

ハバード・モデルにおける密度の揺らぎ -超伝導不安定性は存在するか?-

九州東海大学工学部 西村 久

(1994年9月28日受理)

Abstract

ハバード・モデルの密度応答関数をダイアグラム法で計算する。風船型グラフを連鎖したものの総和をとる伝統的な乱雑位相近似 (RPA) は、ハバード相互作用 U が波数に依存しないために梯子型グラフからの補正をうけることによって、むしろ proper な RPA に修正される。つぎの段階の近似として maximally crossed diagrams の総和からの寄与がある。この場合、2種類のタイプからのスピン平行な粒子対のグラフが相殺して、残りのスピン反平行な粒子対伝播関数から構成されるチャンネルは超伝導不安定性に導かない。しかし、このグラフを連鎖したものの総和はシングレットな粒子対形成の不安定性に導く可能性がある。

§1. 緒論

銅酸化物高温超伝導体 (CuO_2 超伝導体) は強相関電子系と考えられる。ドーピングなどによってキャリアが生ずる前の超伝導体の母体 (例えば La_2CuO_4) は実験的に K_2NiF_4 型の反強磁性絶縁体であること、 CuO_2 超伝導体の転移温度 T_c が電子-フォノン相互作用によるものに較べて異常に高いこと、常伝導相における諸物性の異常なことなどがその理由であろう。

狭いバンドの強相関電子系を記述するハミルトニアンとして

$$H = \sum_{i,j,\sigma} T_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

がある。これは Wannier 表示で書かれたもので、 $a_{i\sigma}^\dagger$ などはサイト $\mathbf{R}_i$ におけるスピン σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$ または $+, -$) の電子の生成演算子など、 $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ は電子数の演算子、 T_{ij} は transfer integral, U はサイト内クーロン反発力ポテンシャルである。この相互作用は、金属強磁性の問題に接触型のクーロン反発として Slater などによって昔から採用されたものであるが、Hubbard が一連の仕事を精力的に行って以来ハバード・モデルと呼ばれている。¹⁾

大きい U の極限において超交換相互作用 $J \sum \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, $J = |T|^2 / U$, が (1) から導かれる。そして、これが反強磁性絶縁体を記述するハミルトニアンとなる。 CuO_2 超伝導体を記述するために、ドーピングや酸素欠損などによって生じたキャリアが空いたサイトを渡り歩くとして t - J モデル²⁾ が提案された。言わば超強相関モデルであるが、これが真相をついているかどうか現時点では不明である。

著者は数年前から CuO_2 超伝導体を対象としながら、(1) の相互作用に基づいて、i) ハバード・モデルにおける超伝導不安定性の議論、ii) 常伝導状態での電気伝導度、動的帯磁率の計算を試みてきた。³⁾ これま

での計算は、相互作用をこの論文のものと同等な電荷およびスピンの揺らぎの2次形式に変形してストラトノヴィッチ・ハバード変換による汎関数積分法を用い、電荷とスピンの揺らぎの項を別々に評価するというもので、その cross effects を完全に無視した。以降においては、(1) の全相互作用に基づいてハバード系の諸性質の計算と議論を試みたい。

まず、(1) はつぎのように変形される。

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1 \\ H_0 &= \sum_{i,j,\sigma} T_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} \\ H_1 &= -\frac{U}{4} \sum_i \sum_{\sigma,\sigma'} (1 + 3\sigma\sigma') a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma'}^\dagger a_{i\sigma'} a_{i\sigma} \end{aligned} \quad (1')$$

そして Wannier 表示から Bloch 表示

$$a_{k\sigma} = N^{-1/2} \sum_i a_{i\sigma} e^{ik \cdot R_i}$$

に移れば

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \\ H_1 &= \frac{g}{2} \sum_{k,k',q} \sum_{\sigma,\sigma'} (1 + 3\sigma\sigma') a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma'}^\dagger a_{k'-q\sigma'} a_{k+q\sigma} \\ g &= -\frac{U}{2N} < 0 \end{aligned} \quad (2)$$

となる。 ε_k はエネルギーバンドのスペクトルである。 H_1 の第1、第2項はそれぞれ電荷の揺らぎおよびスピンの揺らぎの相互作用に対応する。電荷およびスピンの揺らぎの項へのこの分離の仕方によって相互作用が見かけ上引力的になっていることに注意しよう。

この論文ではまず、密度応答関数をダイアグラム法で計算し、ハバード系に対する正当 (proper) な乱雑位相近似 (RPA) を導く。そして、そのつぎの段階の近似から超伝導不安定性の存否を議論する。⁴⁾ 諸物性の計算は次稿以降においてなされよう。

§2. 密度応答関数

密度応答関数 $Q(q, \omega)$ は

$$Q(q, \omega) = (i\hbar)^{-1} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle [n_q(t), n_{-q}] \rangle \quad (3)$$

とかかれる。ここに、 $\langle \cdots \rangle$ は温度 $T = 1/k_B \beta$ における熱平衡アンサンブル平均、 $[A, B] = AB - BA$

である。遅延グリーン関数

$$G^R(n_q(t), n_{-q}) = (i\hbar)^{-1} \theta(t) \langle [n_q(t), n_{-q}] \rangle \quad (4)$$

を導入すれば、 $Q(q, \omega)$ はそのフーリエ変換

$$Q(q, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G^R(n_q(t), n_{-q}) \quad (5)$$

で与えられる。したがって、 $Q(q, \omega)$ は温度グリーン関数

$$Q(q, u) = - \langle T n_q(u) n_{-q} \rangle \quad (6)$$

のフーリエ変換

$$Q(q, i\nu_l) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} du e^{i\nu_l u} Q(q, u) \quad (7)$$

を解析接続 ($i\nu_l \rightarrow \omega + i\delta, \delta = +0$) すれば得られる。⁵⁾ ここに、 $u (\rightarrow it/\hbar)$ は虚時間変数、 T は Wick の time ordering operator, $\nu_l = 2\ell\pi/\beta$ (ℓ は整数) は松原周波数である。温度グリーン関数 $Q(q, u)$ は相互作用表示で

$$Q(q, u) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle TS(\beta) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(u) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}(u) a_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'} \rangle_0 / \langle S(\beta) \rangle_0$$

$$S(\beta) = T \exp \left[- \int_0^\beta du H_1(u) \right]$$

とかかれる。 $S(\beta)$ の摂動展開から linked diagram expansion theorem

$$Q(q, u) = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta du_1 \cdots \int_0^\beta du_n$$

$$\times \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle TH_1(u_1) \cdots H_1(u_n) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(u) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}(u) a_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'} \rangle_0^{\text{linked}} \quad (8)$$

が導かれる。⁶⁾

まず、第0次の項はフーリエ変換をとって

$$\begin{aligned} Q^{(0)}(q, i\nu_l) &= 2\beta^{-1} \sum_n \sum_k G^0(k+q, i(\omega_n + \nu_l)) G^0(k, i\omega_n) \\ &\equiv -2\chi_0(q, i\nu_l) \end{aligned} \quad (9)$$

$$\chi_0(q, i\nu_l) = - \sum_k \frac{f(\varepsilon_{k+q}) - f(\varepsilon_k)}{\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - i\nu_l} \quad (10)$$

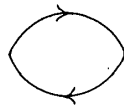
とかかれる。ここで、

$$G^0(k, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}, \quad \omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$$

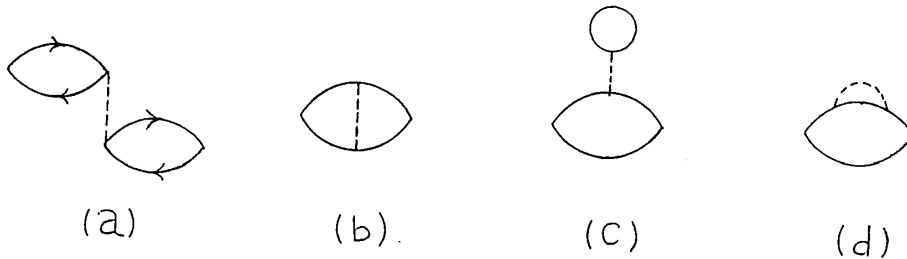
は0次の1電子グリーン関数で、1本の電子線のグラフに描かれる。そして、(9)は風船型のグラフ(第1図)で表わされる。すなわち、それは(9)の2本の電子線(粒子・空孔)を両端で結び、 n, k, σ に関する和をとることを意味する。そして、これは $-2\chi_0$ の寄与を与える。

1次の項はつぎの第2図のグラフ等である。相互作用が2本の電子線にまたがる図(a), (b)を問題にしよう。(c), (d)のような1電子グリーン関数の自己エネルギーへの補正を問題にすることは別の機会に行う。(a)の寄与は $(-2\chi_0)g(-2\chi_0)$, (b)の寄与は $(-2\chi_0)(-g)(-4\chi_0)$ であって、両者は同じオーダーの大きさ(この場合は異符号)である。このことはサイト内反発力ポテンシャル U が波数に依存しないために起こることである。

2次以上の項は(a)型(風船型の連鎖)、(b)型(梯子型)、およびそれらの混合図形から成り、これらは各次数においてすべて同じオーダーの大きさをもつことに注意しよう。その他の形のグラフからの寄与は小さい。



第1図 $Q^{(0)}(q, i\nu_l)$



第2図 1次のグラフ

§3. proper な RPA

伝統的な RPA $Q_{\text{TRAD}}(q, i\nu_l)$ はつぎの第3図のような風船型図形の連鎖の総和によって与えられる。

$$\begin{aligned}
 Q_{\text{TRAD}}(q, i\nu_l) &= (-2\chi_0) + (-2\chi_0)g(-2\chi_0) \\
 &\quad + (-2\chi_0)g(-2\chi_0)g(-2\chi_0) + \cdots \\
 &= -\frac{2\chi_0(q, i\nu_l)}{1 - \frac{U}{N}\chi_0(q, i\nu_l)}
 \end{aligned} \tag{11}$$

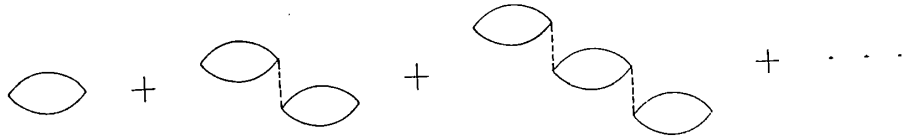
となる。

これに対して、先に注意したように、梯子型およびそれと風船型との混合図形がそれぞれ対応する次数において同じオーダーの大きさの寄与を与え、符号に応じて干渉する。従って、proper な RPA としてはこれらすべての図形を考慮し、総和しなければならない。これを系統的に行うにはつぎのようにすればよい。

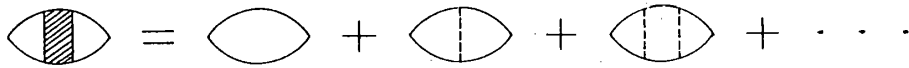
まず、1つの風船型図形の中に梯子を埋め込んだものの総和 $Q_L(q, i\nu_l)$ (第4図)

$$\begin{aligned}
 Q_L(q, i\nu_l) &= (-2\chi_0) + (-2\chi_0)(-g)(-4\chi_0) \\
 &\quad + (-2\chi_0)(-g)(-4\chi_0)(-g)(-4\chi_0) + \cdots \\
 &= -\frac{2\chi_0(q, i\nu_l)}{1 + \frac{2U}{N}\chi_0(q, i\nu_l)}
 \end{aligned} \tag{12}$$

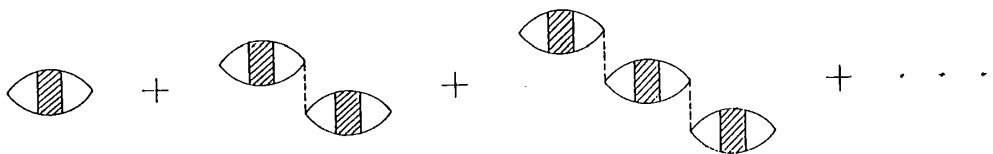
をとる。そして、proper な RPA はこの梯子型を繰り込んだ風船型図形 $Q_L(q, i\nu_l)$ の連鎖の総和 (第5図)



第3図 伝統的な RPA $Q_{\text{TRAD}}(q, i\nu_l)$



第4図 $Q_L(q, i\nu_l)$



第5図 proper な RPA $Q_{\text{RPA}}(q, i\nu_l)$

$$\begin{aligned} Q_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\nu_l) &= Q_L + Q_L g Q_L + Q_L g Q_L g Q_L + \cdots \\ &= -\frac{2\chi_0(\mathbf{q}, i\nu_l)}{1 + \frac{U}{N}\chi_0(\mathbf{q}, i\nu_l)} \end{aligned} \quad (13)$$

によって与えられる。

通常の電子ガスの誘電的性質は主としてクーロン相互作用の長距離成分によって支配される。しかし、ハバード・モデルではこの長距離相関は全く無視されている。そこで、ハバード系の誘電率を定義するために外部電荷との相互作用も接触型の $V\delta(\mathbf{r})U/2N$ を仮定すれば、縦波の誘電率 $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ は

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} = 1 + \frac{U}{2N} Q(\mathbf{q}, \omega) \quad (14)$$

となる。(13) を (14) に代入すれば、proper な RPA における誘電率

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{U}{N} \chi_0(\mathbf{q}, \omega) \quad (15)$$

が得られる。これに対して、(11) を (14) に代入したものは

$$\epsilon_{\text{TRAD}}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{U}{N} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - \frac{2U}{N}\chi_0(\mathbf{q}, \omega)} \quad (16)$$

を与える。

§4. 粒子対形成の不安定性

proper な RPA に導く図形のつぎの段階で考慮されるべきものとして第6図の maximally crossed diagrams $Q_{\text{CROS}}(\mathbf{q}, i\nu_l)$ が考えられる。第6図のグラフの間で相当する次数ごとにスピン平行な粒子対の部分の相殺が起こり、その総和は

$$\begin{aligned} & \text{Diagram 1} = \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \cdots \\ & + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \cdots \end{aligned}$$

第6図 maximally crossed diagrams $Q_{\text{CROS}}(\mathbf{q}, i\nu_l)$

$$Q_{\text{CROS}}(q, i\nu_l) = g \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \beta^{-2} \sum_{n, n'} \sum_{\sigma} (1 - 3\sigma\sigma) \times G_{\sigma}^0(\mathbf{k} + q) G_{\sigma}^0(\mathbf{k}) \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') G_{-\sigma}^0(\mathbf{k}') G_{-\sigma}^0(\mathbf{k}' - q) \quad (17)$$

$$\Delta(K) = \frac{-g(1 - 3\sigma\sigma)\Pi(K)}{1 + g(1 - 3\sigma\sigma)\Pi(K)} \quad (18)$$

$$\Pi(K) = \sum_{\mathbf{k}_1} \beta^{-1} \sum_{n_1} G_{\sigma}^0(\mathbf{k}_1) G_{-\sigma}^0(K - \mathbf{k}_1) \quad (19)$$

となる。ここで、4次元記法 $k = (\mathbf{k}, i\omega_n)$ を用いた。また、 $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ はスピン反平行な粒子対 (singlet pair) の重心運動量である。(17), (18) の粒子-粒子チャンネル $\Delta(K)$ を構成する (19) の粒子対伝播関数 $\Pi(K)$, $K = (\mathbf{K}, i\Omega)$ 、は

$$\Pi(K) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + f(\varepsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}) - 1}{i\Omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}} \quad (20)$$

とかかれ、 $K = 0$ の粒子対に対して

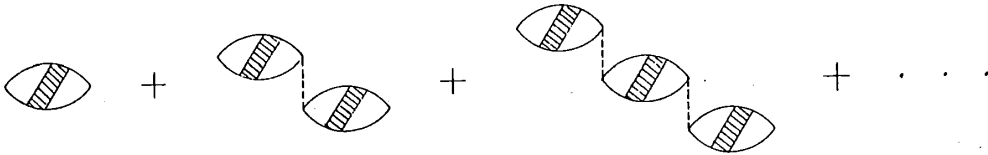
$$\Pi(0) \cong D_0 \log \frac{2\gamma\hbar\omega_0}{\pi k_B T} \quad (20')$$

と評価される。ここに、 D_0 はフェルミ準位におけるスピンあたりの状態密度、 $\hbar\omega_0$ は cut off エネルギー、 $\gamma = 1.78$ である。 $g = -U/2N < 0$ に注意すれば、(20), (20') より (18) の分母が 0 になる条件

$$1 - 2g\Pi(0) = 0$$

が満たされることはない。すなわち、第6図に示された近似の範囲ではシングレットな粒子対形成の不安定性は存在しない。

つぎに、 $Q_{\text{CROS}}(q, i\nu_l)$ のグラフの連鎖の総和 $Q_R(q, i\nu_l)$ を考えよう (第7図)。



第7図 $Q_R(\mathbf{q}, i\nu_l)$

$$Q_R(q, i\nu_l) = \frac{Q_{\text{CROS}}}{1 - gQ_{\text{CROS}}} \quad (21)$$

となる。まず、(18)の $\Delta(K)$ への寄与は $K = k + k' = 0$ から大きいとして(17)において $\Delta(K) \simeq \Delta(0)$ ととれば

$$Q_{\text{CROS}}(q, i\nu_l) = -4g[\chi_0(q, i\nu_l)]^2 \Delta(0) \quad (22)$$

となり、(21)に(22)を代入すれば

$$Q_R(q, i\nu_l) = \frac{-8g^2 \chi_0^2 \Pi(0)}{1 + 2g(4g^2 \chi_0^2 - 1) \Pi(0)} \quad (23)$$

が得られる。解析接続($i\nu_l \rightarrow \omega + i\delta$)して得られる感受率関数 $\chi_0(q, \omega)$ は $q \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$ の極限で $\chi_0 \simeq D_0$ である。したがって、強磁性のハートレー・フォックの判定基準 $UD_0/N > 1$ が満たされれば、(23)の分母が0の条件

$$1 - \frac{U}{N} \left(\frac{U^2}{N^2} D_0^2 - 1 \right) \Pi(0) = 0 \quad (24)$$

は成立しうる。相関が強い場合、ハートレー・フォックの判定基準は充分満たされると考えられる。この近似までくれば、 $Q(q, \omega)$ を与える摂動級数は(24)が成立するとき発散する。このことはシングレットな粒子対形成の不安定性、すなわち超伝導不安定性、と解釈される。転移温度 T_c を評価すれば

$$\begin{aligned} k_B T_c &= 1.13 \hbar \omega_0 \exp \left(-\frac{1}{\lambda} \right) \\ \lambda &= \frac{U}{N} D_0 \left(\frac{U^2}{N^2} D_0^2 - 1 \right) \end{aligned} \quad (25)$$

となる。 $T \rightarrow T_c$ のとき密度応答関数は

$$Q_R = -\frac{2D_0}{\left(\frac{U^2}{N^2} D_0^2 - 1 \right)^2} \frac{T_c}{T - T_c} \quad (26)$$

のようにキュリー・ワイス則にしたがって発散する。

§5. まとめ

ハバード・モデルの相互作用は、ワニエ表示で(1'), プロッホ表示で(2)のように見かけ上引力的にかかれ、計算は結合パラメータ $g(= -U/2N < 0)$ を用いて実行された。

誘電率に対する proper な RPA は、単純な風船型図形の連鎖の総和ではなく、梯子型を内蔵した風船の連鎖を総和することによって(13), (15)のように得られた。

maximally crossed diagrams の総和から得られる粒子-粒子チャンネルだけでは粒子対形成の不安定性に導かないことが示された。そして、その連鎖の総和は、強磁性のハートレー・フォック判定基準が満たされるという意味で相関の強い場合に、シングレットな粒子対の形成不安定性、すなわち超伝導不安定性に導きうることが示された。

実際には、 d バンドまたは d - p 混成バンドを問題にしなければならないが、そのとき (1) は tight binding 近似での表現となる。 d -wave か s -wave かという問題は将来の議論となる。

とりあえず実行する予定の問題としては、まず 1 電子グリーン関数のバーテックス補正がある。それは、この論文で行った近似、すなわち maximally crossed diagrams $Q_{\text{CROS}}(q, i\nu_l)$ の連鎖まで総和することを行えばよい。つぎに、(2) に基づいて電気伝導率、動的帯磁率などの諸量を計算することである。これらの結果を CuO_2 超伝導体の常伝導相における諸物性と比較することは興味あることであろう。

参考文献

- 1) J. Hubbard: Proc. Roy. Soc. **A276**(1963) 238; ibid **A277**(1964) 237; ibid **A281** (1964) 401; ibid **A285** (1965) 542; ibid **A296** (1966) 82; ibid **A296** (1966) 100.
- 2) F. C. Zhang and T. M. Rice: Phys. Rev. **B37** (1988) 3759.
- 3) H. Nishimura: in *Proceedings of the 5th Asia Pacific Physics Conference*, Kuala Lumpur, 10 to 15 August 1992, S. P. Chia et al. Eds. (World Scientific, Singapore, 1994) Vol.1, p.491.
- 4) H. Nishimura: Oral presentation in the 6th Asia Pacific Physics Conference, Brisbane, 4 to 8 July 1994.
- 5) A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinski: Soviet Physics JETP **9** (1959) 636.
- 6) A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinski: *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Prentice-Hall, Inc., 1963) Chap. 3.