

平成 21 年度卒業論文  
超伝導転移温度の不純物効果の理論

兵庫県立大学理学部物質科学科  
応用数学講座 SB06M067 富谷昭夫

平成 22 年 3 月 19 日

# 目次

第 1 章	序章	3
第 2 章	理論的準備	4
2.1	理論的準備	4
2.1.1	第一量子化 (1 粒子の量子力学)	4
2.1.2	フェルミ面	5
2.1.3	第二量子化	6
2.1.4	相互作用のハミルトニアン	6
2.2	摂動論	8
2.2.1	相互作用表示	9
2.2.2	グリーン関数とその運動方程式	10
2.2.3	自己エネルギー $\Sigma$	11
2.2.4	ファインマンダイアグラム	12
2.2.5	不純物との相互作用のボルン近似	12
第 3 章	超伝導の理論	14
3.1	超伝導の理論	14
3.1.1	超伝導の理論	14
3.2	超伝導の不純物効果の理論	15
3.2.1	Nambu 表示の定義、ハミルトニアン	15
3.2.2	Nambu 表示のグリーン関数	16
3.2.3	グリーン関数の計算	17
3.2.4	セルフコンシステントボルン近似	17
3.2.5	相互作用をくり込んだ量	19
3.2.6	$\Sigma$ の計算	19
3.2.7	非磁性不純物散乱による自己エネルギー	20
3.2.8	磁性不純物散乱による自己エネルギー	21
3.2.9	くりこまれた物理量の具体的な形	22
3.2.10	ギャップ方程式	23
3.2.11	不純物がある時のギャップ方程式の計算	25
3.2.12	$\tau_2$ と $T_c, T_{c0}$	26
3.2.13	fortran での計算	27
3.2.14	通常のボルン近似での計算	28
3.2.15	セルフコンシステント t-matrix 近似での計算	29
3.3	まとめ	31
第 4 章	謝辞	32
付録 A	複素積分	34

付 録 B ディガンマ関数について	36
付 録 C プログラム	37

# 第1章 序章

1911年の超伝導の発見以来、超伝導は、理論・実験ともに多くの研究が進められてきた<sup>1)</sup>。そして2008年、磁性の象徴である鉄を含む鉄ヒ素系で超伝導が発見された<sup>2)</sup>。今までの常識を覆した発見であった。超伝導体が不純物原子を含み、さらにその不純物原子が局在スピンをもち磁性が発生すると、転移温度が下がってしまう。不純物の濃度によっては超伝導が消失する。ではなぜ磁性不純物があると超伝導転移温度は下がるのか。それを疑問に思い、超伝導転移温度の不純物効果を示したP. Fulde and K. Makiの論文<sup>7)</sup>を勉強した。まず前半では、阿部龍蔵の統計力学<sup>5)</sup>を参考にSchrödinger方程式から始め、第二量子化そして摂動論について述べた。そして後半では、前半で考えた第二量子化、摂動論を用いて、相互作用を表す自己エネルギー $\Sigma$ をセルフコンシステントボルン近似で計算し、摂動として、不純物効果を取り入れた。

P. Fulde and K. Makiの論文では、磁性不純物、非磁性不純物の他に、ゼーマン項、スピン軌道カップリングの効果を含めた計算を取り扱っているが、今回は簡単のために、磁性不純物と非磁性不純物の効果のみを取り扱った。P. Fulde and K. Makiの論文に従い、不純物効果を表す自己エネルギーをセルフコンシステントボルン近似で求め、その自己エネルギーを用いて不純物効果を含んだグリーン関数を求めた。さらに得られたグリーン関数を用いて、不純物効果をくりこんだギャップ方程式を求めた。そして、くりこんだギャップ方程式を解くことによって、s波singletの超伝導体中に磁性不純物が存在すると転移温度が下がることを確かめ、同時に非磁性不純物が転移温度に関係しないことも確かめた。また通常のボルン近似で磁性不純物が正しく取り扱えないことも確かめた。そして不純物がある場合の転移温度 $T_c$ を不純物のない場合の転移温度 $T_{c0}$ で規格化した $T_c/T_{c0}$ を縦軸、磁性不純物のパラメータ $\alpha$  ( $\propto$  不純物濃度)を $T_{c0}$ で規格化しそれを横軸にしてfortranにて $\log(T_c/T_{c0}) = \psi(1/2) - \psi(1/2 - \alpha/2\pi T_c)$ の解を求めた。また、磁性不純物を含まない場合であるが、セルフコンシステントt-matrix近似の下、ユニタリティー極限をとって不純物効果を表す自己エネルギーを求めた。その自己エネルギーを用いs波を仮定すると、セルフコンシステントボルン近似と同様に、非磁性不純物によっては、転移温度が変わらないことが確かめられた。セルフコンシステントt-matrix近似の取扱いと計算は、T. Hottaの論文<sup>8)</sup>に従った。

## 第2章 理論的準備

### 2.1 理論的準備

以下において、位置ベクトル、波数ベクトルは  $\vec{x}$  のようにあらわすが、添え字や、総和のダミー変数、指数の肩に乗ったときなどは、 $e^x$  のように書くことにする。また、記号  $\langle \dots \rangle$  は  $\dots$  の平均値である。

#### 2.1.1 第一量子化 (1 粒子の量子力学)

定常状態を扱う Schrödinger 方程式は、以下である<sup>1</sup>。

$$\hat{H}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) \quad (2.1)$$

$\hat{H}$  は、ハミルトニアンと呼ばれる演算子で関数に作用する。このとき  $E$  をエネルギー固有値、 $\psi(\vec{x})$  を固有関数とよぶ。 $\hat{H}$  は、一般的に運動エネルギーとポテンシャル (エネルギー) にわけられる。

ここで、任意の演算子  $\hat{A}$  を行列表示することを考える。 $\phi_i(\vec{x})$  が完全規格直交系をなすとする。

$$A_{ij} = \int \phi_i^*(\vec{x}) \hat{A} \phi_j(\vec{x}) dv \equiv (\phi_i \hat{A} \phi_j) \quad (2.2)$$

上記のようにする事を行列表示するという。ここで、完全系  $\phi_i$  から他の完全系  $\varphi_i$  に移ることを考える。すると、行列表示もそれに伴って変更を受ける。それを求める。元の完全系  $\phi_i$  を新しい完全系  $\varphi_i$  で展開する。

$$\phi_i = \sum_l a_{il} \varphi_l = a_{i1} \varphi_1 + a_{i2} \varphi_2 + a_{i3} \varphi_3 + \dots \quad (2.3)$$

両辺に  $\varphi_n^*$  をかければ、 $a_{in} = (\varphi_n \phi_i)$  が得られる。以上から、 $\phi$  は、新しい完全系で、以下のようにかける。

$$\phi_i = \sum_l (\varphi_l \phi_i) \varphi_l \quad (2.4)$$

得られた関係式を、完全規格直交系の式  $(\phi_i \phi_j) = \delta_{ij}$  に代入すると以下が得られる。

$$\sum_l (\phi_i \varphi_l) (\varphi_l \phi_j) = \delta_{ij} \quad (2.5)$$

行列の各要素は、基底となる関数 (= 展開に用いた完全系) が違うと異なるが、その対角和 = トレースは、基底によらず、どんな完全系で行列表示してもかわらない。まず、トレースは、以下のよう定義される。

$$\text{Tr}[\hat{A}] = \sum_i (\phi_i \hat{A} \phi_i) \quad (2.6)$$

---

<sup>1</sup>前半の説明は、<sup>5)</sup> に従った。

対角和が基底に依存しない事は、以下のようにして証明できる。それは (2.4)(2.5) をもちいて、 $\phi_i$  による行列の表示 (2.3) を、 $\varphi_i$  による表示に変えることで示される。

$$\begin{aligned} \sum_i (\phi_i \hat{A} \phi_i) &= \sum_{ijl} (\phi_i \varphi_j) (\varphi_j \hat{A} \varphi_l) (\varphi_l \phi_i) = \sum_{jl} \delta_{jl} (\varphi_j \hat{A} \varphi_l) \\ &= \sum_j (\varphi_j \hat{A} \varphi_j) \end{aligned} \quad (2.7)$$

いままで、出てきた量子力学の問題にの応用として、1辺  $L$  の立方体に入った質量  $m$  の問題を考える。この系の古典的なハミルトニアン (=運動量を用いて表した全エネルギー) は、 $H = \vec{p}^2/2m$  である。そして量子化の置き換え  $-i\vec{p} \Rightarrow \hbar\vec{\nabla}$  をする。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \quad (2.8)$$

このハミルトニアンを用いて、エネルギー固有値  $E$  を求めるとき、境界条件が必要である。このとき、周期的境界条件を取ることにする。 $x$  方向のみ書くと以下のようなになる。

$$\phi(x+L) = \phi(x), \quad \frac{\partial}{\partial x} \phi(x+L) = \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) \quad (2.9)$$

それを満たす、 $\phi$  は、規格化を考慮すると以下のようなになる。ただし  $L^3 = V$  とした。

$$\phi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \quad (2.10)$$

となる。ここで出てきた  $\vec{k}$  は、波数ベクトルと呼ばれ、 $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$  である。また、運動量は  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  で表すことができる。しかし波数  $k_x, k_y, k_z$  は、離散的な値しかとれず、 $k_x$  のみ書くと以下の値がとれる。

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.11)$$

以上を用いると、1つの自由粒子の系のエネルギー固有値  $E$  は波数  $\vec{k}$  を用いて以下のように書ける。

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.12)$$

1粒子については、以上である。多数のフェルミ粒子を扱う場合、波動関数に反交換関係が必要である。これは、スレーター行列式を課すことでも実現できるが、後で説明する第2量子化 ( $\simeq$  場の量子化) が便利でありそれによっても反交換関係を満たせる。また以下では、ハミルトニアン  $\hat{H}$  を、 $H$  と表示するが、演算子であることには変わらない。

## 2.1.2 フェルミ面

この節では、フェルミ面 (Fermi Surface:FS) について説明する。理想的なフェルミ粒子を考える。理想的なフェルミ粒子は相互作用せず、運動エネルギーのみをもつ。絶対零度の (理想) フェルミ粒子は、波数空間 ( $k$  空間) でパウリの排他律を満たしながら、 $E = \hbar^2 k^2/2m$  で定義されるエネルギーでエネルギーの低いところから順に占有されていき球体を形成する。これを、フェルミ球と言い、この球の表面をフェルミ面という。一般の場合 (結晶の場合等) を考えると球にはならないが、境界が存在し、無限小のエネルギーで励起できる場合これもフェルミ面という (バンドギャップがあると励起できない)。その境界での波数をフェルミ波数  $k_F$  という。また、 $E_F = \hbar^2 k_F^2/2m$  で定義されるエネルギーをフェルミエネルギーという。絶対零度の理想フェルミ粒子において化学ポテンシャル  $\mu$  は  $E_F$  に等しい。

### 2.1.3 第二量子化

多数の粒子を扱う、量子統計力学では第二量子化法が用いられる。この節では、波数  $\vec{k}$  とスピン  $\sigma(=\uparrow, \downarrow)$  をまとめて添え字  $r = (\vec{k}, \sigma) = (k_x, k_y, k_z, \sigma)$  で表す。状態  $r$ 、つまり波数  $\vec{k}$  でスピンの状態を占有する粒子の数は、 $n_r$  である。第二量子化とは、 $n_r$  を演算子  $\hat{n}_r$  として扱う手法のことである。このとき自由粒子 (=粒子が運動エネルギーしか持たない) のハミルトニアン  $H_0$  は、以下のようになる。

$$H_0 = \sum_r e_r \hat{n}_r, \quad e_r = \hbar^2 k^2 / 2m \quad (2.13)$$

また、粒子の総数を  $N$  とすると、 $N$  も  $n_r$  が演算子になったことに対応して演算子になる。

$$\hat{N} = \sum_r \hat{n}_r \quad (2.14)$$

以下では、フェルミ粒子 (fermion) を扱うので、フェルミ粒子の第二量子化について述べる。 $\hat{n}_r$  の固有値は、フェルミ粒子ではパウリの排他律より 0,1 である。粒子数演算子  $\hat{n}_r$  が固有値を持つ状態をディラックのブラ・ケット記法で  $|n_r\rangle$  と書くことにする。このような表示を数表示という。ここで、次の“演算子”  $C_r$ 、 $C_r^\dagger$  を定義する。

$$C_r |n_r\rangle = \sqrt{n_r} |n_r - 1\rangle, \quad C_r^\dagger |n_r\rangle = \sqrt{n_r + 1} |n_r + 1\rangle \quad (2.15)$$

この式からわかるように、 $C_r$  は、状態  $r$  の粒子を 1 つ減らす演算子で、 $C_r^\dagger$  は、1 つ増やす演算子である。それぞれを消滅、生成演算子とよぶ。次に、 $C_r^\dagger$  と  $C_r$  の積を  $|n_r\rangle$  に作用させてみる。 $C_r^\dagger$  の  $C_r$  は、それぞれ演算子なので、以下の 2 通りが考えられる。なお、各演算子は係数には作用しないとする。

$$C_r^\dagger C_r |n_r\rangle = C_r^\dagger \sqrt{n_r} |n_r - 1\rangle = n_r |n_r\rangle \quad (2.16)$$

$$C_r C_r^\dagger |n_r\rangle = C_r \sqrt{n_r + 1} |n_r + 1\rangle = (n_r + 1) |n_r\rangle \quad (2.17)$$

以上から  $C_r^\dagger C_r$  が粒子数演算子  $\hat{n}_r$  に等しいことがわかる。ボース粒子の生成消滅演算子では、交換関係を要請するが、今回用いるフェルミ粒子の場合は、反交換関係を要請する。

$$\begin{cases} C_r C_s^\dagger + C_s^\dagger C_r = \delta_{rs} \\ C_r C_s + C_s C_r = 0 \\ C_r^\dagger C_s^\dagger + C_s^\dagger C_r^\dagger = 0 \end{cases} \quad (2.18)$$

ここで注意が必要なのは、(2.18) で、生成演算子、消滅演算子同士の積でも、順序をひっくり返すと符号が変わってしまうという事である。また、(2.18) の条件を課すことで  $\hat{n}_r$  の固有値が 0,1 であることは容易に証明できる。粒子のいない状態からさらに粒子を減らすことができないから、 $C|0\rangle = 0$  であり、さらにフェルミ粒子では  $C^\dagger|1\rangle = 0$  も満たす。また、 $\hat{n}_r = C_r^\dagger C_r$  と、(2.13) より、以下が得られる。

$$H_0 = \sum_r e_r C_r^\dagger C_r \quad (2.19)$$

### 2.1.4 相互作用のハミルトニアン

粒子間の相互作用を  $C_r^\dagger$  と  $C_r$  で表すため、次の場の演算子  $\Psi_s(\vec{x})$  を定義する。

$$\Psi_s(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_r C_r e^{ik \cdot x} \delta(s, \sigma) \quad (2.20)$$

ここで、 $s$  は、粒子のスピン座標を表す。同様に  $\Psi_s^\dagger(\vec{x})$  も定義する。

$$\Psi_s^\dagger(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_r C_r^\dagger e^{-ik \cdot x} \delta(s, \sigma) \quad (2.21)$$

それぞれの場の演算子が (2.18) と似た反交換関係をみたすことは、(2.18)(2.20)(2.21) を用いればすぐに確かめられる。

$$\begin{cases} \Psi_s(\vec{x})\Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') + \Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}')\Psi_s(\vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{x}')\delta(s, s') \\ \Psi_s(\vec{x})\Psi_{s'}(\vec{x}') + \Psi_{s'}(\vec{x}')\Psi_s(\vec{x}) = 0 \\ \Psi_s^\dagger(\vec{x})\Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') + \Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}')\Psi_s^\dagger(\vec{x}) = 0 \end{cases}$$

ここで、場の演算子  $\Psi$  の物理的意味を見るために次の積分を考える。

$$\int_V \Psi_s^\dagger(\vec{x})\Psi_s(\vec{x})dv \quad (2.22)$$

上の式に (2.20)(2.21) を代入する。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \sum_{r,r'} \int_V C_{r'} e^{ik' \cdot x} \delta(s, \sigma') C_r^\dagger e^{-ik \cdot x} \delta(s, \sigma) dv \\ &= \sum_{k\sigma\sigma'} C_{k\sigma'}^\dagger C_{k\sigma} \delta(s, \sigma') \delta(s, \sigma) = \sum_k C_{ks}^\dagger C_{ks} \end{aligned} \quad (2.23)$$

ここで今、次の演算子  $\hat{\rho}_s(\vec{x})$  を定義する。

$$\hat{\rho}_s(\vec{x}) = \Psi_s^\dagger(\vec{x})\Psi_s(\vec{x}) \quad (2.24)$$

このように定義すると、数演算子の定義と上の式及び (2.23) より、以下のように  $\hat{\rho}_s(\vec{x})$  を体積  $V$  内で積分すると、その中に含まれるスピン状態  $s$  の全粒子数が得られる。

$$\sum_s \int_V \hat{\rho}_s(\vec{x})dv = N \quad (2.25)$$

したがって、 $\hat{\rho}_s(\vec{x})$  は、スピン  $s$  を持った粒子の場所  $\vec{x}$  での数密度を表していると考えられる。

以上のことを念頭に置き、粒子間の相互作用を場の演算子で書くことを試みる。相互作用は、2体力であるとし、そのポテンシャルを  $v(\vec{x} - \vec{x}')$  としよう。さらにこの相互作用は、粒子のスピンによらないとする。場所  $\vec{x}$  近傍の微小体積  $dv$  に含まれるスピン  $s$  の粒子数は、 $\hat{\rho}_s(\vec{x})dv$  であり、同様に場所  $\vec{x}'$  近傍の微小体積  $dv'$  に含まれるスピン  $s'$  の粒子数は、 $\hat{\rho}_{s'}(\vec{x}')dv'$  であるので、それらの粒子間には、 $(1/2)v(\vec{x} - \vec{x}')\hat{\rho}_s(\vec{x})\hat{\rho}_{s'}(\vec{x}')dvdv'$  の相互作用が働く。

以上のことから相互作用のハミルトニアンを  $H'$  とすると、 $(1/2)v(\vec{x} - \vec{x}')\hat{\rho}_s(\vec{x})\hat{\rho}_{s'}(\vec{x}')dvdv'$  を  $\vec{x}$ 、 $\vec{x}'$  について積分し、 $s$ 、 $s'$  について和を取れば得られる。

$$H' = \frac{1}{2} \int_V \sum_{s,s'} v(\vec{x} - \vec{x}') \hat{\rho}_s(\vec{x}) \hat{\rho}_{s'}(\vec{x}') dvdv' \quad (2.26)$$

(2.26) に (2.24) を代入し反交換関係 (2.22) 等を用いると、以下が得られる。

$$\begin{aligned} H' &= \frac{1}{2} \int_V \sum_{s,s'} \Psi_s^\dagger(\vec{x}) v(\vec{x} - \vec{x}') \delta(\vec{x} - \vec{x}') \delta(s, s') \Psi_{s'}(\vec{x}') dvdv' \\ &+ \frac{1}{2} \int_V \sum_{s,s'} \Psi_s^\dagger(\vec{x}) \Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') v(\vec{x} - \vec{x}') \Psi_{s'}(\vec{x}') \Psi_s(\vec{x}) dvdv' \end{aligned} \quad (2.27)$$



ここで、第一項は、以下のように定数である。

$$H' \text{の第1項} = \frac{1}{2}v(0) \int_V \sum_s \Psi_s^\dagger(\vec{x}) \Psi_s(\vec{x}) dv = \frac{1}{2}v(0)N \quad (2.28)$$

ハミルトニアンに定数を足しても、全体のエネルギーがシフトするだけで物理的にあまり意味がない。したがって、(2.27)の $H'$ の第2項のみを取ることにする。 $v(0)$ が無限大になってしまうクーロン相互作用のときでも第2項のみで正しい結果を与える。以上の議論により相互作用のハミルトニアン $H'$ は、第二量子化法では以下で与えられることがわかる。

$$H' = \frac{1}{2} \int_V \sum_{s,s'} \Psi_s^\dagger(\vec{x}) \Psi_{s'}^\dagger(\vec{x}') v(\vec{x} - \vec{x}') \Psi_{s'}(\vec{x}') \Psi_s(\vec{x}) dv dv' \quad (2.29)$$

さて今、得ることができた $H'$ をいよいよ $C_{k\sigma}^\dagger$ と $C_{k\sigma}$ で表すことを考える。(2.29)に(2.20)(2.21)を代入して計算すると以下が得られる。

$$H' = \frac{1}{2V} \sum_{k_1 \dots k_4 \sigma, \sigma'} (\vec{k}_1 \vec{k}_2 | v | \vec{k}_3 \vec{k}_4) C_{k_1 \sigma}^\dagger C_{k_2 \sigma'}^\dagger C_{k_4 \sigma'} C_{k_3 \sigma} \quad (2.30)$$

ただし、 $(\vec{k}_1 \vec{k}_2 | v | \vec{k}_3 \vec{k}_4)$ は、以下で定義してある。

$$(\vec{k}_1 \vec{k}_2 | v | \vec{k}_3 \vec{k}_4) = \frac{1}{V} \int_V e^{-ik_1 \cdot x - ik_2 \cdot x'} v(\vec{x} - \vec{x}') e^{+ik_3 \cdot x + ik_4 \cdot x'} dv dv' \quad (2.31)$$

ここで、 $v(\vec{x})$ のフーリエ変換を定義する。

$$v(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_q v(\vec{q}) e^{iq \cdot x}, \quad v(\vec{q}) = \int_V v(\vec{x}) e^{-iq \cdot x} \quad (2.32)$$

フーリエ変換を上記のように定義すると、 $(\vec{k}_1 \vec{k}_2 | v | \vec{k}_3 \vec{k}_4)$ は、 $e^{ikx}$ のフーリエ変換がデルタ関数になることから以下のようなになる。

$$(\vec{k}_1 \vec{k}_2 | v | \vec{k}_3 \vec{k}_4) = \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4) v(\vec{k}_1 - \vec{k}_3) \quad (2.33)$$

見て明らかなように上の式中のデルタ関数は、運動量保存則をあらわす。(2.33)を(2.30)に代入し $\vec{k}_1 - \vec{k}_3 = \vec{q}$ 、 $\vec{k}_1 = \vec{k}_3 + \vec{q}$ 、 $\vec{k}_2 = \vec{k}_4 - \vec{q}$ と変数変換すると $H'$ を生成消滅演算子 $C_{k,\sigma}^\dagger$ 、 $C_{k,\sigma}$ で表した以下が得られる。

$$H' = \frac{1}{2V} \sum_{qkk'\sigma\sigma'} v(\vec{q}) C_{k+q,\sigma}^\dagger C_{k'-q,\sigma'}^\dagger C_{k',\sigma'} C_{k,\sigma} \quad (2.34)$$

この式をみると、 $H'$ によって $\vec{k}\sigma, \vec{k}'\sigma'$ の粒子が消えて、 $\vec{k} + \vec{q}, \sigma; \vec{k}' - \vec{q}, \sigma'$ の粒子が生成している。あるいは、 $\vec{k}'$ の粒子が、 $\vec{q}$ を吐き出し、 $\vec{k}$ の粒子を吸収するということもできる。ただしこの相互作用ではスピンは影響を受けない。これを図にすると Fig. 2.1 の様になる。

## 2.2 摂動論

<sup>2</sup>量子統計力学では、ハミルトニアン $H$ 自身より、粒子数を保存するためにラグランジュの未定乗数として $\mu$ (化学ポテンシャル)を取り込んだものが便利である。

$$\mathcal{H} = H - \mu N \quad (2.35)$$

<sup>2</sup>詳しくは<sup>5)</sup>を参照。

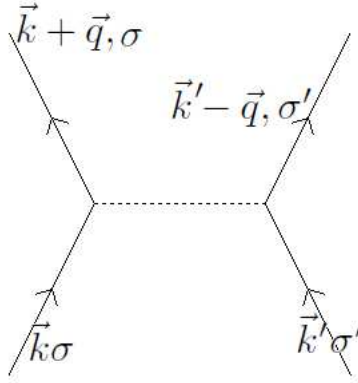


Fig. 2.1:

以後このかざり文字  $\mathcal{H}$  であらわされるのは上を意味するものとし、自由粒子のハミルトニアンを  $H_0$ 、 $\mathcal{H}_0$  であらわすことにする。また、 $\varepsilon_r = e_r - \mu$  とおくと、これを用いて  $\mathcal{H}_0$  を表すことができる。

$$\mathcal{H}_0 = \sum_r \varepsilon_r C_r^\dagger C_r \quad (2.36)$$

$\varepsilon_r$  は絶対零度の理想フェルミ気体では、 $\varepsilon_r = e_r - E_F \equiv \xi_k$  となりフェルミ面から測った運動エネルギーとなる。

## 2.2.1 相互作用表示

温度が  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  のとき、(虚時間での<sup>3</sup>) 相互作用表示の演算子  $A^I(\beta)$ 、 $A^{I\dagger}(\beta)$  は以下で定義される。ただし  $a$  は Schrödinger 表示である<sup>4</sup>。

$$A^I(\beta) = e^{\beta \mathcal{H}_0} a e^{-\beta \mathcal{H}_0} \quad (2.37)$$

$$A^{I\dagger}(\beta) = e^{\beta \mathcal{H}_0} a^\dagger e^{-\beta \mathcal{H}_0} \quad (2.38)$$

Heisenberg 表示との違いは、指数関数の肩に全体のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  ではなく、相互作用を含まない自由なハミルトニアン  $\mathcal{H}_0$  が乗っている点である。また、 $A^{I\dagger}$  と  $A^I$  は、エルミート共役でないこと ( $(A^{I\dagger})^\dagger \neq A^I$ ) に注意する必要がある<sup>5</sup>。

時間発展演算子  $U(\beta)$  は、以下で定義される。

$$U(\beta) = \hat{T} \exp\left(-\int_0^\beta H'^I(u) du\right) \equiv 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \hat{P}[H'^I(u_1) \cdots H'^I(u_n)] du_1 \cdots du_n \quad (2.39)$$

ここで、 $\hat{P}$  はダイソンの記号で、後ろに来る演算子を左から引数の大きい順に並べる演算子である。なぜこんな時間発展演算子なるものを考えるかという、詳しい議論は、<sup>5)</sup> に載っているが  $H = H_0 + H'$  のとき、以下のようなものを考えた。

$$e^{-\beta \mathcal{H}} = e^{-\beta \mathcal{H}_0} U(\beta) \quad (2.40)$$

<sup>3</sup>本来なら  $A = e^{i\mathcal{H}t/\hbar} a e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$  であるが、 $t = -\hbar\beta$  と置くことで、時間ではなく温度に関する相互作用表示が得られる。これを時間を虚数に取っているので虚時間法という。

<sup>4</sup>演算子を引数に持つ指数関数の定義は、 $e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}$ 。また、 $e^{\hat{H}} \psi_i(x) = e^{\hat{E}_i} \psi_i(x)$  である。

<sup>5</sup>虚時間でない通常の相互作用表示ならエルミート共役になる。

上記のようにして  $U(\beta)$  の摂動展開を求めたからだった。そして、上式の両辺でトレースを取る等をするると次式が得られた。

$$Z_G = Z_{G_0} \langle e^{-\beta \mathcal{H}_0} U(\beta) \rangle_0 = Z_{G_0} \langle U(\beta) \rangle \quad (2.41)$$

$Z_{G_0}$  は、 $H_0$  に対する大分配関数で、 $\langle \dots \rangle_0 = \text{Tr}[\dots e^{-\beta \mathcal{H}_0}] / \text{Tr}[e^{-\beta \mathcal{H}_0}]$  である。相互作用  $H'$  を含んだ系での物理量は、 $Z_G$  が求まれば計算できるので物理量を計算するには  $\langle U(\beta) \rangle_0$  がわかれば良いことになる。 $\langle U(\beta) \rangle$ 、具体的には  $\langle H'(u_1) \dots H'(u_n) \rangle_0$  を求めるには、ブロックドミニシスの定理が有効である。ブロックドミニシスの定理を用いると、摂動の各項は 2 体相互作用であれば、1 体グリーン関数に分解することができる。次の節でグリーン関数について述べる。

## 2.2.2 グリーン関数とその運動方程式

自由電子の温度グリーン関数は、次式で定義される。

$$G_{0,r}[u, u'] = \langle \hat{T} C_r^I(u) C_r^{I\dagger}(u') \rangle_0 \quad (2.42)$$

ここで、 $\hat{T}$  は時間順序演算子とよばれる演算子で、後ろに来る演算子を左から引数の大きい順に並べ、その交換が奇置換であれば (-1) の符号をつけ、偶置換であれば (+1) の符号をつける演算子である。具体的には、以下である。

$$G_{0,r}[u, u'] = \begin{cases} -\langle C_r^I(u) C_r^{I\dagger}(u') \rangle_0, & (u > u') \\ \langle C_r^{I\dagger}(u') C_r^I(u) \rangle_0, & (u' > u) \end{cases}$$

また、ヘヴィサイドの階段関数<sup>6</sup>  $\theta(x)$  を用いると、以下のようにあらわすこともできる。

$$G_{0,r}[u, u'] = -\theta(u - u') \langle C_r^I(u) C_r^{I\dagger}(u') \rangle_0 + \theta(u' - u) \langle C_r^{I\dagger}(u') C_r^I(u) \rangle_0 \quad (2.43)$$

そして 1 体温度グリーン関数は以下で定義される。演算子は、Heisenberg 表示である。

$$G_r[u, u'] = \langle \hat{T} C_r(u) C_r^\dagger(u') \rangle = -\theta(u - u') \langle C_r(u) C_r^\dagger(u') \rangle_0 + \theta(u' - u) \langle C_r^\dagger(u') C_r(u) \rangle_0 \quad (2.44)$$

ここで、 $C_r(u)$  の  $u$  についての微分を考えると以下が成り立つ。

$$\frac{\partial C_r(u)}{\partial u} = [\mathcal{H}(u), C_r(u)] \quad (2.45)$$

$\mathcal{H}(u)$  は、ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  の Heisenberg 表示である。ここで、ハミルトニアンは運動エネルギー  $H_0$  と、2 体相互作用  $H'$  の和であるとする。

$$\mathcal{H}(u) = \sum_r \varepsilon_r C_r^\dagger(u) C_r(u) + \frac{1}{2V} \sum_{rsr's'} (rs|v|r's') C_r^\dagger(u) C_s^\dagger(u) C_{s'}(u) C_{r'}(u) \quad (2.46)$$

これを用いると、 $C_r(u)$  の  $u$  についての微分は以下の様になる。

$$\frac{\partial C_r(u)}{\partial u} = -\varepsilon_r C_r(u) - \frac{1}{V} \sum_{sr's'} (rs|v|r's') C_s^\dagger(u) C_{s'}(u) C_{r'}(u) \quad (2.47)$$

<sup>6</sup>ヘヴィサイドの階段関数は、引数が正のとき 1、負のとき 0 となるように定義されている。

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & (x < 0) \\ 1, & (x > 0) \end{cases}$$

以上を用いて、グリーン関数の運動方程式 (グリーン関数の虚時間微分) を求める。ヘヴィサイドの階段関数の微分は、ディラックのデルタ関数 ( $d\theta(x)/dx = \delta(x)$ ) で、ディラックのデルタ関数は偶関数 ( $\delta(-x) = \delta(x)$ ) であることに注意すると以下が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial u} G_r[u, u'] = -\delta(u - u') \langle C_r(u) C_r^\dagger(u') \rangle - \delta(u - u') \langle C_r^\dagger(u') C_r(u) \rangle - \langle \hat{T} \frac{\partial C_r(u)}{\partial u} C_r^\dagger(u') \rangle \quad (2.48)$$

デルタ関数の係数部分では、 $u = u'$  と置けるので、 $\langle C_r(u) C_r^\dagger(u) + C_r^\dagger(u) C_r(u) \rangle = 1$  が成り立ち、以下が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial u} G_r[u, u'] = -\delta(u - u') - \langle \hat{T} \frac{\partial C_r(u)}{\partial u} C_r^\dagger(u') \rangle \quad (2.49)$$

得た式に、 $C_r(u)$  の  $u$  についての微分の結果を代入すると以下が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial u} G_r[u, u'] = -\delta(u - u') - \varepsilon_r G_r[u, u'] + \frac{1}{V} \sum_{sr's'} (rs|v|r's') \langle \hat{T} C_s^\dagger(u) C_{s'}(u) C_{r'}(u) \rangle \quad (2.50)$$

### 2.2.3 自己エネルギー $\Sigma$

前節で得られた最後の式 (2.50) の最後の項で現れる平均値は、2体グリーン関数と呼ばれるものである。この2体グリーン関数に対する方程式を立てると3体のものがあらわれ、以下同様に新しいグリーン関数が出てきて閉じない。しかし形式的な解は、自己エネルギー  $\Sigma_r$  と呼ばれるものを導入すれば求めることができる。それは、以下で定義される。

$$\frac{1}{V} \sum_{sr's'} (rs|v|r's') \langle \hat{T} C_s^\dagger(u) C_{s'}(u) C_{r'}(u) \rangle = - \int_0^\beta \Sigma_r[u, u''] G[u'', u'] du'' \quad (2.51)$$

ここで、温度グリーン関数  $G[u, u']$  は、周期  $2\beta = 2 \times \frac{1}{k_B T}$  を持つので以下のようにフーリエ変換できる。さらに、自己エネルギー  $\Sigma_r$  にもフーリエ変換を行う。

$$G_r[u, u'] = \frac{1}{\beta} \sum_l G_r(i\omega_l) e^{-i\omega_l(u-u')} \quad (2.52)$$

$$\Sigma_r = \frac{1}{\beta} \sum_l \Sigma_r(i\omega_l) e^{-i\omega_l(u-u')} \quad (2.53)$$

ただし  $\omega_n$  は以下で定義される。

$$\omega_n = \frac{2n+1}{\beta}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.54)$$

上式で定義される  $\omega_n$  を (フェルミ粒子の) 松原振動数という。ボース粒子に対しては、偶数が対応する。

このフーリエ変換を用いると、(2.51) の右辺は簡単にかけて、以下である。

$$\text{右辺} = -\frac{1}{\beta} \sum_l e^{-i\omega_l(u-u')} \Sigma_r(i\omega_l) G_r(i\omega_l) \quad (2.55)$$

ただしここで、 $\int_0^\beta \exp[i(\omega_l - \omega_{l'})u] du = \beta \delta(l, l')$  を用いた。上式と (2.52)、(2.53)、(2.50) から、以下が得られる。

$$\frac{1}{\beta} \sum_l [i\omega_l - \varepsilon_r - \Sigma_r(\omega_l)] G_r(i\omega_l) e^{-i\omega_l(u-u')} = \delta(u - u') \quad (2.56)$$

得た式の両編に  $\exp(-i\omega_{l'}u')$  をかけて、 $u'$  に関して 0 から  $\beta$  まで積分すると次式が得られる。

$$i\omega_l - \varepsilon_r - \Sigma_r(i\omega_l)G_r(i\omega_l) = 1 \quad (2.57)$$

ここで、 $G_{R,0}^{-1} = i\omega_l - \varepsilon_r$  なので代入すると以下が得られる。

$$[G_{0,r}^{-1} - \Sigma_r(i\omega_l)] G_r(i\omega_l) = 1 \quad (2.58)$$

上より、以下のダイソン方程式がえられる。

$$G_r^{-1} = G_{0,r}^{-1} - \Sigma_r \quad (2.59)$$

## 2.2.4 ファインマンダイアグラム

Fig. 2.2 であらわされるファインマンダイアグラムを考えてみよう。左辺の太い線 (太い電子線)

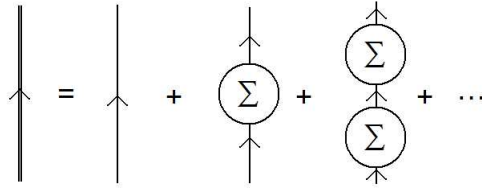


Fig. 2.2:

は  $G_r$  に対応し、右辺の細い線は自由電子のグリーン関数  $G_{0,r}$  に対応し、そして○で囲まれた  $\Sigma$  は、自己エネルギー  $\Sigma$  に対応する<sup>7</sup>。それを式にすると、以下のようになる。

$$G_r = G_{0,r} + G_{0,r}\Sigma_r G_{0,r} + G_{0,r}\Sigma_r G_{0,r}\Sigma_r G_{0,r} + \dots \quad (2.60)$$

これは、グリーン関数の展開が等比級数的な性格をもつと、以下のように変形できる。

$$G_r = [G_{0,r}^{-1} - \Sigma_r]^{-1} \quad (2.61)$$

これは、前述のダイソン方程式 (2.59) に一致する。つまりダイソン方程式は、色々な相互作用過程を足し合わせたものだと考えられる。

ファインマンダイアグラムは、 $\langle U(\beta) \rangle$  の摂動展開を間違えずに求める方法である。ブロックドミニシスの定理によって、高次の摂動項も2つの演算子の平均値=コントラクションに分解できる。その分解の仕方でダブらないように示してくれるのがファインマンダイアグラムである。また、グリーン関数  $G$  を求めるには、ダイソン方程式を用いることができ、自己エネルギー  $\Sigma$  がわかれば、 $G$  がわかることになる。そこでは、つながった自己エネルギーのダイアグラムのみ考えて、実線に  $G_{0,r}$ 、点線にポテンシャル  $V$  を対応つけければ良い。そうすると、 $\Sigma$  を求めることができる。

## 2.2.5 不純物との相互作用のボルン近似

ここでは、不純物との相互作用のボルン近似について軽く触れる<sup>8</sup>。自由電子の体系をとって、その中に  $N_i$  個の不純物原子をばらまく。不純物原子間には相関はないとし、各原子は完全に乱雑

<sup>7</sup>詳しい議論は、<sup>5)</sup> の 11 章参照

<sup>8</sup>詳しくは <sup>5)</sup> の 14 章を参照。

な分布をすると仮定する。1つの原子が及ぼすポテンシャルを  $v$  とすると、位置  $\vec{x}$  におけるポテンシャルは、次のようになる。

$$U[\vec{x}] = \sum_i v(\vec{x} - \vec{x}_i) \quad (2.62)$$

ただし、 $\vec{x}_i$  は、 $i$  番目の不純物原子の位置である。ここで、 $v(\vec{x})$  をフーリエ変換することを考える。

$$v(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_q U(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{x}} \quad (2.63)$$

すると、位置  $\vec{x}$  におけるポテンシャルは、次のようになる。

$$U[\vec{x}] = \frac{1}{V} \sum_q U(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{x}} \quad (2.64)$$

ここで、以下の定義を用いた。

$$\begin{cases} U(\vec{q}) = v(\vec{q})\rho_q \\ \rho_q = \sum_i e^{-i\vec{q}\vec{x}_i} \end{cases}$$

第2量子化法を用いると、電子と不純物原子との相互作用は以下のように書ける。

$$H' = \sum_s \int_V \psi_s^\dagger(\vec{x}) U[\vec{x}] \psi_s(\vec{x}) dv = \frac{1}{V} \sum_{kq\sigma} U(\vec{q}) C_{k+q,\sigma}^\dagger C_{k\sigma} \quad (2.65)$$

上式からわかるように、波数  $\vec{k}$  の電子は、不純物から波数  $\vec{q}$  をもらい、 $\vec{k} + \vec{q}$  の状態に散乱される。

1体グリーン関数に対する表式(ただし  $u' = 0$  とおく)は、以下である<sup>5)</sup>。

$$G_r[u] = -\langle \hat{T} U(\beta) C_r^I(u) C_r^{I\dagger} \rangle_{0L} \quad (2.66)$$

ここで、 $\langle \dots \rangle_{0L}$  は、つながったダイアグラムのみのコントラクションをとることを意味する。上式を摂動展開すると0次の項は、 $G_{0,r}[u]$  である。そして不純物濃度が十分小さいとする。不純物の分布に関する平均を取ると1次の項は  $v(0) = 0$  と一般性を失うことなくおけるので、0となる。次に2次の摂動項を考える。

$$-\frac{1}{2V^2} \int_0^\beta \sum \langle \hat{T} C_{p+q}^\dagger(u_1) c_p(u_1) C_{t+s}^\dagger(u_2) C_t(u_2) C_k(u) C_k^\dagger \rangle_{0L} U(\vec{q}) U(\vec{s}) du_1 du_2 \quad (2.67)$$

そして、以下がなりたつ。

$$\langle U(\vec{q}) U(\vec{s}) \rangle_{AV} = v^2(\vec{q}) \delta(\vec{q} + \vec{s}, 0) N_i \quad (2.68)$$

ただし  $\langle \dots \rangle_{AV}$  は、分布に関する平均である。これから、以下が求まる<sup>5)</sup>。

$$\Sigma_k(i\omega_l) = \frac{n_i}{V} \sum_{pq} \frac{v^2(\vec{q}^2)}{i\omega_l - \varepsilon_p} \delta(\vec{k}, \vec{p} + \vec{q}) \quad (2.69)$$

この項は、Fig. 2.3 であらわされる。点線は不純物ポテンシャルを表すが、それはエネルギーをもたない。

次の章から超伝導の不純物効果の理論に入る。

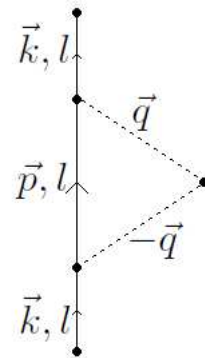


Fig. 2.3:

## 第3章 超伝導の理論

### 3.1 超伝導の理論

以下では、 $\vec{k}$  を単純に  $k$  と書くが、 $k$  は3次元ベクトルのままである。

#### 3.1.1 超伝導の理論

BCS 理論においてフォノンによる有効引力のみを取り出す近似をしてフェルミ面上のスピン↑の電子と、↓の電子がクーパーペアを作る (=シングレットのペア) という事から導かれる BCS 還元ハミルトニアンは以下の式であらわされる。

$$\mathcal{H}_{BCS} = \sum_{k\sigma} \xi_k C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma} + \sum_{k,k'} U_{k,k'} C_{k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow}^\dagger C_{-k'\downarrow} C_{k'\uparrow} \quad (3.1)$$

第1項は運動エネルギーをあらわし、第2項が電子間の相互作用を表している。 $C_{k\sigma}^\dagger$  は、第二量子化法で用いられる波数  $\vec{k}$ 、スピン  $\sigma$  の粒子の生成演算子である。 $\xi_k$  は、フェルミ面から計った運動エネルギー ( $= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$ ) で、 $U_{k,k'}$  は、波数  $\vec{k}$ 、 $\vec{k}'$  間に働く引力の大きさである。以下では、 $U_{k,k'} = -g$  とおく、つまり波数によらない引力とする (=s波の仮定)。ここで、第2項を平均場近似することを考える。そのために第2項を  $H'$  と置く。平均場近似とは、演算子を平均値とその差に置き換え、差の2乗を無視する近似である。計算の見通しを良くするために次の対演算子を定義する。

$$B_k^\dagger = C_{k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow}^\dagger, \quad B_k = C_{-k\downarrow} C_{k\uparrow} \quad (3.2)$$

すると、 $H'$  は、以下のように書ける。

$$H' = \sum_{k,k'} g B_k^\dagger B_{k'} \quad (3.3)$$

そして、対演算子に対して平均場近似をする。そのためにまず以下のように、演算子をその平均値と差にわけける。

$$\begin{cases} B_k^\dagger = \langle B_k \rangle^* + \delta B_k^\dagger \\ B_k = \langle B_k \rangle + \delta B_k \end{cases}$$

(3.3) に (3.4) を代入し差  $\delta \dots$  の2乗となる項を無視する。

$$H' \approx - \sum_{k'} \left( - \sum_k g \langle B_k \rangle^* \right) B_{k'} - \sum_k \left( - \sum_{k'} g \langle B_{k'} \rangle \right) B_k^\dagger + \text{const.} \quad (3.4)$$

ハミルトニアンに含まれる定数は  $\mu$  のシフトになるのみであり意味がないので、まとめて const. と置いた。そして、以下のような  $\Delta^*$  と  $\Delta$  を定義しておく。これは、(超伝導) ギャップと呼ばれる。

$$\begin{cases} \Delta^* = - \sum_k g \langle B_k \rangle^* = - \sum_k g \langle C_{k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow}^\dagger \rangle \\ \Delta = - \sum_k g \langle B_k \rangle = - \sum_k g \langle C_{-k\downarrow} C_{k\uparrow} \rangle \end{cases}$$

通常状態では、生成 (消滅) 演算子同士の積の平均値、たとえば  $\langle CC \rangle$  はゼロである。そしてこの  $\Delta$  がゼロでないときが超伝導状態である。つまり、 $\Delta$  がゼロでないとき超伝導状態である。

$$H'_{\text{meanfield}} = - \sum_k (\Delta^* C_{-k\downarrow} C_{k\uparrow} + \Delta C_{k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow}^\dagger) \quad (3.5)$$

以上から、平均場近似をした BCS ハミルトニアンは以下のようになる。

$$\mathcal{H}_{BCS MF} = \sum_{k\sigma} \xi_k C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma} - \sum_k (\Delta^* C_{-k\downarrow} C_{k\uparrow} + \Delta C_{k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow}^\dagger) \quad (3.6)$$

## 3.2 超伝導の不純物効果の理論

### 3.2.1 Nambu 表示の定義、ハミルトニアン

ここで、Nambu 表示の導入を行う。

引力相互作用がシングレットペアのみのときは、相互作用項は、以下のように書くことができる。

$$- \sum_{k,k'} g C_{k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow}^\dagger C_{-k'\downarrow} C_{k'\uparrow} = - \sum_{k,k'} g \frac{1}{4} (C_{k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow}^\dagger - C_{-k\downarrow}^\dagger C_{k\uparrow}^\dagger) (C_{-k'\downarrow} C_{k'\uparrow} - C_{-k'\uparrow} C_{k'\downarrow}) \quad (3.7)$$

Nambu 表示では、スピン、波数をすべて独立に和を取るなのでギャップの定義は、和を  $k_z > 0$ 、つまり半分の空間に取るほうが簡単である。これを  $\sum_{k>0}$  と書くことにする。しかしそのままでは総数が半分になってしまうので代わりに 2 倍しておく。

$$\Delta^* = +2g \sum_{k>0} \langle C_{k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow}^\dagger \rangle = -2g \sum_{k>0} \langle C_{k\downarrow}^\dagger C_{-k\uparrow}^\dagger \rangle \quad (3.8)$$

そして、上と同様に、平均場近似を施す。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & \sum_{k>0} \xi_k (C_{k\uparrow}^\dagger C_{k\uparrow} + C_{k\downarrow}^\dagger C_{k\downarrow} - C_{-k\uparrow} C_{-k\uparrow}^\dagger - C_{-k\downarrow} C_{-k\downarrow}^\dagger) \\ & - \sum_{k>0} [\Delta (C_{k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow}^\dagger - C_{k\downarrow}^\dagger C_{k\uparrow}^\dagger) + \Delta^* (C_{-k\downarrow} C_{k\uparrow} - C_{-k\uparrow} C_{k\downarrow})] \end{aligned} \quad (3.9)$$

Nambu 表示での生成消滅演算子はそれぞれ以下のようになる。

$$C_k^\dagger = \begin{pmatrix} C_{k\uparrow}^\dagger & C_{k\downarrow}^\dagger & C_{-k\uparrow} & C_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

$$C_k = \begin{pmatrix} C_{k\uparrow} \\ C_{k\downarrow} \\ C_{-k\uparrow}^\dagger \\ C_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

上記をもちいると、平均場近似したハミルトニアンは、以下になる。

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{k>0} C_k^\dagger \varepsilon_k^0 C_k \quad (3.12)$$



ただし、 $\varepsilon_k^0$  は、次の式で定義した。

$$\varepsilon_k^0 = \begin{pmatrix} \xi_k & 0 & 0 & -\Delta \\ 0 & \xi_k & +\Delta & 0 \\ 0 & +\Delta^* & -\xi_{-k} & 0 \\ -\Delta^* & 0 & 0 & -\xi_{-k} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

$\xi_k$  はフェルミ面から測った運動エネルギーで定義より、 $\xi_k = \xi_{-k}$  である。  
ここで、空間に作用する  $\rho$  演算子を定義する。

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

$$\rho_1 \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

すると、 $\varepsilon_k^0$  は、次式のように書ける。

$$\varepsilon_k^0 = \xi_k \rho_3 - i \Delta \rho_1 \sigma_2 \quad (3.16)$$

さらに  $\Delta = \Delta' + i \Delta''$  とおき、 $\Delta' = 0$  とする。

$$\varepsilon_k^0 = \xi_k \rho_3 + \Delta'' \rho_1 \sigma_2 \quad (3.17)$$

### 3.2.2 Nambu 表示のグリーン関数

Nambu 表示の消滅、生成演算子の定義から次のグリーン関数が定義できる。

$$\begin{aligned} G &= -\langle \hat{T} C[u] C^\dagger[0] \rangle \\ &= \begin{pmatrix} -\langle C_{k\uparrow} C_{k\uparrow}^\dagger \rangle & -\langle C_{k\uparrow} C_{k\downarrow}^\dagger \rangle & -\langle C_{k\uparrow} C_{-k\uparrow} \rangle & -\langle C_{k\uparrow} C_{-k\downarrow} \rangle \\ -\langle C_{k\downarrow} C_{k\uparrow}^\dagger \rangle & -\langle C_{k\downarrow} C_{k\downarrow}^\dagger \rangle & -\langle C_{k\downarrow} C_{-k\uparrow} \rangle & -\langle C_{k\downarrow} C_{-k\downarrow} \rangle \\ -\langle C_{-k\uparrow}^\dagger C_{k\uparrow}^\dagger \rangle & -\langle C_{-k\uparrow}^\dagger C_{k\downarrow}^\dagger \rangle & -\langle C_{-k\uparrow} C_{-k\uparrow} \rangle & -\langle C_{-k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow} \rangle \\ -\langle C_{-k\downarrow}^\dagger C_{k\uparrow}^\dagger \rangle & -\langle C_{-k\downarrow}^\dagger C_{k\downarrow}^\dagger \rangle & -\langle C_{-k\downarrow} C_{-k\uparrow} \rangle & -\langle C_{-k\downarrow}^\dagger C_{-k\downarrow} \rangle \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.18)$$

2 行目の変形は、Nambu 表示での消滅、生成演算子の定義を用いて行列の積をとった。Nambu 表示でのグリーン関数と  $\rho_1 \sigma_2$  の積をとると次式が得られる。

$$\begin{aligned} \rho_1 \sigma_2 G &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} G \\ &= \begin{pmatrix} +i \langle C_{-k\downarrow}^\dagger C_{k\uparrow}^\dagger \rangle & & & \\ & -i \langle C_{-k\uparrow}^\dagger C_{k\downarrow}^\dagger \rangle & & \\ & & +i \langle C_{k\downarrow} C_{-k\uparrow} \rangle & \\ & & & -i \langle C_{k\uparrow} C_{-k\downarrow} \rangle \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.19)$$

得た式のトレースを求めると次式のようになる。

$$\text{Tr}[\rho_1 \sigma_2 G] = i \left( \langle C_{-k\downarrow}^\dagger C_{k\uparrow}^\dagger \rangle - \langle C_{-k\uparrow}^\dagger C_{k\downarrow}^\dagger \rangle + \langle C_{k\downarrow} C_{-k\uparrow} \rangle - \langle C_{k\uparrow} C_{-k\downarrow} \rangle \right) \quad (3.20)$$

ギャップの定義を用いるため、上式の両辺で  $k$  について半分の空間で和をとり、 $2g$  を乗じ  $i$  で除すると以下が得られ、ギャップの定義を代入する。

$$\begin{aligned} \frac{2g}{i} \sum_{k>0} \text{Tr}[\rho_1 \sigma_2 G] &= 2g \sum_{k>0} \left( \langle C_{-k\downarrow}^\dagger C_{k\uparrow}^\dagger \rangle - \langle C_{-k\uparrow}^\dagger C_{k\downarrow}^\dagger \rangle + \langle C_{k\downarrow} C_{-k\uparrow} \rangle - \langle C_{k\uparrow} C_{-k\downarrow} \rangle \right) \\ &= -\Delta^* - \Delta^* + \Delta + \Delta \\ &= -2\Delta^* + 2\Delta \\ &= 2\Delta' + 2i\Delta'' - 2\Delta' + 2i\Delta'' \\ &= 4i\Delta'' \end{aligned} \quad (3.21)$$

ところで、温度グリーン関数  $G[u, u']$  は、以下のようにフーリエ展開できた。

$$G[u, u'] = \frac{1}{\beta} \sum_n G(i\omega_n) e^{-i\omega_n(u-u')} \quad (3.22)$$

この温度グリーン関数  $G[u, u']$  のフーリエ展開を代入し  $\Delta''$  を  $\Delta$  と置くと、以下の式が得られる。ただしこれより以下では、簡便のためにボルツマン定数  $k_B$  を 1 と置くことにする (つまり  $\beta^{-1} = T$ )

$$\Delta = -\frac{g}{2} T \sum_n \sum_{k>0} \text{Tr}[\rho_1 \sigma_2 G(i\omega_n)] \quad (3.23)$$

### 3.2.3 グリーン関数の計算

Nambu 表示のグリーン関数の運動方程式も通常のグリーン関数と同様に、ハミルトニアンと演算子の交換関係で虚時間微分を考えて求める。平均場近似したハミルトニアンは、以下であった。

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{k>0} C_k^\dagger \varepsilon_k^0 C_k \quad (3.24)$$

なので、前と同じ様に計算すると、以下が得られる。

$$G_0(k, i\omega_n) = (i\omega_n - \varepsilon_k^0)^{-1} \quad (3.25)$$

$$= (i\omega_n - \xi_k \rho_3 - \Delta \rho_1 \sigma_2)^{-1} \quad (3.26)$$

ここで、 $i\omega_n$  の後ろには 4 行 4 列の単位行列  $E_4 = \text{diag}(1, 1, 1, 1)$ <sup>1</sup> がついているが、これを明記しないことにする。

$$G_0 = \frac{-i\omega_n - \xi_k - \Delta \rho_1 \sigma_2}{\omega_n^2 + \xi_k^2 + \Delta^2} \quad (3.27)$$

### 3.2.4 セルフコンシステントボルン近似

通常のボルン近似で不純物との相互作用を表すと以下になる。

$$\Sigma_k^{\text{BornApp}} = \sum_{k'} V(k, k') G_0(k', i\omega_n) V(k, k') \quad (3.28)$$

ファインマンダイアグラムで書くと Fig. 3.1 になる。

<sup>1</sup>diag( $a, b, c, d$ ) は対角行列を表す記号で、11 成分が  $a$ 、22 成分が  $b$ 、33 成分が  $c$ 、44 成分が  $d$ 、他の成分はゼロである。つまり diag(1, 1, 1, 1) 単位行列になる

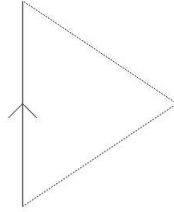


Fig. 3.1:

これは、摂動の2次に対応している。1次の摂動は、 $\mu$  のシフトになるだけなのであまり意味がない。次にセルフコンシステントボルン近似の説明を行う。

セルフコンシステントボルン近似 (Self-consistent Born Approximation) では、自由電子のグリーン関数  $G_0$  を、全体の相互作用を含んだグリーン関数  $G$  に置き換える。そしてそれを自己無撞着 (セルフコンシスト) に解く。この置き換えが意味するのは以下である。まず通常のボルン近似は、自由な電子が、不純物と相互作用 (運動量の受け渡し) を行う。この過程が2回行われるのが2次摂動であらわされるものである。セルフコンシステントボルン近似では、その”自由な電子線”を”相互作用を行った後の電子線”で置き換えることになる。これは、以下のダイアグラム (Fig. 3.2) で描かれているように、多数回の散乱過程を足し合わせた格好になっている。(簡単に言うと、等比級数の和と似たことをやっているのので、無限等比級数の和の公式を用いて積の形に直したのと似ている。) ただしこの無限和の中には、考慮されていない項 (=ファインマンダイアグラム) があるので近似である。

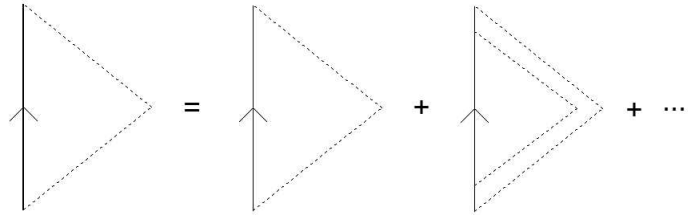


Fig. 3.2:

この図を式にまとめると以下であらわされる。

$$\Sigma_k^{SCBornApp} = \sum_{k'} V(k, k') G(k', i\omega_n) V(k, k') \quad (3.29)$$

以下では、 $\Sigma_k^{SCBornApp}$  を単純に  $\Sigma_k$  と書く事にする。不純物のポテンシャル  $V(k - k')$  を以下のように定義する。第1項は非磁性不純物の効果を表し、第2項は磁性不純物の効果を表す。

$$V(k, k') = v_1(k - k')\rho_3 + u_2(k - k')\vec{S} \cdot \vec{\alpha} \quad (3.30)$$

ただし、 $\vec{\alpha}$  は、以下で定義されているスピンの Nambu 表現である。

$$\vec{\alpha} = \frac{1 + \rho_3}{2} \vec{\sigma} + \frac{1 - \rho_3}{2} \sigma_2 \vec{\sigma} \sigma_2 \quad (3.31)$$

不純物のポテンシャル  $V(k - k')$  を以下のように書き換えておく。

$$\begin{aligned} V(k - k') &= v_1(k - k')\rho_3 + u_2(k - k')\vec{S} \cdot \vec{\alpha} \\ &= n_b V_b(k - k') + n_a V_a(k - k') \end{aligned} \quad (3.32)$$

2式目では、それぞれ、 $n_b V_b$ 、 $n_a V_a$  と置いた。 $n_b$ 、 $n_a$  は、それぞれ非磁性、磁性不純物の濃度であり、 $V_b$ 、 $V_a$  は、非磁性、磁性不純物の原子一個当たりのポテンシャルである。

### 3.2.5 相互作用をくり込んだ量

グリーン関数の摂動では、相互作用の効果を自己エネルギー  $\Sigma$  で表すことは述べた。ここでは、自己エネルギーを分割することを考える。

$$\Sigma = -i\Sigma_0 + \Sigma_2\rho_1\sigma_2 + \Sigma_4\rho_3 \quad (3.33)$$

そうすると、ダイソン方程式  $G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma$ (2.59) から、相互作用を含んだグリーン関数  $G(i\omega_n)$  は、以下のように書ける。

$$\begin{aligned} G^{-1} &= G_0^{-1} - \Sigma \\ &= (-i\omega_n - \xi_k\rho_3 - \Delta\rho_1\sigma_2) - (-i\Sigma_0 + \Sigma_2\rho_1\sigma_2 + \Sigma_4\rho_3) \\ &= i(\omega_n + \Sigma_0) - (\xi_k + \Sigma_4)\rho_3 - (\Delta + \Sigma_2)\rho_1\sigma_2 \end{aligned} \quad (3.34)$$

ここで、不純物との相互作用の効果をくり込んだ量として、以下を定義する。

$$\begin{cases} \omega_n + \Sigma_0 = \tilde{\omega}_n \\ \xi_k + \Sigma_4 = \tilde{\xi}_k \\ \Delta + \Sigma_2 = \tilde{\Delta} \end{cases}$$

(3.35) を用いて (3.34) を書き換えると、不純物との相互作用を含んだグリーン関数  $G^{-1}$  も、相互作用を含まないグリーン関数  $G_0^{-1}$ (3.26) と同じように次式のように書ける。

$$\begin{aligned} G &= \left( i\tilde{\omega}_n - \tilde{\xi}_k\rho_3 - \tilde{\Delta}\rho_1\sigma_2 \right)^{-1} \\ &= \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\xi}_k\rho_3 - \tilde{\Delta}\rho_1\sigma_2}{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}^2} \end{aligned} \quad (3.35)$$

### 3.2.6 $\Sigma$ の計算

不純物との相互作用を表す自己エネルギー  $\Sigma$  は、セルフコンシステントボルン近似で、以下のようにかけた。

$$\Sigma_k = \sum_{k'} V(k, k') G(k', i\tilde{\omega}_n) V(k, k') \quad (3.36)$$

まず、 $V$  を以前定義したように非磁性不純物  $V_b$ 、磁性不純物  $V_a$  に分ける。そして不純物のポテンシャルが、波数によらないので、 $k'$  を  $k$  と置きなおす。自己エネルギー  $\Sigma_k$  も波数  $k$  によらなくなるので、添え字  $k$  を省く。

$$\Sigma = \sum_k (n_b V_b + n_a V_a) G(k, i\tilde{\omega}_n) (n_b V_b + n_a V_a) \quad (3.37)$$

不純物濃度が十分低いとき、 $n_b n_a V_b V_a$  のようなクロスタームは系全体で平均するとゼロとしてよい。(似たような議論が<sup>5)</sup>の14章に書いてある。)したがって、非磁性不純物によるポテンシャルと磁性不純物によるポテンシャルは、分離できて以下のように書ける。

$$\Sigma = n_b \sum_k V_b G V_b + n_a \sum_k V_a G V_a \quad (3.38)$$

この(3.38)に、 $G(i\tilde{\omega}_n)$ (3.35)、 $n_b V_b$ 、 $n_a V_a$ (3.32)を代入すると以下が得られる。

$$\Sigma = n_b \sum_k v_1 \rho_3 \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\xi}_k \rho_3 - \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}^2} v_1 \rho_3 + n_a \sum_k u_2 \vec{S} \cdot \vec{\alpha} \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\xi}_k \rho_3 - \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}^2} u_2 \vec{S} \cdot \vec{\alpha} \quad (3.39)$$

いま得た(3.39)の第1項(非磁性項:non-magnetic term)、第2項(磁性項:magnetic term)を次節とその次の節で、それぞれ計算する。

### 3.2.7 非磁性不純物散乱による自己エネルギー

不純物による自己エネルギー $\Sigma$ の第1項を計算する。 $k$ についての和があるが、これを状態密度 $N(\xi)$ を用いて積分になおす。すなわち、下記の置き換えを行う。

$$\sum_k \rightarrow \int d\xi \frac{d\Omega}{4\pi} N(\xi) \quad (3.40)$$

ここで $\Omega$ は、立体角についての積分である。状態密度の積分への寄与は、フェルミ面上が一番効くとして $N(\xi)$ をフェルミ面上の状態密度 $N(0)$ に置き換える。また、自己エネルギー $\Sigma$ が波数 $k$ によらないとしているので積分に対して定数である。よって(3.35)より、 $d\xi = d\tilde{\xi}$ である。

ここで、空間へ作用する行列 $\rho$ が反交換関係を満たすことを確かめておく(計算は定義通りすれば良い)。

$$\rho_3 \rho_1 = -\rho_1 \rho_3 \quad (3.41)$$

さらに $\rho$ は、2乗すると4行4列の単位行列になる(e.g.  $(\rho_3)^2 = E_4$ )。今確かめた $\rho$ の反交換関係等を用いると、(3.39)の第1項は、以下のようになる。

$$\Sigma \text{ の第1項} = n_b N(0) \int d\xi \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\xi}_k \rho_3 + \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}^2} \quad (3.42)$$

今行った計算は、(3.39)の第1項の右端にあった $v_1 \rho_3$ 項を左端に移しただけである。 $\tilde{\Delta}$ の前の符号が変わったのに注意する必要がある。積分は $\xi$ と $\Omega$ であるが、まず立体角 $\Omega$ について積分を行う。

$$\text{立体角の積分} = \int v_1^2 d\Omega = \langle v_1^2 \rangle \quad (3.43)$$

ここで、右辺の $\langle \dots \rangle$ は $\dots$ の角度平均の意味である。つぎに $\xi$ の積分を行うために、複素積分を行う(付録参照)。

複素積分の結果(A.2)で $a \Rightarrow \tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2$ と置き換え、立体角での積分の結果を総合すると以下が得られる。

$$\Sigma \text{ の第1項} = N(0) n_b \langle v_1^2 \rangle \frac{-i\tilde{\omega}_n + \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}} \frac{\pi}{4} \quad (3.44)$$

ここで、非磁性不純物を表すパラメータ $\frac{1}{\tau}$ を導入する。それは、以下のように定義される。

$$\frac{1}{\tau} \equiv n_b \frac{N(0)}{2} \langle v_1^2 \rangle \quad (3.45)$$

すると、非磁性項の自己エネルギーは、以下ようになる。

$$\Sigma \text{ の第 1 項} = \frac{1}{2\tau} \frac{-i\tilde{\omega}_n + \tilde{\Delta}\rho_1\sigma_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}} \quad (3.46)$$

次に、磁性不純物散乱による自己エネルギーの計算に移る。

### 3.2.8 磁性不純物散乱による自己エネルギー

(3.39) の第 2 項は、以下であった。

$$\Sigma \text{ の第 2 項} = n_a \sum_k u_2 \vec{S} \cdot \vec{\alpha} \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\xi}_k \rho_3 - \tilde{\Delta}\rho_1\sigma_2}{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}^2} u_2 \vec{S} \cdot \vec{\alpha} \quad (3.47)$$

非磁性項と同じように、 $k$  の和をフェルミ面上の状態密度を用いて積分に置き換える。

$$\sum_k \rightarrow N(0) \int d\xi \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (3.48)$$

つまり、自己エネルギー  $\Sigma$  の第 2 項は、以下のように書ける。

$$\Sigma \text{ の第 2 項} = n_a N(0) \sum_{ij} \int d\xi \frac{d\Omega}{4\pi} u_2^2 S_i \alpha_i \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\xi}_k \rho_3 - \tilde{\Delta}\rho_1\sigma_2}{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}^2} S_j \alpha_j \quad (3.49)$$

ただし  $ij$  はそれぞれ 1,2,3 をとる。ここからは、非磁性項と同じように  $G$  の両側にある不純物の因子を片側に寄せることを考える。その為にまず、スピンについての平均値を以下のように近似する。

$$\langle S_i S_j \rangle = \delta_{ij} S_z^2 \quad (3.50)$$

以上のように置くことによって、もとの  $ij$  についての和が  $i$  だけの和になる。次に  $\sum_i \alpha_i \alpha_i$  について計算する。そのためにまず  $\alpha_i \alpha_i$  を計算する。

$$\begin{aligned} \alpha_i \alpha_i &= \left[ \frac{1 + \rho_3}{2} \sigma_i + \frac{1 - \rho_3}{2} \sigma_i \right]^2 \\ &= \frac{1}{4} (1 + \rho_3)^2 \sigma_i^2 + \frac{1}{4} (1 - \rho_3)^2 \sigma_2 \sigma_i \sigma_2 \sigma_2 \sigma_i \sigma_2 + \frac{1}{4} (1 + \rho_3)(1 - \rho_3) \sigma_i \sigma_2 \sigma_i \sigma_2 + \frac{1}{4} \sigma_2 \sigma_i \sigma_2 \sigma_i \quad (3.51) \end{aligned}$$

以下が成り立つ事に注意する。

$$\begin{cases} \frac{1}{4} (1 + \rho_3)^2 = \frac{1 + \rho_3}{2} \\ \frac{1}{4} (1 - \rho_3)^2 = \frac{1 - \rho_3}{2} \\ (1 + \rho_3)(1 - \rho_3) = 0 \\ (1 - \rho_3)(1 + \rho_3) = 0 \\ \sum_i \sigma_2 \sigma_i \sigma_2 \sigma_2 \sigma_i \sigma_2 = 3 \\ \sigma_i^2 = 1 \end{cases}$$

上を用いて計算すると、以下が得られる。

$$\sum_i \alpha_i \alpha_i = 3 \left[ \frac{1 + \rho_3}{2} + \frac{1 - \rho_3}{2} \right] = 3 \quad (3.52)$$

次に、 $\sum_i \alpha_i \rho_3 \alpha_i$  について計算する。 $\alpha$  と  $\rho_3$  は  $\alpha$  の定義より可換なので以下のように計算できる。

$$\sum_i \alpha_i \rho_3 \alpha_i = \sum_i \alpha_i \alpha_i \rho_3 = 3\rho_3 \quad (3.53)$$

つぎに  $\sum_i \alpha_i \rho_1 \sigma_2 \alpha_i$  を計算する。ここで、 $\sigma$  は  $\rho$  と作用する空間が違うので可換であることに留意すると次の式が得られる。

$$\sum_i \alpha_i \rho_1 \sigma_2 \alpha_i = \left[ \frac{1+\rho_3}{2} \sigma_i + \frac{1-\rho_3}{2} \sigma_i \right] \rho_1 \sigma_2 \left[ \frac{1+\rho_3}{2} \sigma_i + \frac{1-\rho_3}{2} \sigma_i \right] \quad (3.54)$$

ここでは、以下に注意する。

$$\begin{cases} (1+\rho_3)\rho_1(1+\rho_3) = (1+\rho_3)(1-\rho_3)\rho_1 = 0 \\ (1-\rho_3)\rho_1(1-\rho_3) = 0 \end{cases}$$

上の2式は、両方とも  $\rho$  の反交換関係  $\rho_1 \rho_3 = -\rho_3 \rho_1$  から得られる。すると、以下のようになる。

$$\sum_i \alpha_i \rho_1 \sigma_2 \alpha_i = \sum_i \left[ \frac{1}{4} (1+\rho_3) \sigma_i \rho_1 \sigma_2 (1-\rho_3) \sigma_i \sigma_2 + \frac{1}{4} (1-\rho_3) \sigma_i \sigma_2 \rho_1 \sigma_2 (1+\rho_3) \sigma_i \right] \quad (3.55)$$

$\sigma$  と  $\rho$  が可換である事、 $\sigma_i^2 = 1$  を用いると次の結果が得られる。

$$\begin{aligned} \sum_i \alpha_i \rho_1 \sigma_2 \alpha_i &= \frac{1}{4} \sum_i [(1+\rho_3)(1+\rho_3)\rho_1 \sigma_2 + (1-\rho_3)(1-\rho_3)\rho_1 \sigma_2] \\ &= \frac{1}{4} \sum_i [(1+1+2\rho_3+1+1-2\rho_3) \rho_1 \sigma_2] \\ &= \sum_i \rho_1 \sigma_2 = 3\rho_1 \sigma_2 \end{aligned} \quad (3.56)$$

この節の議論をまとめると以下が得られる。

$$\Sigma \text{ の第 2 項} = n_a N(0) \int d\xi \frac{d\Omega}{4\pi} u_2^2 S_z^2 \cdot 3 \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\xi}_k \rho_3 - \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}^2} \quad (3.57)$$

上の式のように書いておくと積分は、非磁性項と同じように計算できる。また、 $3S_z^2 = S^2$  である。そして非磁性項と同じように、磁性不純物を表すパラメータ  $\frac{1}{\tau_2}$  を導入する。それは、以下のように定義される。

$$\frac{1}{\tau_2} \equiv n_a \frac{N(0)}{2} \langle u_2^2 \rangle S^2 \quad (3.58)$$

このパラメータをもちいると、非磁性不純物からの自己エネルギーは次式で書ける。

$$\Sigma \text{ の第 2 項} = \frac{1}{\tau_2} \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}} \quad (3.59)$$

### 3.2.9 くりこまれた物理量の具体的な形

前々節、前節の最後の式 (3.46)(3.59) 不純物効果を表す自己エネルギー  $\Sigma$  は、次式である。

$$\Sigma = \frac{1}{2\tau} \frac{-i\tilde{\omega}_n + \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}} + \frac{1}{\tau_2} \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}} \quad (3.60)$$

いま求めた (3.60) と (3.35) の上の式 (3.26) をダイソン方程式 (2.59) に代入する。

$$i\tilde{\omega}_n - \tilde{\xi}_k \rho_3 - \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2 = i\omega_n - \xi_k \rho_3 - \Delta \rho_1 \sigma_2 - \frac{1}{2\tau} \frac{-i\tilde{\omega}_n + \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}} - \frac{1}{2\tau_2} \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}} \quad (3.61)$$

上式の両辺の行列 ( $\omega_n$  の後ろには単位行列が隠れている。) の係数を比較すると以下の関係が得られる。

$$\begin{cases} i\tilde{\omega}_n = i\omega_n + \left( \frac{1}{2\tau} + \frac{1}{2\tau_2} \right) \frac{+i\tilde{\omega}_n}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}} \\ -\tilde{\xi} = -\xi \\ -\tilde{\Delta} = -\Delta - \left( \frac{1}{2\tau} - \frac{1}{2\tau_2} \right) \frac{\tilde{\Delta}}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}} \end{cases}$$

次の節でいよいよギャップ方程式に入る。

### 3.2.10 ギャップ方程式

以前計算した (3.23) を再掲する。ただし、 $G$  の引数  $i\omega_n$  は、不純物が含まれているときを考えているので、 $i\tilde{\omega}_n$  としておく。

$$\Delta = -\frac{g}{2} T \sum_n \sum_{k>0} \text{Tr}[\rho_1 \sigma_2 G(i\tilde{\omega}_n)] \quad (3.62)$$

ここでも、 $k$  の和を積分に置き換えるため以下の置き換えを行う。ただし相互作用定数  $g$  が  $k$  によらず等方的なことから、和の範囲の違いに注意する。

$$\sum_{k>0} \rightarrow \frac{N(0)}{2} \int d\xi \quad (3.63)$$

ここで、前節で求めた  $G(i\tilde{\omega}_n)$  を  $\text{Tr}[\rho_1 \sigma_2 G(i\tilde{\omega}_n)]$  に代入してみる。

$$\text{Tr}[\rho_1 \sigma_2 G(i\tilde{\omega}_n)] = \text{Tr}[\rho_1 \sigma_2 \frac{-i\tilde{\omega}_n - \tilde{\xi}_k \rho_3 - \tilde{\Delta} \rho_1 \sigma_2}{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}^2}] \quad (3.64)$$

ここで、上の式に出てくる行列のトレースを求めておく。

$$\begin{cases} \text{Tr}(\rho_1 \sigma_2 E_4) = 0 & (i\tilde{\omega}_n \text{ の係数}) \\ \text{Tr}(\rho_1 \sigma_2 \rho_3) = 0 & (\tilde{\xi}_k \text{ の係数}) \\ \text{Tr}(\rho_1 \sigma_2 \rho_1 \sigma_2) = \text{Tr}(E_4) = 4 & (\tilde{\Delta} \text{ の係数}) \end{cases}$$

これを (3.64) に代入する。

$$\text{Tr}[\rho_1 \sigma_2 G(i\tilde{\omega}_n)] = \frac{-4\tilde{\Delta}}{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}^2} \quad (3.65)$$

このトレースの計算を用いるとギャップ方程式は次式になる。

$$\Delta = -\frac{g}{2} T \sum_n \frac{N(0)}{2} \int d\xi \frac{-4\tilde{\Delta}}{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\xi}_k^2 + \tilde{\Delta}^2} \quad (3.66)$$

上記の式に出てくる積分は前述した非磁性の自己エネルギーの計算に出てきた留数を用いた積分と同様にすれば良い。積分を実行すると以下が得られる。

$$\Delta = gN(0)T \sum_n \frac{\pi \tilde{\Delta}}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}} \quad (3.67)$$

得られた式をまずは、簡単な場合から解いていく。



不純物なしのギャップ方程式と  $T_c$

もし不純物がなければ、 $\tilde{\omega}_n = \omega_n$ 、 $\tilde{\Delta} = \Delta$  なのでギャップ方程式 (3.67) は以下の様になる。

$$\Delta = gN(0)T \sum_n \frac{\pi\Delta}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \quad (3.68)$$

両辺から  $\Delta$  を除する事ができる。

$$1 = gN(0)T \sum_n \frac{\pi}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \quad (3.69)$$

不純物がない時の超伝導転移温度を  $T_{c0}$  とすると、 $T = T_c$  では  $\Delta = 0$  である。つまり次式の様になる。

$$1 = gN(0)T_{c0} \sum_n \frac{\pi}{\sqrt{\omega_n^2}} \quad (3.70)$$

2乗のルートは、絶対値と等価である。そして  $n$  での和を取るために、和の範囲を  $n \geq 0$  に限って2倍する。さらに和の上限にカットオフ  $n_{c0}$  をつける。ここでカットオフを導入する理由は、前述したギャップ方程式での  $\xi$  の積分範囲を  $-\infty \rightarrow \infty$  にした代わりである。

$$1 = gN(0)T_{c0} \sum_n \frac{\pi}{|\omega_n|} = gN(0)T_{c0} \sum_{n=0}^{n_{c0}} \frac{2\pi}{\omega_n} \quad (3.71)$$

この式のなかの  $\omega_n$  にフェルミ粒子の松原振動数の定義 (2.54) を代入する。

$$1 = gN(0) \sum_{n=0}^{n_{c0}} \frac{2\pi T_{c0}}{(2n+1)\pi T_{c0}} \quad (3.72)$$

分母分子に含まれる  $T_{c0}$ 、 $\pi$  は約分できる。さらに、分母分子を2で割ると次式が得られる。

$$1 = gN(0) \sum_{n=0}^{n_{c0}} \frac{1}{n + \frac{1}{2}} \quad (3.73)$$

出てきた和は、ディガンマ関数の漸化式になっている (付録参照)。

付録にあるディガンマ関数の差の式を用いて、(3.73) に代入すると以下が得られる。

$$1 = gN(0) \left[ \psi(n_{c0} + \frac{3}{2}) - \psi(\frac{1}{2}) \right] \quad (3.74)$$

$n_{c0}$  が十分大きいときには、以下の近似が成り立つ。

$$1 = gN(0) \left[ \psi(n_{c0}) - \psi(\frac{1}{2}) \right] \quad (3.75)$$

次節で不純物がある時の (3.67) を計算するがその前に  $T_{c0}$  を求めておく。

不純物を含まない時の転移温度  $T_{c0}$  の導出

まず、カットオフ周波数  $\omega_c$  を以下のように定義する。

$$n_{c0} \cong \frac{\omega_c}{2\pi T_{c0}} \quad (3.76)$$

(3.75) の両辺を  $gN(0)$  で割り、ディガンマ関数  $\psi$  を対数関数  $\log$  で近似する。

$$\frac{1}{gN(0)} \cong \log n_{c0} - \log \frac{1}{4e^\gamma} = \log 4e^\gamma n_{c0} \quad (3.77)$$

$$\therefore 4e^\gamma n_{c0} = e^{\frac{1}{gN(0)}} \Leftrightarrow n_{c0} = \frac{1}{4e^\gamma} e^{\frac{1}{gN(0)}} \quad (3.78)$$

(3.76) と (3.78) から  $n_{c0}$  を消去する。

$$\frac{\omega_c}{2\pi T_{c0}} = \frac{1}{4e^\gamma} e^{-\frac{1}{gN(0)}} \quad (3.79)$$

これを  $T_{c0}$  について解くと以下が得られる。

$$T_{c0} = \omega_c \frac{2e^\gamma}{\pi} e^{-\frac{1}{gN(0)}} \quad (3.80)$$

ここで、 $\frac{2e^\gamma}{\pi} = 1.13 \dots$  であり、また相互作用がフォノンに由来する時カットオフを  $\omega_c = \omega_D$  (デ바이振動数) とすると有名な転移温度に関する式が得られる。

$$T_{c0} = 1.13\omega_D e^{-\frac{1}{gN(0)}} \quad (3.81)$$

次節では、不純物を含むときのギャップ方程式を解く。

### 3.2.11 不純物がある時のギャップ方程式の計算

ギャップ方程式 (3.67) は、次式だった。

$$\Delta = gN(0)T \sum_n \frac{\pi \tilde{\Delta}}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}}$$

前節では、不純物がない時の計算をした。今回は、不純物が入っている所以下の条件がある。

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau} \neq 0 \\ \frac{1}{\tau_2} \neq 0 \end{cases}$$

そして  $T = T_c$  の時を考える。このとき以下を仮定する。

$$\begin{cases} \Delta \ll \omega_n \\ \tilde{\Delta} \ll \tilde{\omega}_n \end{cases}$$

このとき、ギャップ方程式 (3.67) は、以下のように書ける。

$$\Delta = gN(0)T_c \sum_n \frac{\pi \tilde{\Delta}}{|\tilde{\omega}_n|} \quad (3.82)$$

くりこまれた量については (3.62) から以下が得られる。

$$\begin{cases} \tilde{\omega}_n = \omega + \left( \frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau_2} \right) \frac{\tilde{\omega}_n}{|\tilde{\omega}_n|} \\ \tilde{\Delta} = \Delta + \left( \frac{1}{\tau} - \frac{1}{\tau_2} \right) \frac{\tilde{\Delta}}{|\tilde{\omega}_n|} \end{cases}$$

ここからギャップ方程式 (3.82) に含まれる  $\frac{\tilde{\Delta}}{|\tilde{\omega}_n|}$  を求める。

$$\begin{aligned}\frac{\tilde{\Delta}}{|\tilde{\omega}_n|} &= \frac{\Delta}{|\tilde{\omega}_n| \left( \frac{1}{\tau} - \frac{1}{\tau_2} \right) \frac{1}{|\tilde{\omega}_n|}} \\ &= \frac{\Delta}{|\tilde{\omega}_n| - \left( \frac{1}{\tau} - \frac{1}{\tau_2} \right)}\end{aligned}\quad (3.83)$$

この式の分母の絶対値を外すために場合分け行う。

$$= \begin{cases} \frac{\Delta}{\omega_n + \frac{1}{\tau} - \frac{1}{\tau_2} - \left( \frac{1}{\tau} - \frac{1}{\tau_2} \right)} = \frac{\Delta}{\omega_n + \frac{1}{\tau_2}}, & (n \geq 0) \\ \frac{\Delta}{|\omega_n - \left( \frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau_2} \right)| - \left( \frac{1}{\tau} - \frac{1}{\tau_2} \right)} = \frac{\Delta}{-\omega_n + \frac{1}{\tau_2}}, & (n < 0) \end{cases}$$

ここで  $\tau^{-1}$ 、 $\tau_2^{-1}$  は、十分小さいとした。以上をまとめると、次式になる。

$$\frac{\tilde{\Delta}}{|\tilde{\omega}_n|} = \frac{\Delta}{|\omega_n| + \frac{1}{\tau_2}}\quad (3.84)$$

### 3.2.12 $\tau_2$ と $T_c, T_{c0}$

前節で得た式をギャップ方程式 (3.82) に代入する。また、ここでのカットオフは、 $n_c$  とする。

$$\Delta = gN(0) \sum_{n=0}^{n_c} \frac{2\pi T_c \Delta}{\omega + \frac{1}{\tau_2}}\quad (3.85)$$

不純物なしの場合と同様に両辺を  $\Delta$  で除し、フェルミ粒子の松原振動数 (2.54) を代入し、 $2\pi T_c$  で約分する。

$$1 = gN(0) \sum_{n=0}^{n_c} \frac{2\pi T_c}{(2n+1)\pi T_c + \frac{1}{\tau_2}} = gN(0) \sum_{n=0}^{n_c} \frac{1}{n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi T_c \tau_2}}\quad (3.86)$$

最後の式は、ディガンマ関数で書き換えることができる。

$$1 = gN(0) \left[ \psi\left(n_c + \frac{3}{2} + \frac{1}{2\pi T_c \tau_2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi T_c \tau_2}\right) \right]\quad (3.87)$$

この式は、 $n_c$  が十分大きいときには、以下のように第1項を  $\psi(n_c)$  で置き換えることができる。

$$\approx gN(0) \left[ \psi(n_c) - \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi T_c \tau_2}\right) \right]\quad (3.88)$$

今得た (3.88) と不純物が無いときの (3.75) を組み合わせると以下なりたつ。

$$\psi(n_{c0}) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) = \psi(n_c) - \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi T_c}\right)\quad (3.89)$$

松葉振動数の定義より、以下が成り立つ。ただし、 $\omega_c$  は、相互作用に関するカットオフである。

$$n_c \cong \frac{\omega_c}{2\pi T_c}\quad (3.90)$$

(3.76)、(3.90) と (B.7) より、以下が導かれる。

$$\log \frac{\omega_c}{2\pi T_{c0}} - \psi\left(\frac{1}{2}\right) = \log \frac{\omega_c}{2\pi T_c} - \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi T_c \tau_2}\right)\quad (3.91)$$

ここで、 $\alpha = \tau_2^{-1}$  と置き、対数法則をもちいると、 $T_c$ 、 $T_{C0}$  そして磁性不純物のパラメータ  $\alpha$  を結ぶ次式を得る。

$$\log \frac{T_c}{T_{c0}} = \psi\left(\frac{1}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2\pi T_c}\right) \quad (3.92)$$

今得た (3.92) の解  $\alpha$  を解析的に求めることはできない。なのでまず、 $T_c \rightarrow 0$  の解となる  $\alpha$  を求める。これは、 $\alpha = \tau_2^{-1}$  と、(3.58) から、超伝導が消失する磁性不純物の濃度に対応していることがわかる。 $T_c \rightarrow 0$  では、 $(T_c)^{-1}$  は、十分大きく 2 項目の  $\psi$  の中の  $\frac{1}{2}$  は無視できる。よって次を得る。また、(B.8) も用いて  $\psi(\frac{1}{2})$  の値を代入しておく。

$$\log \frac{T_c}{T_{c0}} = \log \frac{1}{4e^\gamma} + \log \frac{2\pi T_c}{\alpha} \quad (3.93)$$

対数関数の引数を比べると以下を得る。

$$\frac{T_c}{T_{c0}} = \frac{2\pi T_c}{4e^\gamma \alpha} \quad (3.94)$$

両辺から  $T_c$  を除し、 $\alpha/T_{c0}$  について解くと解がえられる。

$$\frac{\alpha}{T_{c0}} = \frac{\pi}{2e^\gamma} = 0.88193 \quad (3.95)$$

上以外の解は、fortran を用いてプログラムし、数値的に求めた。

### 3.2.13 fortran での計算

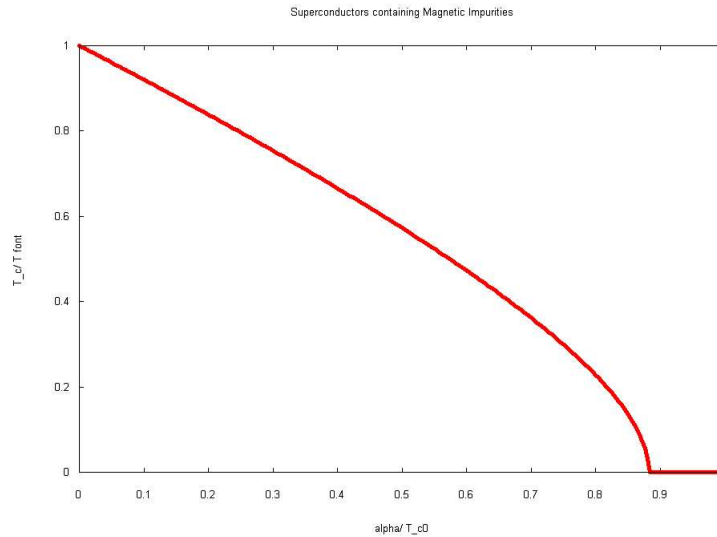


Fig. 3.3:

(3.92) を解くために、付録につけたプログラムを実行した。これは、(3.92) の解を 2 分法で求めている。

2 分法とは、 $y = f(x)$  の解を  $y = 0$  となる  $x$  を 1 つ含む  $(x_0, x_1)$  の範囲 ( $f(x_0)f(x_1) = -1$ ) で解を求める方法である。まず  $x_2 = (x_0 + x_1)/2$  を求め、もし  $f(x_2) \leq 0$  なら  $x_0 = x_2$ 、もし  $f(x_2) > 0$  なら  $x_1 = x_2$  として、十分回数くりかえして  $y = 0$  となる  $x$  を求める方法である。

すると、Fig. 3.3 のような解が得られた。解の精度は 2 分法の精度 ((初期の  $x_1 -$  初期の  $x_0$ )  $\times$  2-繰り返し回数)、変数の精度 (今回は倍精度  $\sim 16$  桁) より精度の低い  $10^{-8}$  である。これは、解の概形を得るには十分である。

### 3.2.14 通常のボルン近似での計算

以前にも記したが通常のボルン近似で不純物との相互作用を表すと以下になる。

$$\Sigma_0^{BornApp} = \sum_k V G_0(k', i\omega_n) V \quad (3.96)$$

ファインマンダイアグラムで書くと Fig. 3.4 の様になる。これは、セルフコンシステントボルン近

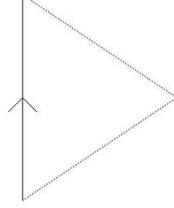


Fig. 3.4:

似のときと同様に計算すると以下が得られる。ただし自己エネルギーを  $\Sigma_0$  と書いた。

$$\Sigma_0 = \frac{1}{2\tau} \frac{-i\omega_n + \Delta\rho_1\sigma_2}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} + \frac{1}{2\tau_2} \frac{-i\omega_n - \Delta\rho_1\sigma_2}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \quad (3.97)$$

通常のボルン近似なので、 $\tilde{\omega}$  がついていない事に注意。セルフコンシステントボルン近似のときと同様にダイソン方程式  $G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma_0$  (2.59) との比較により以下を得る。

$$\begin{cases} i\tilde{\omega}_n = i\omega_n + \left(\frac{1}{2\tau} + \frac{1}{2\tau_2}\right) \frac{+i\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \\ \tilde{\Delta} = \Delta + \left(\frac{1}{2\tau} - \frac{1}{2\tau_2}\right) \frac{\Delta}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \end{cases}$$

これも、通常のボルン近似なので右辺に  $\tilde{\omega}$  がついていない事に注意。ギャップ方程式は、前に出てきたのと同じで以下である。

$$\Delta = gN(0)T \sum_n \frac{\pi\tilde{\Delta}}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \tilde{\Delta}^2}}$$

$T = T_c$  のときは、前と同じように以下を得る。

$$\Delta = gN(0)T_c \sum_n \frac{\pi\tilde{\Delta}}{|\tilde{\omega}_n|} \quad (3.98)$$

(3.98) からギャップ方程式に含まれる物理量を求めると以下ようになる。

$$\begin{cases} \tilde{\omega}_n = \omega_n + \left(\frac{1}{2\tau} + \frac{1}{2\tau_2}\right) \frac{\omega_n}{|\omega_n|} \\ \tilde{\Delta} = \Delta + \left(\frac{1}{2\tau} - \frac{1}{2\tau_2}\right) \frac{\Delta}{|\omega_n|} \end{cases}$$

これから、 $\tilde{\Delta}/|\tilde{\omega}_n|$  を求めると以下ようになる。

$$\frac{\tilde{\Delta}}{|\tilde{\omega}_n|} = \frac{\Delta \left(1 + \left(\frac{1}{2\tau} - \frac{1}{2\tau_2}\right) \frac{1}{|\omega_n|}\right)}{\left|\omega_n + \left(\frac{1}{2\tau} + \frac{1}{2\tau_2}\right) \frac{\omega_n}{|\omega_n|}\right|} \quad (3.99)$$

これは、 $\frac{1}{\tau_2} = 0$  の時、セルフコンシステントボルン近似に一致し正しい結果を与える。しかし、 $\frac{1}{\tau_2} \neq 0$  では一致しないことがわかる。

### 3.2.15 セルフコンシステント t-matrix 近似での計算

最後に、今回セルフコンシステントボルン近似のほかに行った計算であるセルフコンシステント t-matrix 近似での計算を乗せておく<sup>2)</sup>。シングレットのグリーン関数 (The singlet particle propagator) を  $G(\vec{k}, z)$  と置く。ここで、 $z$  は松原振動数である。ダイソン方程式は、(2.59) で以下のように与えられていた。ただし、変数は書き換えてある。

$$G^{-1}(\vec{k}, z) = G_0^{-1}(\vec{k}, z) - \Sigma(\vec{k}, z)$$

セルフコンシステントボルン近似のときと同様に、自己エネルギー  $\Sigma$  を以下のように分ける。

$$\Sigma = \Sigma_0 \sigma_0 + \Sigma_1 \sigma_1 + \Sigma_2 \sigma_2 \quad (3.100)$$

ここで、 $\sigma_0$  は、 $2 \times 2$  の単位行列、 $\sigma_i (i = 1, 2, 3)$  はパウリ行列である。不純物との相互作用の入っていない無摂動グリーン関数  $G_0^{-1}$  は以下である。

$$G_0^{-1} = z\sigma_0 - \xi_k \sigma_3 - \Delta_k \sigma_3$$

$\Delta_k$  には、まだ  $\vec{k}$  依存性 (波数によってギャップが変わる可能性) があることに注意。不純物効果を含んだグリーン関数に分けた自己エネルギー  $\Sigma$  を代入し、 $\sigma$  の係数でまとめる。すると、次式が得られる。

$$G^{-1} = (z - \Sigma_0)\sigma_0 - (\Delta_k + \Sigma_1)\sigma_1 - (\xi_k + \Sigma_3)\sigma_3 \quad (3.101)$$

以上より、前と同様にくりこんだ量を以下のように定義する。

$$\begin{cases} \tilde{z} = z - \Sigma_0 \\ \tilde{\Delta}_k = \Delta_k + \Sigma_1 \\ \tilde{\xi}_k \xi_k + \Sigma_3 \end{cases}$$

#### セルフコンシステント t-matrix 近似

1つのサイトのセルフコンシステント t-matrix 近似では、自己エネルギーは以下のように置かれる。

$$\Sigma(\tilde{z}) = c\mathbf{t}(\tilde{z}) \quad (3.102)$$

ただし  $c$  は、不純物の濃度である。そして  $\mathbf{t}(\tilde{z})$  は、次式で定義され“t 行列 (t-matrix)”と呼ばれるものである。

$$\mathbf{t}(\tilde{z}) = \mathbf{u} + \mathbf{U} \sum_k G(\vec{k}, \tilde{z}) \mathbf{t}(z) \quad (3.103)$$

$\mathbf{U}$  は、 $\mathbf{U} = U\sigma_3$  で定義されていて、 $U$  は、1つの電子と不純物との相互作用のポテンシャルを表す。ここで、上式右辺の  $\mathbf{t}(z)$  が  $\vec{k}$  によらないので、和の外に出すことができる。

$$\mathbf{t}(\tilde{z}) = \mathbf{u} + \mathbf{U} \mathbf{t}(z) \sum_k G(\vec{k}, \tilde{z}) \quad (3.104)$$

そして、 $\mathbf{t}(\tilde{z})$  を含む項を左辺に集め、 $\mathbf{t}(\tilde{z})$  について解くと以下が得られる。

$$\mathbf{t}(\tilde{z}) = \frac{\mathbf{U}}{1 - \mathbf{U} \sum_k G(\vec{k}, \tilde{z})} \quad (3.105)$$

<sup>28)</sup> に従って計算した

両辺に  $c$  をかけ、セルフコンシステント  $t$ -matrix 近似の自己エネルギーの定義 (3.102) を使い、和を状態密度を用いて積分に直すと以下が得られる。

$$\Sigma(\tilde{z}) = \frac{c\mathbf{U}}{1 - \mathbf{UN}(0) \int_{-\infty}^{\infty} G d\xi \frac{d\Omega}{4\pi}} \quad (3.106)$$

ここで、 $\Sigma_3$  が波数によらないとした。 $G$  は、 $G^{-1}$  を用いて計算すると以下の様になる。

$$G = -\frac{\tilde{z}\sigma_0 + \tilde{\Delta}_k\sigma_1 + \tilde{\xi}_k\sigma_2}{\tilde{\Delta}_k^2 - \tilde{z}^2 + \tilde{\xi}_k^2} \quad (3.107)$$

そして、 $G$  の  $\xi$  による積分は、付録の通りに計算すると以下の様になる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} G d\xi = -\frac{\tilde{z}\sigma_0 + \tilde{\Delta}_k\sigma_1}{\sqrt{\tilde{\Delta}_k^2 - \tilde{z}^2}} \pi \quad (3.108)$$

以上から自己エネルギー  $\Sigma$  は、以下の様になる。

$$\Sigma(\tilde{z}) = \frac{c\mathbf{U}}{1 + \mathbf{UN}(0) \int \frac{\tilde{z}\sigma_0 + \tilde{\Delta}_k\sigma_1}{\sqrt{\tilde{\Delta}_k^2 - \tilde{z}^2}} d\frac{\Omega}{4\pi} \pi} \quad (3.109)$$

ここで、ユニタリティー極限 ( $\mathbf{UN}(0) \gg 1$ ) をとる。これは、相互作用の強い極限に対応している。操作としては、上式の分母の 1 を無視する。すると、 $\mathbf{U}$  が分母分子で約分できる。そして  $\alpha = c/\pi N(0)$  と置く。これは、ペア破壊パラメータと呼ばれる。

$$\Sigma(\tilde{z}) = \alpha \left[ \int \left( \frac{\tilde{z}\sigma_0}{\sqrt{\tilde{\Delta}_k^2 - \tilde{z}^2}} + \frac{\tilde{\Delta}_k\sigma_1}{\sqrt{\tilde{\Delta}_k^2 - \tilde{z}^2}} \right) d\Omega \right]^{-1} \quad (3.110)$$

積分は立体角に関する積分のみ残っているが、これはフェルミ面での積分に対応している。ここで、 $\int \dots d\Omega = \langle \dots \rangle_{\text{FS}}$  という記号を導入しこれを用いて以下を定義する。

$$\begin{cases} g_0 = -\langle \frac{\tilde{z}}{\sqrt{\tilde{\Delta}_k^2 - \tilde{z}^2}} \rangle_{\text{FS}} \\ g_1 = \langle \frac{\tilde{\Delta}_k}{\sqrt{\tilde{\Delta}_k^2 - \tilde{z}^2}} \rangle_{\text{FS}} \end{cases}$$

すると  $\Sigma$  は、以下の様になる。

$$\Sigma(\tilde{z}) = \alpha (-g_0\sigma_0 - g_1\sigma_1)^{-1} \quad (3.111)$$

分母から行列を消去し、行列ごとにまとめると以下が得られる。

$$\Sigma(\tilde{z}) = -\alpha \frac{g_0}{g_0^2 - g_1^2} \sigma_0 + \alpha \frac{g_1}{g_0^2 - g_1^2} \sigma_1 \quad (3.112)$$

これが、(3.100) に等しいので、以下が得られる。

$$\begin{cases} \Sigma_0 = -\alpha \frac{g_0}{g_0^2 - g_1^2} \\ \Sigma_1 = \alpha \frac{g_1}{g_0^2 - g_1^2} \end{cases}$$

これを用いるとギャップ方程式に現れる  $\frac{\tilde{\Delta}_k}{\tilde{z}}$  が計算できる<sup>3</sup>。

$$\frac{\tilde{\Delta}_k}{\tilde{z}} = \frac{\Delta_k + \Sigma_1}{z - \Sigma_0}$$

<sup>3</sup>ここでは松原振動数の表記が  $z$  である。セルフコンシステントボルン近似のときの  $\frac{\tilde{\Delta}}{\tilde{\omega}_n}$  にあたる。

$$\begin{aligned} & \Delta_k + \alpha \frac{g_1}{g_0^2 - g_1^2} \\ &= \frac{\Delta_k + \alpha \frac{g_1}{g_0^2 - g_1^2}}{z + \alpha \frac{g_0}{g_0^2 - g_1^2}} \end{aligned} \quad (3.113)$$

ここで、考える超伝導体がs波だとする。つまり、ギャップ  $\Delta_k$  に波数依存性がなく  $\Delta_k = \Delta$  とできる場合を考える。すると、 $g_0$ 、 $g_1$  はそれぞれ、以下のように  $\langle \dots \rangle_{\text{FS}}$  がとれる。

$$\begin{cases} g_0 = -\frac{\tilde{z}}{\sqrt{\tilde{\Delta}_k^2 - \tilde{z}^2}} \\ g_1 = \frac{\tilde{\Delta}_k}{\sqrt{\tilde{\Delta}_k^2 - \tilde{z}^2}} \end{cases}$$

これを用いると  $g_0^2 - g_1^2 = -1$  であることも確かめられる。すると自己エネルギー  $\Sigma_0$ 、 $\Sigma_1$  はそれぞれ、 $\Sigma_0 = \alpha g_0$ 、 $\Sigma_1 = -\alpha g_1$  となる。そしてまず  $\tilde{z}$  を求めよう。

$$\begin{aligned} \tilde{z} &= z - \Sigma_0 \\ &= z - \alpha g_0 \\ &= z + \alpha \frac{z}{\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - \tilde{z}^2}} \end{aligned} \quad (3.114)$$

$$\therefore \tilde{z} = z \left( 1 - \frac{\alpha}{\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - \tilde{z}^2}} \right)^{-1} \quad (3.115)$$

同様に計算すると、 $\tilde{\Delta}$  についても以下が得られる。

$$\tilde{\Delta} = \Delta \left( 1 - \frac{\alpha}{\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - \tilde{z}^2}} \right)^{-1} \quad (3.116)$$

以上をまとめると以下が得られる。

$$\frac{\tilde{\Delta}}{\tilde{z}} = \frac{\Delta}{z} \quad (3.117)$$

よって、s波シングレットでは転移温度が変わらないことがわかる。

### 3.3 まとめ

超伝導体に磁性不純物が含まれると  $T_c$  が下がる。S波シングレット、非磁性不純物では  $T_c$  は変化しない。また、セルフコンシステントでない通常のボルン近似では、磁性不純物の効果が正しく取り扱えない。



## 第4章 謝辞

高橋先生

一年間を通して、金曜日に行っていたいただいた物性論のゼミでお世話になったのはもちろんですが、前期に行っていたいただいた科学英語、そして統計力学 I や量子力学 III など基礎分野の講義ノート等々非常にお世話になり感謝しきれません。院試の勉強のときに非常に役立ちました。忙しい中、面倒を見ていただき本当にありがとうございました。

長谷川先生

卒業研究を始めるのが 10 月からと遅くなってしまってお迷惑をおかけしました。それでも熱心にご指導いただき嬉しかったです。前期の量子力学のゼミも大変力が身に付きました。物理数学 I や統計力学 II、計算機プログラミングの授業で習ったことは、今になって大切さが身にしみています。本当にありがとうございました。

中野先生

2 年の後期から始まる物理数学 I 演習から長い間お世話になりました。あの授業のおかげで、今の自分があると思っています。数学の計算が苦手な僕にとっては、欠かすことができない経験だったと思います。今後勉強面でつらくなったらあの授業を思い出して頑張ります。ありがとうございました。

下川さん

勉強面では、TA のときからお世話になりました。4 回生になってからは、それに加え研究への姿勢や生活面、精神面で非常に勉強させていただきました。魚おいしかったです。一年間お世話になりました。

奥田さん

4 回生になって、先生がどういう方なのかわからない時に色々教えていただきありがとうございました。何か困ったときは、いつも相談に乗っていただき本当に助かりました。一年間お世話になりました。

神吉さん

いろいろ差し入れを入れていただきありがとうございました。神吉さんには、色々質問していただき、自分の中でもう一度考えるチャンスをいただきました。一年間お世話になりました。

グレ君

日本語があまり得意でないグレ君に説明するのは、とても勉強になりました。餃子おいしかったです。一年間お世話になりました。

森崎君

4 月のオリエンテーションの時に衣笠君を通じて連絡をくれてありがとう。本当に助かりました。あと、プログラムの話をするのも楽しかったし、新しいことを知れたのでよかったです。一年間お世話になりました。

## 参考文献

- [1] 勝本信吾, 河野公俊 「岩波講座 物理の世界 超伝導と超流動」 (岩波書店 2006 年).
- [2] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono: J. Am. Chem. Soc. 130 (2008) 3296.
- [3] 立花俊一, 成田清正 「エクササイズ線形代数」 (共立出版株式会社 1994 年).
- [4] 丹羽雅昭 「超伝導の基礎」 (東京電機大学出版局 2002 年).
- [5] 阿部龍蔵 「統計力学 (第 2 版)」 (東京大学出版会 1966 年).
- [6] 小野寺嘉孝 「物理のための応用数学」 (裳華房 1988 年).
- [7] P. Fulde K. Maki Phys. Rev. 141 (1966) 141.
- [8] T. Hotta J. Phys. Soc. Jpn. 62 (1996) 274.
- [9] 大友康寛 「LaTeX 組版ハンドブック」 (株式会社飛泳社 2005 年).
- [10] 奥村晴彦 「 $\text{\LaTeX}2\epsilon$  美文書作成入門」 (株式会社情報評論社 1997 年).

## 付録 A 複素積分

考えたい積分は、以下の形をしている。

$$I_R = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2 + a} dx, \quad a > 0, \in \mathbb{R}$$

計算の都合上、 $a$  は正の実数としておく。

そして、上記の積分を行うため、 $x \Rightarrow z$  と置き換え、経路を複素平面  $\mathbb{C}$  上に設定した次の複素積分を考える。

$$I_c = \oint_c \frac{1}{z^2 + a} dz, \quad z \in \mathbb{C} \quad (\text{A.1})$$

ただし積分経路  $c$  は、以下のようにとる。

$$c: \begin{cases} z = Re^{i\theta}, (R > 0, 0 < \theta < \pi) \\ z = x, (-R < x < R) \end{cases}$$

これは、Fig. A.1 の様に見える。

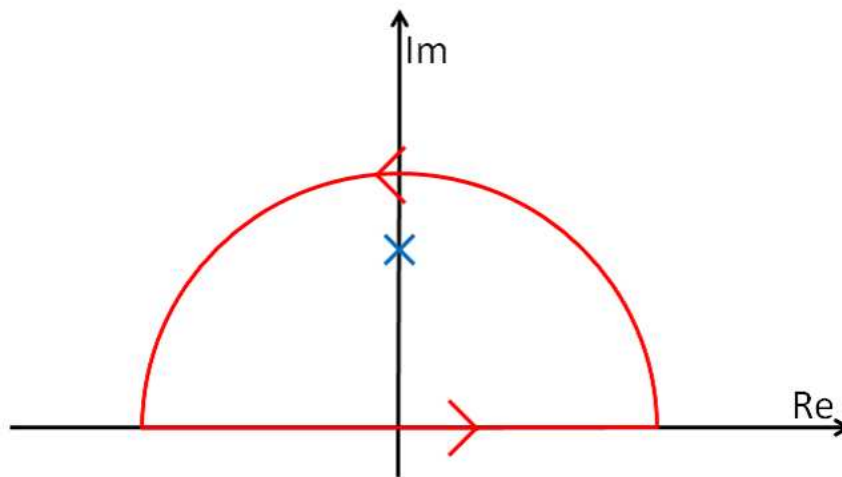


Fig. A.1:

複素積分 (A.1) の被積分関数の分母は因数分解できるので以下のように書ける。

$$I_c = \oint_c \frac{1}{(z - i\sqrt{a})(z + i\sqrt{a})} dz$$

この式を見ると、明らかに一意の極  $z = i\sqrt{a}, -i\sqrt{a}$  を持つ。経路  $c$  内の極  $z = i\sqrt{a}$  の留数を求めて留数定理によって積分を行う。

$$I_c = 2\pi i \left( \frac{1}{(z - i\sqrt{a})(z + i\sqrt{a})} (z - i\sqrt{a}) \right)_{z=i\sqrt{a}}$$

代入して計算すると、以下が得られる。

$$I_c = \frac{\pi}{\sqrt{a}}$$

一方、(A.1) で  $R \rightarrow +\infty$  をすると、被積分関数の分母が2次なので、 $\theta$  の積分となる半円周の経路では、積分  $\rightarrow 0$  である。すなわち  $R \rightarrow +\infty$  では実軸上の積分のみが残ることになり以下が得られる。

$$I_c \rightarrow I_R(R \rightarrow \infty)$$

まとめると以下が得られることになる。

$$I_R = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2 + a} dx = \frac{\pi}{\sqrt{a}}, \quad a > 0, \in \mathbb{R} \quad (\text{A.2})$$

## 付録B ディガンマ関数について

ディガンマ関数 (di-gamma function:  $\psi(x)$ ) は、ガンマ関数  $\Gamma(x)$  の対数微分で定義される<sup>1</sup>。

$$\psi(x) \equiv \frac{d}{dx} \log \Gamma(x) \quad (\text{B.1})$$

ガンマ関数は、以下の漸化式を満たす。

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \quad (\text{B.2})$$

両辺の対数をとって微分し、ディガンマ関数の定義を代入すると、以下のディガンマ関数の漸化式が得られる。

$$\psi(x+1) = \psi(x) + \frac{1}{x}$$

得た式を  $\frac{1}{x}$  について解いて  $x \Rightarrow n$  と置き換える。

$$\frac{1}{n} = \psi(n+1) - \psi(n) \quad (\text{B.3})$$

$n$  が  $n + \frac{1}{2}$  のとき、以下の式になる。

$$\frac{1}{n + \frac{1}{2}} = \psi(n + \frac{1}{2} + 1) - \psi(n + \frac{1}{2}) \quad (\text{B.4})$$

(B.4) の両辺の  $n$  を 1 ずつ減らしながら  $n = 1$  まで和を取る。また和の上限を  $n'$  とする。すると、ディガンマ関数の漸化式から 1 ずつずれた項の符号が違いためたし合わせると消えてしまい、次式が得られる。

$$\sum_{n=1}^{n'} \frac{1}{n + \frac{1}{2}} = \psi(n' + \frac{3}{2}) - \psi(\frac{1}{2}) \quad (\text{B.5})$$

もう 1 つ後で用いる式を導いておく。ガンマ関数は引数が十分大きいところでスターリングの公式が成り立つ。

$$\Gamma(x+1) \cong \sqrt{2\pi} x^{x+\frac{1}{2}} e^{-x} \quad (\text{B.6})$$

上式の対数をとって微分し、ディガンマ関数の定義を用いるとディガンマ関数に対して以下が成り立つことがわかる。

$$\psi(x) \cong \log x - \frac{1}{x} \quad (\text{B.7})$$

よって  $x \gg 0$  では  $\psi(x) \sim \log x$  である。以下の式は、導出はしないが必要になるので載せておく。この式は、ガンマ関数のワイエルシュトラスの無限乗積表示からえられる<sup>6)</sup>。

$$\psi(\frac{1}{2}) = \log \frac{1}{4e^\gamma} \quad (\text{B.8})$$

ただし、 $\gamma$  は、オイラーの定数<sup>2</sup>である。

<sup>1</sup>詳しくは、<sup>6)</sup> 参照

<sup>2</sup> $\gamma \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{n} - \log n \right)$ . これはグラフでイメージすると、調和級数と対数関数の面積の差に対応している。

## 付録C プログラム

```
!  
! 2009.12.15  
!  
! transition temperture vs magnetic impurity  
! self-consistent Born approximation  
!  
! s-wave, spin-singlet, single band  
!  
! digamma function : NUMPAC  
!  
program tcsuper  
  implicit none  
  real (8):: ddigam  
  real (8):: tc,alpha,tc0,tc1,pho !パラメータは、倍精度で計算  
  integer :: ialpha ,nalpha  
  integer ii,nn  
  real (8):: pi,y  
  integer itc,ntc  
  real (8)::alpha0,alpha1  
!  
pi=4.0d0*atan(1.0d0) !パイは、tan(pi/4)=1 からもとめる。  
nn=30  
tc1=1.0d0 !初期値設定  
tc0=0.0d0 !初期値設定  
nalpha=500  
tc=1.0d0  
do ialpha=0,nalpha  
  alpha=2.0d0*ialpha/nalpha  
  pho=alpha/(2*pi*tc)  
  tc1=1.0d0  
  tc0=0.0d0  
  do ii=1,nn  
    tc=(tc1+tc0)/2  
    pho=alpha/(2*pi*tc)  
    y=log(tc)-(ddigam(0.5d0)-ddigam(0.5d0+pho))  
    if (abs(y) < 1.0d0-8) exit  
    if (y < 0) then
```

```

        tc1=tc
    else
        tc0=tc
    end if
end do
write (10,'(3e20.12,i5)') alpha,tc,y,ii
end do
!
stop
end program tcsuper
!----プログラム本体はここまで。
!----これより以下は、ディガンマ関数のサブルーチンである。
!--NUMPAC digamma function
FUNCTION DDIGAM(X)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DATA PI / 0.314159265358979324D+01/
DATA G / 0.577215664901532861D+00/
DATA A00/ 0.335021639287404696D+04/
DATA A01/ 0.305508443905384280D+04/
DATA A02/ 0.937234803313992074D+03/
DATA A03/ 0.111463175019430427D+03/
DATA A04/ 0.418794425659280667D+01/
DATA A05/ 0.115274910471985540D-01/
DATA B00/ 0.519466495117315571D+04/
DATA B01/ 0.636453021019518201D+04/
DATA B02/ 0.278414576485347789D+04/
DATA B03/ 0.530128072307789296D+03/
DATA B04/ 0.419275654635318453D+02/
DATA C00/-0.833333333333333287D-01/
DATA C01/ 0.833333333333084302D-02/
DATA C02/-0.396825396079051197D-02/
DATA C03/ 0.416665847634144475D-02/
DATA C04/-0.757168514393299474D-02/
DATA C05/ 0.201535588643063273D-01/
IF(DINT(X).EQ.X.AND.X.LE.0.D0) GO TO 50
Z=X
IF(Z.LT.0.5D0) Z=1.D0-Z
IF(Z.GT.16.D0) GO TO 40
S=0.D0
GO TO 20
10 S=1.D0/Z+S
20 Z=Z-1.D0
IF(DABS(Z).GT.0.5D0) GO TO 10
DDIGAM=((((A05*Z+A04)*Z+A03)*Z+A02)*Z+A01)*Z+A00)/ &

```

```

&((((Z+B04)*Z+B03)*Z+B02)*Z+B01)*Z+B00)*Z+Z/(1.D0+Z)-G+S
30 IF(X.GE.0.5) RETURN
   IF(Z.GT.0.112590D16) GO TO 35
   DDIGAM=DCOTHP(Z+Z)*PI+DDIGAM
   RETURN
35 DDIGAM=0.
   CALL MGDD(6HDDIGAM,X,DDIGAM,19HARG LT -0.112590D16,5)
   RETURN
40 T=1.D0/(Z*Z)
   DDIGAM=((((C05*T+C04)*T+C03)*T+C02)*T+C01)*T+C00)*T &
&+DLOG(Z)-0.5D0/Z
   GO TO 30
50 DDIGAM=0.D0
   CALL MGDD('DDIGAM',X,DDIGAM,'ARG IS NONPOSITIVE INTEGER ',7)
   RETURN
END

```

!-----

```

SUBROUTINE FNERST(IABORT,MSGPRT,LIMERR)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (D)
COMPLEX CARG,CVAL
COMPLEX*16 BARG,BVAL
CHARACTER*6 NAME
CHARACTER*4 MSG(10)
DATA KABORT,IPRINT,LIMIT,NERR/1,1,10,0/
KABORT=IABORT
IPRINT=MSGPRT
LIMIT=LIMERR
RETURN
ENTRY      MGIR(NAME,IARG,VAL,MSG,MSGLEN)
ISW=1
GO TO 1
ENTRY      MGRR(NAME,ARG,VAL,MSG,MSGLEN)
ISW=2
GO TO 1
ENTRY      MGIRR(NAME,IARG,ARG,VAL,MSG,MSGLEN)
ISW=3
GO TO 1
ENTRY      MGRRR(NAME,ARG1,ARG2,VAL,MSG,MSGLEN)
ISW=4
GO TO 1
ENTRY      MGIRR(NAME,IARG1,IARG2,ARG,VAL,MSG,MSGLEN)
ISW=5
GO TO 1
ENTRY      MGID(NAME,IARG,DVAL,MSG,MSGLEN)

```



```
ISW=6
GO TO 1
ENTRY      MGDD(NAME,DARG,DVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=7
GO TO 1
ENTRY      MGIDD(NAME,IARG,DARG,DVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=8
GO TO 1
ENTRY      MGDDD(NAME,DARG1,DARG2,DVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=9
GO TO 1
ENTRY      MGIIDD(NAME,IARG1,IARG2,DARG,DVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=10
GO TO 1
ENTRY      MGCC(NAME,CARG,CVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=11
GO TO 1
ENTRY      MGBB(NAME,BARG,BVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=12
GO TO 1
ENTRY      MGIIR(NAME,IARG1,IARG2,VAL,MSG,MSGLEN)
ISW=15
GO TO 1
ENTRY      MGIID(NAME,IARG1,IARG2,DVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=16
GO TO 1
ENTRY      MGIRRR(NAME,IARG,ARG1,ARG2,VAL,MSG,MSGLEN)
ISW=21
GO TO 1
ENTRY      MGIDDD(NAME,IARG,DARG1,DARG2,DVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=22
GO TO 1
ENTRY      MGICC(NAME,IARG,CARG,CVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=24
GO TO 1
ENTRY      MGIBB(NAME,IARG,BARG,BVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=25
GO TO 1
ENTRY      MGRCC(NAME,ARG,CARG,CVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=26
GO TO 1
ENTRY      MGDBB(NAME,DARG,BARG,BVAL,MSG,MSGLEN)
ISW=27
GO TO 1
```

```

ENTRY      MGRRRR(NAME, ARG1, ARG2, ARG3, VAL, MSG, MSGLEN)
ISW=28
GO TO 1
ENTRY      MGDDDD(NAME, DARG1, DARG2, DARG3, DVAL, MSG, MSGLEN)
ISW=29
GO TO 1
1 CONTINUE
  IF(IPRINT.EQ.0) GO TO 90
  GO TO (51,52,53,54,55,56,57,58,59,60,61,62,99,99,65,66 &
&,99,99,99,99,71,72,99,74,75,76,77,78,79,99,99), ISW
99 STOP 'FNERST: PROGRAM ERROR GO TO 99 IS MADE.'
51 WRITE(6,601) NAME, IARG, VAL, (MSG(I), I=1, MSGLEN)
601 FORMAT(1H ,A6, ' ERROR ARG=', I5, ' VAL=', F4.1, 1X, 10A4)
GO TO 90
52 WRITE(6,602) NAME, ARG, VAL, (MSG(I), I=1, MSGLEN)
602 FORMAT(1H ,A6, ' ERROR ARG=', E14.7, ' VAL=', F4.1, 1X, 10A4)
GO TO 90
53 WRITE(6,603) NAME, IARG, ARG, VAL, (MSG(I), I=1, MSGLEN)
603 FORMAT(1H ,A6, ' ERROR ARG1=', I5, ' ARG2=', E14.7 &
&, ' VAL=', F4.1/8X, 10A4)
GO TO 90
54 WRITE(6,604) NAME, ARG1, ARG2, VAL, (MSG(I), I=1, MSGLEN)
604 FORMAT(1H ,A6, ' ERROR ARG1=', E14.7, ' ARG2=', E14.7 &
&, ' VAL=', F4.1/8X, 10A4)
GO TO 90
55 WRITE(6,605) NAME, IARG1, IARG2, ARG, VAL, (MSG(I), I=1, MSGLEN)
605 FORMAT(1H ,A6, ' ERROR ARG1=', I5, ' ARG2=', I5 &
&, ' ARG3=', E14.7, ' VAL=', F4.1/8X, 10A4)
GO TO 90
56 WRITE(6,606) NAME, IARG, DVAL, (MSG(I), I=1, MSGLEN)
606 FORMAT(1H ,A6, ' ERROR ARG=', I5, ' VAL=', F4.1, 1X, 10A4)
GO TO 90
57 WRITE(6,607) NAME, DARG, DVAL, (MSG(I), I=1, MSGLEN)
607 FORMAT(1H ,A6, ' ERROR ARG=', D14.7, ' VAL=', F4.1, 1X, 10A4)
GO TO 90
58 WRITE(6,608) NAME, IARG, DARG, DVAL, (MSG(I), I=1, MSGLEN)
608 FORMAT(1H ,A6, ' ERROR ARG1=', I5, ' ARG2=', D14.7 &
&, ' VAL=', F4.1/8X, 10A4)
GO TO 90
59 WRITE(6,609) NAME, DARG1, DARG2, DVAL, (MSG(I), I=1, MSGLEN)
609 FORMAT(1H ,A6, ' ERROR ARG1=', D14.7, ' ARG2=', D14.7 &
&, ' VAL=', F4.1/8X, 10A4)
GO TO 90
60 WRITE(6,610) NAME, IARG1, IARG2, DARG, DVAL, (MSG(I), I=1, MSGLEN)

```

```

610 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',I5,' ARG2=',I5 &
&,' ARG3=',D14.7,' VAL=',F4.1/8X,10A4)
GO TO 90
61 WRITE(6,611) NAME,CARG,CVAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
611 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG=(',E14.7,',',E14.7,') VAL=( ' &
&,F4.1,',',F4.1,') '/8X,10A4)
GO TO 90
62 WRITE(6,612) NAME,BARG,BVAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
612 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG=(',D14.7,',',D14.7,') VAL=( ' &
&,F4.1,',',F4.1,') '/8X,10A4)
GO TO 90
65 WRITE(6,615) NAME,IARG1,IARG2,VAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
615 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',I5,' ARG2=',I5,' VAL=',F4.1 &
&/8X,10A4)
GO TO 90
66 WRITE(6,616) NAME,IARG1,IARG2,DVAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
616 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',I5,' ARG2=',I5,' VAL=',F4.1 &
&/8X,10A4)
GO TO 90
71 WRITE(6,621) NAME,IARG,ARG1,ARG2,VAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
621 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',I5,' ARG2=',E14.7 &
&,' ARG3=',E14.7,' VAL=',F4.1/8X,10A4)
GO TO 90
72 WRITE(6,622) NAME,IARG,DARG1,DARG2,DVAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
622 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',I5,' ARG2=',D15.7 &
&,' ARG3=',D15.7,' VAL=',F4.1/8X,10A4)
GO TO 90
74 WRITE(6,624) NAME,IARG,CARG,CVAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
624 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',I5,' ARG2=(',E14.7,',',E14.7 &
&,') VAL=(',F4.1,',',F4.1,') '/8X,10A4)
GO TO 90
75 WRITE(6,625) NAME,IARG,BARG,BVAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
625 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',I5,' ARG2=(',D14.7,',',D14.7 &
&,') VAL=(',F4.1,',',F4.1,') '/8X,10A4)
GO TO 90
76 WRITE(6,626) NAME,ARG,CARG,CVAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
626 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',E14.7,' ARG2=(',E14.7,',',E14.7 &
&,') VAL=(',F4.1,',',F4.1,') '/8X,10A4)
GO TO 90
77 WRITE(6,627) NAME,DARG,BARG,BVAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
627 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',D14.7,' ARG2=(',D14.7,',',D14.7 &
&,') VAL=(',F4.1,',',F4.1,') ',/8X,10A4)
GO TO 90
78 WRITE(6,628) NAME,ARG1,ARG2,ARG3,VAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)

```

```

628 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',E14.7,' ARG2=',E14.7 &
&,' ARG3=',E14.7,' VAL=',F4.1/8X,10A4)
GO TO 90
79 WRITE(6,629) NAME,DARG1,DARG2,DARG3,DVAL,(MSG(I),I=1,MSGLEN)
629 FORMAT(1H ,A6,' ERROR ARG1=',D15.7,' ARG2=',D15.7 &
&,' ARG3=',D15.7,' VAL=',F4.1/8X,10A4)
GO TO 90
90 NERR=NERR+1
IF(NERR.LE.LIMIT) RETURN
WRITE(6,700) NERR,LIMIT
700 FORMAT(1H , 'NLIB FUNCTION ERROR COUNT',I6 &
&,' EXCEEDED THE LIMIT',I6)
IF(KABORT.EQ.0) RETURN
STOP
END
!C -----
FUNCTION DCOTQ(X)
!C QUADRANT COTANGENT FUNCTION DCOTQ(X)=DCOT(Q*X) Q=PI/2
!C WRITTEN BY I.NINOMIYA 1991.02.09
!C REVISED BY I.NINOMIYA 1991.08.03
!C -----
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
PARAMETER (XMAX=2.25D+15)
!C XMAX=2**51,BG=1.5*2**53
!C -----COEFFICIENTS OF RATIONAL APPROXIMATION-----
DIMENSION LBG(2),LR(2)
EQUIVALENCE (LBG,BG),(LR,R)
DATA MASK/1/
DATA LBG/0,1128792064/
!C DATA LBG /Z'00000000',Z'43480000'/
DATA A0/ 3.570749742092733673D+03/
DATA A1/-3.709780461376413527D+03/
DATA A2/ 1.399964598734222778D+02/
DATA A3/-9.657744561288430369D-01/
DATA A4/ 3.386638641977018658D-05/
DATA B0/-1.663895239026242433D+04/
DATA B1/ 4.765751363135986862D+03/
DATA B2/-1.555033164085946431D+02/
DATA C0/ 2.732395447351626932D-01/
DATA C1/-2.617993877991508120D-01/
DATA C2/-1.076606829172647092D-02/
DATA C3/-6.324811612385245011D-04/
DATA C4/-3.901461426400143849D-05/
DATA C5/-2.430939945996375181D-06/

```

```

DATA C6/-1.517906727265622710D-07/
DATA C7/-9.526169571108084379D-09/
DATA C8/-5.608327715752070394D-10/
DATA C9/-5.116181324045501959D-11/
!C -----DEFINITION OF STATEMENT FUNCTIONS DTANF AND DCOTF -----
!C -----RATIONAL APPROXIMATION TO TANQ(X) U=X*X (ABS(X)< =1.0)-----
DTANF(X,U)=((((A4*U+A3)*U+A2)*U+A1)*U+A0)*X &
&          /(((U+B2)*U+B1)*U+B0)+X
!C -----RATIONAL APPROXIMATION TO COT(X) U=X*X (ABS(X)< =1.0)-----
DCOTF(X,U)=(((((((C9*U+C8)*U+C7)*U+C6)*U+C5)*U &
&          +C4)*U+C3)*U+C2)*U+C1)*U+C0)/X+1.D0/X
!C -----ENTRY POINT-----
T=DABS(X)
IF (T.LE.1.D0) THEN
!C -----ABS(X) <= 1.0-----
    IF (T.LE.0.5D0) THEN
        IF (X.EQ.0.D0) GOTO 10
        Y=X+X
        DCOTQ=DCOTF(Y,Y*Y)
    ELSE
        T=T+T
        T=DSIGN(2.D0-T,X)
        DCOTQ=DTANF(T,T*T)
    ENDIF
ELSE
!C -----ABS(X) < 1.0 RANGE REDUCTION TO (-1.0,1.0)-----
    IF (T.GT.XMAX) GOTO 20
    Y=X+X
    R=BG+Y
    T=(BG-R)+Y
    IF (IAND(LR(1),MASK).EQ.1) THEN
        DCOTQ=-DTANF(T,T*T)
    ELSE
        IF(T.EQ.0.D0) GOTO 10
        DCOTQ=DCOTF(T,T*T)
    ENDIF
ENDIF
RETURN
!C -----ERROR HANDLING-----
10 DCOTQ=0.D0
   CALL MGDD('DCOTQ ',X,DCOTQ,'SINGULARITY ERROR ',5)
   RETURN
20 DCOTQ=0.D0
   CALL MGDD('DCOTQ ',X,DCOTQ,'ABS(ARG)> =2**51 ',4)

```

```
RETURN
END
```

```
!C -----
FUNCTION DCOTHP(X)
!C   QUADRANT COTANGENT FUNCTION DCOTHP(X)=DCOT(Q*X) Q=PI/2
!C                                     WRITTEN BY I.NINOMIYA   1991.02.10
!C -----
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DCOTHP=DCOTQ(X)
RETURN
END
```