C_k^\dagger$ の割合と考えることもできる。相互作用をゆっくり強めていって、自由粒子からそれに対応する準粒子に連続的に移行できる。この移行が連続的であることは、理論的にはフェルミ液体における物理量が相互作用に関して解析的であり、展開可能なことを保証しているのである。この解析性は、不純物アンダーソン (Anderson) 模型では厳密解を用いて証明されている [3]。

さらに $Q_k^\dagger$ と $C_k^\dagger$ の対応が1対1であるということは結果として占有される状態数は変わらないから、相互作用導入前後の Fermi 面の囲む体積が不変であることがわかる。球ではなく一般的な形のフェルミ面は相互作用によって変形しうるが、その囲む体積は不変である。これがラッティンジャー (Luttinger) の定理である [4]。

## 第2章 線形応答理論とその応用 [5]

電場をかければ電流が流れる。磁場をかければ磁化が生じる。このような外場に対する応答を外場に比例する範囲 (線形) で考えよう。この時、応答は相関関数で表わされ、多粒子グリーン関数が重要な働きをする。

### 2.1 線形応答理論

時刻 $t = -\infty$ で系が熱平衡にあったとする。その時、密度行列は

$$\rho_0 = e^{-\beta H_0} / \text{Tr} e^{-\beta H_0} = e^{\beta(\Omega - H_0)} \quad (23)$$

この系に外場による摂動 $H'(t)$ が働いたとする。

$$H = H_0 + H'(t), \quad (24)$$

$$\rho = \rho_0 + \rho'(t) \quad (25)$$

とにおいて、外場 $H'(t)$ に対する1次の変化を考える。運動方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \rho'}{\partial t} = [H_0, \rho'] + [H', \rho_0] \quad (26)$$

となる。この解は

$$\rho' = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-iH_0(t-t')/\hbar} [H'(t'), \rho_0] e^{iH_0(t-t')/\hbar} \quad (27)$$

となる。初期条件 $\rho'(-\infty) = 0$ を用い、(27)を(26)に代入して確かめられる。

$A$ を時間によらない演算子として、

$$H'(t) = -AF(t) \quad (28)$$

とおく.  $F(t)$  は外力の時間依存性を表わす. 後に  $F(t) = e^{(-i\omega+\delta)t}$  とする. 今, ある物理量  $B$  が  $B_0 = \text{Tr}\rho_0 B = 0$  から変化して (もし,  $B_0 \neq 0$  ならそれを引いて  $B$  を定義する事にする),

$$\langle B \rangle = \text{Tr}\rho' B \quad (29)$$

となったとしよう. (29) 式に (27) 式を代入して

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t F(t') \text{Tr}[e^{-iH_0(t-t')} [A, \rho_0] e^{iH_0(t-t')/\hbar} B] dt' \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t e^{(-i\omega+\delta)t'} \text{Tr}[A, \rho_0] B(t-t') dt', \end{aligned} \quad (30)$$

$$B(t) = e^{iH_0 t/\hbar} B e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (31)$$

線形の応答  $B(t)$  も外場  $F(t)$  の時間依存性を持つので,  $t-t' = \tau$  とおくと,

$$\langle B \rangle = e^{-i\omega t + \delta t} \chi_{BA}(\omega), \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \chi_{BA}(\omega) &= \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} e^{i\omega\tau - \delta\tau} \text{Tr}[e^{-iH_0\tau/\hbar} [A, \rho_0] e^{iH_0\tau/\hbar} B] d\tau \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} \langle [B(\tau), A] \rangle d\tau. \end{aligned} \quad (33)$$

上の式 (33) を変形しよう.

$$X(t) = \text{Tr}[e^{-iH_0 t/\hbar} [A, \rho_0] e^{iH_0 t/\hbar} B]. \quad (34)$$

とおくと (33) 式は,

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} e^{i\omega t - \delta t} X(t) dt \quad (35)$$

となる. これを部分積分して

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{X(0)}{i\omega} - \int_0^{\infty} \frac{e^{i\omega t - \delta t}}{i\omega} \frac{dX(t)}{dt} dt \right] \quad (36)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} \frac{e^{i\omega t} - 1}{i\omega} e^{-\delta t} \frac{dX(t)}{dt} dt \quad (37)$$

上で

$$X(0) = - \int_0^{\infty} e^{-\delta t} \frac{dX(t)}{dt} dt \quad (38)$$

を用いた.  $dX(t)/dt$  を求めると,

$$\frac{dX(t)}{dt} = - \langle B(t)\dot{A} - \dot{A}B(t) \rangle, \quad (39)$$

$$\dot{A} = \frac{i}{\hbar} (H_0 A - A H_0). \quad (40)$$

ここで、次ぎの遅延2粒子グリーン関数を導入すると便利である。

$$K^R(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t) \langle B(t)\dot{A} - \dot{A}B(t) \rangle \quad (41)$$

これを用いて

$$\chi_{AB}(\omega) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t} - 1}{i\omega} K^R(t) dt \quad (42)$$

となる。ここで  $K^R(t)$  のフーリエ変換  $K^R(\omega)$  を用いて

$$\chi_{BA}(\omega) = -\frac{K^R(\omega) - K^R(0)}{i\omega} \quad (43)$$

となる。この式より、 $\chi_{BA}(\omega)$  が求められる。

## 2.2. 輸送係数の導出

### 2.2.1. 電気抵抗

前節の結果によれば、2粒子グリーン関数を計算すると2体の相関関数が求まり、応答関数が得られる。この計算において場の理論が非常に有効である。ここでは最近、相関の強い電子系で重要になった輸送係数について説明する。いわゆる久保公式(43)に依れば電気伝導率  $\sigma_{\mu,\nu}(\omega)$  は電流の揺らぎの相関関数で与えられる。この時(43, 41)式において、外部電場  $E$  の応答が電流密度  $j = ev$  であり、 $\dot{A}$  にあたるのが  $A = er$  から、やはり電流密度  $j$  である [6],[7].

$$\sigma_{\mu,\nu}(\omega) = e^2 \sum_{kk',\sigma\sigma'} v_{k\mu} v_{k'\nu} \frac{1}{\omega} \text{Im} K_{k\sigma,k'\sigma'}(\omega + i\delta). \quad (44)$$

ここで  $K_{k\sigma,k'\sigma'}(\omega + i\delta)$  は次ぎの2体の温度グリーン関数  $K_{k\sigma,k'\sigma'}(i\omega_m)$  を上半面から解析接続、 $i\omega_m (\omega_m > 0) \rightarrow \omega + i\delta$  とする事によって得られる。

$$K_{k\sigma,k'\sigma'}(i\omega_m) = \int_0^{1/T} d\tau e^{i\omega_m \tau} \langle T\tau a_{k\sigma}^\dagger(\tau) a_{k\sigma}(\tau) a_{k'\sigma'}^\dagger a_{k'\sigma'} \rangle, \quad (45)$$

$$a_{k\sigma}(\tau) = e^{(H-\mu N)\tau} a_{k\sigma} e^{-(H-\mu N)\tau} \quad (46)$$

エリアシュバーク (Eliashberg) にしたがって、解析接続を行なうと次ぎの結果が得られる。

$$K_{k\sigma,k'\sigma'}(\omega + i\delta) = -\frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[ \text{th} \frac{\varepsilon}{2T} K_1(\varepsilon, \omega) + \left( \text{th} \frac{\varepsilon + \omega}{2T} - \text{th} \frac{\varepsilon}{2T} \right) K_2(\varepsilon, \omega) - \text{th} \frac{\varepsilon + \omega}{2T} K_3(\varepsilon, \omega) \right] \quad (47)$$

$$K_l(\varepsilon, \omega) = g_l(\varepsilon, \omega) + g_l(\varepsilon, \omega) \sum_{m=1}^3 \frac{1}{4\pi i} \int d\varepsilon' T_{lm}(\varepsilon, \varepsilon' : \omega) \times g_m(\varepsilon', \omega) \quad (48)$$



となる. ただし,  $g_l$  は  $\omega > 0$  として

$$g_1(\varepsilon, \omega) = G^R(\varepsilon)G^R(\varepsilon + \omega) \quad (49)$$

$$g_2(\varepsilon, \omega) = G^A(\varepsilon)G^R(\varepsilon + \omega) \quad (50)$$

$$g_3(\varepsilon, \omega) = G^A(\varepsilon)G^A(\varepsilon + \omega) \quad (51)$$

ここで R と A は遅延と先進のグリーン関数を表わす. フェルミ面近くの極でグリーン関数を近似すると

$$g_1(\varepsilon, \omega) \simeq [G^R(\varepsilon)]^2 = z_k z_k (\varepsilon - E_k^* + i\delta)^{-2} \quad (52)$$

$$g_2(\varepsilon, \omega) = G^A(\varepsilon)G^R(\varepsilon + \omega) \simeq 2\pi i z_k z_k \delta(\varepsilon - E_k^*) / (\omega + 2i\Gamma_k^*) \quad (53)$$

$$g_3(\varepsilon, \omega) = g_1(\varepsilon, \omega)^* \quad (54)$$

(48) 式の  $T_{lm}$  は  $g_2$  を前後にもつ  $T_{22}$  を除いて, 速度の繰り込みに寄与する.

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu}(\omega) = & \frac{ie^2}{2V} \left[ \sum_k v_{k\mu}^* \frac{1}{2T} \frac{\cosh^{-2}[(\varepsilon_k^* - \mu)/2T]}{\omega + 2i\gamma_k^*} v_{k\nu}^* \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \sum_{k,k'} z_k v_{k\mu}^* \frac{1}{2T} \frac{\cosh^{-2}[(\varepsilon_k^* - \mu)/2T] T_{22}(k, k'; \omega)}{(\omega + 2i\gamma_k^*)(\omega + 2i\gamma_{k'}^*)} z_{k'} v_{k'\nu}^* \right]. \end{aligned} \quad (55)$$

ここで  $\varepsilon_k^*$ ,  $v_{k\mu}^*$ ,  $z_k$  はそれぞれ準粒子のエネルギー, 速度, 繰り込み因子である.  $T_{22}$  は後に説明する電子間相互作用  $U$  によるバーテックス補正である. 準粒子の減衰率  $\gamma_k^*$  は自己エネルギーの虚数部分を用いて次ぎのように与えられる.

$$\gamma_k^* = -z_k \text{Im} \Sigma_k(0). \quad (56)$$

静的な領域 ( $\omega\tau = \omega/\gamma_k^* \ll 1$ ) の時, 電気伝導率  $\sigma(0)$  は (55) から, 次ぎのように得られる.

$$\sigma_{\mu\nu}(0) = \sigma_{\mu\nu} = \frac{e^2}{V} \sum_k \frac{1}{2i\gamma_k^*} \left( -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_k^*} v_{k\mu}^* \Lambda_{k\nu} \quad (57)$$

$$\Lambda_{k\nu} = v_{k\nu}^* + \sum_{k'} \frac{z_k T_{22}(k, k'; 0)}{2i\gamma_{k'}^*} z_{k'} v_{k'\nu}^*. \quad (58)$$

ここで次ぎの関係式を用いた.

$$\frac{1}{4T} \cosh^{-2} \left( \frac{\varepsilon_k^* - \mu}{2T} \right) = \left( -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_k^*} \quad (59)$$

バーテックス補正は  $T_{22}$  の項から来るのであるが, 静的な伝導率には虚数部分が, 動的な光学伝導度には実数部分が効く.  $T_{22}$  の虚数部は次のように計算される. 図 3 の自己エネルギーに対応するバーテックス補正 (図 4) は自己エネルギーと同様に

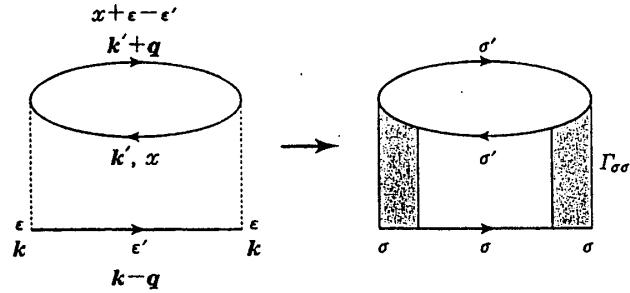


図 3:  $T^2$  項を与える自己エネルギー左が  $U$  の 2 次のグラフ, 右が一般のダイアグラム.

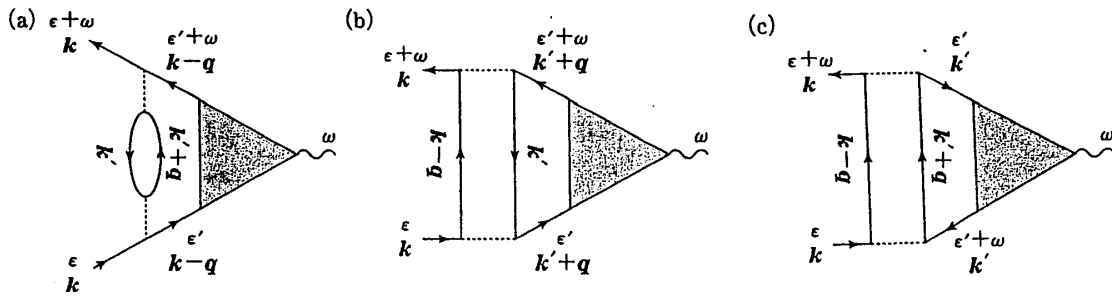


図 4: 運動量を保存するために必要な 2 次のバーテックス補正. 実線と破線は夫々粒子線と相互作用を表わす. 図 3 の自己エネルギーのグラフの粒子線 3 本に夫々バーテックス補正をして得られる.

して  $T^2$  項を生じる. この  $T^2$  をダイアグラム中の異常項  $G^A G^R$  から生じる  $1/2\gamma^*$  の  $T^2$  が打ち消し, 結果として, 1 のオーダーの補正を与えるので無視できない. 伝導率に対するバーテックス  $\Lambda$  に対する方程式は図 5 を用いて次ぎのように表わされる.

$$\begin{aligned} \Lambda_k(\epsilon) &= v_k^* + \Lambda_k^{(a)}(\epsilon) + \Lambda_k^{(b)} + \Lambda_k^{(c)} \\ &= v_k^* + \sum_{k'q} \Delta_0(k, k'; k' + q, k - q) \left( \frac{\Lambda_{k-q}(\epsilon)}{2\Delta_{k-q}(\epsilon)} + \frac{\Lambda_{k'+q}(\epsilon)}{2\Delta_{k'+q}(\epsilon)} - \frac{\Lambda_{k'}(-\epsilon)}{2\Delta_{k'}(-\epsilon)} \right) \end{aligned} \quad (60)$$

ただし,

$$\begin{aligned} \Delta_0(k, k'; k' + q, k - q) &= \pi \rho_{k-q}(0) \rho_{k'+q}(0) \rho_{k'}(0) [(\pi T)^2 + \epsilon^2] \\ &\quad \times [\Gamma_{\uparrow\uparrow}^2(k, k'; k' + q, k - q) + \frac{1}{2} \Gamma_{\uparrow\uparrow}^A(k, k'; k' + q, k - q)], \end{aligned} \quad (61)$$

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'q} \Delta_0(k, k'; k' + q, k - q) \quad (62)$$

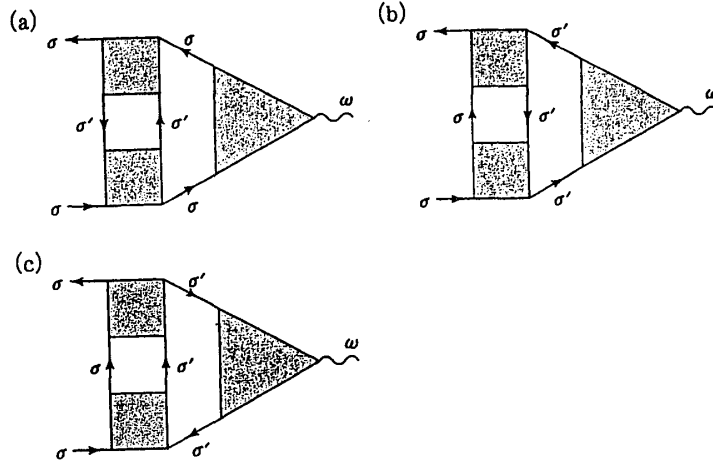


図 5: 運動量を保存するために必要なバーテックス補正の一般項

ここで,  $\Gamma_{\uparrow\downarrow}, \Gamma_{\uparrow\uparrow}^A$  はそれぞれ反平行及び平行スピンの電子間の 4 点バーテックスである.

$$\Phi_k(\varepsilon) = \frac{\Lambda_k(\varepsilon)}{2\Delta_k(\varepsilon)} = \Phi(-\varepsilon) \quad (63)$$

とおくと, 式 (60) は

$$v^*_k + \sum_{k',q} \Delta_0(k, k'; k' + q, k - q) [\Phi_{k-q} + \Phi_{k'+q} - \Phi_{k'} - \Phi_k] = 0 \quad (64)$$

となる. 伝導率 (57) は次ぎのように変形される.

$$\sigma_{\mu\nu}(0) = e^2 \sum_k v^*_{k\mu} \left( -\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right)_{x=\varepsilon_k^*} \frac{\Lambda_{k\nu}}{2\gamma^*}. \quad (65)$$

ここで自由電子を仮定して,

$$\Phi_k = kF \quad (66)$$

とおく. 運動量が保存するから,

$$\Phi_{k-q} + \Phi_{k'+q} - \Phi_{k'} - \Phi_k = 0 \quad (67)$$

となる. これを式 (64) に代入して, それが成立するためには  $F = \infty$  となり, (65) 式より, 伝導率が無限大になる. こうして, 反転 (Umklapp) 散乱を考えないと運動量が保存し, 電気抵抗がゼロになることが示された. 電子同士の散乱が運動量を保存している限り, 電流は減衰しないわけである. 減衰するためには反転散乱等の過程で電子系以外の系に運動量を移動させる過程が必要である. 一般に電子系では格子があり, 反転過程が存在する. その時は (60) を反転過程を入れて解くことになる. 簡単な例を示そう.  $K_i$  を逆格子ベクトルとして,

$$\Phi_{k-q} + \Phi_{k'+q} - \Phi_{k'} - \Phi_k = - \sum_i K_i F \quad (68)$$

と仮定すると (64) から,

$$\Phi_k = \frac{k}{2\Delta_k} \frac{v_k^* k}{\sum_i K_i k}, \quad v_k^* \propto k. \quad (69)$$

となる. この結果を用いて伝導率は

$$\sigma_{\mu\nu}(0) = e^2 \sum_k \delta(\mu - \varepsilon_k^*) v_{k\mu}^* \frac{1}{\gamma_k^*} \frac{k^2}{\sum_i K_i k} v_{k\mu}^*. \quad (70)$$

となる. こうして  $\gamma_k^*$  が  $T^2$  に比例するから,  $T^2$  に比例する電気抵抗が得られた.

### 2.2.2. 光学伝導度

電子間の散乱が無視できる領域,  $\gamma_k^*/\omega \ll 1$  において, 光学伝導度は (55) から次ぎのように求められる. この際, バーテックス補正の実数部分が効く.

$$\text{Re}T_{22}(k, k'; \omega) = \left[ \tanh\left(\frac{\varepsilon_{k'}^* - \mu - \omega}{2T}\right) - \tanh\left(\frac{\varepsilon_{k'}^* - \mu}{2T}\right) \right] \times \text{Re}\Gamma(k, k'; \omega) \quad (71)$$

この式を (55) に代入して次ぎの式が得られる.

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu}(\omega) &= \frac{ie^2}{\omega + i\delta} \frac{1}{V} \sum_k [v_{k\mu}^* v_{k\nu}^* \delta(\mu - \varepsilon_k^*) \\ &+ \sum_{k'} f(k, k') v_{k\mu}^* v_{k'\nu}^* \delta(\mu - \varepsilon_k^*) \delta(\mu - \varepsilon_{k'}^*)] \\ &= \frac{ie^2}{\omega + i\delta} \frac{1}{V} \sum_k v_{k\mu}^* j_{k\nu}^* \delta(\mu - \varepsilon_k^*) \end{aligned} \quad (72)$$

ここで

$$f(k, k') = z_k z_{k'} \text{Re}\Gamma^\omega(k, k'; \omega)|_{\omega \rightarrow 0} \quad (73)$$

$$\Gamma_{\sigma, \sigma'}(k, k'; k', k) = \Gamma_{\sigma, \sigma'}(k, k'; 0) \quad (74)$$

$$j_{k\nu}^* = v_{k\nu}^* + \sum_{k'} f(k, k') v_{k'\nu}^* \delta(\mu - \varepsilon_{k'}^*) \quad (75)$$

上の (75) の第2項が準粒子の相互作用  $f(k, k')$  によって生じるバック フロー (back flow) の項である. この項が光学伝導度を小さくする. この補正を忘れた議論でドルーデ重み (Drude Weight)  $D$  が  $D = n/m^*$  であると説明されることがあるが一般に正しくない. 特に、電子間相互作用が強い系では誤った記述が多い. 正しい導出は岡部によってなされた [8].

### 2.2.3 ホール係数

バーテックス補正を持つホール伝導率の式は次ぎのようになる [9].

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{e^3}{c} H \sum_k \left[ \Lambda_{k\mu} \frac{\partial \Lambda_{k\mu}}{\partial k_\nu} - \frac{\partial \Lambda_{k\mu}}{\partial k_\nu} \Lambda_{k\nu} \right] v_{k\mu}^* \frac{1}{(2\gamma_k^*)^2} \left( -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_k^*} \quad (76)$$

ここでバーテックス補正を含むカレント  $\Lambda$  は (58) で与えられたものである。一般にフェルミ液体ではホール係数  $R$

$$R = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy}} \quad (77)$$

は温度に依らず、一定である。しかし、反強磁性揺らぎが強い時は (58) 式のバーテックス補正が温度に依存し、低温で増大する。抵抗ではバーテックス補正は単に反転散乱で決定される定数を定めるが、ホール係数では (76) 式に見るように波数で微分するため温度依存性を変えることもあるのである。紺谷達は反強磁性スピン揺らぎの強い時にはホール係数が低温で増大することを示した [10]。この結果はフェルミ液体論の豊かな内容を示すと共にその有効性、バーテックス補正の重要性を示すものである。アンダーソン達は2種類の緩和時間を導入し、異常金属説を展開したがそのような仮定の必要性を否定し、フェルミ液体が成立していることを示した点で重要な理論である。

### 第3章 超伝導のBCS理論(紙数の関係で省略)

#### 第4章 相関の強い電子系の超伝導

1986年に銅酸化物で高温超伝導が発見され、それらの超伝導が電子間のクーロン斥力を起源として起こることが明らかになった。この銅酸化物高温超伝導体で超伝導に対して本質的な役割を果たすのは銅と酸素からなる  $\text{CuO}_2$  面である。その構造を図6に示す。正孔や電子をドーピングしない時は反強磁性体であり、その相図は図7に示すようにドーピング量  $x$  の関数である。

さて、本題の斥力からどのようにして超伝導が実現するかを考えよう。

有名な超伝導理論であるBCS理論によるとギャップ ( $\Delta$ ) 方程式は一般に次の形をしている。

$$\Delta_k = - \sum_{k'} V_{k'k} \tanh \left[ \frac{E_{k'}}{2k_B T} \right] \frac{\Delta_{k'}}{2E_{k'}} \quad (78)$$

$$E_k = \sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta_k^2} \quad (79)$$

従来のs-波の解を考えた時、ギャップ  $\Delta_k$  が正の一定符号を持つには常に  $V_{k'k} < 0$  でなければならない。一方、 $V_{k'k}$  が常に正でも強い運動量依存性があれば、 $\Delta_k$  が符号を変えることによって解が得られることが分かる。これが斥力  $U$  が超伝導を導く基本的な原理である。反強磁性揺らぎ  $Q = (\pi, \pi)$  が強いとフェルミ面上の  $(\pm\pi, 0)$  と  $(0, \pm\pi)$  付近を強く結びつける。

この時、 $\Delta_{\pi,0}$  と  $\Delta_{0,\pi}$  が符号が逆であれば斥力  $V(k-k') = V(Q)$  によって強く結び付けられ、安定した超伝導の解が生じる。こうしてd-波の超伝導が生じる。このように相互作用が運動量依存性をもち、ギャップ関数  $\Delta_k$  がフェルミ面上で符号を変えるときは  $V(k',k)$  が斥力で正符号であっても超伝導が存在し得る事がわかる。 $\Delta_k$  が

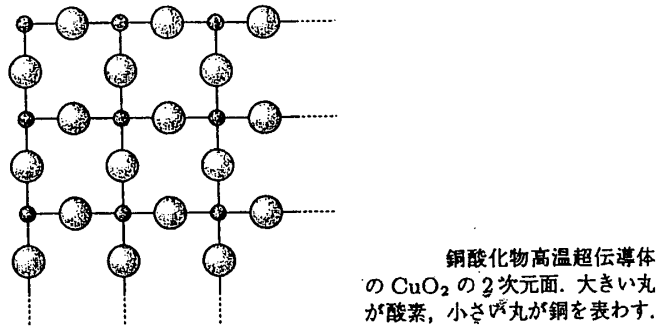


図 6: 銅酸化物高温超伝導体の CuO<sub>2</sub> の 2次元面

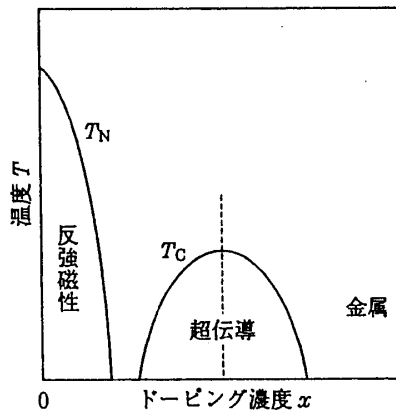


図 7: 銅酸化物高温超伝導体の相図.  $x$  はドーピングされたホールの数.

2回符号を変えれば p-波であり, 4回変えれば d-波である. 以下に見るように s-波以外の異方的超伝導がどのように実現するかは電子密度, フェルミ面の詳細, 相互作用の運動量依存性によるのである.

#### 4.1. ダイソン・ゴリコフ (Dyson-Gor'kov) 方程式

場の理論の凝縮系における応用の例としてハバード (Hubbard) モデルに対する超伝導の研究を紹介しよう. ハバード・ハミルトニアン (Hubbard Hamiltonian) は電子の軌道の縮退を無視すると次のように書ける.

$$H = \sum_{i,\sigma} \epsilon_0 c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{i \neq j, \sigma, j} t_{i,j} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (80)$$

これをフーリエ変換して運動量空間で考える.

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{k,k',q} c_{k-q\uparrow}^\dagger c_{k'+q\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} c_{k\uparrow} \quad (81)$$

ここで,  $\epsilon_k$  はそれぞれの系で与えられるが, 例えば銅酸化物の超伝導体では

$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu. \quad (82)$$

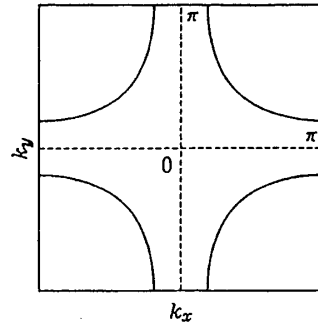


図 8: 銅酸化物高温超伝導体のフェルミ面

で与えられる. ここで  $t$  は正方格子の最近接格子点間の,  $t'$  は次近接格子点間の遷移行列要素である. 格子定数  $a$  を 1 とし,  $2t = 1, 4t' = 1$  の値を取り電子数をはーフ・フィールド (Half-filled) の  $n = 1$  からずらして 1 より小さくするとホールドープ, 1 より大きくすると電子ドープの系のフェルミ面が再現される.

図 8 にホールドープの場合のフェルミ面を示した. これからハバードモデルの超伝導を導きたいのであるが, (81) 式が示すように相互作用は斥力の項,  $U$  のみである. したがって, クーロン斥力から如何にして超伝導が生じるかが研究の重要課題である. 最も簡単でしかも信頼できる方法を紹介しよう.

ハイゼンベルグ表示の場の演算子を用いて異常温度グリーン関数 (Anomalous Thermal Green Function) を定義する.

$$F_{\alpha\beta}(r_1\tau_1; r_2\tau_2) = \langle T_\tau \psi_\alpha(r_1, \tau_1) \psi_\beta(r_2, \tau_2) \rangle \quad (83)$$

$$F_{\alpha\beta}^\dagger(r_1\tau_1; r_2\tau_2) = \langle T_\tau \psi_\alpha^\dagger(r_1, \tau_1) \psi_\beta^\dagger(r_2, \tau_2) \rangle \quad (84)$$

これは粒子数を保存しないので異常に見えるが超伝導状態は電子対の生成、消滅の状態であるので、異常グリーン関数が有限に残ることが本質的である. 同じく粒子数を保存しない異常自己エネルギー (Anomalous Selfenergy)  $\Sigma_a$  を用いて, 次のゴルコフ・ダイソン (Gor'kov-Dyson) 方程式を得る.  $k = (k, \omega_l)$  を表わす.

$$G(k) = G^0(k) + G^0(k)\Sigma_n(k)G(k) + G^0(k)\Sigma_a(k)F^\dagger(k), \quad (85)$$

$$F^\dagger(k) = G^0(-k)\Sigma_n(-k)F^\dagger(k) + G^0(-k)\Sigma_a(-k)G(k), \quad (86)$$

$$F(k) = G^0(k)\Sigma_n(k)F(k) + G^0(k)\Sigma_a(k)G(-k). \quad (87)$$

ここで  $\Sigma_n$  は正常な自己エネルギーである. それぞれの自己エネルギーと方程式を図 9 に示す. また, それぞれの自己エネルギーは図 10 に示す 2 体の相互作用を表わす 4 点バーテックスが求められればそれから導出できる. それゆえ, 問題は如何にして 4 点バーテックスを計算するかにつきる. その 1 つがここで用いた摂動計算であり, 後に述べる揺らぎ交換近似 (Fluctuation Exchange Approximation) (FLEX 近似) である.

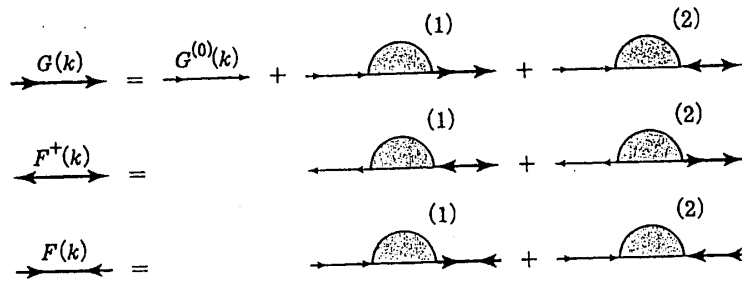


図 9: Dyson-Gor'kov 方程式. 正常、異常自己エネルギーをそれぞれ  $\Sigma^{(1)}$  と  $\Sigma^{(2)}$  で表わした. これらの自己エネルギーが求まると閉じた方程式が完成する.

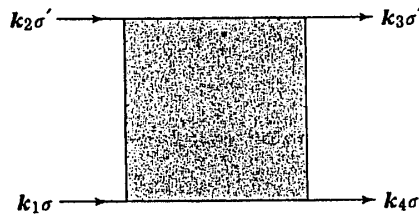


図 10: 4点バーテックス  $\Gamma_{\sigma\sigma'}(k_1, k_2; k_3, k_4)$

超伝導転移温度  $T_c$  を求めるためには上記のダイソン・ゴリコフ方程式を解く必要がある.  $T_c$  に近いので異常項に関して線形化できて

$$G(k)^{-1} = G^{0-1}(k) - \Sigma_n(k), \tag{88}$$

$$F^\dagger(k) = G^0(-k)\Sigma_a(-k)G(k), \tag{89}$$

$$F(k) = G^0(k)\Sigma_a(k)G(-k). \tag{90}$$

この方程式が、解を持つ温度が転移温度  $T_c$  である.

#### 4.2. 摂動展開による方法

クーロン (Coulomb) 相互作用  $U$  が強くない時は弱結合の近似として,  $U$  に関する摂動展開が可能である. ハバードハミルトニアンを用いた 3 次までの摂動計算を紹介しよう. ただし、相互作用を摂動計算に依って求めるのであって、超伝導が摂動計算に依って生じるのではないことに注意しよう. ここで銅酸化物高温超伝導体と有機超伝導体  $\kappa$  型 BEDT-TTF が、同じハバード・ハミルトンで記述した摂動計算や後に述べる FLEX 近似で、超伝導が導出できることが大変重要である. 夫々、電子密度やバンド構造が異なるからフェルミ面が異なるがそれを再現するように遷移行列  $t, t'$  を決めて以下の摂動計算を行うのである. 有機超伝導体は格子点当たり 1 個の電子を持つハーフ・フィルドの系と考えて良い. 正常部分の自己



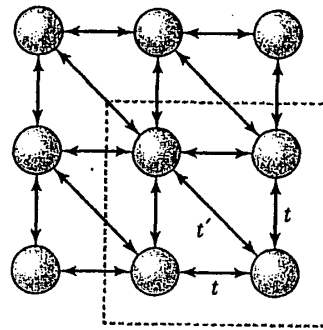


図 11: 有機超伝導体 BEDT-TTF の格子構造.  $t = t'$  の時は三角格子になり, フラストレーションで, 反強磁性揺らぎが抑えられる.

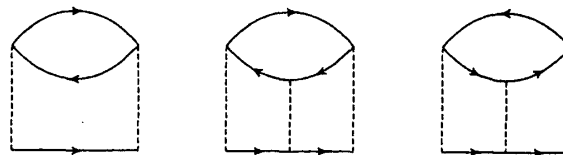


図 12: 2次と3次の正常自己エネルギー. 電子と正孔の対称性が良いと3次は打ち消し合い小さくなる.

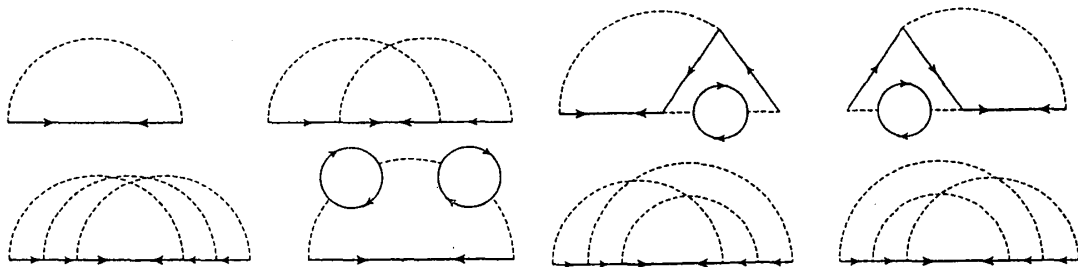


図 13: 異常自己エネルギー

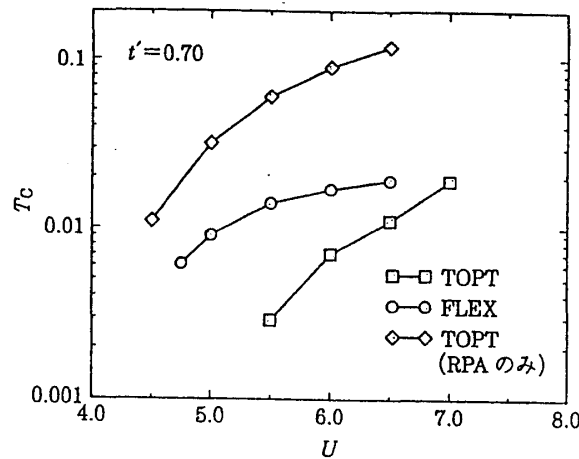


図 14: 有機超伝導体  $\kappa$ -BEDT-TTF の超伝導転移温度.  $T_c$  の高い順に RPA 項だけによるもの, FLEX 近似, 3 次摂動である.

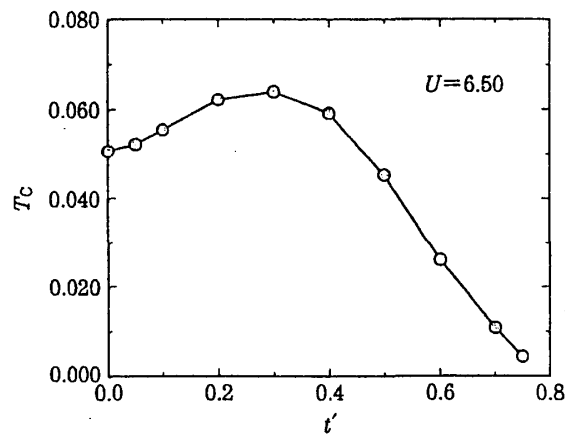


図 15: 転移温度  $T_c$  の  $t'$  依存性.  $t'$  が 1 に近づくと超伝導が起こらなくなる.

エネルギーのグラフと異常自己エネルギーのグラフをそれぞれ図 12, 13 に示す. これを用いてエリアシュバーク (Eliashberg) 方程式を解いて超伝導転移温度を計算したのが図 14, 15 である.  $U$  の増大と共に  $T_c$  が高くなる. 電子相関による斥力に基づく超伝導であるので増大するのは自然である. 今, スピン磁化率  $\chi(q, \omega)$  を図 16 に示す.  $\chi(q, \omega)$  のピークが高く, 反強磁性的な揺らぎが強いと d-波の超伝導が起こりやすい事がわかる. このことは反強磁性揺らぎに寄与する項のみを残すと  $T_c$  が高くなることでも分かる. バートックス補正は d-波の転移温度を下げる.

#### 4.2.1. d-波に対する摂動計算

摂動計算の実地訓練も兼ねて, 少し, ていねいに説明しよう. 正常 (Normal) 自己エネルギー  $\Sigma_n$  は次ぎのように表わされる.  $k = (k, \varepsilon_n), q = (q, \omega_m)$  と書くことにする.

$$\Sigma_n = \frac{T}{N} \sum_{k'} [U^2 \chi_0(k - k') + U^3 \chi_0^2(k - k') + U^3 \phi_0^2(k + k')] G_0(k') \quad (91)$$

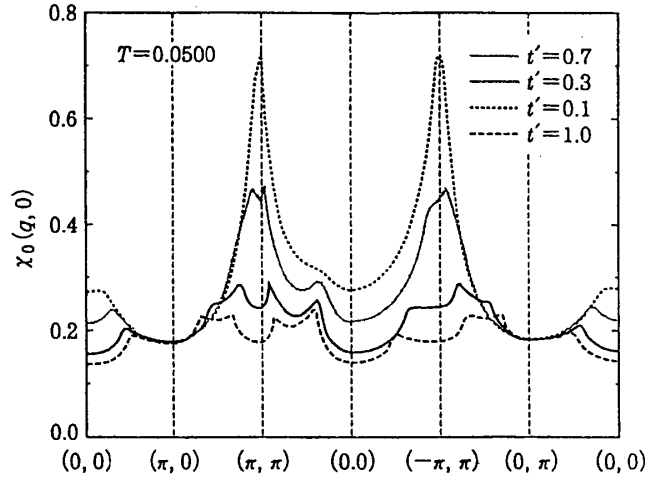


図 16: 磁化率  $\chi_0(q, 0)$  の  $t'$  依存性

ここで,

$$\chi_0(q) = -\frac{T}{N} \sum_k G_0(k) G_0(q+k), \quad (92)$$

$$\phi_0(q) = -\frac{T}{N} \sum_k G_0(k) G_0(q-k). \quad (93)$$

異常 (Anomalous) 自己エネルギー  $\Sigma_a$  は 2 つの部分の和として表される.

$$\Sigma_a(k) = \Sigma_{\text{RPA}}(k) + \Sigma_{\text{vert}}(k), \quad (94)$$

$$\Sigma_{\text{RPA}}(k) = -\frac{T}{N} \sum_{k'} [U + U^2 \chi_0(k+k') + 2U^3 \chi_0^2(k+k')] F(k'), \quad (95)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{vert}}(k) = & -U^3 \frac{T^2}{N^2} \sum_{k', k_1} G_0(k') [\chi_0(k+k') - \phi_0(k+k')] G_0(k+k'-k_1) F(k_1) \\ & -U^3 \frac{T^2}{N^2} \sum_{k', k_1} G_0(k') [\chi_0(-k+k') - \phi_0(-k+k')] G_0(-k+k'-k_1) F(k_1). \end{aligned} \quad (96)$$

転移温度  $T_c$  に近いとして上式を線形化すると

$$F(k) = |G(k)|^2 \Sigma_a(k). \quad (97)$$

となるので

$$\begin{aligned} \Sigma_a(k) = & -\frac{T}{N} \sum_{k'} [U + U^2 \chi_0(k+k') + 2U^3 \chi_0^2(k+k')] |G(k')|^2 \Sigma_a(k') \\ & -U^3 \frac{T^2}{N^2} \sum_{k', k_1} G_0(k') [\chi_0(k+k') - \phi_0(k+k')] G_0(k+k'+-k_1) |G(k_1)|^2 \Sigma_a(k_1) \end{aligned}$$

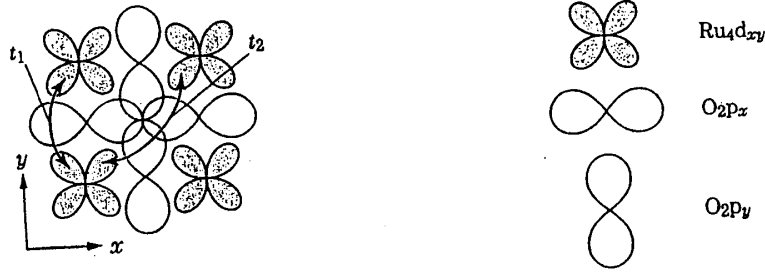


図 17:  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の 2 次元面. Ru 間の電子移動と Ru 原子上のクーロン斥力を考えると 2 次元ハバード・ハミルトニアンで記述される.  $t_1$  が最近接の  $t$ ,  $t_2$  が次近接の  $t'$  に対応する.

$$-U^3 \frac{T^2}{N^2} \sum_{k', k_1} G_0(k') [\chi_0(-k+k') - \phi_0(-k+k')] G_0(-k+k'-k_1) |G(k_1)|^2 \Sigma_a(k_1) \quad (98)$$

このエリアシュベルグ方程式は次ぎの形に整理できる.

$$\Sigma_a(k) = -\frac{T}{N} \sum_{k'} V(k', k) |G(k')|^2 \Sigma_a(k'). \quad (99)$$

この  $T_c$  を決める固有値方程式は  $V(k', k)$  が斥力で常に正でも運動量依存性が強く, ある  $k$  と  $k'$  を強く結びつける時は  $\Sigma_a(k)$  が符号を変えれば成立する. もし, s-波の等方的な解を探すには  $V(k', k)$  が引力で負でなければならない.

#### 4.2.2. p-波に対する摂動計算

前節の摂動計算を p-波 (スピン 3 重項) の場合にも適用できる. この良い例が前野達によって発見された  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  である. 準 2 次元的な金属であるのでその 2 次元面を図 17 に示す. この系の場合,  $\gamma$  面と呼ばれる 2 次元面が状態密度も高く超伝導に重要な役割を果たす (図 18). 野村によって摂動計算がなされ, スピン 3 重項の超伝導が自然な形で導出されている [12]. この場合は平行スピンの電子または正孔が電子対を形成するから図 19 に示すように異常自己エネルギーのグラフが d-波の場合とは異なる.

$$\begin{aligned} \Sigma_a(k) &= \sum_{k'} |G(k')|^2 \Sigma_a(k') \chi_0(k-k') U^2 \\ &- \frac{T^2}{N^2} \sum_{k', k''} |G(k')|^2 \Sigma_a^\dagger(k') G_0(-k+k'+k'') [\chi_0(-k+k'') + \phi_0(-k+k'')] G_0(k'') U^3 \\ &- \frac{T^2}{N^2} \sum_{k', k''} |G(k')|^2 \Sigma_a^\dagger(k') G_0(k-k'+k'') [\chi_0(k+k'') + \phi_0(k+k'')] G_0(k'') U^3 \quad (100) \end{aligned}$$

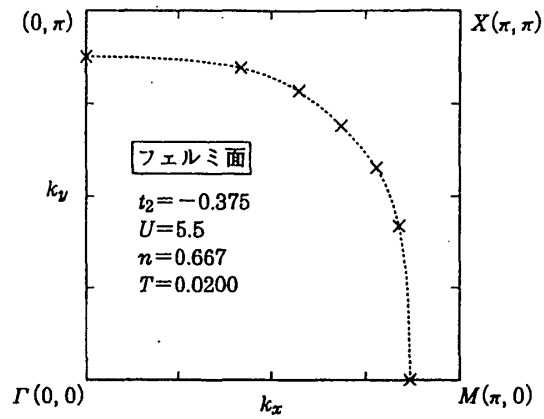


図 18:  $\gamma$ バンドのフェルミ面. 現実のフェルミ面を再現するために使用されたフェルミ面.

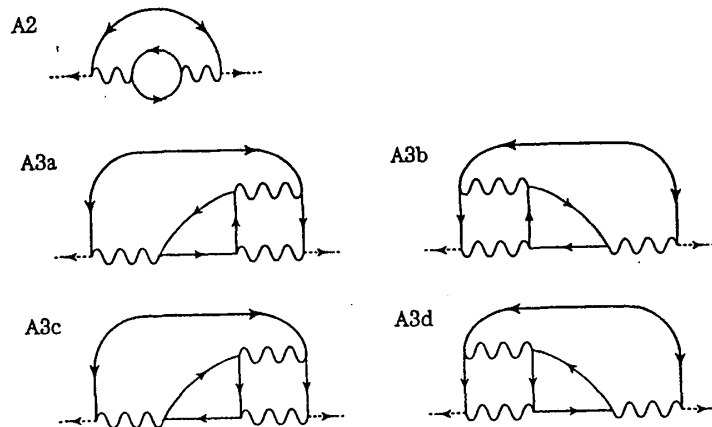


図 19: スピン 3 重項 (Triplet) に対する異常自己エネルギー

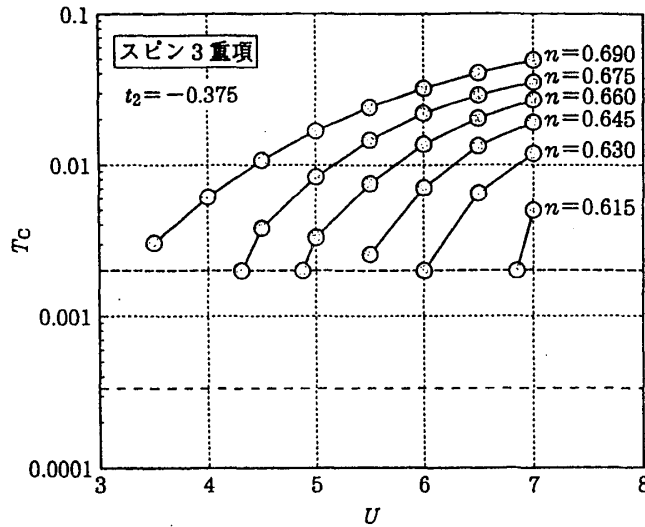


図 20: スピン 3 重項 (Triplet) 状態の  $T_c$  の  $U$  依存性.  $t_2 = 0.375$  である. 現実に  $n$  は 0.667 に近い.

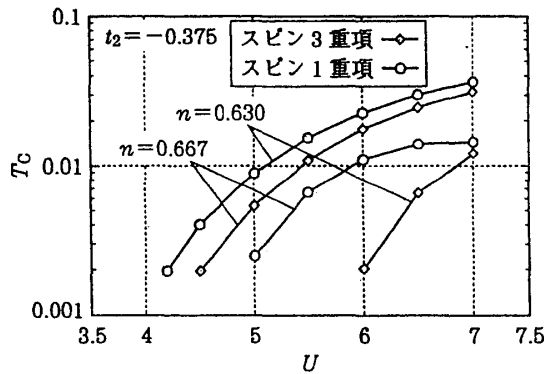


図 21: スピン 3 重項 (p-波) と 1 重項 (d-波) の  $T_c$  の比較

この場合も

$$\Sigma_a^\dagger(k) = -\frac{T}{N} \sum_{k'} |G(k')|^2 \Sigma_a^\dagger(k') V(k', k). \quad (101)$$

と表わすと 3 次の項が効いて、 $V(k', k)$  がフェルミ面上の反対称な点の間で大きくなり、ギャップ関数がある間で符号を変えればスピン 3 重項の p-波が安定になることが分かる. このような計算から野村は  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  のスピン 3 重項の超伝導の機構を説明している [12]. 従来、定説とされてきたパラマグノン機構とは異なるが、現実にパラマグノンと呼ばれる強磁性的スピン揺らぎは実験でも観測されていないので、自然な説明である.

最近、 $U$  の摂動展開は野村によって 4 次まで拡張された [13]. その結果によると d-波に対しては大変収束性が良く、4 次の項は転移温度をわずかにあげる. p-波に対しては 4 次の項は転移温度を下げるが、電荷揺らぎを表す項を無限次まで集

めることによって収束性を回復し、3次までの結果が正しいことが示されている。

### 4.3 FLEX 近似

反強磁性スピン揺らぎのスペクトルを現象論的に仮定して、それによるd-波の超伝導を導出する理論がある。この立場ではハミルトニアンとの関係が明確ではないので、場の理論的なアプローチとして特定のダイアグラムを集めた揺らぎ交換近似 (Fluctuation Exchange Approximation) (FLEX) という近似計算がなされる。乱雑位相近似 (RPA) に似た面もあるが自己無撞着に解くことで反強磁性の不安定性を抑え、超伝導に導く。反強磁性揺らぎの強い系で妥当な近似と考えられる。FLEX 近似における正常自己エネルギー  $\Sigma_F(k, i\varepsilon_n)$  は次ぎのような1ループ (One-Loop) 近似で求められる。

$$\Sigma_F(k, i\varepsilon_n) = T \sum_{q, i\omega_n} V_n(q, i\omega_n) G(k - q, i\varepsilon_n - i\omega_n). \quad (102)$$

ここで正常バーテックス  $V_n(q, i\omega_n)$  は次式で与えられる。

$$V_n(q, i\omega_n) = U^2 \left[ \frac{3}{2} \chi_s(q, i\omega_n) + \frac{1}{2} \chi_c(q, i\omega_n) - \chi_0(q, i\omega_n) \right]. \quad (103)$$

ここでスピン磁化率  $\chi_s(q, \omega_n)$ , 電荷感受率  $\chi_c(q, i\omega_n)$  は夫々次ぎのように与えられる。

$$\chi_s(q, i\omega_n) = \frac{\chi_0(q, i\omega_n)}{1 - U\chi_0(q, i\omega_n)}, \quad \chi_c(q, i\omega_n) = \frac{\chi_0(q, i\omega_n)}{1 + U\chi_0(q, i\omega_n)}. \quad (104)$$

既約磁化率  $\chi_0(q, i\omega_n)$  は自己エネルギー補正を含んだグリーン関数  $G(k, i\varepsilon_n) = (i\varepsilon_n - \varepsilon_k - \Sigma_F(k, i\varepsilon_n))^{-1}$  を用いて次ぎのように表わされる。

$$\chi_0(q, i\omega_n) = -T \sum_{k, i\varepsilon_n} G(k, i\varepsilon_n) G(k + q, i\varepsilon_n + i\omega_n). \quad (105)$$

上において、 $U$  の1次の項は化学ポテンシャルのシフトに繰り込まれるので省略できる。FLEX 近似において自己エネルギーと磁化率が自己無撞着に決定される。FLEX 近似で与えられるスピン磁化率  $\chi_s(q, i\omega_n)$  は反強磁性波数  $Q = (\pi, \pi)$  の近くで強められる。こうして FLEX 近似が適切な記述である場合は反強磁性揺らぎが本質的な役割を果たす。

超伝導転移温度  $T_c$  は線形化されたダイソン・ゴリコフ方程式が解を持つ温度として決定される。 $T_c$  を決める線形化された方程式は次ぎの固有値方程式で与えられる。

$$\lambda \phi(k, i\varepsilon_n) = -T \sum_{p, i\varepsilon_m} V_a(k - p, i\varepsilon_n - i\varepsilon_m) |G(p, i\varepsilon_m)|^2 \phi(p, i\varepsilon_m). \quad (106)$$

ここで  $V_a(q, i\omega_n)$  は一重項 (singlet channel) に対する異常バーテックスで次式で与えられる。

$$V_a(q, i\omega_n) = U^2 \left[ \frac{3}{2} \chi_s(q, i\omega_n) - \frac{1}{2} \chi_c(q, i\omega_n) \right] + U. \quad (107)$$

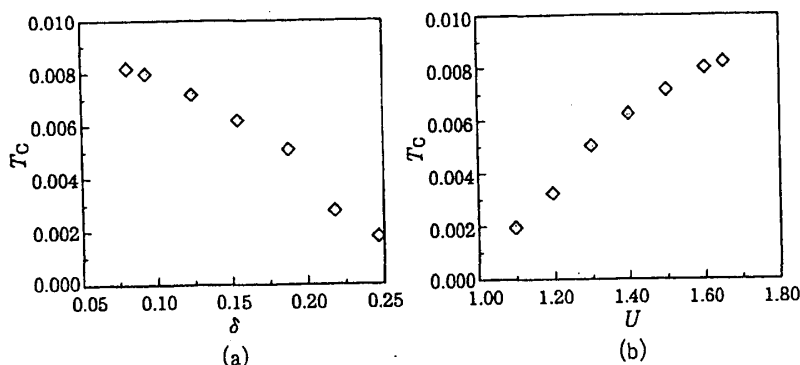


図 22: (a) $T_c$ のドーピング依存性, (b) $T_c$ の  $U$  依存性

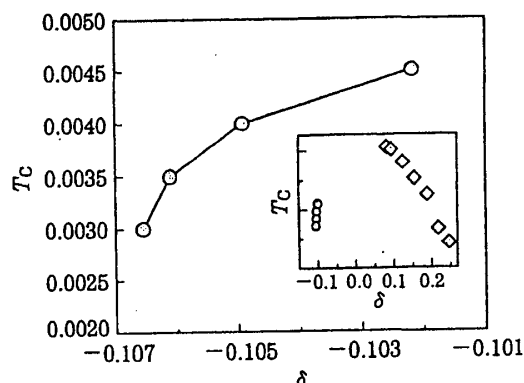


図 23: 電子澤呂  $T_c$  のドーピング依存性. 小さい図は全ドーピング領域での  $T_c$  のドーピング依存性を示している. ドーピング  $\delta$  が 0 の近くは反強磁性である.

ここで超伝導転移温度  $T_c$  は最大固有値  $\lambda_{\max}$  が 1 になる温度として定まる. それに対応するクーバー対の波動関数が  $\phi_{\max}(p, i\varepsilon)$  である. ハバードモデル  $\varepsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t'\cos k_x \cos k_y - \mu$  に対する計算結果を図 22 に示す.

最近では銅酸化物において電子をドーピングした系でも純良な試料が得られるようになった. ホールドーピング系からは反強磁性の絶縁相を挟んで隔てられているが, フェルミ液体として金属状態を接続して, ラッティンジャーの定理を満たすようにフェルミ面を決めると東北大高橋グループの光電子分光で得られたフェルミ面に一致する. 現実には反強磁性相で隔てられていても, 金属状態としては連続であるということはフェルミ液体の有効性を示す大変興味ある事実である. 摂動計算や FLEX で超伝導転移温度を計算できる. FLEX 近似による計算は多くの人によってなされている. ここでは電子ドーピング系も含めて計算された柳瀬の結果を図 23 に示した. 電子ドーピング系で  $T_c$  が低いのは反強磁性揺らぎが運動量空間で狭く, d-波の引力が弱くなるためである.

#### 4.4 おわりに

銅酸化物高温超伝導体や  $\kappa$  型 BEDT-TTF では反強磁性相に近づくと共に d-波の



引力が強くなり、準2次元系の強結合超伝導の結果として、擬ギャップと呼ばれる現象が見られる。超伝導転移温度  $T_c$  の上で超伝導ギャップが現れる。ハーフ・フィロドに近い電子密度の高い系での強結合超伝導は驚くべきことである。実は、高密度の電子系では、通常バンド幅は大きくても電子相関効果によって繰り込まれた準粒子のバンド幅に対して超伝導の引力が強くなることを意味する。その結果、クーバー対の状態とフェルミ液体の準粒子とが共鳴した状態になり、準粒子の自己エネルギーの虚数部が異常に増大する。この結果としてフェルミ面近くの状態密度が減少するのである [14],[15]。本来、超伝導転移すべきであるが2次元性のため、超伝導が抑制されているがエネルギーを下げるために擬ギャップを形成すると考えることができる。この擬ギャップの効果によって図7に見られるように低ドープ  $T_c$  が低下する [14]。自然は私達の予想を越えて新しい現象を登場させる。しかし、研究していくと原理の単純さ、美しさにもう一度驚かされる。

強い電子相関の系の超伝導として多彩で興味の尽きないのが重い電子系である。フェルミ面近くの準粒子がクーロン斥力で異方的超伝導になる。

最後に以上の計算の参考文献として Review[16] をあげておく。さらに Cambridge University Press から、出版される 'Electron Correlation in Metals' も参照していただきたい。

#### 本文全体で参考にした文献

このテキストの大部分は「凝縮系における場の理論」(岩波書店)の2章と6章からなる。1300円の本なのでご一読願いたい。他の章には Green 関数など場の理論が説明されている。

芳田 奎: 磁性 (岩波書店, 1991)

斯波弘行: 固体の電子論 (丸善, 1996)

斯波弘行: 電子相関の物理 (岩波書店, 2001)

阿部龍蔵: 統計力学 [第2版] (東京大学出版会, 1992)

恒藤敏彦: 超流動・超伝導 (岩波書店, 2000)

山田耕作: 電子相関 (岩波書店, 2000)

P. Nozieres: Theory of Interacting Fermi Systems (Benjamin, 1964)

D. P. Pines: Elementary Excitations in Solids (Benjamin, 1964)

P.W. Anderson: Basic Notions of Condensed Matter Physics (Benjamin, 1984)

A.A. Abrikosov L.P. Gor'kov and E. Dzyaloshinskii: Method of Quantum Field Theory in Statistical Physics (Prentice Hall, 1963)

## 参考文献

- [1] P.W. Anderson: *Basic Notions of Condensed Matter Physics* (Benjamin, 1984)
- [2] L.D. Landau: *Sov. Phys. JETP* 3 (1957) 920; *ibid.* 5 (1957) 101; *ibid.* 8 (1959) 70
- [3] V. Zlatić and Horvatić: *Phys. Rev. B* 28 (1985) 6904.
- [4] J.M. Luttinger: *Phys. Rev.* 119 (1960) 1153.
- [5] 阿部龍蔵: 統計力学 [第2版] (東京大学大出版会, 1992)
- [6] Éliashberg: *Sov. Phys. JETP* 14 (1962) 886.
- [7] K. Yamada and K. Yosida: *Prog. Theor. Phys.* 76 (1986) 621.
- [8] T. Okabe: *J. Phys. Soc. Jpn.* 67 (1998) 2792.
- [9] H. Kohno and K. Yamada: *Prog. Theor. Phys.* 80 (1988) 623.
- [10] H. Kontani, K. Kanki and K. Ueda: *Phys. Rev. B* 59 (1999) 14723;  
K. Kanki and K. Kontani: *J. Phys. Soc. Jpn.* 68 (1999) 1614.
- [11] T. Toyota: *Ann. Phys. (USA)* 173 (1987) 226.
- [12] T. Nomura and K. Yamada: *J. Phys. Soc. Jpn.* 69 (2000) 3678.
- [13] T. Nomura and K. Yamada: *J. Phys. Soc. Jpn.* 72 (2003) 2053.
- [14] Y. Yanase and K. Yamada: *J. Phys. Soc. Jpn.* 70 (2001) 1659.
- [15] T. Jujo and K. Yamada: *J. Phys. Soc. Jpn.* 68 (1999) 2198.
- [16] Y. Yanase, T. Jujo, T. Nomura, H. Ikeda, T. Hotta and K. Yamada: *Physics Report* 387 (2003) 1.