

高温超伝導—理論面でのむずかしさ

東大・工 大高一雄 (Kazuo Ohtaka)

I. 序

1986年秋の高温超伝導体(High T_c Superconductors, 以下, 「高温超伝導体」又は「高温超伝導(High T_c Superconductivity)」の意味でHTSと記す)の発見は、新素材として文明を一変させる程の可能性を持つが故に、応用面ばかりでなく、基礎的な研究分野にも強いインパクトを与えた。その常識をくつがえす高い T_c は、BCS(Bandeen, Cooper, Schrieffer)による超伝導機構の解明(1957年)以降も続いていた、格子振動(以下フォンと呼ぶ)に依拠しない超伝導の発現機構研究を、いかにもかに低温物理の基礎研究の中に引き立てた感がある。(しかししながら、線引き、ジヨセフソン素子化、薄膜合成等の応用面での一派の成果にくらべ、基礎的な分野では、発見後2年たった今でも満足すべき理解の段階には程遠いといえる。基礎的な実験についていえば、HTSの構造が“やや複雑”で解析が単純にいかなかつたり、試料の問題で、データの再

現性が悪かったりすることが問題である。基礎理論については、従来の超伝導理論とは異った大きなエネルギースケールが問題になるための難しさが克服できないこととか、強い電子相関が隠さるためた、伝統的な、物性物理の手法や概念の正当性が疑問視されていることなどが、その困難の原因である。しかし、群盲象をなでるといった感の2年前の状況と比べると、いくつかの難しさがわかってきて、これらが集中的に研究されたという感じで進歩したといふこともできよう。本稿は超伝導理論のHTSとつながるいくつかの側面を取り上げることからはじめて、HTSの研究の現状をみて、その難しさの側面にスポットをあてる試みである。

II. 従来の超伝導

BCS理論の骨子は次のようにまとめることができよう。「2つの自由電子がフォトンのやりとりを通じて引力を及し合い、束縛状態をつくることによって、運動量空間のフェルミ面近傍のすべての電子が、2ヶずつの対をつくる。これらの電子対からなる多電子系の基底状態は、それが“れのアカ”，規則的な位相関係をもって重なり合う秩序状態であって、励起状態との間に有限のエネルギー^差を有する。」運動量 \vec{k} で、スピニガ[↑]の電子が対をつくるには、相手として $-\vec{k}$ の運動量を持

ち、スピニガの電子を送ふことがエネルギー的に有利であることがわかつてゐる。このような対は、2ヶのスピニの和がゼロだから singlet 対と呼ばれる。singlet 対では、2ヶの電子の束縛状態の対称性は $l=0$ (s状態), $l=2$ (d状態) ...といった方を単位として偶数の角運動量をもつてゐる。それは対が電子というフェルミオンのつくる対であつて、スピニ部分が singlet の状態は、電子の交換に対して奇の対称性を持つから、空間部分は、偶の parity を持つ必要があるからである。triplet の超伝導対（対のスピニ和が 1）は $l=1, 3 \dots$ という相対運動の対称性をもたねばならぬ。triplet 対の可能性がとりざたされていいる例外的物質を除くと、今まで発見された超伝導体は、すべて singlet で $l=0$ の s波超伝導体である。HTS でも 1313 な実験から、s波超伝導が実現しているのは間違ひないと思われてゐる。

電子系が他の系と相互作用し、その系を励起する過程を考える。両者の相互作用を代表的に V と書けば、Vについての1次の擾動がなければ、2次擾動で、電子系の基底状態のエネルギーは、V の符号にかかわらず必ず低くなることがわかる。このことから、フォン励起が 2 電子間の状態の安定化（= 引力の存在）を引きおこすことは容易にわかる。これは、(図 1) の過程で、2 電子の基底状態（エネルギー E_0 ）が、中間状態

として、1ヶのフォトンを励起（その分だけ 中間状態のエネルギーは高くなる。中間状態のエネルギーを E_1 とする）すると、そのエネルギーが

$$E_0^* = E_0 + \frac{|V|^2}{E_0 - E_1} \quad (1)$$

に変化するからである ($E_0 < E_1$ のため $E_0^* < E_0$)。

超伝導状態でどの

くらいエネルギーが安定化するかは、対の束縛エネルギーの大ささによるから、Vについて無限次の振動を考慮してベ

ッテ・サルペーテー方程式 (Bethe-Salpeter eq., BS eq., 相対運動 Schrödinger 方程式の積分形) の解の極の位置を調べればわかる。ふつうは、(図 2) に示す

すフォトンのやりとりを無限回く

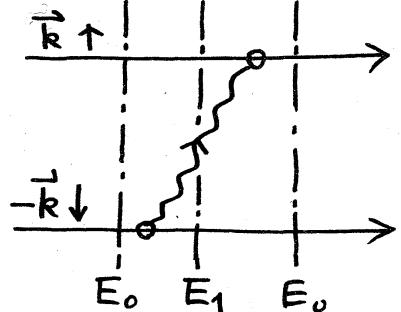
りかえすはしこ图形 (ladder 図形)

をとり込めば良い近似にあること

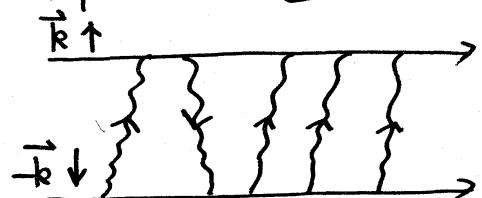
がわかっている。そのようにして、BCS理論での超伝導への転移温度 T_c を決めることができる：

$$T_c = \omega_p e^{-\frac{1}{g}} \quad (2)$$

ω_p はフォトンの振動数で、100 K (ケルビン。絶対温度 100 度のこと) から 200 K 程度の大ささである。g は上で用いた $|V|^2$



(図 1)



(図 2)

から得られる無次元化した電子-フォン相互作用の強さをあらわす係数である。1つうの金属では $g \sim 0.1 \sim 0.2$ 程度である。したがって(2)から T_c は $100 \times e^{-5} K$ 程度で、高々 $10K$ 程度にしかならない。

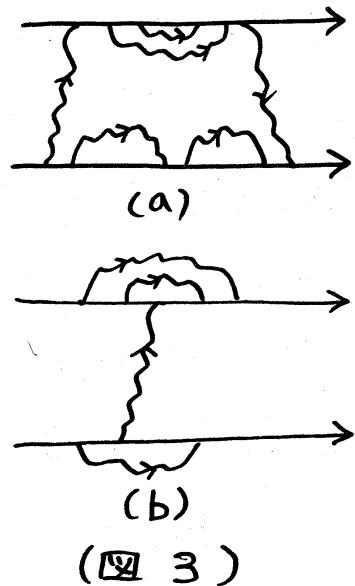
温度 T が T_c 以下での超伝導体の特長(抵抗がゼロ(直流抵抗の場合は、磁場が侵入できない Meissner 効果と同じこと) - 磁場が侵入できなければ電場もゼロ), 比熱の T 依存性が指數関数的であること, 電子系の励起のスケートルにはギャップ Δ がある, 光吸収, 音波吸収, 磁気共鳴等これら特有のエネルギー・温度依存性がみられることがある(HTS でも、これら種々の特長が量的たちかにはあるが、相当程度実現している(いくつか、エラだつた質的ち違ひもあることを忘れてはならない)ので、対形成反応の物理量の計算は、BCS 的にやってよいだる、あるいは補正するとしても以下で述べる強結合理論程度である)などと、大方の見方といつてよい。したがって、どういう機構で電子対が束縛状態をつくるかということが、さしあたってこの、しかし HTS に関して最も重要な、集中的に研究すべきテーマとなる。(1), (2) 式で認められは、 ω_0 大, g 大なら T_c も高くあるし、 V_0 の符号は g には無関係であり、引力の起源はまわめて一般的といえることになる。HTS

が見られる前から、113 113 な引力の起源が調べられたのは、この下めである。以下、いくつかの機構をつかみよう。

III. いくつかの引力の起源

III.1. フォン機構と強結合論

フォン機構で何度まで T_c が高くなるかは、大さく 10^6 トは、(2)式より ω_D と g の大きさの限界を見れば良いが、限界的な領域の T_c を見積るには、(図2)の過程だけでは不十分である。 V が“大きくなければ”、(図3(a), (b)) のような多くのフォンが“関とした過程もきてくるから”である。(図3(b)) の寄与を Vertex 補正といふが、これが“あまり” T_c に影響しないことは、「Vertex 補正是 ω_D/E_F 程度の補正（かとせり）」というミグダル (Migdal) の定理で証明されている。ここで E_F は電子のフェルミエネルギーで、電子系のエネルギー・スケールを持続付ける量である。つまり $\omega_D \sim 100K$, $E_F \sim 10^4 K$ から(図3(b))は 1% 程度の T_c の変化しか生じしない。これに反し(図3(a))は T_c を数 10 % も低くする働きがある。この過程は中間状態の電子の伝播が、フォン励起によるエネルギー散逸を供うので、有効な抵抗が出来にくくなるからで



(図3)

のフェルミエネルギーで、電子系のエネルギー・スケールを持つ量である。つまり $\omega_D \sim 100K$, $E_F \sim 10^4 K$ から(図3(b))は 1% 程度の T_c の変化しか生じない。これに反し(図3(a))は T_c を数 10 % も低くする働きがある。この過程は中間状態の電子の伝播が、フォン励起によるエネルギー散逸を供うので、有効な抵抗が出来にくくなるからで

ある。また対を形成する 2 つの電子が接近するため、クーロン反発も強くなるので、一般には、高 $T_c \rightarrow$ 対の半径小 \rightarrow クーロン反発大という因果で、クーロン力による反発も BS 方程式にとり込む必要が生じる。このような BCS 理論で無視されていける自己エネルギー効果、クーロン反発、さらにフォンのディテール（各原子が共通の振動数 ω_0 で振動している訳でない）をとり込んだ対形成理論を強結合理論といい、確定的な T_c の値の見積りにはなくてはならない理論である。強結合理論を用いて、いざいざ現実的な物質について T_c を計算すると、高い場合でも $T_c < 30K, 40K$ とならぬのが、経験的おしえる所である（しかし、理論的にフォン構構で）。それ以上の T_c が実現できないと証明できることはない）。したがって $T_c \sim 80K \sim 100K$ という HTS は、フォン構構ではなくかうというのが有力な見方である。（しかし、(2) 式より、 T_c の大きさは指數関数的にますますで、8 の倍を少しきぞうとして、30K は 60K にある。このため 80K の HTS がフォン構構でないとは、下で述べる。同位元素効果の実験を待たねば結論できなかつたことである。

III.2. スピニ系との相互作用

電子対が他のスピニ \vec{S} (たとえば、超伝導体の金属に、スピニ \vec{S} を持つ不純物—磁性不純物といふ—tof) とトーフす

3) と相互作用をすると、不純物濃度があら程度大きくなつて \vec{S} による効果が無視できなくなると超伝導はこわれる。單純にいえば、対を構成するスピニ↑の電子と↓の電子が感じる \vec{S} の効果が異なるからで、時間反転の対称性で保証されていき $(\vec{k}\uparrow)$ と (\vec{k}, \downarrow) の電子のエネルギーの階級がとれて(すうのてみる(対破壊効果))。このため、ハッタは各原子の \vec{S} が協力的に長距離秩序を持つこと磁性と超伝導は、互に排他的な現象と考えられていい。

HTSで最も目を引く点は、磁性との関連にある。HTSといへば t, T_c の値には大して興味をもたなかつた人も多かつたと思うが、磁性との関連では目を引かれたに違ひない。超伝導が磁性と共存している可能性、あるいは t, T_c と積極的にスピニの役割を評価して、スピニとの相互作用によつて対形成の束縛エネルギーをかせぐという可能性(かりやすくいえは、(図1)の波線がマグノン)がHTSでは無視できまいのである。

スピニ系が対形成に積極的に関与した例としては、 He^3 の γ 波超伝導がある(He^3 はフェルミオンの原子($s=1/2$)。中性で電荷をもたないから、超伝導という言葉は適当でないか)。これは仲間同志の弱いファン・デア・ワールス力による相互作用で、局所的に He^3 原子のスピニがとどめている低エネルギーの集団的な励起状態を、2ヶの He^3 原子がうけあわすことである。

束縛エネルギーをかせいでいると考えられている。 He^3 は中性でワーロン反発がないから、2ヶの原子が近くと急激に斥力が大きくなる（剛体衝突を思えばよい）ので、空間的な対の波動関数としては S波より Y波の方が有利となる。このことにより ↑↑ 又は ↓↓ 同志の triplet 対の形成が得にならないので、まわりに生じているスピン分極との相互作用による対破壊機構に敏感となる。HTS は singlet 対の S 波伝導である可能性が強いから、 He^3 との類似にちりたっていな。中性原子の場合は反発も小さいが、引力も小さく、 He^3 の T_c は 10^{-3} K のオーダである。S 波以外は、V や Y が小さくなつて高い T_c はまず不可能である。

III.3. 電子系の他の励起との相互作用

対をつくる 1" 2 電子が、ワーロンカで反発しあう時、ワーロンカは裸の形でなく、種々の遮蔽効果をうける。遮蔽誘電率で書きあらわすことからわかるように、短い時間域で生じたり消えたりする分極場がその原因である。(図4) の中の矢印は裸のワーロンカで、丸で囲んだ部分が分極場をあらわしている。電子系の分極は、ある原子内の電子を励起する (exciton, 励起子) ことによつて生じたり、あるいは、仲間の金属

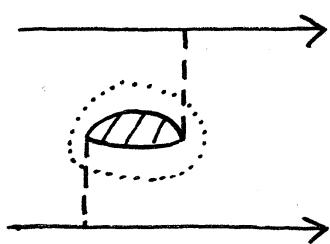


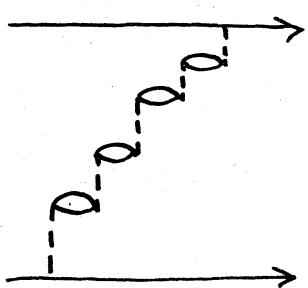
図 4

電子をフェルミ面の外に励起させると (particle-hole pair 励起) ことによって生じたりする。特に後者の場合は近似を高めると プラズモン (plasmon) という集団運動のモードをうむ (図5)。励起子 $= 1/3$ プラズモン $= 1/3$, (2) 式の ω_D にかぎりで $E_F \sim 10^4 K$ のオーダーである。

$g=0.2$ にすれば (2) 式から $T_c \sim 70 K$ となる。

ここにちるので「有効な非フオノン機構」に見える。

(しかし、このような大きなエネルギー スケールの励起の電子状態へのはかえり (図5) は、最も粗い近似でも III.1 で述べた強結合理論を用いて議論しなければならない。(図5) の機構については、HTS がある前から相当調べられていて、自己エネルギーの補正が T_c の見積りに大きくきくことがわかつている。特に 2 次元性がきていて HTS は 2 次元系のプラズモンの分散が 3 次元系よりも引力を有効に導くと思われる所以意味がある。しかし、強結合理論で、セルフ・コンシスティントに積分方程式を解くので、大々モリで 早い計算機 が使ふることが重要で、最近のスーパーコンピューターでどこまで行くか、目下筆者のところでも調べている最中である。励起子の非フオノン機構として最も古くからとりあげられている機構で、HTS に関しては多數の研究がある。しかし、光吸收の実験との対応から見て、否定的に



見ている人も多い。

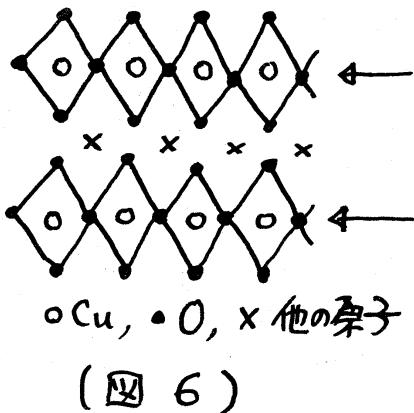
IV. HTSの特色

IV.1. 結晶構造

伝導電子は、 Cu^{++} と O^{--} のつくる2次元的方面を伝導していることがわかつてゐる。(図6)に概略図を示した。 Cu 原子は、 O 原子によって構成されるピラミッド又は八面体によって囲まれてゐる。矢印の面が伝導面である。物質によって2次元面の枚数や上下面のずれなどが異なる。単位胞中に含まれる2次元面の枚数と T_c の値に相関も見られるので、2次元伝導面間の対形成の可能性や電子相関の重要性も指摘されてゐる。なお純粹の2次元系では、超伝導がゆらぎのために生じないことが知られてゐるが、面間の相互作用を少しても入ると、2次元性ゆえの発散がおさえられ、ゆらぎを考慮しない2次元理論の結果がよみがえる。この点でも面間の相互作用は重要なみるとか、上で述べた面間相互作用の重要性とは、対形成の機構として、より積極的に考慮しようというものである。

IV.2. CuO 面の電子数とHTS

CuO 面内の電子の数を、(図6)で O 原子の数をかえたり。



×の原子を他の価数の異なる原子と置換したりすることによって、変化させることができ。その結果わかったことは、CuO 1ヶあたりの正孔の数を γ とするとき $\gamma \sim 0.1, 0.2$ のようだ、ある程度正孔数が増えないと HTS が生じないということである。

CuO 1ヶあたり P_{Cu} 正孔といふのは、 $P=0$ のとき、Cu は Cu^{++} として振舞うと見ていい。この時、Cu 原子の電子配位は $3d^{10}4s^1$ であるから、4s 電子が $\frac{1}{2}$ と同時に 3d の殻に 1つ穴があいていることを示していい。3d の 8ヶの電子は、結晶場によって低いエネルギー状態にあって、伝導に関与しないから、伝導に関与すべき電子は、3d⁹ の内の 1ヶだけということになる。 $\gamma \sim 0.1$ といふのは、この電子数が、15% γ も下へ落ちて（といふことは、電子を 1ヶももたない CuO が生じると）、はじめて HTS が生じるというわけである。

$P=0$ のとき、 Cu^{++} は 9番目の 3d 電子に $\frac{1}{2}$ $S=1/2$ のスピニンを持つことが期待される。実際 $P=0$ に、 Cu^{++} に $1/2$ のスピニンがあり、反強磁性的なスピニンの長距離秩序をもつ絶縁体であることが確認されている。 $P > 0$ で HTS が出現するという事実は、 $P=0$ からはずれて、Cu のスピニンが、ある程度減り、たとえば HTS が生じるとも見えてし、磁性秩序をつくらず最大のスピニンの相關があるから HTS が実現するのだと思ふことである。やがて増せば、正孔が Cu から \times と

を意味するから。どちらに入るかは、HTS機構の理解には、キーポイントとなる。最近の光吸収の実験によれば、正孔はOに入るというのが有力な見方である。すると、各CuO₂-Cuのサイトには、 $S=1/2$ のスピニが生残している。

IV.3. 同位体効果

非フロン機構か否かの有力な判定方法は同位体効果を調べることである。 O^{16} を O^{18} に変えれば、電子状態は不变のままの原子の質量だけが重くなる。格子振動は、その分位子から、(2)式の ω_D が変化するので T_c には何かえりが見えるだらうという話である。HTSではこのための T_c の変化は、なくはないが、まやめてトとく、（じたがって、引かの起因として）非フロン機構を考えざるを得ない。なお、HTSでも $T_c \sim 30\text{K}, 40\text{K}$ の物質は、比較的大きな同位体効果が見られる。結晶構造の類似性から言って、二の系も、もっと高い $T_c \sim 90\text{K}, 100\text{K}$ の物質と同様の機構で統一的に理解したい所であるが、30K附近のHTSはフロン機構で、(BCS+強結合)の理論でよいと見ていい人も多い。

V. モデルとその扱い(单一バンドモデル)

強い相関をもつ電子系を扱うのに古くから有効だったハミルトニアンは、ハベルトモデルといわれる

$$H = \sum_{i,i',\sigma} t c_{i,\sigma}^+ c_{i',\sigma} + \sum_{i,\sigma} U n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma} \quad (3)$$

であらわされるものである。 i は原子の位置, $c_{i\sigma}(c_{i\sigma}^+)$ は i 原子にいるスピニルの電子の消滅(生成)演算子, $n_{i\sigma}$ は i 原子にいるスピニルの電子数 $c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$ をあらわしている。オーナーは i' 原子から i 原子へ電子が飛び移る電子の運動エネルギーをあらわしている。もしあつた 2 ヶの電子が i 原子の位置に来るとして、ワーコン反発しあって U ハイエネルギーが損となるというのがである。(オーナーの意味) 同じスピニルの 2 電子が同一の原子(1つの原子に電子を 2 ケしか収容できないとしている)に来るのは、ハーリ非他律で除いてある。HTS に則して(3)式を参考れば、 i は 1, 1 の CuO ユニットをあらわし、 U で相関しながら 1, 1 の CuO のサイトを遍歴して 11 の電子をあらわしていると考える。ここで電子といっているのは、 Cu^{++} の一番上の 3d レベルを占める電子のことと指す。

V.1. 理論的考察

(3)式に対する 2 次元以上の厳密解はみつかっていない。
(3)式の有効性体
磁性については古くから調べられていて、IV. 2 で述べた $P=0$ の時の反強磁性は(3)式が良く記述する。簡単にいえば、 U が大きくて、CuO 1 ユニットあたり 1 ケの電子がいるという $P=0$ の時は、動きまわることなくどこかの原子が 2 ケ電子を収容することになり、 U が損をするということである。問

題は、分子場理論以上に近似をたかめて、 $\gamma\kappa_0$ の基底状態か、超伝導状態であるかどうかを調べることである。(3)式のオーランを無擾動系としてオニラント擾動でとり込もうといふのが伝統的やり方であるが、どういう過程を表すファインマングラフを用いて無限次までとり込めばよいかは、ある程度の見当がつくので、相当な計算がやられている。III.1で述べた自己エネルギー補正、vertex補正もある程度セルフコンシステムな形でとり込まねばならない。計算の結果は、HTSの相の依存性は定性的には実験の示すものと合う。 T_c の値は(3)式の七八、または自己エネルギー等のとり込み方に敏感に依存するので定量的な議論には至っていない。

このような伝統的方裏動論か、ある種の過程については、 $U=0$ で無限次まで入っているといっても、問題として(3)式のオニラントがみらわす局所的な振舞いをカヴァーできていふかが問題である。この間に付する古くからの解答は否定的をもつてゐる。新しい解析的な扱いもHTSに則していくつか提案されているが、そこで用いられた近似の程度を見つめることは、きやめて難しい。

V.2. 数値実験

解析的に無理ならば、といふわけで、特にHTSの発見以降(4)式を用いた数値実験がいくつかのグループでさかんに行わ

れるようになった。(3)のハミルトニアンを対角化することは
いとて小数(10ヶ程度)で良いといふのなら行える。たと
えば、 4×4 の格子を考え、電子が 2 けいるとすれば、電子
のバラマキ方は、 $16! / 12!$ 通り。電子のスピンの↑、↓の自由
度を考慮してパウリ排他律に反するバラマキ方を除き、1000
程度の状態の重ね合わせで(3)を対角化することは、今では
大して困難なことではない。問題はこのようす小数の系から
の外挿で本来の多体問題の基底状態がつかめるかということ
である。 i の数の外挿は可能としても電子数の外挿はいた
やうでない。このようすやり方は、厳密対角化の方法と
呼ばれている。現在やうれてはいるが、2ヶの電子系の基底
状態のエネルギーが、1ヶの電子のそれの2倍と見て安定
化するか否かという、束縛が電子の吸収によって起り得るか
という計算なのである。

もう1つの数値実験のやり方は、分配関数

$$\chi = \text{Tr} (e^{-\beta H}) \quad (\beta = 1/(kT)) \quad (4)$$

を、モンテカルロ・ミュレーションを用いて計算する方法であ
る。これは、 β を区間の中の N_T の領域に分割し：

$$e^{-\beta H} = \prod^N e^{-\tau H} \quad (\beta = NT) \quad (5)$$

もしもその領域内では、(3)式のオーナーとオーネーの非可換

性が、 $N \rightarrow \infty$ の極限で無視できることを利用する。この方法では、電子数は相当大きくできるからに、 N の値に限界があるから基底状態の情報（ \approx この $T=0$ ($\beta=\infty$) の情報）がつかみ得るかといった問題がある。このようなやり方で、超伝導の相関が、高温から T を下げて行った時に成長するか（発散すれば、その時の T が T_c ）が調べられている。

いずれの方法による、数値計算の結果は、單一バンドのハーレドモデルは超伝導を導きにくいといいうものである。上に述べた、小数系の限界、 $T=0$ 附近における限界の保留の結果ではあるが。

VI. 2バンド・スピニモデル

1バンドモデルが形成に有利でないとの観点から、2バンドモデルが提唱されている。これは1つのバンドの電子、又は正孔が、^(他の) バンドの自由度を励起させることで、対の束縛エネルギーを得しようとするとモデルである。HTSに則りていえば、Cu サイトにはスピニ \vec{S} があって 1つのバンド（といっても自由度はスピニの回転だけ）を構成し、O サイトの正孔が、まわりの O のサイトを運動しながら、 \vec{S} と相互作用をするというのである。 \vec{S} と正孔との相互作用を

$$J_k \vec{S}_i \cdot \vec{s}_k \quad (J_k > 0) \quad (6)$$

と表すとすると、この系のハミルトニアントは

$$H = \sum_{ll'} t C_{l\sigma}^+ C_{l'\sigma} + J_k \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{s}_k + J \sum_{ii'} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i'}, \quad (7)$$

ここで、O 原子のサイトを l, l' , Cu のサイトを i, i' であらわす。 (7) 式のオニ原、つまり (6) は i として唯一のサイトのみを考慮することにする。Kondo 問題として古くから研究されて相互作用ハミルトンニアントである。(7) では i が "Cu のサイトを走る" ので、Kondo 格子との相互作用をあらわしてゐる。(7) のオニ原は、 $J > 0$ とすると 2 次元の反強磁性ハイゼンバーグモデルを記述する。問題は (7) の基底状態はいかなるパラメーター空間で、超伝導にならかといふことであるか。Kondo 問題、ハイゼンバーグモデルとも、それぞれ単独でも、難問中の難問である。

VI.1. 2 次元ハイゼンバーグ・モデル

2 ヶのスピン \vec{S}_1 と \vec{S}_2 に対するハミルトニアント

$$J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (J > 0) \quad (8)$$

の基底状態のエネルギーは、2 ヶのスピンが singlet 的に結合した $-\frac{3}{4}J$ であり、古典的な反平行スピンの状態(ネール状態)のエネルギー $-\frac{1}{4}J$ より安定である。量子効果のために 2 ヶのスピンが singlet 的に結合した方が有利であるといふのは、空間の次元数が増して行くといえなくなる。1 ヶのスピンが周囲のスピンとつながる手の数に比例してネール状

態のエネルギーが安定化して行くからである。このため、3次元では、長距離秩序をもつたネール状態の方が、安定となる。これが反強磁性の長距離秩序状態である。2次元の場合にはネール状態と、2ヶのスピンの singlet 結合の重ね合わせで作る。状態は、エネルギーが大体同じになる。後者の状態を RVB (resonating valence bond) 状態という。RVBか、ネール状態か、いずれかが安定か未解決のハミルトニアンが(7)式のオミ頂である。

VI. 2. Kondo 相互作用

(7)式のオミ頂を落し、オニ頂は $i=0$ だけをとったものを Kondo ハミルトニアンといふ。磁性不純物のスピニ $\vec{S}_{i=0}$ による、金属電子の散乱を記述する。今、↑スピニの1ヶの電子に注目してみると、この電子の見る $\vec{S}_{i=0}$ は上向きのみでも下向きのこともある。元来電子は無数に多いから、他の電子との相互作用で $\vec{S}_{i=0}$ は見えず。アリ、フローフローリングからである。したがって注目している電子は、時間的にゆらりしている散乱をうけることになる。時間的なゆらぎは、確率論的取扱いが“量子論であるか”，それは、それで“量子論多電子系の状態によってセルフ・コンピューティングに決まる”ので行けばならない。ここが難問となるゆえんである。Kondo 問題はある近似のもとでは厳密に解かれているか、(7)式は、そ

のようちスピン系が、オミ良にさる相関をもちながら、電子系と Kondo 的に相互作用をしてさる系をカバーする。

VI.3 數値計算

(7) 式に対する、容易に自信をもつて計算がせらるるには、上に述べた 2つの難しい部分を含んでいふからである。數値計算は、いとては 10ヶ程のサイトをとり、2ヶの正孔と \vec{S}_i の値についての自由度から基底状態を展開すべき base をつくり厳密な対角化が試みられている。計算するものは、單一エンド・ハーレトモデルに述べた 2ヶの正孔の束縛エネルギーである。 $10^4 \sim 10^5$ 次元の H の行列表現を対角化して最低固有値を求めるにて、このことは議論である。singlet 対 α 形成が有望であると報告されていふ。

VII. まとめ

HTS の特長をとらえには、いざいざな問題を解決せねばならない。現状では T_c 見積りにはほど遠い。2ハンドモデルにおいても、Cu 電子のスピンを固定して考えることに疑問をもつ人も多い。さらに、2正孔についての數値実験で、Kondo 的な \vec{S} と \vec{s} の singlet 的な対形成というエネルギー利得をウツバーザしているかももう 1つは、ヨリくない。時間的 $= \vec{S}$ が“ゆらぐ” Kondo 系に対して我々が“もつイメージ”とシングレットの超伝導対形成のイメージは、ちがつかつちがりにくく。

HTSの理解には、まだまだ多くの努力を必要とする。
なお、本稿を書くにあたって筑波大の久保健氏に多大の御
教示を受けました。感謝します。