物性研究　56－3(1991－6)

修士論文　（1990年度）

A Simple Model for High-T_c Superconductors

東海大 理　佐藤 実

（1991年3月28日受理）

Abstract

高温超伝導が発見されて以来様々な物質が発見されているが，その機構ははっきりしていない．それは高温超伝導が，電子の局在する状態，遍歴する状態といった極端な状況ではなく，中間的な状況にあるためと思われる．本論文では高温超伝導において電子の局在性を本質的とみて，2次元正方格子の1バンド・ハバード・モデルを起点とする．最近接格子間の電子の遷移行列要素 t の大きさに較べて同一格子点上のクーロン斥力 U が大きい strong correlation limit（$|t| \ll U$）の場合に注目する．half-filled 以下で格子点の電子による二重占有状態を考えない，lower Hubbard band の運動だけを考慮する簡単なモデルで超伝導が得られるかを議論する．ここで超伝導電子対がd波的な対称性をもつとすると，t の2次摂動である超交換相互作用 J による超伝導が得られる．$J/t = 0.1$ としてキャリア密度δと超伝導転移温度 T_cの関係を計算した結果，δが 0.3 ~ 0.4 の範囲で超伝導を得ることができ，T_cのピークは $t = 1$eV として$\delta = 1/3$ で 20K 程度となる．

§1. Introduction

1986 年に Bednorz と Möller によって $La_{2-x}Ba_xCuO_4$が発見されて以来，La 系（$La_{2-x}M_xCuO_4$，M=Sr,Ba,Ca）の他，Y 系，Bi 系，Tl 系など様々なタイプの銅酸化物高温超伝導体が発見され，また超伝導電流の荷電担体（キャリア）が正孔（ホール）であるものだけではなく，電子であるもの（例えば，$Ln_{2-x}Ce_xCuO_4$，Ln=Pr,Nd,Sm,Eu）も発見されている[1]．

こういった高温超伝導体を用いて行なわれた，ジョセフソン効果でのシャピロ・ステップの測定や，渦糸構造での磁束密度の測定などから，キャリアの単位は素電荷の二倍（$2e$）となっていることが知られている．このことから，高温超伝導もクーパー対によって担われていることが想像でき，この面ではいままでの超伝導と同じであると考えられている．

しかし高温超伝導体には，はっきりとしたアイソトープ効果が見られないため，クーパー対がフォノンに媒介された引力によって形成されるとする，金属系の BCS 理論が高温超伝導を記述しているとは考えにくい．つまり高温超伝導体内でクーパー対をつくる機構は電子-格子相互作用以外に求めなければならないと思われるが，それが何であるかは現在わかっていない．

それは，$La_{2-x}Sr_xCuO_4$の相図（図 1.1）が示しているように高温超伝導相が，強いクーロン相互作用のために電子が局在する反強磁性絶縁相でもなく，結晶中を電子が遍歴する金

属相でもない，中間的な状況で現れるためである．

以下，$La_{2-x}Sr_xCuO_4$を代表的物質として念頭に置きつつ，この中間的状況をなるべく簡単なモデルで記述することを試みる．

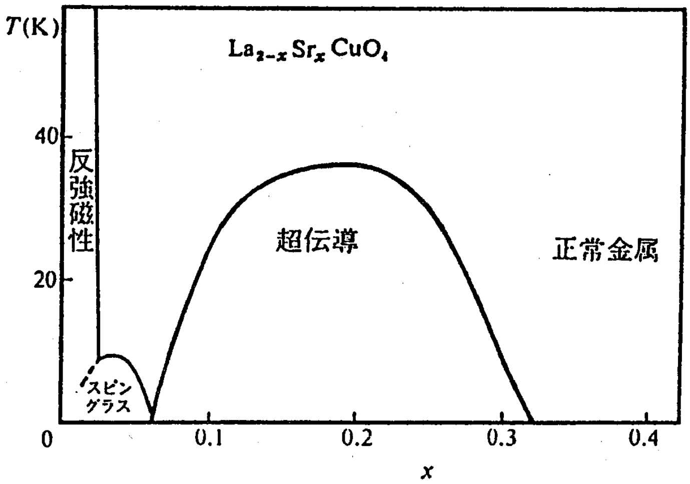


図 1.1 $La_{2-x}Sr_xCuO_4$の相図 Ref.2)

実験によると高温超伝導はCuO_2面（図 1.2）で起きると考えられるので，以下 2 次元正方格子上の電子系を考える．

$La_{2-x}Sr_xCuO_4$をイオン結晶としてみると，$x=0$ の場合（La_2CuO_4）は La が+3 価，O が−2 価，Cu は+2 価であり，CuO_2面は Cu^{2+} と O^{2-} から成っていることになる．Cu^{2+} は $3d^9$，O^{2-} は $2p^6$ の電子配置をとる．d 軌道は 5 種類，p 軌道は 3 種類あるが，CuO_2面での伝導に重要な役割を果たしているのは $d_{x^2-y^2}$ 軌道と p_x,p_y 軌道であると考えられる[2]（図 1.3）．

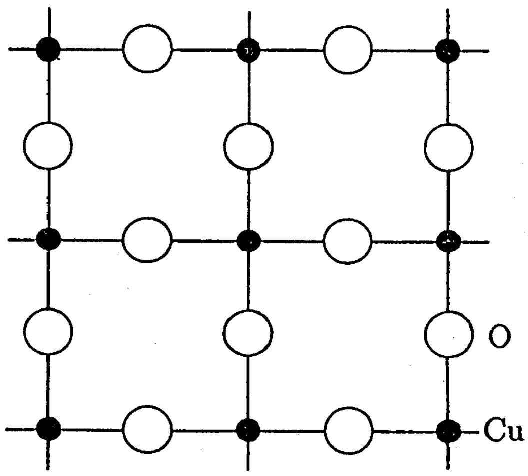


図 1.2 CuO_2面

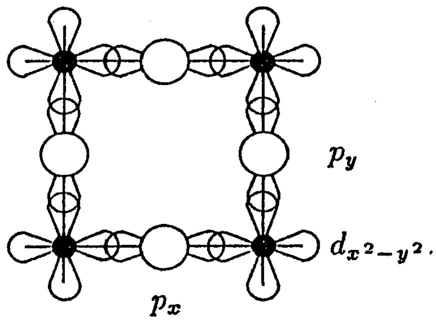


図 1.3 $d_{x^2-y^2}$軌道と p_x,p_y 軌道

$3d^9$という電子配置のため $d_{x^2-y^2}$ 軌道には平均すると電子が一つだけ存在している．軌道間の量子力学的な遷移のみを考える通常のバンド理論では，$d_{x^2-y^2}$ のバンドが半分まで詰

まった状態（ half-filled ）に対応し，金属になっているはずだが，現実の La_2CuO_4 は絶縁体となっている．

これは電子間に強いクーロン斥力が働くために，一つの軌道を二つの電子が占有するのはエネルギー的に損であり，そのため各 $d_{x^2-y^2}$ 軌道に電子が一個ずつ局在してそこから動かなくなるためと考えられる（この様な絶縁体をモット-ハバード絶縁体（ Mott-Hubbard insulator ）という）．またこの物体の反強磁性は，軌道間遷移を摂動論的に考えに入れると，電子が局在するために各 $d_{x^2-y^2}$ 軌道に局在する大きさ 1/2 のスピンが超交換相互作用によって反強磁性的に結合するためと理解できる．

$x \neq 0$ の場合には，Sr が+2 価なので La^{3+} を Sr^{2+} で置き換えることなるが，CuO_2 面から電子一個が Sr に吸収され，CuO_2 面では Cu^{2+} と Cu^{3+} ができていることが実験で調べられている[3]．そのため x の量に応じて電子を含まない $d_{x^2-y^2}$ 軌道ができ，電子は空いた軌道に移ることが可能となる．電子が次々に空の軌道を跳び移ることができると空いた軌道が動いているように見え，ホールがキャリアとなって電流が流れる．$x \sim 1$ ではホールが自由に動けるようになるので，金属になると考えられる．

問題となるのは x が 0 と 1 の中間の場合で，超伝導はまさにこういう状況で起きている．（ $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ の場合 x が $0.05 \sim 0.3$ で超伝導になっている）

電子が d 軌道に局在する状況はハバード・モデル（ Hubbard model ）によってよく表わされる[4]．各格子点に電子の軌道が一つだけある格子を考え，格子点上の電子は軌道の重なりのために量子力学的トンネル効果により格子点間を跳び移ることができる．ただし二つの電子が一つの格子点上に来たときには強いクーロン斥力を受けると考える．酸化物高温超伝導対の場合 CuO_2 面の Cu を格子点にとった 2 次元正方格子を用い，その $d_{x^2-y^2}$ 軌道に注目したことに対応する．これは次のハバード・ハミルトニアン（ Hubbard Hamiltonian ）で表現することができる：

$$H = -\sum_{ij}\sum_{\sigma} t_{ij} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu_0 \sum_{i}\sum_{\sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{i\sigma} \ . \tag{1.1}$$

ここで i, j は格子点の位置，σ は電子のスピンを表わし $\sigma = \uparrow, \downarrow$ とする．$c^{\dagger}_{i\sigma}$ は格子点 i にスピン σ の電子を作り出す生成演算子，$c_{i\sigma}$ は格子点 i にあるスピン σ の電子を消す消滅演算子である†．また $n_{i\sigma} = c^{\dagger}_{i\sigma} c_{i\sigma}$ である．t_{ij} は電子が格子点 j から格子点 i へ量子力学的トンネル効果で遷移するときの行列要素である．ここでは簡単のために最近接格子間のみで遷移が起こるものとして，その値を t と書くことにする．$U(>0)$ は一つの格子点に二つの電子が来たときのクーロン・ポテンシャルを表わし，μ_0 は化学ポテンシャルを表わす．現実には実験から $t \sim 1\mathrm{eV}$，$U \sim 10\mathrm{eV}$ と考えられている（図 1.4）．

$U = 0$ の場合，このハミルトニアンはバンド理論で強く束縛された電子（ tight-binding electron ）と呼ばれるものに対応し，電子は遍歴電子として系全体を動き回り，金属となる．

---

† ハバード・ハミルトニアン (1.1) には particle-hole symmetry があり，$c^{\dagger}_{i\sigma}$ を，キャリアがホールの場合は電子の生成演算子，キャリアが電子の場合にはホールの生成演算子とする事によってどちらも表わすことができる (Appendix A)．ここでは煩雑さを避けるために，キャリアがホールであるとの立場で進めることにする．

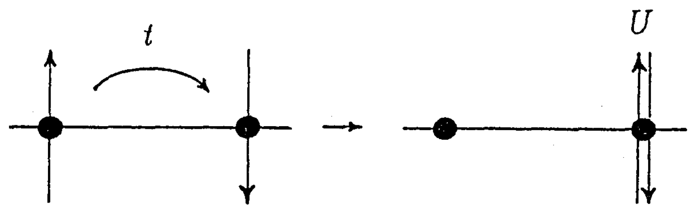


図 1.4 格子上の電子の運動（t と U）

逆に $t=0$ の場合，格子間隔が大きい極限に対応するため，電子は各格子点に一個ずつ局在するという粒子性の強い状況になり，格子点は局在スピンを持つことになる．

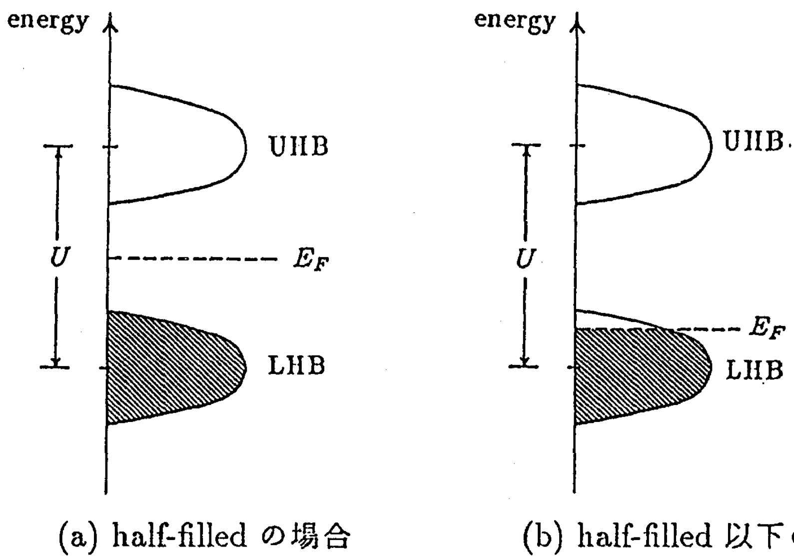
問題となる t も U も 0 でない値をとる場合には，電子は遍歴と局在の間で落ちつくことになるが，前にも述べたように高温超伝導体には強い電子相関があるので，ここでは強相関の極限（ strong correlation limit ）$|t| \ll U$ を考えることにする．

このとき電子は空いた格子点にだけ動くことができるので，その動きやすさは空の格子点の密度，つまりドープされたキャリア密度 δ；

$$\delta = 1 - \frac{1}{N}\sum_i \sum_\sigma \langle n_{i\sigma} \rangle \ . \tag{1.2}$$

によることになる．ここで N は全格子点数であり，$\langle \cdots \rangle$ は熱平衡平均値を表わす．

$\delta = 0$（$x = 0$ に対応する）では，大きなクーロン・ポテンシャル U のために $d_{x^2-y^2}$ バンドに電子が一個ある場合と二個ある場合でエネルギーは大きく異なる．そのため $d_{x^2-y^2}$ 軌道に電子が一つあるバンド（ lower Hubbard band ; LHB ）と電子が二つあるバンド（ upper Hubbard band ; UHB ）に別れ，その間に大きさ U 程度のハバード・ギャップ（ Hubbard gap ）を生じる．half-filled ということは LHB は完全に占有され，UHB は完全に空となるので，ハバード・ギャップ中にフェルミ・レベル（ E_F）が位置することになり，電流は流れることができずモット・ハバード絶縁体となる（図 1.5(a)）．



(a) half-filled の場合　(b) half-filled 以下の場合

図 1.5 バンドの模式図

$\delta \neq 0$（half-filled 以下）になると，ホールが増える，つまり電子の数が減りフェルミ・レベルが LHB の中に降りてくるので，電流は流れることが可能となる（図 1.5(b)）.

但し，十分ホールが増えた場合（$x \sim 1$）は金属的になるが，そうでない場合は電子の励起が制限されるため金属的であるよりもエネルギー的に有利な状態が有り得る．ここでは $|t| \ll U$ で half-filled 以下の場合に，超伝導になる可能性があるかについて議論していく．

§2. Effective Hamiltonian

ハバード・ハミルトニアン (1.1) は，LHB-UHB 間の遷移を含んでいるが，strong correlation limit では強いクーロン斥力のために LHB と UHB を行き来する遷移は起こりにくいと思われる．そこで，カノニカル変換をして $|t|/U$ の 2 次までの近似で LHB と UHB の mixing term を消去すると，次の t-J ハミルトニアン（t-J Hamiltonian）を得る (Appendix B)：

$$
\begin{aligned}
H_{tJ} = &-t\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}\{(1-n_{i-\sigma})c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma}(1-n_{j-\sigma})+n_{i-\sigma}c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma}n_{j-\sigma}\} \\
&-\frac{J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}\{c^{\dagger}_{i\sigma}c_{i-\sigma}c_{j\sigma}c^{\dagger}_{j-\sigma}+c^{\dagger}_{i\sigma}c^{\dagger}_{i-\sigma}c_{j\sigma}c_{j-\sigma} \\
&\qquad +n_{i\sigma}(1-n_{i-\sigma})(1-n_{j\sigma})n_{j-\sigma}+n_{i\sigma}n_{i-\sigma}(1-n_{j\sigma})(1-n_{j-\sigma})\} \\
&+U\sum_{i}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}-\mu_0\sum_{i}\sum_{\sigma}c^{\dagger}_{i\sigma}c_{i\sigma}\ .
\end{aligned}
\tag{2.1}
$$

ここで J は隣合う格子点間の超交換相互作用で，$2t^2/U$ である（図 2.1）．また $\langle i,j\rangle$ の和は最近接格子 i,j 間で取るものとする．

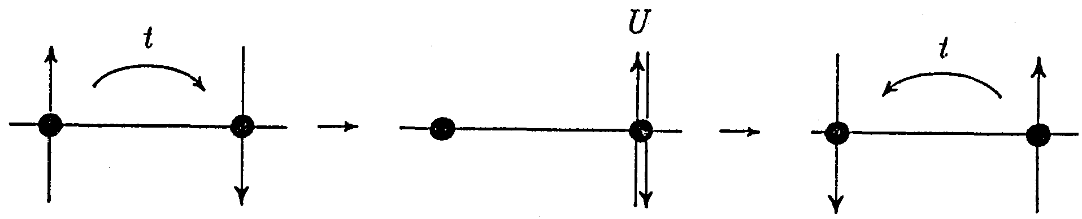


図 2.1 超交換相互作用 J

t の 2 次摂動による J の項のために，隣合う電子のスピンが同じ向きの場合に較べて互いに逆向きの場合には J だけのエネルギー低下があるので，half-filled の場合には各格子点に局在しているスピンは互いに逆向きとなり，すべてのスピンが隣と互いに逆向きになっている状態（Néel 状態，図 2.2）が得られる．

ここで，演算子 c を次のように書き換える：

$$
c_{i\sigma} = a_{i\sigma} + b_{i\sigma}\ ,
$$
$$
a_{i\sigma} = (1-n_{i-\sigma})c_{i\sigma}\ ,\ b_{i\sigma} = n_{i-\sigma}c_{i\sigma}\ .
$$

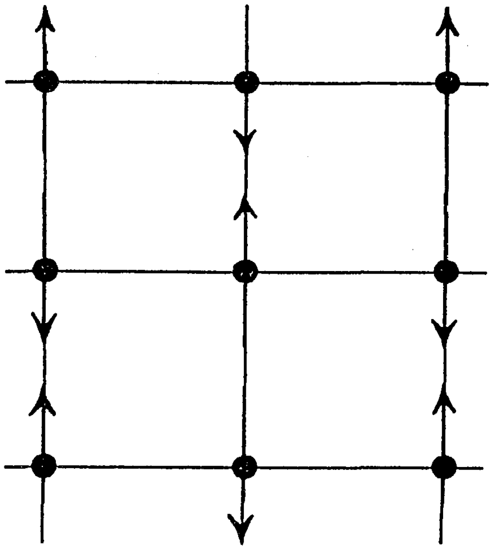


図 2.2　2 次元 Néel 状態

演算子 $a_{i\sigma}^{\dagger}$ は，格子点 i が空席の時にそこにスピンσの電子を作る生成演算子であり，演算子 $b_{i\sigma}^{\dagger}$ は，格子点 i にスピン$-\sigma$の電子が存在するときにそこにスピンσの電子を作り格子点 i を満席にする生成演算子である．つまり演算子 a は LHB の，演算子 b は UHB の運動を記述することになる．

ここでは half-filled 以下で，弱励起状態の場合を扱うことにすると UHB の運動は考える必要がなく，演算子 b を含む項は無視することができる．従って，t-Jハミルトニアン (2.1) は演算子 a だけで書くことができ，これを有効ハミルトニアン (effective Hamiltonian) とする：

$$
\begin{aligned}
H_{eff} = & -t\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma} a_{i\sigma}^{\dagger}a_{j\sigma} \\
& + \frac{J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}(a_{i\sigma}^{\dagger}a_{i-\sigma}a_{j-\sigma}^{\dagger}a_{j\sigma} - a_{i\sigma}^{\dagger}a_{i\sigma}a_{j-\sigma}^{\dagger}a_{j-\sigma}) \\
& - \mu_0\sum_{i}\sum_{\sigma} a_{i\sigma}^{\dagger}a_{i\sigma} \ .
\end{aligned}
\tag{2.2}
$$

また演算子 a の反交換関係は，

$$
\{a_{i\sigma}^{\dagger}a_{i\sigma}\} = 1 - a_{i-\sigma}^{\dagger}a_{i-\sigma} \ , \ \{a_{i\sigma}^{\dagger}a_{i-\sigma}\} = a_{i\sigma}^{\dagger}a_{i-\sigma} \ , \tag{2.3}
$$

（それ以外の反交換関係）$= 0$,

となり，通常のフェルミ粒子と異なった非線形の反交換関係となる．

また $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^{\dagger}a_{i\sigma}$.

演算子 $a_{i\uparrow}$ の運動方程式は：

$$
\begin{aligned}
[a_{i\uparrow}, H_{eff}] =& -t\sum_j\{(1-n_{i\downarrow})a_{j\uparrow} + a^\dagger_{i\downarrow}a_{i\uparrow}a_{j\downarrow}\} \\
&+ J\sum_j(a_{i\downarrow}a^\dagger_{j\downarrow}a_{j\uparrow} - a_{i\uparrow}a^\dagger_{i\downarrow}a_{j\downarrow}) \\
&- \mu_0(1-n_{i\downarrow})a_{i\uparrow}\ .
\end{aligned}
\tag{2.4}
$$

この運動方程式は非線形の項をもつ．それを線形化するために，演算子 a の三個の積のうち二個の積を平均値で置き換えるという平均場近似（ mean field approximation ）を行なう．以下，磁気的な長距離秩序のなく，均質な状態を考えるとする．磁気的な長距離秩序がないので $\langle a^\dagger_{i\downarrow}a_{j\uparrow}\rangle = \langle a^\dagger_{j\downarrow}a_{i\uparrow}\rangle = \langle a^\dagger_{i\downarrow}a_{i\uparrow}\rangle = \langle a^\dagger_{j\downarrow}a_{j\uparrow}\rangle = 0$ ．また LHB だけを考えているので $\langle a_{i\downarrow}a_{i\uparrow}\rangle = 0$ ．すると残るのは，

$$
\begin{aligned}
a^\dagger_{i\downarrow}a_{i\downarrow}a_{j\uparrow} \approx&\ \ \langle a^\dagger_{i\downarrow}a_{i\downarrow}\rangle a_{j\uparrow} + \langle a_{i\downarrow}a_{j\uparrow}\rangle a^\dagger_{i\downarrow}\ , \\
a^\dagger_{i\downarrow}a_{i\downarrow}a_{j\downarrow} \approx&\ \ \langle a_{i\uparrow}a_{j\downarrow}\rangle a^\dagger_{i\downarrow} - \langle a^\dagger_{i\downarrow}a_{j\downarrow}\rangle a^\dagger_{i\uparrow}\ , \\
a_{i\downarrow}a^\dagger_{j\downarrow}a_{j\uparrow} \approx& -\langle a^\dagger_{j\downarrow}a_{i\uparrow}\rangle a_{j\uparrow} - \langle a_{i\downarrow}a_{j\uparrow}\rangle a^\dagger_{i\downarrow}\ , \\
a_{i\uparrow}a^\dagger_{j\downarrow}a_{j\downarrow} \approx&\ \ \langle a^\dagger_{j\downarrow}a_{j\downarrow}\rangle a_{i\uparrow} - \langle a_{i\uparrow}a_{j\downarrow}\rangle a^\dagger_{j\downarrow}\ , \\
a^\dagger_{i\downarrow}a_{i\downarrow}a_{i\uparrow} \approx&\ \ \langle a^\dagger_{i\downarrow}a_{i\downarrow}\rangle a_{j\uparrow}\ .
\end{aligned}
\tag{2.5}
$$

キャリア密度 (1.2) は，均質な状態を考えているので一つの格子点で代表して和をとることができ，スピンの自由度が二つあることに注意して：

$$
\langle a^\dagger_{i\downarrow}a_{i\downarrow}\rangle = \frac{1}{2}(1-\delta). \tag{2.6}
$$

(2.5),(2.6) を運動方程式 (2.4) に用いると線形化した運動方程式を得ることができる：

$$
\begin{aligned}
[a_{i\uparrow}, H_{eff}] \approx& -\sum_j\{\frac{1}{2}(1+\delta)t + J\kappa\}a_{j\uparrow} \\
&- t\phi N a^\dagger_{i\downarrow} + J\phi N a^\dagger_{j\downarrow} - \mu a_{i\uparrow}\ .
\end{aligned}
\tag{2.7}
$$

ここで

$$
\begin{aligned}
\phi \equiv& 2\langle a_{i\uparrow}a_{j\downarrow}\rangle\ , \\
\mu \equiv& \frac{1}{2}(1+\delta)\mu_0 - t\sum_j\langle a^\dagger_{i\downarrow}a_{j\downarrow}\rangle + J\sum_j\langle a^\dagger_{j\downarrow}a_{j\downarrow}\rangle\ , \\
\kappa \equiv& \langle a^\dagger_{j\downarrow}a_{i\downarrow}\rangle\ ,
\end{aligned}
$$

ϕ は超伝導状態を表わす BCS の秩序パラメーターであり，μ は粒子の運動を取り込んだ化学ポテンシャル，κ は粒子が動くときに値をもつ局在のパラメーターである．

また演算子 $a_{i\downarrow}^{\dagger}$ の線形化した運動方程式は；

$$[a_{i\downarrow}^{\dagger}, H_{eff}] \approx \sum_j \{\frac{1}{2}(1+\delta)t + J\kappa\} a_{j\downarrow}^{\dagger} - t\phi^* N a_{i\uparrow} + J\phi^* N a_{j\uparrow} - \mu a_{i\downarrow}^{\dagger} \ . \tag{2.8}$$

§3. Superconductivity

有効ハミルトニアン (2.2) と反交換関係 (2.3) から物理的結論を導くために，Gor'kov のグリーン関数法を用いる．

まず，温度グリーン関数を次のように定義する：

$$G(i,\tau;i',\tau') = -\langle T_\tau \ a_{i\uparrow}(\tau) a_{i'\uparrow}^{\dagger}(\tau')\rangle \ , \tag{3.1}$$

$$F(i,\tau;i',\tau') = -\langle T_\tau \ a_{i\downarrow}^{\dagger}(\tau) a_{i'\uparrow}^{\dagger}(\tau')\rangle \ . \tag{3.2}$$

ここで Tを温度（ボルツマン定数 $k_B = 1$ とする）として，τ, τ'は 0 と $1/T$の間を変化する虚時間であり，T_τは Wick の記号である．また演算子はハイゼンベルグ表示

$$a_{i\uparrow}(\tau) = e^{\tau H_{eff}} a_{i\uparrow} e^{-\tau H_{eff}} \ ,$$

である．

グリーン関数 (3.1),(3.2) の運動方程式

$$-\frac{\partial}{\partial\tau} G(i,\tau;i',\tau') = \delta(\tau-\tau')\delta_{ii'}(1-\langle n_{i\uparrow}\rangle) - \langle T_\tau [a_{i\uparrow}(\tau) \ H_{eff}] a_{i'\uparrow}^{\dagger}(\tau')\rangle \ ,$$

$$-\frac{\partial}{\partial\tau} F(i,\tau;i',\tau') = \delta(\tau-\tau')\delta_{ii'}(1-\langle n_{i\uparrow}\rangle) - \langle T_\tau [a_{i\downarrow}^{\dagger}(\tau) \ H_{eff}] a_{i'\uparrow}^{\dagger}(\tau')\rangle \ .$$

に (2.8) を代入して解き，さらに k空間へフーリエ変換する：

$$G(\mathbf{k}, i\omega) = \frac{1}{2}(1+\delta)\frac{i\omega + \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{(i\omega)^2 - E^2(\mathbf{k})} \ , \tag{3.3}$$

$$F(\mathbf{k}, i\omega) = \frac{1}{2}(1+\delta)\frac{\Delta^*(\mathbf{k})}{(i\omega)^2 - E^2(\mathbf{k})} \ . \tag{3.4}$$

但し，

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \{\frac{1}{2}(1+\delta)t - J\kappa\} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}} \ , \tag{3.5}$$

$$\Delta(\mathbf{k}) = t\phi - J\phi \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}} \ , \tag{3.6}$$

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2} \ . \tag{3.7}$$

ここで $E(\mathbf{k})$ はグリーン関数(3.3),(3.4)の極なので励起エネルギーであり，(3.7)より $\Delta(\mathbf{k})$ はエネルギー・ギャップということになる．

また $G(i,\tau;i',\tau'),F(i,\tau;i',\tau')$ のフーリエ変換は：

$$G(i,\tau;i',\tau')=\frac{T}{N}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\omega}G(\mathbf{k},i\omega)e^{i\{\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ii'}-\omega(\tau-\tau')\}}\ ,$$

$$F(i,\tau;i',\tau')=\frac{T}{N}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\omega}F(\mathbf{k},i\omega)e^{i\{\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ii'}-\omega(\tau-\tau')\}}\ .$$

ここで $\omega=(2n+1)\pi T$ $(n=0,\pm1,\pm2\cdots)$ であり，$\mathbf{k}$ はブリルアン・ゾーンの波数ベクトルで，ここでは格子定数1の2次元正方格子を考えるとすると（図3.1）：

$$k_x=\frac{2\pi}{\sqrt{N}}n_x\ ,\ k_y=\frac{2\pi}{\sqrt{N}}n_y\quad ここで\quad n_x,n_y=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm\frac{\sqrt{N}}{2}\ .$$

また $\mathbf{R}_{ii'}$ は格子点 i と i' の相対位置のベクトルで，格子点 i,i' のそれぞれの位置ベクトルを $\mathbf{R}_i,\mathbf{R}_{i'}$ として $\mathbf{R}_{i'}-\mathbf{R}_i$ である．

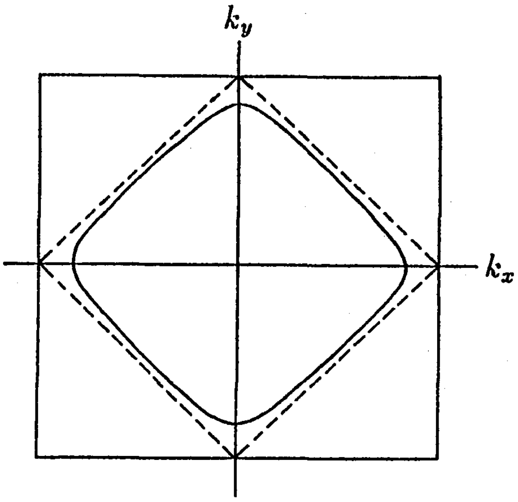


図3.1　2次元正方格子のブリルアン・ゾーン（還元ゾーン）．
破線は half-filled の場合，実線は half-filled 以下の場合．

超伝導状態ではふたつの電子が対を作っている状態なので，励起エネルギーにエネルギー・ギャップが存在する．そこでエネルギー・ギャップ $\Delta(\mathbf{k})$ に対する自己無撞着（self consistent）な式（ギャップ方程式）をみると(Appendix C)：

$$\Delta(\mathbf{k})=\frac{(1+\delta)}{2N}\sum_{\mathbf{k}'}\{\varepsilon_0(\mathbf{k}')+J_0(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\}\frac{\Delta(\mathbf{k}')}{E(\mathbf{k}')}\tanh\frac{E(\mathbf{k}')}{2T}\ . \tag{3.8}$$

但し；

$$\varepsilon_0(\mathbf{k})=t\sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}}\ ,\ J_0(\mathbf{k})=J\sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}}\ . \tag{3.9}$$

さらに電子対の対称性について次のような要請をする．超伝導電子対はスピン一重項の状態にあるとする．この場合 BCS 理論のように s 波の対称性を持っているよりも d 波の対称性を持っている方が，一つの格子点上に二つの電子がくる確率は小さくなる．ここでは格子点上のクーロン斥力 U が大きい場合を扱っているので d 波対が有利であるように思われる．そこで電子対は d 波対であるとする：

$$\Delta(\mathbf{k}) = \phi(\cos k_x - \cos k_y) \ . \tag{3.10}$$

さて，ここでどのような超伝導が得られるのか超伝導転移温度 T_c とキャリア密度 δ の関係で調べることにする．

超伝導転移温度 T_c を電子が対でなくなる温度，つまりエネルギー・ギャップが消える温度と定義して，T_c の様子を調べる．ギャップ方程式 (3.8) において $|\ \Delta(\mathbf{k})\ | = 0$，$T = T_c$ として (3.9) を，

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = 2t(\cos k_x + \cos k_y) \ , \ J_0(\mathbf{k}) = 2J(\cos k_x + \cos k_y) \ , \tag{3.9$'$}$$

として代入し，和を積分にかえて J, μ, T_c を t で規格化すると (Appendix D)：

$$1 = \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y \frac{\frac{J}{t}(\cos k_x - \cos k_y)^2}{\cos k_x - \cos k_y - \nu} \tanh \frac{(\cos k_x + \cos k_y - \nu)}{2\theta_c} \ . \tag{3.11}$$

ここで，

$$\nu = \frac{2\mu}{(1+\delta)t} \ , \ \theta_c = \frac{2T_c}{(1+\delta)t} \ . \tag{3.12}$$

またキャリア密度 (1.2) は，グリーン関数の解 (3.3) を用いると (Appendix E)，

$$\frac{1-2\delta}{1+\delta} = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y \tanh \frac{(\cos k_x + \cos k_y - \nu)}{2\theta_c} \ . \tag{3.13}$$

(3.7) と (3.8) を $J/t = 0.1$ として数値計算を行ない，δ と T_c の関係を調べた．その結果，図 3.2 のように，δ が 0.3 ～ 0.4 の範囲で超伝導が得られ，T_c/t は δ が 1/3 のときに 0.002 程度の最高値が得られることがわかった．実験で知られている値から $t = 1$eV とすると，T_c が 20K の最高値を持つことに相当する．

J/t は 0.1 であり tanh は-1 ～ 1 の範囲で変化するので被積分関数が大きくなるところがなければ (3.11) の積分方程式は成り立たない．ここでは $\cos k_x - \cos k_y$ が μ の付近で積分の値が発散的に大きくなり，そのために (3.11) の積分方程式が成り立っている．つまり，このギャップ方程式は J が効いて成り立っていることになる．

これは，超交換相互作用 J によるスピンの向きの交換により電子が対のように振舞い，この電子の d 波対が格子上を伝わって超伝導が得られていることになる．

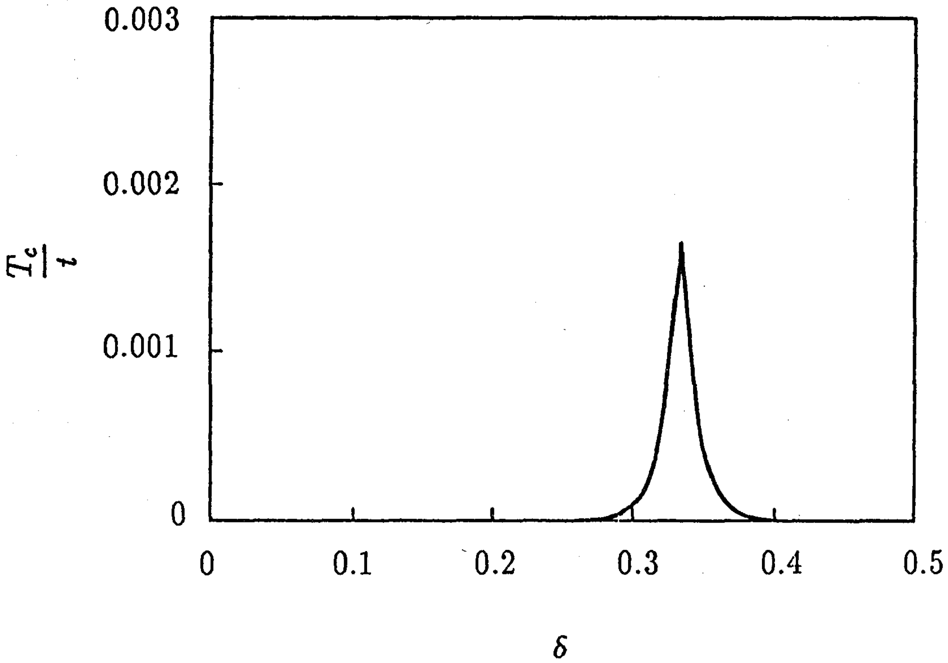


図 3.2 キャリア密度δと T_c/t の関係.
ここで $J/t = 0.1$ とした.

§4. Discussion

さて，ここで得られた超伝導が現実の高温超伝導と対応しているのかを比較したいのだが，$La_{2-x}Sr_xCuO_4$の場合 x の増加とともに O の欠損が増加する傾向にあるので，x の変化がそのままδの変化となっておらず，図 1.1 のような相図をそのまま計算結果と比較することはできない．O の欠損の問題を避けるために Cu と O をまとめて[Cu-O]と考え，その平均原子価 p として CuO_2面内のホール濃度$[Cu\text{-}O]^p$ と T_cの関係（図 4.1 ）が調べられている[5]．

このホール濃度$[Cu\text{-}O]^p$ はキャリア密度δと対応しているので図 3.2 と図 4.1 とを比較すると，T_cのピークを得るキャリア密度が計算結果では 1/3 であるのに対し現実には 0.2 付近であり，計算結果は発散的な鋭いピークを持っているのに対し図 4.1 には T_cの飽和がみられる．また t_cの最高値も現実の物質の方が高い．

ここでの議論で得られた機構はギャップ方程式の発散的な振舞いが重要であった．しかし現実の高温超伝導の T_cの飽和から，その機構は発散的な振舞いではないと思われる．ことから，ここでの議論がそのまま現実の高温超伝導と対応しているわけではないようである．

しかし，このように非常に簡単なモデルでも 20K 程度の T_cが，しかも摂動の効果で得られることは興味深い．

また，ここでは平均場近似を用いたがそれがよい近似かどうかはわからない．しかし平均場近似をして線形化することによって，Gor'kov の方法と同じ様な方法で局在性と遍歴性を簡単に記述することができるのは興味深い．この方法では Gor'kov による金属系の超伝導における方法と (3.3),(3.4) において$\frac{1}{2}(1+\delta)$ だけの違いがある．これによりキャリア密度の依

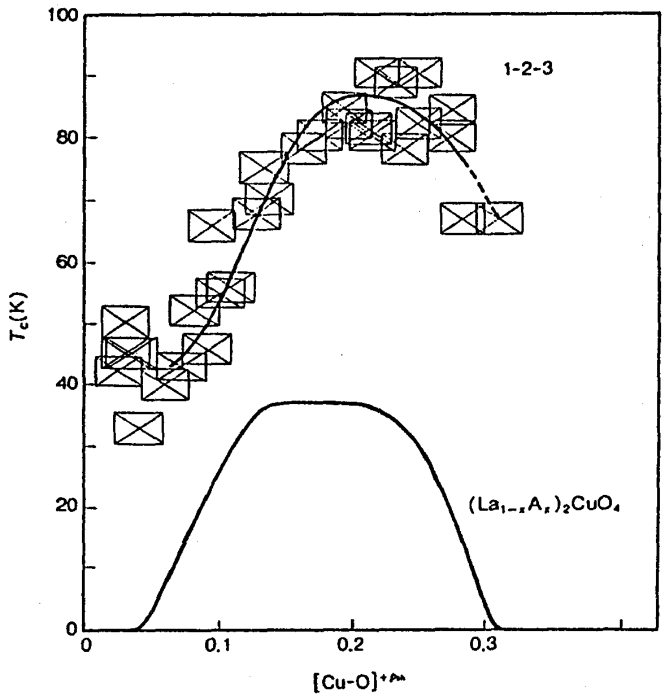


図 4.1 CuO_2面内のホール濃度$[Cu\text{-}O]^p$とT_cの関係. A=Sr,Ba,Ca. Ref.5).

存性として局在性と遍歴性を得ることができる.

今回はCuのd軌道だけに注目したが，Oのp軌道も含めて考慮しなければならないのかもしれない．今後もさらに発展させ検討していく必要があるとおもわれる．

Acknowledgements

本修士論文の作成にあたって，たくさんの方々にご援助，ご協力を賜りました．中嶋貞雄教授には適切なご指導，多くのご助言を頂きありがとうございました．また，山下佳男氏，尾崎浩司氏，長谷川智明氏，物理大学院研究室の方々にも暖かいお心遣いを頂きました．

この場を借りて厚く感謝の意を表します．

1990 年 2 月 28 日

Appendix A

$c_{i\sigma}=\gamma_{i\sigma}^{\dagger}$, $\nu_{i\sigma}=\gamma_{i\sigma}^{\dagger}\gamma_{i\sigma}$と定義すると，

$$
\begin{aligned}
n_{i\sigma} &= c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma} \\
&= \gamma_{i\sigma}\gamma_{i\sigma}^{\dagger} = 1-\gamma_{i\sigma}^{\dagger}\gamma_{i\sigma} \\
&= 1-\nu_{i\sigma} \ ,
\end{aligned}
$$

となるので，

$$
\begin{aligned}
H &= \sum_{i,j}\sum_{\sigma} t_{ij}\gamma_{i\sigma}\gamma_{j\sigma}^{\dagger} + U\sum_{i}(1-\nu_{i\uparrow})(1-\nu_{i\downarrow}) - \mu_0\sum_{i}\sum_{\sigma}(1-\nu_{i\sigma}) \\
&= \sum_{i,j}\sum_{\sigma} t_{ij}(-\gamma_{i\sigma}^{\dagger}\gamma_{j\sigma}) + U\sum_{i}(1-\nu_{i\uparrow}-\nu_{i\downarrow}+\nu_{i\uparrow}\nu_{i\downarrow}) - \mu_0\sum_{i}\sum_{\sigma}(1-\nu_{i\sigma}) \\
&= -\sum_{i,j}\sum_{\sigma} t_{ij}\gamma_{i\sigma}^{\dagger}\gamma_{j\sigma} + U\sum_{i}\nu_{i\uparrow}\nu_{i\downarrow} - (U-\mu_0)\sum_{i}\sum_{\sigma}\nu_{i\sigma} + (U-\mu_0)N \ .
\end{aligned}
$$

$(U-\mu_0)$ をホールの化学ポテンシャルと考えれば (1.1) と同形になる.

Appendix B

Hubbard Hamiltonian (1.1) を

$$H = H_0 + H_{\mathrm{mix}} \ , \tag{B.1}$$

とする．ここで，

$$
\begin{aligned}
H_0 &= -t\sum_{ij}\sum_{\sigma}\{(1-n_{i-\sigma})c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}(1-n_{j-\sigma}) + n_{i-\sigma}c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}n_{j-\sigma}\} \\
&\quad + U\sum_{i}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} - \mu_0\sum_{i}\sum_{\sigma}c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma} \ , \\
H_{\mathrm{mix}} &= -t\sum_{ij}\sum_{\sigma}\{(1-n_{i-\sigma})c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}n_{j-\sigma} + n_{i-\sigma}c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}(1-n_{j-\sigma})\} \ .
\end{aligned}
$$

変換のパラメーターをεとして (B.1) を，

$$H = H_0 + \varepsilon H_{\mathrm{mix}} \ , \tag{B.2}$$

とする．ハバード・ハミルトニアン (1.1) では$\varepsilon=1$であるが，strong correlation limit では H_{mix}はほとんどないのでεを小さいと考えて，カノニカル変換：

$$\mathcal{H} = e^{-i\varepsilon S}He^{i\varepsilon S} \ ,$$

でεの２次までの近似をする．その後，εの１次の項を０として$H_{\rm mix}$を含まないようにSを決める．(１次の項を０とすると２次の項も$H_{\rm mix}$を含まないので１次を０にするだけで$H_{\rm mix}$の効果は十分小さくできる)

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= e^{-i\varepsilon S}(H_0+\varepsilon H_{\rm mix})e^{i\varepsilon S} \\ &\approx \{1-i\varepsilon S+\frac{1}{2}(-i\varepsilon S)^2\}(H_0+\varepsilon H_{\rm mix})\{1+i\varepsilon S+\frac{1}{2}(i\varepsilon S)^2\} \\ &\approx H_0+\varepsilon(H_0+i[H_0,S])+\varepsilon^2(i[H_{\rm mix},S]-\frac{1}{2}[[H_0,S],S])\ . \end{aligned} \tag{B.3}$$

εの１次の項を０:

$$H_{\rm mix}+i[H_0,S]=0\ ,$$

とすると，

$$H_0S-SH_0=iH_{\rm mix}. \tag{B.4}$$

従って (B.3) は，$\varepsilon=1$ に戻して，

$$\mathcal{H}=H_0+\frac{i}{2}[H_{\rm mix},S]\ , \tag{B.5}$$

となる．

ここで (B.5) で$[H_{\rm mix},S]$がわかれば，$\mathcal{H}$もわかるので$[H_{\rm mix},S]$を調べる．S行列の LHB-UHB 間の遷移の行列要素を取り出せばよいので，射影演算子 P_1,P_2を定義する．

$$\begin{aligned} P_1 &= p(i,0)p(j,0)+p(i,1)p(j,0)+p(i,0)p(j,1)+p(i,1)p(j,1)\ , \\ P_2 &= p(i,2)p(j,0)+p(i,0)p(j,2)+p(i,2)p(j,1)+p(i,1)p(j,2)+p(i,2)p(j,2)\ . \end{aligned}$$

ここで，

$$\begin{aligned} p(i,0) &= (1-n_{i\uparrow})(1-n_{i\downarrow})\ , \\ p(i,1) &= (1-n_{i\uparrow})n_{i\downarrow}+n_{i\uparrow}(1-n_{i\downarrow})\ , \\ p(i,2) &= n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}\ . \end{aligned}$$

これらを用いると $H_0,H_{\rm mix}$は，

$$\begin{aligned} H_0 &= P_1HP_1+P_2HP_2\ , \\ H_{\rm mix} &= P_1HP_2+P_2HP_1\ , \end{aligned}$$

と表わすことができる．交換関係 (B.4) は，

$$(P_1HP_1+P_2HP_2)S-S(P_1HP_1+P_2HP_2)=i(P_1HP_2+P_2HP_1)\ . \tag{B.6}$$

と書き換えられる．

P_1SP_2の行列要素を得るには，(B.6) の左から P_1，右から P_2をかける；

$$P_1\{(P_1HP_1+P_2HP_2)S-S(P_1HP_1+P_2HP_2)\}P_2=iP_1(P_1HP_2+P_2HP_1)P_2\ .$$

射影演算子の性質 $P_1P_2=0, P_1P_1=P_1$ を用いて，

$$P_1HP_1P_1SP_2 - P_1SP_2P_2HP_2 = iP_1HP_2 \ ,$$

ここで $\langle P_2HP_2\rangle, \langle P_1HP_1\rangle$ と平均で置き換えると，

$$(\langle P_2HP_2\rangle - \langle P_1HP_1\rangle)P_1SP_2 = iP_1HP_2 \ .$$

$\langle P_2HP_2\rangle, \langle P_1HP_1\rangle$ の差は UHB と LHB のエネルギーの差と見なせるので，

$$\langle P_2HP_2\rangle - \langle P_1HP_1\rangle = U \ .$$

従って，

$$P_1SP_2 = -i\frac{P_1HP_2}{U} \ .$$

また (B.6) の左から P_2，右から P_1 をかけると，同様にして P_2SP_1 の行列要素を得る．

$$P_2SP_1 = i\frac{P_2HP_1}{U} \ .$$

左から P_1，右から P_1 をかけると，

$$P_1HP_1SP_1 - P_1SP_1HP_1 = 0 \ ,$$

となるので P_1SP_1 の行列要素を得る：

$$P_1SP_1 = \gamma P_1 .$$

同様に左から P_2，右から P_2 をかけると P_2SP_2 の行列要素を得る：

$$P_2SP_2 = \gamma P_2 \ .$$

ここでγは任意定数である．

これらより (B.5) は，

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= H_0 + \frac{i}{2}(P_1+P_2)[H_{\mathrm{mix}}, S](P_1+P_2) \\ &= H_0 - \frac{1}{U}(P_1HP_2HP_1 - P_2HP_1HP_2) \ . \end{aligned} \qquad (B.7)$$

ここで $P_1HP_2HP_1, P_2HP_1HP_2$ はそれぞれ，

$$\begin{aligned} &P_1HP_2HP_1 \\ =&P_1HP_2P_2HP_1 \\ =&\{-t\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}(1-n_{i-\sigma})c^\dagger_{i\sigma}c_{j\sigma}n_{j-\sigma}\}\{-t\sum_{\langle k,l\rangle}\sum_{\tau}n_{k-\tau}c^\dagger_{k\tau}c_{l\tau}(1-n_{l-\tau})\} \\ =&-t^2\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}\{n_{i\sigma}(1-n_{i-\sigma})(1-n_{j\sigma})n_{j-\sigma} + c^\dagger_{i\sigma}c_{i-\sigma}c_{j\sigma}c^\dagger_{j-\sigma}\} \ , \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&P_2HP_1HP_2\\
&=P_2HP_1P_1HP_2\\
&=\{-t\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}n_{i-\sigma}c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}(1-n_{i-\sigma})\}\{-t\sum_{\langle k,l\rangle}\sum_{\tau}(1-n_{k-\tau})c_{k\tau}^{\dagger}c_{l\tau}n_{l-\tau}\}\\
&=-t^2\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}\{c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i-\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}c_{j-\sigma}+n_{i\sigma}n_{i-\sigma}(1-n_{j\sigma})(1-n_{j-\sigma})\}\ ,
\end{aligned}
$$

となるので (B.7) は,

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}=H_0-\frac{t^2}{U}\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}\{&n_{i\sigma}(1-n_{i-\sigma})(1-n_{j\sigma})n_{j-\sigma}+c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i-\sigma}c_{j\sigma}c_{j-\sigma}^{\dagger}\\
&-n_{i\sigma}n_{i-\sigma}(1-n_{j\sigma})(1-n_{j-\sigma})+c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i-\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}c_{j-\sigma}\}\ .
\end{aligned}
$$

ここで $J=\dfrac{2t^2}{U}$ と定義し, $\mathcal{H}$を H_{tJ} と書き換えると,

$$
\begin{aligned}
H_{tJ}=&-t\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}\{(1-n_{i-\sigma})c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}(1-n_{j-\sigma})+n_{i-\sigma}c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}n_{j-\sigma}\}\\
&-\frac{J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}\{c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i-\sigma}c_{j\sigma}c_{j-\sigma}^{\dagger}+c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i-\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma}c_{j-\sigma}\\
&\qquad+n_{i\sigma}(1-n_{i-\sigma})(1-n_{j\sigma})n_{j-\sigma}-n_{i\sigma}n_{i-\sigma}(1-n_{j\sigma})(1-n_{j-\sigma})\}\\
&+U\sum_{i}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}-\mu_0\sum_{i}\sum_{\sigma}c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}
\end{aligned}
$$

となり H_{tJ}ハミルトニアン (2.1) を得る.

Appendix C

エネルギー・ギャップ (3.6) よりギャップ方程式 (3.8) を求める.
BCS の秩序パラメーターϕをグリーン関数を用いて書き換える.

$$
\begin{aligned}
\phi&=2\langle a_{i\uparrow}a_{j\downarrow}\rangle\\
&=2\langle T_\tau\ a_{i\uparrow}(\tau)a_{j\downarrow}(\tau+0^+)\rangle\\
&=-2F^{\dagger}(i,\tau;j,\tau+0^+)\\
&=-2\frac{T}{N}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\omega}F^{\dagger}(\mathbf{k},i\omega)e^{i\{\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}-\omega(\tau-\tau-0^+)\}}\\
&=-2\frac{T}{N}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\omega}\frac{1}{2}(1-\delta)\frac{\Delta(\mathbf{k})}{(-i\omega)^2-E^2(\mathbf{k})}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}}\\
&=\frac{T}{N}(1-\delta)\sum_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}}\Delta(\mathbf{k})\sum_{\omega}\frac{1}{\omega^2+E^2(\mathbf{k})}
\end{aligned}
$$

ここで$\omega=(2n+1)\pi T$を代入して，

$$=\frac{T}{N}(1-\delta)\sum_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}}\Delta(\mathbf{k})\sum_{n}\frac{1}{(2n+1)^2\pi^2T^2+E^2(\mathbf{k})}$$

ここで$\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{x^2+(2n-1)^2}=\frac{\pi}{4x}\tanh\frac{\pi x}{2}$ を用いて，

$$=\frac{1}{2N}(1+\delta)\sum_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}}\frac{\Delta(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})}\tanh\frac{E(\mathbf{k})}{2T}$$

となるので$\Delta(\mathbf{k})$ は，

$$\Delta(\mathbf{k})=\frac{1}{2N}(1+\delta)\sum_{\mathbf{k}'}\{t\sum_{j}e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_{ij}}+J\sum_{j}e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_{ij}}\}\frac{\Delta(\mathbf{k}')}{E(\mathbf{k}')}\tanh\frac{E(\mathbf{k}')}{2T}$$

これに (3.9) を用いると，ギャップ方程式 (3,8)

$$\Delta(\mathbf{k})=\frac{(1+\delta)}{2N}\sum_{\mathbf{k}'}\{\varepsilon_0(\mathbf{k}')+J_0(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\}\frac{\Delta(\mathbf{k}')}{E(\mathbf{k}')}\tanh\frac{E(\mathbf{k}')}{2T}\ .$$

を得る．

Appendix D

ギャップ方程式 (3.8) に (3.5),(3.6),(3.7),(3.9) を代入する．ここではκJを小さいと考えて，

$$\varepsilon(\mathbf{k})=\frac{1}{2}(1+\delta)\sum_{j}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}}$$

とすると，

$$\begin{aligned}\Delta(\mathbf{k})=\frac{1}{2N}(1+\delta)\sum_{\mathbf{k}'}\Bigg[&\{\varepsilon_0(\mathbf{k}')+J_0(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\}\\&\times\frac{\Delta(\mathbf{k}')}{[\{\frac{1}{2}(1+\delta)\varepsilon_0(\mathbf{k}')-\mu\}^2-|\Delta(\mathbf{k}')|^2]^{\frac{1}{2}}}\\&\times\tanh\frac{[\{\frac{1}{2}(1+\delta)\varepsilon_0(\mathbf{k}')-\mu\}^2-|\Delta(\mathbf{k}')|^2]^{\frac{1}{2}}}{2T}\Bigg]\ .\end{aligned}$$

これに (3.9'),(3.11) を代入して，$\displaystyle\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\cdots=\frac{1}{4\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}dk_xdk_y\cdots$ を用いて和を積分に

換える.

$$
\begin{aligned}
&\phi(\cos k_x - \cos k_y) = \\
&\quad \frac{(1+\delta)}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y \Bigg[\{2t(\cos k'_x + \cos k'_y) + 2J(\cos(k'_x - k_x) + \cos(k'_y - k_y))\} \\
&\quad \times \frac{\phi(\cos k'_x - \cos k'_y)}{[\{(1+\delta)t(\cos k'_x + \cos k'_y) - \mu\}^2 - |\phi(\cos k'_x - \cos k'_y)|^2]^{\frac{1}{2}}} \\
&\quad \times \tanh \frac{[\{(1+\delta)t(\cos k'_x + \cos k'_y) - \mu\}^2 - |\phi(\cos k'_x - \cos k'_y)|^2]^{\frac{1}{2}}}{2T} \Bigg] .
\end{aligned}
$$

さらに (3.12)

$$
\nu = \frac{2\mu}{(1+\delta)t} , \ \theta_c = \frac{2T_c}{(1+\delta)t} ,
$$

を用いると, (3.11)

$$
1 = \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y \frac{\frac{J}{t}(\cos k_x - \cos k_y)^2}{\cos k_x - \cos k_y - \nu} \tanh \frac{(\cos k_x + \cos k_y - \nu)}{2\theta_c} ,
$$

を得る.

Appendix E

$\langle n_{i\sigma} \rangle$ をグリーン関数で書き換える.

$$
\begin{aligned}
\langle n_{i\sigma} \rangle &= \langle a^\dagger_{i\sigma} a_{i\sigma} \rangle \\
&= \langle T_\tau \ a^\dagger_{i\sigma}(\tau) a_{i\sigma}(\tau + 0^+) \rangle \\
&= -2G(i, \tau; i', \tau') \\
&= -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\omega} \frac{1}{2}(1-\delta) \frac{i\omega + \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{(-i\omega)^2 - E^2(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}} \\
&= \frac{T}{N}(1-\delta) \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}} (i\omega + \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) \sum_{\omega} \frac{1}{\omega^2 + E^2(\mathbf{k})} \\
&= \frac{1}{2N}(1+\delta) \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}} \frac{i\omega + \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})} \tanh \frac{E(\mathbf{k})}{2T}
\end{aligned}
$$

従ってキャリア密度 (1.2)

$$
\delta = 1 - \frac{1}{N} \sum_{i} \sum_{\sigma} \langle n_{i\sigma} \rangle ,
$$

は,

$$\delta = 1 - \frac{1}{N}\sum_i \sum_\sigma \frac{1}{2N}(1+\delta)\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}} \frac{i\omega + \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})} \tanh\frac{E(\mathbf{k})}{2T}$$

であり, Appendix D と同様に計算すると (3.13)

$$\frac{1-2\delta}{1+\delta} = \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y \tanh\frac{(\cos k_x + \cos k_y - \nu)}{2\theta_c} ,$$

を得る.

References

1) 十倉好紀：日本物理学会誌 45(1990)901.
2) 福山秀敏：日本物理学会誌 44(1989)475.
3) 十倉好紀：固体物理 25(1990)618.
4) 斯波弘行：数理科学 26(1988)29.
5) 十倉好紀：パリティ別冊「高温超伝導」(1988)192.

全般的な参考文献として

· Sadao Nakajima : *Proc. 3rd Int. Symp. Foundation of Quantum Mechanics*, eds. S.Kobayashi, *et al* Phys. Soc. Japan, Tokyo,(1990)385.
· パリティ別冊「高温超伝導」(1988)(1989).
· 数理科学 26(1988)—特集「超伝導新理論の展望」.
· 固体物理 25(1990)—<高温超伝導—物質, 物性, 理論—>.