

超伝導と電子相関

東大・総合文化 小形正男

このサブゼミでは、超伝導という引力によるクーパー対形成メカニズムと、電子相関という強い斥力の2つがどのように競合し得るかということを考える。このテキストでは基本的なことがらをまとめた。

1. クーパー問題

最初にクーパー問題を復習しておこう [1,2]。まず真空中に↑スピンと↓スピンの2つの電子があるとして、全運動量を q 、相対運動量を k とすると、この状態は

$$|k + \frac{q}{2} \uparrow; -k + \frac{q}{2} \downarrow\rangle \quad (1)$$

と表される。

この系に相互作用があると、2つの電子の間に束縛状態ができることがある。相互作用は一般に全運動量を保存するので (Umklapp 散乱は考えないことにする)、2つの電子が互いに相互作用すると k が k' に変更をうける。結局、相互作用している場合の状態は (1) 式の線形結合

$$\sum_k C(k, q) |k + \frac{q}{2} \uparrow; -k + \frac{q}{2} \downarrow\rangle \quad (2)$$

と表される。係数 $C(k, q)$ はシュレディンガー方程式を満たすように決められる。

運動エネルギーは $\frac{\hbar^2}{2m} \{ (k + \frac{q}{2})^2 + (-k + \frac{q}{2})^2 \} = \frac{\hbar^2}{m} (k^2 + \frac{q^2}{4})$ だから ($k = |k|, q = |q|$)、シュレディンガー方程式は

$$\frac{\hbar^2}{m} (k^2 + \frac{q^2}{4}) C(k, q) + \sum_{k'} V(k, k') C(k', q) = E C(k, q) \quad (3)$$

となる。このような2体問題のシュレディンガー方程式は解ける。

$$\Lambda(k, q) = \sum_{k'} V(k, k') C(k', q) \quad (4)$$

とおくと、求めたい係数 $C(k, q)$ は

$$C(k, q) = \frac{\Lambda(k, q)}{E - \frac{\hbar^2}{m} (k^2 + \frac{q^2}{4})} \quad (5)$$

となる。これで一応 $C(k, q)$ は求まったが、新しく定義した関数 $\Lambda(k, q)$ が決まっていない。(5) 式を (4) 式に代入すると、 $\Lambda(k, q)$ の満たすべき式

$$\Lambda(k, q) = \sum_{k'} V(k, k') \frac{\Lambda(k', q)}{E - \frac{\hbar^2}{m} (k'^2 + \frac{q^2}{4})} \quad (6)$$

が得られる。関数 $\Lambda(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ が矛盾なく決定されなければならないという意味で、(6) 式を自己無撞着 (self-consistency) 方程式と呼ぶ。この式で $E < 0$ の解が得られたら、それが 2 電子の束縛状態の固有エネルギーである。

さてクーパーが超伝導の理解のために考えた問題は、 $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ が引力だとしたらどうなるかというものである。つまり

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -g \quad (\mathbf{k}, \mathbf{k}' < k_D) \quad (7)$$

とする。以下全運動量が $\mathbf{q} = 0$ という場合を考える。この場合自己無撞着方程式は

$$\Lambda(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}' < k_D} g \frac{\Lambda(\mathbf{k}')}{E - \frac{\hbar^2}{m} k'^2} \quad (8)$$

となり、右辺は $\mathbf{k}$ に依存しないから $\Lambda(\mathbf{k})$ も $\mathbf{k}$ に依存しない定数となる (ただし $k < k_D$)。これを Λ とおき、 $\mathbf{k}'$ の和を積分に直すと

$$\Lambda = - \frac{4\pi g}{(2\pi)^3} \int_0^{k_D} k'^2 dk' \frac{\Lambda}{E - \frac{\hbar^2}{m} k'^2} \quad (9)$$

右辺は $E < 0$ の束縛状態については、単調増加関数なので、最大値は $E \rightarrow 0_-$ のときで

$$\text{右辺} < \frac{gmk_D}{2\pi^2\hbar^2} \Lambda \quad (10)$$

である。

もし $gmk_D/2\pi^2\hbar^2 < 1$ ならば、右辺の最大値は Λ より小さいので、(9) 式を満たすような Λ の解は (0 以外に) 存在しない。これは $E < 0$ の束縛状態の解が存在しないということを意味する。逆に $gmk_D/2\pi^2\hbar^2$ が 1 より大きければ、適当な $E < 0$ の時に (9) 式の自己無撞着方程式の解が存在する。つまり 2 つの電子は束縛状態を作る。これは 1 電子の引力ポテンシャル問題と同じで、3 次元の場合に引力の強さがある臨界値を超えない限り束縛状態を作らないということに対応している。

もし空間次元が 2 次元であると $\mathbf{k}'$ の和は

$$\sum_{\mathbf{k}'} \rightarrow \frac{2\pi}{(2\pi)^2} \int_0^{k_D} k' dk' \quad (11)$$

となるので、 $E \rightarrow 0_-$ のときに積分が $\log$ 発散する。つまり、任意の大きさの引力があると、必ず束縛状態が存在する。さらに 1 次元では積分の発散はもっと強くなる。

上の計算は真空中に 2 つの電子があって、互いの相互作用で束縛状態を作るかどうかという問題であった。クーパーは、この問題を金属中でフェルミ面が存在する場合に拡張した。自己無撞着方程式の導出は今までとほとんど同じであるが、今度はフェルミ面の内部に電子が詰まっているので、考えている 2 つの電子はフェルミ面の外側 ($k > k_F, k' > k_F$) であるとしなければならない。その結果、仮定する引力相互作用も

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \begin{cases} -g & (k_F < k, k' < k_F + k_D) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (12)$$

であるとする。

フェルミ面が存在する場合に積分を直接実行してもよいが、応用上はフェルミ面上の状態密度を用いた近似計算の方が将来役に立つ。フェルミエネルギー $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ から計った電子のエネルギーを

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \epsilon_F \quad (13)$$

とおき、積分変数を k' から ϵ に変更する。状態密度 $N(\epsilon)$ を用いると k' 積分は一般に

$$\sum_{k'} \rightarrow \int N(\epsilon) d\epsilon \quad (14)$$

と変数変換できるので、自己無撞着方程式 (8) は

$$\Lambda = -g \int_0^{\omega_D} N(\epsilon) \frac{\Lambda}{E - 2\epsilon} d\epsilon = g \int_0^{\omega_D} N(\epsilon) \frac{\Lambda}{2\epsilon + |E|} d\epsilon \quad (15)$$

となる。ここで $\omega_D = \frac{\hbar^2 (k_F + k_D)^2}{2m} - \epsilon_F$ であり、束縛エネルギー E は $2\epsilon_F$ から測ることにする。

通常フェルミエネルギー ϵ_F は非常に大きく、 $\omega_D \ll \epsilon_F$ であると考えられる。このとき、積分領域 ($0 < \epsilon < \omega_D$) で状態密度はほぼ一定であるとして $N(0)$ と近似する。フェルミ面上の物理を議論する場合はこのような置き換えをしばしば用いる。計算が楽になるからという側面もあるが、現実問題としてフェルミエネルギーが大きいので十分正しい答えを与え、かつ物理的な描像が得られやすい。

この近似では

$$\Lambda = gN(0) \int_0^{\omega_D} d\epsilon \frac{\Lambda}{2\epsilon + |E|} = gN(0) \frac{\Lambda}{2} \ln \frac{2\omega_D + |E|}{|E|} \sim gN(0) \frac{\Lambda}{2} \ln \frac{2\omega_D}{|E|} \quad (16)$$

となり、必ず束縛状態の解が存在する。束縛エネルギーは

$$|E| = 2\omega_D e^{-\frac{2}{gN(0)}} \quad (17)$$

と得られる。(BCS 理論の結果と指数関数の肩の 2 倍が異なるが、これはクーパー問題でフェルミ面より外側だけを考えたからである)

この結果は、引力 g が少しでもあれば必ず束縛状態ができることを示している。一方真空中の 2 電子問題では、空間 3 次元の場合、引力の大きさがある程度以上大きくなければ束縛状態が得られないという結論であった。この違いは何かと言うと、『フェルミ面の存在』によるものである。フェルミ面があるために束縛状態をつくるべき電子は k_F 付近の電子となり、フェルミ面上の状態密度 $N(0)$ が十分にあるために束縛状態を作ることができたのである。一方の真空中では、いわば $\epsilon_F \rightarrow 0$ の極限の場合であって、3 次元の状態密度 $N(\epsilon) \propto \sqrt{\epsilon}$ が 0 になってしまうので束縛状態が作りづらい。

2. クーロン斥力がある場合のクーパー対

金属中では一般に遮蔽されているとはいえ、クーロン斥力によって電子同志は反発する。それにもかかわらず、弱い引力 g によって束縛状態を作ることができるであろうか？これが次の問題

である。問題を簡単化して Morel と Anderson[3] によって考えられたモデルを考えよう。このモデルでは相互作用を

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \begin{cases} V - g & (k_F < k, k' < k_F + k_D) \\ V & (\text{それ以外で、かつ } k, k' < k_c) \end{cases} \quad (18)$$

であるとする。

まずくりこみ群の考え方でクーロン斥力 V の効果がどうなるかを考えてみよう [4]。図 1 のようなファインマンダイアグラムを考える。いま議論したい電子はフェルミ面近傍のものであるので、フェルミ面からずっと離れた高エネルギーの電子の寄与は先に考慮してしまって、低エネルギーの電子に対する有効クーロン斥力を考えようというのがくりこみ群の考え方である。裸のクーロン斥力 V がくりこまれて V^* になると考える。

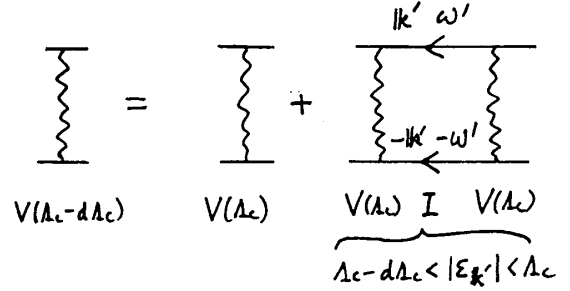


図 1

カットオフを Λ_c とおくと、図 1 のファインマンダイアグラムは

$$V(\Lambda_c - d\Lambda_c) = V(\Lambda_c) + V(\Lambda_c)IV(\Lambda_c) \quad (19)$$

と書ける。ここで I は中間状態 (途中の電子のエネルギーがカットオフ以上のもの) での積分であり、具体的にはグリーン関数を用いて

$$\begin{aligned} I &= \sum_{\Lambda_c - d\Lambda_c < |\epsilon_{k'}| < \Lambda_c} \int \frac{d\omega'}{2\pi} iG_0(\mathbf{k}', \omega')G_0(-\mathbf{k}', -\omega') \\ &= N(0) \int_{\Lambda_c - d\Lambda_c}^{\Lambda_c} d\epsilon' \int \frac{d\omega'}{2\pi} i \left(\frac{1}{\omega' - \epsilon' + i\delta} \frac{1}{-\omega' - \epsilon' + i\delta} + \frac{1}{\omega' + \epsilon' - i\delta} \frac{1}{-\omega' + \epsilon' - i\delta} \right) \\ &= -2N(0) \int_{\Lambda_c - d\Lambda_c}^{\Lambda_c} d\epsilon' \frac{1}{2\epsilon'} = -N(0) \frac{d\Lambda_c}{\Lambda_c} \end{aligned} \quad (20)$$

である (ファインマンダイアグラムの規則によって、始めの式で虚数 i がついた)。これから $V(\Lambda_c)$ に対するくりこみ群の方程式

$$dV = V(\Lambda_c) - V(\Lambda_c - d\Lambda_c) = V^2 N(0) \frac{d\Lambda_c}{\Lambda_c} \quad (21)$$

が得られる。(21) 式を微分方程式として解くと ($\frac{dV}{V^2} = N(0) \frac{d\Lambda_c}{\Lambda_c}$ から)

$$\frac{1}{V(\Lambda_c)} = \frac{1}{V} - N(0) \ln \frac{\Lambda_c}{\epsilon_F} = \frac{1}{V} + N(0) \ln \frac{\epsilon_F}{\Lambda_c} \quad (22)$$

である。ただしカットオフが $\Lambda_c = \epsilon_F$ のときの初期値を V とした。今、興味あるエネルギースケールは $\Lambda_c = \omega_D$ のときなので、その低エネルギーでの有効的なクーロン斥力は

$$V^* = V(\omega_D) = \frac{V}{1 + VN(0) \ln \frac{\epsilon_F}{\omega_D}} \quad (23)$$

となる。 $\omega_D = 100\text{K}$ くらい、 $\epsilon_F = 10000\text{K}$ くらいとすると、 $\ln(\epsilon_F/\omega_D) = 4.6$ なので、たとえば $VN(0) \sim 1$ くらいの強いクーロン斥力の場合でも有効斥力はその 0.18 倍に弱められることがわかる。

又はくりこみ群といわずに、Dyson 方程式として

$$V^* = V + VIV^* \quad (24)$$

を用いても同じ結果が得られる。ただし中間状態の積分 I は ω_D から ϵ_F まですべてにわたってとる。(20) 式と同様にして

$$I = -N(0) \ln \frac{\epsilon_F}{\omega_D} \quad (25)$$

となるので

$$V^* = \frac{V}{1 - VI} = \frac{V}{1 + VN(0) \ln \frac{\epsilon_F}{\omega_D}} \quad (26)$$

が得られる。

3. クーパー対の形

実際にこのようなクーロン斥力がある場合のクーパー対の形、つまり 2 電子の束縛状態のようすを調べてみよう。まず、単純に引力 g だけの場合はクーパー対の波動関数は図 2(a) のようになる。クーパー対の幅はコヒーレンス長 $\xi = \hbar v_F / \Delta_0$ 程度である。波動関数の細かい振動は k_F の波数によるものである。これに対してクーロン斥力がある場合のクーパー対の波動関数は図 2(b) のようになる。原点付近で波動関数が小さくなっているのは、クーパー対を形成する 2 つの電子がお互いに避け合った束縛状態を作っていることを示している。

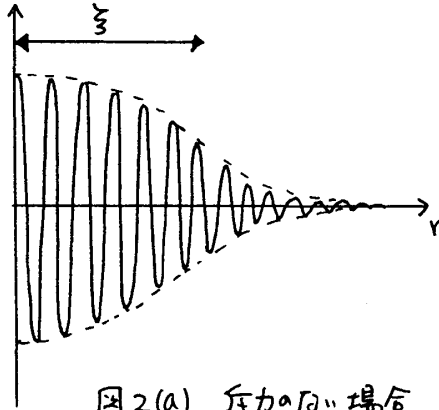


図 2(a) 斥力のない場合

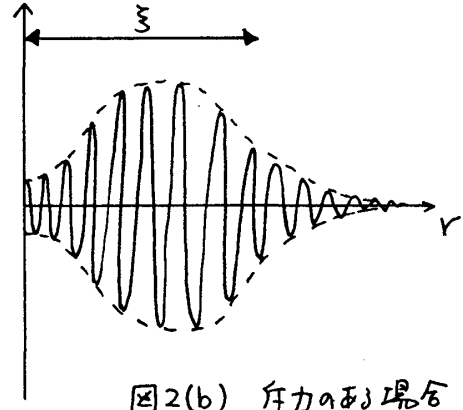


図 2(b) 斥力のある場合

図 2(b) のような波動関数が得られることを示すために、まずモデル (18) 式における $\Lambda(k)$ の形を具体的に求めてみよう。相互作用は状態密度をかけて

$$N(0)V(k, k') = \begin{cases} -\lambda + \mu & (k_F < k, k' < k_F + k_D) \\ \mu & (\text{それ以外で、かつ } k, k' < k_c) \end{cases} \quad (18')$$

というパラメータとする。 $V(k, k')$ の 2 つの領域に対応して、 $\Lambda(k)$ も一定値ではなく

$$\Lambda(k) = \begin{cases} \Lambda & (k_F < k' < k_F + k_D) \\ \Lambda' & (k' > k_F + k_D) \end{cases} \quad (27)$$

とおく。この仮定のもとで束縛エネルギーを決める自己無撞着の方程式は

$$\begin{aligned}\Lambda &= (\lambda - \mu) \int_0^{\omega_D} d\epsilon \frac{\Lambda}{2\epsilon + |E|} - \mu \int_{\omega_D}^{\epsilon_F} d\epsilon \frac{\Lambda'}{2\epsilon + |E|} = (\lambda - \mu) \frac{\Lambda}{2} \ln \frac{2\omega_D}{|E|} - \mu \frac{\Lambda'}{2} \ln \frac{\epsilon_F}{\omega_D} \\ \Lambda' &= -\mu \int_0^{\omega_D} d\epsilon \frac{\Lambda}{2\epsilon + |E|} - \mu \int_{\omega_D}^{\epsilon_F} d\epsilon \frac{\Lambda'}{2\epsilon + |E|} = -\mu \frac{\Lambda}{2} \ln \frac{2\omega_D}{|E|} - \mu \frac{\Lambda'}{2} \ln \frac{\epsilon_F}{\omega_D}\end{aligned}\quad (28)$$

となる。これを連立させて解くと、

$$\begin{aligned}\Lambda' &= -\frac{\frac{\mu}{2} \ln \frac{2\omega_D}{|E|}}{1 + \frac{\mu}{2} \ln \frac{\epsilon_F}{\omega_D}} \Lambda, \\ \Lambda &= (\lambda - \mu^*) \frac{\Lambda}{2} \ln \frac{2\omega_D}{|E|}\end{aligned}\quad (29)$$

ただし

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \frac{\mu}{2} \ln \frac{\epsilon_F}{\omega_D}} \quad (30)$$

である[†]。式 (29) からわかるように、引力は (18') で定義した裸の $\lambda - \mu$ ではなく、くりこまれた斥力 μ^* を用いた $\lambda - \mu^*$ になっている。もし $\lambda - \mu^* > 0$ であれば束縛状態が存在する。このような μ^* が現れてクーロン斥力の効果が弱められるのは、式 (29) の導出からわかるように Λ' が Λ と逆符号になるということが重要な役割を果たしている。

このことはクーパー対の波動関数を調べることによってさらに理解できる。実空間の波動関数は、式 (1) をフーリエ変換すると得られる。つまり

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{i(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2})\mathbf{r}_1 + i(-\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2})\mathbf{r}_2} C(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \quad (31)$$

を求めてみればよい。 $\mathbf{q} = 0$ という重心が止まった状態のみに限ると

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} C(\mathbf{k}) \quad (32)$$

である。

これを具体的に計算してみると ($E = 2\epsilon_F - \Delta_0$, $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = r$, $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ などにおいて)

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= - \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \frac{\Lambda(\mathbf{k})}{2\epsilon_k - 2\epsilon_F + \Delta_0} \\ &= -\frac{1}{4\pi^2} \int \sin \theta d\theta k^2 dk e^{ikr \cos \theta} \frac{\Lambda(k)}{2\epsilon_k - 2\epsilon_F + \Delta_0} \\ &= -\frac{1}{2\pi^2 r} \int_{k_F}^{k_c} \frac{k \sin kr}{2\epsilon_k - 2\epsilon_F + \Delta_0} \Lambda(k) dk\end{aligned}\quad (33)$$

[†] (30) 式は、式 (23) の $VN(0)$ を μ とおいたものと比較すると、分母が $\mu/2$ となっているところが違っている。これはクーパー問題を解くときにフェルミ面より上の状態しか考慮しなかったからである。BCS 理論ではフェルミ面上下の 2 つの寄与があって 2 倍になる。

となる。クーパー対の相対距離 r が大きいときは、 k 積分のうち $k = k_F$ 付近のみが重要になる。したがってこの領域では、クーパー対の波動関数はクーロン斥力の有無によらず同じような振舞をする。つまりコヒーレンス長 $\xi = \hbar v_F / \Delta_0$ くらいの範囲にひろがっている。

一方 r が小さいときは、広い領域の k 積分がきいてくる。 $\Lambda(k)$ は $k > k_F + k_D$ の領域で逆符号になるので、正負の打ち消しがおこって波動関数は小さくなる。この様子を示したのが図 2(b) である。つまり、クーパー対は実空間においては互いに近づくことを避けていることになる。

このことについての物理的な説明は色々な立場から可能である。たとえば次のような解釈ができる。エネルギースケールでいうと、高いエネルギーのところ $\omega_D < \epsilon < \epsilon_F$ では2つの電子対は斥力を感じるので、短い時間スケールの間に対が近づくことは避けている。かわりに低エネルギー $\epsilon < \omega_D$ の引力を利用して対をつくっている。このような $1/\omega_D$ よりもゆっくりとした時間スケールでは、1つの電子が通過したあとの格子のゆがみがまだ残っているので、もう1つの電子がその残り香を通して引力を感じているわけである。

4. 異方的超伝導の場合

クーロン斥力を避ける方法がもう1つある。それが異方的なクーパー対を作った場合である。たとえば k と k' が2次元面内にあるとして、引力相互作用が

$$V(k, k') = -g \cos 2(\theta - \theta') + V \quad (k_F < k, k' < k_F + k_D) \quad (34)$$

であるとしよう。ここで θ, θ' は k と k' の2次元面内の角度であるとする。この引力の k, k' 依存性を図 3(a) に示した。

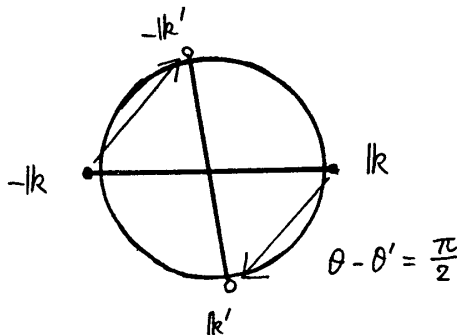


図 3. (a)

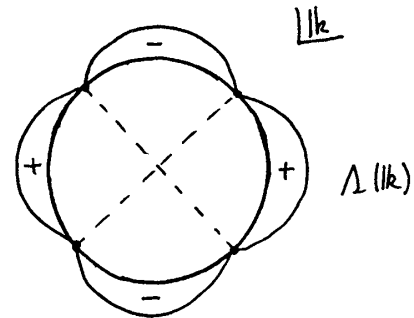


図 3 (b)

自己無撞着方程式は

$$\Lambda(k) = \sum_{k'} V(k, k') \frac{\Lambda(k')}{E - 2\epsilon_{k'}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta' \int_{k_F}^{k_F + k_D} \{g \cos 2(\theta - \theta') - V\} \frac{\Lambda(k')}{2\epsilon_{k'} - 2\epsilon_F + |E|} k' dk' \quad (35)$$

となる。この方程式の解としては

$$\Lambda(k) = \Lambda \cos 2\theta \quad (k_F < k < k_F + k_D) \quad (36)$$

という関数形のものを考えればよいことがわかる。

この関数形を仮定すると

$$\Lambda = \frac{g}{4\pi} \int_{k_F}^{k_F+k_D} \frac{\Lambda}{2\epsilon_{k'} - 2\epsilon_F + |E|} k' dk' = \frac{g}{2} N(0) \int_0^{\omega_D} d\epsilon \frac{\Lambda}{2\epsilon + |E|} = \frac{g}{2} N(0) \frac{\Lambda}{2} \ln \frac{2\omega_D}{|E|} \quad (37)$$

となる。クーロン斥力 V の項はいくら大きくても角度積分によって 0 になってしまい、全く効かなくなる。結局引力 g の部分だけが効いてきて、必ず束縛状態が形成されることが示される。 $\Lambda(\mathbf{k})$ で表されるクーパー対の符号を図 3(b) に示した。 $\theta = 0$ または π の方向では $\Lambda(\mathbf{k})$ は正であり、 $\theta = \frac{\pi}{2}$ の方向では $\Lambda(\mathbf{k}) = -\Lambda$ で負となっている。これはちょうど図 3(a) の異方的な引力と合致している。前節ではクーロン斥力を避けるために $\Lambda(k)$ の k の大きい部分が負になっていたが、今度の場合は $\mathbf{k}$ の角度方向で Λ の正負の交替が起こってクーロン斥力を避けることに成功している。

具体的に異方的な引力がどのようなモデルで可能であるか考えてみよう。例として、2 次元正方格子での最近接格子点間の引力をとりあげる。フーリエ変換すると

$$-\sum_{(i,j)} g n_{i\uparrow} n_{j\downarrow} = -\frac{g}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} (\cos q_x + \cos q_y) c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}'\downarrow} \quad (38)$$

となる。いろいろな成分のうち $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ のクーパー対間の相互作用だけを取り出すと

$$-\frac{g}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (\cos q_x + \cos q_y) c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \quad (39)$$

となる。これが図 3(a) のような相互作用を与えるものであることがわかる。例えば $(q_x, q_y) = (\pi, \pi)$ の場合には $+2g$ の相互作用であり、反対に $(q_x, q_y) = (0, 0)$ の場合には $-2g$ という反対符号になっている。

このような最近接の相互作用はスピン間の超交換相互作用

$$J \sum_{(i,j)} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (40)$$

でも得られる。この相互作用が高温超伝導のメカニズムの本命であると考えられている。この相互作用のために、隣同志の格子点上に電子がいるとスピンが反強磁性的つまり $\uparrow$ スピンと $\downarrow$ スピンに揃ってスピン一重項を形成したがるようになる。これは実空間におけるクーパー対そのものである。このため高温超伝導では、ほとんど実空間の隣同志の格子点上でクーパー対が形成されている状況に近くなっていると考えられている。

5. クーパー対の広がり と 強相関

今まで考えたようなクーパー対だとすると、1 つの対の電子はお互いに近寄ることではない。しかし BCS 状態では、1 つ 1 つのクーパー対は広がり ξ を持っていて、多くのクーパー対が重なり合っている。その場合に強いクーロン斥力があっても超伝導状態が安定かどうかは自明なことではない。

それについては、同じ格子点上に $\uparrow$ スピンと $\downarrow$ スピンが決してこないという波動関数を考えて調べられている [5]。具体的には、2 重占有状態を排除する演算子

$$P_G = \prod_i (1 - n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}) \quad (41)$$

を用いて、

$$P_G|BCS\rangle \quad (42)$$

というBCS状態に射影演算子をかけたものを考える。この波動関数を変分関数とみなして変分エネルギーが下るかどうかを数値的に調べることができ、実際に超伝導状態が安定であることが示されている。

最後に、波動関数(42)がRVB(Resonating Valence Bond)状態(価数結合の共鳴状態)に対応していることを示そう[5]。RVB状態とは、↑スピンと↓スピンの2つの電子が実空間で価数結合したもの(=実空間のクーパー対)が、空間全体にお互いに避け合いながら敷き詰められており、さらに量子効果によって様々な敷き詰め方の重ね合わせ(共鳴)が起こっている状態のことをいう[6]。実際に(42)式を変形すると

$$\begin{aligned} P_G P_N \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle &\propto P_G P_N \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= P_G P_N \prod_{\mathbf{k}} e^{\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle \\ &= P_G P_N \exp \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= P_G \frac{1}{(\frac{N}{2})!} \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right)^{\frac{N}{2}} |0\rangle \\ &= P_G \frac{1}{(\frac{N}{2})!} \left(\sum_{i,j} a_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right)^{\frac{N}{2}} |0\rangle = \text{RVB state} \quad (43) \end{aligned}$$

となる。途中 P_N は N 粒子状態への射影演算子、 a_{ij} は $v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}$ のフーリエ変換である。式(43)の最後の表式は実空間で書かれたRVB状態そのものである。

参考文献

- [1] L. N. Cooper: Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
- [2] BCS理論の原論文は J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer: Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [3] P. Morel and P. W. Anderson: Phys. Rev. **125**, 1263 (1962).
- [4] 『超伝導・超流動』恒藤敏彦(岩波講座 現代の物理学 17)(岩波 1993). 『固体の電子論』斯波弘行(パリティ物理学コース)(丸善 1996).
- [5] H. Yokoyama and H. Shiba: J. Phys. Soc. Japan **57**, 2482 (1988). C. Gros: Phys. Rev. **B38**, 931 (1988).
- [6] P. W. Anderson: Science **235**, 1196 (1987). P. W. Anderson: Mat. Res. Bull. **8**, 153 (1973).