

金属に於ける電子格子相互作用

についての RPA による考察. I

—— 音波の SDHVA 効果, 一次元超伝導と Peierls 転移 ——

岡大・電子工学教室 石 井 忠 男

§ 1. 序 論

金属中の電子は, 格子イオンの電荷を遮蔽するように働く。その結果, 裸のイオン-イオン相互作用に由来するプラズマ振動数を有する格子振動のノーマルモードは, イオン-イオン相互作用が長距離になるほど小さい振動数のノーマルモードへと再規格される。Bardeen-Pines¹⁾ は, 電子格子系に於ける Nakajima-Hamiltonian²⁾ を, ユニタリ-変換の展開の 2 次の次数までで処理することによって, 再規格化されたフォノンの振動数及び電子-フォノン相互作用の Hamiltonian を導出した。今, 電子系の誘電関数を $\epsilon(k, \omega)$, 電子-裸イオン相互作用のポテンシャルを V_k^i とすると, ジェリコーム模型で RPA を用いて,

$$\omega_k^2 = \Omega_p^2 / \epsilon(k, \omega), \quad (1)$$

$$H_{\text{int}} = \sum_k \frac{V_k^i}{\epsilon(k, \omega)} \rho_{-k} q_k \quad (2)$$

$$V_k^i = iz \sqrt{N/M} M_k^2 k, \quad M_k^2 = 4\pi e^2 / k^2 \quad (3)$$

となる。(2) 式は Fröhlich Hamiltonian をミクロに証明するものであり, 系全体として次の様にかける。

$$H_{\text{BP}} = \sum E_a(K) C_{Ka} C_{Ka} + \sum \frac{1}{2} (p_{-k} p_k + (\omega_k^0)^2 q_{-k} q_k) + \sum \frac{V_k^i}{\epsilon(k, \omega)} \rho_{-k} q_k, \quad (4)$$

$$(\omega_k^0)^2 = \frac{2\epsilon(k, \omega) - 1}{\epsilon(k, \omega)^2} \Omega_p^2 \simeq 2\Omega_p^2 / \epsilon(k, \omega) \quad (5)$$

ここで、(4) 式は長波長 $k < k_c$ の項のみ残し、短距離項は省いてある。(5) 式は $\epsilon(k, \omega) \gg 1$ を利用した。(4) 式は裸イオン-電子系から出発しても得られる(付録 A 参照) 今、Fröhlich パラメータを λ_0 とすると(4) 式との比較から、 $k \rightarrow 0$ の極限で格子の周期性を考慮して、

$$\lambda_0 = S_{BS}^2 / (2S_{BS}^2 + S_+^2) \equiv S_{BS}^2 / S_0^2 < 1/2 \quad (6)$$

この S_+ は後程出てくる量で格子の周期からくる音速であり(10) 式), S_{BS} は Bohm-Staver の音速である。³⁾

一方 Migdal⁴⁾ は Fröhlich-Hamiltonian から出発して、フォノンの振動散を“再規格化”した。Fröhlich-Hamiltonian

$$H_F = g \sum \sqrt{\frac{\omega_k^m}{2}} c_K^+ c_{K-k} (b_k + b_{-k}^+) \quad (7)$$

$$g^2 = \pi^2 \lambda_0 / m K_F, \quad \omega_k^m = S_0 k$$

を通じて自己エネルギーを求めるわけである。ここで注意すべきは λ_0 は k に依存しない定数であり、 $\omega_k^m = S_0 k$ である。一般的には、(4) 式から理解できるように k の関数である。Green 関数法で得られた結果は

$$\omega_k^2 = (\omega_k^m)^2 \{1 - \lambda_0 u(k/2K_F)\} \quad (8)$$

である。 $u(x)$ は (B.3) 式で与えられる関数であるが、金属の場合、Fröhlich-Hamiltonian の性質上、 $k \rightarrow 0$, $u(k/2K_F) \sim 1$ 以外無意味である。

Blank-Kaner⁵⁾ は、この Migdal 理論をそのまま用いて磁場中に於けるフォノンのスペクトルを調べた。(2) 式あるいは(4) 式から判るように、 $\epsilon(k, \omega)$ は磁場の関数であって、しかも磁場の寄与が自己エネルギー部分のそれと同じ次数であることを考えると、金属中では、少く共(7) 式を出発点とすることは同意できない。^{*}

§ 2 では上記の補正を簡単に議論する。一方超伝導の出発点となった 2 次のハミルト

ニアンは、やはり Bardeen-Pines のユニタリー変換からその原型が求まり、結局その延長線上として、BCS の reduced Hamiltonian が仮定された。この Hamiltonian は超伝導をよく説明するが、§ 3 では、この reduced Hamiltonian を別の角度から議論する。

以上の議論を一次元金属について応用する。純粹一次元金属を Bardeen-Pines 流の精神で議論すれば、その結果が Fröhlich⁶⁾ あるいは Rice-Strässler⁷⁾ の Fröhlich-Hamiltonian から出発した議論と異なることは、§ 2 の議論から簡単に予想される。この Bardeen-Pines の模型について詳しく調べるとともに、§ 3 の議論を考慮し、Fröhlich 模型に於ける Peierls-phase と Superconducting-phase について簡単に調べる。ここでの近似は、全て RPA-近似とする。他の近似については別の機会に述べることにする。

§ 2. 磁場中に於ける音速の変化と音波減衰

ここで出発点となる Hamiltonian は (4) 式とする。実際、Bardeen-Pines の近似式 (4) から出発するより、むしろ、裸イオン-電子系から出発した、Green 関数による議論の方が、近似の程度が判っていて、より自明であるように思われる。^{8,9)} しかし本節は、Migdal-Blank-Kaner 理論のミクロな議論として、前者の方法をとる。

(4) 式の近似では、electron-electron 相互作用は、短距離部分しかないから、vertex-part は Migdal 近似をそのまま用いて、フォノンについての Dyson 方程式

$$D^{-1}(k, \omega) = D_0^{-1}(k, \omega) - \Sigma(k, \omega)$$

$$D_0(k, \omega) = |\tilde{g}(k, \omega)|^2 (\omega_k^0)^2 \{ \omega_k^2 - (\omega_k^0)^2 + i\delta \}$$

より、

*) 磁場効果が入る場合、(7) 式には、 ρ_{-k} を通じての磁場の影響が入ってくる。Blank-Kaner は電子グリーン関数の中で、その効果を取り込んでいる。従って、相互作用ハミルトニアンとして (7) 式を用いたとしているが、正確に云えば、結局 (7) 式そのものを用いているのではないということになる。

$$\omega_k^2 = (\omega_k^0)^2 \{1 + |\tilde{\mathcal{G}}(k, \omega)|^2 \Sigma(k, \omega)\} \quad (9)$$

ここで、格子の周期性を考慮して¹⁰⁾

$$(\omega_k^0)^2 = S_+^2 k^2 + 2 \Omega_p^2 / \epsilon(k, \omega) \quad (10)$$

$$|\tilde{\mathcal{G}}(k, \omega)|^2 = \frac{M_k^2}{\epsilon(k, \omega)} \frac{\Omega_p^2 - S_+^2 k^2}{S_+^2 k^2 \epsilon(k, \omega) + 2 \Omega_p^2} \quad (11)$$

更に $\Sigma(k, \omega)$ と $\epsilon(k, \omega)$ の関係

$$\Sigma(k, \omega) = \{1 - \epsilon(k, \omega)\} / M_k^2 \quad (12)$$

を用い、 $\epsilon(k, \omega)^{-1}$ を 1 に比して無視すると、結局

$$\omega_k^2 = S_+^2 k^2 + \Omega_p^2 / \epsilon(k, \omega) \quad (1')$$

仮に ϵ^{-1} を 1 に比して無視できないとしても、上記の方法は、(5)式のもとのままの式に $S_+^2 k^2$ を加えておくだけで、正しく (1') 式を与える。

電子の温度 Green 関数を

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(0)_{(K, K'; \epsilon)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n(K_x) \varphi_n^*(K'_x)}{i \epsilon - E_n(K) + \mu} \\ &\times e^{i t^2 K_y (K_x - K'_x)} \cdot (2\pi)^2 \delta(K_y - K'_y) \delta(K_z - K'_z) \end{aligned}$$

とすると、 $\Sigma(k, \omega)$ が計算できて、(12) 式とより $\epsilon(k, \omega)$ が求まる。これらの結果は音波が磁場と平行に進む場合について、Appendix B に記されている。垂直に進む場合、photon の効果が入ってきて、electron-phonon だけで系は閉じない。従って、この場合についての Blank-Kaner の計算も怪しい。

一方、 $\text{Re } \omega_k \equiv \omega_k^r$, $\text{Im } \omega_k \equiv \omega_k^i$ 及び誘電率 $\epsilon = \epsilon_k^r + i \epsilon_k^i$ を用いて (1') 式から、

$$\left. \begin{aligned} \omega_k^r &= \{ S_+^2 k^2 + \Omega_p^2 / \epsilon_k^r \}^{1/2} \\ \omega_k^i &= \Omega_p^2 \epsilon_k^i / 2 \omega_k^r (\epsilon_k^r)^2 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

(A.2) 式で $k \rightarrow 0$ として計算し, ϵ_k^r と関連させて, $\epsilon_k^r \cong (k_s^2/k^2)(1+B_{\text{SDHVA}})$ とできる。 S_{SDHVA} は Shubnikovde-Haas-Van-Alphen 効果の項である。従って,

$$(\omega_k^r/k) = (S_+^2 + S_{\text{BS}}^2)^{1/2} \{ 1 - \lambda B_{\text{SDHVA}} \} \quad (14)$$

$$\lambda \equiv S_{\text{BS}}^2 / 2(S_+^2 + S_{\text{BS}}^2)$$

となる。Blank-Kaner 理論は

$$(\omega_k^r/k)_{\text{BK}} = S_0 (1 - \lambda_0)^{1/2} \left\{ 1 - \frac{\lambda_0}{2(1 - \lambda_0)} B_{\text{SDHVA}} \right\} \quad (15)$$

を与え $k \ll k_s$ に対しては (14), (15) 式は (6) 式を通じて全く一致する。しかし k が k_s に比して無視できない場合は, 異った値を与えることは, 当然のことである。一方 ω_k^i については ϵ_k^i をそのまま用い, $k \ll k_s$ の領域で

$$\omega_k^i = \frac{k^3}{2k_s^2} \epsilon_k^i \frac{S_{\text{BS}}^2}{\sqrt{S_+^2 + S_{\text{BS}}^2}} \{ 1 - (2 - \lambda) B_{\text{SDHVA}} \} \quad (16)$$

同様に (6) 式を用いて,

$$(\omega_k^i)_{\text{BK}} = \frac{k^3}{2k_s^2} \epsilon_k^i \frac{S_{\text{BS}}^2}{\sqrt{S_+^2 + S_{\text{BS}}^2}} \{ 1 - \lambda B_{\text{SDHVA}} \} \quad (17)$$

従って異っているのは B_{SDHVA} の係数だけである。因みに N_a については $\lambda \cong 0.35$ と計算できる。(14), (16) 式は Rodriguez の熱力学的方法が得られる結果¹¹⁾ のミクロな表式となっている。 $k \sim k_s$ については Appendix C 参照。

§ 3. Phonon を媒介とする電子間引力

超伝導理論の出発点となった BCS-Hamiltonian は、次の様に書かれる。

$$H_{rd} = \sum_{Ka} \xi_a(K) c_{Ka}^+ c_{Ka} - \zeta \sum_{KK'} c_{K'\uparrow}^+ c_{-K'\downarrow}^+ c_{-K\downarrow} c_{K\uparrow} \quad (18)$$

ここで係数 $-\zeta$ は、摂動展開で、2 次の項を求めた場合現われる、 $\omega_k / \{(E_K - E_{K-k})^2 - \omega_k^2\}$ という量から、簡単化された定数として用いられた。¹²⁾ しかし ζ は、実際には K, k の関数である。この節では、これまでの近似の範囲内で、 ζ を K に依存しない量で表わし、しかも $k \leq k_D$ において引力になっていることを示す。

全系の Hamiltonian を次の形に書く。

$$\begin{aligned} H = & \sum E_a(K) c_{Ka}^+ c_{Ka} + \sum \frac{1}{2} (p_k^* p_k + \omega_k^2 q_k^* q_k) \\ & + \sum V_k^i \rho_{-k} q_k + \sum \frac{1}{2} M_k^2 \rho_{-k} \rho_k \\ & + \sum \frac{1}{2} (\Omega_k^2 - \omega_k^2) q_k^* q_k \end{aligned} \quad (19)$$

ω_k^2 は (1') 式で求められている値で、 Ω_k^2 は $\Omega_p^2 - S_1^2 k^2$ で与えられる裸イオンの振動数である。 ω_k^2 は § 2 の議論から RPA 近似の範囲で正しく求まる。上記の様に書いた理由は、Nakajima-Bardeen-Pines の精神を汲んでのことである。

さてここで、Heisenberg の運動方程式を用いて q_k を求めることができる。即ち、 $\dot{q}_k = p_{-k}$ 及び $\dot{p}_{-k} = -\Omega_k^2 q_k - V_{-k}^i \rho_k$ より、 $\ddot{q}_k = -\Omega_k^2 q_k - V_{-k}^i \rho_k$ 。ここでフォノンの renormalize された振動数を ω_k として、次の近似式を考えよう。 $\ddot{q}_k = -\omega_k^2 q_k$ とおいて、

$$q_k = V_{-k}^i \rho_k / (\omega_k^2 - \Omega_k^2) \quad (20)$$

この段階で (20) 式がどの程度の近似になっているかは不明である。しかし付録 A に示されているように、裸イオン-電子系に上式を援用することによって (4) 式がそのまま導出できることから、少くとも RPA は包含できると思われる。この式を (19) 式の 第

3, 5 項目に代入すると, 2~3 行目は

$$H' = \sum_k \frac{1}{2} M_k^2 \rho_{-k} \rho_k + \sum_{k < k_D} \frac{1}{2} \frac{|V_k^i|^2}{\omega_k^2 - \Omega_k^2} \rho_{-k} \rho_k \quad (21)$$

となる。2 項目は, $\omega_k^2 < \Omega_k^2$ であるから負であるが, 一項目との和が問題である。この和を遂行して,

$$H' = \sum_{k > k_D} \frac{1}{2} M_k^2 \rho_{-k} \rho_k + \sum_{k < k_D} \frac{1}{2} \frac{M_k^2}{\epsilon(k, \omega)} \frac{\Omega_p^2}{\Omega_p^2 (1 - \frac{1}{\epsilon}) - S_2^2 k^2} \rho_{-k} \rho_k$$

従って $\epsilon^{-1}(k, \omega) < 1$ については, 電子間相互作用は引力となっている。 $k \rightarrow 0$ の極限をとると, $\zeta_{k \rightarrow 0} \cong \pi^2 \hbar^2 / 2mK_F$ となる。あるいは $\epsilon \cong 1 + k_s^2 / k^2$ として, $\zeta \equiv \langle \zeta_k \rangle = \sum_k \frac{1}{2\epsilon} M_k^2 / \sum_k$ とすると, $\zeta = (6\pi e^2 / k_D^2) \{1 - (k_s / k_D) \times \arctan(k_D / k_s)\}$ となる。この値は N_a について試算をすると $M_{k_D}^2$ の $1/4$ を与える。以上の結果は (4), (10) 式から出発しても同一の結果を与える。

以上のまとめとして, $\epsilon(k_D, \omega) \gg 1$ の場合, ハミルトニアンは,

$$H \cong \sum_a E_a(K) c_{ka}^+ c_{Ka} + \sum_k \omega_k (b_k^+ b_k + 1/2) - \sum_k \frac{1}{2} \frac{M_k^2}{\epsilon(k, \omega)} \sum_{\substack{Ka \\ K'a'}} c_{K+Ka}^+ c_{Ka} c_{K'-ka'}^+ c_{K'a'} \quad (22)$$

となる。これから, Phonon を媒介とする電子-電子相互作用は全て引力となることが判る。従ってこの範囲で金属は全て超伝導になる可能性を有す。

§ 4. 一次元金属に於ける Peierls 相と超伝導

— Model I —

ここでは, BP-Hamiltonian (4) 式から出発することにする。従って, Peierls 相の性質は誘電率 $\epsilon(k, \omega; T)$ に大きく依存することになる。RPA での誘電率は,

$$\epsilon(k, \omega; T) = 1 + M_k^2 \sum_{aK} \frac{f(K-k) - f(K)}{E(K) - E(K-k) + \omega} \quad (23)$$

簡単の為, half-filled の場合を考え, かつ $E(K) = -E_F \cos Ka$ [$-\pi/a < K < \pi/a$] とする。 $\Sigma_K = \int N(E) dE$ とすると, 結局 (23) 式は

$$\epsilon(k, \omega; T) = 1 + 2N(0) M_k^2 \int_0^{E_F} \frac{dE}{E + \omega/2} \tanh \frac{\beta E}{2} \quad (24)$$

一方 (4) 式に於て, $\langle b_k \rangle = \langle b_k^+ \rangle = \eta \sqrt{n}/2 \delta_{k, k_0}$ とすると,

$$H_0 = \sum E_a(K) c_{Ka}^+ c_{Ka}^+ + n \eta^2 \omega_k^0 / 2 \quad (25)$$

$$H' = \sum_{Ka} \Delta_k (c_K^+ c_{K-k} + c_K^+ c_{K+k}) \quad (26)$$

$$g_k \equiv \frac{V_k^i}{\epsilon(k, \omega)} \cdot \frac{1}{\sqrt{2} \omega_k^0}, \quad \Delta_k \equiv g \eta \sqrt{n}$$

(25), (26) 式で $k \equiv k_0 \equiv 2 K_F$ とし, 簡単の為 k_0 の添字 0 は省いてある。Free energy は,

$$F = \frac{1}{2} n \eta^2 \omega_k^0 - \frac{2}{B} \int \{N_c(E) - N_M(E)\} \ln(1 + e^{-\beta E}) dE$$

となる。これより gap equation は,

$$\frac{\omega_k^0}{2 g^2 N(0)} = E_F \int_{\Delta}^{E_F + \Delta^2} dE \frac{\tanh \frac{\beta E}{2}}{\sqrt{E_F^2 + \Delta^2 - E^2} \sqrt{E^2 - \Delta^2}} \quad (27)$$

フォノンの振動数は, 格子の周期性を無視して,

$$\omega_k^2 = \Omega_k^2 / \epsilon(k, \omega; T) \quad (28)$$

以上 (24), (27), (28) 式が基本となる式で, 以下簡単に, これらの振舞を調べてみよ

う。

4-1. $\omega_k \rightarrow 0$ ($T \ll T_{cB}$) の場合

(24) 式より,

$$\epsilon(k, \omega_k; T) = \alpha_B^{-1} \ell_n(T_{cB}/T) \quad (29)$$

$$\alpha_B^{-1} \equiv 2N(0) M_k^2,$$

$$k_B T_{cB} \equiv \frac{2r}{\pi} E_F \exp(\alpha_B) = 1.13 E_F \exp(\alpha_B) \quad (30)$$

従って (28) 式は, $\alpha_B \Omega_k^2 \equiv \omega_\alpha^2$ [一次元についても, この値は $v_{BS}^2 k^2$ を与える] と
して,

$$\omega_k^2 = \omega_\alpha^2 / \ell_n(T_{cB}/T) \quad (31)$$

上式は $T \rightarrow 0$ 近傍でのみ正しい式である。即ち $T \rightarrow 0$ でフォノンは完全にソフトになる。

4-2. 転移温度 T_B^D ($\Delta=0$)

(27) 式に於て $\Delta=0$ とおいて

$$\begin{aligned} k_B T_B^D(0) &\cong 2.27 E_F \exp \{-4 \alpha_B \epsilon(k, \omega; T)\} \\ &= 2.27 E_F \exp \{-4 \ell_n(T_{cB}/T)\} \end{aligned}$$

従って

$$k_B T_B^D(0) = 0 \quad (32)$$

4-3. 超伝導相

Hamiltonian は (18) 式を用いる。ここでは簡単の為, 係数 ζ として $k = k_D \equiv k_0$ を用いよう。従って,

$$\zeta \sim \frac{1}{2} \frac{M_{k_0}^2}{\epsilon(k_0, \omega_{k_0}, T)}$$

と仮定する。従って $T \lesssim T_{CB}$ については, (29) 式を用いて,

$$\zeta \sim 1/4 N(0) \ell_n(T_{CB}/T)$$

となる。よって gap equation より¹³⁾

$$\begin{aligned} k_B T(\Delta=0) &= 1.15 \omega_{k_0} \exp \{-2 \ell_n(T_{CB}/T)\} \\ &= 1.15 \frac{\omega_{\alpha}}{\sqrt{\ell_n(T_{CB}/T)}} (T/T_{CB})^2 \end{aligned}$$

となる。故に $k_B T_B^S(\Delta=0) = 0$ 。

§ 5. 一次元金属に於ける Peierls 相と超伝導相

— Model II —

Rice-Strässler が行ったように, Fröhlich-Hamiltonian を出発点とする。即ち音速を伝導電子-格子の相互作用から, ミクロに求めている場合である。

5-1. クーロン相互作用を考慮しない場合

(7) 式を出発点とするわけであるが, λ_0 は任意の定数として用いる。 $\omega_k^m \equiv \omega_k^0$ と改め, $\omega_k^0 = S k$ とする。Peierls 相については, すでに論じられているから, ここでは超伝導相のみを扱うことにする。全ハミルトニアンは, §3 の議論と同様に, $q_k = g \omega_k^0 \rho_k / \{\omega_k^2 - (\omega_k^0)^2\}$ を用いて,

$$\begin{aligned} H &= \sum_{Ka} E_{Ka}^+ c_{Ka} c_{Ka} + \sum_k \frac{1}{2} (p_k^* p_k + \omega_k^2 q_k^* q_k) \\ &\quad - \sum \frac{1}{2} g^2 \frac{(\omega_k^0)^2}{(\omega_k^0)^2 - \omega_k^2} \rho_{-k} \rho_k \end{aligned} \quad (33)$$

ここで ω_k は static な近似の範囲で,

$$\omega_k^2 = \frac{(\omega_k^0)^2}{\alpha_R} \ell_n (T/T_{cR})$$

$$\alpha_R^{-1} \equiv 2N(0) g^2$$

$$k_B T_{cR} \equiv 1.13 E_F \exp(-\alpha_R)$$

である。今, $\zeta = \frac{1}{2} g^2 (\omega_{k_0}^0)^2 \{(\omega_{k_0}^0)^2 - \omega_{k_0}^2\}^{-1}$ とすると, 引力である為の条件 $\omega_k < \omega_{k_0}$ を考慮して, 条件 $T_{cR} < T < 1.13 E_F$ が課せられる。この場合の転移温度は,

$$k_B T(\Delta=0) = 1.15 \omega_{k_0} \exp \{-1/2 \zeta N(0)\}$$

$$= 1.15 \frac{\omega_k^0}{\sqrt{\alpha_R}} \{ \ell_n (T/T_{cR}) \}^{1/2} \left(\frac{k_B T}{1.13 E_F} \right)^2$$

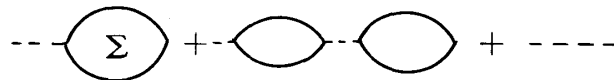
$$\therefore k_B T_R^S(\Delta=0) \cong k_B T_{cR} e^{\xi_R}, \quad \sqrt{\xi_R} e^{\xi_R} = \sqrt{d_R} e^{\alpha_R} \frac{1.13 E_F}{1.15 \omega_k^0}$$

従って $1.13 E_F > 1.15 \omega_k^0$ である限り, $\xi_R > \alpha_R$ となって $T < 1.13 E_F$ の解は存在しないことになる。即ち, $\Delta=0$ をとりえないことになる。しかし反面 $1.15 \omega_k^0 \gtrsim 1.13 E_F$ であれば $T < E_F$ で $\Delta=0$ の解が存在する。

5-2. クーロン相互作用のある場合の Peierls 転移 (1)

今, 電子-電子相互作用が $\Sigma M_k^2/2\varepsilon(k, \omega, T)$ で存在すると仮定する。従って結節部分には,

$$\frac{M_k^2}{\varepsilon}$$



を考えることができる。従ってフォノンスペクトルは,

$$\omega_k^2 = (\omega_k^0)^2 \left[1 + g^2 \sum \left\{ 1 - \frac{1}{\epsilon} (1 - \epsilon) \right\} \right]$$

$$\cong (\omega_k^0)^2 \left[1 - \frac{\alpha_R^{-1} \ln(1.13 E_F / k_B T)}{2 - \alpha_B^{-1} \ln(1.13 E_F / k_B T)} \right]$$

ここで再び $\alpha_B^{-1} \gg 1$ を仮定した。 $k_B T < 1.13 E_F$ の場合は、分母の 2 項目は無視できて、結局、

$$\omega_k^2 = \frac{(\omega_k^0)^2}{2 d_R} \ln(T / T_{cR}^c) \quad \left. \vphantom{\omega_k^2} \right\} \quad (35)$$

$$k_B T_{cR}^c = 1.13 E_F \exp(-2 \alpha_R)$$

従って α_R に因子 2 倍がかかるだけとなる。即ちクーロン相互作用の為、転移温度が下がる。この傾向 Bjelis, Saub and Barisic¹⁴⁾ による tight-binding model の BPA の主張と同じであるが、Chui, Rice and Varma¹⁵⁾ の Renormalization group による結論と異なる。これらの相異は、次のように言いうるであろうか。「RPA ではクーロン相互作用が、遮蔽効果にのみ取り入れられていて、その為 electron-phonon 相互作用定数 g が小さくなることに由来する。一方、後者では遮蔽についてはほぼ同じことが云えるが、フォノンの自己エネルギーが変化を受け ($\bigcirc \rightarrow \text{shaded circle}$), 遮蔽の効果を打消し、なお実質的に g を大きくしている。」と。

5-3. (20) 式からの議論 (2)

5-2 の議論の結論は、(20) 式を用いるとどのようなになるであろうか。Fröhlich Hamiltonian に電子-電子相互作用を導入したものを改めて書いておこう。

$$H = H_{\text{electron}} + \sum_k \frac{1}{2} (p_k^* p_k + (\omega_k^0)^2 q_k^* q_k)$$

$$+ \sum_k g_k \omega_k^0 \rho_{-k} q_k + \sum_k f_k \rho_{-k} \rho_k \quad (36)$$

ここで f_k は前節のクーロン相互作用と考える。今、クーロン相互作用の一部が、Phonon

の振動数及び electron-phonon 相互作用係数それぞれの renormalization に使われたとする。その結果 (36) 式の $\omega_k^0 \rightarrow \omega_k'$, $g_k \rightarrow g_k'$ になったとすると,

$$H = H_{el} + \sum_k \frac{1}{2} (p_k^* p_k + \omega_k'^2 q_k^* q_k) + \sum_k g_k' \omega_k' \rho_{-k} q_k + \sum_k (1-\alpha) f_k \rho_{-k} \rho_k \quad (37)$$

とかける。(36) 及び (37) 式ともに, (20) 式を満足しなければならないから,

$g_k \omega_k^0 \rho_k \{ \omega_k^2 - (\omega_k^0)^2 \}^{-1} = g_k' \omega_k' \rho_k \{ \omega_k^2 - \omega_k'^2 \}^{-1}$ となる。今, renormalized phonon がソフト化するとすれば $\omega_k = 0$ とおいて,

$$\omega_k^0 / \omega_k' = g_k / g_k' \quad (38)$$

なる関係が成立つ。一方 (37) 式の $\alpha f_k \rho_{-k} \rho_k$ が (36) 式の (g_k, ω_k^0) を (g_k', ω_k') に変身するから, (20) 式を援用して,

$$\omega_k^2 / \omega_k'^2 = g_k^2 / (g_k^2 - 2 \alpha f_k) \quad (39)$$

となる。即ち $g_k' < g_k$ となって Peierls 転移温度を下げることを意味する。以上の議論は任意の定数 α について成立つから, (20) 式の近似の範囲では前節の議論を支持する。

5-3. クーロン相互作用を考慮した場合の超伝導相

(33) 式の引力の項を抜き出し, 考慮するクーロン相互作用の項を付加すると

$$H' = - \sum_k \frac{1}{2} g_k^2 \rho_{-k} \rho_k \left[\frac{(\omega_k^0)^2}{(\omega_k^0)^2 - \omega_k^2} - \frac{M_k^2}{g_k^2 \epsilon(k, \omega)} \right] \quad (40)$$

この場合も 1.13 $E_F \geq T \geq T_{CR}^c$ の条件がつく。(35) 式の ω_k^2 及び (29) 式の $\epsilon(k, \omega)$ を用いて, (36) 式は

$$H' = -\frac{g^2}{2} \sum \rho_{-k} \rho_k \alpha_R \{ 2 (\ln 1.13 E_F/T)^{-1} - (\ln 1.13 E_F e^{\alpha_B}/T)^{-1} \}$$

と書ける。ここで $k_B = 1$ ととった。 $\alpha_B \rightarrow 0$ の場合の ζ は、クーロン相互作用のない場合のそれと同じで、転移温度は、

$$k_B T_R^S(\Delta=0) \cong k_B T_{cR}^c e^{2\xi_R^c},$$

$$\sqrt{2\xi_R} \exp(2\xi_P) = \sqrt{2\alpha_R} \exp(2\alpha_R) \frac{1.13 E_F}{1.15 \omega_k^0}$$

となる。従って $1.13 E_F < 1.15 \omega_k^0$ の場合は、クーロン相互作用のない場合より、転移温度は $e^{-\alpha_k + \xi_R}$ 倍だけ低くなる。

§ 6. Discussion - 今後の問題点

これまで述べてきた点で問題となる点は、やはり (20) 式を用いる点にあるが 今後の問題として残しておくことにする。この近似を引き継ぐ (22) 式が従来の BCS-Hamiltonian と比較してどうなのか等、あるいは一次元での Peierls 転移と超伝導転移の競争の問題 (§4), renormalization group との比較 (§5) 等多くの問題点がある。これらの点は現在検討中であるが、何か御意見を頂ければ幸いである。なお物性研で議論頂いたことを感謝致します。同室させて頂いた中西一夫氏には終始議論して頂き、かつ文献 14) 及び Polymeric Sulfur Nitride についての論文をお教え頂いたこともあわせて感謝致します。

Appendix A. (4) 式の別の証明法

裸イオン - 電子系の Hamiltonian は

$$\begin{aligned} H = & \sum_{Ka} E_{Ka} c_{Ka}^+ c_{Ka} + \sum \frac{1}{2} (p_k^* p_k + \Omega_k^2 q_k^* q_k) \\ & + \sum V_k^i \rho_{-k} q_k + \sum \frac{1}{2} M_k^2 \rho_{-k} \rho_k \end{aligned} \quad (A \cdot 1)$$

diagonal な誘電関数 $|\epsilon(k, \omega)| \gg 1$ と仮定する。勿論 (4) 式については、一般の $\epsilon(k, \omega)$ の値に対して証明できる。今、Phonon のスペクトルを ω_k とすると、§3 の議論から、

$$q_k = \frac{V_{-k}^i}{\omega_k^2 - \Omega_k^2} \rho_k \simeq - \frac{V_{-k}^i}{\Omega_k^2} \rho_k \quad (\text{A} \cdot 2)$$

従って (A・1) を、(A・2) を用いて、しかも (A・2) とコンシステントになる様に変形すると、

$$\begin{aligned} H = & \sum E_{Ka} c_{Ka}^+ c_{Ka} + \sum \frac{1}{2} (p_k^* p_k + 2 \omega_k^2 q_k^* q_k) \\ & + \sum \frac{V_k^i}{\epsilon} \rho_{-k} q_k \end{aligned} \quad (\text{A} \cdot 3)$$

但し、 $\omega_k^2 / \Omega_k^2 = \epsilon^{-1}(k, \omega)$ とおいた。一方、§3 で議論したように、超伝導の出発点となるクーロン引力の形式にも書くことができ [(22) 式参照]、これも (A・2) とエンシステントである。(A・3) には、クーロン相互作用の項が全く出てこないということに注意すべきである。この点も含めて (4) 式と一致する。しかし Bardeen-Pines が扱った Plasmon の効果については不明であることも付け加えておく。

Appendix B. 縦磁場に於ける自己エネルギー

ここに、参考の為音波が磁場と平行に進む場合の Σ の結果を記しておく。

$$\begin{aligned} \Sigma(k, \omega) = & - \frac{1}{8\pi\ell^2} \sum_{nn'} \int dK_z \left[\tanh \frac{E_n(K_z) - \mu}{2T} - \right. \\ & \left. - \tanh \frac{E_{n'}(K_z - k_z) - \mu}{2T} \right] \frac{1}{E_n(K_z) - E_{n'}(K_z - k_z) - \omega - i\delta} \end{aligned} \quad (\text{B} \cdot 1)$$

$\tilde{k} = k/K_F$ とすると、

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_e \Sigma(k, 0) = & - \frac{K_F}{\pi^2} \int_0^\infty dx \left[\frac{\mu}{4T} \frac{x^2}{\text{ch}^2(\mu \frac{x^2-1}{2T})} u(\frac{\tilde{k}}{2x}) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\tilde{k}} \sum_{j=1}^\infty (-1)^j A_j x \ell_n \left| \frac{x+\tilde{k}/2}{x+\tilde{k}/2} \right| \cos \left\{ \frac{2\pi j \mu}{\omega_c} (x^2-1) \right\} \right] \quad (\text{B} \cdot 2) \end{aligned}$$

但し,

$$\begin{aligned} u(p) &\equiv \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1-p^2}{2p} \ell_n \left| \frac{1+p}{1-p} \right| \right\}, \\ A_j &\equiv \frac{2\pi^2 j T / \omega_c}{\text{Sh}(2\pi^2 j T / \omega_c)} \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} u(p) &\equiv \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1-p^2}{2p} \ell_n \left| \frac{1+p}{1-p} \right| \right\}, \\ A_j &\equiv \frac{2\pi^2 j T / \omega_c}{\text{Sh}(2\pi^2 j T / \omega_c)} \right\} \quad (\text{B} \cdot 3)$$

一方,

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_m \Sigma(k, \omega \rightarrow 0) = & - \frac{K_F \omega}{6\pi \ell^2 \mu \tilde{k} T} \sum_n \text{ch}^{-2} \left\{ \frac{\mu}{2T} \left(x_n^2 - \frac{\tilde{k}^2}{4} \right) \right\}, \quad (\text{B} \cdot 4) \\ x_n &\equiv \left\{ 1 - \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega_c / \mu \right\}^{1/2} \end{aligned}$$

Appendix. C $k \sim k_s$ での SDHVA の結果

ここでは簡単に Tohmas-Fermi 近似について示しておく。従って ϵ_k^r は次の様にかける。

$$\epsilon_k^r \cong 1 + \frac{k_s^2}{k^2} (1 + B_{\text{SDHVA}}) \quad (\text{C} \cdot 1)$$

上式を用いて, (B) 式を変形すると,

$$(\omega_k^r / k) = (S_+^2 + r_k S_{\text{BS}}^2)^{1/2} \{ 1 - \lambda_k B_{\text{SDHVA}} \} \quad (\text{C} \cdot 2)$$

$$\lambda_k \equiv r_k^2 S_{BS}^2 / 2 (S_+^2 + r_k S_{BS}^2),$$

$$r_k \equiv (1 + \frac{k^2}{k_s^2})^{-1}$$

及び,

$$\omega_k^i = \frac{k^3}{2 k_s^2} \epsilon_k^i \frac{r_k^2 S_{BS}^2}{(S_+^2 + r_k S_{BS}^2)^{1/2}} \{ 1 - (2 r_k - \lambda_k) B_{SDHVA} \} \quad (C.3)$$

となって, k -依存性を含む。

参 考 文 献

- 1) J. Bardeen and D. Pines: Phys. Rev. 99 (1955) 1140.
- 2) P. L. Taylor: A Quantum Approach to the Solid State (Prentice-Hall, New Jersey, 1970) Chap. 5.
- 3) D. Bohm and T. Staver: Phys. Rev. 84 (1951) 836.
- 4) A. B. Migdal: Soviet Physics JETP 7 (1958) 996.
- 5) A. Ya. Blank and E. Kaner: Soviet Physics JETP 23 (1966).
- 6) H. Fröhlich: Proc. Roy. Soc. A233 (1954) 296.
- 7) J. M. Rice and S. Strässler: Solid State Commun. 13 (1973) 125.
- 8) D. Pines: The Many-Body Problem (Benjamin, Massachusetts, 1962) Chap. 3.
- 9) J. R. Schrieffer: Theory of Superconductivity (Benjamin, New York, 1964) Chap. 6.
- 10) D. Pines: Elementary Excitations in Solids (Benjamin, New York, 1964) Chap. 5.
- 11) S. Rodriguez: Phys. Rev. 132 (1963) 535.
- 12) J. Bardeen, L. Cooper and J. Schrieffer: Phys. Rev. 108 (1957) 1175.
- 13) S. Nakajima: Chodendo-Nyumon (Baifukan, Tokyo, 1971) p. 100.

石井忠男

- 14) A. Bjelis, K. Saub and S. Barisic: Nuovo Cimento B23 (1974) 102.
- 15) S. T. Chui, T. M. Rice and C. M. Varma: Solid State Commun.
15 (1974) 155.