

強相関電子系の物理

川上則雄

京都大学 大学院理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻

アブストラクト

近年、凝縮系物理で注目を集めている強相関電子系について、いくつかの例を取り上げて入門的な講義を行う。まず、強相関電子系における豊富な物理について説明した後、量子揺らぎの最も大きい「1次元電子系」の話題から始める。1次元系の普遍的性質を記述する「朝永ラッティンジャー液体」を臨界現象という観点からながめてみると、多様性の中に潜む「美しくさ」が自然に浮きあがる。カーボンナノチューブや量子細線への応用も紹介する。次に、多体効果の典型例である局所的な電子相関「近藤効果」について概説する。近藤効果は古くから研究されているが、最近でも重い電子系や量子ドット系など、広い分野で精力的に研究が展開されている。いたるところに顔を出す、とびきり重要な概念である。近藤効果には電子相関のエッセンスが凝縮されており、実験の人もぜひマスターしたい必須アイテムである。最後に「モット転移」の話をする。特に、強相関現象の解明には欠かせない動的平均場理論を紹介する。電子相関効果を扱うことは一般に難しいが、「局所的な相関効果を正確に扱おう」というアプローチが動的平均場のエッセンスである。「平均場なのにダイナミクスが扱えるの？」という疑問にも答えたい。

第1章 はじめに

物性物理学の最近の話題は、超伝導や磁性などの伝統的なものから最先端テクノロジーを駆使したナノスケール物理まで、たいへん豊富になっている。このような物性物理学において常に中心的なテーマとなっているのが「電子相関効果」である。例えば、固体中には多くの電子が存在し、周りにいる電子の動きを感じ相互に関係をもちながら複雑に運動している。これが「電子相関効果」である。その結果、電子系は金属、超伝導、半導体といったような様々な性質を示す。

このような電子相関効果が物性にどのように現れるかは、系の次元性に大きく依存する。特に低次元になると量子揺らぎの効果が本質的となり、3次元金属の基本となる「フェルミ液体」の考えが成り立たなくなる。その典型例が、本講義の第一の話題である1次元電子系である。3次元電子系のユニバーサルな性質を記述するのがフェルミ液体であるなら、1次元電子系でこれに対応するものは？これが「朝永ラッティンジャー液体」に他ならない。この朝永ラッティンジャー液体の本質は「量子臨界現象」であり、これがユニバーサルな性質の起源となっている。この臨界現象を記述する最も基本的な枠組みが「共形場理論」である。もともと素粒子物理分野で発展してきたものであるが、物性物理にも広く応用されている。朝永ラッティンジャー液体と共形場理論をキーワードとして、1次元電子系の美しくかつ現実的な物理を紹介する。

電子相関効果が最もよく理解されている現象は何？この質問に対する答えは、間違いなく「近藤効果」であろう。これが、本講義の第二の話題である。近藤効果は金属中の磁性不純物の問題に端を発したものであるが、その後、物性物理のみならず物理学全体に著しい影響を与え、「強相関効果」あるいは「量子多体効果」の本質を抽出したものと考えられている。ここでは、近藤効果に現れる「電子の繰りこみ」を紹介する。これはフェルミ液体の基礎を与えるものである。

考えている系の相関がどんどん強くなると、電子系は最終的にモット絶縁体に転移する。モット転移付近は新奇な量子凝縮相の宝庫である。実際、エキゾチックな超伝導やスピン液体などの様々な異常量子相が実験的に観測され、物性物理に常にホットな話題を提供している。三番目のテーマである動的平均場理論は、モット転移なども含め、電子相関を弱相関から強相関にいたるまで統一的に扱える方法である。この動的平均場の考えを用いると、遍歴電子系の多体効果の本質が「近藤効果」であるということも明らかになる。

本講義では、上記の3つの話題を取り上げて、強相関電子系を取り扱うための基本的な考え方を紹介する。上記のテーマは、次元で分類すると、1次元、ゼロ次元(不純物)、無限次元の強相関系であるといってもよい。上でもふれたように、ゼロ次元(近藤効果)が無限次元の本質をとらえているという事実は少し感動的ではないだろうか。では、さっそく次章で1次元の話題から始めることにする。

第2章 1次元電子系と共形場理論

強相関電子系の中で、近年、低次元電子系に多くの興味が集まっており、中でも1次元電子系に関する研究が急速に進んできた[1]。1次元電子系といえば最近まで、現実の物理現象とはすぐには結びつかない数理的な模型という感もあった。しかし近年の微細加工技術の急速な進歩にともなって、このような理論模型をメゾスコピック系などで容易に実現できるようになった。量子細線、カーボンナノチューブ、量子ホール効果のエッジ状態などは理想的な1次元量子系の研究舞台を与えている。

1次元電子系の示す性質は、通常の3次元金属のものとは大きく異なり、物性研究の最先端において「朝永ラッティンジャー液体」と呼ばれる魅力的な研究舞台を提供している。朝永ラッティンジャー液体で見られるユニバーサルな性質は、1次元量子系の美しい対称性と密接に関連している。この対称性は「共形不変性」と呼ばれ、このような対称性をもつ場の理論が「共形場理論」である[2]。共形場理論は、臨界現象を記述する最も基礎的な理論である。本章では、1次元電子系の臨界現象と共形場理論に関する基礎的な事柄を説明する。

2.1 フェルミ液体と朝永ラッティンジャー液体

まず、1次元電子系の低温におけるユニバーサルな性質を3次元電子系と対比させながらみてみよう[1]。相互作用のある3次元電子系の低温での性質を記述する理論はランダウの「フェルミ液体」と呼ばれる。この枠組みでは、相互作用の効果は電子の有効質量などに繰り込まれ、電子は準粒子と呼ばれる「衣を着た電子」として振る舞う。これを理解するためには、フェルミ分布関数を一般化した「運動量分布関数」を考えると便利である(図2.1)。まず、相互作用のない自由電子では、運動量分布はフェルミ面で不連続を示し、フェルミ粒子としての特徴を示す(フェルミ分布)。3次元電子系では相互作用が加わっても、パウリ原理による拘束がたいへん強いので電子の散乱は大きな規制を受ける。その結果、運動量分布関数は相互作用が入っても、フェルミ面において依然としてジャンプを示しシャープなフェルミ面を維持する(図2.1(b))。このジャンプの存在がフェルミ液体としての証であり、これが存在するため、上で述べた衣を着た電子(準粒子)という考え方が許される。

しかしながらフェルミ液体論は系の次元が低くなると安心して使えなくなる。低次元になると、量子効果によるゆらぎが大きくなるため、フェルミ液体がその基盤としていたパウリの原理(フェルミ統計性)だけでは、多体電子系の本質を記述することができなくなる。特に量子揺らぎの大きい1次元電子系ではフェルミ液体の考え方は完全に破綻する。図2.1(c)に示すように、この場合フェルミ面は相互作用によって完全にならされてしまい、運動量分布関数はフェルミ面で連続になる。ただし、運動量分布は依然としてフェルミ面において、 $|k - k_F|^\alpha$ のようなべき異常型の特徴を示す。すなわち、微係数が発散するタイプの異常である。ここで α は「臨界指数」と呼ばれ、べき異常を特徴づける

ものである。このようにフェルミ面付近の運動量分布関数（より一般的には相関関数）が「べき型の異常」を示すような量子液体を、フェルミ液体と対比させて、「朝永ラッティンジャー液体」と呼ぶ[3, 4]。この朝永ラッティンジャー液体には、フェルミ液体とはひと味違った、1次元電子系の面白い物理が横たわっている。これについてながめてみよう。

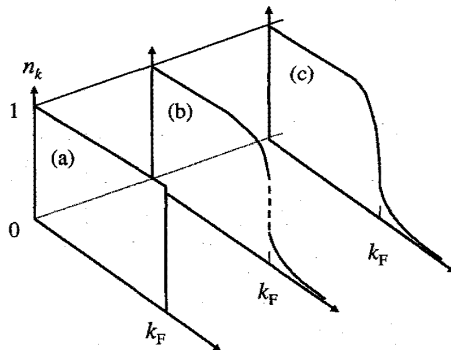


図 2.1: 運動量分布関数:(a) 自由電子 (b) フェルミ液体 (c) 朝永ラッティンジャー液体

◇ スピンと電荷の分離

1次元電子系では、衣を着た電子としての準粒子が破綻しているとなれば、これにかわる繰り込まれた粒子とはどのようなものだろうか。もともと電子は電荷とスピンをもつ粒子として導入されているが、1次元の低エネルギー励起としては、スピンを担う素励起と、電荷を担う素励起が独立に繰り込まれた粒子として振る舞う。いわば、電子がスピンを担う部分と電荷を担う部分に分離してしまったように見える。勿論、このような現象は単独でいる電子では起こらない。これらの素励起はスピンと電荷の「密度波」が量子化されたもので、これらを繰り込まれた粒子とみなして、スピノン、ホロンと呼ぶことが多い[1]。電子型の準粒子にかわって、スピンと電荷励起のモードが分離してよい量子状態を作ることは「スピンと電荷の分離」と呼ばれ、フェルミ液体には現れなかった1次元電子系の大きな特徴である。

◇ 量子臨界現象

スピンと電荷の分離は1次元電子系を特徴づける重要な性質であるが、さらにつきつめて朝永ラッティンジャー液体を記述するには、絶対零度における1次元電子系の「臨界現象」を考えなければならない。まず、有限温度における1次元電子系を思い浮かべ、ある点にいる電子の振舞いが、そこから離れた別の点にいる電子の振舞いにどの程度影響を及ぼすのか、考えてみよう。互いに影響を及ぼし合える距離は相関距離とよばれる。相関距離は長さの基準となるもので、1次元電子系ではスピノンとホロンに関する2種類のものがある。もちろん有限温度では熱的な乱雑さのため相関距離は有限となっている。

ところが、温度が下がってくると、熱揺らぎが徐々に抑えられるのでスピノンとホロンの相関距離は長くなる。やがて系が絶対零度の「臨界点」に達すると相関距離に異変が生じる。絶対零度でのスピノンとホロンのエネルギースペクトルを調べてみると、どちらも質量をもたない（ギャップレス）素励起であることがわかる。従って、相関距離は絶対零度で無限大になり、系は「臨界現象」を示す。すなわち、相関距離が無限大になったため長さのスケールを与える基準がなくなり、どんなスケールをもってきても眺めても、物理現象の本質は変わらないというわけである。これは「スケール不変性」とよばれている重要な概念である。このスケール不変性で特徴づけられる臨界現象が朝永ラッティンジャー液体のもう一つの重要な性質である。

このように、1次元電子系における朝永ラッティンジャー液体を理解するためには、その臨界現象を正しく記述することが不可欠である。この臨界現象の基礎を与えるのが共形場理論である。

2.2 共形場理論と臨界現象

◇ 基礎的なことから

共形場理論は、素粒子の弦理論の基礎として1980年代の後半から発展し、これまで臨界現象への応用も活発になされてきた[2]。今考えている系が臨界点（二次相転移点）にあると、相関距離が無限大になるため一様なスケール不変性が現れる。これはいわゆる「一様なスケール不変性」である（図2.2(a)）。通常の臨界現象においては、さらに「局所的なスケール不変性」も現れる（図2.2(b)）。これが共形不変性であり、このような不変性を持つ場の理論が共形場理論である。このような共形不変性は、短距離相互作用を持つ任意次元の臨界現象で期待されるが、2次元ではこれが無限個のパラメータをもつ対称性になっている。ただし、1次元量子系の場合は時空からなる2次元面を考える。この2次元の共形場理論の基礎を与えるのが、以下に述べるビラソロ代数である。

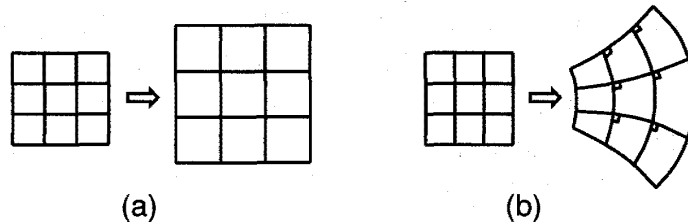


図 2.2: (a) スケール変換と (b) 共形変換

さて複素関数論を少しばかり思いだそう。いま2次元座標 (x, y) から複素座標 $z = x + iy$ を導入しよう。並進は $z \rightarrow z + c_0$ 、スケール変換は $z \rightarrow (1 + c_1)z$ と表される。これを拡張して、共形変換は z に関する任意次数の変換を含み、一般には解析変換 $z \rightarrow w(z)$ で与えられる。ここで $w(z)$ には無限個の座標変換のパラメータが含まれているので、共形変換は無限次元の対称性を持つことになる。また、 $\bar{z} = x - iy$ に関する変換（反解析変換と呼ばれる）も無限次元の対称性を持つ。

共形場理論の定式化を行うために、無限小の共形変換 $(z \rightarrow z + \epsilon_n z^{n+1})$ を生みだす生成子 L_n ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) を導入する。この L_n の間の交換関係は、

$$[L_m, L_n] = (m - n)L_{m+n} + \frac{c}{12}(m^3 - m)\delta_{m+n,0} \quad (2.1)$$

となることが知られている。これがビラソロ代数と呼ばれるもので共形場理論の守護神である[2]。これは z に関する解析変換の代数であるが、 $\bar{z}$ に関する反解析変換の生成子 $\bar{L}_n$ に関しても同様の代数が成り立ち、この2つは独立な代数を構成する。例えば、 L_0 は $z \rightarrow z + \epsilon_0 z$ を生成するので $(1 + \epsilon_0)$ 倍の一様なスケール変換を記述する。ここでビラソロ代数右辺の c は、「セントラルチャージ」と呼ばれる c -数である。セントラルチャージは、現実的なモデルを解析する際には、素励起の有効的なモード数に対応していると考えてよい。重要なことは、この c の値によって系のユニバーサリティ・クラスが決定されるということである。例えば2次元イジング・モデルは $c = \frac{1}{2}$ の理論、1次元電子系は $c = 1$ の理論に分類される。

共形場理論におけるもう一つの重要なパラメタは「共形次元」 $\Delta^\pm$ である。これは共形変換の下で場が変換するときの重みを表わす（ $\pm$ は解析、反解析部分に対応）。この中で特に中心的な役割をする場が、「プライマリー場」 $\phi(z, \bar{z})$ で、共形変換 $z \rightarrow w(z)$, $\bar{z} \rightarrow \bar{w}(\bar{z})$ に対して、

$$\phi(z, \bar{z}) = \left(\frac{dw}{dz}\right)^{\Delta^+} \left(\frac{d\bar{w}}{d\bar{z}}\right)^{\Delta^-} \tilde{\phi}(w, \bar{w}) \quad (2.2)$$

と変換する。重要なことは、プライマリー場の相関関数は共形次元 $\Delta^\pm$ により

$$\langle \phi(z, \bar{z}) \phi(z', \bar{z}') \rangle = |z - z'|^{-2\Delta^+} |\bar{z} - \bar{z}'|^{-2\Delta^-} \quad (2.3)$$

のように決定されることである。臨界指数が $2\Delta^\pm$ で与えられることに注意しよう。

これ以外の場（セカンダリー場と呼ばれる）は、プライマリー場を基本として統制され、共形次元 $\Delta_n^\pm$ によってそのラベル付けがなされる。すなわち、あるプライマリー場に属する n 番目のセカンダリー場は、その共形次元が

$$\Delta_n^\pm = \Delta^\pm + n^\pm \quad (2.4)$$

で与えられ、プライマリー場を基にして整数間隔 $n^\pm$ で規則正しく並ぶ。このような構造は、「共形タワー構造」と呼ばれる。

上にみたように、物性物理に現れるミクロな模型を共形場理論を用いて解析するためには、セントラルチャージ c によってまずユニバーサリティクラスを指定し、さらに共形次元 Δ_n からその共形タワー構造を決定する必要がある。このタワー構造が求められると、考えている系の臨界現象が共形場理論で記述されたことになり、同時に相関関数の臨界指数が求められる。このプログラムを実行する実践的な方法が、以下に述べる有限サイズスケーリングである [5, 6, 7]。

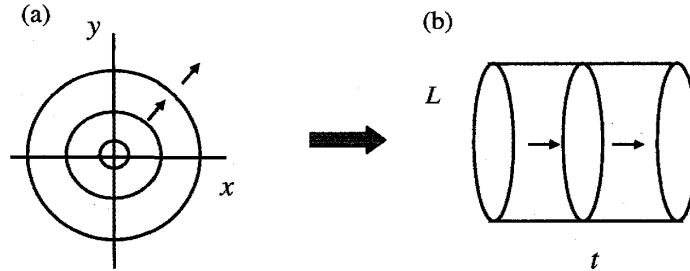


図 2.3: 無限平面からシリンダーへの共形変換： $w = (L/2\pi) \log z$.

◇ 有限サイズスケーリング

さて、共形場理論を用いて物理系を解析することを考えてみる。このとき、有限サイズ・スケーリングのアイデアが、臨界現象における数理と物理を明快に結びつけてくれる。ここで、無限平面を円周 L のシリンダーに移す特別な共形変換

$$z \rightarrow w = \frac{L}{2\pi} \log z \quad (2.5)$$

を考えてみる [5]。変換後の新しいシリンダーを、円周が L の1次元量子臨界系が時間方向に発展した世界面と解釈する (図 2.3)。この変換により、共形場理論に現れるパラメタと量子系の有限サイズスペクトルを対応させることができる。例として新しいシリンダー

での時間発展を考えると、これはハミルトニアン $\mathcal{H}$ により引き起こされる。一方、これはもとの2次元平面では一様な拡大に対応し (図 2.3(a))、生成子 L_0 で記述される (厳密には $L_0 + \bar{L}_0$)。この関係を利用すると、ハミルトニアン固有値であるエネルギー・スペクトルを解析することにより、 L_0 の固有値 (すなわち共形次元) を求めることができる。この「有限サイズスケーリング法」に基づいて得られている重要な公式を以下に記す。まず、周期境界条件のもとで有限サイズ L の1次元系の基底エネルギーは、素励起の速度 v を用いて

$$E_0 \simeq \epsilon_0 L - c \frac{\pi v}{6L} \quad (2.6)$$

と書ける (ϵ_0 は熱力学極限でのエネルギー密度) [6]。セントラルチャージ c が $1/L$ の項にユニバーサルな形で現れていることに注意しよう。自由エネルギー密度は低温で

$$f(T) \simeq f(T=0) - c \frac{\pi T^2}{6v} \quad (2.7)$$

と展開され、 T^2 の係数にやはりセントラルチャージが現れる [7]。素励起のエネルギーと対応する運動量は

$$E_n - E_0 \simeq \frac{2\pi v}{L} (\Delta^+ + \Delta^- + n^+ + n^-), \quad (2.8)$$

$$P_n - P_0 \simeq \frac{2\pi}{L} (\Delta^+ - \Delta^- + n^+ - n^-), \quad (2.9)$$

で与えられる ($n^\pm = 0, 1, 2, \dots$) [5]。ただし、 $\Delta^\pm + n^\pm$ は解析 (反解析) 部分の共形次元である。まとめると、励起状態はプライマリー場と正の整数 $n^\pm$ で指定されるセカンダリー場からなり、これらは共形タワー構造を形成する (図 2.4)。このことは、量子系の励起スペクトルがピラソロ代数の既約表現で一意的に分解されることを意味している。

このように有限サイズスケーリング法を用いることにより、エネルギー・スペクトルの解析から、共形タワー構造、さらには相関関数の臨界指数を決定することができる。

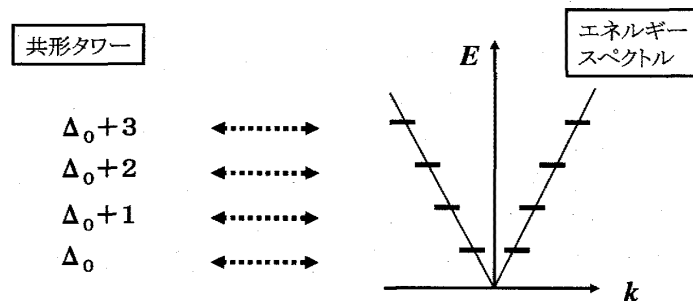


図 2.4: エネルギー・スペクトルと共形タワー構造

2.3 朝永ラッティンジャー液体と共形場理論

◇ $c=1$ ガウシアン理論

1次元量子系における興味深い模型の多くは、セントラルチャージ $c=1$ の理論 (ガウシアン理論) で記述される。これが朝永ラッティンジャー液体の定義であると考えても間

違いではない。スピン $S = 1/2$ のハイゼンベルクモデルや相互作用ボゾンモデルは、 $c = 1$ 理論の典型例である。これらの量子系の有限サイズ・スケーリング解析を行うと、個々の模型によらず以下のようなユニバーサルな答が得られる [1]。まず、基底エネルギー E ならびに自由エネルギー f は、

$$E \simeq L\varepsilon_0 - \frac{\pi v}{6L}, \quad f(T) \simeq f(T=0) - \frac{\pi T^2}{6v} \quad (2.10)$$

となる。この結果を (2.6), (2.7) の有限サイズスケーリングに照らしあわせると、セントラルチャージ $c = 1$ が得られる。すなわち、この系は $c = 1$ 共形場理論（ガウシアン理論）で記述される。上記の模型では一種類のボゾン型励起があるが、この数がちょうど $c = 1$ に対応している。一方、励起スペクトルを解析することで、解析 (+) および反解析 (-) 部分の共形次元は、

$$\Delta_{\mathbf{m}}^{\pm} = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta N}{2\xi} \pm \Delta D \xi \right)^2 + n^{\pm} \quad (2.11)$$

と求められる。ここで、 $\mathbf{m} = (\Delta N, \Delta D, n^{\pm})$ は素励起を指定する量子数である： ΔN は系の粒子数変化、 ΔD は左のフェルミ面から右のフェルミ面への低エネルギー励起、 $n^{\pm}$ は左右のフェルミ面付近での粒子・正孔タイプの励起を表す。この共形次元の表式が $c = 1$ ガウシアン理論を特徴づける。すなわち、系の $U(1)$ 対称性を反映して、連続変化できるパラメタ ξ が理論に入っており、これがプライマリー場の共形次元を決定する。プライマリー場には粒子数変化を伴う励起とカレントを運ぶ励起が寄与している。一方、粒子・正孔励起はセカンダリー場を記述し、共形タワー構造を構成する。プライマリー場の共形次元は $\Delta N, \Delta D$ を変えることによって得られるので、プライマリー場は無限個存在する。 $U(1)$ 対称性を反映した (2.11) の形の共形次元を持つ系が（1成分の）朝永ラッティンジャー液体を記述する。

演習問題として、上の表式を用いて電荷密度の相関関数

$$\langle \rho(x) \rho(0) \rangle \sim \text{const.} + A_0 x^{-2} + A_2 x^{-\alpha} \cos 2k_F x \quad (2.12)$$

の臨界指数を決定しよう。まず、電荷密度の演算子 $\rho(x)$ を作用しても粒子数は変化しないので、 $\Delta N = 0$ である。さらに、 $\Delta D = 0, n^{\pm} = 1$ とおくと、これは大きな運動量変化を伴わないので、非振動の項 x^{-2} に対する臨界指数 2 が得られる。ここで、 $2(\Delta^+ + \Delta^-) = 2$ となることを用いた。他方、 $\Delta D = 1, n^{\pm} = 0$ とすると、 $2k_F$ の運動量変化を伴うので、これに対応する項の臨界指数として、 $\alpha = 2K = 2\xi^2$ が得られる。この表式を用いることで臨界指数の値は、具体的に厳密解から見積もることができる [1]。

◇ 電子系の朝永ラッティンジャー液体

以上のことを基にして、電子系について考えてみよう。電子系の場合、スピンと電荷の素励起が低エネルギー領域で分離し、ともに臨界現象を示すことは上に述べた。これらの素励起がそれぞれ $c = 1$ 共形場理論で記述される（図 2.5）。例として、1次元のハバード模型

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} \quad (2.13)$$

を考えよう。電子は最近接の格子をホッピングし、同一格子点で2電子のクーロン反発 $U (> 0)$ を感じるというモデルである。

この模型に関する有限サイズスケーリングから臨界現象の解析を行うことができる。まず、基底エネルギーの有限サイズ補正は、

$$E = L\varepsilon_0 - \frac{\pi}{6L}(v_c + v_s) \quad (2.14)$$

となる。これは、スピンと電荷が分離し、ともに $c=1$ ガウシアン理論で記述されることを表している。さらに、素励起スペクトルを調べてみると、やはりスピンと電荷が分離していることがわかり、これらの有限サイズ・スケーリング解析からそれぞれの共形次元が (2.11) 式と同じ形に求められる。このことは、スピンと電荷の素励起が $c=1$ ガウシアン理論で記述できることと符号している。ただしスピン部分の表式は、(2.11) に $\xi = 1/\sqrt{2}$ を代入した形になる。これはスピン励起に関する対称性が $SU(2)$ になっていることを反映したものである。

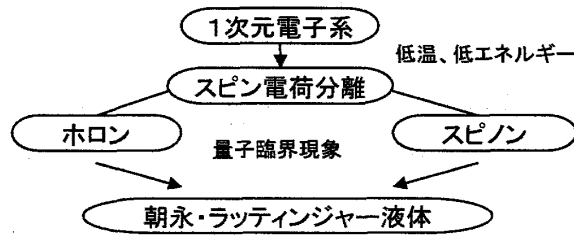


図 2.5: 電子系の朝永ラッティンジャー液体の概念図

以上のように、共形場理論で有限サイズスペクトルを分類することができると、相関関数の臨界指数を決定することができる。例えば、電荷密度の相関関数は、長距離において

$$\langle \rho(x)\rho(0) \rangle \sim \text{const.} + A_0 x^{-2} + A_2 x^{-\alpha_s} \cos 2k_F x + A_4 x^{-\alpha_c} \cos 4k_F x \quad (2.15)$$

と振る舞う。これに対応する臨界指数は一つのパラメタ K_c で

$$\alpha_c \equiv 4K_c, \quad \alpha_s = 1 + K_c \quad (2.16)$$

と表すことができる。また、運動量分布関数は

$$\langle n_k \rangle = \langle n_{k_F} \rangle - \text{const.} |k - k_F|^\theta \text{sgn}(k - k_F) \quad (2.17)$$

の形をとり、対応する臨界指数は

$$\theta = (K_c - 1)^2 / (4K_c) \quad (2.18)$$

となることが知られている。上式で、種々の臨界指数が互いに独立ではなく互いに関係していることがわかる。これは、臨界現象でよく知られている「スケーリング関係式」と呼ばれているものに他ならない。これらの臨界指数は弱相関から強相関に至るまで厳密に計算されている [1]。このように、電子系の朝永ラッティンジャー液体は、電荷励起が $c=1$ ガウシアン共形場理論、そしてスピン励起が $c=1$ $SU(2)$ 共形場理論の枠組みで記述される。図 2.5 に、この様子を模式的に示した。

2.4 閑話：素粒子の弦理論と1次元電子系

少し頭を休めるために、ここでの話題と素粒子論との関連についてふれておく。本章の冒頭でもふれたが、1次元電子系の研究は素粒子と物性の異分野交流の舞台ともなっている。なかでも、素粒子物理学の超弦理論との関わりは著しい。極微の世界では、素粒子は1次元的な伸びをもつ「弦(ひも)」にみえるというのが弦理論のアイデアである。弦は時空内の運動の軌跡として2次元(時空1+1次元)の世界面を描く(図2.6に示したのは、開いた弦と閉じた弦の時空間の中での運動の奇跡である)。この弦の振動を量子化することにより現実の素粒子が見えてくると考える。この弦の張る世界面を記述するために2次元座標を設定するが、弦の物理は、この2次元座標系の選び方に依ってはいけな。これが「共形不変性」である。この共形不変性を持つ場の理論が「共形場理論」であり、弦理論の基礎を与えるものである。

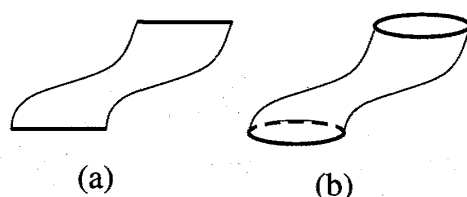


図 2.6: 1次元系時間発展による世界面：(a) 開弦 (b) 閉弦

上に述べたように、このような共形不変性は朝永ラッティンジャー液体にも現れる。この場合は、相関距離が無限大になるという「臨界現象」に起因して共形不変性が現れる(図2.2(b))。このように物理的背景はかなり異なるものの、共形場理論は弦理論と1次元電子系を取り扱うための共通の数学を与えてくれる。

2.5 実験

1950年に朝永理論が提出されたころには夢物語でしかなかったような1次元物質が、物質合成技術、ナノテクノロジーの進歩で数多く作成されている。これまでに朝永ラッティンジャー液体が、多くの物質で観測されるに至っている。まず、メゾスコピック系では量子細線の研究が大きく進展し、コンダクタンスの温度変化に朝永ラッティンジャー液体特有のべき依存性が観測された。また、量子ホール効果のエッジ状態も理想的な1次元系を実現しており、エッジ間のトンネルコンダクタンスにべき型の温度依存性が観測され、理論の予言を裏付けた。最近では、理想的な1次元電子系としてカーボンナノチューブの研究が急速に進展している。以下では、カーボンナノチューブについて簡単にまとめる。カーボンナノチューブ[8]は、2次元グラファイトを円筒状に丸めた物質であり、エレクトロニクス、電子源、ナノテクノロジーなどに広く応用されている[9]。直径は7~300オングストローム程度、長さが10ミクロン程度の物質である。図2.7に示したように、グラファイトの巻き具合によっていろいろなパターンが実現し、金属になったり半導体になったりする。これらは3つのカテゴリーに分類され、それぞれアームチェア、ジグザグ、カイラル、という名前が付いている。チューブの切り口の形状からの命名である。ジグザグとカイラルの場合は、巻き方(半径などの違い)によって金属になったり半導体になったりするが、アームチェアの場合はどのように巻いても常に金属になるということがわかっている。

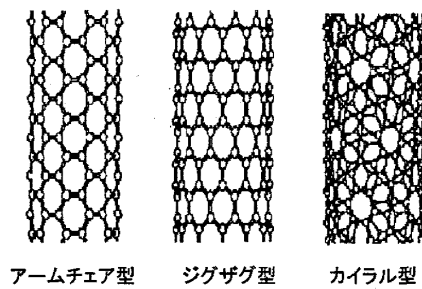


図 2.7: カーボンナノチューブ：巻き方により 3 つのカテゴリーに分かれる。

カーボンナノチューブは、朝永ラッティンジャー液体を実現している典型的な物質であることがさまざまな実験から明らかにされている。例えば、コンダクタンスの温度依存性に T^α のべき依存性が観測されている。ここでは、光電子放出に関する実験について簡単にまとめておく [10]。カーボンナノチューブに放射光を当て電子をたたき出し、光電子スペクトルを測定する。実験では入射エネルギーを固定し、300 ケルビンから 10 ケルビンまでの温度範囲での強度が測定された。その結果、光電子放出強度が $T^{0.48}$ というべき依存性を示すことが高精度に決定された。通常のフェルミ液体では、低温で光電子スペクトル強度は温度に依存性しなくなるので、この $T^{0.48}$ という依存性は、系に強い電子相関があることを示している。これは、それまでのナイーブな「カーボンナノチューブでは電子相関は弱い」という推測とは大きく異なっている。

朝永ラッティンジャー液体の探索にからんで、1970 年代から 80 年代にかけて盛んに行われてた有機導体の実験では「べき依存性」はなかなかきれいに観測されず、その解釈も統一的なものではなかった。現在では、ほぼ理想的な 1 次元系として、量子細線、量子ホール系エッジ状態、カーボンナノチューブなどではっきりと朝永ラッティンジャー液体が観測されるようになっている。

このように、近年のナノテクノロジーの急速な進歩のおかげで朝永ラッティンジャー液体を実験できれいに観測できるようになっている。物性物理は現象に現れる多様性を一つの特徴としているが、そのような多様性の中にみられる普遍性の典型例が朝永ラッティンジャー液体である。1 次元電子系の低エネルギー物理の理論は、朝永による先駆的な研究から現在にいたるまでの長年にわたる研究により美しい体系として整備されている。実験的にも 1 次元電子系の思いがけない側面が着々と明らかにされ、これにまつわる話題もたいへん豊富になっており、実験、理論ともに興味は尽きない。

第3章 近藤効果：電子相関の典型例

3.1 抵抗極小と近藤効果

近藤効果は、金属中に混入した希薄な磁性不純物が引き起こす抵抗極小の現象である。通常の残留抵抗とは異なり、抵抗は低温で $\log T$ タイプの異常な増加を示す (図 3.1)。よく知られている例としては、銅の中にマンガン不純物が混入している系がある。1964 年に、近藤によって磁性不純物による散乱に関する摂動論で抵抗極小はうまく説明されたが、同時に、低温で種々の物理量に発散が生じるという困難を伴った [11, 12]。この理論の困難さの起源が不純物スピンによる多体効果であることが示され、近藤効果が多体問題の本質にふれるものであることが広く認識された。その後の多くの研究で低温における本質は明らかにされ [13, 14, 15]、全温度領域での振舞いは Wilson の繰り込み群によって解明された [16]。これは Wilson のノーベル賞の主業績ともなった。Wilson の理論に続き、近藤効果の厳密解が導出され [17]、さらには共形場理論による解析も行われるなど [18]、近藤効果は「ほぼ完全に解明された稀有な多体問題」と認識されている。実験的にも、近藤効果は物理学の至る所に現れる。重い電子系と呼ばれる希土類化合物、量子ドット系、金属表面の吸着子などなど、近藤効果の出現する現象は枚挙にいとまがない。物理学における近藤効果の重要性を決定的にしているのは、「繰りこみ群の具現化」であろう。近藤効果において、高温から低温へ至る物理量の変化を観測することは、弱い相関の領域から強い相関の領域への「繰りこみフロー」を追いかけることに他ならない。

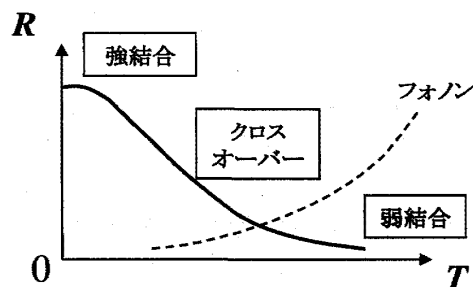


図 3.1: 近藤効果における抵抗 R の温度依存性。通常、抵抗は温度を下げるとフォノン散乱がおさまるので残留抵抗値に近づくが、近藤効果では低温で逆に抵抗は増加し ($\log T$ の依存性)、さらに低温では一定値に近づく。実線 (破線) は磁性不純物 (フォノン) からの寄与。

近藤効果では、伝導電子が磁性不純物により $J\mathbf{S}_{\text{imp}} \cdot \mathbf{S}_c$ タイプの交換相互作用で散乱される。重要なことは、散乱の際に不純物スピン ($\mathbf{S}_{\text{imp}}$) と伝導電子のスピン ($\mathbf{S}_c$) が反転を起こすことである (図 3.5)。このような散乱を通して、伝導電子は不純物のスピンを遮蔽し始める ($J > 0$ 、反強磁性的な結合の場合)。この遮蔽のプロセスに伴い、物理量には対数的な温度依存性が現れる。さらに温度が下がり絶対零度付近になると、局在スピ

ンは完全に凍結し強結合領域に入る。この低温の状態は「局所フェルミ液体」と呼ばれており、ここでは種々の物理量の温度依存性は正常なものとなる。どのように小さい J の値(弱結合)から出発しても必ずこの繰り込みが生じ、低温では強結合のフェルミ液体(強結合)へと移り変わっていく(図3.1)。



図 3.2: 近藤効果における伝導電子と局在スピンとの散乱。スピン反転を伴う。

近藤効果を理解するためには、2つのステップが必要である。まず(1)金属中で磁気モーメントはどのように形成されるのか、(2)生成された磁気モーメントがどのように多体効果を引き起こし低温でのフェルミ液体まで至るのか、である。以下では、このような多体問題としての本質を見るため、2つの平均場近似を紹介しよう。平均場近似で多体効果が入るの?と思われる方も多いと思うが、物理的思考を柔軟にすることで、これが可能になる。この考え方は、次章の動的平均場の発想に自然につながる重要なものである。

3.2 アンダーソンモデルとハートリーフォック近似

近藤効果を含み、金属中の磁性不純物の生起の問題まで立ち返って考えることができるのが、アンダーソンモデル[12, 13, 14, 15]

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V \sum_{k,\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}) + \epsilon_d \sum_{\sigma} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \quad (3.1)$$

である。近藤理論が提出される数年前の1961年にアンダーソンによって提案され、同氏のノーベル賞受賞の一翼を担った業績でもある[19]。ここで $c^\dagger, c$ 等の演算子が導入されているが、これらは伝導電子、不純物電子の生成・消滅を表す演算子である。また、 $n_{d\sigma} = c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma}$ は、局在 d 電子の個数演算子ある。このモデルの意味するところは、 ϵ_k のエネルギーを持つ伝導電子が混成項 V によって不純物(エネルギーレベル ϵ_d 、2電子間クーロン反発 U)とカップルする、というものである。アンダーソンモデルは、強相関の極限で近藤モデルに帰着する。一方で、このアンダーソンモデルを眺めてみると、これが量子ドット系のモデルともみなされることに気づく。不純物を量子ドットと解釈し、これがリードすなわち伝導電子とトンネル効果で結びついているというものである。量子ドットにおいても1998年に近藤効果が観測され[20]、その後、量子ドットの研究において重要な位置を占めている。

まずは、金属中の局在スピンの生起を議論するため、アンダーソンの原論文に従って、上記のクーロン反発の項を平均場近似(ハートリーフォック近似)で取り扱う[19]。まずクーロン反発がないとき($U=0$)、不純物電子は伝導電子と V を通して混成するので、不純物レベルは有限の寿命を持ち、共鳴幅 Δ だけ広がる(図3.3)。さて、相互作用の部分の演算子は

$$n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} = n_{d\uparrow} \langle n_{d\downarrow} \rangle + \langle n_{d\uparrow} \rangle n_{d\downarrow} - \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle + \Delta n_{d\uparrow} \Delta n_{d\downarrow} \quad (3.2)$$

と、形式的に分解できることに注意しよう。ただし、 $\langle n_{d\sigma} \rangle$ は局在電子数の平均値を表し、 $\Delta n_{d\sigma} = n_{d\sigma} - \langle n_{d\sigma} \rangle$ は平均値からのずれである。ここで、最後の「ずれの積」(揺らぎの項) $\Delta n_{d\uparrow} \Delta n_{d\downarrow}$ は小さいものとして無視する。このような平均場近似では、定数項 $\langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle$ を除くと、相互作用 $U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}$ の効果は、もとの不純物レベルを $\epsilon_d + U \langle n_{d-\sigma} \rangle$ だけシフトするものと考えることができる。

この平均場近似の範囲では、一つの不純物レベル ϵ_d ($\uparrow$ スピンとしよう) がフェルミ面より十分深く、クーロン斥力を感じた $\downarrow$ スピンのレベル $\epsilon_d + U \langle n_{d\uparrow} \rangle$ がフェルミ面の上方にあれば、 $\uparrow$ スピンのみを詰めて $\downarrow$ スピンを空にした不純物状態が安定である。すなわち、磁気モーメントが生成することになる (図 3.3)。具体的に磁気モーメントが生成する条件を求めてみると、不純物部分のフェルミ面での状態密度 $\rho_d(0)$ を用いて

$$\rho_d(0)U \geq 1 \quad (3.3)$$

と表すことができる。これはハバードモデルで強磁性が出現する条件 (ストーナー条件) と同じ形をしている。共に平均場に基づいた解析なので当然の結果である。

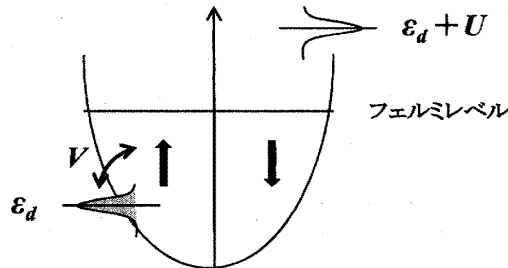


図 3.3: アンダーソンモデルの平均場近似：磁気モーメントの生起

以上がアンダーソンの原論文の概略であり、金属中の磁性不純物の生起に関する実験事実を定性的に説明するものである [19]。しかしながら、多体効果である近藤効果はこの取り扱いでは記述することができない。平均場に基づいて揺らぎを無視しているのので、この扱いは高エネルギー領域でのみ意味を持つ。量子揺らぎが重要となる近藤効果では、低エネルギー領域での多体効果が本質的となる。以下に、この効果に注目してみる。

3.3 局所フェルミ液体：繰りこまれた電子

上に述べたように、ハートリーフォック近似では、量子揺らぎによって生じる「電子の繰りこみ」を記述することはできない。低温でのフェルミ液体の本質を担うのは、この繰りこみ効果であることを思いだそう。では、何とかしてこの繰りこみ効果を「平均場」で取り入れることはできないものであろうか。もとのアンダーソンモデルをじっと眺めてみても、上記のハートリーフォック近似以外にはよい方法を思いつかない。ここで、ちょっと発想を柔軟にしてみよう：「もとの状態空間を仮想的に広げてみる。ただし、物理的に正しい答を出すため、広げた空間に拘束条件をつける」。このような柔軟な発想 (あるいはトリック) は、多体問題を扱う際の常套手段となっている。

話の見通しをよくするため、 $U \rightarrow \infty$ の強相関アンダーソンモデルを考えよう。この極限では、不純物における電子の二重占有は禁止され、可能な不純物の配置は、 $\uparrow$, $\downarrow$, 空, の 3 種類となる。そこで、これらの電子の状態を生成する演算子を新たに $d_{\uparrow}^{\dagger}$, $d_{\downarrow}^{\dagger}$, $b^{\dagger}$ としよう。

これらの統計性はそれぞれフェルミ、フェルミ、ボースとする。演算子の種類がもとの2から3に増えていることに注意。これらの演算子はもとの電子の生成、消滅演算子と次のような関係があることが直ちにわかる。

$$c_{d\sigma}^\dagger = d_\sigma^\dagger b, \quad c_{d\sigma} = d_\sigma b^\dagger \quad (3.4)$$

すなわち、拡張された空間では、電子を一つ作るためには、まず空の状態を b で消し去り、その後に $d_\sigma^\dagger$ で電子をつけるという作業をおこなうことになる。この表示にしたがうと、アンダーソンモデルは

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,\sigma} (V c_{k\sigma}^\dagger b^\dagger d_{\sigma} + h.c.) \quad (3.5)$$

と書きなおすことができる。形式的ではあるが、相互作用がなくなったような形をしている。ただし、勝手にヒルベルト空間を広げてしまったので、これを律するための拘束条件

$$d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} + d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} + b^\dagger b = 1 \quad (3.6)$$

が課される。すなわち、物理的に実現してよいのは、 $\uparrow, \downarrow$, 空, の3種類のいずれかである、という条件である。多体効果としての困難さを、この拘束条件に押し付けてしまったことになる。この方法はしばしばスレーブボゾン法と呼ばれる [21]。

この新しいハミルトニアンをみると、なにやら頼もしい形をしていることが分かる。すなわち、不純物と伝導電子の混成項 V が、ボゾン場 b によって制御される形になっている。ここに、電子の運動（混成）の繰りこみ効果を陽に扱える可能性がでてきたのである。もとのアンダーソンモデルでは、これは陽に表われないことに注意しよう。

さて、最も簡単な近似として、ボゾン場 b に「平均場近似」を用いてみよう。まず、ボゾン場 b を時間に依存しない平均値 $\langle b \rangle$ で置き換える。このようにすれば、ハミルトニアンは一体問題に帰着する。拘束条件 (3.6) を扱うために、よく知られているラグランジュの未定乗数法を用いる。 $\mu(d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} + d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} + b^\dagger b - 1)$ をハミルトニアンに追加して、エネルギー期待値を計算し、その極値から実現する状態を求めるという手続きである。この際、拘束条件 (3.6) も期待値で置き換える。この手続きにより、混成項 V は繰りこまれ、有効的に $V^* = \langle b \rangle V$ となる。この繰りこみのため、 V の2乗に比例する不純物の共鳴幅 Δ は、

$$\Delta^* = |\langle b \rangle|^2 \Delta, \quad |\langle b \rangle|^2 = 1 - n_d \quad (3.7)$$

のように繰りこまれる [21]。2番目の式は、拘束条件そのものである。変分を行って、繰りこまれた共鳴幅と不純物レベルの具体的な表式を求めてみると、

$$\Delta^* = D \exp[\pi \epsilon_d / (4\Delta)], \quad \epsilon_d^* = \epsilon_d + \mu \sim (\Delta^*)^2 / \Delta \quad (3.8)$$

となる。 D はバンド幅である。この結果は、繰りこまれた共鳴が近藤共鳴に他ならないことを意味している [12, 13, 14, 15]。また、繰りこまれたレベル ϵ_d^* はゼロに近いことから、近藤共鳴はフェルミ面付近に形成されることがわかる。この繰りこみの概略を図3.4に示した。

このように、発想を柔軟にすることで平均場でも近藤効果における繰りこみ効果を記述することができる。よく耳にする「平均場では電子相関は記述できない」のフレーズを使う際には注意が必要である。

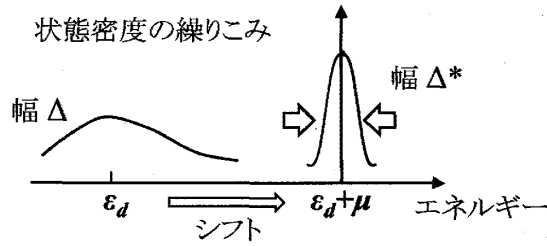


図 3.4: 近藤効果による繰りこみ：もとの不純物共鳴は、フェルミ面までシフトし繰りこまれてシャープな共鳴（近藤共鳴）になる。

3.4 多体効果の本質：繰りこみはなぜ起きる？

では、近藤効果における繰りこみ効果、すなわち電子相関効果をなぜ平均場で導出できたのであろうか。これを考察することは、次章の動的平均場の基本を理解する上で重要である。これを見るため、一粒子グリーン関数を眺めてみよう [12, 13, 14, 15]（グリーン関数のエッセンスは講義で紹介する）。

$$G(\omega_+) = [\omega_+ - \epsilon_d + i\Delta - \Sigma_d(\omega_+)]^{-1} \quad (3.9)$$

ただし、 $\omega_+ = \omega + i\delta$ (δ は正の微小量)。分母の最後の項 $\Sigma_d(\omega_+)$ は「自己エネルギー」と呼ばれるもので、多体効果はすべてこの中に押し込められている。この表式の意味するところは、不純物レベル ϵ_d が混成によって Δ だけぼやけた共鳴状態に変化し、それが多体効果によってさらに $\Sigma_d(\omega_+)$ という補正を受ける、ということである。

ここで、自己エネルギーを形式的にフェルミ面 $\omega \sim 0$ 付近で展開してみよう。

$$\Sigma_d(\omega_+) \sim \mu + a_1\omega_+ + O(\omega_+^2) \quad (3.10)$$

この式をグリーン関数の表式に代入し、少しだけ変形すると

$$G(\omega_+) \sim z[\omega_+ - z\epsilon_d^* + i\Delta^*]^{-1} \quad (3.11)$$

となることがすぐ分かる。ここで

$$z = 1/(1 - a_1), \quad \Delta^* = z\Delta, \quad \epsilon_d^* = (\epsilon_d + \mu) \quad (3.12)$$

である。この結果は、もとの不純物共鳴がフェルミ面付近 ϵ_d^* に移動し、その幅が z という因子だけ縮まり、繰りこまれた共鳴（近藤共鳴）に変化する、ということの意味している。この繰りこみが「フェルミ液体の形成」のエッセンスでもある [12, 13, 14, 15]。以上は、絶対零度の結果である。温度が上昇すると、多体効果で生じた近藤共鳴は徐々に消失していくことになる。

ここで、上に述べた平均場近似との関係を見てみよう。スレーブボゾン平均場では、伝導電子と不純物の混成項の係数を平均場 $\langle b \rangle$ がコントロールしており、その結果、共鳴幅が $|\langle b \rangle|^2$ の因子だけ縮む。これを自己エネルギーの展開の表式と比較すると、 ω の1次の係数 a_1 の部分が、ちょうど $|\langle b \rangle|^2$ の役割を担っていることがわかる。このように、スレーブボゾン平均場は時間に依存しない静的な近似であるにも関わらず、「 ω の1次の係数を平均場」としているために、量子ゆらぎによる「繰りこみの効果」を取り入れることができるのである。これと対照的に、アンダーソンによる通常の平均場近似（ハートリーフォック近似）は ω のゼロ次の項のみを扱うので、繰りこみ効果は入らない。

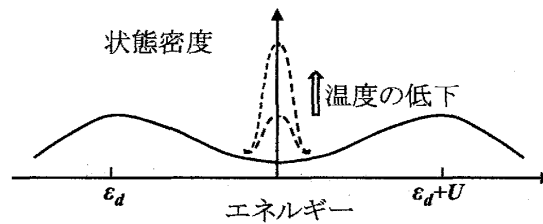


図 3.5: アンダーソンモデルの状態密度。中央の幅の狭い構造が近藤ピーク。

3.5 正確な描像

上に紹介した2つの平均場近似の答を組み合わせると、近藤効果を定性的に正しく描写することができる(図3.5)[12, 13, 14, 15]。まず、高温では多体効果は熱擾乱のためかき消される。したがって、状態密度に現れるのは、高エネルギーの近似として導入したハートリーフォック近似(図3.3)の2つの山のみである。ただし、ハートリーフォック近似とは異なり局在スピンの向きは固定されず、自由スピンの実現している。温度を下げていくと、不純物スピンの遮蔽が徐々に生じ、同時にフェルミ面付近に近藤ピークが成長していく(図3.5)。この近藤ピークの成長に伴い、物理量には異常な振る舞いが現れる。その一つが抵抗極小の現象として観測された $\log T$ タイプの抵抗増加である(図3.1)。さらに低温になると、近藤ピークは飽和して絶対零度のものに落ち着く。このような低温では、 $\log T$ のような異常な温度依存性はすべておさまり、物理量の振る舞いは正常なものとなる。この性質は「繰りこまれた共鳴状態」すなわち近藤共鳴状態を用いて表される。これが「局所フェルミ液体」と呼ばれているものに他ならない[12, 13, 14, 15]。近藤共鳴は、実際に光電子分光やSTMなどによって直接観測されている。

このように、近藤効果では、高温の自由スピン(弱結合)の領域から、温度の低下とともにクロスオーバーが起き、最終的に低温のフェルミ液体(強結合)の領域に落ち着く。繰りこみ群のフローが、まさに物理量の温度変化に実現されているわけである。このような観点から、最初に示した抵抗極小の現象(図3.1)を見直してみると、近藤効果に潜む深遠な物理が自然に浮き上がってくるのではないだろうか。

第4章 動的平均場理論とモット転移

相互作用する電子系を記述する簡単化されたモデルとして、ハバードモデルやアンダーソンモデルがあり、古くから盛んに研究されてきた。これらの電子系で生じる超伝導や磁性などの多彩な物性を記述する出発点として平均場理論がしばしば用いられる。しかしながら、強い電子相関の下では、通常平均場理論においては取り入れられない動的揺らぎの効果が重要となる。このような強相関電子系を系統的に取り扱う理論的手法の確立は、物性物理学において最重要課題の一つとなっている。

近年、系の空間次元が大きい極限からのアプローチとして [22]、動的平均場理論が提案されている。この方法は、局所的な電子相関効果を正確に取り入れることのできる方法である。現在、動的平均場理論は強相関電子系を研究する強力な理論的枠組みとして確立され、実験の解析にも広く用いられている [23, 24, 25]。非常に汎用性が高く、強相関系を扱うスタンダードな方法となっている [13, 15]。以下では、この理論のエッセンスを紹介する。

4.1 動的平均場とは

まず、通常の「静的」平均場の話から始めよう。平均場近似は通常、無限次元の極限で厳密になる。この近似のポイントを抑えるため、格子点 i, j に位置する局在スピン $\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j$ の間に強磁性交換相互作用 $J_{ij} (> 0)$ が働くハイゼンベルグモデルを考えてみる。ハミルトニアンは、

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (4.1)$$

で与えられる。ただし、和 $\langle i, j \rangle$ は最近接格子点のみを取るものとする。この系のある格子点のスピンに注目すると、有効磁場 $\mathbf{H}_i = \sum_j J_{ij} \mathbf{S}_j$ が働いているとみなすことができる。 $\mathbf{S}_j$ は量子的にゆらぐため、有効磁場も揺らぐことになる。格子点 i の最近接格子点の数を M とし、 M が十分大きい極限で相互作用を $J_{ij} = J/M$ とスケールしよう。このとき $M \rightarrow \infty$ の極限で、有効磁場は $\sum_j J_{ij} \langle \mathbf{S}_j \rangle = J \langle \mathbf{S} \rangle$ のようにスピンの平均値 $\langle \mathbf{S} \rangle$ を用いて記述することができる。すなわち、平均値からのずれである揺らぎの効果を無視することができる。このことは、「静的」平均場近似が無限次元の極限で正確になることを示している。

以上の話は、局在スピンに関してよく知られたものであるが、「動きまわる電子」に関してはそれほど事情は単純ではない。無限次元においても「量子ゆらぎ」が無視できないのである。この量子ゆらぎを扱う枠組みが動的平均場理論である。この理論では、ハバードモデルなどの格子モデルが有効的な不純物モデルにマップされる (図 4.1)。この不純物モデルは、動的な (すなわち時間に依存して揺らぐ) 平均場と結合しているところが通常の「静的」平均場近似と異なる。

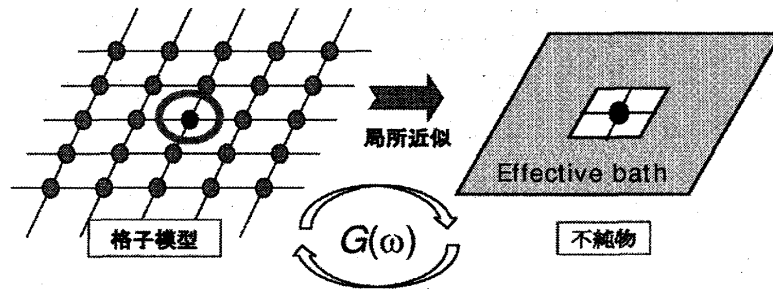


図 4.1: 動的平均場近似：格子模型の1つのサイトに着目し、周りのサイトからの寄与を動的な有効場として取り入れ、有効不純物模型へマップする。

以下では、第二章でも登場したハバード模型

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (4.2)$$

を用いて、動的平均場理論について説明する。ここで、相互作用 U の項に対して通常の前平均場近似（ハートリーフォック近似）を行うと、 $U < n_{i\uparrow} > n_{i\downarrow}$ ($= \Sigma(0)$ と書くことにする) のようなエネルギーシフトの項が出てくるのみである。したがって、このハートリーフォック近似では、個々のエネルギーレベルが ϵ_k から $\epsilon_k + \Sigma(0)$ へと定数だけシフトするだけで、動的なゆらぎは一切入らない。このときの「静的」平均場は、 $\Sigma(0)$ であることをまず頭に刻んでおこう。動的な効果まで入れるためには、ナイーブには、上記のエネルギーシフトに「エネルギー依存性」（フーリエ変換を用いれば時間依存性）を持たせればよいように思われる。すなわち

$$\epsilon_k \rightarrow \epsilon_k + \Sigma_k(\epsilon) \quad (4.3)$$

とすれば、 $\Sigma_k(\epsilon)$ が「動的ゆらぎを含んだ平均場」とみなすことができるであろう。ここで、一般的には波数 k 依存性もあるとして添え字に k をつけた。実は、 $\Sigma_k(\epsilon)$ は、前章でふれたグリーン関数に現れる「自己エネルギー」に他ならない [13, 15]。したがって、「動的な平均場」を導入する場合、その自然な候補として自己エネルギーあるいは、その元締めであるグリーン関数が浮かびあがってくる。実際には、波数 k 依存性まで含めて $\Sigma_k(\epsilon)$ を見積もることは困難なので、波数依存性を落とした $\Sigma(\epsilon)$ を有効場と考えるのが、動的平均場の枠組みである。すなわち、局所的な量子揺らぎを正確に扱うアプローチである。このように波数依存性を落とすことが正当化されるのは系が無限次元の時である。この事情は通常の前平均場とも共通している。

このような空間次元の大きい極限では、もとの格子模型は、「動的平均場に埋め込まれた有効不純物模型」に帰着される。図 4.1 に、もとの格子模型から有効不純物模型へのマッピングを模式的に示した。動的平均場は、通常の前平均場と同様、自己無撞着に決定されなければならない。これについて、以下に簡単にまとめる。

ステップ (1):

まず、有効不純物模型を解く。この不純物模型における無摂動グリーン関数を $G_0(\omega)$ と書くことにすると、これが時間に依存した有効場を記述する (図 4.1 の右図)。この有効模型

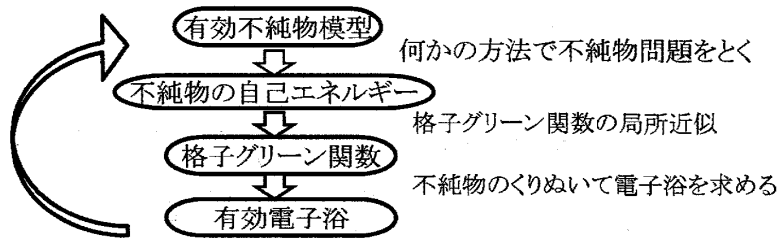


図 4.2: 動的平均場近似における自己無撞着ループ

において、相互作用を含むグリーン関数 G_σ は自己エネルギー Σ_σ を用いて、次式の関係式（ダイソン方程式と呼ばれる）[13, 15]

$$G_\sigma = G_\sigma + G_\sigma \Sigma_\sigma G_\sigma \quad (4.4)$$

で表される。有効場 G_σ が与えられていれば、自己エネルギー Σ_σ およびグリーン関数 G_σ は、有効不純物模型を何らかの方法（摂動論、数値計算など）で解くことにより得られる。

ステップ (2):

次に、伝導電子のグリーン関数を求める。グリーン関数 G_σ は、あるサイトにおける局所的なグリーン関数であるので、これはもとの模型 (4.2) の伝導電子の局所グリーン関数と一致しなければならない。(4.2) 式のハミルトニアンに対する局所グリーン関数は、

$$G_\sigma(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + \mu - \Sigma_\sigma(\omega)} \quad (4.5)$$

と書くことができる。ただし、 μ は化学ポテンシャル。 k の和を取ることで、グリーン関数が局所的なものになっている。結局、(4.4) 式と (4.5) 式を用いて、有効場を記述するグリーン関数 G_σ は

$$G_\sigma^{-1}(\omega) = \left[\frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + \mu - \Sigma_\sigma(\omega)} \right]^{-1} + \Sigma_\sigma(\omega) \quad (4.6)$$

のように求めることができる [13, 15]。

ステップ (3):

再び、不純物模型を解く。有効場 G_σ が一旦求められれば、有効不純物模型を解くことで自己エネルギー Σ_σ を計算することができる。 Σ_σ が得られると (4.6) 式よりグリーン関数 G_σ を計算できるので、これらは自己無撞着方程式を構成している。第 4.2 図に動的平均場理論の自己無撞着ループを示した。

以上みたように、遍歴電子系では、スピン系などと異なり無限次元の極限でも「量子揺らぎ」の項が生き残り、問題は古典論には帰着しない。このため厳密に答を求めることは一般にできない。しかしながら、もとの問題は不純物問題に帰着されているので、これをうまく処理することができる。

4.2 モット転移

以上の手続きで、遍歴電子系の多体問題が不純物系の多体問題（近藤効果）にマップされた。後者の問題で解析の中心となるのは前章に登場したアンダーソンモデルであり、残

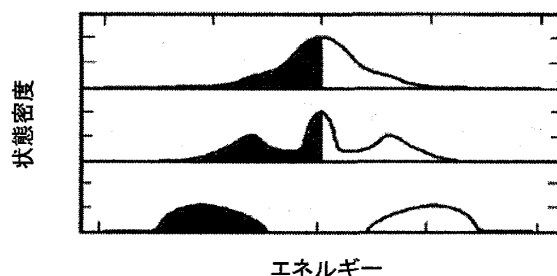


図 4.3: 動的平均場理論で計算された状態密度：上の図から順に $U/W = 2, 4, 8$ である (W はバンド幅)。

された問題はこれをどのように解くかである。アンダーソンモデルの動的性質を調べるには、種々の方法がある。(1) U に関する摂動論、(2) Wilson 数値繰りこみ群法、(3) 量子モンテカルロ法、(4) 密度行列繰りこみ群法、(5) 数値的厳密対角化法、(6) グリーン関数切断近似法、などが代表的である。どれも一長一短があるが、(2)-(4) の数値的方法是信頼度が高い。

例として、ハバード模型に動的平均場近似を行い、量子モンテカルロ法で不純物問題を解いて得られたモット転移の結果を図 4.3 に示す [23]。ハバード相互作用 U がいないときは通常の金属であるが、 U を大きくしていくと、次第にフェルミ面付近に状態密度の細いピークが現れる。これは、繰りこまれた電子がフェルミ面付近に形成されたことを示している。いわゆる「フェルミ液体」の状態が実現する。さらに U を大きくしていくと、フェルミ面に電荷ギャップが形成され系はモット絶縁体に転移する。動的平均場理論は、これまでにハバード模型や周期アンダーソン模型などに適用され多くの成功を収めてきた [23, 24, 25]。

このように、動的平均場理論を用いることで、電子系を相関の弱い領域から強い領域まで系統的に扱うことができ、モット転移も記述することができる。それまでの多くの理論では難しかった「相互作用を全領域で取り扱うこと」が可能になったことは特筆に値する。ただし、この理論では空間的に広がった量子揺らぎが落とされているので、理論を整備するためには、空間揺らぎの効果を系統的に取り入れていく必要がある。

4.3 クラスタ型の動的平均場理論

動的平均場理論を拡張して、空間的な揺らぎの効果をとり入れる方法には、いくつかのものがある。基本的には、動的平均場理論における有効不純物を有効クラスタに拡張するものである。代表的なものに運動量空間をクラスタに分割する「動的クラスタ理論」[26] と実空間のクラスタを扱う「セル型動的平均場理論」[27] がある。例えば、セル型動的平均場理論においては、図 4.4 に示すように、元の格子模型を数サイトのクラスタと有効場にマップする。この有効クラスタ模型においては、局所的な電子相関効果に加えてクラスタ内部における短距離の相関効果を取り扱うことができる。

ここでは、2次元ハバード模型に対する 2×2 サイトのクラスタを用いたセル型動的平均場を例として考えよう。まず、図 4.4 のように、元の格子を4つの副格子に分割し、点線で囲まれた4つのサイトを1つのサイトと考える。格子の基本並進ベクトルは、元の格子の基本並進ベクトルの2倍になる。このように元の格子をクラスタをユニットとした超



図 4.4: セル型動的平均場理論

格子と考えることで、副格子に関する4つの自由度を、実空間の指標ではなく「1つの格子点における内部自由度」とみなす。これがセル型動的平均場理論の骨子である。

例えば、グリーン関数は「4つの内部自由度」を反映して、 4×4 の行列となり、 4×4 行列の自己エネルギー $\hat{\Sigma}_\sigma(\mathbf{K} : \omega)$ を用いて

$$\hat{G}_\sigma(\mathbf{K} : \omega) = [\omega + \mu - \hat{t}(\mathbf{K}) - \hat{\Sigma}_\sigma(\mathbf{K} : \omega)]^{-1} \quad (4.7)$$

と書かれる。ここで、 $\hat{A}$ は A が 4×4 の行列であることを意味する。ここで、 $\mathbf{K}$ はクラスタを一つの格子点とみなした時の運動量であり、 $\hat{t}(\mathbf{K})$ は、(内部自由度に対して対角化されていない) 運動エネルギーの項である。このように副格子の自由度を超格子における内部自由度と考えると、通常の動的平均場理論と全く同じ手続きで自己無撞着な方程式を導くことができる。クラスタにしたことにより、グリーン関数や自己エネルギーをクラスタのサイズに対応する行列として扱えばよいことになる。

セル型動的平均場理論は、1次元ハバード模型に適用され、厳密解や密度行列繰り込み群の結果をかなりよく再現することが確かめられている。また、2次元ハバード模型におけるスピン揺らぎの効果なども議論されている。第一原理計算と組み合わせて、実験結果を定量的な解析を行う試みもなされている。このあたりの詳細は、レビュー文献[23, 24, 25]を参照されたい。

このように動的平均場理論のクラスタ模型への拡張は、空間の揺らぎが重要な系(別の言い方をすると運動量依存性が重要な系)には不可欠のものである。例えば、フラストレーションの強い系では、空間的に広がった揺らぎが重要となるので、クラスタ理論が本質的な役割を果たす。

4.4 まとめ

本章では、動的平均場理論とそのクラスタ拡張版を紹介した。動的平均場理論は、強相関電子系を研究する強力な枠組みとして様々な系に適用され、成功を収めてきた。この理論では局所的な量子揺らぎが正確に記述される。一方で空間的な揺らぎの効果は無視されるので、この点を系統的に改良するのがクラスタ理論への拡張である。

従来の第一原理計算は、結晶構造による電子構造をうまく記述するものであったが、電子相関効果を取り入れることが難しいという難点があった。ここに動的平均場を組み合わせることにより、個々の物質の性質を丁寧に考慮しつつ電子相関効果も取り入れることができるようになっており、種々の実験の定量的解析が行われている[23, 24, 25]。

関連図書

- [1] 川上則雄、梁成吉、「共形場理論と1次元量子系」(岩波書店、1997年); 川上則雄、「一次元電子系の数理」(岩波書店、2002年)
- [2] A. A. Belavin, A. M. Polyakov and A. B. Zamolodchikov, Nucl. Phys. B **241**, 333 (1984).
- [3] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **5**, 544 (1950).
- [4] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963).
- [5] J. L. Cardy, Nucl. Phys. B **270** [FS 16], 186 (1986).
- [6] H. W. J. Blöte, J. L. Cardy and M. P. Nightingale, Phys. Rev. Lett. **56**, 742 (1986).
- [7] I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **56**, 746 (1986).
- [8] S. Iijima, Nature **354**, 56 (1991)
- [9] R. Saito, G. Dresselhaus and M. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (Imperial College Press)
- [10] Ishii et al., Nature **426**, 540(2003))
- [11] J. Kondo, Prog. Theor. Phys. **32**, 37 (1964).
- [12] 近藤淳,「金属電子論」(裳華房, 1983年)
- [13] 山田耕作,「電子相関」(岩波現代の物理学 **16**, 1993) .
- [14] 芳田奎,「磁性」(岩波書店、1991)
- [15] 斯波弘行,「電子相関の物理」(岩波書店、2001)
- [16] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975)
- [17] N. Andrei, K. Furuya and J. H. Lowenstein, Rev. Mod. Phys. **55**, (1983) 331; 興地斐男、川上則雄、日本物理学会誌 **38**, 716 (1983)
- [18] I. Affleck and A.W.W. Ludwig, Phys. Rev. **B48**, 7297 (1993)
- [19] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [20] D. Goldhaber-Gordon *et al.*, Nature (London) **391**, 156 (1998); S. M. Cronenwett *et al.*: Science **281**, 540 (1998).
- [21] 永長直人,「電子相関における場の理論的方法」(岩波書店、1998年)
- [22] W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).

- [23] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [24] T. Pruschke, M. Jarrell and J. K. Freericks, Adv. Phys. 44, 187 (1995).
- [25] G. Kotliar and D. Vollhardt, Physics Today 53, (2004).
- [26] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke, and H. R. Krishnamurthy, Phys. Rev. B **58**, R7475 (1998).
- [27] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Pálsson, and G. Biroli Phys. Rev. Lett. **87**, 186401 (2001).