

相関の強い電子系の理論の進展

京都大学名誉教授 山田 耕作

遠山 : それでは午後の後半のセッションを始めさせていただきます。私はこの10月に東北大学から基研に移ってきました遠山といいます。よろしくお願いします。

このセッションは物性で、坂東先生から配っていただいたものは、テーマ4「物性論の大通りから」、私個人的には非常にうれしいタイトルだと思っております。

ここでは凝集系の固体物性のほうから、お二人の先生に講演していただきたいと思えます。まず最初は、京都大学名誉教授の山田耕作先生です。山田先生は、Fermi 液体論に基づく、いろいろな固体物性の現象の解明ということで、近藤効果であるとか、重い電子系の問題、最近では高温超伝導の問題で、Fermi 液体論に基づいて、物性を解明しようということで、精力的に研究なさっていらっしゃいます。今日はそのへんの歴史的な問題も含めて、現状まで、いろいろと面白い話を聴かせていただけるのではないかと楽しみにしております。

先生の講演のタイトルは「相関の強い電子系の理論の進展、基礎物理学の現状と未来」ということです。先生、よろしくお願いします。

山田です。基研にはだいぶお世話になりまして、実際、基研のスタッフにいたこともありますので、基研の研究会というのは、僕は非常に好きですので、喜んで引き受けさせていただきました。

相関の強い電子系の理論 の進展

基礎物理学の現状と未来
山田耕作
11月16日

[Slide 1]

[Slide 1] いろいろな議論はあろうと思うのですが、僕はあと、川畑さんがどういう話をされるか知らなくて、僕が先に話してしまうと、申し訳ないところもあると思うのですが、僕は電子系の多体問題に限って、どのように理論が発展してきたかというお話を、できるだけポイントを絞ってお話をしたいと思います。

電子系の相互作用というのは、Coulomb 相互作用で、素粒子のように難しい相互作用はなくて、単に Coulomb 相互作用ただ一筋で、その多体問題がどのように解決されてきたかというお話をしたいと思います。

だから素粒子論なんかと比べると、ずいぶん簡単だろうと思われると思うのですが、それなりにいろいろと苦労もしていて、それなりに進展してきたんじゃないかと思います。

[Slide 2] 話の一番最初は、自由電子で、相互作用のないときの話があって、それから僕の記憶では、電子ガスの多体問題に発展します。電子ガスというのは、金属だと陽イオンと電子がありま

電子関連の理論

- 1. 自由電子
- 2. 電子ガスの多体問題
- 3. BCS理論
- 4. Hubbard Model (Tight Binding Model)
- 5. Mott 転移
- 6. 金属の強磁性
- 7. 近藤効果とAnderson Hamiltonian
- 8. 強相関電子系の超伝導
- 9. 展望

[Slide 2]

すけれども、陽イオンのほうを、一様なプラス電荷に置き換えて、電子が一様分布すると打ち消してしまうという前提のもとに、電子の多体問題とする。

それがはっきりした時点で、BCS 理論ができました。超伝導というのはやっぱり多体問題の華で、やっぱり超伝導の話をします。

それから、Hubbard Model です。束縛された電子のバンドという狭いバンドを走る電子の多体問題の議論が発展します。その Hubbard Model において、Mott 転移という金属から絶縁体に転移するというような事が起こります。

もう一つは、パラレルに、ずっと鉄はどうして強磁性になるのかということが、僕が大学に入ったときから、ずっと問題になっておりました。金属の強磁性というのは、どのように考えたらいいかということが、多体問題として、むしろ超伝導より難しいんじゃないかという話もあったのですけれども、これについてもちょっとお話しします。

あと、「近藤効果と Anderson Hamiltonian」と書きましたけれども、金属中に磁気モーメントが発生するというわけです。電子相関の反発力のために、磁気モーメントが発生するのですけれども、それをめぐって、多体系の議論がありました。

そういう時代を経て、最近では、相関の強い電子系というのが、いろいろと研究されていまして、そこで高温超伝導をはじめ、いろいろな超伝導が起こっています。それはいろいろな見解があるのですが、electron-phonon ではなくて、まさにここの議論の主題である Coulomb 相互作用から超伝導が起こると考えられています。だから斥力からどうやって超伝導が起こるかというのが、現代の焦点です。

このように、Coulomb 相互作用というのは、磁性から超伝導まで、あらゆる物性物理の、エッセンシャルな現象を引き起こせるというところがあるのです。

今後、どうということが発展するだろうかということがあるのですけれども、これは僕はあまり話すべきことではないので、簡単に触れることにします。

Blochの自由電子

- Bloch Electron
- Bloch の定理(1928)

電子相関を考えない

F.Bloch (1905-1983)

[Slide 3]

電子ガスの多体問題

- Bohm-Pines(1953)
- Gell-Mann-Brueckner(1957)
- Brueckner-Sawada(1958)

$$H_K + H_{\text{Coulomb}} = \sum_k \varepsilon_k n_{k\sigma} +$$

$$(1/2) \sum_{\sigma\sigma'kk'q} 4\pi e^2/q^2 a_{k-q\sigma}^\dagger a_{k'+q\sigma'}^\dagger a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$$

[Slide 4]

[Slide 3] まず、Bloch の自由電子という話なのですけれども、これは Bloch Electron と言われていまして、電子間の相互作用を考えないで、バンドモデルで電子系のいろいろな性質を説明しています。これがいろいろなことを、ほとんど説明してしまうわけです。Bloch の定理というのは、1928 年なのです。

僕が長岡さんに聞いた話ですが、Bloch さんというのは、基研に来られたらしくて、亡くなったのが 1983 年だから、この 1980 年頃か何年か知りませんが、比叡山に案内されたときに、長岡さんは帰り道で、「電子間の多体相互作用というのは気にしなかったのか」と聞かれたらしいのです。Bloch は「そんなこと、考えたこともなかった」という返事だったらしくて、物理というのは、難

しいことを先に考えたりするのではなくて、楽観主義でいかないといけないというのが、長岡さんのおっしゃっていたことです。

自由電子から実際に電子ガスの多体問題に行くのに、25年から30年かかっているのです。この時代から一所懸命考えても、多分、一人で頑張っても成果は出なかったでしょう。

[Slide 4] 電子ガスの多体問題というのは、Bloch 電子から25年から30年経って解決しました。Bohm-Pines とか Gell-Mann-Brueckner とか Brueckner-Sawada という人たちが解決しました。澤田克郎先生は、朝永先生のグループだと思います。

電子ガスというのは、電子の運動エネルギーと、ここの $\frac{4\pi e^2}{q^2}$ というのが Coulomb 相互作用のフーリエ変換したものです。その二つだけを考えて、この多体問題をどう解くかというのがこの当時の問題でした。

Coulomb Interaction $\frac{4\pi e^2}{q^2}$ long range part $q \rightarrow 0$ で発散	Perturbation Expansion From High Density Limit 基底エネルギーを 運動エネルギーに対して Coulomb Interaction を摂動展開することによって求める。 これは r_s 展開とも呼ばれる。 $1/n = 4\pi r_0^3/3$ $r_0/a_B = r_s$ が大きいと電子密度 n が低い (a_B は Bohr 半径)
--	--

[Slide 5]

[Slide 6]

[Slide 5] これは単純に考えるとなかなか難しい問題で、Coulomb 相互作用というのは $\frac{1}{r}$ ですから、フーリエ変換すると $\frac{4\pi e^2}{q^2}$ で、 q が0のところ、つまり、long range のところが発散するという問題が一つあります。もともと発散しなくても、多体問題ですから、どうやって解けばいいかというのが問題になりますね。

[Slide 6] これがどのように解かれたかという、僕は非常に摂動が好きなのですが、この場合の教訓は、摂動展開する。どういう limit から研究していくかという、運動エネルギーに対して、Coulomb 相互作用を摂動展開する。だから、電子を High-density にして、運動エネルギーが高い limit から、Coulomb 相互作用が弱いようにして、摂動展開する。そのやり方は、 $\frac{1}{n}$ というのは電子の密度の逆数だから、1個あたりの体積を与えるような半径の球を考えて、その半径が r_0 で、それを Bohr 半径で割って、それを r_s といいますけれども、 r_s という dimensionless の量を用いて展開します。普通の電子密度だと、金属だと2とか3ぐらいなんですけれども、そういう値を用いて。だから r_s が大きいと、1個あたりの球が大きくなるので、low-density ですね。High density は r_s が小さいというので、この r_s で展開するという計算が、結果的に高密度展開になるのです。

[Slide 7] これが Ground State Energy を電子1個あたりのエネルギーで表わしたものです。リュードベリ単位で表すと、 r_s^{-2} が最初の項にあって運動エネルギーで unperturbed です。 $\frac{1}{r_s}$ の1次がこれで、1次は Coulomb 相互作用ですが、これはパウリ原理で、平行なスピンの電子はお互いに避けあうということから来るエネルギーの上がりなのです。だから波動関数は変化しないので、それ以上の高次が電子相関のエネルギーといわれているところなのです。 $\frac{1}{r_s}$ の次が constant かと思うわけですが、 $\log r_s$ という項があって、ここのところが2次摂動以上から出てくる。

Coulomb 相互作用の相関エネルギーというのが、ここから出てくるものです。

Ground State Energy

- $E_t/N_e = 2.21/r_s^2 - 0.916/r_s + 0.0622 \log r_s - 0.096$ Ry単位

第1項 kinetic energy r_s^{-2}
 第2項 exchange energy r_s^{-1}
 第3項以下 相関エネルギー

[Slide 7]

Coulomb相互作用の2次の項

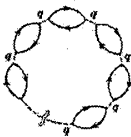
- $-(4/\pi^2)(1-\log 2)\log q \quad q \rightarrow 0$

無限次まで発散項を集めると q が $r_s^{-1/2}$ でカットされる。

[Slide 8]

[Slide 8] 単純に摂動展開をやりますと、Coulomb 相互作用の2次のところで、 $\log q$ という項が出て、 q が 0 で発散してしまう、そういうことになっているのです。

- Random Phase Approximation
- $q \rightarrow 0$ で発散する寄与を集める。



[Slide 9]

Random Phase Approximation

高密度のとき、 $4\pi e^2/q^2$ の相互作用を持つ項が主な寄与をする。

$$[4\pi e^2/q^2] [1 + (4\pi e^2/q^2) \chi(q)]^{-1}$$

Screened Coulomb Interaction (Yukawa type)

[Slide 10]

[Slide 9] この発散がどうやって解決されたかといいますと、発散する項を無限次まで和を取って解決します。このように、Coulomb 相互作用があつて、バブルがあつて、Coulomb 相互作用があつて、バブルがあつてと言うと、同じ q が 0 に近い最強発散項を繰り返し使うことになります。2次というのは、その一つの例ですけれども、こうやると $\frac{1}{q^2}$ がどれだけ繰り返されるかという計算になります。これを3次元で積分しているわけです。発散してしまう。そういうのを無限次まで集めてしまうと、逆に収斂するというのが、Gell-Mann-Brueckner の理論です。RPA 近似とか、呼ばれていますが発散する項をみんな集めてしまうというのが、普通やられる方法だと思うんです。

[Slide 10] $\frac{1}{q^2}$ というのは、Coulomb 相互作用です。それが無限次まで幾何級数で分母へ集めると。ここが Coulomb 相互作用で、バブルが $\chi(q)$ で、これは $q=0$ でもなんでも constant で、発散しなくて。この q^2 をここへかけてやると、ここが q^2 ここが constant. で、これをフーリエ変換すると、湯川タイプの Screened Coulomb の相互作用になるということです。収斂します。

こういう電子ガスの多体問題でわかったことは、電子間の相互作用の間で、また電子が分極して、Screening というのが起こって、Coulomb 相互作用は short range になるということです。

Bohm Pinesの理論

- Coulomb相互作用を長距離部分と短距離部分に分ける。
- Coulomb 相互作用の長距離部分はPlasma振動になる。残りは短距離のCoulomb 相互作用
- 通常Plasma振動のエネルギーは高く励起されない。 一様な電子分布

[Slide 13]

低密度極限

- Kinetic Energy r^{-2}
- Coulomb Interaction r^{-1}
- それ故、 r が大きいと必ずCoulomb 斥力が勝つ。
局在する。Wigner Latticeになる。

[Slide 14]

[Slide 13] これは Bohm -Pines が、その前から現象論的に、Coulomb 相互作用を長距離と短距離に分けて、短距離のCoulomb相互作用と長距離のプラズマ振動に分離したのに対応します。long rangeの部分は、運動方程式の方法とか、いろいろなことで調べればわかるんですけども、densityの揺らぎであるPlasma振動になっているのです。長距離の自由度は、そういうもので吸収されます。Plasma振動のエネルギーは、非常に高いので、普通は励起されなくて、一様な電子分布を保障するという役割を果たします。電子ガスの多体問題は、そういうふうに解決されるわけです。

[Slide 14] いまのは、High-densityのlimitで、Low-densityの極限というのは、逆にまたどうなるかというのは解けています。運動エネルギーは $\frac{1}{r^2}$ 、Coulomb相互作用は $\frac{1}{r}$ でしたが、 r がうんと大きければ、運動エネルギーが逆に無視できて、Coulomb相互作用だけになるのです。

Coulomb相互作用だけになれば、できるだけ電子は離れて、じっとしていればよろしいというので、固体はWigner Latticeになります。だから、金属から格子に、絶縁体に転移するということです。

Wigner という人が、Low density limitとHigh density limit、さっきの展開とを、 r_s の関数として、interpolationのエネルギーの式をつくったのですが、1984年のAndersonの教科書では批判しています。Wigner先生ともあろう人が、金属・絶縁体相転移して不連続な部分をinterpolationするようなナンセンスな式をつくっていると批判しています。それは、Andersonの言うとおりです。metal-insulator transitionが起こるということは、電子ガスではこのように相互作用の距離依存性からわかるということです。

BCS理論による超伝導の解決 1956年

- 電子格子相互作用を介しての電子間引力
- Spin Singlet のCooper Pair
- Pairing Theory
- Fermi Liquid Theory (1957)

[Slide 15]

BCS理論による超伝導の解決

- 電子格子相互作用を介する引力
- Cooper Pairs の凝縮
- Pair 近似
- $\Psi_{\text{BCS}} = \prod_k (u_k + v_k b_k^\dagger) |0\rangle$
- $b_k^\dagger = c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger$

励起スペクトルの観測(東北大 松井et al.)

[Slide 16]

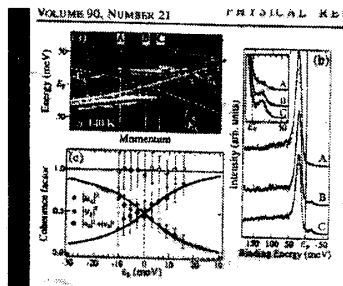
[Slide 15] 1957, 58 年, いまの電子ガスと同じ頃に, 超伝導の BCS 理論という多体問題の発展がありました。これは一体問題なら超伝導は起こりませんから, 多体問題にして初めて起こっているのです。

これは electron-phonon, 電子格子相互作用を介して Singlet の Cooper Pair が起こるとというのが, 従来の BCS 理論です。

そのときに, Coulomb 相互作用は short range であるのですけれども, 斥力であれば, Fermi 液体で繰り込んで, 準粒子というものを考えれば, これは Schrieffer の教科書にも書いてあるのですけれども, 準粒子というものになって, その準粒子の間にこの electron-phonon 相互作用がはたらくと考えます。だからいくら screen されても, この Coulomb 斥力というのは大きいかもしれないんだけど, その斥力は, Fermi 面を不安定にしないので, 繰り込んだ準粒子を考えて, 準粒子に electron-phonon 相互作用がはたらいて, 超伝導になるというふうに考えなさいというのが当時の理解です。

[Slide 16] 実際に BCS 理論というのは, 波動関数なのです。ここの u_k が Constant で, v_k という係数をかけて, これが Up Down の電子の k と $-k$ の電子の Pair を考えます。はじめの項は Constant であり, ここに 2 個の電子があつて, 電子数も保存しないし, とんでもない波動関数に見えますけれども, これが正しいのです。実際にこれから高温超伝導とか相関の強い電子系の超伝導が導かれます。そのときは, u_k, v_k というのは波動関数ですので, それが符号を変えたり, これがギャップ関数といわれるのと同様しているのです。それが符号を変えるということが異方的超伝導, s 波はなくて d 波とか p 波とかができるのと同様しているのです。「ギャップが符号を変えるのは, どういう意味ですか」って学生から質問されたことがあるのですけれども, ギャップの大きさではなくて, こういう波動関数なので, 位相があつて符号を変えていいわけなのです。

超伝導状態からの励起スペクトル



[Slide 17]

Electron Correlation の理論

- 金森近似 多重散乱 1963
- Hubbard近似 Decoupling近似 1963, 1964
- Gutzwillerの変分理論 1963, 1964, 1965

バンド幅の縮小

U の上限がバンド幅でカットされる。

[Slide 18]

[Slide 17] 実際に超伝導状態からの励起スペクトルというのがあるのです。Fermi 面の下と上ですね。高温超伝導体だと, 転移温度が 90K ぐらいと高いので, 60K ぐらいで光電子分光という実験でやると, Fermi 面の下の励起と, Fermi 面の上の励起と, 両方が観測されて, Fermi 分布関数で割ると, BCS 理論で言う, ホールの励起とエレクトロンの励起の強度がちゃんと出てくる。こちらの励起が u_k^2 で, こっちが v_k^2 で足すと 1 とかというようなことが, 最近, 2000 年代の東北大学, 高橋研, 松井くん達によって観測されています。遠山さんも議論に参加されていると思うのですけれども, そうというのが実際に観測されて BCS 理論が確認されているのです。

これはだから, 高温超伝導体なんですけど, やはり BCS 理論で言うとおりの, ただちょっとギャップの対称性は変わりますけれども, そういうものが現実に観測されています。

超伝導のお話は後でお話します。

[Slide 18] 電子相関の理論として、物性で有名なのは、金森近似というのと Hubbard 近似というのと Gutzwiller 近似というのがあります。これらは若干、半定量的な議論なんですけど、電子間の相互作用が狭いバンドの電子ではたらくと、バンド幅が縮みます。これは有効質量が大きくなるということに関係しています。

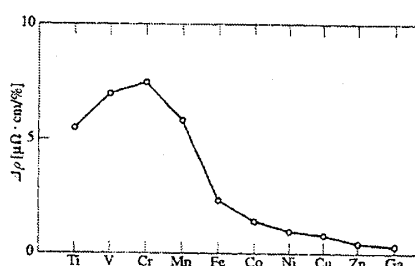
それからもう一つ大事なことは、金属であれば、どんなに電子間の Coulomb 相互作用斥力が強くても、effective な U というのは、バンド幅の大きさにしかはたらかないのです。それはものすごく嫌いな人間同士は、真っ正面から同じ場所を占めるということではなくてお互いに避けます、電子間の反発力が強ければ、同じサイトにはいなくて、遠回りして走ればいいので、せいぜい運動エネルギーの損だけしか感じないというのが、これが非常に大事なことです。金属になれば、有効 Coulomb 相互作用というのは、同じサイトに入らないので、バンド幅でカットされてしまうということです。

金属中の磁気モーメント

1. Friedel の理論
2. Anderson Hamiltonian
磁気・非磁性の相転移
3. 近藤効果 抵抗極小
Log T の異常
4. Fermi 液体論

[Slide 19]

Friedelの理論(1958)非磁性



[Slide 20]

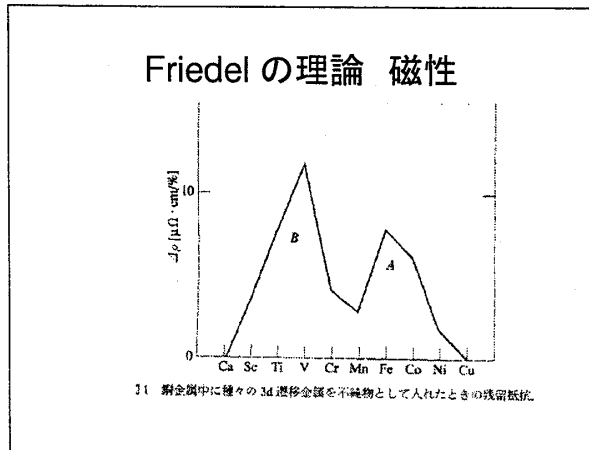
[Slide 19,20] 次に 1960 年代に問題になったのは、金属中の磁気モーメントの問題です。今まではバンドの話でしたけれども、それを局所的に、あるサイトだけに Coulomb 斥力がはたらくときに、あるサイトに磁気モーメントが発生するんじゃないかという議論がありました。Friedel の理論というのは、1958 年なのなんですけれども、これが残留抵抗なんですけど、例えばこれはアルミニウムにチタン、バナジウムなどの 3d の遷移金属を入れると、このマンガンとか Cr のへんが、d 電子が 5 個入っているような場合なのです。d 軌道というのは、 l が 2 ですから、5 つあって、スピンまで入れると 10 個入るところが、5 個で半分入っていると、位相のずれというのが $\frac{\pi}{2}$ で、残留抵抗というのは、位相のずれの $\sin^2$ なので、最大のところです。

こうして、Al 中の Mn はノンマグネティックな場合に相当し、Spin も入れると自由度が 10 あって、そこに半分詰まっているからです。

[Slide 21] これが同じマンガンでも、これが銅のなかへ入れると、抵抗が減ります。これは上向きの電子が 5 個詰まっていれば、Fermi 面のフェイズシフトが π で、下向きが 0 個なら 0 で、 $\sin \delta$ の 2 乗というのは、 π でも 0 だし、0 でも 0 なので、ここはマグネティックになると、残留抵抗が減りますよというわけです。だから世の中には、磁気モーメントを持つときと持たない場合がある。これが、Friedel が実験事実に基づいて、言っている話なのです。

[Slide 22-27] それに基づいて、Anderson という人が、伝導電子のバンドと、d 軌道という、つまりいまの磁気モーメントを持つような d 軌道を 1 個だけ考えて、ある原点に不純物を 1 個だけ置いて、そこには Coulomb 斥力がはたらくモデルを考えました。あとは伝導電子と d 軌道の間が混ざり合い、d 軌道から伝導電子に行ったり、伝導電子から d 軌道に入ったり、こういう入れ替わりが起こると考えます。だから、d 軌道が幅を持つわけです。有限の寿命を持つので、幅を持ちます

が、多体問題というのは、唯一クーロン相互作用 U だけなのです。



[Slide 21]

Anderson Hamiltonian

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_d n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{k\sigma} \{ V_{kd} C_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + V_{dk} d_{\sigma}^\dagger C_{k\sigma} \}$$

[Slide 22]

Hartree-Fock 近似

$$U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} = U \{ (n_{d\uparrow} - \langle n_{d\uparrow} \rangle) (n_{d\downarrow} - \langle n_{d\downarrow} \rangle) + (n_{d\uparrow} \langle n_{d\downarrow} \rangle + n_{d\downarrow} \langle n_{d\uparrow} \rangle - \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle) \}$$

[Slide 23]

Anderson は Hartree-Fock 近似を用いて磁気モーメントの発生を説明した。

$$U / (\pi \Delta) > 1$$

Δ は d 軌道のエネルギー幅

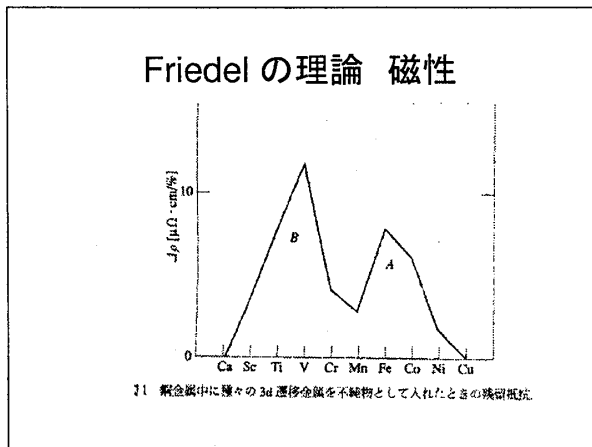
[Slide 24]

Anderson がノーベル賞をもらったときに言っているのは、もっとも単純なこの多体問題で、たくさんの人がこれで論文を書いているということです。僕もこれで学位をもらいましたので、Anderson の悪口は言えないのですけれども、これが一番単純な多体問題です。いまは Bethe 仮説を用いた厳密解もあって、いろいろな解析性も全部わかっているのですけれども、当時はこれが難問で、Anderson が最初に提唱したときは、Hartree-Fock 近似で取り扱いました。これを変形すると、平均からのずれの 2 乗と、一体で近似できる項がでます。

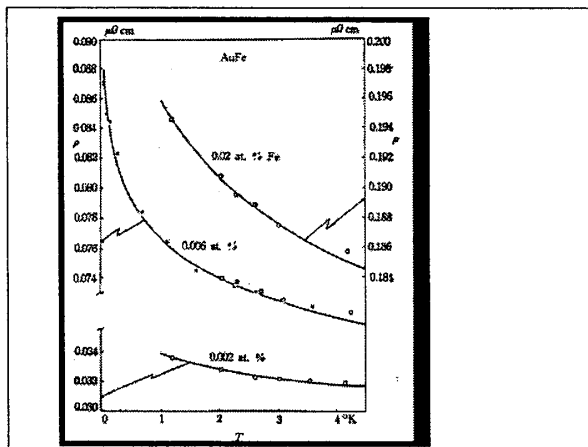
このずれの 2 乗を無視すると、一体問題になって、Hartree-Fock 近似ができて、それで解くと次のようになります。 Δ というのはさっきの d 電子と伝導電子が混成することによる d 軌道のエネルギー幅なのですけれども、その幅よりも U が大きければ、磁気モーメントを持って、小さいと持たないという答えが出てきます、われわれはこれを疑いもしなかったのですけれども、考えてみれば、これは非常にまずいことだったのです。実際にこういうマグネティックな解があつて、残留抵抗が下がったと思われていたのですけれども、一方で 1930 年代からずっと、一旦下がった抵抗が上がるといふ実験事実があつて、それは同じ問題だということに、はっきりした認識がなかったのです、抵抗極小というのがあつて、いまのように下がったのが、また低温にしていくと抵抗がこういふように上がっていたのです。

この電気抵抗が、低温でなぜ上がるかというのは、1964 年に近藤さんの理論で解決されました。磁気モーメントがあるとして、伝導電子との散乱を考えると説明できるのです。これは局在した

Spin と伝導電子の交換相互作用を考えるのですが、そういう内部自由度がある散乱体によって、散乱されるとき、ボルン近似より次数を上げるとこういう $\log T$ という項があって、 T が下がるとどんどん抵抗が上がるということが出てきたのです。



[Slide 25]



[Slide 26]

これが、抵抗極小を説明したのです。なかなか普通、気が付かなかったことで大発見です。ただこれで終わらず、そのとき近藤問題というのが起こりました。それは温度 T を 0 にすると、抵抗が無限大になってしまうので、どう解決したらいいかということが問題だったのです。

近藤効果 1964年

- $\log T$ の存在 抵抗極小の説明
- Spin という内部自由度のある散乱体を介する伝導電子間の多体問題
- Fermi 面の存在

[Slide 27]

フェルミ液体の基底状態

局所的に
スピンを
保存する

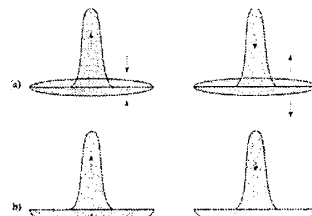


図3 中心の電子のスピンが固定。下図のときの周囲のスピンは分断 (a) から、一様に上下のスピンを1/2個ずつ減らした図 (b)。中心の電子と反対方向のスピンのはたが問題である。中心の電子と周囲の電子が結合してスピンを局所的に保存する。

[Slide 28]

[Slide 28] それが実際は、磁気モーメントを持つということは、 d 電子が、上向き Spin を持つか下向き Spin を持つかの自由度があり、縮退しているので、Ground State にはなれないわけです。縮退が残ったままではいけないので、実際わかったことは、局在した Spin と、周りの伝導電子が Spin が平行な方向は $\frac{1}{2}$ 個減って、反対向きの Spin の電子は $\frac{1}{2}$ 個増えて、ちょうど周りの伝導電子が Spin として局在 Spin とは逆向き 1 個ぶん集まって、局在 Spin を打ち消します。その反対のほうも同じになっています。伝導電子を伴った d 電子が、その Spin が上向きと下向きの 2 成分が singlet に結合して、絶えず時間的に入れ替わっている状態が基底状態であるということがわかったのです。

だから一所懸命磁気的な解をつくったのですが、これが結局、 singlet に結合して、 spin がまた消えてしまったというのが答えなのです。だから本当は、Anderson が解いたように、Hartree-Fock 近似で [Slide 23]、1 個の不純物というのは揺らぎばかりなのに、これを無視して解いたところが間違いです。だから揺らぎをきちんと入れて解くと、こういう状態 [Slide 28] になって、そ

それはだから、結果的に $U = 0$ のときの Fermi 液体から、 U を入れていっても、同じサイトに同時に 2 個の d 電子が入入るという確率を減らすだけで、ずっと singlet の状態が連続的に続くというのが、最終的な答えなのです。

あとの関係で言いますと、これは不純物の d 電子と、伝導電子なのですが、Hubbard Model みたいな 1 種類の電子しかないような場合に、ある原点のところの電子が上を向いていると、周りの電子がこういう構造をしていて、この全体で $\frac{1}{2}$ 個ずつ増えているのを減らして、下向きも $\frac{1}{2}$ 個減らすということをやると、下の図の構造になります。これは $\frac{1}{2}$ ずつ uniform な系なら、全部一様に電子数をずらすと、こういうかたちになって、あるサイトが上を向いていると、周りには同じ方向の spin が 1 個足りないようになっています。そういうかたちに結局なっていて、Fermi 液体というのは、コヒーレントに電子移動が起こるためには、局所的に spin を保存するというのが本質的であることを示しています。

Hamiltonian は、トータルにスピンを保存するのですが、local にスピンを保存するというのが基底状態としてのフェルミ液体です。local という意味は、 q が有限という意味で、 q はどんなに小さくてもいいわけです。広がりには問わないのですが、local と一様分布というのが物理では違って、コヒーレントな運動をするためには、無限の遠くから電子を運んでくることができないというのが、Anderson の直交定理というので証明されていることなのです。

LandauのFermi液体論

・ 連続性の原理 (P.W.Anderson)

準粒子の寿命の間に相互作用 U をゆっくり導入できる。断熱的に相互作用系に接続できる。

Fermi液体では準粒子の寿命が長い。

$$\hbar/\tau = (k_B T)^2 / E_F$$

$k_B T / E_F \ll 1$ が Fermi 液体の成立条件
相互作用に関する解析性を保証する。摂動展開が可能である。

[Slide 29]

遍歴電子磁性の理論的諸問題 まとめ

京大院理 山田耕作

[Slide 30]

[Slide 29] そういうことで、大事なことは、いま言いましたように、1 個の不純物の系で見たように、 U を 0 からずっと変えていったときに、非磁性的 (ノンマグネティック) な状態がずっと続いて、それは強磁性になるとか、反強磁性になるとか、そういう相転移が起こるとだめなのですが、起こらないような場合は、Fermi 液体の状態が続いて、それは多体相互作用に関して、系は断熱的に、連続的に接続できる。それは準粒子ということを考えて、準粒子の寿命がこういう $\frac{(k_B T)^2}{E_F}$ というかたちで与えられているのです。この温度が低くなれば、寿命がどんどん長くなるので、そのあいだに多体的な相互作用を断熱的に入れることができ、そうやって、一体問題から多体問題へ、連続的に移行できる。これが Andersen が「連続性の原理」と言っていることです。

これは Landau が言っていることなのですが、連続性の原理というもので、Fermi 液体では、そういうことができ、そのクライテリオンは、Fermi 温度に対して温度 T が低いかどうかということで決まります。

この場合はだから、相互作用に関する摂動展開が可能で、厳密解を使って実際に展開すると、いまの Andersen Model では U に関して収束半径無限大で収束します。

[Slide 30,31] 次に話がかわりますが、強磁性の問題で、これは僕らが大学院に入ったときに、永宮健夫先生とか伊藤順吉先生とか、いろいろな実験家も含めて、金属強磁性はどうして起こるか

という議論があつて、誰も鉄族強磁性は説明できないなという議論のまま、ずっと未解決でいたのです。

鉄族(3d遷移金属)の強磁性

- 電子ガスの強磁性
- Brueckner-Sawada
- B.S.Shastry; Phys. Rev. Lett. 38, 449 (1977)

$$\chi = \chi_0 / \{1 - X + X^2 / 2 \cdot [0.303 - \ln X] + O(r_s^3)\}$$

ただし、 $X = \alpha r_s / \pi$, $\alpha^3 = 4 / (9\pi)$

Hartree-Fock近似では $X=1$ で強磁性になる。 X^2 以上の項を入れると $X=1.12$ にずれる。 r_s にすると、6.03から6.75にずれることになる。

[Slide 31]

電子相関の補正はBS理論と違って小さいことになる。

- $\chi = \chi_0 / \{1 - X + X^2 / 2 \cdot [0.303 - \ln X] + O(r_s^3)\}$
- しかし、従来のBS理論では上記の0.303が1.534であつたという。このBS理論の場合は $X=2.965$, $r_s=17.878$ にならないと強磁性は生じないことになっていた。
- 正しい結果は $X=1$ が1.12に変わるのであるから12%くらいの補正となる。
- 平均場近似がそう悪くない。

[Slide 32]

その根拠は、これは磁化率の正しい答えなのですけれども、その前に誤って、この0.303というのが、Brueckner-Sawada理論で1.534という数値で議論されてきました。さっきの r_s 展開で $1-X$ というのが、平均場近似の結果です。

こちらのほうで言うと、 X というのが r_s の展開で、これが r_s の1次で、2次で、こうずっといつているわけです。Hartree-Fock近似をやると、 $1-X$ で、 X が1のところで、これは磁化率ですから、この部分が0になるところ、 $X=1$ で強磁性になるのです。

しかし従来われわれがやっていたときは、ここの数値が間違っていたもので、いまのこの正しいのでやると、1を入れて、ここの補正を求めると、 X が1.1で、12パーセントぐらいしかずれない。だからこの高次が電子相関のエネルギーで、いままで、われわれはHartree-Fock近似は悪くて、相関が入ると強磁性が起こらなくなるので、電子相関は非常に大事だというように、ずっと教えられてきていたのですけれども、これが0.303で、これがBrueckner-Sawadaが1.534であつたのです。その当時は、 r_s が17いくつかにならないと、ものすごくlow densityにならないと、強磁性にならないと思っていたのです。

ところが正しい結果を入れると、12パーセントぐらいしかずれなくて、結局、平均場近似はそんなに悪くないということがわかったと思います。これは実際に芳田奎先生の『磁性』というのが岩波から出ていますけれども、それを英訳したのが10年前で、その英訳が終わる頃に、澤田先生から芳田先生のところに手紙がきて、この数値が間違っていたんだよという。Shastryというインドの人が、学位論文で計算したのがあるのです。それがさっきの1977年で、われわれとしては非常に不勉強だったのです。

坂東:それまでわからないのですか。

山田:それがね、まさか有名なBS理論の計算が間違っているとは思わなかったです。Shastryさんは知っていたんだけど、『Physical Review Letter』に論文が出ているので、われわれは澤田先生に言われるまでは、気が付かなかったのです。澤田先生はもちろんご存じだったんです。

[Slide 32] だから結局、Brueckner-Sawadaで前にやっていたのでは、1.534だったので、 r_s が17いくつかで、本当は正しいやつだと6とか7ぐらいで強磁性になる。だからHartree-Fock近似はそんなに悪くないということなのです。

澤田先生は亡くなりましたけど、その前にそういう手紙で知らせていただいたのです。

スピンの揺らぎの理論

- ・ 守谷・川畑 SCR理論
- ・ スピンは転移温度の上でも揺らぎとして存在し、その自由度を持つ。これは常磁性状態のエントロピーを増やし、安定化させる。
- ・ 結局、転移温度を下げる。

[Slide 33]

[Slide 33] そういうことで、長らく僕は、Brueckner-Sawada という名の論文を信じて、その計算結果も信用して、いろいろと議論してきていたのですけれども、それがそういうことです。

[Slide 34] いま言いましたように、何かオーダーが起きるときは、平均場近似が協力現象ですの、そんなに悪くないだろうということなのです。

[Slide 33] それでただ、強磁性はそれで起こるとしても、実際に平均場近似というのは、パラの常磁性状態というのを一様分布にしています。実際にはエントロピーとか spin の揺らぎというのを考慮すると、パラの状態のエントロピーを増やして、エネルギーを下げることによって、パラの状態が安定になるので、 T_c が下がるということなのです。守谷・川畑という理論ですけれども、そういう議論があります。ですから、まるっきり平均場近似がいいというわけではないのです。

[Slide 34] 実際、これからのお話と関係するような、電子相関の強い金属で Coulomb 相互作用が電子にはたらくのですけれども、超伝導以外はインスタビリティがないような系で考えるときは、超伝導になる前というか、超伝導になる転移温度よりは高温では、いま言いましたように、斥力によって Fermi 液体が実現する。その条件は、Fermi energy よりも温度が低いということです。これが2次元の電子系でスピンの揺らぎが強いときは、ここが T^2 ではなくて、 T linear になるので、ちょっと微妙にはなるのですけれども、この高温超伝導体でも、Fermi 面全体で考えると準粒子が定義できて実験でも観測されます。

LandauのFermi液体論

- ・ 連続性の原理(P.W.Anderson)

準粒子の寿命の間に相互作用 U をゆっくり導入できる。断熱的に相互作用系に接続できる。

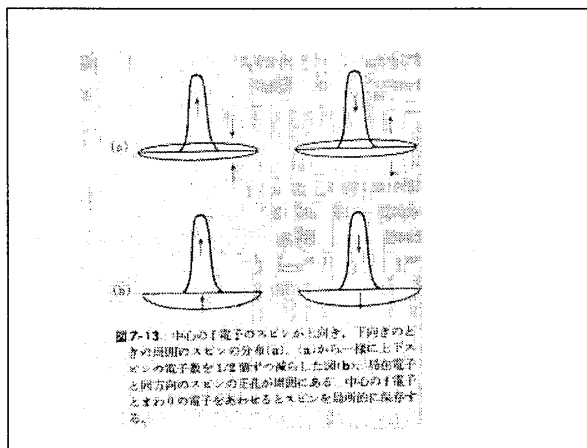
Fermi 液体では準粒子の寿命が長い。

$$\hbar/\tau = (k_B T)^2 / E_F$$

$k_B T / E_F \ll 1$ が Fermi 液体の成立条件

相互作用に関する解析性を保証する。摂動展開が可能である。

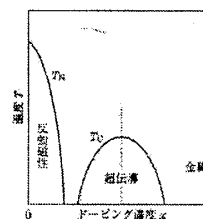
[Slide 34]



[Slide 35]

[Slide 35] いま言いましたように、Fermi 液体というのは、あくまでスピンは互いに singlet で、金属の Fermi 液体というのは、Anderson が一所懸命探している金属の RVB 状態に他ならないの

銅酸化物高温超伝導体

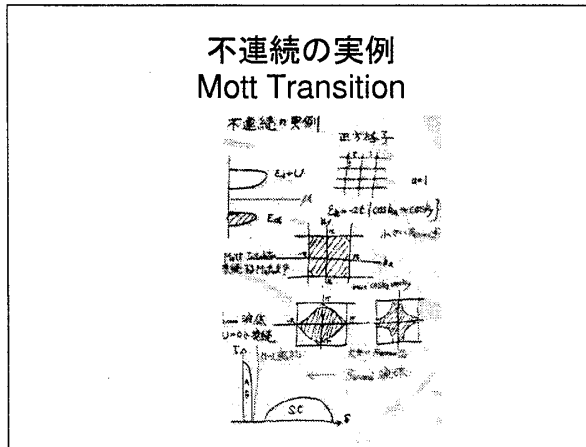


[Slide 36]

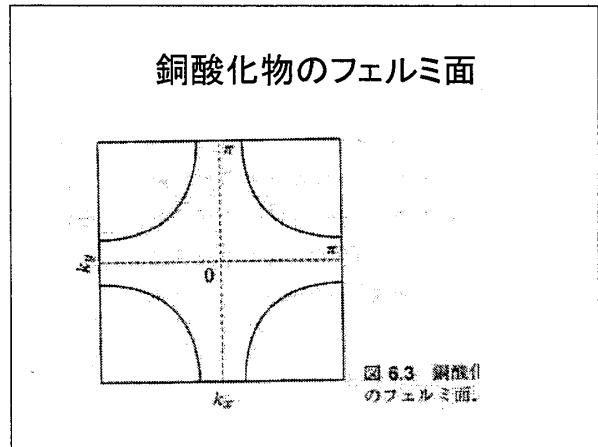
です。

Anderson が、Fermi 液体を否定して、RVB 状態というものを一所懸命探しているの、僕はだから矛盾しているのではないかと思うのです。Fermi 液体は、RVB 状態を満たす金属で、これがノーマルの状態で、これから超伝導を考えればよいという立場なのです。

[Slide 36] 実際に高温超伝導体では、こういうようになっています。ドーピングというのをやりますけれども、half filled のところへ、電子やホールを 5 パーセント、10 パーセント入れていくと、超伝導が起こる。



[Slide 37]



[Slide 38]

[Slide 37,38] いままで、Fermi 液体というのは、電子間の相互作用に関して、連続であるという話をしましたけれども、もしも正方格子を考えて、各格子点に 1 個ずつ電子を置いていくと、Coulomb 斥力がうんと強ければ、各格子点に 1 個ずつ電子が詰まって、 U が大きいと 2 個詰めると反発力のはたらきますから、2 個目は $E_d + U$ のところに入らなきゃいけないので、電子は移動できず、絶縁体になってしまう。これが Mott 絶縁体といわれるものです。

ここへドーピングといって、電子数を減らすなり増やすなりをするのですけれども、この Mott 絶縁体から電子を減らしたときに、dispersion が $\cos k_x + \cos k_y$ というのができて、エネルギーが一番、この (π, π) の所が高いので、隅っこに穴が開くのです。ここは Up か Down かの電子が 1 重に詰まっている Brillouin ゾーンです。

高温超伝導の初期は大きい Fermi 面、小さい Fermi 面という議論がいろいろあったのですが、実際の Fermi 面は、こういう Brillouin ゾーンの半分しか詰まっていなくて、この半分のところに、上向きと下向きの電子が 2 重に詰まっている。ちょっとホールを減らすと、ここのがちょっと少なめに入ることになります。実際は次近接の対角線の相互作用があるので、こういうところ $(\pi, 0)(0, \pi)$ がエネルギーが下がって、こういう Fermi 面の格好をしているのが、高温超伝導体なのです。

この図の 2 番目と 3 番目のフェルミ面の間は、絶対に連続的には変わらないわけです。ここは 5 パーセントか 10 パーセントぐらい、角っこが現れているんですけども、こちらは半分、50 パーセント以下に電子が詰まっているので、だから Metal-insulator transition というのはこの間にあって、Mott 絶縁体から超伝導を議論することができないはずなのです。物性物理では、ものごとは連続にかわるか、不連続であるかというのは非常に大事で、これは Anderson の 1984 年の教科書にわざわざ原理として書いている話です。連続性の一番美しい例が、Fermi 液体であると、Anderson は言っているわけです。

だから、Anderson が、僕はちょっと話をしたことがあるんですけど、Anderson はこの高温超伝導体は、Fermi 液体ではないので、フェルミ面のどこにも quasi particle が存在しないと言ってい

ます。全部が高温超伝導体の電子系全体が、異常な系であるという考え方なのですけれども、さっきも実験でお見せしましたように、quasi particle のスペクトルというのは、実際に実験でも見つかっているんで、Anderson は間違っていると思うのですけれども、Anderson も連続の原理は守っているのです。

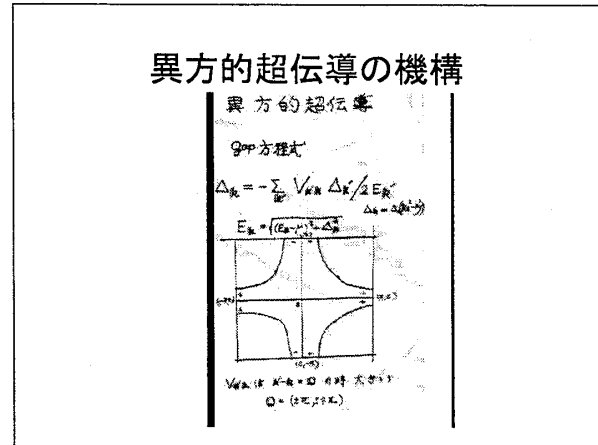
だから、Anderson が言っている Fermi 液体の連続性というのは、正しい、いい指摘であると思います。不連続のところはどこかを考えなさいということなのですけれども、現実に応用する際に、Anderson は全部が異常金属として接続したので、現実とはあわないのです。

Gap Equation

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

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta_k^2}$$

[Slide 39]



[Slide 40]

[Slide 39,40] だからそうすると、Coulomb 斥力で、どうやって超伝導が起こるかという話をいまからします。これはBCSでも何でも、Gap, T_c を、超伝導の Δ_k, k' としますと、hyperbolic tangent, これで超伝導が決まるわけです。s波の場合は $\sum_{k'} V_{kk'}$ 電子間の相互作用が、これがマイナスなので、 Δ_k 正で等方的なのです。Gap をつくることのできる。異方的な超伝導の場合は斥力ですので、これが斥力であると、どうすればいいかというと、hyperbolic tangent のところは正で、温度を0にすればこれは1ですから、そして $E_{k'}$ というのは準粒子の励起エネルギーで、これは正なので、これが k と k' が、この相互作用で結び付くのですけれども、実際の系は異方的になっていて、この場所とこの場所が強く結び付くとかします。等方的な結びつきじゃなくて、異方的になっているというところがミソで、それぞれの場所で、こちらがもしもプラスなら、これが強く結びついてマイナスだと、 k がマイナスになる。こっちがマイナスなら、こっちがプラスになるというような組をつくってやると、Gap 方程式はこうなっているときに、プラスマイナスプラスマイナスというふうに符号を変えてやると、ちょうど対角線のところはGapが0になるのですけれども、node を持ったGap関数で符号が変わるような超伝導ができます。どんなに斥力が強くても、 k' で積分をしてやるとプラスとマイナスで符号を変えるので、等方的な斥力は消えてしまいます。そういうことで、どこで強く相互作用するかということが決まると、Gap関数が決まります。これはBCSの波動関数に関係するので、もちろん符号は変わってもいいのです。そういうプラスマイナス、符号を変えて、node というのは、この変わり目のところがGapがゼロになるのです。実際の高温超伝導体では、 (π, π) という反強磁性揺らぎが強いので、 $(\pi, 0)$ と $(0, \pi)$ 、ここここを、非常に強く結び付けるような相互作用があつて、おまけにここは、電子論的に van Hove singularity というのがあつて、電子状態密度が非常に高いところであるわけです。

[Slide 41,42] もちろんCoulomb 斥力が原因で、こういうことが起こるので、この白黒がGapの符号と考えると、ギャップ関数がプラスマイナスプラスマイナスというので、ここにGapが0のところができる。そういうことで超伝導が起こります。

異方的超伝導

$$\lambda \Delta(k) = - \sum_{k'} V(k, k') |G(k')|^2 \Delta(k')$$

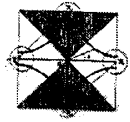


Figure 15. Feynman diagram of the loop. The vertex functions of the diagram are given by the same loop. The diagram is the same as the one in the text.

$$E_k = -2t(\cosh k_x + \cosh k_y) + 2t \cosh k_x \cosh k_y - \mu$$

[Slide 41]

Higher Order Perturbation Expansion for Pairing Interaction in Repulsive Hubbard Model

Takuji Nomura and Kosaku Yamada
J.Phys. Soc.Jpn.72,2053(2003)

[Slide 42]

電子相関による超伝導の計算

超伝導状態は、以下のÉliashberg 方程式を解くことにより議論する。

$$\lambda_{\max} \Delta(k) = - \sum_{k'} V(k, k') |G(k')|^2 \Delta(k').$$

$T = T_c$ で $\lambda_{\max} = 1$ である。

有効相互作用 $V(k, k')$ は、spin-singlet state の場合、

$$\begin{aligned} V(k, k') &= V_{\text{RPA}}(k, k') + V_{\text{Vertex}}(k, k') \\ V_{\text{RPA}}(k, k') &= U + U^2 \chi_0(k - k') + 2U^3 \chi_0^2(k - k') \\ V_{\text{Vertex}}(k, k') &= 2U^3 \text{Re} \left[\sum_q G^{(0)}(k + q) G^{(0)}(k' + q) [\chi_0(q) - \phi_0(q)] \right]. \end{aligned}$$

[Slide 43]

Perturbation Theory with Respect to U

超伝導状態は、以下のÉliashberg 方程式を解くことにより議論する。

$$\lambda_{\max} \Delta(k) = - \sum_{k'} V(k, k') |G(k')|^2 \Delta(k').$$

$T = T_c$ で $\lambda_{\max} = 1$ である。

有効相互作用 $V(k, k')$ は、spin-singlet state の場合、

$$\begin{aligned} V(k, k') &= V_{\text{RPA}}(k, k') + V_{\text{Vertex}}(k, k') \\ V_{\text{RPA}}(k, k') &= U + U^2 \chi_0(k - k') + 2U^3 \chi_0^2(k - k') \\ V_{\text{Vertex}}(k, k') &= 2U^3 \text{Re} \left[\sum_q G^{(0)}(k + q) G^{(0)}(k' + q) [\chi_0(q) - \phi_0(q)] \right]. \end{aligned}$$

[Slide 44]

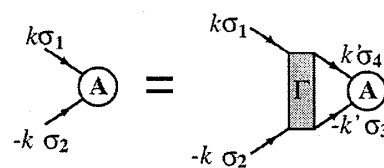
$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - t' \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma_1 \sigma_2}^A(k) &= - \frac{T}{N} \sum_{k', \sigma_3} \Sigma_{\sigma_1 \sigma_3}^A(k') |G_0(k')|^2 \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}(k, k'), \quad (5) \\ \lambda \cdot A_{\sigma_1 \sigma_2}(k_F) &= - \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{L_F}{N_F} \ln \left(\frac{2e'W}{\pi T} \right) \sum_{j=1}^{N_F} \left| \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial k} \right|_{k=k_F j}^{-1} \\ &\quad \times \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}(k_F, k_F) A_{\sigma_1 \sigma_2}(k_F). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}(k, k') &= \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(1)}(k, k') U + \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(2)}(k, k') U^2 \\ &\quad + \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(3)}(k, k') U^3 + \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(4)}(k, k') U^4 \\ &\quad + \dots \quad (6) \end{aligned}$$

[Slide 45]

$$\Sigma_{\sigma_1 \sigma_2}^A(k) = - \frac{T}{N} \sum_{k', \sigma_3} \Sigma_{\sigma_1 \sigma_3}^A(k') |G_0(k')|^2 \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}(k, k').$$

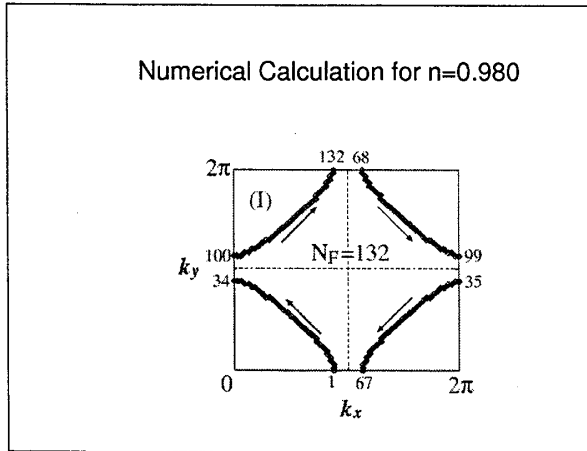


$$\begin{aligned} \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(\leq 2)}(k, k') &= \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(1)}(k, k') U + \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(2)}(k, k') U^2 \\ \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(\leq 3)}(k, k') &= \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(\leq 2)}(k, k') + \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(3)}(k, k') U^3 \\ \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(\leq 4)}(k, k') &= \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(\leq 3)}(k, k') + \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{(4)}(k, k') U^4. \end{aligned}$$

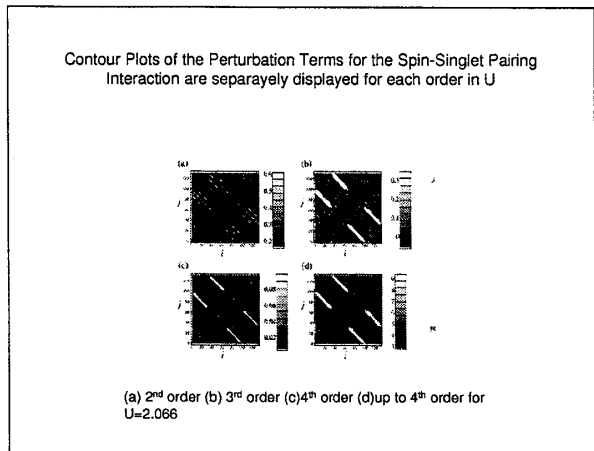
[Slide 46]

[Slide 45-47,49,50] これは2003年、野村くんが、実際に Hubbard Model で次近接まで入れて計算したものです。これはさっきの Gap 方程式と同じようなもので、これが Gap 関数に対応するもので、ここが k, k' という相互作用を、Coulomb 相互作用 U で展開して4次まで入れて、実際にどういう超伝導が起こるかというのを計算します。これは half filled に近い、銅の高温超伝導体の場合を計算しますと、こういうように Gap 関数がプラスマイナスプラスマイナスと4回符号を変えて、d 波になっているのです。これが固有値が1のところで、超伝導が起こるのですけれども、

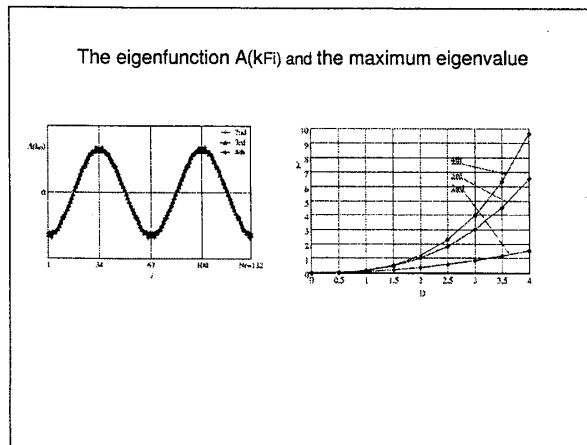
U の関数として、実際に T_c を求めることができて、これがその結果なんですけど、 U が大きくなると、 T_c が上がるのです。これが例えば filling が 0.98 だと 2 次摂動、3 次、4 次と、割合この 3 次までの摂動と、4 次までの摂動は収斂が良くて、filling が 0.84 の場合はこうなって、3 次、4 次だと T_c が、ほとんど一致しています..



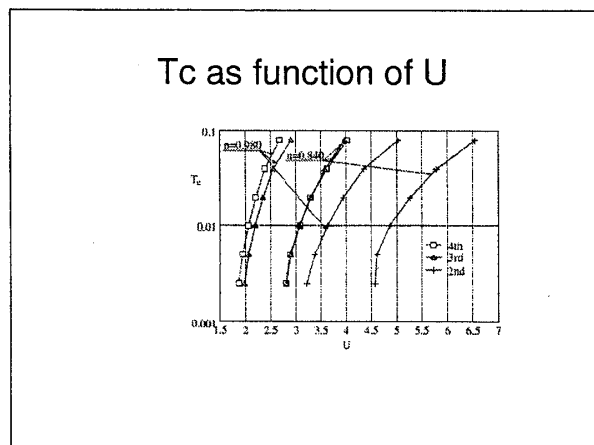
[Slide 47]



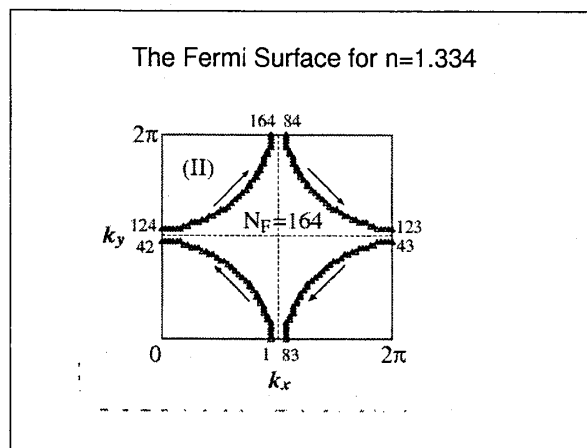
[Slide 48]



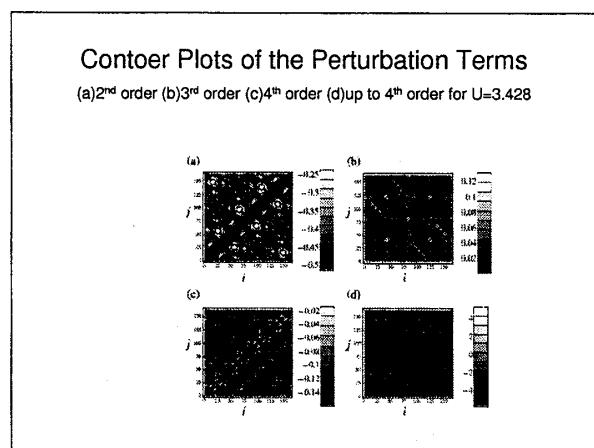
[Slide 49]



[Slide 50]



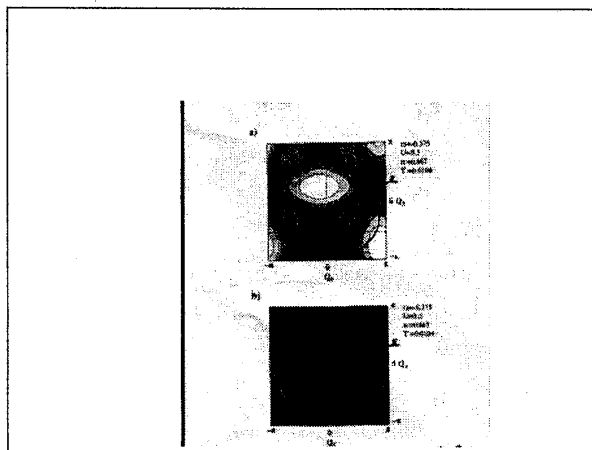
[Slide 51]



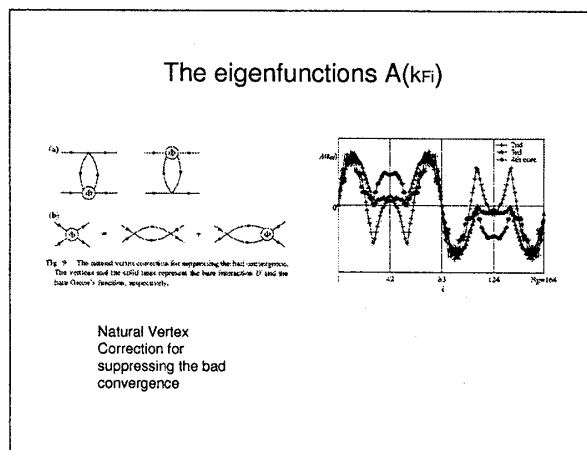
[Slide 52]

[Slide 51] このように d 波の場合は非常に収斂性が良くて、3 次までと 4 次までの摂動計算で T_c の差が小さいです。固有関数もどの次数でとめてもほとんど違いがありません。次にこれは前

野さんのところで研究されている Sr_2RuO_4 の場合で、これは実験的には triplet の p 波の超伝導なのですが、それに対応する Fermi 面を仮定して同じ計算をします。この場合は電子数は half filled よりだいぶ多い filling で、実際にこういう形です。



[Slide 53]



[Slide 54]

[Slide 53,54] 大事なことは、どこどこが強く相互作用するかというのは、 k をひとつ決めると、この白いところの相互作用が一番強くて、ちょっと薄くて見えないのですが、これが Fermi 面で、ちょうど反対称のところが強くて、p 波が起こるのです。これは非常に微妙で、2 次がこれで 3 次がこれで、ちょうどここが Fermi 面の真ん中で、プラスとマイナスで p 波のシンメトリーを持っているのです。高次にしていくと Gap 関数がいろいろと変化して、収斂性が良くなる。

坂東 : その 2 次とか 3 次というのは perturbation のオーダー?

山田 : U の相互作用の。

坂東 : そんなに現象と違う項にわけてで、どこが正しいんですか。何かよくわからないんですが。

山田 : Gap 関数というのは d 波では安定しますが、p 波では変化します。

坂東 : それ計算ですよ。実験データとはちがいますよね。

山田 : ええ。

坂東 : で、2 次とか 3 次とかいうのだけは現象を reproduce できないので、3 次まで入れたっていうことですか?

山田 : ええ。3 次まで入れた、4 次まで入れた。

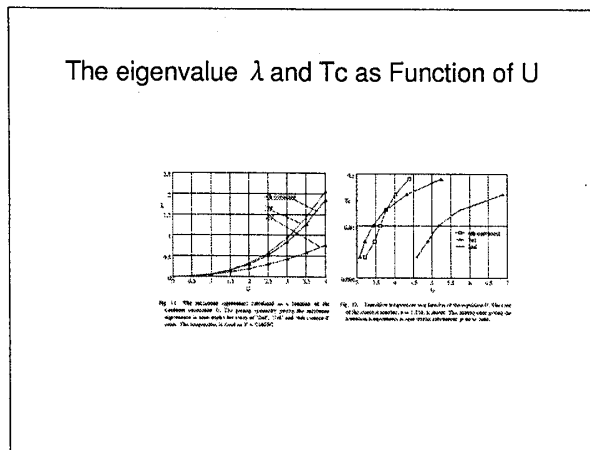
坂東 : そんなに違うもんなんですか。答えは合っているんですか?

山田 : 合っています。それをちょっと説明しますと、実際に 4 次までやりますと、3 次で T_c が上がって、4 次で下がるように、この Fermi 面の filling のときは、振動するのです。それはこういう particle particle の ladder が一番強く効いてくるからです。それを particle particle ladder を集めて、補正をしてやると、こういう、4 次の corrected というかたちになるのです。

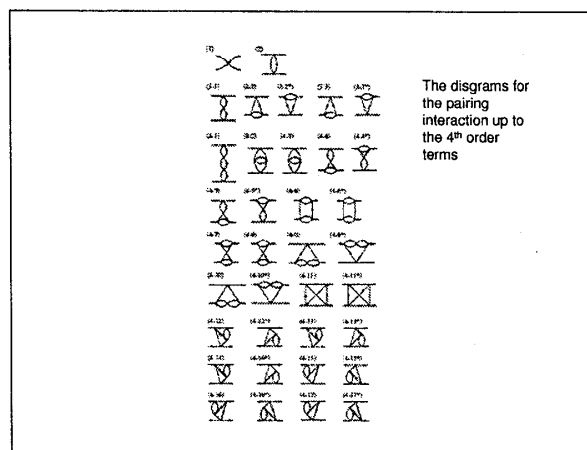
[Slide 55] 実際に T_c を計算しますと、これが固有値で、2 次まで。3 次がこの上かな、3 次まで、4 次まで。転移温度が、 U の関数として 2 次までと、3 次、4 次ですね。corrected というのを入れたのが、これです。3 次と 4 次が割合、対応するかたちになります。

これはだから、何の仮定もなく、 U の摂動で、ただいまの filling は、half filled から外れていて、電荷の揺らぎが強くなるので、収斂性の問題では、難しいわけです。charge の揺らぎを抑えるために、particle particle ladder というのを足しあげると、分母で $1+X$ のようなかたちに収まるように、小さいかたちに抑えることができます。そういう工夫をして求めたもので、原理的に、いまのように 4 次までの摂動を入れて、そういう相互作用の運動量依存性を考慮してやると、

どうい超伝導が起こるかということ、決めることができる。



[Slide 55]



[Slide 56]

[Slide 56] これは4次の摂動のグラフで、計算はなかなか大変で、電子ガスの dispersion がフリーの場合の計算がいままであったのですけれども、Hubbard 模型では初めてです。

自己エネルギーの4次の摂動項
を考慮した超伝導理論

京大院理 新開章吾
(池田浩章、山田耕作)

[Slide 57]

Motivation YBCOはなぜLSCOより T_c が高いのか?

Zhengさんらの高温超伝導体における NQRの実験[1]から次の様なデータがある。

右図は T_c のdホール数・pホール数に対する依存性である。
縦軸によるとdホール数(n_d)/pホール数($2n_p$)が小さい方が T_c は大きいように見える。

これはd-pモデルでは E_d-E_p が小さいことに対応している。

相関が弱いほうが T_c が高くなるという現象である

[1] J.Phys.Soc.Jpn.64(1995)2524

[Slide 58]

[Slide 55,57,58] いままでの話は、 U の関数として T_c が必ず上がるかたちになっています。われわれとしてはもう少し、話を精密化しないとイケないというので次の問題を考えました。これが高温超伝導体の物質と T_c です。この Zheng さんというのは阪大のグループです。 T_c という値と、 Cu O_2 の、d 軌道のホールと酸素の p ホールの数。酸素のサイトが 2 個あるので、2 倍して、酸素の p ホールに対する銅の d ホールの割合を取っています。こちらの比が、2 に近づいて高いと、 T_c がわりと低くて、この銅と酸素のホール数が等しい、1 ぐらいのところは T_c が高いわけです。

こちらのほうは、普通、高温超伝導、LSCO というのは比が 2 に近く、こちらの YBCO というのは、こっちの比が 1 に近いホール数なのです。実際は YBCO の T_c は 90K ぐらいで、こちらは 40K ぐらいです。いままで僕が説明したのでは、超伝導というのは Coulomb 斥力で起こるのですから、Coulomb 斥力が強いほうが T_c が高いだろうということなのです。

ところが、実際にいまの系で言いますと、こちらの d ホールの数が 1 に近いのが電子相関が強い方ですが、 T_c が低くて、d ホール数が 0.7 ぐらいで電子相関が弱い方が T_c が高い。

これはわれわれが高温超伝導がだいたいわかったと思っていたら、次にぶつかった実験との矛盾がこれで、2 回ぐらいマスター論文を書いてもらって、説明がそのたびに変わって申し訳なかったんですけども、なかなか説明できなかったんです。

坂東 : いまのは何が説明しにくかったんですか？

山田 : え？

坂東 : いまの絵で.

山田 : これから説明しますね. いまの説明だけだとわかりにくいと思うんですけど, Hubbard Model だと, いまの LSCO とか YBCO とかの物質の違いは説明できないのです. その違いは何かというと, いま言いましたように, こういう違いを説明しようと思うと, d ホールと p ホールとの個数の違いが T_c の違いを与えている, もちろんドーピング依存性というのはあるのですが.

坂東 : すみません, さっきの U の違いは, どちらにあたるんですか？

山田 : U は同じ銅ですから, 同じかもしれないんですけども.

坂東 : U は同じなんですか？

山田 : だいたい銅の原子で決まっています.

そこで我々は質量増大因子

$$z^{-1} = 1 - \frac{d\Sigma^{loc}(\omega)}{d\omega} \Big|_{\omega=0}$$

に注目した.
電子間斥力 U_0 を大きくすると

- 有効相互作用の増大により T_c が増大
- 有効質量 z^{-1} の増大によりエネルギースケールが小さくなり T_c は減少 ($T_c = z T_{c0}$)

の二つの効果がある.
前回の論文 (J.Phys.Soc.Jpn.74(2005)2592.) で, 自己エネルギーの 4 次項を計算し, Fermi 面近傍で大きな有効質量の増大を得た.
(3 次では Fermi 面の有効質量が軽くなる)
これを d-p モデルに応用し, 後者の効果から実験を説明できないだろうか？

[Slide 59]

Model

d-p モデルを用いる

$$H_0 = \begin{pmatrix} d_{kx}^\dagger & p_{ky}^\dagger \\ \xi_k^d & \xi_k^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_d & \xi_k^d \\ \xi_k^p & \epsilon_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{kx} \\ p_{ky} \end{pmatrix}$$

ϵ_d と ϵ_p は化学ポテンシャル μ を含んでおり, 分数は

$$\xi_k^d = -2t_{dp} \sin \frac{k_x}{2}, \quad (i=x,y),$$

$$\xi_k^p = 4t_{pp} \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2}.$$

となる. 以後, $t_{dp} = 1.0$, $t_{pp} = 0.3$ と固定する.
斥力は on-site で d 電子間のみに働くとする.

$$H_{int} = \frac{U}{2N} \sum_{\vec{k}_i} \sum_{\sigma \neq \sigma'} d_{\vec{k}_i, \sigma}^\dagger d_{\vec{k}_i, \sigma'}^\dagger d_{\vec{k}_i, \sigma'} d_{\vec{k}_i, \sigma}$$

グリーン関数は $\hat{G}^{(0)}(k) = (i\omega_n \mathbf{1} - \hat{H}_0)^{-1}$ で表せる.
ここで, $k = (\vec{k}, i\omega_n)$, $\omega_n = (2n+1)\pi T$ (n : integer)

[Slide 60]

Number of Electrons

以下, $n = 4.9$, $T = 0.01$ に固定する.
 $\epsilon_d - \epsilon_p$ を変化させて, d-ホール数, p-ホール数を計算すると以下のようになる.
 $\epsilon_d - \epsilon_p = 1.5$ が YBCO, $\epsilon_d - \epsilon_p = 3.0$ が LSCO に対応していることが分かる.

[Slide 61]

Fermi Surface

右に $\epsilon_d - \epsilon_p = 1.5$ (YBCO・点線) と $\epsilon_d - \epsilon_p = 3.0$ (LSCO・実線) のフェルミ面を示す.

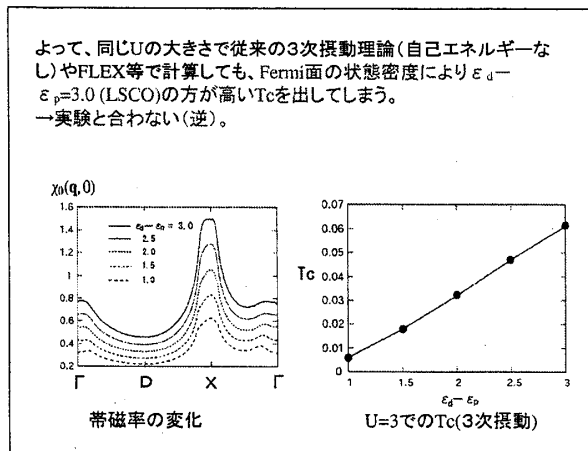
下にそれぞれの分散と d 電子状態密度を示す.
混成により $\epsilon_d - \epsilon_p = 1.5$ の方がフェルミ面の状態密度が小さくっており, Bonding バンドの d 電子数も大きい.

[Slide 62]

[Slide 61,62] この違いというのは, CuO_2 という 2 次元の面があって, 上下にこのランタンとかストロンチウムとか, いろいろなものを置いている. それでその違いで, 銅と酸素の d と p レベルが上下し, 実際は詰まっているホールの数が違う. 銅と酸素の d と p レベルの上下関係を変えているということですが, 混成して全体として電子構造をつくっているんで, ドーピング量と同じなら, Fermi 面を見れば殆ど違いません. いまからちょっとお話しますが, こういう銅と酸素で軌道を考えて, 三つの軌道を考えてバンドをつくって, 実際に計算します.

で、銅のサイトに Coulomb 斥力がはたらくとして計算しますと、実際にちょうど、YBCO に相当するのが d と p のレベルの差が 1.5 ぐらいのところ、この比からですね。こちらのほうは、d と p レベルのエネルギー差が 3 ぐらいが LSCO で、こちらのほうは d ホールの数が多いのです。でも d レベルと p レベルが、銅と酸素のレベルが相対的に違うのですが、和が同じなら同じドーピングなので、Fermi 面はほとんど変わらないのです。

はじめは僕はこのへんのパラメータを変えれば、LSCO と YBCO の違いは説明できると思っていましたのすけれども、実際には電子構造を計算しますと次のようになります。酸素の軌道を 2 つ考えて、銅を 1 個考えたので、3 つ軌道があって、6 個電子が詰まるところを、実際は 5 個近く詰まっていて、5 個よりちょっと少ないかもしれないけれども、そういうところに Fermi 面がこういうようになって、ここが LSCO の場合で、YBCO の場合は、こちらが状態密度でこれがバンドの dispersion ですが、LSCO のほうが鋭いピークを持っているので、電子相関が強いはたらく系になっています。



[Slide 63]

Effective Mass

右図に $U=3, n=4.9$ での有効質量の

$\epsilon_d - \epsilon_p$ 依存性を示す。

Z^{-1} は symmetry line 上の平均。

$\epsilon_d - \epsilon_p = 1.5$ が YBCO。

$\epsilon_d - \epsilon_p = 3.0$ が LSCO に対応

[Slide 64]

[Slide 63] 実際に有効質量と T_c を計算すると、これは 3 次までで計算しています。こういうふうに単純に T_c が上がっていつてしまう。こちらの 3 が YBCO で、実験とは反対になってしまう。

[Slide 64] 大事な話は繰り込みの話で、有効質量というのを計算すると、LSCO のほうが大きくて、YBCO のほうが小さい。で、実際にこれは有効質量を U で摂動展開したものなのですが、3 次というのは half filled のときには消えてしまうので、2 次と 4 次が大事なのですが、これはだいたい、single impurity Anderson Model と同じような係数の変化で、 $1/N!$ に近く、収斂性が非常にいいというのが特色です。だけどこの 4 次が、有効質量がちゃんと求められる上で非常に大事です

[Slide 67] これが結局、答えですけれども、有効質量による繰り込みを入れると、こちらは LSCO で、こちらが YBCO なのですが、単純に U が大きいときは、有効質量が重くなると、エネルギースケールが逆に波動関数の繰り込み因子 z で renormalize されるので、逆に下がるようになる。わかりますかね、そういうことで、 z は有効質量の逆数です。

だから Fermi 液体論で言う、有効質量の繰り込みというのが大切です。実際に超伝導が起こるのは、Fermi 面の近くの準粒子のバンド幅に対して、引力がどうかという議論になるので、電子相関が強くて有効質量が重くなると、準粒子のバンド幅が狭くなって、エネルギースケールが小さくなって、逆に T_c が下がるということです。

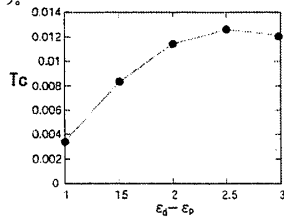
Transition Temperature

自己エネルギーを全 k -space で計算できないため、
見積もった z^{-1} からパラメータを renormalize する。

$$\begin{aligned} t_{dp}, t_{pp} &\Rightarrow z t_{dp}, z t_{pp} \\ \epsilon_d - \epsilon_p &\Rightarrow z(\epsilon_d - \epsilon_p) \\ U &\Rightarrow zU \end{aligned}$$

pairing interaction は 3 次まで計算を行う。

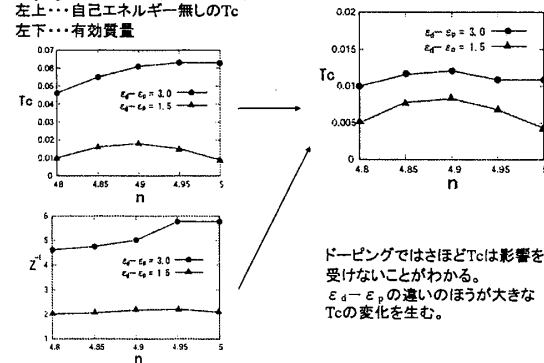
$U=3$, $n=4.9$ での繰り込み後の T_c を示す。
 $\epsilon_d - \epsilon_p = 1.5$ が YBCO、
 $\epsilon_d - \epsilon_p = 3.0$ が LSCO に対応。
繰り込み無しの時の実験との不一致が大きく改善された。



[Slide 65]

Doping - dependence

Doping n を変化させ計算を行った ($U=3$)
左上... 自己エネルギー無しでの T_c
左下... 有効質量



ドーピングではさほど T_c は影響を受けないことがわかる。
 $\epsilon_d - \epsilon_p$ の違いのほうが大きな T_c の変化を生む。

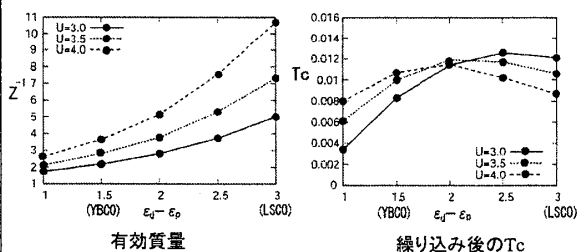
[Slide 66]

U-dependence

U を変えた計算も行った。 ($n=4.9$)

$\epsilon_d - \epsilon_p = 3.0$ (LSCO) では U を大きくすることで有効質量の増大が強く効き、 T_c が下がっている。

$\epsilon_d - \epsilon_p = 1.5$ では T_c は上昇しており、 T_c の逆転が起こる。



[Slide 67]

Summary

自己エネルギーの4次の項をd-pモデルにおいて計算し繰り込み因子を評価して、転移温度を見積もった。

LSCOとYBCOの転移温度は従来の理論では実験と逆の結果がでてくるが、 $\epsilon_d - \epsilon_p$ による繰り込み因子の違いを4次で評価することにより、実際の転移温度を説明できた。

強相関になると「有効相互作用による T_c の増大」と「有効質量の増大による T_c の減少」という2つの反する効果により T_c は決まる。

doping や U 依存性を詳しく計算した結果、YBCOは2つの効果に対し最適近くに位置しており、LSCOは後者の繰り込みが強いところに位置していると考えられる。

JPSJ,75,104712

[Slide 68]

[Slide 68] そういうことで、Coulomb 相互作用というのは、有効質量を上げるほうにもはたらくし、異方的な相互作用も増大させると、その兼ね合いで、実際には定量的には T_c が決まるということなのです。

その有効質量の増大には、等方的な部分も効くわけですが、 T_c にはたらくほうは、引力に効くのは、異方的な相互作用なので、その相互作用の具合で、 T_c が高くなったり低くなったりするということがわかりました。それが結論です。

Diagrams of Selfenergy

自己エネルギーを U に関して4次まで展開し、計算する

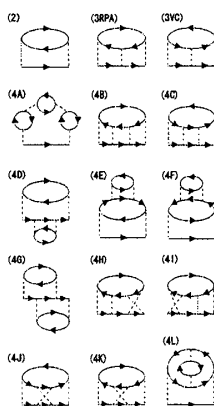
(4A)(4B) particle-hole RPA diagrams
(4C) particle-particle diagram
(4D)(4E)(4F) selfenergy-correction
(4G)~(4L) vertex-correction

Calculation

2次、3次、(4A)~(4F)はFFTで計算

64*64 k-mesh, 512 Matsubara frequency

(4G)(4H)(4I)はFFTが使えない積分が1個あるので、外線を固定して symmetry line 上のみ計算



[Slide 69]

(4J)(4K)(4L)は、外線 k をグリーン関数ひとつだけに通せることに注目。

$$\begin{aligned} \Sigma^{(4)}(k) &= U^4 \sum_q \sum_{p_1 p_2} \chi_0(q-p_1-p_2) G^{(0)}(p_1) G^{(0)}(p_2) G^{(0)}(q-p_1) G^{(0)}(q-p_2) G^{(0)}(q-k) \\ &\equiv U^4 \sum_q A(q) G^{(0)}(q-k) \end{aligned}$$

$$A(q) = \sum_{p_1 p_2} \chi_0(q-p_1-p_2) G^{(0)}(p_1) G^{(0)}(p_2) G^{(0)}(q-p_1) G^{(0)}(q-p_2)$$

と分離後、 $A(q)$ をフーリエ変換し $A(r)$ として、 $q' \equiv q-p_1-p_2$ と変数変換

$$\begin{aligned} A(r) &= \sum_q \sum_{p_1 p_2} \chi_0(q-p_1-p_2) G^{(0)}(p_1) G^{(0)}(p_2) G^{(0)}(q-p_1) G^{(0)}(q-p_2) e^{iq'r} \\ &= \sum_{q'} \chi_0(q') e^{iq'r} \\ &\quad \times \sum_{p_1} G^{(0)}(p_1) G^{(0)}(q'+p_1) e^{ip_1 r} \\ &\quad \times \sum_{p_2} G^{(0)}(p_2) G^{(0)}(q'+p_2) e^{ip_2 r} \end{aligned}$$

このように変数分離できる。ここで $G^{(0)}(r)$ や $\chi_0(r)$, $\Sigma(r)$ などの物理量は $|r|$ が増大すると急速に0に収束 $\Rightarrow r$ を固定して、 $|r|=0$ 近傍 (9*9) のみ計算し、残りは0と近似

[Slide 70]

Superconducting State

超伝導状態は、以下のEliashberg 方程式を解くことにより議論する。

$$\lambda_{\max} \Delta(k) = - \sum_{k'} V(k, k') |G(k')|^2 \Delta(k').$$

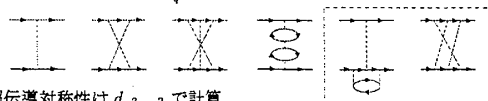
$T = T_c$ で $\lambda_{\max} = 1$ である。

有効相互作用 $V(k, k')$ は、spin-singlet state の場合、

$$V(k, k') = V_{\text{RPA}}(k, k') + V_{\text{vertex}}(k, k')$$

$$V_{\text{RPA}}(k, k') = U + U^2 \chi_0(k - k') + 2U^3 \chi_0^2(k - k')$$

$$V_{\text{vertex}}(k, k') = 2U^3 \text{Re} \left[\sum_q G^{(0)}(k+q) G^{(0)}(k'+q) [\chi_0(q) - \phi_0(q)] \right].$$



超伝導対称性は $d_{x^2-y^2}$ で計算

基底関数は $\cos(k_x) - \cos(k_y)$

[Slide 71]

Tc in the Strongly Correlated Electron Systems

	Band Width of QP W^*	T_c
• Cuprates	1000K	100K
• Organic	100K	10K
• PuCoGa5	100K	10K
• CeCoIn5	10K	1K
• Heavy Fermions	10K	1K
• Energy Scale is determined by W^* .		

[Slide 72]

[Slide 72] 実際に相関が強い電子系の超伝導というのはたくさんあって、いまの銅酸化物というのは、だいたい renormalize されたバンド幅というのは 1000K ぐらいですと、 T_c は 100K ぐらいで、有機導体でも d 波の超伝導が起こって、そのバンド幅は 100K ぐらいで、 T_c が 10K ぐらいで、その化学教室の齋藤軍治さんのところの研究されたのが、この有機導体です。

プルトニウムまでやらなくてもいいと思うんですけど、プルトニウムのこういう系では、バンド幅はこのぐらいで、 T_c が本当は 18K です。重い電子系というのは、有効質量が 1000 倍ぐらいになっている。だから繰り込みから言うと、1eV が 10K ぐらいの準粒子のバンド幅になって、この T_c は 1K ぐらいです。これはだから、Fermi 液体そのものなのですけども、これは一般に、Heavy Fermion では有効バンド幅と T_c はこんなものです。だから逆に超伝導というのは、Fermi 液体で renormalize されたバンドに起こるものであるという統一的理解が得られます。

高温超伝導のPseudogap

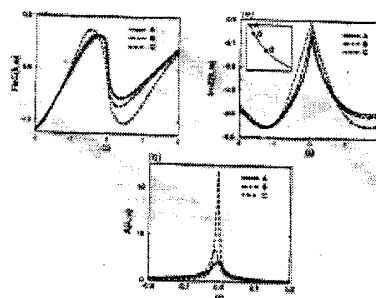
高密度、

強結合超伝導

Fermi 液体の準粒子とCooper Pairs の状態が共鳴する。

[Slide 73]

Fluctuation Exchange Approximation



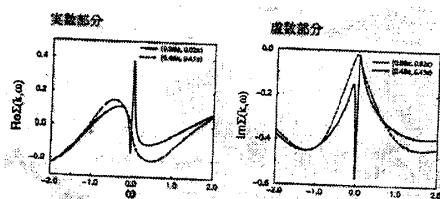
[Slide 74]

[Slide 73,74] あと、高温超伝導の Pseudogap というのがあるのですが、それは実際に準粒子、これが self energy の imaginary part, real part で、imaginary part がゼロになっているところは、Fermi 面なののですが、これが普通の振る舞いです。有効質量を重くするのは real part の傾きはマイナスのところ、imaginary part は 0 になるところがあるのですが、Pseudogap というのは、そういう imaginary part, real part の性質が逆転してフェルミ液体を不安定にします。マイナスの傾きを逆にこういうプラスの傾きに、imaginary part は、0 に近づかないといけないところが逆に大きくなる。

これはどうしてそういうことになるかという、高温超伝導体というのは準 2 次元の系なので

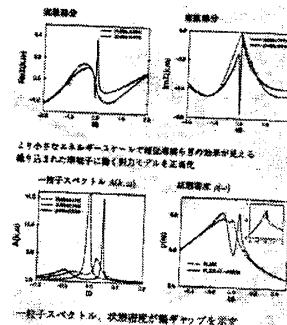
す。強結合のときは、クーパーペアの状態と、Fermi 液体の準粒子とが共鳴を起こして、imaginary part がフェルミ面のところで急に増大する。これはKramers-Kronig の関係で、imaginary part が増大すれば、real part は逆に振る舞うということです。これがだから、高温超伝導体の強結合、有機導体でも強結合の場合だけで見られることなのですけど、これは特色ある現象で、だいたいこのことで擬ギャップは理解されています。

Flex + Superconducting Fluctuation



[Slide 75]

超伝導揺らぎを入れた時



[Slide 76]

展望

- ・ 強相関電子系の超伝導の研究
重い電子系 (UGe_2 , UNi_2Al_3 , UPd_2Al_3 , CeCoIn_5)
 $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$
- ・ Fermi 液体論に基づく輸送現象、応答理論の発展
Hall 係数、異常 Hall Effect,
Nernst 係数

[Slide 77]

基礎物理学

- ・ 物理の境界の拡大 総合化
- ・ 直接国民に責任を持って研究・教育を行う。
生体と電磁波
梶 真徳氏 et al.
Childhood leukemia and magnetic fields in Japan: A case-control study of childhood leukemia and residential power-frequency magnetic fields in Japan, Int. J. Cancer; 119, 643 (2006)

[Slide 78]

[Slide 77] 「展望」というのは、もう時間がないので申しわけないのですが、重い電子系の超伝導、 UGe_2 というのは、強磁性で超伝導なのです。これはどうしてそうなるかということとか、 UNi_2Al_3 というのも、triplet かもしれないというのが実験の指摘で、こういう重い電子系の超伝導のメカニズムが今後の研究課題ですね。

このナトリウム・コバルトというのは 3d の鉄族なので、3d 電子系で超伝導が確かに起こっているのですが、それを Multi Band の相互作用で起こっているという説や、electron-phonon だという説もあるので、それにしても、それにしてもはちょっと敏感すぎるので、これはまだ決着はついていませんけれども、3d の遷移金属でも、銅だけじゃなくて、むしろコバルトでも起こるとなると、またいろいろな発展があると思います。

それからいろいろな電子相関が強くなるような系の輸送現象、特にホール係数というのは特徴があります。一体のプロッホのモデルでは、ホール係数などというのは、金属では一定ですよとか、いろいろなことがあるのです。けれども、それは実際に反強磁性揺らぎのあるような、多体相互作用がはたらくような系では、金属でもホール係数が温度変化するなどいろいろなことがあって、従

来考えられていた以上に、いろいろな面白い物理が見えてくるわけです。理論としてはそれを説明するというのが、必要になってくるだろうと思っています。

[Slide 78] あとは、この物理の幅を広げられないかということがあるのです。僕は、やっぱり基礎としては、いろいろな分野に挑戦されて、例えば生物と物理の境界の様子、生体と電磁波というのは研究会があつて、この兜さんたちの電磁波の影響がありますよという発表がありました。4ミリガウスで子供の白血病が2倍に増えますよというような貴重な結果です。文科省からC判定で予算が打ち切られるということがあつたのです。けれども、最近これは、論文がpublishされました。ところがお気の毒なことに、兜さんは最近亡くなって、ずいぶんいろいろと苦労されたことがあつたのです。

教育基本法が採決されたのかどうか知りませんが、僕は教育基本法の第10条というのは非常に大事だと思っていて、直接国民に責任を持って教育をおこなわなければならないというのは、教育基本法の第10条なのです。だからやはり、こういうわれわれが研究するときは直接国民に責任を持って行う。国民に役に立つような研究、教育がおこなわれるように一般の人とともに研究会を開催する。ということが基礎物理学を学問の境界を越えて発展させる上で、重要なことではないかと思っています。どうもご静聴ありがとうございました。

遠山：ありがとうございました。相関、超伝導、そして今後の発展まで、いろいろとご講演いただきました。どうも。じゃあ、質問をお願いします。

早川：二つありますけど、まずRVBの話なんですけれども、spin singletでそれがliquid的にいくというのは、Andersonのpictureだと思うんですけど、それではいけないんですか。Fermi liquidで説明がつくから、必要がないという感じなんですか。そのへんがよくわからない。

山田：もともとのAndersonのRVBというのは絶縁体のときの、どちらかというとspin系の理論です。それが金属になって、RVBでそのspinをつくって、 $JS \cdot S$ と書いたときに、そのspinを消すのは大変ですよ。RVBで消すと言いますけど、あらゆるところでsingletのPairを作らないといけない。

夏目さんのスピン系のRVBの変分の計算があつて、ほとんど正確なRVB状態ができていくんですけど、それをまたメタルにすると、電子移動とともに各サイトのspinができたり消えたりします。そういう場合に、接続するのに、フェルミ液体では $U=0$ のUpとDownのスピンを持つ電子を詰めた状態からcorrelationだけを入れていけば、自動的につながるのですが、RVBの方からいけないわけではないんですけど、非常に難しく成功していません。

早川：難しいから、そちらのほうが自然だと。

山田：はい。実際にはそんなに、さっきも言いましたように、電子間のcorrelationというのは無限大であっても、2個、絶対に入ってはいけないというものではないのです。ちょっとでも配慮すれば、電子相関というのははたらいっているのです。そういうのがFermi液体で、世の中にはFermi液体というのは、いろいろな U の強さの物質があつて多様です。だからむしろ、Anderson自身が言っているように、Fermi液体の連続性を使うほうが自然です。

昔から福山さんらの高温超伝導の研究会があつたときに、RVBは U の大きいほうから、一方フェルミ液体は U の小さい方からだが、最後はどこかで会うでしょうという話をいつもしていたんです。当時の福山さんの批判は、Fermi液体とお題目だけで、ちっとも計算しないじゃないかということでした。RVBのほうは、福山さんたちの tJ モデルの計算が、2000年以前に答えが出ていて、1991年か2年ぐらいですかね。今日はやっと、フェルミ液体の立場から計算ができるようになったという話をしました。

だから決してPictureが対立するものではないと思うんですけど。

坂東 :よくわからないんですよ. なんで好みの問題なんですか. あのとき, よくわからなかったんです. 好みの問題として片づけるのは不思議です.

早川 :坂東さんが途中で質問していたのに関連して, 新開さんの計算で, 4 次の摂動をやっていたんだけど, 全然収束しているように見えないし, 4 次で変わっても, この調子だったら 5 次, 6 次とかやっていったら, また結論が変わるかもしれないという印象も持ったんですが, そのへんは, そもそも摂動のなかでそんなに結果ががたがた動いて, 大丈夫なのかという.

山田 :「がたがた」っていうのは?

早川 :要するに 3 次までの結果と, 4 次の結果というのはずいぶん違いましたよね.

遠山 :p-Wave のときの. Gap の Function.

山田 :p-Wave のときはそうなんだけど, それは実際に不純物に弱く微妙な超伝導です. d 波は動きません. 本当は自己エネルギーのところで言えば, Single impurity の場合は, Bethe 仮設を用いて, 厳密解がある. それがどうかを見ると収束性がわかります. 実際に私が 4 次まで摂動計算したのと, 厳密解を展開したのと, もちろん一致しているはずなんですけど, その series は, だいたい係数が $1/N!$ なのです. それはだから, exponential になって, それは収束半径無限大です. それといまの周期系の有効質量の series とは, そんなに違ってない. 収束性がよくらいです.

早川 :なるほど.

山田 :もちろんいまで Coupling Constant とか, そういうものを厳密に議論しないといけないのですけれど. 僕が Anderson の連続性の原理で驚いたのは, Anderson の本は, 1984 年で, single impurity Anderson Model で考えたのかもしれないんですけども, 断熱的に相互作用を徐々に連続的に入れていけば, 連続的に接続できる. さらに Anderson の本自身に摂動展開でちゃんと接続できると書いてあるのです. その頃, われわれの分野のなかでは, $U = 0$ のところで展開できるかどうかというのは, ずいぶん議論になったのです. でも single impurity は相転移がないんだから単純です. 実際に periodic な系でも, 相転移があるときはもちろんだめですよ. もちろん磁化率とかそういうものは, 発散してしまうので. だから超伝導以外のインスタビリティが T_c 以上で起こらないときは, いまのような議論ができるんじゃないかと思います.

だから 4 次以上は誰も計算したことがないんだから, 誰も知らないと言えば知らないんですけど, それを見ている限りは, 不純物系と同じような series になっています. それは実際に, 4 次だともものすごいグラフの数で, RPA だと係数 1 で, 1 のオーダーで係数を足し合わせるわけです. それを全部のグラフの寄与を足すともものすごく消し合って $1/N!$ になるのです. 4 次では 1 が $1/24$ になる. 僕はちよつとあるところを書いたんですけども, 実際に計算したものじゃないと, そういう印象, なぜか消えるというのがね, そういう印象を持たれない人は, 疑いを持たれるのは当然じゃないかと思いますけれども, 計算してみると不思議なくらいです.

それで, 実際にこの 4 次の計算というのは, なかなかやっぱ大変です.

早川 :ありがとうございました.

遠山 :じゃあ, 時間ですので. もう一つだけどなたかありましたら. それじゃあ自分から. 先生, バンド幅と T_c の図を, 相関を出されていましたね. T_c はどのぐらいまでいくんでしょうか.

坂東 :すみません. これは [Slide 72] 理論値なんですか? 実験値なんですか?

山田 :これは実験値なんです.

坂東 :なんや. そうですか. ははは.

山田 :いや, 理論でだいたい reasonable な値が出ます. 実際のバンド構造を仮定して. 僕のところ

では、こういうのは全部計算していますが、こんなプルトニウムまで実験しなくてもいいんじゃないかというのは、僕も一緒なんですけど、これも計算しました。確かにd波の超伝導になりました。

坂東 : 質問は、もっと高い温度にはいかないのかということですね。

遠山 : もう少し頑張って、バンド幅を広げて、強相関で超伝導を起こすと、室温ぐらいまで行くかもしれない。

山田 : これはね、だから、僕らは相関が強いから U が大きければいいと思っていましたけど、それはだから、いまの LSCO の話で、有効質量が重くなってはだめなんですね。

遠山 : 頭打ち効果があるから。

山田 : できるだけ異方的な相互作用が強いような系でないといけないよね。

遠山 : なかなか、それを選び出すのは、いまとしては、逆に難しいんですか。

山田 : いまの高温超伝導体、2次元の CuO_2 が一番最適な系じゃないかと思っているところなんです。

遠山 : なるほど。わかりました。どうもありがとうございました。



ph05 大貫, 南部, 坂東/山田/川畑//山田/川畑/川畑//九後, 山田/田中正/遠山