2C1a

Off-Diagonal Long Range Orser

青野茂行　　金沢大学名誉教授

aonosan2007@ybb.ne.jp

電子の波動関数を spinor であらわす。その時、一体の電子 Hamiltonian は

$$\begin{aligned} h_{rs} &= \int dx \rho_{rs} h(x) = \int dx h(x) \begin{pmatrix} \rho_{r\uparrow s\uparrow}(x) & \rho_{r\uparrow s\downarrow}(x) \\ \rho_{r\downarrow s\uparrow}(x) & \rho_{r\downarrow s\downarrow}(x) \end{pmatrix} \\ &= \sigma^\mu h^\mu_{rs} \end{aligned} \tag{1}$$

となる。このとき、off-diagonal elements は意味を持たない。しかし電子間相互作用を考慮すると意味を生じ、超伝導状態に対応する。site 表示での SCF 方程式は、対角部分が (unrestricted HF)

$$\begin{aligned} G^\uparrow_{rs}(0^-) &= \frac{1}{2} < r^\uparrow | s^\uparrow > - < r^\uparrow | i^a > \frac{D^a_{ii}}{2(\eta^{norm}_i + \eta^{sup}_i)} \tanh(\eta^a_i / 2k_B T) < i^a | s^\uparrow >, \\ D^a_{ii} &= h^\uparrow_{ii} + (\rho^a_{ii}; \rho^a_{tu}) G^a_{tu} - (\rho^\uparrow_{ii}; \rho^\uparrow_{ut}) G^\uparrow_{tu}. \qquad (a : \uparrow, \downarrow) \end{aligned} \tag{2}$$

非対角要素が

$$\begin{aligned} G^+_{rs}(0^-) &= -\left\{ < r^+ | i^+ > \frac{(\rho^+_{ii}; \rho^-_{tu}) < \bar{\mathbf{a}}_t \mathbf{a}_t >^-}{2(\eta^{norm}_i + \eta^{sup}_i)} < i^+ | s^+ > \right\} \tanh(\eta^+_i / 2k_B T). \\ &= -\left\{ < r^+ | i^+ > \frac{(\rho^+_{ii}; \rho^-_{tu}) G^-_{tu}}{2(\eta^{norm}_i + \eta^{sup}_i)} < i^+ | s^+ > \right\} \tanh(\eta^+_i / 2k_B T). \end{aligned} \tag{3}$$

この関係は、有効的な電子間相互作用が引力（＜０）でないと成り立たない：

$$< r^+ | i^+ > (\rho^+_{ii}; \rho^-_{tu}) < i^+ | s^+ > < 0 \tag{4}$$

ところで

$$< r^+ | i^+ > (\rho^+_{ii}; \rho^-_{tu}) < i^+ | s^+ > \sim q^H_{rs} (\rho^+_{rs}; \rho^-_{tu}) \tag{5}$$

だから、partial bond order q^H_{rs} が負であることは、十分ありうる。これが有効電子間相互作用を引力にする。

こうして、phonon を介しない、純電子論的な超伝道理論を得た。

この際、超伝導に寄与する ban 幅は ~eV であるから、phonon の Deby 振動数に比べて、100 倍程度。高温超伝導の機構に十分なりうる。