

電子ガスの超伝導

東京大学物性研究所 高田康民

§1 はじめに

電子ガスとは、金属において、イオンをその平均電荷密度に等しい密度で一様に分布した正電荷のバックグラウンドに置き換えた多電子系のことである。通常、そのバックグラウンドは堅くて動かないと考えるので、フォノン(あるいはイオン・プラズマ)は存在せず、電子間にはクーロン斥力のみが働く。したがって、直観的には、そのような系が超伝導になりそうにない。更に一般的には電子ガス模型が一番適用されると考えられているアルカリ金属で、少なくとも1 mKまでは超伝導にならないことが実験的に確かめられていることから、この直観は正しいものとみられている。実際、Rickayzenは1969年に出版されたParks編集による著書¹⁾の冒頭で、「まだ決定的に証明されたわけではないが、クーロン力だけでは超伝導にならない。」と言い切っている。その理由として、BohmとPinesの理論²⁾によれば、電子ガス系は、その長距離成分はプラズマ振動の自由度となり、そのエネルギーは超伝導にとってあまりに高いので関係がないとし、一方、その短距離成分は斥力であり、それだけでは決して超伝導に結びつかないというものである。

ところで、以上の論点はそれだけでは理由にならないことが明らかになってきた。まず第一点のプラズマ振動のエネルギーがフォノンのそれよりずっと高いことであるが、むしろ高いエネルギーの素励起を媒介として、高い転移温度 T_c をもつ超伝導が考えられることが、Little³⁾、Ginzburg⁴⁾、Allender-Bray-Bardeen⁵⁾らによるエキシトン機構提案の根幹になっている。次に第二点の短距離斥

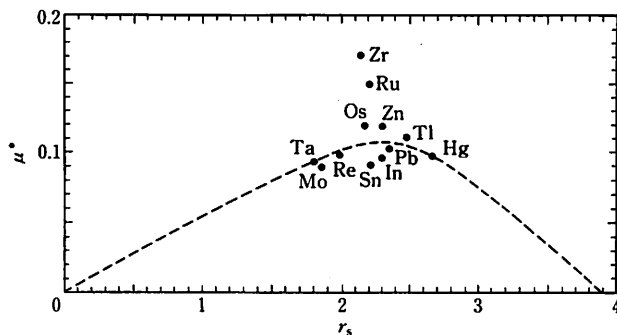
力だけで超伝導が出るか出ないかの議論はそれほど単純でなく、最近では銅酸化物高温超伝導体の機構がこのような短距離斥力によるとし、ハバード模型での超伝導を考えたAndersonの提案⁶⁾があるほどである。

しかし、クーロン力だけでは超伝導にならないと考える理由が他にも二つほどある。一つは、電子間の静的有効相互作用を運動量空間で考えると普通は常に正である結果が得られ、したがってクーバー対は決してできないと思われる。また、通常の超伝導体に対してよく使われるMcMillan⁷⁾の T_c に対する表式、あるいはそれを改良したAllen-Dynes⁸⁾の式では、超伝導に対するクーロン力の効果を、ある一つのパラメーター μ^* (クーロン擬ポテンシャルと呼ばれる⁹⁾) に押し込めて考える。この μ^* は、 T_c 、デバイ振動数 θ_D 、および同位元素効果の係数 α (ここで M をイオンの質量とすると $T_c \propto M^{-\alpha}$) が実験的に決まれば、決められる定数であるが、いくつかの金属に対して決められた μ^* は常に0.1前後であり、決して負の値にならず、したがってクーロン力だけの超伝導を示唆しないことになる。

ところが以上の二点に対しても、次のような反論が成り立つ。まず最初の点に関しては、たとえ運動量空間で常に正でも、実空間に直したときは相互作用に負の領域が現れうるという議論があり、電子ガスについては、フリーデル振動の引力部分を使うというKohn-Luttingerの提案¹⁰⁾が既に1965年にある。また超伝導で問題になるのは、静的な相互作用だけでなく動的なそれであり(いわゆる遅延効果)、その場合は、有効相互作用に引力部分が必ず現れる。このように励起されるエ

第1図

擬クーロン・ポテンシャル μ^* を r_s の関数としてプロットしたもの。黒丸は単体金属における実験値を表わし、破線はそれらの点の傾向を推測し、外挿してみたもの。



エネルギーの大きさによって相互作用が変わることが超伝導出現に対していかに重要であるかは§2で詳しく述べる。次に、第二点に関しては、通常の金属では、電子密度を表わすパラメーター r_s でみると1から3の間にあり、実際、 μ^* が決められている金属では更に制限されていて、1.7から2.7の間にある。第1図は μ^* を r_s の関数としてプロットしたものである。ところで電子ガスでは r_s が唯一のパラメーターであり、そのパラメーターがごく狭い範囲でしか変わらなければ、それに伴うあらゆる物理量も大きな変化を示さないのが当然で、 μ^* が大体0.1のまわりにあることも納得できる。なお、第1図の点の散らばり方から μ^* の r_s 依存性の曲線を推測してみたものが破線で示されている。それによると、 r_s が4より大きな低密度系では μ^* が負になりうることを示唆しているようにも見える。もっとも、その曲線の引き方自身はかなり偏見に満ちたものであることは認めざるを得ないが、同時に、少なくとも r_s が4以上の低密度系では、電子ガスでの超伝導の可能性を真剣に考えてみるべきことを示している。

ところで、電子ガスでの超伝導の問題はそれ自身、物性理論の基本的に重要な問題であるが、同時に、それは T_c を第一原理から計算する理論の完成に向けての重要な第一歩になる。すなわち、現時点で T_c の理論式の中に現れる諸量のうち、最も計算しにくく、しかも基礎があいまいなものは μ^* である¹¹⁾。とりわけ、電子間の相関が強い系である重電子系¹²⁾や、最近の銅酸化物高温超伝導体¹³⁾では、電子相関の効果がすべて μ^* の中に

押し込めるかどうか、押し込めたとすればその値はどうなるべきかは、すべて未知のことである。これらの問題に正攻法で取り組むとすれば、やはり、電子ガスの超伝導、とりわけ低密度系での超伝導の問題は避けては通れない問題である。

しかし、低密度電子ガス系は、通常の超伝導理論がその基礎にしているグリーン関数法では大変扱いにくいものであり、それ故、 μ^* の計算がこれまできちんとできなかったのである。それでも無理にRPA近似を用いて評価することを、筆者は1978年に試みた¹⁴⁾。それによると、 $r_s > 6$ で超伝導は可能であり、 r_s を変えた場合の T_c の最大値は1 K程度であるという結論を得た。筆者は弱結合近似の範囲でこの計算を行ったが、後にRietschel-Sham¹⁵⁾は、強結合の場合も取り扱える表式を用いて同じ計算を行い、 $r_s > 2.5$ で超伝導が出現し、 T_c の最大値も100 K程度になりうるとした(ただし筆者には、他のあらゆる近似が同じ場合に、弱結合の結果より強結合の結果の方が T_c が高くなることは理解できない)。しかるに r_s がこのように大きいときにRPA近似の結果は信用できず、それを越えた取り扱いが必要になる。筆者は最近この問題を変分法とグリーン関数法との合成法である「有効ポテンシャル展開法」¹⁶⁾によって考え直し、RPA近似を越えた効果を電子の自己エネルギー部分と対ポテンシャルの両方に系統的に取り入れた計算を行った。紙面の関係上、ここではその方法の詳細については述べず、得られた結果とその解釈を示す(興味のある読者は、他の雑誌に投稿したものを参照してください¹⁷⁾)。なお、その前に、対ポテンシャルが常に斥力でも超伝導になる可能性があることを簡単な

モデルにより示すことが重要と思われるので、§2でそれを論ずる。次に§3で、電子相関の効果をRPA近似で考えると電子ガスが超伝導になる可能性があることを述べ、§4で最近の詳細な計算の結果と、超伝導をひき起こす具体的なプロセスを記し、最後に、§5で今後の問題などについて述べる。

§2 箱型模型

超伝導を論ずる最も簡単な模型は、BCS¹⁸⁾による以下の有効ハミルトニアンである。

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{k\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{k'k} V_{kk'} c_{k'}^+ c_{-k}^+ c_{-k'} c_{k'} \quad (1)$$

ここで、バンドの質量 m^* を使って

$$\xi_k = \frac{k^2}{2m^*} - \varepsilon_F \quad (2)$$

であり、 $V_{kk'}$ は何らかの方法で与えられた対ポテンシャルである。ハミルトニアン(1)の基底状態は、試行関数

$$|0\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k1}^+ c_{-k1}^+) |\text{vacuum}\rangle \quad (3)$$

が、 $u_k v_k \neq 0$ の解をもつ限り、 $V_{kk'}$ の符号によらず、その解(超伝導状態を表わす)のエネルギーは、必ず正常状態($u_k = \theta(k - k_F)$, $v_k = \theta(k_F - k)$ 、ここで $\theta(x)$ はヘビサイド関数であり、 k_F はフェルミ波数である。また、本解説では、 $k_B = \hbar = 1$ の単位で考えている)のエネルギーより低くなる。 $u_k v_k \neq 0$ の解の有無は、次のギャップ方程式がゼロでないギャップ Δ_k を解としてもつかどうかで決まる。

$$\Delta_k = - \sum_{k'} V_{kk'} \frac{V_{k'}}{2\sqrt{\xi_k'^2 + \Delta_k'^2}} \quad (4)$$

ところで、BCSの元来の模型では、 $V_{kk'}$ は、

$$N(0)V_{kk'} = \begin{cases} -\lambda & |\xi_k|, |\xi_{k'}| < \theta_D \text{ の場合} \\ 0 & \text{その他の場合} \end{cases} \quad (5)$$

と仮定された。ここで、 $N(0)$ は、スピン当たりのフェルミ面での状態密度である。この模型では、方程式(4)は $\lambda > 0$ 、すなわち引力的な対ポテンシャルのときのみ解をもつ。このことが、超伝

導出現には引力が必要であり、とりわけフェルミ面上での対ポテンシャルは負でないといけなという考え方を一般に流布させている理由となっている。

しかし、 $V_{kk'}$ が常に正であっても方程式(4)が解をもつ場合がある。もちろん、そのような場合というのはかなり限られたものであるが、一番簡単なものは Morel と Anderson⁹⁾ によって考案された次の箱型模型(two-square well model)である。

$$N(0)V_{kk'} = \begin{cases} \mu - \lambda & |\xi_k|, |\xi_{k'}| < \theta_D \text{ の場合} \\ \mu & |\xi_k|, |\xi_{k'}| < \varepsilon_F \text{ だが、} \\ & |\xi_k|, |\xi_{k'}| < \theta_D \text{ の場合を除く} \\ 0 & \text{その他の場合} \end{cases} \quad (6)$$

この場合、方程式(4)はたとえ $\mu > \lambda$ (したがって $V_{kk'}$ は常に0以上)でも、 $\lambda > \mu^*$ である限り解をもつ。ここで

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \mu \ln \varepsilon_F / \theta_D} \quad (7)$$

である。なお、得られる Δ_k は $|\xi_k| = \theta_D$ の所で符号を逆転させることが重要である。

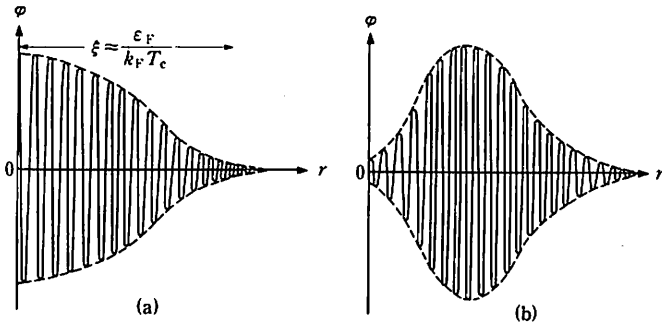
このように、 $V_{kk'}$ が常に正で斥力的であっても超伝導が出現しうることを数学的に示したが、このことの物理的な説明はいろいろな立場からなされる。一番よくなされる説明は、 μ という大きなクーロン斥力は、 ε_F 程度のエネルギー領域でみればそうであっても、フォノン引力が働く θ_D 程度のエネルギー領域では弱められて μ^* になるという見方である。これを言い直すと、フォノンを媒介とするようなゆっくりとした現象には有効的なクーロン斥力は弱くなるということであり、電子間相互作用の遅延効果をきちんと考える必要があることを示す。

以上の説明の立場は、 $V_{kk'}$ がフォノン部分とクーロン部分にきちんと分けられるということを前提としている。しかし、実際に第一原理から $V_{kk'}$ を計算してみようとすると、この分離は必ずしも明確でない。したがって、 $V_{kk'}$ の全体の形と、得られる Δ_k の形だけから、超伝導出現の理由を説明しようとするとき次ようになる。まず、実空間

第2図

クーバー対の波動関数 $\varphi(r)$ を相対距離 r についてプロットしたもの。

(a)はBCS模型(式(5))に対応し、(b)はMorel-Anderson模型(式(6))に対応する。



でのクーバー対の波動関数は、 Δ_k を使うと、

$$\varphi(r) = \frac{m^*}{4\pi^2 r} \int_{-\epsilon_F}^{\infty} d\xi_k \frac{\Delta_k \sin kr}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \quad (8)$$

で与えられる。 $\varphi(r)$ は、模型(5)のときはよく知られているように第2図(a)のようになり、 $r \approx 0$ 付近で最大の振幅をもち、対の束縛状態の様子がよくわかる。一方、模型(6)の場合、 $r \approx 0$ 付近では Δ_k のすべての k 成分が寄与するが、 Δ_k の符号の変化のため振幅は小さくなってしまふ。一方、 $r \approx \infty$ では $k \approx 0$ 付近が主に寄与するが、このとき $|\xi_k| \approx \epsilon_F$ より V_{kk} の強い斥力部分がきき、電子はそこを避けるため、やはり $\varphi(r)$ の振幅は小さくなる。

以上のことをまとめると、 $\varphi(r)$ は第2図(b)のような形をとって束縛状態をつくると考えられる。したがって、常に斥力であっても、もしその斥力が弱い部分と強い部分がある場合、電子は強い部分避けて弱い部分に集まろうとする結果、対が形成されたと見られる。

この他、2-バンド模型をつかって超伝導出現を説明する立場もあることも紹介しよう。1963年に近藤は、遷移金属の超伝導を説明するため、s-およびd-の2つのバンドを考え、バンド間およびd-dバンド内の相互作用は斥力である模型を提出した¹⁹⁾。そして、s-とd-との間でギャップが符号を変えることにより、バンド間斥力というのはギャップ方程式中では有効的には引力のように働き、したがってd-バンドの存在を考えた方が、s-バンドだけのときより T_c が有意に上がると結論した。更に、この結論は、d-バンドがフェルミ面上になくても、それがフェルミ・エネルギー近傍にあるかぎりには変わらないとした。さ

て、今、全く同じことが模型(6)についても言える。そのために電子を便宜上 $|\xi_k| < \theta_D$ の部分(s的バンド)とそれ以外の部分(d的バンド)に分けて考えると、模型(6)ではd的バンド内およびs的とd的のバンド間の相互作用は常に強い斥力である。しかるに、s的とd的の各バンドのギャップは符号を変えているので、このような強い斥力があつた方が超伝導が起りやすく、しかもその斥力が強ければ強いほどよいことになる。この効果がある程度以上強くなると、たとえs的バンド内の相互作用が斥力的でもクーバー対を形成しうることになる。

なお、ここで一つ注意したいのは、 V_{kk} が常に斥力の場合には超伝導を得るのはそうやさしいことではなく、たとえば V_{kk} が分離形であると仮定して、

$$V_{kk'} = V_k V_{k'} \quad (9)$$

と書くと、式(4)は

$$1 = - \sum_{k'} \frac{V_k^2}{2\sqrt{\xi_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}} \quad (10)$$

となり、これは決して解をもたない。(同じ分離形でも、

$$V_{kk'} = -V_k V_{k'} \quad (9')$$

ならば、式(10)で右辺の符号が逆転して解を持ちうるが、このとき $V_{kk} < 0$ より、常に斥力という仮定に反する。) 実際、模型(6)でも V_{kk} は分離形に書くことはできず、また $k-k'$ の関数でもない。重要なのは、 $|\xi_k|$ や $|\xi_{k'}|$ が小さいフェルミ面付近では V_{kk} はたとえ斥力としても小さく、一方、フェルミ面から大きく離れて $|\xi_k|$ や $|\xi_{k'}|$ が大きい場合には V_{kk} はできるだけ大きな斥力の方がよいのである。

§3 RPA 近似

式(5)や(6)の模型でなく、第一原理から $V_{kk'}$ を計算することは一般に難しく、何らかの近似を導入することになる。電子ガスの場合、一番単純な近似は Hartree-Fock (HF) 近似であり、そのとき $V_{kk'}$ は

$$V_{kk'} = V(k-k') \quad (11)$$

で与えられる。ここで、 $V(q)$ は裸のクーロン斥力であり、誘電定数 κ を用いて、

$$V(q) = \frac{4\pi e^2}{\kappa q^2} \quad (12)$$

で与えられる。ところで式(11)を与えられた $|k|, |k'|$ について角度平均をとり、式(5)あるいは(6)に対応する量を計算してみると、フェルミ面付近では $k=k'$ の発散がきいて非常に強い斥力となり、フェルミ面から離れるにつれて斥力が弱まる。これは §2 の箱型模型の場合とは全く逆の $|\xi_k|, |\xi_{k'}|$ 依存性であり、実際に方程式(4)を数値的に解いてみても解がないことはすぐにわかる。すなわち、HF 近似では電子ガスは決して超伝導にならない。超伝導が出るとすれば、それを越えた効果、いわゆる相関効果のみがきいてくることになる。

ところで、電子ガスでは、高密度系(すなわち r_s が小さいところ)では相関効果は HF 項に比べてずっと小さいことから、超伝導の出現も期待できない。また、正常状態の電子ガスの相関効果は、シングレット対の間では大きい、トリプレット対の間ではパウリ則の効果が大きいため小さい。したがって、より大きな T_c を得ようと思えば相関効果の大きいシングレット対の超伝導を考えるべきである。しかも大きな斥力は必ずしも超伝導に不利には働かないことを §2 の議論で知っているので、s 波対を考えることにする。もちろん d 波や p 波の対も可能性は大いにあるが、それらに参与する対ポテンシャルの大きさは s 波対のそれに比べてその絶対値は小さくなり、したがって得られる T_c もずっと小さくなるだろうと筆者は予測した。

さて、s 波対に対して相関効果を RPA 近似で取り扱い、しかも弱結合の近似をすると、ギャップ

方程式は式(4)の形で与えられ、 $V_{kk'}$ は、

$$V_{kk'} = V(k-k') + \int_0^\infty \frac{2}{\pi} d\Omega \frac{\text{Im} \tilde{V}(k-k', \Omega)}{\Omega + |\xi_k| + |\xi_{k'}|} \quad (13)$$

であることは、Kirzhnitz-Maksimov-Khomskii²⁰⁾ (KMK)によって導かれている。ここで、 $\tilde{V}(q, \Omega)$ は RPA 近似での電子間有効相互作用である。式(13)で注意すべきことは、フェルミ面付近では $|\xi_k|, |\xi_{k'}|$ は小さく、被積分関数の中で、 Ω に比べて無視できる。したがって、 $V_{kk'}$ はほぼ $\tilde{V}(k-k', 0)$ に等しい。このとき、 $V_{kk'}$ は斥力とはいっても他の電子の遮蔽効果で十分に弱められている。一方、 $|\xi_k|$ あるいは $|\xi_{k'}|$ が充分大きくなってくると、式(13)の第2項はきかなくなり、 $V_{kk'}$ はほぼ裸のポテンシャル $V(k-k')$ に等しくなり、強い斥力を感じるようになる。この状況は §2 で説明した箱型模型が超伝導になる状況と非常に似ていることがわかる。実際、方程式(4)に式(13)で決まる $V_{kk'}$ を代入して数値的に解くと、 $r_s > 6$ で超伝導が可能という解を得る¹⁴⁾。なお、有限温度のギャップ方程式を解いて得られる T_c は、 r_s の増大に伴い、いったん上昇し、 $r_s \approx 40$ の所で極大値をとり、以後、減少する。なお、その極大値は $m^*/(m_e \kappa^2)$ でスケールして約 1 K であり、決して高温超伝導を導かないこともわかった (m_e は自由電子の質量)。

ここで二つの注意が必要になる。一つは、§2 の箱型模型では θ_D という決まったエネルギーの所で Δ_k は符号を変えたが、今の場合 θ_D に対応するエネルギーは $\text{Im} \tilde{V}(q, \Omega)$ のピーク値、すなわちプラズマ振動のエネルギー ω_p である。しかるに、 $\omega_p > \epsilon_F$ より $V_{kk'}$ の $|\xi_k|$ や $|\xi_{k'}|$ 依存性は、箱型模型のときのようにあるエネルギーを境に急激に変わるというものではない。したがって、実際の計算では100個以上の小さな区間に分けた。こうすれば、 Δ_k の符号が変わる位置は Δ_{k^*} (あるいは有限温度のギャップ方程式では T_c) を最大にするように自動的に決まってくる。得られた結果によると、 $|\xi_k|/\epsilon_F \sim 0.1$ の所で Δ_k は符号を変えている。もう一つの注意は、Kohn-Luttinger の議論¹⁰⁾との関係である。それを知るために、式(13)の \tilde{V} を静的ポテンシャルは Thomas-Fermi 近似

のそれになるようなプラズモン・ポール近似での有効相互作用に変えてみた。このときはRPA近似と異なりフリーデル振動による引力部分は含まないのであるが、本質的に同じ結果を得た。すなわち、フリーデル振動の引力部分はここで考えている超伝導にほとんど寄与しないので、明らかにKohn-Luttingerの超伝導とは別個のものである。今の場合、フリーデル振動が間額になるような遠方の問題でなく、実は $r \sim k_F^{-1}$ 程度の距離における電荷のゆらぎによるものである。なお筆者の推定では、Kohn-Luttinger型の超伝導ではたとえなるとしても $T_c \ll 1$ Kである。

§4 有効ポテンシャル展開法

前項で述べたRPA近似は、 $r_s > 6$ のような低密度系ではよくないことは、電子ガスのこれまでの種々の研究から明らかであるが、特に今の超伝導では k_F^{-1} 程度の短距離の電荷のゆらぎが問題になるのでなおさらである。すなわち、いろいろなパーテックス補正がきいてくるので、RPA近似を越えていわゆる局所場補正を正しく系統的に扱う必要が出てくる。

筆者は、この問題を有効ポテンシャル展開法で考えてみた。まず試行関数として、式(3)に相関因子を作用させたものを使った。

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\sum_{i=1}^{\infty} U_i \right)^n |0\rangle \quad (14)$$

ここで、 U_i は有効ポテンシャル \tilde{V} を使って、

$$U_i = \frac{(-i)^i}{i!} \int_{-\infty}^0 e^{0^+ t} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^0 e^{0^+ t} dt_i \times T[\tilde{V}(t_1) \cdots \tilde{V}(t_i)]_L \quad (15)$$

で定義される。TはT積、Lは*l*個の \tilde{V} が連結したグラフのみを取るとの指示を表わす。 \tilde{V} は変分パラメーターである。

さて、電子ガスのハミルトニアンは、

$$H = \sum_{k\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} \sum_{k\sigma} \sum_{k'\sigma'} V(q) c_{k+q\sigma}^+ c_{k-\sigma}^+ c_{k'\sigma'} c_{k\sigma} \quad (16)$$

で与えられるが、これの $|\Phi\rangle$ に関する期待値は \tilde{V} のべきによる展開となる。 $\tilde{V}(q)$ はすべての q

について $V(q)$ よりずっと小さいので、この展開は $V(q)$ の展開である普通の摂動展開よりずっと収束が速い。したがって、ここではこの展開の2次までの項をすべて拾い、他は捨てる近似を行う。さらに、 \tilde{V} の値は正常状態と超伝導状態で大きな変化はないと考え、正常状態($u_k = \theta(k - k_F)$, $v_k = \theta(k_F - k)$)で、方程式

$$\frac{\delta[\langle \Phi | H | \Phi \rangle / \langle \Phi | \Phi \rangle]}{\delta \tilde{V}(q)} = 0 \quad (17)$$

を数値的に解いて決めた。このようにすると、 $\tilde{V}(q)$ は q が小さいときはThomas-Fermi型のポテンシャルになり、 q が大きいときは電子-電子の梯子型のグラフの無限和をとった型のポテンシャルになる。 $q \sim k_F$ のときはこれらの極限形を内挿し、更に種々の交換相互作用を含む形になっている。

得られた $\tilde{V}(q)$ を使うと、正常状態での全エネルギーやリノーマリゼーション因子 z_k^{-1} が計算される。第3図に示すように、全エネルギーの値はグリーン関数モンテカルロ(GFMC)法による値²¹⁾と比べて、 $1 \leq r_s \leq 15$ で、数%以内の誤差である。また、フェルミ面での z_k^{-1} を第4図に示すが、 r_s が小さいときは、グリーン関数法で得られている値²²⁾によく一致し、 $r_s = 14.3$ で0になる。これはこの点で何らかの金属・非金属転移を起こすことを意味するが、バックグラウンドが堅いという模型をとっていることから、おそらくSDWのような転移と思われる。

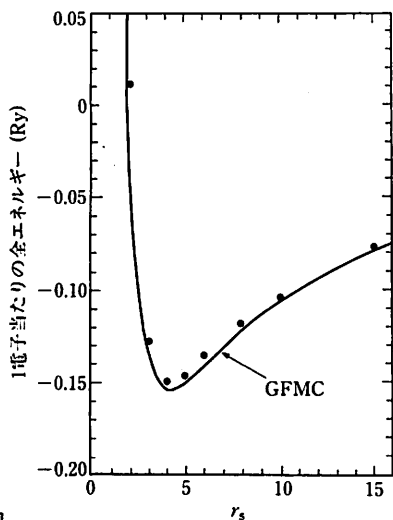
ギャップ方程式は、

$$\frac{\delta[\langle \Phi | H | \Phi \rangle / \langle \Phi | \Phi \rangle]}{\delta v_k} = 0 \quad (18)$$

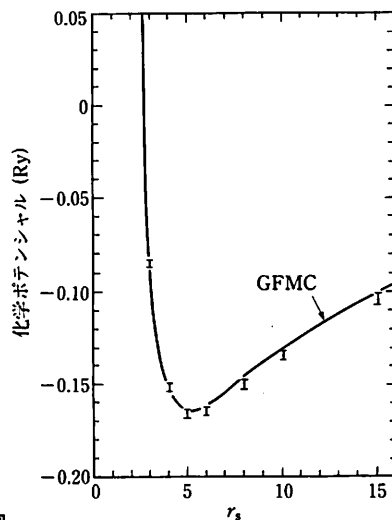
より、得られる。結果は式(4)の形にまとめられるが、 ξ_k , $V_{kk'}$ などはそれぞれ自己エネルギー部分や z_k^{-1} の因子がつく形にかえられる。すなわち

$$\begin{cases} \xi_k \rightarrow \xi_k^* / z_k \\ V_{kk'} \rightarrow V_{kk'}^* / z_k z_{k'} \end{cases} \quad (19)$$

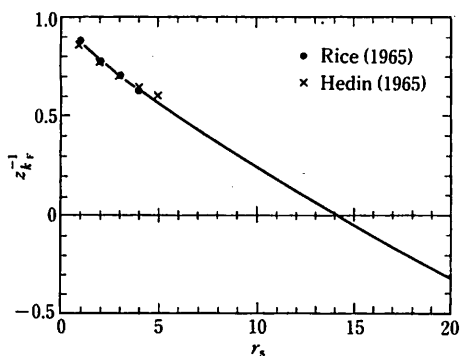
となる。 ξ_k^* や $V_{kk'}^*$ は \tilde{V} の展開として与えられ、その2次までの項をすべてとると、 ξ_k^* には33個、 $V_{kk'}^*$ には55個の項が入る。これらの項の正常状態での値を計算した。なお、 ξ_k^* の $k = k_F$ での値は化学ポテンシャルであり、それはGFMC法での値と比べられる。第5図にその結果を示してあ



第3図 正常状態での1電子当たりの全エネルギーを r_s の関数として描いたもの。実線はGFMC法の値であり、黒丸は有効ポテンシャル展開法での値である。なお、単位は $\text{Ry} \equiv m^* \epsilon^2 / 2 \kappa^2$ である。



第5図 化学ポテンシャルを r_s の関数として描いたもの。実線はGFMC法での値である。有効ポテンシャル展開法での値は誤差率をつけて書いてある。



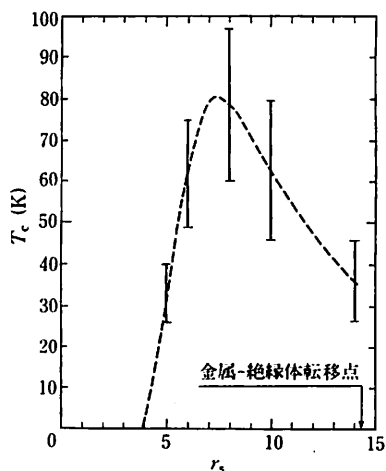
第4図 フェルミ面でのリノーマリゼーション因子を r_s の関数として描いたもの。点はRiceおよびHedin²²⁾による値を示す。

る。有効ポテンシャル展開法による値には誤差棒を示してあるが、これは ξ_k^* を評価するときに含まれる誤差の大きさを描いたものである。いずれにしてもGFMC法の値と比べて、数%以内の誤差で求まっている。

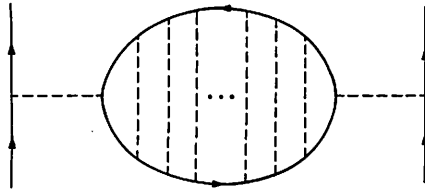
得られた ξ_k^* 、 V_{kk}^* 、 z_k^{-1} を用いて、有限温度のギャップ方程式を数値的に解いて、 T_c を得た。第6図にその結果を示す。 ξ_k^* では誤差棒は小さかったが、 T_c にするとかなり大きなものに拡大されている。点線はそれらの誤差棒の中央の点を結

んだものである。この計算から $r_s > 3.9$ で電子ガスで超伝導が起り、 $r_s \approx 7.5$ で T_c は極大になり、その値は $m^*/(m_e \kappa^2)$ でスケールして80 K程度であることがわかる。

このようにRPA近似を越えて局所場補正を加えると、総体として超伝導が起りやすくなるという結論を得たが、それでは V_{kk}^* に含まれるプロセスのうち、どれが一番本質的なのだろうか。



第6図 電子ガスでの超伝導転移温度の r_s 依存性。点線は誤差棒の中央を結んだもの。なお T_c は $m^*/(m_e \kappa^2)$ でスケールされている。



第7図 電子ガスの超伝導に一番重要な過程を表わすダイアグラム。

実際、 $V_{kk'}$ はRPA近似で取り扱ったようなプラズモンを媒介とする引力の他に、スピンのゆらぎを介するものをはじめ、実に様々な過程を含んでいる。筆者はこれらを一つ一つ順番に調べた結果第7図に示すような過程が一番重要とわかった。これは、 k_F^{-1} 程度の短距離の電荷のゆらぎによって作られた電気分極が、その分極を形成する電子・正孔多重散乱によって増強され、RPA近似でのプラズモンを交換する場合よりもより強い引力を与えるようになったと解釈される。

なお、式(18)で与えられるギャップ方程式は、基本的にKMKの弱結合の方程式を z_k^{-1} と自己エネルギー項の導入により強結合領域に拡張した形になっている。Khan-Allen²³⁾によれば、このような形で得られる T_c はEliashberg方程式²⁴⁾で得られる T_c より低くなるのとことである。

§5 今後の問題

さて、電子ガスで $r_s > 3.9$ で超伝導が出現するという結論を得たが、アルカリ金属の中にはこのような条件を満たすものが多くあるが、いずれも超伝導になっていない。実は、アルカリ金属は超伝導の立場からはかなり特殊であり、たとえフォノン機構で考えても、Liなどは超伝導にならない方がおかしいのである。したがって、アルカリ金属が超伝導にならない理由は、普通の超伝導理論の枠組みの外に求めるべきかもしれない。ただし電子ガスの立場からみると、アルカリ金属で超伝導にならない理由は次のようにも説明される。そもそも $r_s \leq 6$ で電子ガスが超伝導になるには k_F^{-1} 程度の短距離の電荷のゆらぎが重要であったが、その程度の距離になると電子ガスのように一

様なバックグラウンド模型と実際のアルカリ金属のように1電子当たり1個のイオンがあるというのでは、全然状況が違うのである。明らかに前者の方が電荷のゆらぎが大きくなると考えられ、実際のアルカリ金属では超伝導にならないと推測される。この点から見ると、最近の銅酸化物超伝導体は電子ガス模型にずっと近いと言える。それは、銅イオン1個当たり動きうる電荷(この場合は正孔)は、1/6から1/7であり、正孔にとってはかなり一様なバックグラウンド模型が適用される状況にある。また、正孔密度も低く、 κ が小さく、しかも m^* が大きい(特に2次元的になっているため c 軸方向の質量が大きく、それが幾何平均で与える m^* を大きくしている)という条件は、 r_s を大きくするのに最適である。ただし、現在のところ、電子ガス模型で銅酸化物超伝導体を説明する積極的な動きはない。

今後の問題としては、有効ポテンシャル展開法も近似理論なので、さらに完全を期すべく、他のいろいろな方法、とりわけGFMC法によって、電子ガスの超伝導の問題に取り組んでもらうことを希望したい。また、実験的にはできる限り一様なバックグラウンド上の低密度多電子系の実現を期待して、筆をおく。

〔参考文献〕

- 1) G. Rickayzen: *Superconductivity* (Marcel Dekker, 1969) ed. by R. D. Parks, Vol. 1, p. 52.
- 2) D. Bohm and D. Pines: *Phys. Rev.* **92** (1953) 609.
- 3) W. A. Little: *Phys. Rev.* **134** (1964) A1416.
- 4) V. L. Ginzburg: *Sov. Phys.-Usp.* **13** (1970) 335.
- 5) D. Allender, J. Bray and J. Bardeen: *Phys. Rev.* **B7** (1973) 1020; *ibid.* **B8** (1973) 4433.
- 6) P. W. Anderson: *Science* **235** (1987) 1196.
- 7) W. L. McMillan: *Phys. Rev.* **167** (1968) 331.
- 8) P. B. Allen and R. C. Dynes: *Phys. Rev.* **B12** (1975) 905.
- 9) P. Morel and P. W. Anderson: *Phys. Rev.* **125** (1962) 1263.
- 10) W. Kohn and J. M. Luttinger: *Phys. Rev. Lett.* **15** (1965) 524.
- 11) たとえば、D. Rainer: *Progress in Low Temperature Physics* (North Holland, 1986) ed. by D. F. Brewer, Vol. 10, p. 371. また、日本語での解説としては、福山秀敏: *固体物理* **20** (1985) 198.
- 12) たとえば、G. R. Stewart: *Rev. Mod. Phys.* **56** (1984) 755.
- 13) たとえば、*Phys. Today*, **40**, No. 4 (1987) 17.
- 14) Y. Takada: *J. Phys. Soc. Jpn.* **45** (1978) 786.
- 15) H. Rie tsel and L. J. Sham: *Phys. Rev.* **B28** (1983) 5100.

- 16) Y. Takada: Phys. Rev. A28 (1983) 2417; *ibid.* B35 (1987) 6923.
 17) Y. Takada: *Novel Superconductivity* (Plenum, 1987) ed. by S. A. Wolf and V. Z. Kresin; to appear in Phys. Rev. B (Technical Report of ISSP, Ser. A, No. 1826, 1987) p.435.
 18) J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer: Phys. Rev. 108 (1957) 1175.
 19) J. Kondo: Prog. Theor. Phys. 29 (1963) 1.
 20) D. A. Kirzhnits, E. G. Maksimov and D. I. Khomskii: J. Low Temp. Phys. 10 (1973) 79.
 21) D. M. Ceperley and B. J. Alder: Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 566; S. H. Vosko, L. Wilk and M. Nusair: Can. J. Phys. 58 (1980) 1200.
 22) T. M. Rice: Ann. Phys. (N. Y.) 31 (1965) 100; L. Hedin: Phys. Rev. 139 (1965) A796.
 23) F. S. Khan and P. B. Allen: Solid State Commun. 36 (1980) 481.
 24) G. M. Eliashberg: Sov. Phys.-JETP 11 (1960) 696.

固体物理 特集号のご案内

〈低次元物質〉 Vol. 16 No. 7 (1981)

〈表面・界面〉 Vol. 18 No. 11 (1983)

〈超低温〉 Vol. 19 No. 10 (1984)

〈アモルファス物質(II)〉

Vol. 20 No. 8 (1985)

〈超格子・多層膜〉

Vol. 21 No. 8 (1986)

はじめに 三浦 登
 半導体超格子の作製と評価
 MBEによる半導体超格子の作製とその物性 佐野直克
 MOCVDにより成長した超構造, 超格子 渡部尚三
 低次元超格子の作成技術の可能性 蒲生健次
 ホットウォール法によるII-VIおよびIV-VI族
 化合物半導体超格子作製とその物性
 藤安 洋・邑瀬和生
 半導体超格子の電子状態
 超薄膜半導体超格子の電子構造 中山隆史・上村 洗
 超格子中の2次元励起子 舛本泰章・松浦 満
 AlGaAs-GaAs 超格子の浅い不純物準位と
 DX センター 馬場寿夫
 超格子中の正孔のバンド構造 安藤恒也
 半導体超格子の物性
 2次元正孔ガスの電流磁気効果 家 泰弘
 GaAs/AlGaAs 界面2次元電子系の
 分数量子ホール効果 若林淳一
 超格子中2次元励起子の磁気光学 岩佐義宏・三浦 登
 2次元電子系の集団励起と共鳴光散乱 片山倍一
 半導体超格子の応用
 量子井戸レーザー 岡本 紘
 HEMT—1986
 三村高志・安部正幸・柴富昭洋・小林正明

半導体二重障壁ダイオードにおける
 共鳴トンネル効果 土屋昌弘・榑 裕之
 量子井戸構造におけるルミネッセンスの電界効果
 山西正道
 HgTe-CdTe 超格子 三浦 登
 金属超格子の物理
 金属人工格子の生成と磁性 新庄輝也
 人工格子超伝導体の理論的側面 高橋三郎・立木 昌
 スパッタ多層膜の超伝導 小尾叔久・藤森啓安
 磁性体人工格子のNMR 安岡弘志
 希土類金属人工格子の磁性 森下忠隆・対馬国郎
 ファンデアワールス・エビタキシー法による
 金属超薄膜の作成 小間 篤

〈磁性(II)〉

Vol. 22 No. 9 (1987)

はじめに 近角聡信
 遷移金属合金の磁性 長谷川秀夫
 強磁性金属中の不純物の電子状態 赤井久純
 スピンのゆらぎと磁性・伝導 川畑有郷
 希土類化合物における価数揺動状態 笠谷光男
 重い電子系 半澤克郎・山田耕作
 磁性と超伝導——最近の話題から—— 前川禎通
 スピングラス 都 福仁
 競合系の磁気相転移 目片 守
 多層膜(人工格子)の磁性 新庄輝也
 磁性流体 武富 荒
 磁性を基礎とした生物研究 田崎 明
 マグネタイト低温相研究上の諸問題 千葉公二
 希土類金属を含む金属間化合物の磁性
 岡本哲彦・藤井博信
 Nd-Fe-B 磁石 佐川真人・広沢 哲
 偏極中性子による磁性研究 遠藤康夫
 中性子線とX線による磁性研究 白根 元
 高エネルギー分光と磁性 石井武比古
 μ SR (ミュオン・スピン回転・緩和・共鳴) と磁性
 山崎敏光・植村康朋・永嶺謙忠
 強磁場による磁性実験 (定常強磁場) 中川康昭
 強磁場による磁性実験 伊達宗行・山岸昭雄
 強磁場による磁性実験 三浦 登・後藤恒昭