

多電子系の遍歴・局在・秩序化

東北大学大学院理学研究科 倉本義夫

概要

単独の電子は、質量・電荷・スピンの特徴付けられ、その性質は定量的によくわかっている。しかし、このような電子が多数集まると、非常に豊かで思いがけない性質を示す。固体中に凝縮した電子が示す超伝導、強磁性、分数量子ホール効果などはその例である。単独の電子の固有状態は、自由空間では平面波であるが、多数の電子の固有状態は必ずしも平面波ではない。すなわち斥力相互作用が強いと、平面波状態は不安定になり、多数の電子は自発的に局在する。この状態は、電子の結晶とみなせる。それでは逆に、平面波状態（フェルミ液体状態）は電子間の相互作用があっても生き残れるか、と問うこともできる。実はこの答えは単純ではない。その際、系の次元性が本質的に重要になる。

この講義では、量子多体系としての電子系が示す興味ある性質を理解するために、単純な例から出発して重要な基本概念を説明する。特に、近藤効果、朝永・ラッティンジャー流体、モット絶縁体、動的有効場などを直感的に理解できるようにしたい。また、できるだけ最近の実験結果を含む新しい例題を選んで、量子多体系に関する最先端研究の現状がわかるようにしたい。

1 はじめに

量子力学の入門で、自由空間中の粒子の固有状態は平面波であることを習う。また、周期的なポテンシャルがあると、固有状態はブロッホ関数になることも習う。これらの固有状態は、単独の粒子について当てはまることに注意が必要である。粒子間に相互作用があると、上記は修正しなくてはならない。固体中には電子が多数存在し、お互いの相互作用によって一つの電子に見られない幾多の興味ある性質が出てくる。この講義では、電子が集団として示す性質を、特に遍歴と局在という角度から眺め、代表的な例を示したい。また、これらの現象を理解するための概念と、基礎的な理論的手法を解説したい。多体理論には、多くの人の努力で新しいアイデアと技術が盛り込まれ、また実験との比較によって定量的

にも鍛えられてきた。この結果、現在では非常に洗練されたものになっている。初学者からみると、敷居の高いものも多いが、昔の人が一生かかって建設したものを数日で習得できるのであるから、ありがたいものである。ニュートンも "If I have seen further, it is by standing on the shoulders of giants." と手紙に書いたという。



図 1: “ジャックと豆の木”より

量子多体論で習得すべき基礎的概念として、第一は摂動論と繰り込みである。強い相互作用がある系の基底状態は、一般にハミルトニアンの変動エネルギー部分の基底状態とはかなり異なる。相互作用の効果は摂動論を用いて理解することが一般的であるが、これを強力にした概念が、繰り込み（及び繰り込み群）という考え方である。今まで学部コースの量子力学によって学んできた摂動論を、もうすこし一般的な見方からとらえ直すと、繰り込みの考え方に至る。すなわち、通常の摂動論が固有エネルギーと固有関数を近似的に求めることを目的にし

ているのに対して、繰り込みに至る考え方では、有効ハミルトニアンという演算子を求めることを目的にする。特別な場合として、有効ハミルトニアンが作用する空間がひとつの基底しか持たない時には、演算子は固有値に帰着し、通常の摂動論が再現される。

量子力学の基礎を越えた摂動論のもう一つの特徴は、摂動展開のパラメータとして自明でないものも用いることである。この有名な例は、かつて K.G. Wilson が用いた ϵ 展開である [1]。彼は系の次元 d が 4 からずれていることを $\epsilon = 4 - d$ として展開に用いた。この展開の動機は、4 次元以上で分子場理論が臨界現象を正しく記述することにあり、分子場からの展開に通ずる。自明でない展開パラメータのもう一つの例は、内部自由度の数 n の逆数を用いることである。内部自由度の数が十分大きいと、繰り込みの固定点の場合によっては簡単に求まることが、この展開のねらいである。

繰り込みの考え方が劇的に有効になるのは、近藤効果の問題である。近藤効果は、初めのハミルトニアンと、繰り込まれた後の有効ハミルトニアンが全く異なっている形をしている、という驚くべき特徴がある。近藤効果における繰り込みは、種々のやり方で行われてきたが、筆者の意見では、有効ハミルトニアンと、Rayleigh-Schrödinger 摂動論を用いるのが最も簡明である。本講義では、繰り込みの具体例として近藤効果を解説する。近藤効果では、最終的に実現される状態は、フェルミ流体とつながる状態であり、その解釈は直感的にできる。

一方、繰り込み効果が非摂動論的に働き、フェルミ流体状態が不安定になる場合もある。磁性不純物では、軌道縮退があると非フェルミ流体の基底状態が生じる。また 1 次元の電子系では一般に非摂動効果が強いので、フェルミ流体状態は不安定になり存在しない。この時有効な考え方は、フェルミ粒子としての電子が、集合的に振る舞う結果、ボソンとしての波として振舞うことである。実は、より一般的にはボソンではなく分数統計に従う素励起を生み出すのであるが、低エネルギーの極限では、ボソンで十分である。1 次元系は、電子の局在・遍歴に関する物理をもっとも簡明に実現する。例えば 1 次元ハバードモデルは、ペーテ仮説法と呼ばれる手法を用いて、厳密に解かれている。電子の個数がちょうど格子点の数に等しい場合は、エネルギーバンドが半分まで詰まった状態に対応するので half-filled と呼ばれる。この密度では、電子移動にエネルギーギャップが生ずる。これは、電子が局在状態にあることを表している。このような絶縁体は、クーロン相互作用があつてはじめて生ずるものであり、モット絶縁体と呼ばれる。格子点あたり偶数個の電子が存在するときに生ずるバンド絶縁体とモッ

ト絶縁体の性質はかなり異なっている。バンド絶縁体では、電子が局在しているか遍歴しているかの区別は重要ではない。1 次元ハバードモデルでは、スピン励起にはギャップがない。この励起の構造は、反強磁性ハイゼンベルクモデルと基本的に同じである。このことは、有効ハミルトニアンを構成することによって確認できる。

逆に、現実の系を空間次元が大きい極限からアプローチする方法がある。これは、分子場理論からの展開に他ならない。通常の分子場ではなく、動的な有効媒質を自己無撞着に決める理論が大きな成功を収めている。この方法は、現実の物理系を数値計算を駆使して調べる際に非常に有効である。理論開発の当初は、ひとつのサイトの周りの有効場しか考えていなかったが、次第に短距離秩序も取り入れられるように洗練されてきた。

本講義では、このような目覚ましい進展を理解するために必要な基礎的事項に重点をおいて解説する。大体の講義スケジュールとしては以下のように考えている。

1 日目：ゼロ次元系

2 日目：1 次元系

3 日目：無限次元系

3 次元系は無限次元からの摂動として理解できる。一番難しいのは 2 次元系であり、1 次元から見ても無限次元から見ても捕らえきれない。本講義では、時間があれば簡単にコメントする。なお、実際の数値を見積もる場合以外には、単位系として $\hbar = k_B = 1$ を用いる。

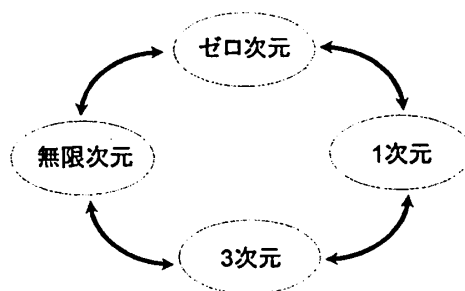


図 2: 各空間次元に対する理論的アプローチの関係

この講義ノートは、著者の大学院講義、過去の夏の学校、固体物理の解説などで使った材料をかなり含んでいる [2, 3, 4]。一方、特に 1 次元系を中心に新たな改訂も相当に加えている。ノートに書かれている内容を理解することは、初学者にはすぐにはできないかもしれない。予習にトライして難しく感じても、あきらめないでいただきたい。一通り講義を聞いた後で見返してもらうとき、またさらに研究を進めるときに、じわじわと役に立つこ

とを願っている。毎度のことながら、著者の力不足と時間不足から、このノートには、わかりにくいところや中途半端な議論に終わっているところが多い。関連する日本語教科書の例をいくつか挙げておく [5, 6, 7]。実際の講義では、聴衆がいるので、その反応を見ながらより分かりやすい形に説明するつもりである。

2 摂動論と繰り込み

2.1 有効ハミルトニアン

物理現象を考えるときに、すべてのエネルギー領域を問題にすることはまれである。注目しているエネルギー領域の情報が得られれば十分な場合が多い。例えば低温の比熱では、注目する温度と同程度のエネルギー領域にある励起スペクトルだけが問題になる。このような場合、すべての状態を含んだハミルトニアンから、低エネルギーの状態だけを正しく記述することを目標に簡単化をする。この目標に答える有効ハミルトニアンは、その詳細について漠然と語られることが多いが、厳密な構成を行うことも可能である。以下では、この構成の概要を説明する [2]。

全系の波動関数を ψ として、シュレーディンガー方程式 $H\psi = E\psi$ を考える。注目するエネルギー領域に状態を狭く限ったものをモデル空間とよぶ。有効ハミルトニアンに対する基本的な要請は、注目する領域では元のシュレーディンガー方程式と、同じ固有値を与えることである。すなわち、

$$H_{\text{eff}}P\psi = EP\psi. \quad (1)$$

ここでモデル空間への射影演算子 P を導入した。有効ハミルトニアンは、以下のようにして (形式的には) 厳密に決めることができる。まず、モデル空間に直交する空間への射影演算子 Q を導入する。すなわち $P+Q=1$ 。するとシュレーディンガー方程式は次のように書き直せる。

$$(E - H_0)Q\psi = QV\psi \quad (2)$$

ここで、非摂動項 H_0 は、モデル空間内で対角化可能なものを選ぶ。すなわち、 $[H_0, P] = 0$ を要請する。次に波動演算子 Ω を導入する。これは、図 2.1 に模式的に示すように、モデル空間での波動関数をもとの波動関数に戻す演算子である。図で明らかのように、同一の投影 $P\psi$ を与える ψ は、 $Q\psi$ が異なる分だけ無数に存在する。これに関わらず、 Ω で元に戻せるのは、 ψ が H の固有関数である、という条件を用いるからである。

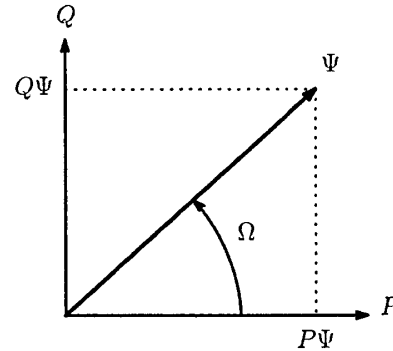


図 3: 波動関数 ψ とその射影。

波動演算子 Ω の定義から、 $\psi = P\psi + Q\psi = \Omega(E)P\psi$ の関係が成り立つ。 $Q\psi$ を消去すると、 Ω が閉じた形で求まる。

$$\Omega(E) = \sum_0^\infty [R(E)V]^n, \quad R(E) = Q(E - H_0)^{-1} \quad (3)$$

この結果から有効ハミルトニアンは、

$$H_{\text{eff}}(E) = PH\Omega(E) \quad (4)$$

のように求められる。

いままでの議論は、いささか抽象的なので、簡単な具体例を示すことにしよう。以下のように、厳密に解けるモデルを考える。

$$H = \epsilon_0 c_0^\dagger c_0 + \epsilon_1 c_1^\dagger c_1 + V(c_0^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_0) \quad (5)$$

ここで、モデル空間として、フェルミ粒子が下のレベル 0 にある状態を選ぶ。すると有効ハミルトニアン (実際にはエネルギー固有値) は以下の方程式で与えられる。

$$\langle 0 | H_{\text{eff}} | 0 \rangle = \epsilon_0 + \frac{V^2}{E - \epsilon_1} = E \quad (6)$$

この固有値 E は二次方程式の解として

$$E = \frac{1}{2}(\epsilon_0 + \epsilon_1) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\epsilon_1 - \epsilon_0)^2 + V^2} \quad (7)$$

と求まる。この解は厳密であり、もちろん通常の対角化で求めた結果と一致する。

2.2 Rayleigh-Schrödinger 摂動論

以上述べた枠組みを、Brillouin-Wigner の摂動論と呼ぶ。この枠組みでの有効ハミルトニアンは、求めるべきエネルギーに依存している。このエネルギー依存性は、摂動論を高次まで行うときには、不便になる。このよう

な不便を解消するのが, Rayleigh-Schrödinger の摂動論である。まずシュレーディンガー方程式を次のように書き直す。

$$(E - H_0)\psi = E\psi - H_0\Omega P\psi = V\Omega P\psi, \quad (8)$$

ここで射影演算子 Ω は, $H_0 + V$ の固有状態に対して, $\Omega P\psi = \psi$ を満たすことを用いた。また状態を指定する添え字 i は省いた。式 (8) の両辺に演算子 P をかけ, さらに Ω をかけると, 次の形を得る。

$$\Omega(E - H_0)P\psi = E\psi - \Omega H_0 P\psi = \Omega P V \Omega P\psi, \quad (9)$$

ここで, $PH_0 = H_0P$ の性質を用いた。式 (9) を式 (8) から引くと,

$$[\Omega, H_0]P\psi = (1 - \Omega P)V\Omega P\psi \quad (10)$$

を得る。

射影演算子を, $\Omega = \Omega_0 + \Omega_1 + \Omega_2 + \dots$ のように級数展開する。ここで, Ω_n は $O(V^n)$ の寄与を表し, $\Omega_0 = 1$ である。式 (10) の両辺で同じ次数の項を比較して,

$$[\Omega_n, H_0] = QV\Omega_{n-1} - \sum_{j=1}^{n-1} \Omega_j P V \Omega_{n-j-1} \quad (11)$$

を得る。この結果を用いると, 一般項 Ω_n を低次の側から逐次求めることができる。また有効ハミルトニアンを展開形 $H_{\text{eff}} = P(H_0 + V)P + H_2 + H_3 + \dots$ において, $H_n = P V \Omega_{n-1} P$ の関係を用いると, Ω_n の知識から H_n を求めることができる。低次の項をあからさみに示すと, 次のようになる。

$$\langle a | H_2 | b \rangle = \langle a | V (\epsilon_b - H_0)^{-1} Q V | b \rangle, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \langle a | H_3 | b \rangle &= \langle a | V \frac{1}{\epsilon_b - H_0} Q V \frac{1}{\epsilon_b - H_0} Q V | b \rangle \\ &- \sum_c \langle a | V \frac{1}{\epsilon_b - H_0} \frac{1}{\epsilon_c - H_0} Q V | c \rangle \langle c | V | b \rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

ここで, $|a\rangle, |b\rangle$ で示されるすべての状態は, モデル空間に属する。eq.(13) で, 右辺第一項は Brillouin-Wigner 摂動論の結果と同じであるが, 第二項は新しく現れたものである。この新しい項は, 高次のクラスター展開をする際には重要な役割を果たす。これについては残念ながら詳しく述べる紙数がないが, 参考文献を参照されたい [2]。

2.3 分子における有効モデル

2.3.1 水素分子

電子の遍歴と局在を議論する際に, 分子の電子状態を復習することが有益である。まず水素分子の簡単なモデル

を考えよう。水素原子の基底状態エネルギーを基準にとり, $2s, 2p$ 励起状態のエネルギーは十分離れているので, $1s$ 波動関数が隣に移動することによる効果だけを残す。以下のモデルを考える。

$$H_2 = -t \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma}) + U(n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow}). \quad (14)$$

ここで $c_{i\sigma}^{\dagger}$ は陽子 i に束縛された $1s$ 電子 (スピン σ) の生成演算子である。 $-t$ は波動関数の重なりによる効果, U は $(1s)^2$ 状態に伴うクーロンエネルギーである。

このモデルは, 実は 2 サイト系のハバードモデル [8] に他ならない。2 サイト系なので, 任意の U に対して厳密に解ける。物理的描像をはっきりさせるために, 二つの極限 $t \gg U$, および $0 < t \ll U$ を考える。 $U = 0$ であれば, 1 電子の固有エネルギーは $\pm t$ となる。これらに対応する波動関数を, それぞれ結合軌道, 反結合軌道と呼ぶ。これらは総称して分子軌道と呼ばれる。2 個の電子のスピンが異なっていれば, 結合軌道に 2 個の電子が入ることができ, これが基底状態である。全体のスピンは 0 (単重項) になる。 U が有限であっても, その値が小さければ, 影響は小さい。

一方 $t = 0$ であれば, それぞれの電子状態は水素原子の場合と同じである。基底状態はスピン配置によらないので 4 重に縮退しているが, 少しでも $t \neq 0$ がいっていると縮退が解ける。この状況を記述するのが Heitler-London の描像である。スピン配置を議論するには, 有効ハミルトニアンの方が便利である。前章の結果を用いると, t を含む項を摂動項と見て

$$H_{\text{eff}} = J \left(S_1 \cdot S_2 - \frac{1}{4} \right), \quad (15)$$

が得られる。ここで $J = 4t^2/U$ である。 $J > 0$ なので, 基底状態はスピン単重項になる。単重項だけが $(1s)^2$ の中間状態を許し, 摂動エネルギーを稼ぐからである。

以上のように, 分子軌道の描像と Heitler-London の描像はともに, 単重項の基底状態を与える。この単純なモデルでは, 任意の U/t の値に対して, 厳密な基底状態エネルギー E_0 を求めることができ,

$$E_0 = \frac{1}{2}U - \sqrt{\frac{1}{4}U^2 + 4t^2} \quad (16)$$

となる。この解で, $U/t \rightarrow 0, \infty$ における極限值は, それぞれ $-2t, -4t^2/U$ となる。すなわち, 分子軌道描像と Heitler-London 描像は実際に連続的につながっている。結晶の場合には, 前者は遍歴極限, 後者は局在極限を表わす。すなわち, 電子の状態は遍歴極限から局在極限まで滑らかに変化できることを強調したい。このこと

は Pr^{3+} の $4f^2$ 状態など、原子あたり偶数の強相関電子を持つ系の遍歴と局在を議論する際に思い出すべきことである。

2.3.2 酸素分子

酸素分子 O_2 がスピン 1 の常磁性分子であることはよく知られている。この理由を簡単なモデルで解明しよう。中性酸素原子の電子配置は $(2p)^4$ である。これを $2p$ 軌道に 2 個のホールがある状態と解釈する。分子が z 軸方向に並んでいるとすると、 $2p_z$ 軌道は反結合軌道になり、原子あたりホール 1 個 (分子あたり 2 個) が占有する。残りのホール (原子あたり 1 個) は $2p_x, 2p_y$ のどちらかに入る。これらの軌道は結合軸に垂直な広がりを持ち、縮退している。波動関数の模式図を図 4 に示す。

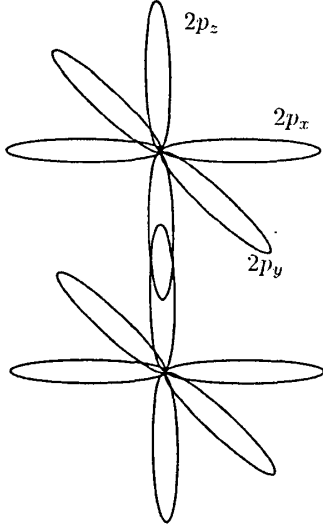


図 4: 酸素分子の $2p$ ホール波動関数の広がり。 $2p_x, 2p_y$ 軌道のいずれかに原子あたり 1 個のホールが入る。

酸素分子の磁性を議論するには、 $2p_x, 2p_y$ 軌道のホールだけを考慮して、以下のようなモデルを考えるのが便利である。

$$H = -t \sum_{\alpha\sigma} \left(p_{1\alpha\sigma}^\dagger p_{2\alpha\sigma} + p_{2\alpha\sigma}^\dagger p_{1\alpha\sigma} \right) + H_{\text{int}}^{(1)} + H_{\text{int}}^{(2)}, \quad (17)$$

$$H_{\text{int}}^{(i)} = U \sum_{\alpha} n_{i\alpha\uparrow} n_{i\alpha\downarrow} + U' n_{ix} n_{iy} \quad (18)$$

$$- J_H \left(\mathbf{S}_{ix} \cdot \mathbf{S}_{iy} + \frac{3}{4} n_{ix} n_{iy} \right). \quad (19)$$

ここで各サイトにおける 2 種類の $2p$ 軌道を区別する添え字を $\alpha (= x, y)$ とし、 $n_{i\alpha}$ はサイト $i (= 1, 2)$, 軌道 α

にあるホールの個数演算子、 $S_{i\alpha}$ はスピン演算子である。また U は同一軌道間のクーロン斥力、 $U' (< U)$ は異なる軌道間のクーロン斥力である。 J_H の項は、 $2p_x, 2p_y$ の両方にホールが入った場合、平行スピン間の斥力を $J_H (> 0)$ だけ小さくするように働き、フント規則に対応している。分子の対称性から、ホッピングは同一軌道間にだけ存在することに注意する。

この系で $U > U' \gg t > 0$ を仮定して 16 個の固有状態すべてのエネルギーを求めてみる。軌道の自由度を擬スピン τ として扱うことにより、計算が簡単になる。即ちサイト i に対して、

$$\tau_i = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \sum_{\rho} p_{i\mu\rho}^\dagger \sigma_{\mu\nu} p_{i\nu\rho}$$

と定義すると、軌道自由度に対しても、スピンと同様に軌道単重項 $L_\tau = 0$ と軌道三重項 $L_\tau = 1$ で $2 \times 2 = 4$ 通りの軌道の組み合わせを表現できる。 t に関する 2 次の摂動論を行なうと、正孔対のエネルギー E_{pair} は次のように求められる:

$$E_{\text{pair}} = \begin{cases} 0, & (L_\tau = 1, S = 1) \\ -4t^2/U, & (L_\tau = 1, S = 0) \\ -4t^2/(U' - J_H), & (L_\tau = 0, S = 1) \\ -4t^2/U'. & (L_\tau = 0, S = 0) \end{cases} \quad (20)$$

図 5 はこの摂動過程を模式的に示したものである。正孔が酸素原子 j から i に跳び移る過程も同様に存在するので、因子として 4 が t^2 につく。式 (20) の結果から、相互作用エネルギーを最も有利にするのは、異なる軌道にスピン 3 重項を形成する配置 ($L_\tau = 0, S = 1$) であることがわかる。スピンのそろう理由は、フント規則により中間状態のエネルギーが低くなるからである。

さて、有効ハミルトニアンを出すために次のような射影演算子を導入する:

$$P(L_\tau = 1) = \tau_1 \cdot \tau_2 + \frac{3}{4}$$

$$P(L_\tau = 0) = -\tau_1 \cdot \tau_2 + \frac{1}{4}.$$

これは、スピンに対する射影演算子で $S \rightarrow \tau$ の置き換えをしたものである。スピンに対しても同様な射影演算子を用いて、各配置のエネルギーと対照させると、有効ハミルトニアンとして、次の形

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} [J_O \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + K \tau_i \cdot \tau_j + I (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) (\tau_i \cdot \tau_j)], \quad (21)$$

が得られる。ここで、各相互作用定数は

$$\begin{aligned} J_O &= t^2 \left(-\frac{1}{U' - J_H} + \frac{1}{U'} + \frac{3}{U} \right), \\ K &= t^2 \left(\frac{3}{U' - J_H} + \frac{1}{U'} - \frac{1}{U} \right), \\ I &= 4t^2 \left(\frac{1}{U' - J_H} - \frac{1}{U'} + \frac{1}{U} \right), \end{aligned}$$

のように与えられる。

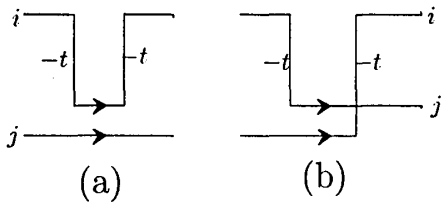


図 5: 仮想ホッピングによるスピンと軌道自由度の交換過程。正孔が酸素原子 i から j へ跳ぶ過程を示す。

式 (21) で与えられるモデルは、ヤーン・テラーイオンを持つペロブスカイト型酸化物に関係して古くから議論されている [9, 10]。このような絶縁体化合物では、高温相が立方晶構造でも、自発的な対称性低下で低次元磁性が生ずる。この原因は、軌道が交替的な秩序状態に入り、スピンがそれに合わせて強磁性的に揃うことによるエネルギーの低下である。例えば LaMnO_3 では、Mn の局在 3d 軌道に縮退があり、異なる形の波動関数が縮退している。この縮退は立方対称性より低い対称性の下では解け、エネルギーの利得が生ずる。この結果、結晶全体として対称性が低下することが有り得る。これは協力的ヤーン・テラー効果と呼ばれている。ペロブスカイト系では、軌道整列の直接的証拠は見出されていないが、格子の歪み、異方的磁気構造の自発的生成などでその存在は確実視されている。最近では、特殊な回折実験により、軌道秩序を直接観測する努力がなされている。

2.3.3 遍歴と局在の分子モデル

酸素分子のモデル式 (19) で、 $t \gg U, U', J_H > 0$ の場合を考える。固有値 $-t$ を持つ p_x, p_y の反結合軌道（正孔の結合軌道）だけを残すと、軌道縮退のために、4 つのスピン・軌道状態に 2 個の正孔を占有させる自由度がある。相互作用が 0 の極限では基底状態は 6 重縮退している。 J_H などがあると、この縮退が解け、量子数 $L_\tau = 1, S = 0$ の状態と $L_\tau = 0, S = 1$ の状態に分裂する。それぞれの状態は 3 重縮退している。

相互作用により、それぞれの固有エネルギーは

$$E(L_\tau = 1, S = 0) = \frac{U}{2}, \quad E(L_\tau = 0, S = 1) = \frac{U'}{2} - J_H, \quad (22)$$

だけずれる。したがって、弱結合の極限でもやはりスピン 3 重項、軌道単重項が基底状態になる。この基底状態は、局在スピン 3 重項の極限とつながっている。すなわち、水素分子モデルの基底状態が、Heitler-London(強結合) 極限から分子軌道 (弱結合) 極限まで連続的につながっているように、軌道縮退 (酸素分子) モデルでは、強磁性状態が強結合から弱結合の極限まで連続的につながっている。弱結合極限は、分子の構成原子数を増やしていくと、遍歴強磁性の状態につながる、と考えられる。

ちなみに、イオウは $(3p)^4$ の電子配置を持ち、その分子 S_2 は、酸素分子に比べて t/U が大きいと考えられる。 $3p$ 波動関数のほうが、 $2p$ よりも広がっているからである。イオウ分子もスピン 1 を持つ常磁性分子であることが知られている。

3 近藤効果

3.1 Anderson モデルと近藤モデル

磁性不純物を記述するための、最も基本的なモデルとして Anderson モデルがある [11]。もともと単純なバリエーションでは、局在電子として軌道縮退がないものを取り、それと混合する伝導電子としては、s 波のものを考える。局在電子の間には、クーロン相互作用 U が働くものとする。Anderson モデルは次のように与えられる。

$$\begin{aligned} H_A &= \sum_{k\sigma} [\epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \frac{1}{\sqrt{N}} V_k (c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma + f_\sigma^\dagger c_{k\sigma})] \\ &+ \sum_{\sigma} \epsilon_f f_\sigma^\dagger f_\sigma + \frac{1}{2} U \sum_{\sigma \neq \sigma'} n_{f\sigma} n_{f\sigma'} \end{aligned} \quad (23)$$

ここで、 V_k は、混成の大きさであり、 N は、格子点の数である。Anderson モデルは、近藤効果を含んでおり、これを正確に解くことは、非常に困難である。

さて、f 電子のレベル ϵ_f が、フェルミレベルよりも非常に深いところにあり、大きなクーロン相互作用のために、2 番目の電子がとるレベル $\epsilon_f + U$ は、フェルミレベルよりも上にある状況を考えよう。このような場合には、f 電子の占有数はほとんど 1 であり、これの揺らぎは無視できる。するとモデル空間としては、局在電子が空の状態と、これが 2 個ある状態を排除してよいので、局在電子の自由度として残るのはスピンだけになる。この事情ををあらかじめ考慮した有効ハミルトニアンを

導いてみよう。混成相互作用 H_{hyb} は、モデル空間とそれに直交する空間を結ぶ。従って、最低次の有効相互作用は以下ようになる。

$$H_{int} = PH_{hyb}(E_g - H_c - H_f)^{-1}QH_{hyb}P. \quad (24)$$

ここで E_g は、ゼロ次の基底状態エネルギーである。 H_c, H_f はそれぞれ伝導電子の運動エネルギー部分と、混成のない f 電子のハミルトニアンである。また P に直交する中間状態は、空か二重占有のどちらかである。

伝導電子が、 f 電子と混成して、二重占有の状態に移れるのは、両者の全スピンの 0 のときだけである。二重占有状態から、伝導電子と f 電子に別れるときには、各々のスピンの混成前と反転する場合と、そのまま変わらない場合とがある。前者は、交換相互作用と呼ばれる。これを計算すると、有効モデルは次のように与えられる。

$$H_{eff} = H_c + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sum_{\mathbf{k}'\beta} [\frac{1}{2} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} S \cdot \sigma_{\beta\alpha} c_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} + K_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha}], \quad (25)$$

ここで、 S は不純物スピンの演算子であり、交換相互作用は

$$J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 2V_{\mathbf{k}}V_{\mathbf{k}'} [\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_f} - \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_f - U}], \quad (26)$$

である。一方スピンの変わらない過程に利く相互作用は以下のように与えられる。

$$K_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{2} V_{\mathbf{k}}V_{\mathbf{k}'} [\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_f} + \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_f - U}]. \quad (27)$$

このモデル H_{eff} は、さらに簡単化することができる。即ち、 $V_{\mathbf{k}}$ を波数によらない定数 V で置き換え、散乱に関与する伝導電子のエネルギー $\epsilon_{\mathbf{k}}$ などを ϵ_f や $\epsilon_f + U$ に比べて無視することである。特別な場合として、 $\epsilon_f + U = |\epsilon_f|$ が成り立っていると（「対称の場合」と呼ばれる）、 $K_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ は消える。この場合交換相互作用は、 $J = 2V^2/|\epsilon_f|$ と与えられる。このモデルを、近藤モデル（あるいは $s-d$ モデル）と呼ぶ [12]。

以上をまとめると、不純物サイトにおける伝導電子のスピンの演算子を s_c として、近藤モデルは

$$H_K = H_c + JS \cdot s_c = H_c + H_{ex}, \quad (28)$$

と与えられる。運動量表示では、

$$s_c = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\mu\nu} c_{\mathbf{k}\mu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} c_{\mathbf{k}'\nu} \quad (29)$$

である。

近藤モデルは Anderson モデルよりもさらに簡単な形をしているが、 J がどんなに小さくても、これについての摂動論が破たんするという驚くべき性質がある [12, 13]。一方温度が交換相互作用よりも高いと、 J についての摂動論を行うのが最も簡便であり便利である。ここで注意すべきことは、Anderson モデルの自然な展開パラメータ U と、近藤モデルの展開パラメータ J は、互いに異なる無摂動状態を持っているということである。繰り込みによって、初めて両者の基底状態が連続的につながるようになる。これらの詳しい解析は次の章で行うが、関連するモデルとして、Coqblin-Schrieffer model H_{CS} と呼ばれるモデルを説明しておく [14]。このモデルは次のハミルトニアンで定義される。

$$H_{CS} = H_c + \frac{J}{2} \mathcal{P}_{spin}. \quad (30)$$

ここで $\mathcal{P}_{spin}$ は、伝導電子と局在電子の内部自由度 ν, μ を取り換える演算子である。内部自由度が $SU(2)$ の場合には

$$\mathcal{P}_{spin} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\nu\mu} f_\nu^\dagger f_\mu c_{\mathbf{k}\mu}^\dagger c_{\mathbf{k}'\nu} = 2S \cdot s_c + \frac{1}{2} \hat{n}_f \hat{n}_c \quad (31)$$

と表すことができる。ここで、 $\hat{n}_f (=1)$ は f 電子の、個数演算子であり、 $\hat{n}_c$ は、不純物サイトの、伝導電子の個数演算子である。

3.2 近藤モデルの繰り込み

近藤モデルに対して有効ハミルトニアンの方法を適用しよう [2]。この原型は Anderson による "poor man's scaling" である [15]。まず、伝導バンドは一様なスピンあたり状態密度 $\rho_c = (2D)^{-1}$ を $-D$ から D まで持っているとして仮定する。またフェルミ準位はバンドの中心にあるものとする。つまり $\mu = 0$ 。モデル空間として、バンドのはじめの状態が指定した分だけ排除されたものを考えよう。非常に強力な方法は、この排除の一つの過程を無限小にして微分方程式を適用することである。これを具体的に実行しよう。Rayleigh-Schrödinger の摂動論の最低次では、有効ハミルトニアンは次のように与えられる。

$$H_{eff} = P(H_c + H_{ex})P + PH_{ex}(E_i - H_c)^{-1}QH_{ex}P \quad (32)$$

ここで、 E_g は、 H_c の基底状態エネルギーである。射影演算子 Q として、伝導電子のエネルギーを $[D + \delta D, D]$ および $[-D, -D - \delta D]$ ($\delta D < 0$ は無限小) に投影するものを選ぶ。

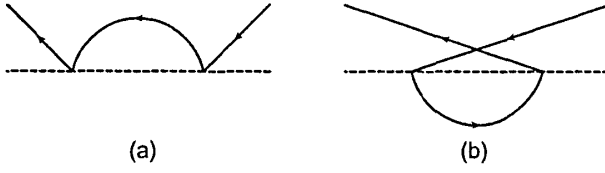


図 6: 2 次の交換散乱過程。実線は伝導電子、波線は不純物スピンを表す。

入射する伝導電子のスピンとして σ , 中間状態として ξ , また散乱状態として σ' を与える。右の部分の散乱においてスピンの成分 $JS^\alpha s_c^\alpha$ を考える。または左の部分では, 成分 $JS^\beta s_c^\beta$ を考えよう。図 6 (a) において, s_c の行列要素は

$$\langle \sigma' | s_c^\beta | \xi \rangle \langle \xi | s_c^\alpha | \sigma \rangle, \quad (33)$$

と与えられる。この過程は直接散乱と呼ばれ, 図 6 (a) に示されている。同様に図 6 (b) は, 交換散乱と呼ばれ, 行列要素は,

$$\langle \sigma' | s_c^\alpha | \xi \rangle \langle \xi | s_c^\beta | \sigma \rangle \quad (34)$$

となる。中間状態のエネルギーは, ξ によらないので, これについての和をとることができる。ここで過程 (b) はフェルミ演算子の交換を伴うので, $-$ の符号がつく。そこで, (a) と (b) の和をとると,

$$\frac{J^2}{-D} \sum_{\alpha\beta} S^\beta S^\alpha [s_c^\beta, s_c^\alpha] \delta D | \rho_c, \quad (35)$$

が 2 次の有効ハミルトニアンとして求められる。 $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ を完全反対称テンソルとして, 次の交換関係

$$[s_c^\beta, s_c^\alpha] = -i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} s_c^\gamma, \quad (36)$$

が成り立つことに注意すると, 有効相互作用ハミルトニアンは, もとの交換相互作用 H_{ex} と同じ形をしていて, 相互作用の強さだけが異なっているとわかる。そこで, 相互作用の変化分 δJ として,

$$\delta J = -\frac{\delta D}{D} J^2 \rho_c \quad (37)$$

という関係式が得られる。これはスケーリング方程式, あるいは繰り込み群方程式と呼ばれる。

このように有効バンド幅を狭くする操作を繰り返す。有効バンド幅 $2D_{eff}$ が興味を持っているエネルギー尺度よりも十分大きければ, 繰り込みの各ステップで, 最低次の摂動論を正当化することができる。このような条件のもとで, スケーリング方程式を積分して,

$$J_{eff} = \frac{J}{1 - J\rho_c \ln(D/D_{eff})} \quad (38)$$

を得る。ここで境界条件として, $D_{eff} = D$ で $J_{eff} = J$ となることを用いた。

J_{eff} の最も重要な性質は, D_{eff} の減少とともに次第に増大し, $D_{eff} = D \exp[-1/(J\rho_c)]$ になると発散することである。この特性エネルギー $D \exp[-1/(J\rho_c)]$ を温度スケールで表したものを, 近藤温度 T_K と呼ぶ。後で見ると, T_K は, 帯磁率や比熱などの物理量を決定する。 T_K は交換相互作用で展開できない形をしていることに注意する。上の議論から明らかなように, 繰り込みが $D_{eff} = T_K$ に至るまで有効という保証はない。従って, J_{eff} の発散は字義通りに解釈すべきではない。むしろ, エネルギー尺度を小さくすると T_K 程度で摂動論が破たんするということを言っている。

系の温度 T が T_K よりも十分大きい場合には, 熱的に励起された伝導電子を考える必要がある。この効果を考慮すると, 繰り込みにおいて D_{eff} が温度 T と同程度になった時点で, 有効バンド幅はそれ以上小さくできないことがわかる。従って温度 T での有効相互作用は次のように与えられる。

$$J_{eff}(T) = \frac{J}{1 - J\rho_c \ln(D/T)}. \quad (39)$$

電気抵抗や帯磁率などの物理量の摂動計算において, もともとの J をここで求めた $J_{eff}(T)$ で置き換えると, 高次の摂動効果を取り入れた結果が得られる。

この事情を抵抗率 ρ の場合をとって説明しよう。金属に対する最も簡単な伝導理論によると, 電気伝導度 $\sigma = 1/\rho$ は, 緩和時間 τ を用いて次のように書ける。

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}, \quad (40)$$

ここで, n は有効質量 m^* を持つ伝導電子の密度である。ボルン近似によると,

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi c_{imp} J^2 \rho_c \sum_{\alpha} \langle S_{\alpha}^2 s_{\alpha}^2 \rangle = \frac{3\pi}{8} c_{imp} J^2 \rho_c, \quad (41)$$

が得られる。ここで c_{imp} は, 磁性不純物の密度である。ボルン近似では, 高いエネルギーを持つ中間状態の存在は考慮していないが, これらの状態は, 繰り込みによって低エネルギー状態に影響を与える。 $J_{eff}(T)$ を J の代わりに用いることにより, 高いエネルギーを持つ中間状態の効果が取り入れられる。このような置き換えにより

$$\rho(T) = \frac{\rho_0}{[1 - J\rho_c \ln(D/T)]^2} = \frac{\rho_0}{[J\rho_c \ln(T/T_K)]^2} \quad (42)$$

という結果を得る。ここでボルン近似での抵抗率を ρ_0 とした。この結果は, 摂動級数を無限次まで和をとった結果と一致する [16]。また通常の摂動論において, $O(J^3)$ までとった近藤のオリジナルな結果 [12] を再現する。

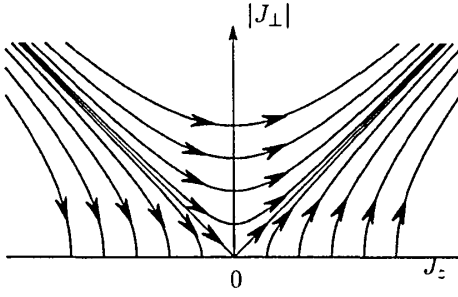


図 7: 繰り込みによる有効相互作用の変化

3.3 異方的近藤モデルの繰り込み

近藤モデルの固定点 $J \rightarrow \infty$ は、アンダーソンモデルで見ると $U \rightarrow 0$ の状態に相当する。すなわち、近藤モデルの不純物電子には局在スピンの自由度だけを残したのにもかかわらず、繰り込みによって伝導電子と混成するほとんど自由な電子になってしまった。すなわち、遍歴性を獲得したと解釈できる。

近藤モデルをアンダーソンモデルの有効ハミルトニアンと見ると、 $J > 0$ であるが、一般には、クーロン相互作用に起因する交換相互作用もあるので、 J が負になる系もある。繰り込みの方程式は、 J の符号によらず成立する。 $J < 0$ の場合には、繰り込まれた相互作用が、もとの相互作用よりも小さくなる。これは、磁性不純物と伝導電子の相互作用が低温では消失し、孤立スピンの状態が現れることを意味する。

孤立スピンの伴う帯磁率のキュリー則 $\chi = C/T$ は局在電子の典型的挙動である。絶対零度の性質を見ると、 $J > 0$ の基底状態は磁性不純物の電子が遍歴的な極限とつながっているので $J = 0$ で遍歴と局在の状態が不連続的に変わっていることになる。この不連続性は、単位胞あたり奇数の電子を持つ系の特徴である。

この変化を見るには、交換相互作用を異方的にして

$$H_{\text{ex}} = J_{\perp}(S_x s_x + S_y s_y) + J_z S_z s_z, \quad (43)$$

をとるのがわかりやすい。スケール方程式は式 (37) を少し変更して

$$\delta J_z = -\frac{\delta D}{D} J_{\perp}^2 \rho_c, \quad \delta J_{\perp} = -\frac{\delta D}{D} J_z J_{\perp} \rho_c \quad (44)$$

と与えられる。これを積分すると、 $J_{\perp}^2 - J_z^2 = \text{const.}$ という $(J_z, J_{\perp})$ 平面での双曲線が得られる。すなわち、図 7 に示すような繰り込みの流れを得る。

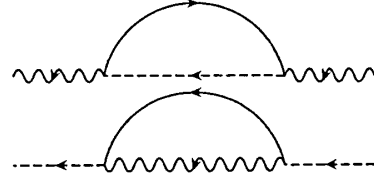


図 8: 最低次の有効ポテンシャル。波線は f 電子が空の状態、波線は占有状態を示す。

3.4 近藤系の基底状態

Anderson モデルの固定点はスピン単重項であり、 f 電子が空の状態と連続的につながっている。軌道縮退 n が大きい極限から考えると、この事情を直感的に理解できる。すなわち Anderson モデルにおいては $1/n$ を展開パラメータとする摂動論が収束すると期待される。小さいパラメータ $1/n$ は混成相互作用のスケールングとして現れる。ここで、混成相互作用に関する摂動論が、高温では局在電子からの自然な展開になる事情を考慮すると、 $1/n$ 展開はすべての温度領域で有効になることが予想される。

Anderson モデル H_A において、スピンの添え字 σ が n 通りの値をとり、 U が無限大である場合を考える。このモデルは $SU(n)$ Anderson モデルと呼ばれている。すなわち

$$H_{SU(n)} = H_c + H_f + H_{hyb} \quad (45)$$

で混成の強度 $W_0(\epsilon)$ を

$$W_0(\epsilon) = \frac{1}{N} \sum_k |V_k|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_k), \quad (46)$$

によって導入する。ここで混成強度は $-D < \epsilon < D$ では定数 W_0 をとり、これから外れると 0 になると仮定する。今 nW_0 をエネルギーの単位に取り、Brillouin-Wigner の摂動論を用いる。モデル空間を単重項にとると有効相互作用は $O(1)$ になる。その理由は f 電子の中間状態として n 通りの状態が可能だからである。それに対して、別のモデル空間として多重項状態（局在電子の状態）をとると、 f 電子の中間状態としては空の状態一つだけが可能である。この様子は図 8 に示されている。

単重項の基底状態エネルギー E_0 は、伝導電子だけの基底状態から測って

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle 0 | H_{hyb} (E_0 - H_c - H_f)^{-1} H_{hyb} | 0 \rangle \\ &= nW_0 \int_{-D}^0 \frac{d\epsilon}{E_0 + \epsilon - \epsilon_f} \end{aligned} \quad (47)$$

のように与えられる。極端な場合として $nW_0 \ll |\epsilon_f| \ll D$, をとると, E_0 は解析的に求まる。即ち

$$E_0 - \epsilon_f \equiv -T_0 = -D \exp\left(\frac{\epsilon_f}{nW_0}\right) \quad (48)$$

である [17]。一方, 多重項状態 (局在状態) から出発すると, 中間状態がひとつしかないのでエネルギーの補正は $O(1/n)$ の程度である。従って多重項状態のエネルギー ϵ_f は, 単重項状態のエネルギー E_0 よりも T_0 の程度だけ高い。このように簡単な計算で, 近藤温度に対応するエネルギー尺度 T_0 を導出できたことは興味深い。

f 電子の平均占有数 n_f が 1 から外れる場合は, 占有数がゆらいでいるので価数揺動と呼ばれる。 n_f は次のように計算される。

$$\begin{aligned} n_f &= \frac{\partial E_0}{\partial \epsilon_f} = nW_0 \int_{-D}^0 d\epsilon \frac{1 - n_f}{(E_0 + \epsilon - \epsilon_f)^2} \\ &\sim \frac{nW_0}{T_0} (1 - n_f). \end{aligned} \quad (49)$$

すなわち,

$$n_f = \left(1 + \frac{T_0}{nW_0}\right)^{-1} \quad (50)$$

である。帯磁率は, 磁場中の基底状態エネルギー $E_0(H)$ を磁場 H に関して 2 回微分する事によって得られる。 $E_0(H)$ は以下のように与えられる。

$$E_0 = W_0 \sum_{Jz} \int_{-D}^0 \frac{d\epsilon}{E_0 + \epsilon - \epsilon_f - gJ\mu_B J_z H}. \quad (51)$$

これを直接計算すると,

$$\chi = C_J n_f / T_0, \quad (52)$$

となる。ここで $C_J = (gJ\mu_B)^2 J(J+1)/3$ は全角運動量が $J = (n-1)/2$ の場合のキュリー定数である。そこで帯磁率もやはり T_0 で決まっていることがわかる。

3.5 近藤系の分子場理論

基底状態を記述する固定点のハミルトニアンがわかると, ある種の分子場理論を行うことができる [18]。 n 重縮退した Anderson モデルで, f 電子が空の状態 $|0\rangle$ を作り出すボソン演算子 $b^\dagger$ と, スピン σ の状態を作り出す演算子 $f_\sigma^\dagger$ を次のように導入する。

$$|0\rangle\langle 0| = b^\dagger b, \quad |\sigma\rangle\langle \sigma| = f_\sigma^\dagger f_\sigma, \quad |\sigma\rangle\langle 0| = f_\sigma^\dagger b. \quad (53)$$

すなわち $b^\dagger$ は仮想的な「真空」に作用して, 物理的な (不純物状態としての) f 電子の空状態を作り出す演算子で

ある。物理的な f 電子の状態は, 必ずこれらの状態のどれか一つに対応するので, 拘束条件 $\sum_\sigma f_\sigma^\dagger f_\sigma + b^\dagger b = 1$ を課す。拘束条件を演算子間の関係式と見なすと f_σ と $f_\sigma^\dagger$ はフェルミオンの交換関係を満たさない。しかし, 拘束条件をフォック空間にある状態の選択則と見なして, 演算子自体は通常のフェルミオンとボソンの交換関係を満たすとする考え方もできる。後者の考え方では, 仮想的なフェルミオンとボソンはスレーブ粒子と呼ばれることがある。

スレーブ粒子を用いた平均場理論では, 拘束条件は統計平均としてだけ満足させる。すなわち

$$\sum_\sigma \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle + \langle b^\dagger b \rangle = 1 \quad (54)$$

である。さらに,

$$\langle b^\dagger b \rangle = |\langle b \rangle|^2 \quad (55)$$

と近似する。ここで現れた平均値 $\langle b \rangle = r$ は, b の位相揺らぎを取り入れた厳密な議論ではゼロになるべきものである。しかし, この揺らぎをひとまず無視して, r を変分を用いて最適化すると, $SU(n)$ Anderson モデルはクーロン相互作用のない別の Anderson モデル H_{MF} に写像される。すなわち,

$$\begin{aligned} H_{MF} &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} [\epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{\sqrt{N}} V_{\mathbf{k}} r (c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_\sigma + f_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma})] \\ &+ \epsilon_f \sum_\sigma f_\sigma^\dagger f_\sigma + \lambda(n_f + r^2 - 1), \end{aligned} \quad (56)$$

ここで λ はラグランジュの未定係数である。また $V_{\mathbf{k}}$ と r は実数にとる。

変分原理は以下のように用いる。任意の演算子 O の平均 $\langle O \rangle$ を, 最適化する統計演算子 $\exp(-\beta H_{MF})$ を用いてとると, ファインマンの不等式

$$\Omega \leq \Omega_{MF} + \langle H_{SU(n)} - H_{MF} \rangle \quad (57)$$

が成立する。右辺の第 2 項は $-\lambda(n_f + r^2 - 1)$ となる。 λ に関する変分をとると, 次の結果を得る。

$$\lambda r = \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}} \langle f_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle. \quad (58)$$

特性温度 T_B ($\sim T_K$) 以上では, $r = 0$ が最適解になるが, この温度以下では $r \neq 0$ の解が存在し, この方がエネルギーが低い。ちなみに $T = T_B$ における相転移は, 平均場理論の不正確さによるもので, 実際には高温からなめらかに低温状態に移行する。絶対零度においては, 平均場理論は Anderson モデルの固定点を正しく与える。そこで以下の議論は $T = 0$ に限定する。

統計平均を計算するには、グリーン関数を用いるのが便利である。f 電子に対するグリーン関数 $G_f^*(z)$ は、 H_{MF} を用いて次のようになる。

$$G_f^*(z) = [z - \bar{\epsilon}_f + i\bar{\Delta}\text{sgn}(\text{Im}z)]^{-1}, \quad (59)$$

ここで $\bar{\epsilon}_f = \epsilon_f + \lambda$ および $\bar{\Delta} = \pi r^2 W_0$ である。この理論の励起は準粒子によると考えられるので関連する物理量にアスタリスク (*) をつける。たとえば状態密度 $\rho_f^*(\epsilon)$ は

$$\rho_f^*(\epsilon) = \frac{\bar{\Delta}}{\pi} \frac{1}{(\epsilon - \bar{\epsilon}_f)^2 + \bar{\Delta}^2} \quad (60)$$

と与えられる。f 電子の占有数 n_f は $\rho_f^*(\epsilon)$ をフェルミ単位まで積分して

$$n_f = \frac{n}{\pi} \arctan\left(\frac{\bar{\Delta}}{\bar{\epsilon}_f}\right) \quad (61)$$

と求められる。

一方、混成グリーン関数 $G_{cf}(k, z) = \langle \{c_{k\sigma}^\dagger, f_\sigma\} \rangle(z)$ は

$$G_{cf}(k, z) = G_{fc}(k, z) = V_{\mathbf{k}} r (z - \epsilon_{\mathbf{k}})^{-1} G_f^*(z) \quad (62)$$

となる。 G_{cf} を用いて少し計算すると、次の結果が求められる。

$$\sum_{k\sigma} V_{\mathbf{k}} \langle f_\sigma^\dagger c_{k\sigma} \rangle = n W_0 r \ln \left(\frac{\sqrt{\bar{\epsilon}_f^2 + \bar{\Delta}^2}}{D} \right), \quad (63)$$

ここで ρ_c と $V_{\mathbf{k}}$ は $D > \epsilon > -D$ では定数、これからはずれるとゼロとした。つまり eq.(58) は

$$\sqrt{\bar{\epsilon}_f^2 + \bar{\Delta}^2} = D \exp\left(\frac{\lambda}{n W_0}\right), \quad (64)$$

と同等である。ここで指数の中の λ は $|\bar{\epsilon}_f| \ll |\epsilon_f|$ を考慮すると $-\epsilon_f$ で置き換えてよい。左辺は系のエネルギー尺度を与える。

分子場理論を用いると静的な物理量を求めることができる。たとえば不純物による比熱は $\rho_f^*(0)$ によって決まる。

$$\rho_f^*(0) = \frac{n\bar{\Delta}}{\pi(\bar{\epsilon}_f^2 + \bar{\Delta}^2)} = \frac{n}{\pi\bar{\Delta}} \sin^2\left(\frac{\pi n_f}{n}\right). \quad (65)$$

比熱係数 γ は、

$$\gamma = \frac{1}{3} \pi^2 \rho_f^*(0), \quad (66)$$

のように求まる。一方帯磁率は

$$\chi = C_J \rho_f^*(0) \rightarrow C_J n_f / T_0 \quad (n \rightarrow \infty), \quad (67)$$

となる。ここで C_J はキュリー定数である。これらの結果は n の大きい極限で正しい。その理由はこの極限でランダウパラメーターが消えるからである。

平均場近似でのグリーン関数 $G_f^*(z)$ と厳密な $G_f(z)$ との関係をみよう。後者は自己エネルギー $\Sigma_f(z)$ を用いると

$$G_f(z) = [z - \epsilon_f + i\Delta\text{sgn}(\text{Im}z) - \Sigma_f(z)]^{-1}, \quad (68)$$

と書ける。ここで $\Delta = \pi W_0$ 。準粒子の寄与を引き出すために $\Sigma_f(z)$ をフェルミ単位 $z = 0$ の周りで展開する:

$$\Sigma_f(z) = \Sigma_f(0) + \frac{\partial \Sigma_f(z)}{\partial z} \Big|_{z=0} z + O(z^2). \quad (69)$$

ここで、フェルミ液体状態では微分は実数になる。すると

$$G_f(z) = a_f G_f^*(z), \quad (70)$$

となる。 $a_f = [1 - \Sigma_f'(0)]^{-1}$ は繰り込み因子と呼ばれる。平均場近似でのグリーン関数 $G_f^*(z)$ との関係は、

$$\Sigma_f(0) = \lambda, \quad a_f = r^2 \quad (71)$$

によってつく。従って、平均場近似は繰り込みを実行する最も単純な枠組みと捉えることができる。

4 1次元電子系とボソン化

4.1 調和振動する弦の量子論

相互作用する量子多体系の議論をするには、自由ボソン系の準備も必要である。まず調和振動する弦の量子論を復習する。自由なボソン系を

$$H_B = \sum_{q \neq 0} \omega_q \left(n_q + \frac{1}{2}\right), \quad n_q = b_q^\dagger b_q, \quad (72)$$

とする。長さ L 、質量密度 ρ の弦に周期的境界条件を課すと、振幅 $\Phi(x)$ と共役運動量 $\Pi(x)$ は以下のように与えられる。

$$\Phi(x) = \sum_{q \neq 0} \frac{1}{\sqrt{2\omega_q \rho L}} (b_q + b_{-q}^\dagger) \exp(iqx), \quad (73)$$

$$\begin{aligned} \Pi(x) &= i\rho[H_B, \Phi(x)] \\ &= \sum_{q \neq 0} \sqrt{\frac{\rho\omega_q}{2L}} i(b_q - b_{-q}^\dagger) \exp(iqx) \end{aligned} \quad (74)$$

これらは、正準交換関係

$$[\Phi(x), \Pi(y)] = i\delta(x - y) \quad (75)$$

を満たす。 $\Phi(x)$ は場の座標, $\Pi(x)$ は場の運動量である。今後扱うのは, もっぱら音響フォノン $\omega_q = v|q|$ である。この場合には, 弦の張力を適当に選ぶと $\rho = 1/v$ にとれるので, ハミルトニアンは簡単になり

$$H_B = \frac{v}{2} \int_0^L dx \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 + \Pi(x)^2 \right] \quad (76)$$

と書ける。後に出てくるように, フェルミ粒子の位相場 $\theta_N(x)$ は

$$\theta_N(x) = \sqrt{4\pi} \Phi(x), \quad \Pi_\theta(x) = (4\pi)^{-1/2} \Pi(x) \quad (77)$$

と導入される。定義から θ_N, Π_θ も, 正準交換関係を満足することがわかる。位相場を用いたハミルトニアンは

$$H_B = \frac{v}{2} \int_0^L dx \left[\frac{1}{4\pi} \left(\frac{\partial \theta_N}{\partial x} \right)^2 + 4\pi \Pi_\theta^2 \right] \quad (78)$$

ともかける。

ボソンの生成消滅演算子 $b^\dagger, b$ の満たす有用な関係式をいくつかあげよう。まず, 任意の複素数 α, β に対して

$$[b, \exp(\alpha b^\dagger)] = \alpha \exp(\alpha b^\dagger), \quad (79)$$

$$[b^\dagger, \exp(\beta b)] = -\beta \exp(\beta b). \quad (80)$$

これらは, 指数関数を級数展開して $[b^n, b^\dagger] = nb^{n-1}$ を用いると確かめられる。真空を $|0\rangle$ と書くと $|\alpha\rangle \equiv \exp(\alpha b^\dagger)|0\rangle$ は, 異なる個数のボソン状態を重ね合わせたものであり, コヒーレント状態と呼ばれる。式 (79) から,

$$b \exp(\alpha b^\dagger)|0\rangle = [b, \exp(\alpha b^\dagger)]|0\rangle = b|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

が得られる。すなわち, コヒーレント状態は b の固有状態である。次の有用な関係式は,

$$\begin{aligned} \exp(\alpha b^\dagger) \exp(\beta b) &= \exp\left(\alpha b^\dagger + \beta b - \frac{1}{2}\alpha\beta\right) \\ &= \exp(\beta b) \exp(\alpha b^\dagger - \alpha\beta) \end{aligned} \quad (81)$$

である。これも, $[b, b^\dagger] = 1$ の帰結である。さらに, 統計平均 $\langle \dots \rangle$ に関して

$$\langle \exp(\alpha b^\dagger + \beta b) \rangle = \exp\left[\alpha\beta \left(\langle b^\dagger b \rangle + \frac{1}{2}\right)\right] \quad (82)$$

が得られる。これは, Bloch-de Dominicis の定理の一表現であり, $b^\dagger b$ の高次キュミュラントが 0 になることに由来する。この性質は, ガウス分布と同様である。

演算子 A, B が $b, b^\dagger$ の線形結合であれば, $[A, B]$ は c -数になるので, 式 (81), (82) を組み合わせると以下の関係を得る。

$$\langle e^{A+B} \rangle = \exp\left(\frac{1}{2}(A^2 + B^2) + AB\right) \quad (83)$$

この結果は, 後に相関関数を計算するときに重宝になる。

4.2 自由フェルミ気体のボソン化

1 次元の電子系が強い相互作用効果を示すことは古くから知られていたが, 朝永振一郎は相互作用の効果を巧妙な方法で取り入れた [19]。朝永理論を説明するために, まずスピンのない自由フェルミ気体を考える。普通の方法で解けば, いたって簡単なモデルであるが, わざわざ重装備にするのは, 遠くまで行く準備のためである。ハミルトニアンは

$$H_0 = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k \quad (84)$$

となる。連続体では適当な単位系で $\epsilon_k = k^2 - k_F^2$ となる。これが, 朝永の考えた場合に相当する。一方, 格子モデルで強束縛近似をとると, $\epsilon_k = -2t \cos k$ とできる。この場合, k はブリルアンゾーンの境界 $\pm\pi$ の中に制限する。ただし, 格子定数を 1 とした。フェルミ波数 k_F の近傍だけが重要な場合には, そのまわりで ϵ_k を展開することが許される。すなわち,

$$\begin{aligned} \epsilon_k &\sim (k - k_F)v_F, & (k \sim k_F) \\ \epsilon_k &\sim -(k + k_F)v_F, & (k \sim -k_F) \end{aligned} \quad (85)$$

と近似する。この様子は, 図 4.2 に示されている。ここで, $k = \pm k_F$ で引いた接線は, 線形スペクトル近似を表す。

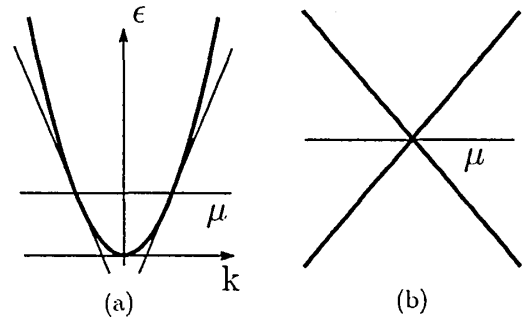


図 9: 1 次元電子のスペクトル。(a) 自由電子, (b) Luttinger モデル。(a) で線形に近似したスペクトル (細線) を $\epsilon \rightarrow -\infty$ まで外挿すると, 正負の運動量の原点を $\pm k_F$ ずらした上で (b) のスペクトルを得る。

朝永の方法で, 本質的な役割を果たす量は次の密度演算子である。

$$\rho_\pm(q) = \sum_k c_{\pm, k}^\dagger c_{\pm, k+q}, \quad (86)$$

ここで, $\pm$ はフェルミ波数付近の運動量が正か負かを示す。 $\pm$ の代わりに c_{Rk}, c_{Lk} のように R と L で表すこと

もある。座標空間で定義した真の密度演算子は、もちろん互いに可換であるが、上で定義した分枝ごとの密度演算子は、次のような交換関係を満たす。

$$[\rho_\alpha(q), \rho_{\alpha'}(-q')] = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{qq'} \alpha N_q. \quad (87)$$

ここで、 $N_q = qL/(2\pi)$ と定義した。密度演算子が交換しないのは、非常に奇妙なことである。なぜ、このような非可換性が生ずるかを見よう。波数が取り得る下限を k_0 とすると、交換関係は以下のように計算される。

$$[\rho_R(q), \rho_R(-q)] = \sum_k (\hat{n}_{k-q} - \hat{n}_k) = \sum_{k_0 - q \leq k < k_0} \hat{n}_k = N_q \quad (88)$$

ここで注意すべきことは、元々発散している和の引き算から有限の結果を出していることである。結果は k_0 に依存しない。朝永は、バンドの底付近の電子分布は相互作用によって影響されないと考えて、 k_0 として十分小さいものを考えて正しい交換関係に至っている。一方、Luttinger は図 4.2(b) のスペクトルを定義通りに持つ有限系を考えたので、この交換関係は 0 とした。これ自体は正しいことであるが、負のエネルギー状態が無限個ある中に有限粒子系を詰めようとする、基底状態が定義できない。従って、無限自由度の問題に直面せざるを得ないが、この場合、もはや有限系の交換関係は成立しないのである。このパラドックスを quantum anomaly と呼ぶ [5]。この問題のデリケートさは、Luttinger さえも間違えてしまったことでもうかがえる [20, 21]。我々は常に有限自由度で考察を進めることにする。

さて、運動エネルギー eq.(84) と密度演算子の交換関係は簡単な計算から

$$[H_0, \rho_\alpha(q)] = v_F \alpha q \rho_\alpha(q) \quad (89)$$

となるが、eq.(88) を用いると次の形

$$H_B = \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{q>0, \alpha=\pm} : \rho_\alpha(q) \rho_\alpha(-q) : \quad (90)$$

も全く同じ交換関係をもたらすことがわかる。ここで、コロンは normal order と呼ばれるもので、基底状態に作用すると 0 になる演算子があればこれを右側に移すことを意味する。具体的には

$$: \rho_\alpha(q) \rho_\alpha(-q) : \equiv \begin{cases} \rho_R(-q) \rho_R(q) & (\alpha = R) \\ \rho_L(q) \rho_L(-q) & (\alpha = L). \end{cases} \quad (91)$$

そこで、 H_0 を H_B で置き換えても、密度演算子の運動として同一のものが得られる。これが朝永の方法の核心である。

ボソン演算子 $b_q, b_q^\dagger$ を導入して、密度演算子を表現しよう。 $q > 0$ とすると以下のように対応する。

$$\begin{aligned} \rho_R(q) &= \sqrt{N_q} b_q, & \rho_R(-q) &= \sqrt{N_q} b_q^\dagger, \\ \rho_L(q) &= \sqrt{N_q} b_{-q}^\dagger, & \rho_L(-q) &= \sqrt{N_q} b_{-q}. \end{aligned} \quad (92)$$

エルミート演算子 $\theta_{R,L}(x)$ を以下のように導入する。

$$\theta_R(x) = \sum_{q>0} \frac{-i}{\sqrt{N_q}} (b_q e^{iqx} - b_q^\dagger e^{-iqx}) \quad (93)$$

$$\theta_L(x) = \sum_{q>0} \frac{i}{\sqrt{N_q}} (b_{-q} e^{-iqx} - b_{-q}^\dagger e^{iqx}) \quad (94)$$

式 (92) を用いると、次のような関係を得る。

$$\frac{\partial \theta_R}{\partial x} = 2\pi \rho_R(x), \quad \frac{\partial \theta_L}{\partial x} = 2\pi \rho_L(x), \quad (95)$$

$$[\theta_\alpha(x), \frac{\partial \theta_\beta(y)}{\partial y}] = -2\pi i \delta_{\alpha\beta} \delta(x-y) \quad (96)$$

ここで、実空間の密度演算子 $\rho_\alpha(x)$, ($\alpha = R, L$) を

$$\rho_\alpha(x) = \frac{1}{L} \sum_{q \neq 0} \rho_\alpha(q) \exp(iqx)$$

で定義した。周期的境界条件 $\theta_\alpha(x+L) = \theta_\alpha(x)$ のために、密度演算子 $\rho_\alpha(x)$ は一様な成分を含んでいないことに注意する。一様な状態から見て、局所的にフェルミオンが 1 個分だけ増えるごとに θ は 2π 増加する。しかし、全体としては増加分は負の成分で打ち消される。有限のフェルミ粒子数を記述するのは、和から除いた $q=0$ の成分であり、場の理論の言葉では「巻き数」(winding number) と呼ばれる。巻き数が異なる状態は、ボソン励起では混ざることはない。この意味で巻き数はトポロジカルな量と言える。後に説明するように、粒子数に関する効果は $\exp(ik_F x)$ で考慮するのがもっとも簡明であろう。

さて、右と左の分枝を合わせた密度揺らぎと運動量揺らぎを記述するものとして

$$N(q) = \rho_R(q) + \rho_L(q), \quad (97)$$

$$J(q) = \rho_R(q) - \rho_L(q) \quad (98)$$

を導入する。これに応じて、

$$\theta_N(x) = \theta_R(x) + \theta_L(x), \quad (99)$$

$$\theta_J(x) = \theta_R(x) - \theta_L(x), \quad (100)$$

を定義する。こうすると、ハミルトニアンは

$$H_B = \frac{\pi v_F}{L} \sum_{q>0} : N(q) N(-q) + J(q) J(-q) : \quad (101)$$

$$= \frac{v_F}{4\pi} \int_0^L dx : \left(\frac{\partial \theta_N}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta_J}{\partial x} \right)^2 : \quad (102)$$

となる。量子化された弦振動にマップするには、式 (78) と比較して

$$\frac{\partial \theta_J}{\partial x} = 4\pi \Pi_\theta(x) \quad (103)$$

と置けばよい。交換関係

$$[N(q), J(-q')] = 2N_q \delta_{q,q'} \quad (104)$$

から、正準交換関係 (75) が再現される。

4.3 フェルミオンのボソン表現

前節までの議論で、基底状態が存在するようにスペクトルを線形化すると、自由フェルミ気体は $\omega_q = v_F |q|$ のスペクトルを持つ自由ボソン系と等価であることがわかった。しかし、フェルミ演算子をボソンだけで表わすことはできない。なぜなら、ボソンの完全系は、フェルミオンの粒子数が決まったヒルベルト空間で定義されているからである。そこで、 N 粒子の基底状態と $N+1$ 粒子の基底状態を結ぶ演算子さえ導入すれば、ボソンの演算子と組み合わせて任意のフェルミ演算子を構成することができる。この事情はボソン化理論の当初はあいまいにされ、未だに多くの教科書に混乱が残っている。有限サイズ系から熱力学極限をとると、微妙な問題は明快に解決される。以下、Haldane の理論 [22] を整理して [23] 解説する。

式 (92) から、右向きフェルミオン分枝だけ見ると、 $q > 0$ のボソンだけで記述できることがわかる。そこで、まずこの分枝だけに注目して、場の演算子

$$\psi_R(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k c_{Rk} \exp(ikx), \quad (105)$$

を導入する。和に重要な寄与をするのは $k \sim k_F$ の運動量である。交換関係 $[c_{Rk}, \rho_R(q)] = c_{R,k+q}$ を考慮すると、

$$[b_q, \psi_R(x)] = -\frac{1}{\sqrt{N_q}} e^{-iqx} \psi_R(x), \quad (106)$$

$$[b_q^\dagger, \psi_R(x)] = -\frac{1}{\sqrt{N_q}} e^{iqx} \psi_R(x), \quad (107)$$

を得る。式 (79) と比較すると、 $\psi_R(x)$ はボソン b_q のコヒーレント状態を作ることがわかる。任意の $q > 0$ に対してコヒーレント状態を作ることから

$$\begin{aligned} \psi_R(x) &= \exp\left(-\sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{N_q}} b_q^\dagger e^{-iqx}\right) F_R \\ &\times \exp\left(\sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{N_q}} b_q e^{iqx}\right) \langle 0; N_R - 1 | \psi_R(x) | 0; N_R \rangle \end{aligned} \quad (108)$$

が成立する。ここで $|0; N_R\rangle$ は、 N フェルミオン系の基底状態を表わす。 F_R は $\langle 0; N_R - 1 | F_R | 0; N_R \rangle = 1$ で定義される演算子であり、しばしば Klein 因子と呼ばれる。定義から

$$F_R^\dagger F_R = F_R F_R^\dagger = 1 \quad (109)$$

である。式 (108) が正しいことは、(i) ボソンとの交換関係が、式 (106), (107) を満たしていること、(ii) フェルミオン数 $N_R, N_R - 1$ を持つ基底状態ではさんだ行列要素を正しく与えることから確認される。行列要素は、

$$\langle 0; N_R - 1 | \psi_R(x) | 0; N_R \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ik_F x)$$

となる。 k_F はフェルミ波数である。

式 (108) は、normal order の記号を使うと、次のように簡潔に書ける。

$$\psi_R(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} : \exp[i\theta_R(x) + ik_F x] : F_R \quad (110)$$

ここで、 $\theta_R(x)$ は式 (93) で与えられている。多くの文献では、式 (110) に相当する関係が無限小量 η を用いて以下のように表わされている [24]。

$$\psi_R(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\eta}} \exp[i\theta_R(x) + ik_F x] F_R \quad (111)$$

実は、この表現は式 (110) と同等であり、ボソンの関係式 (81) を用いると出てくる。これを見るためには、式 (79) に対応する変形が出てくる $\sum_{q>0} [b_q, b_q^\dagger] / N_q$ を評価する。 q の和を積分 $[2\pi/L, \infty]$ に直して、 $q \rightarrow \infty$ での対数発散を除去するために因子 $\exp(-q\eta)$ を導入する。こうすると、

$$\int_{2\pi/L}^{\infty} \frac{dq}{2q} \exp(-q\eta) = -\frac{1}{2} \ln(2\pi\eta/L) \quad (112)$$

を得る。これを指数関数の肩に乗せると式 (111) を再現する。この計算から、無限小量 η は物理的なあいまいさから来たのではないことがわかる。すなわち、もともと normal order されていた有限項を無理に変形したことから来る。このことさえ認識していれば、式 (111) はコンパクトで便利な形である。

以上の議論を、左向きフェルミオンについても同様に行なえば、 $\psi_L(x)$ に対応する式

$$\psi_L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\eta}} \exp[-i\theta_L(x) - ik_F x] F_L \quad (113)$$

を得る。 F_L は左向きフェルミオンの Klein 因子である。左右のフェルミオンがボソンで表現できたので、運動エ

エネルギーのほかに以下のように成分の混成がある場合を扱うことができる。

$$H_{\text{hyb}} = m \int_0^L dx : \psi_R(x)^\dagger \psi_L(x) + \text{h.c.} : \quad (114)$$

ここで、運動量が保存するように、左右のブランチの運動量の原点を $\pm k_F$ ずらすものとする。混成効果は、R,Lの基底を混合することによって容易かつ厳密に考慮できる。この結果得られるスペクトルを図4.3に示す。このモデルに相互作用を加えたものは、massive Thirring モデルと呼ばれている。相互作用定数を m と書いたのは、エネルギーギャップの大きさ $2m$ が相対論的粒子の質量と関係しているからである。ボソン化の方法を適用する

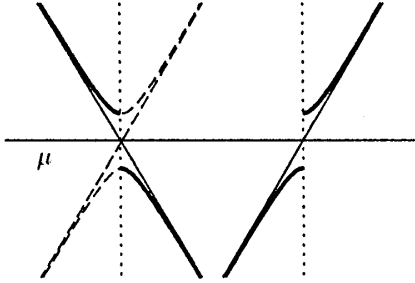


図 10: 混成相互作用によるエネルギーギャップ。右方向の分枝の運動量を $-2k_F$ ずらしたものを破線で示してある。

と、次の形を得る。

$$: \psi_R(x)^\dagger \psi_L(x) : + \text{h.c.} = \frac{1}{\pi\eta} \cos[\theta_N(x)]. \quad (115)$$

ここで、 $\theta_N(x)$ は式 (100) で定義されており、フェルミオン数が変わらないので、Klein 因子は省いた。運動エネルギー部分をボソン化した式 (102) を用いて、全体のハミルトニアンは

$$H_{\text{SG}} = H_B + \frac{m}{\pi\eta} \int_0^L dx \cos[\theta_N(x)] \quad (116)$$

となる。このようなハミルトニアンは sine-Gordon モデルと呼ばれる。sine-Gordon モデルの特殊な場合は、自由なフェルミオンに対応するので、この性質を用いると、相互作用のあるモデルを厳密に解くことができる。実例を後に示す。

4.4 前方散乱だけの相互作用系

以上の自由粒子系での重装備をたずさえて、いよいよ相互作用を考慮する。しかし、まだスピンは無視する。

まず相互作用項として以下のものを導入する。

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2L} \sum_{q,\alpha=\pm} [2g_2 : \rho_\alpha(q) \rho_{-\alpha}(-q) : + g_4 : \rho_\alpha(q) \rho_\alpha(-q) :] \quad (117)$$

すなわち、 g_2 は右と左の分枝の相互作用、 g_4 は同じ分枝の中の相互作用である。全ハミルトニアン $H_{0b} + H_{\text{int}}$ において、 g_4 の効果は、 $v_F^* = v_F + g_4/(2\pi)$ によってフェルミ速度の繰り込みで考慮できる。 g_2 は密度演算子の添え字 $\pm$ (R,L と同じ意味) に関する非対角項をもたらす。バンド理論の強束縛近似を思い出せばわかるように、結合軌道と反結合軌道に対応する

$$N(q) = \rho_R(q) + \rho_L(q), \quad (118)$$

$$J(q) = \rho_R(q) - \rho_L(q) \quad (119)$$

で書き直すと、ハミルトニアンは対角化される。これらは、式 (98) ですでに扱った量である。すなわち、

$$H = \frac{\pi v_s}{L} \sum_{q>0} : \frac{1}{K} N(q) N(-q) + K J(q) J(-q) : \\ = \frac{v_s}{2} \int_0^L dx : \frac{1}{K} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 + K \Pi(x)^2 : \quad (120)$$

となる。ここで相互作用をあらわすパラメタ K と繰り込まれた速度 v_s を

$$\frac{v_s}{K} = v_F^* + \frac{g_2}{2\pi}, \quad K^2 = \frac{2\pi v_F^* - g_2}{2\pi v_F^* + g_2} \quad (121)$$

によって導入した。

さて、対角化基底を具体的に求めるには、次のような変換 (Bogoliubov 変換と呼ばれるものの例) を行う。

$$\begin{pmatrix} \hat{\rho}_R(q) \\ \hat{\rho}_L(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \phi, \sinh \phi \\ \sinh \phi, \cosh \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_R(q) \\ \rho_L(q) \end{pmatrix} \quad (122)$$

これはユニタリ変換である (2×2 の変換行列はユニタリ行列ではないことに注意)。ユニタリ変換であることは、演算子の交換関係が保存していることでわかる。別の表現では

$$U = \exp \left[\sum_{q \neq 0} \frac{\phi}{N_q} \rho_R(-q) \rho_L(q) \right]$$

とすると、 $U^{-1} = U^\dagger$ であり、 $\hat{\rho}_\alpha(q) = U^\dagger \rho_\alpha(q) U$ となることが示せる。Bogoliubov 変換の (虚数) 回転角 ϕ は

$$\tanh 2\phi = -g_2/[2\pi v_F^*] \quad (123)$$

と求められる。このようにすると、変換されたハミルトニアンは

$$H = \frac{2\pi v_s}{L} \sum_{q>0,\alpha} : \hat{\rho}_\alpha(q) \hat{\rho}_\alpha(-q) : \quad (124)$$

と対角化される。ここで

$$v_s/v_F^* = \cosh^{-1} 2\phi \quad (125)$$

ともかける。

双曲線関数の関係式を用いると、以下のような有用な関係式を得る。

$$1 - \left(\frac{g_2}{2\pi v_F^*} \right)^2 = 1 - \tanh^2 2\phi = \cosh^{-2} 2\phi, \quad (126)$$

$$\frac{v_F^*}{v_s} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{K} + K \right), \quad \frac{g_2}{2\pi v_s} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{K} - K \right). \quad (127)$$

4.5 スピンと電荷の分離

やっとスピンと相互作用がある場合を扱うに至った。運動エネルギーは

$$H_0 = v_F \sum_{k,\pm,\sigma} \left[(\pm k - k_F) c_{\pm,k,\sigma}^\dagger c_{\pm,k,\sigma} \right] \\ \rightarrow \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{q>0,\alpha=\pm,\sigma} : \rho_{\alpha,\sigma}(q) \rho_{\alpha,\sigma}(-q) : \quad (128)$$

となる。ここで密度演算子はスピンのインデックス σ を持ち、

$$\rho_{\pm,\sigma}(-q) = \sum_k c_{\pm,k+q,\sigma}^\dagger c_{\pm,k,\sigma}. \quad (129)$$

と定義される。ここで、スピンを次のように組み合わせた量を導入する。

$$\rho_\alpha(q) = [\rho_{\alpha\uparrow}(q) + \rho_{\alpha\downarrow}(q)]/\sqrt{2}, \quad (130)$$

$$\sigma_\alpha(q) = [\rho_{\alpha\uparrow}(q) - \rho_{\alpha\downarrow}(q)]/\sqrt{2}, \quad (131)$$

すると、運動エネルギーは

$$H_B = \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{q>0,\alpha=\pm} : \rho_\alpha(q) \rho_\alpha(-q) + \sigma_\alpha(q) \sigma_\alpha(-q) : \quad (132)$$

となり、電荷密度 ρ とスピン密度 σ が分離した形になる。そこで、相互作用ハミルトニアンとして ρ, σ に関して対角的なものと考えれば、それぞれに対して、スピンがない場合と同様の Bogoliubov 変換ができる。その際、 g_2, g_4 に相当する相互作用定数が、電荷とスピンで同一でなければ、それぞれの励起の速度は異なる。たとえば、 K_ν ($\nu = \rho, \sigma$) は、

$$K_\nu = \sqrt{\frac{2\pi v_F + g_{4\nu} - g_{2\nu}}{2\pi v_F + g_{4\nu} + g_{2\nu}}} = \exp(2\phi_\nu) \quad (133)$$

となる。伝播速度が異なると、スピンと電荷はあたかも分離して運動するように見える。これをスピンと電荷

の分離という。具体的には全体のハミルトニアン H は $H = H_\rho + H_\sigma$ と分離され、それぞれのハミルトニアンは実空間表示では

$$H_\rho = \frac{v_\rho}{2} \int_0^L dx : \frac{1}{K_\rho} \left(\frac{\partial \Phi_\rho}{\partial x} \right)^2 + K_\rho \Pi_\rho(x)^2 : \quad (134)$$

$$H_\sigma = \frac{v_\sigma}{2} \int_0^L dx : \frac{1}{K_\sigma} \left(\frac{\partial \Phi_\sigma}{\partial x} \right)^2 + K_\sigma \Pi_\sigma(x)^2 : \quad (135)$$

で与えられる。ここで Φ_ξ, Π_ξ ($\xi = \rho, \sigma$) は式 (77), (130), (131) に準じて定義される。ここに現れた Φ_μ, Π_μ ($\mu = \rho, \sigma$) に応じて以下のように位相変数を定義する。

$$\theta_{N\rho} = \frac{1}{2} (\theta_{R\uparrow} + \theta_{L\uparrow} + \theta_{R\downarrow} + \theta_{L\downarrow}), \quad (136)$$

$$\theta_{J\rho} = \frac{1}{2} (\theta_{R\uparrow} - \theta_{L\uparrow} + \theta_{R\downarrow} - \theta_{L\downarrow}), \quad (137)$$

$$\theta_{Ns} = \frac{1}{2} (\theta_{R\uparrow} + \theta_{L\uparrow} - \theta_{R\downarrow} - \theta_{L\downarrow}), \quad (138)$$

$$\theta_{Js} = \frac{1}{2} (\theta_{R\uparrow} - \theta_{L\uparrow} - \theta_{R\downarrow} + \theta_{L\downarrow}) \quad (139)$$

これらの4つの独立変数によって、スピンと電荷の動力学が記述される。

4.6 後方散乱とウムクラップ

以上見たように、前方散乱だけがあるモデルのスペクトルは、スピンと電荷に分離するが、ともにギャップはなく、調和振動する弦と同じである。固体中の電子は、この外に左右のフェルミ運動量をまたぐような散乱を受ける。これを図4.6に示す。スピンを σ として、左右のフェルミ

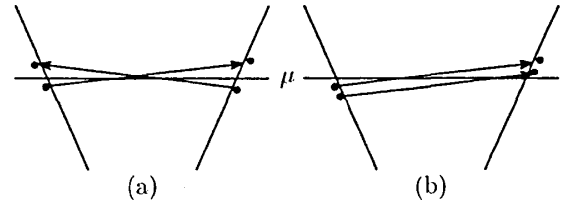


図 11: 大きな運動量移動をともなう散乱。(a) 後方散乱 (結合定数 g_1), (b) ウムクラップ散乱 (結合定数 g_3)。

面近くの電子の消滅演算子を、それぞれ $\psi_{L\sigma}(x), \psi_{R\sigma}(x)$ と書くと、図 4.6(a) で表される後方散乱は

$$H_1 = \frac{1}{2} \int_0^L dx \sum_\sigma \left[g_{1\parallel} \left(\psi_{R\sigma}^\dagger \psi_{L\sigma}^\dagger \psi_{R\sigma} \psi_{L\sigma} + \text{h.c.} \right) \right. \\ \left. + g_{1\perp} \left(\psi_{R\sigma}^\dagger \psi_{L-\sigma}^\dagger \psi_{R-\sigma} \psi_{L\sigma} + \text{h.c.} \right) \right] \quad (140)$$

の形をしている。 $g_{1\parallel}$ の効果は、前方散乱に繰り込める。なぜなら、第一項はフェルミ演算子を交換して

$$-g_{1\parallel} \psi_{R\sigma}^\dagger \psi_{R\sigma} \psi_{L\sigma}^\dagger \psi_{L\sigma} \quad (141)$$

とも書けるからである。具体的には

$$H_{1\parallel} = \frac{-1}{2L} \sum_{q, \alpha=\pm} g_{1\parallel} : \rho_{\alpha}(q) \rho_{-\alpha}(-q) + \sigma_{\alpha}(q) \sigma_{\alpha}(-q) :$$

となる。

一方 $g_{1\perp}$ の第一項を同じように扱って前方散乱の形に書くと、スピンフリップ散乱として現れる。すなわち、 $g_{1\perp}$ は交換相互作用とみなせる。式 (111) を用いて $g_{1\perp}$ を持つ項をボソン化すると

$$g_{1\perp} \sum_{\sigma} \psi_{R\sigma}^{\dagger} \psi_{L-\sigma}^{\dagger} \psi_{R-\sigma} \psi_{L\sigma} + \text{h.c.} = \frac{g_{1\perp}}{(\pi\eta)^2} \cos(2\theta_{Ns}),$$

が得られる。ここで、全体のフェルミオン数が変わらないので Klein 因子は省いてある。

図 4.6(b) で表されるウムクラップ散乱のハミルトニアンは

$$H_3 = \frac{1}{2} \int_0^L dx \sum_{\sigma} g_{3\perp} \psi_{R\sigma}^{\dagger} \psi_{R-\sigma}^{\dagger} \psi_{L-\sigma} \psi_{L\sigma} + \text{h.c.} \quad (142)$$

と書ける。パウリ原理のために同じスピンを持つ 2 粒子はウムクラップ散乱に寄与しない。ウムクラップ散乱にともなう運動量の変化は $4k_F$ なので、一般の密度の場合には運動量保存則から禁止される。しかし、 $4k_F$ が逆格子に等しい場合には、結晶運動量は保存されるので、散乱が許される。これは、スピン 1/2 の電子が格子点あたり一つあるような場合に対応する。すなわち、モット絶縁体を議論する際には、ウムクラップ散乱が本質的に重要である。格子定数を 1 にとると、スピンあたりの密度 n_{σ} は $n_{\sigma} = 2k_F/(2\pi)$ で与えられるので、 $n_{\sigma} = 1/2$ は、 $4k_F = 2\pi$ (逆格子) に対応する。式 (111) を用いてボソン化すると

$$\begin{aligned} & g_{3\perp} \sum_{\sigma} \psi_{R\sigma}^{\dagger} \psi_{R-\sigma}^{\dagger} \psi_{L-\sigma} \psi_{L\sigma} + \text{h.c.} \\ &= \frac{g_{3\perp}}{(\pi\eta)^2} \cos[2\theta_{Ns}\rho + (4k_F - 2\pi)x], \end{aligned} \quad (143)$$

を得る。ここで、連続体近似により、もとの格子点での座標 x が整数であることがわからなくなっているので、あからさまに $-2\pi x$ を挿入している。こうすると、ウムクラップが許される状況 $4k_F = 2\pi$ を表現できる。密度がずれていると、空間積分で消える。

こうして、全体のハミルトニアンは依然としてスピンと電荷が分離した形になっていることがわかる。スピン部分には後方散乱がきき、密度 $n = 1$ の場合の電荷部分にはウムクラップ散乱がきく。

4.7 スピンギャップと超伝導

これだけの重装備をしたかいが、これからやつとわかる。すなわち、超伝導、モット絶縁体、スピンギャップなど最近の実験で話題になっている現象を、1 次元では厳密に調べることができるのである。まず、ウムクラップがきかない密度の電子系を考える。相互作用のうち、前方散乱だけがある場合には、その符号によらず系は朝永理論で記述される流体 (Tomonaga-Luttinger liquid, 略して TL 流体と呼ぶ) として振舞う。すなわち、スピンと電荷は別々の速度を持ち、スペクトルにはギャップがない。一方、ハバードモデルの厳密解から、引力的な短距離相互作用があると基底状態は超伝導状態であることがわかっている。ここでは電荷励起にはギャップがなく、スピン励起にはある。したがって、後方散乱が TL 流体を不安定にしているはずである。

これを理解するために、後方散乱項

$$\frac{2g_{1\perp}}{(2\pi\eta)^2} \int_0^L dx \cos[2\theta_{Ns}(x)]$$

を分析する。ここで左右が混成する自由フェルミ系の場合には、式 (115) を参照して

$$2\theta_{Ns}(x) \rightarrow \sqrt{2}\hat{\theta}_{Ns}(x)$$

になっていたことを思い出す。さて TL 流体に相互作用があるので、一般には $K_{\sigma} \neq 1$ になっている。Bogoliubov 変換は

$$\tilde{\theta}_{Ns} = \theta_{Ns}/\sqrt{K_{\sigma}}, \quad (144)$$

と同等であるので、 $K_{\sigma} = 1/2$ の場合には、スピン流体は左右が混成する自由なフェルミ気体、すなわち自由な massive Thirring モデルにマップされる。このときスピン励起にはギャップがあり、電荷にはない。これは超伝導状態と解釈される。式 (127) から $K_{\sigma} = 1/2$ は

$$\frac{g_{1\parallel}}{2\pi v_F^*} = -\frac{1 - K_{\sigma}^2}{1 + K_{\sigma}^2} = -\frac{3}{5}$$

に対応することがわかる [25]。ここで、式 (142) が示すように $-g_{1\parallel}$ が前方散乱項を与えることを思い出そう。 $g_{1\parallel} < 0$ は、引力ハバードモデルとつながっており、超伝導が出るのは意外ではない。しかし、電荷は TL 状態、スピンはギャップという状態を Luther-Emery が物理的に明快かつ厳密に示した意義は大きい。

スピンギャップは、スピン空間に異方性があっても生ずる。この事情を議論するために、多少話がずれるが、 XXZ モデルと呼ばれる次のようなスピン系を考える。

$$H = J \sum_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z). \quad (145)$$

ここで、 $\Delta = 1$ が等方的ハイゼンベルクモデル、 $\Delta = \infty$ がイジングモデルに対応する。 $\Delta = 0$ は XY モデルと呼ばれる。XY モデルは、フェルミ演算子を導入することによって、厳密に解くことができる。すなわち、各サイト i について $\psi_i^\dagger$ および ψ_i を導入すると、

$$S_i^z = \psi_i^\dagger \psi_i - 1/2 = n_i - 1/2, \quad (146)$$

$$S_i^- = S_i^x - iS_i^y = \psi_i \exp(i\pi \sum_{j=1}^{i-1} n_j), \quad (147)$$

と表わせる。ここで $i = 1$ は左端、 $i = N$ は右端のサイトを表わす。交換関係

$$\{\psi_i, \psi_j\} = 0, \{\psi_i^\dagger, \psi_j\} = \delta_{ij}, \quad (148)$$

が成り立つので、 $\psi_i^\dagger, \psi_i$ はフェルミ粒子の生成消滅演算子とみなせる。この変換を Jordan-Wigner 変換と呼ぶ。フェルミ演算子を用いると、式 (145) は

$$H = \frac{J}{2} \sum_i \left[\psi_i^\dagger \psi_{i+1} + \psi_{i+1}^\dagger \psi_i + 2\Delta(n_i - \frac{1}{2})(n_{i+1} - \frac{1}{2}) \right] \quad (149)$$

のように表わされる。異方性パラメタ Δ は、フェルミオン間の相互作用の強さを表す。特に $\Delta = 0$ の場合は、XY モデルと呼ばれ、スペクトル $\epsilon_k = J \cos k$, ($-\pi < k \leq \pi$) を持つ自由なフェルミ粒子の集合とみなせる。基底状態には $N/2$ 個のフェルミ粒子があり、フェルミ波数は $k_F = \pi/2$ である。

XXZ モデルのスピンギャップはフェルミ粒子のモデルで見ると、電荷のギャップに対応する。 Δ が十分に大きいと、隣接サイトの強い斥力のために粒子は 1 つずつ空格子点をおいて配列する。これからの励起にはギャップがある。弱結合の極限からこの問題を考えると、電荷自由度に対してボソン化を行えばよい。電荷ギャップはウムクラップ散乱が十分に強いと発生する。これはモット絶縁体の問題と関連するので、節を改めて説明する。

4.8 モット絶縁体状態

ウムクラップ散乱を表す式 (143) を、左右に走る電荷フェルミ粒子の立場で考え

$$\theta_{N\rho} = 2^{-1/2}(\theta_{R\rho} + \theta_{L\rho})$$

と書く。左右混成のある自由フェルミ粒子になるのは、スピンの場合と類似して $K_\rho = 1/2$ の場合である。後方散乱の場合と異なり、ウムクラップ項は新たに前方散乱項を生み出さない。したがって、 $g_{2\rho}/(2\pi v_F^*) = 3/5$ の場合にギャップのある自由フェルミ粒子状態が生ずる。

このとき、スピン励起にはギャップがない。これがモット絶縁体の典型的性質である。

以上の考察をまとめると、格子モデルに対する強結合極限からの描像と連続的につながる。この状況を図 12 に示す。実際に連続的につなぐ役割は sine-Gordon 模型に対する繰り込み群である。これは技術的に少し厄介なので、この原稿では触れず、参考書にゆだねる [7, 6]。

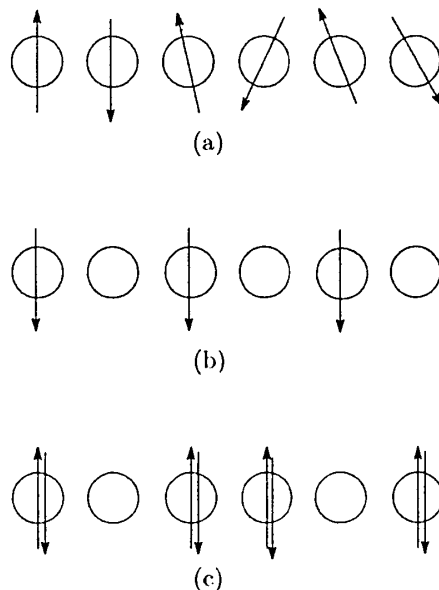


図 12: 格子モデルにおける励起ギャップを理解するための模式図。(a) モット絶縁体 (電荷ギャップ $\Delta_c \neq 0$, スピンギャップ $\Delta_s = 0$), (b) 異方性の XXZ モデルのフェルミオン描像 ($\Delta_c \neq 0$ すなわち元のモデルでは $\Delta_s \neq 0$), (c) 超伝導状態 ($\Delta_c = 0, \Delta_s \neq 0$)。

4.9 相関関数と運動量分布関数

ボソン化の大きな利点の一つは、フェルミ粒子の相関関数を計算できることである。まずスピンのない右向き粒子だけを考える。位相相関関数

$$g_R(x-y) = \langle \theta_R(x) \theta_R(y) \rangle \quad (150)$$

を用いると、式 (83) と系の一様性から

$$\langle e^{\alpha \theta_R(x)} e^{\beta \theta_R(0)} \rangle = C \exp[\alpha \beta g_R(x)], \quad (151)$$

$$C = \exp\left\{\frac{1}{2}(\alpha^2 + \beta^2) \theta_R(0)^2\right\} \quad (152)$$

が成立する。ここで式 (93) を用いると、 $T = 0$ において

$$g_R(x) = \sum_{q>0} \frac{2}{N_q} \exp(iqx) = \ln \frac{L}{2\pi(\eta - ix)} \quad (153)$$

を得る。これは式 (112) で $\eta \rightarrow \eta - ix$ の置き換えに対応する。自由フェルミ粒子の相関関数の距離依存性は、式 (151) で $\alpha = -\beta = i$ とおいて、数係数を無視すると

$$\langle \psi_R^\dagger(x) \psi_R(y) \rangle \sim |x - y|^{-1}, \quad (154)$$

を得る。これは元のフェルミ粒子から直接求めたものと一致する。フーリエ変換すると、右向き粒子の運動量分布関数は

$$n_k = \langle c_k^\dagger c_k \rangle = \theta(k_F - k) \quad (155)$$

と得られる。ここで、 $\theta(x)$ は階段関数を意味する。右向き粒子のエネルギーは $v_F(k - k_F)$ となる。

今度は、相互作用がありスピンはない場合を考える。Bogoliubov 変換のパラメタ K を用いると、

$$\hat{\theta}_N(x) = \theta_N(x)/\sqrt{K}, \quad \hat{\theta}_J(x) = \theta_J(x)\sqrt{K} \quad (156)$$

がハミルトニアンを対角化する。式 (151) で N, J それぞれのボソンが指数関数に乗っているのを、

$$\theta_R = 2^{-1/2} (\theta_N + \theta_J), \quad (157)$$

$$\alpha_N = -\beta_N = i/\sqrt{K}, \quad \alpha_J = -\beta_J = i\sqrt{K} \quad (158)$$

において、次のように相関関数を求められる。

$$\langle \psi_R^\dagger(x) \psi_R(y) \rangle \sim |x - y|^{-v_F^*/v_s}, \quad (159)$$

ここで、 $v_F^*/v_s = (K + 1/K)/2$ は式 (127) で与えられている。これをフーリエ変換すると、右のフェルミ面での特異性は

$$n_k = \langle c_k^\dagger c_k \rangle \sim |k|^{v_F^*/v_s - 1} \quad (160)$$

で特徴付けられることがわかる。

スピンがあると、相互作用の効果は電荷自由度のパラメタ K_ρ とスピン自由度のパラメタ K_σ で取り入れられる。右向きで上向きスピンを持つ粒子の位相

$$\theta_{R\uparrow} = \frac{1}{2} (\theta_{N\rho} + \theta_{J\rho} + \theta_{Ns} + \theta_{Js}) \quad (161)$$

において、 N, J への相互作用効果がそれぞれ因子 $K, 1/K$ をともなうことを考慮すると、式 (160) における運動量分布のべきは

$$\frac{v_F^*}{v_s} - 1 = \frac{1}{4} (K_\rho + K_\rho^{-1} + K_\sigma + K_\sigma^{-1}) - 1 \quad (162)$$

で与えられることがわかる。

同様に、電荷とスピンの相関関数も求めることができる。まず、横スピン相関関数

$$\langle \psi_{R\uparrow}(x)^\dagger \psi_{L\downarrow}(x) \psi_{L\downarrow}(0)^\dagger \psi_{R\uparrow}(0) \rangle \quad (163)$$

を議論しよう。ボソン化したときに現れる位相は $\theta_{R\uparrow} + \theta_{L\downarrow} + 2k_F x$ である。式 (161), および

$$\theta_{L\downarrow} = \frac{1}{2} (\theta_{N\rho} - \theta_{J\rho} - \theta_{Ns} + \theta_{Js}) \quad (164)$$

から、 $\theta_{R\uparrow} + \theta_{L\downarrow} = \theta_{N\rho} + \theta_{Js}$ を得る。したがって、横スピン相関関数のべきは $K_\rho + K_\sigma^{-1}$ で与えられる。一方、スピンの z 成分 s_z の相関関数の位相は、

$$2k_F x + \sum_\sigma \sigma (\theta_{R\sigma} + \theta_{L\sigma}) = 2k_F x + \theta_{N\rho} + \theta_{Ns} \quad (165)$$

となるので、縦スピン相関関数のべきは $K_\rho + K_\sigma$ となる。ところで、スピンに関する回転対称性があれば、縦相関と横相関のべきは同じはずである。これから $K_\sigma = K_\sigma^{-1} = 1$ という著しい結果を得る。例えば斥力ハバードモデルでは、確かにスピン回転対称性があるので、 $K_\sigma = 1$ が成立する。相関関数がべき的に振舞うことが、 $K_\sigma = 1$ の必要条件であることに注意する。すなわち、スピンギャップがあると相関関数は指数関数的に減衰するので、回転対称性があっても、 $K_\sigma = 1$ とは限らない。実際、Luther-Emery の厳密解では $K_\sigma = 1/2$ が得られることを 4.7 で見た。

電荷の相関関数に対しても同様の解析を行うと、 $2k_F$ の振動成分のべきとして、 $K_\rho + K_\sigma$ という結果が得られる。

4.10 再び近藤効果 – Toulouse 極限の自由フェルミ粒子

ボソン化の観点から近藤効果を見直してみる。スピン自由度を表す自由フェルミ粒子の共鳴状態になるパラメータの組み合わせがあることを示す。これは、左右分枝が混成する自由な massive Thirring モデルの不純物版に対応するもので、Toulouse 極限と呼ばれる。歴史的には、Toulouse 極限のほうに先が見つかっている。近藤モデルを 1 次元空間にマップする際に二つの考え方があ。もともと、 s 波の内向き外向き球面波で完全系を張ると波数には正負があり、空間座標はもともとの動径座標なので正、というモデルになる。一方、負の波数状態は、空間座標を負にしまうと、波数は正という状態にマップできるので、右向きの伝導電子だけが原点にある不純物と交換相互作用をするモデルにマップされる。このマッピングはベーテ仮説で厳密解を得たときにも使われたものである。一方、第一のマッピングは boundary sine-Gordon モデルと呼ばれる。

一方、不純物スピンの座標は、もともと離散的な格子点にあったものであり、連続体モデルにする際に注意が

いる。ここでは、格子定数 $a = 1$ をとったものと考え、系の長さ L を無次元量 $N = L/a \gg 1$ で置き換える。また場の演算子 $\psi_\sigma(x)$ を、サイト x におけるワニア状態の消滅演算子と考える。このような考え方で、式 (28) の H_{exc} を

$$H_{\text{exc}} = \frac{J}{2} \left\{ S_z \left[\psi_\uparrow^\dagger(0) \psi_\uparrow(0) - \psi_\downarrow^\dagger(0) \psi_\downarrow(0) \right] + S_+ \psi_\downarrow^\dagger(0) \psi_\uparrow(0) + S_- \psi_\uparrow^\dagger(0) \psi_\downarrow(0) \right\} \quad (166)$$

と書く。右向き伝導電子の運動エネルギーは、 k_F からエネルギーを測って

$$H_c = v_F \sum_{k\sigma} (k - k_F) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (167)$$

となる。ボソン表示では、

$$H_c = \frac{v_F}{4\pi} \int_0^L dx \left[\left(\frac{\partial \theta_c}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta_s}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (168)$$

と書ける。ここで、位相場 θ_c, θ_s は、次のように定義される。

$$\psi_\sigma(x) = \frac{F_\sigma}{\sqrt{2\pi\eta}} \exp[i\theta_\sigma(x)], \quad (169)$$

$$\theta_c = 2^{-1/2}(\theta_\uparrow + \theta_\downarrow), \quad \theta_s = 2^{-1/2}(\theta_\uparrow - \theta_\downarrow). \quad (170)$$

また離散化した空間であからさまに表現する際には、微分は隣接サイトとの差分と解釈する。伝導電子のスピ密度は

$$\frac{\partial \theta_s(x)}{\partial x} = \sqrt{2\pi} \sum_\sigma \sigma \psi_\sigma^\dagger(x) \psi_\sigma(x), \quad (171)$$

で与えられるから、 H_{exc} を

$$\frac{J_z}{\sqrt{2\pi}} S_z \frac{\partial \theta_s}{\partial x} + \frac{J_\perp}{4\pi\eta} \{ S_+ \exp[i\sqrt{2}\theta_s] + \text{h.c.} \} \quad (172)$$

と書き直す。ここで、 θ_s は $x = 0$ の値を用い、 J の異方性を許す形にしてある。

さて、伝導電子の波動関数は S_z によるポテンシャル散乱で変形するが、その電荷を表すボソンは局在スピンと相互作用しない。そこで、スピンボソンだけを考えればよい。散乱の効果を取り入れた伝導電子状態は、位相のずれで指定できる。これを $\theta_s(x)$ を含むユニタリ変換として表わす。 J_z による散乱効果を取り入れるためにユニタリ変換 U を

$$U = \exp[i\gamma\theta_s(0)S_z] \quad (173)$$

と選ぶ。すると $\partial \theta_s / \partial x$ は

$$U^\dagger \frac{\partial \theta_s}{\partial x} U = \frac{\partial \theta_s}{\partial x} - \pi\gamma S_z \delta(x, 0) \quad (174)$$

と変換される。ここで、 $\delta(x, 0)$ はクロネッカーデルタである。この変換で伝導電子の運動エネルギーのスピ部分は

$$U^\dagger \left(\frac{\partial \theta_s}{\partial x} \right)^2 U = \left(\frac{\partial \theta_s}{\partial x} \right)^2 - 2\pi\gamma S_z \frac{\partial \theta_s}{\partial x} \delta(x, 0) + \pi^2 \delta(x, 0) \quad (175)$$

と変換される。 $J_z \rho_c = \sqrt{2}\gamma$ の場合には、もとの相互作用と式 (175) の右辺第 2 項がキャンセルする。ここで $\rho_c = (2\pi v_F)^{-1}$ である。

一方、 $J_\perp$ を含む項は以下のように変換される。 $S_+ U$ において、 U の中では $S_z = -1/2$ とおいてよいことに注意すると、

$$U^\dagger S_+ U = \exp[-i\gamma\theta_s(0)] S_+, \quad (176)$$

が得られる。したがって、 $\gamma = \sqrt{2} - 1$ と選ぶと、定数項を無視して

$$U^\dagger H_{\text{exc}} U = \frac{1}{\sqrt{8\pi\eta}} J_\perp (S_+ F_s^\dagger c_s + c_s^\dagger F_s S_-) \quad (177)$$

と変換される。ここでフェルミ演算子

$$c_s = F_s \exp(i\theta_s) / \sqrt{2\pi\eta}$$

と Klein 因子 $F_s, F_s^\dagger$ を導入した。これらは $S_\pm$ と可換である。さて、Klein 因子を $S^\pm$ に押し付けて

$$F_s^\dagger S_+ = d^\dagger, \quad F_s S_- = d \quad (178)$$

とおくと、 d は c_s とフェルミオンとしての交換関係に従う。

結局、 $J_z \rho_c = 2 - \sqrt{2} \sim 0.6$ の場合の相互作用項は、線形スペクトルを持つフェルミ粒子とエネルギー 0 の共鳴順位との混成相互作用の形になった。これが Toulouse 極限である。自由なフェルミ粒子が表している自由度はスピンだけであることを強調したい。

5 無限次元からのアプローチ

5.1 動的有効場とキャビティ

固体内電子の興味ある物性発現には、多数の自由度が関与している。1つの電子に注目すると、これらの相互作用を時間的・空間的に揺らいでいる力として見る事ができる。強磁性の発現においては、各スピンに有効的な磁場が働いているとみなす。

通常の平均場近似では、有効場は時間的に変動しない。これは振動数成分では $\omega = 0$ のみを持つ、ということである。ここで有効場が時間的に変動することを許すと、揺らぎの効果が取り入れられるため、格段に詳細な情報を盛り込むことができる。この理論は、Dynamical Mean-Field Theory (DMFT) すなわち動的平均場理論と呼ばれている [26, 27, 28]。しかし、短距離相関考慮へ拡張する場合には、混乱を避けるためにクラスター動的有効場理論と呼ぶことにする。

ワイスの分子場理論などで見られるように、もともとの平均場としては物理的実体である磁場や電場が想定された。例えば誘電体においては、各電子は周りの電荷分布にしたがう電場を感じて、自らの電荷分布を決める。その際、自分自身の電荷分布による媒質への反作用も生ずる。平均場を決める際に、本来ならばこの反作用場を除くべきである。しかし、通常分子場理論では、注目しているサイトに働く力の源として自分自身が作り出した場も含まれてしまっている。この結果、本来存在しない相転移が出てきてしまうなど、種々の不都合が生ずることがある。

自己場の排除は、誘電体では古くからの概念、例えばローレンツ場やクラウドス-モソツティの関係式などに、ある程度反映されている。すなわち、注目する電気双極子を仮想的に想定したキャビティの中におくことにより、一様な媒質の分極に補正を加える。より洗練された自己場排除の概念は、オンサガーの反作用場として知られている [31]。スピン系の場合には、自己場を除く拡張平均場理論は 1960 年前後に構築されたが [32]、量子スピン系への拡張は 1990 年代まで遅れた [33]。後で説明するように、動的平均場理論では、ある段階で注目するサイトから電子間クーロン相互作用を除いた状況を設定する。これが系に掘られたキャビティと同等の効果を果たし、自己場の問題を解決している。

局所的な電子相関を、実空間から考慮しようとする努力は、1960 年代にハバードによって先駆的かつ精力的になされた [8]。ハバード III と呼ばれる近似では、注目しているサイトの周囲がどちらのスピンによって占有されているか、という情報をベストの平均場によって考慮している。その際、周囲の電子が動かないことを想定するので、占有するか否かの情報は乱雑な静的ポテンシャルとして現れる。これをそのまま平均すると、ハバード I と呼ばれる近似になるが、散乱補正と呼ばれる効果を取り入れると、平均場は動的な性格を得る。すなわち、電子の持つエネルギーに依存するようになる。ハバードの用いた近似は、後にコヒーレントポテンシャル近似 (CPA) と呼ばれる手法と同等である [34]。CPA は合金

系の乱雑ポテンシャルに対してベストの動的平均場を決めるものである。電子相関の問題では、周囲の電子も実際には運動する。ハバードは、この効果も部分的に取り入れ、共鳴散乱補正と呼んだ。

CPA で現れる平均場は電子が感じるポテンシャルであり、自己エネルギー $\Sigma(z)$ であらわされる。ここで z は複素振動数である。CPA では、乱雑系グリーン関数の平均と、自己エネルギー $\Sigma(z)$ を持つ仮想系グリーン関数が等しくなるように $\Sigma(z)$ を決定する。ここで、平均場 $\Sigma(z)$ は z に依存している。それゆえ動的平均場の一種とみなされる。CPA では、 $\Sigma(z)$ を求める方程式は閉じている。これに対して、DMFT は多体問題を扱うので $\Sigma(z)$ を求める問題は、一般に CPA 条件だけでは決まらない。

5.2 一様な動的平均場

5.2.1 最適平均場と変分原理

DMFT の基本をハバードモデルを例にとりて説明しよう。ハミルトニアンは、サイト表示で

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}$$

と書ける。バンドのエネルギー $\epsilon_{\mathbf{k}}$ は、 $-t_{ij}$ のフーリエ変換で与えられる。以下、断りのないときには、 t_{ij} は最隣接対でのみゼロでないものとし、この値 t をエネルギーの単位にとる。また、格子定数は 1 とする。この系の電子グリーン関数を、波数 $\mathbf{k}$ 、複素振動数を z として

$$G(\mathbf{k}, z) = [z - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(z)]^{-1}$$

と書き、自己エネルギー $\Sigma(z)$ を導入する。自己エネルギーは一般に波数 $\mathbf{k}$ に依存するが、DMFT ではこの依存性を無視する。すなわち、動的平均場はサイトの位置によらず一様である。空間次元が無限大であれば、波数依存性は厳密に消失する [35, 27]。DMFT では、グリーン関数の実空間での対角要素 $\bar{G}(z)$ が重要な役割を果たす。 $G(\mathbf{k}, z)$ との関係は、全格子数を N として

$$\begin{aligned} \bar{G}(z) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{z - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(z)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{z - \Sigma(z) - \epsilon} \\ &= g(z - \Sigma(z)) \end{aligned} \quad (179)$$

で与えられる。ここで $g(z)$ は、 $U = 0$ の場合の局所グリーン関数である。バンドの状態密度 $\rho(\epsilon)$ が簡単な形

をしていると、 $g(z - \Sigma(z))$ は $z - \Sigma(z)$ の関数として解析的に求められる。

見方を変えて、 $\bar{G}(z)$ を有効不純物問題の解として求めることを考える。自己場を除くために、注目サイトでのみクーロン相互作用 U が欠損している状況を考え、これに対応したキャビティグリーン関数 $G(z)$ を導入する。他のサイトとのホッピングの効果をも動的な有効ポテンシャル $\lambda(z)$ で表すと、キャビティグリーン関数は、 $G(z) = [z - \lambda(z)]^{-1}$ と書ける。これを $\lambda(z)$ の定義と考えてもよい。実際には、すべてのサイトに U が存在するから、この効果を、注目サイトの自己エネルギー $\Sigma(z)$ で考慮する。すると注目するサイトのグリーン関数 $\bar{G}(z)$ に対して、(179) の結果と合わせて二つの表現

$$g(z - \Sigma(z)) = [z - \lambda(z) - \Sigma(z)]^{-1} \quad (180)$$

が得られる。系は規則格子なので、 $G(k, z)$ の自己エネルギーと $\bar{G}(z)$ のそれは等しいはずである。これが CPA と同等の最適化条件を $\Sigma(z)$ に与える [30]。この状況を模式的に図 13 に示す。

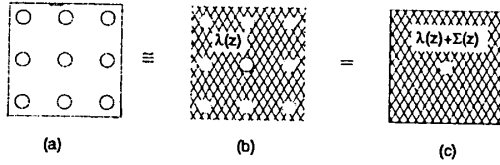


図 13: 動的有効媒質の構成。(a) 元の格子, (b) 有効不純物への置き換え, (c) 局所的相互作用の自己エネルギーへの取り込みを示す。

このようにして、各 z に対して未知量 $\lambda(z)$ と $\Sigma(z)$ 間の自己無撞着関係 (180) が得られた。実際に有効 1 サイト問題を解くと、 $\lambda(z)$ と $\Sigma(z)$ の間にもう 1 つの関係をつけることができる。これで初めて DMFT の方程式系が閉じ、 $\lambda(z)$ と $\Sigma(z)$ の両方が求まる。すなわち、DMFT においては、乱雑系の CPA 条件に相当するものだけでなく、局所多体問題を正確に解くプロセスが本質的である。このプロセスは、不純物ソルバーと呼ばれる。不純物ソルバーに複雑な多体効果の考慮を担わせる点が、DMFT の大きな特徴であり、以前のハバード III 近似や CPA から大きく前進した点である。

1980 年代に DMFT と同等の理論が定式化されたときには、アンダーソン格子が対象にされていた [29]。すでに不純物ソルバーは何でもよい、と自覚されていたが [30]、数値計算には NCA と呼ばれる手法が用いられた [36]。それゆえこの理論は、筆者により extended NCA

(XNCA) と呼ばれた。当時としては重い数値計算が必要とされ、筆者の努力不足もあってあまり普及しなかった。XNCA の場合、 $\lambda(z)$ に対応するハミルトニアンを陽に考える必要はなかった。しかし、1990 年代に入って量子モンテカルロ法 (QMC) などを用いる手段も追求され、媒質をあらわす具体的ハミルトニアンが必要になった。Georges-Kotliar は媒質として仮想的な不純物アンダーソン模型を提案した [37]。すなわち、

$$\lambda(z) = \epsilon_f + \frac{1}{N} \sum_k \frac{|V_k|^2}{z - \epsilon_c(k)} \quad (181)$$

とすると、仮想的な局在準位 ϵ_f 、仮想的混成相互作用 V_k 、および仮想的伝導帯スペクトル $\epsilon_c(k)$ を用いてハミルトニアンが定義できる。

巨視的な有効媒質を表すには、上の 1 次元運動量 k を連続変数と見る必要がある。しかし、これを有限の自由度で近似すると、仮想的アンダーソン模型を数値的厳密対角化の手法で扱うことができる。低励起領域をもっとも精度よく扱うのは、数値的繰り込み群を用いた対角化である [26]。有限自由度の数を小さくすると、自己無撞着方程式 (180) を満たす解は期待できない。したがって、別の考え方から最適解を決める必要がある。Caffarel-Krauth は誤差関数を適当に定義して、求められた $\Sigma(z)$ を持つ不純物系と周期系のグリーン関数の誤差が最小になることを要請した [39]。これから次のステップで用いる仮想的アンダーソン模型のパラメータを決め、逐次近似で最終的なグリーン関数を求めている。この理論での誤差関数は、変分原理から決めたわけではない。最近では低振動数領域のフィットを重視した別の形が提案されている [40]。

Caffarel-Krauth の手法を変分原理を用いて体系化した理論が Potthoff によって定式化された [41]。Potthoff の方法は DMFT をクラスターに拡張する場合にも容易に適用できるので、少し詳しく説明する。まず、有効アンダーソン模型にはフェルミオンの一体状態を記述するパラメータのセットが現れるが、これを一般化されたホッピング t' と書くことにする。さて、系の熱力学ポテンシャル Ω は多体摂動論に従うと、温度 $T = \beta^{-1}$ で以下のように表される [42]。

$$\beta\Omega\{G\} = \beta\Phi\{G\} - \text{Tr}(\Sigma G) + \text{Tr} \ln G \quad (182)$$

ここで、基底に依存しない抽象的な表示を用いており、グリーン関数 G は時空座標を足に持つ行列である。 $\Phi\{G\}$ は、骨格ファインマンダイアグラムで構成される汎関数で $\delta\Phi/\delta G = \Sigma$ の関係を満たす。これを考慮するとダイソン方程式 $G^{-1} = g^{-1} - \Sigma$ を満足するときに $\delta\Omega\{G\}/\delta G = 0$

が得られる。この性質は変分原理の一種であり、量子力学において波動関数の変化に対して、正しい関数のところでエネルギーは停留値をとるべし、という性質に対応している。近似理論においては、 $\Phi\{G\}$ の具体的近似から、とるべき自己エネルギーの形が決まることになる。これは、保存則を満たす近似理論を構築する際に有用な関係である [42]。さて、汎関数の独立変数を G から自己エネルギー Σ に変えるために、 $F\{\Sigma\} = \Phi - T\text{Tr}(\Sigma G)$ を導入すると、 $\delta F/\delta \Sigma = -G$ となり、変分原理として、 $\delta \Omega\{\Sigma\}/\delta \Sigma = 0$ が得られる。

以上の関係式は形式的に厳密であるが、実際には Φ や F は近似的にしか求まらない。Potthoff のアイディアは、 Σ を t' で特徴付けられる代理の系で正確に求めることにある [41]。ここで導入された近似は、 Σ を t' であらわせる関数、すなわち $\Sigma_{t'}$ に限ることである。代理系は元の系と同じ多体相互作用を持っている点が本質的に重要である。 Φ を仮想的に摂動展開して見るとわかるように、代理系と真の系の違いは G の t' 依存性を通じてのみ現れる。したがって、汎関数としての Φ における G 依存性は、代理系と真の系で同じである。しかし、 F の Σ 依存性は t' への制限のため近似的である。元の系の Ω から、代理系の熱力学ポテンシャル $\Omega_{t'}$ を引き算すると、 F は近似的に相殺して

$$\Omega \sim \Omega_{t'} + T\text{Tr} \ln(g^{-1} - \Sigma_{t'}) G_{t'} \equiv \Omega\{\Sigma(t')\} \quad (183)$$

を得る。ここで、 g は無摂動グリーン関数、 $G_{t'}$ は代理系で正確に求めたグリーン関数である。右辺は実際に計算できる。ベストの代理系を決める条件は

$$\partial \Omega\{\Sigma(t')\}/\partial t' = 0 \quad (184)$$

となる。この近似方法を Potthoff は Self-Energy Functional Theory (SFT) と呼んでいる。Caffarel-Krauth の誤差関数の最小化は、多くのパラメータを含む代理系の場合に容易に実行できる形であるが、(184) 式の条件とは異なっている。Potthoff は DMFT とほぼ同様の結果を、非常に少ない自由度の代理系で再現できることを示している [43]。

5.2.2 DMFT の問題点

主にハバードモデルに対して、DMFT を用いたモット転移の議論が盛んに行われた [27]。格子あたり 1 個の電子を持つ場合、クーロン斥力 U が十分大きければ、系は絶縁体になると期待される。一方、 U が十分に小さければ金属状態が安定であろうから、途中で金属絶縁体転

移があるはず、というわけである。実際には、ハバードモデルの金属絶縁体転移は空間次元に敏感に依存する。たとえば、1 次元では U の大きさによらずに絶縁体が基底状態である。DMFT は無限次元でのみ正確さが保障されているので、この近似で得られる結論を有限次元の系に当てはめるのは危険である。特にモット絶縁体の記述においては、スピンエントロピーが基底状態まで残ってしまう、という深刻な欠点がある。これは DMFT が、サイト間相関を平均場で置き換えてしまうことに由来する。相転移はエネルギーとエントロピーの兼ね合いで決まるので、モット転移の議論を DMFT で行うことの有効性を見出すのは難しい。

一方、基底状態が金属的であれば、サイト間相関を無視する近似が深刻にはならない場合がある。たとえば、DMFT はアンダーソン格子の近藤効果など、局所的相関の強い金属状態を記述するのが得意である [36]。しかしこの場合でも、以下でふれるように、サイト間相互作用で近藤効果が抑えられている事情を反映できていない場合がある [44]。そこで、サイト間相関を取り入れた動的有効場理論が必要になる。

5.3 波数に依存する動的平均場

5.3.1 クラスターの座標と運動量

動的平均場を拡張する方法として、さまざまなものが考えられている。この事情は乱雑系のベストの平均場近似である CPA を拡張する努力が下敷きになっている [34, 45]。基本的には、複数の格子点を含むクラスターを DMFT での単一サイトの代わりにとることである。ここでは最も簡単な例としてハバード模型を用いて、非局所相関を取り入れる理論の枠組みについて説明する。始めにクラスターに分割するための座標を定義しよう。全サイト数が N 個の結晶を N/N_c 個に分割し、各領域にはサイト数が N_c 個のクラスターが含まれるとする。実空間におけるクラスターの原点座標を $\tilde{r}$ で表し、クラスター内での各サイトの座標を R で表す。すなわち各サイトの座標は $r = R + \tilde{r}$ で表される。 $\tilde{r}$ と R に対応する逆格子空間でのラベルを、それぞれ $\tilde{k}$ と K とする。また、 $\tilde{k}$ が動きえる逆格子空間の領域をセルと呼ぶ。図 14 に 2 次元正方格子で $N_c = 4 = L^2$ とした場合を示した。

クラスターを媒質に埋め込む方法は、DMFT のようには一意的に決まらない。埋め込み方に依存して、主な理論は以下で説明するように分類される。読みにくい略語が出てくるが、一度訳語をつけた後は文献で一般的に

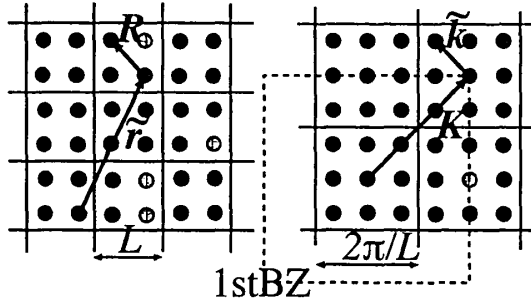


図 14: 実格子のクラスター (左図) と逆格子のセル (右図)。1stBZ は、元の格子のブリルアンゾーンを示す。

使われているものをそのまま用いることにする。

5.3.2 クラスター摂動理論 (CPT)

クラスター間の自由度を分離するためにホッピング t_{ij} をクラスター内とクラスター間に分離する。

$$t(\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_j) = \delta_{\tilde{\mathbf{r}}_i, \tilde{\mathbf{r}}_j} t_c + t'(\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_j)$$

t_c, t' は、それぞれクラスター内とクラスター間のホッピングを表し、クラスター内でのサイト R の集合についての N_c 次元の行列である。実空間における N_c 次元行列グリーン関数 $G(\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_j, z)$ は

$$G(\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_j, z)^{-1} = \delta_{\tilde{\mathbf{r}}_i, \tilde{\mathbf{r}}_j} \bar{G}(z)^{-1} - t'(\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_j)$$

を満たす。ここで $\bar{G}(z)$ は 1 つのクラスターのみを考えた場合の N_c 次元行列グリーン関数であり、

$$\bar{G}(z) = [z - t_c - \Sigma_c(z)]^{-1} \quad (185)$$

と表せる。 $G(\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_j, z)$ の $\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_j$ に関するフーリエ変換を行うと

$$G(\tilde{\mathbf{k}}, z)^{-1} = \bar{G}^{-1}(z) - t'(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (186)$$

を得る。これが CPT である [46, 47]。ここで R に関しては、まだフーリエ変換を行っていないことに注意する。したがって、クラスターに対応した小さいブリルアンゾーンの波数 $\tilde{\mathbf{k}}$ を持つグリーン関数行列 $G_{ij}(\tilde{\mathbf{k}}, z)$ から、元の大きいブリルアンゾーンに対応したグリーン関数 $G(\mathbf{k}, z)$ を構成する必要がある。その際、元の格子の周期性が近似によって失われてしまったので、一般的には $\mathbf{k}$ に関して非対角要素が残るはずである。CPT では

これを無視して対角成分のみを

$$G(\mathbf{k}, z) = \frac{1}{N_c} \sum_{i,j=1}^{N_c} G_{ij}(\tilde{\mathbf{k}}, z) \times \exp[-i\mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_j)] \quad (187)$$

によって求める。ここで、 $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$ となるように $\mathbf{K}$ を選ぶ。

この導出から明らかなように、CPT ではクラスター内の電子間相互作用は (185) 式の $\Sigma_c(z)$ によって考慮されているが、異なるクラスターにまたがる自己エネルギーへの寄与は落とされている。また CPT は媒質への埋め込みについて最適化をしていない。一方、自己エネルギーがクラスター内のプロセスで決まっているので、これを正確に扱えば、因果律の要請すなわち、“ $\Sigma(z)$ の虚部は上半面の z に対しては負であるべし”，という性質を満たしている。全体のグリーン関数 $G(\mathbf{k}, z)$ も因果律、つまり上半平面での解析性を満足する。以下に述べる DCA, CDMFT, SFT においても、クラスター不純物問題を正しく解けば、全体のグリーン関数の解析性を自動的に満足する。

5.3.3 動的クラスター理論 (DCA)

クラスター内のホッピングに起因する t_c は、逆格子空間ではバンド分散のセル内での平均値

$$\bar{\epsilon}_K = (N_c/N) \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \epsilon_{K+\tilde{\mathbf{k}}} \quad (188)$$

となる。これに対応して逆格子空間の各セルを独立とした場合のグリーン関数は

$$\bar{G}(K, z) = [z - \bar{\epsilon}_K - \Sigma(K, z)]^{-1} \quad (189)$$

である。一方、クラスター間のホッピングに起因する t' は、格子のバンド分散と $\bar{\epsilon}_K$ との差

$$t'(K + \tilde{\mathbf{k}}) = \epsilon_{K+\tilde{\mathbf{k}}} - \bar{\epsilon}_K \quad (190)$$

となるので、全体系のグリーン関数は

$$G(K + \tilde{\mathbf{k}}, z) = [\bar{G}^{-1}(K, z) - t'(K + \tilde{\mathbf{k}})]^{-1} \quad (191)$$

と与えられる。これが DCA である [48]。この近似では、自己エネルギーの波数依存性はセル中では無視されている。したがって、グリーン関数の波数依存性は、クラスター間のホッピングだけに由来する。

セル内での $G(K + \tilde{k}, z)$ の平均値を

$$\bar{G}(K, z) = (N_c/N) \sum_{\tilde{k}} G(K + \tilde{k}, z) \quad (192)$$

と定義する。自己無撞着解を得ることは、

$$\bar{G}(K, z)^{-1} = G(K, z)^{-1} - \Sigma(K, z) \quad (193)$$

を満たすキャビティのグリーン関数 $G(K, z)$ を決定する問題と等価である。解を得るための数値計算手順として、以下のような逐次近似が用いられる。

1. キャビティグリーン関数 $G(K, z)$ の第0近似を適当にとる。
2. クラスタを不純物とみなす問題を解いて、繰り込まれたグリーン関数 $G_c(K, z)$ を求める。これは $\bar{G}(K, z)$ と等しくなるべきものである。
3. $\Sigma(K, z) = G(K, z)^{-1} - G_c(K, z)^{-1}$
4. 上の $\Sigma(K, z)$ を $G(K + \tilde{k}, z)$ に用いて $\bar{G}(K, z) = (N_c/N) \sum_{\tilde{k}} G(K + \tilde{k}, z)$ を計算。
5. $G(K, z)^{-1} = \bar{G}(K, z)^{-1} + \Sigma(K, z)$ でキャビティグリーン関数を再計算。
6. 上記の $G(K, z)$ を第1近似として、再び2.の問題に用いる。以下 $\bar{G}(K, z)$ と $G_c(K, z)$ が等しくなるまで2.から5.の計算を繰り返す。

上記のループで、計算負荷が最も大きいステップは2.である。 N_c 個の波数 K のそれぞれについて、クラスター不純物アンダーソン模型を解く必要がある。実際的な計算時間で信頼できる結果の得られる手法を用いることが肝要であり、通常NCAかQMCが用いられている。DCAで $N_c = 1$ とすると従来のDMFTによる計算に帰着される。すなわちDMFTによる計算結果とDCAによるそれを比較することによって非局所相関効果の物理量への寄与を見積もることができる。 N_c を増加させると自己エネルギーの波数依存性を細かく取り入れることができ、より長距離の相関を取り入れることができる。

5.3.4 セル型動的分子場理論 (CDMFT)

CDMFTにおいてはクラスター内の自由度を実空間で取り扱う。クラスターと媒質との相互作用は、CPAの拡張であるMolecular CPA (MCPA)と同様に扱う[45]。すなわち、DMFTにおける(179)式に現れるグリーン関数をすべて $N_c \times N_c$ の行列とみなす。行列の基底はクラ

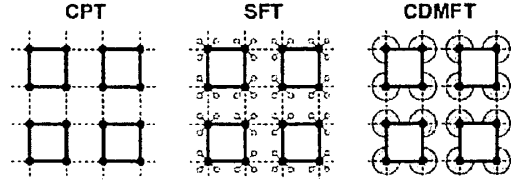


図 15: クラスタ動的有効場理論におけるクラスタのとり方。SFTにおける小さい白丸は媒質の代理となるサイト、CDMFTにおける丸は無限媒質を表す。

スター内のサイトとしてもよいが、より一般的には独立な軌道であれば何でもよい。また(179)式の波数 k は、クラスターに対応した波数 $\tilde{k}$ に置き換える。CDMFTは、CPTにおけるクラスター自己エネルギーを、クラスター相互作用を考慮して最適化する枠組み、といえる。具体的には(185)式の代わりに媒質を考慮した行列グリーン関数の最適化条件

$$\bar{G}(z) = (N_c/N) \sum_{\tilde{k}} G(\tilde{k}, z) \quad (194)$$

を要求する[49]。これを逆格子空間で対角化された(192)式と比較すると、DCAとの対応が明らかになる。行列 $G(\tilde{k}, z)$ からもとの波数を持つグリーン関数を得る方法は、(187)式と同じである。CDMFTのクラスターと媒質への埋め込みは図15にCDMFTとして、模式的に示されている。

5.3.5 自己エネルギー汎関数法 (SFT)

Potthoffの変分原理は、クラスターパラメータの最適化と媒質への埋め込みを最適化するために有益である。いくつかの近似理論は、SFTにあらわれるクラスターのサイズ N_c と媒質を代理するサイトの数 N_b の特別な組み合わせとみなせる[41]。例えば、DMFTは $N_c = 1, N_b = \infty$ のSFTであるし、 N_b を有限にするとCaffarel-Krauthの厳密対角化とほぼ同一である。さらにCDMFTは $N_c > 1, N_b = \infty$ に相当する。しかし、SFTが最も特徴を出すのは、うまい最適化を有限自由度の系で行うときである。こうすると、簡単な計算で熱力学量については大掛かりな数値計算とほぼ一致する結果を出せる。図15にはSFTのクラスターと媒質への埋め込みが模式的に示されている。

5.4 ハバード模型への適用

5.4.1 モット転移と電荷ギャップ

まず、サイトあたり1個の電子があるハバード模型を考える。1次元ではモット転移が起きないことがわかっているが、2次元ではどうだろうか？DFMTでは、 U/t の増加につれてモット転移が生ずるが、絶縁体状態の記述に問題があるので結果は信用できない。2サイト以上のクラスターを取る拡張では、最隣接対の反強磁性相関が取り入れられる。図16に計算結果の例を示す[50]。クラスター有効場理論にDCA、クラスター不純物ソルバーにはQMCを用いている。これを以後DCA+QMCとあらわす。クラスターのサイズを大きくすると、 U/t の小さい領域ですでにモットギャップがあいていることがわかる。

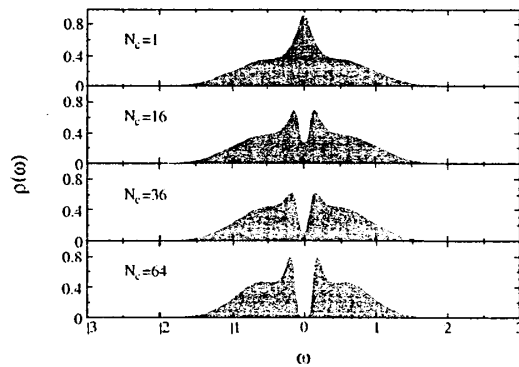


図16: ハーフフィリング $n=1$, 相互作用 $U/t=1$ における2次元ハバードモデルの状態密度 (DCA+QMC)。DMFT($N_c=1$)では、フェルミ単位 ($\omega=0$) でピークが存在するが、 N_c を大きくすると、フェルミ単位に明瞭なギャップが開くことがわかる [50]。

一方、次近接ホッピング t' を入れると、反強磁性相関にフラストレーションが生ずる。この場合には、小さい U では金属状態が安定化し、 U/t の増加とともにモット転移が生ずることが報告されている [51, 52, 53]。

図17は、CDMFTの連続媒質をSFTを用いて有限自由度で代理し、1次元ハバードモデルの電子密度を化学ポテンシャル μ の関数として導出したものである [40]。ハーフフィリングではモット絶縁体が基底状態になっているが、これに伴って μ の有限の区間にわたって $n=1$ になる。これが電荷ギャップに対応する。 $N_c=2, N_b=8$ としてクラスターを最適化すると、 $n(\mu)$ のカスプ構造を含めて、ほぼ厳密解の結果を再現することがわかる。DMFT

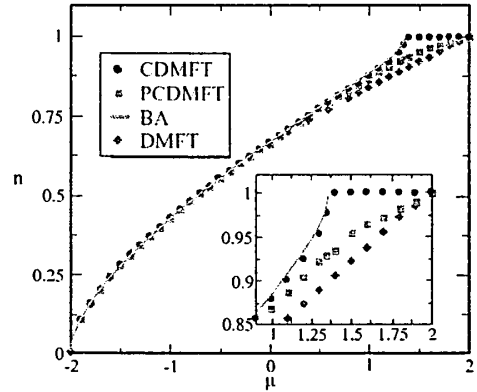


図17: $U/t=4$ における1次元ハバードモデルの電子密度 n と化学ポテンシャル μ の関係。 $N_c=2, N_b=8$ を用いている [40]。BA はベーテ仮説による厳密解、PCDMFT は格子の周期性を忠実に取り入れるようにCDMFTを変形したものである。

ではもちろんこのように正確な結果は得られない。

5.4.2 ドーピングと擬ギャップ

擬ギャップは、はじめ高温超伝導体のNMRで報告され [54]、帯磁率、電気伝導、光電子分光などの物理量でも次々に観測された。この原因については、

1. クーパー対形成の揺らぎ
2. 反強磁性の揺らぎ
3. 多体相関による散乱の増大

などが議論されている [55]。DCA+QMCによる計算結果を図18に示す [56]。ハーフフィリングから少し外れた密度で、確かに状態密度のくぼみがフェルミ単位付近に生じていることがわかる。すなわち $\delta=0.050$ では、フェルミ単位付近に擬ギャップがあるが、 $\delta=0.200$ では消失している。これに対応して、低ドーピング領域では、帯磁率が低温で急速に減少する。Jarrellらは、擬ギャップの現れる領域が、超伝導転移や反強磁性転移の臨界点近傍ではないことから、(i),(ii)の揺らぎ機構を排除している。むしろ、共鳴価電子結合 (RVB) に近い以下の描像が妥当である。すなわち、ホールの周囲がみな反強磁性相関のあるスピンであれば、この反強磁性バンドを切断して移動する必要がある。これに必要なエネルギーは $J \sim 4t^2/U$ である。したがって、擬ギャップはおおよそ J でスケールされる [57]。

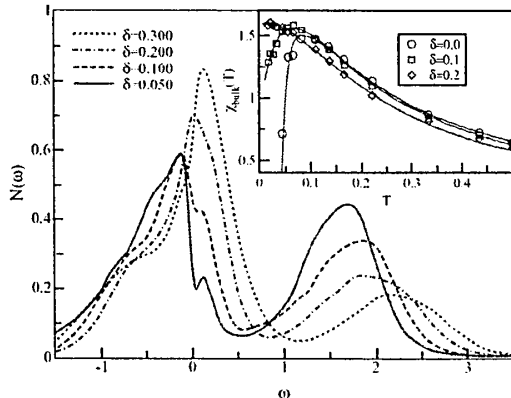


図 18: ホールをサイトあたり δ 個ドーピングした $U/t = 8$ における 2 次元ハバードモデルの状態密度と帯磁率の温度依存性 (DCA+QMC, $N_c = 4$) [56].

CPT を用いて、より大きいクラスターでの 1 電子スペクトル関数が求められた [53]。これは角度分解光電子スペクトルと対応する。ハーフフィリングから電子を減らす場合と増やす場合で、スペクトルの様相はかなり異なる。パラメータを適当に選ぶと、銅酸化物の実験と対応する強度分布が得られた。

5.4.3 反強磁性

正方格子ハバードモデルの基底状態は、ハーフフィリングにおいては、1 次元ではスピン液体、2 次元以上では反強磁性秩序状態である。ただし、有限温度では 2 次元の反強磁性秩序は存在しない。したがって、これらの厳密な性質を再現できるかどうかは近似理論のひとつのテストになる。通常の分子場理論では次元による違いは記述できない。DMFT でも同様である。DCA+QMC では、 N_c の増加とともに転移温度 T_N が減少する。しかし、 $N_c = 40$ としても $N_c = 1$ の値の 7 割程度にしか下がらない [58]。したがって、転移温度をゼロに下げるのは非常に困難であることがわかる。

一方、 $T = 0$ における磁気秩序の次元依存性については、より妥当な結果が得られている。すなわち、CPT のクラスター計算と Potthoff の変分理論を組み合わせると、反強磁性分子場 h を最適化することができる。この結果は、1 次元において $h = 0$ 、2 次元において $h \neq 0$ という結果が得られる [59]。1 次元のハバード鎖をならべたラダーでは、 $h = 0$ のはずであるが、計算では有限の値が出てしまう。しかし、この有限値はラダーを長く

していくと急速に 0 に近づいていく。

5.4.4 超伝導

同一サイトの電子間斥力が強い場合には、クーバー対の波動関数は原点で 0 になるのが有利である。したがって、s 波よりも p 波や d 波の対称性が好まれる。しかし、DMFT では周囲をならしてしまうので、s 波以外の対称性を扱うことはできない。d 波を扱うには最低 4 サイトのクラスターを考慮する必要がある。反強磁性と同様に、2 次元のハバードモデルでは、超伝導の転移温度も厳密には 0 になるはずである。クラスター平均場理論ではこれが有限に出るが、現実の準 2 次元物質の状況を理解するには便利な結果となる。図 19 は、 $N_c = 4$ の DCA+QMC を用いて、正方格子ハバードモデルの各種感受率を計算し、その発散から転移温度を決めて求めた相図である [28]。擬ギャップの領域は帯磁率の極大を与える温度で決めている。d 波の超伝導と反強磁性が銅酸化物系の相図と対応する形で得られている。

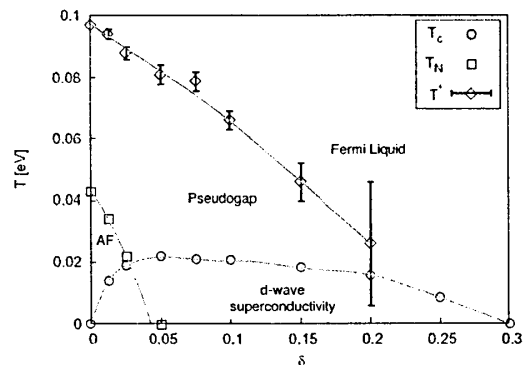


図 19: 超伝導と磁性を含む 2 次元ハバードモデルの相図 [28]。 $U/t = 8$ の場合を示す。

6 まとめ

この講義ノートでは、量子多体系が示す興味ある物理を次元性の役割を強調して述べた。すなわち、まず近藤不純物は空間ゼロ次元系の物理とみなせる。これを適当にマップすると 1 次元の問題に直せる。特にボソン化の考え方や、厳密解の適用可能性が共通している。現実の 3 次元系を理解するためには、1 次元から次元を増やしていくよりも、無限次元を逆の極限として用いたほうが有用である。この講義ノートの後半で詳しく述べたよう

に、無限次元の扱いは中間段階で有効不純物系を導入する。この意味で、無限次元はゼロ次元と案外近いところにある。こうして、高次元極限は低次元極限と滑らかにつながっていることがわかった。しかし、2次元系はどちらの極限からアプローチしても一筋縄ではいかない。革命的な理論が必要である。

量子多体系の相互作用効果を理解するために、二つの最も重要な概念があることは初めにも強調した。その一つは繰込みである。繰り込みについては、さまざまなとらえ方があり、著者も以前から理解に苦しんできた。このテキストで与えた形式は、自分としては一番納得できる考え方である。これに基づく私の説明をうけた若い人が、何やらわかってきているような感触を持っているので、この理解の輪を夏の学校で広げたいと願っている。

もう一つ、初学者が悩むのはボソン化の方法である。中でももっとも厄介なのが、フェルミオンをボソンで表現するところである。Luther-Peschel の原論文 [24] は、他の物理量との交換関係を比較して、フェルミオンと同等であることを示している。ただし、ここで発散量が出てくるので気持ちが悪い。これに輪をかけるのは、無限自由度の場の理論による解釈である。ゼロモードだの Majorana fermion だのを持ち出して煙に巻こうとするので、どうにもわかった気がしない。私も長らく気持ちの悪い状態が続いていた。この講義ノートでは、Haldane の労作 [22] を噛み砕いて、有限量だけでボソン化がなされていることを強調した。また、ボソン化のひとつの理論的頂点として、再フェルミオン化によって近藤効果と1次元の励起ギャップの動的形成機構を厳密に理解する例を示した。

今回の講義では、残念ながら素励起の描像について詳しく説明する余裕がない。素励起描像は、遍歴電子系においては、フェルミ流体理論としては非常に長い歴史を持つ確立した概念である。一方、1次元電子系でフェルミ流体理論が破綻することもよく知られている。1次元のボソン化の方法は素励起について調べるのには適していない。すなわち、低振動数と長波長の極限では、共形対称性を持つボソンがもっとも便利であるが、スペクトルに分散が出てくると共形不変性は破綻する。1次元多体系の完全系を張る基底は素励起に対応するが、素励起をフェルミ粒子としても完全系を張れるし、新奇な分数統計粒子を導入しても別の完全系を張れる [60]。したがって、基底の良し悪しは、系の固有状態を記述するのにどれだけ便利かということによって判定される。1次元系のパラメータを変化させると、出現する粒子が変わるという事情は気持ちが悪いので、自由フェルミ気体に匹敵する標準的な1次元系を持ち、一般の系はその標準系か

ら摂動論で理解できることが望ましい。私の個人的な見解では、1次元系の基本粒子は分数統計に従うスピノンとホロンであり、その事情を端的に表現するのは、 $1/r^2$ 型超対称 t - J モデルということになる [60]。これについては、別の機会に詳しく論じたい。

参考文献

- [1] K.G. Wilson, Phys.Reports **2**, 75 (1974).
- [2] Y. Kuramoto and Y. Kitaoka, *Dynamics of Heavy Electrons*, (Oxford University Press, Oxford, 2000).
- [3] 倉本義夫, 物性研究 **75**, 388 (2000).
- [4] 倉本義夫, 清水幸弘, 固体物理 **39**, 417 (2004).
- [5] 川上則雄, 梁 成吉, “共形場理論と1次元量子系”, (岩波書店, 1997)
- [6] 永長直人, “電子相関における場の量子論”, (岩波書店, 1998)
- [7] 斯波弘行, “電子相関の物理”, (岩波書店, 2001)
- [8] J. Hubbard: Proc. Royal. Soc. London **276** (1963) 238.
- [9] S. Inagaki, Prog. Theor. Phys. **62**, 1441 (1979).
- [10] K.I. Kugel and D.I. Khomski: Sov. Phys. Uspekhi **25** 231 (1982).
- [11] P.W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [12] J. Kondo, in *Solid State Physics* Vol.23 (Academic Press, New York, 1969), p.183.
- [13] A.C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, (Cambridge, 1993).
- [14] B. Coqblin and J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **185**, 847 (1969). (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).
- [15] P.W. Anderson, J. Phys. C **3**, 2439 (1970).
- [16] A.A. Abrikosov, Physics **2**, 5 (1965).
- [17] J.W. Rasul and A.C. Hewson, J. Phys. C **17**, 2555 & 3332 (1984).

- [18] N. Read and D.M. Newns, J. Phys. C **16**, 3273 (1983).
- [19] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **5**, 349 (1950).
- [20] J.M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963).
- [21] D.C. Mattis and E.H. Lieb, J. Math. Phys. **6**, 304 (1963).
- [22] F.D.M. Haldane, J. Phys. C **14**, 2585 (1981).
- [23] J. von Delft and H. Schoeller, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 225 (1998).
- [24] A. Luther and I. Peschel Phys. Rev. B **9**, 2911 (1974).
- [25] A. Luther and V.J. Emery, Phys. Rev. Lett. **33**, 389 (1974).
- [26] 倉本義夫, 酒井治: 固体物理 **29**, 777 (1994).
- [27] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M.J. Rozenberg: Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [28] T. Maier et al., Rev. Mod. Phys. **77**, 1027 (2005).
- [29] Y. Kuramoto: *Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations*, eds. T. Kasuya and T. Saso (Springer Verlag, 1985) p.152.
- [30] Y. Kuramoto and T. Watanabe: Physica **148B** (1987) 80.
- [31] L. Onsager: J. Am. Chem. Soc. **58** (1936) 1486.
- [32] R. Brout: Phys. Rev. **122** (1960) 469.
- [33] Y. Kuramoto and N. Fukushima: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 583.
- [34] R.J. Elliott, J.A. Krumhansl and P.A. Leath: Rev. Mod. Phys. **46** (1974) 465.
- [35] E. Müller-Hartmann: Z. Phys. B **74** (1989) 507.
- [36] C.-I. Kim, Y. Kuramoto and T. Kasuya: J. Phys. Soc. Jpn. **59** (1990) 2414.
- [37] A. Georges and G. Kotliar: Phys. Rev. B **45** (1992) 6479.
- [38] O. Sakai and Y. Kuramoto: Solid State Commun. **89** (1994) 307.
- [39] M. Caffarel and W. Krauth: Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 1545.
- [40] M. Capone et al., Phys. Rev. B **69**, 195105 (2004).
- [41] M. Potthoff, M. Aichhorn and C. Dahnken: Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 206402.
- [42] G. Baym: Phys. Rev. **127** (1962) 835.
- [43] M. Potthoff: Eur. Phys. J. B **36** (2003) 335.
- [44] Y. Shimizu: J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002) 1166.
- [45] M. Tsukada: J. Phys. Soc. Jpn. **26** (1969) 684.
- [46] C. Gros and R. Valenti: Annalen der Phys. **3** (1994) 460.
- [47] D. Sénéchal, D. Perez and M. Pioro-Ladrière: Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 522.
- [48] M.H. Hettler et al.: Phys. Rev. B **58** (1998) R7475.
- [49] G. Kotliar et al.: Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 186401.
- [50] S. Moukouri and M. Jarrell: Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 167010.
- [51] Y. Imai and N. Kawakami: Phys. Rev. B **65** (2002) 233103.
- [52] O. Parcollet, G. Biroli and G. Kotliar: Phys. Rev. Lett. **92**, 226402 (2004).
- [53] D. Sénéchal and A.-M. Tremblay: Phys. Rev. Lett. **92**, 126401 (2004).
- [54] H. Yasuoka, T. Imai, T. Shimizu: *Strong Correlation and Superconductivity*, (Springer Verlag, Berlin, 1989) p. 254.
- [55] Y. Yanase et al.: Phys. Rep. **387** (2003) 1.
- [56] M. Jarrell et al.: Europhys. Lett. **56** (2001) 563.
- [57] T.D. Stanescu and P. Phillips: Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 017002.
- [58] M. Jarrell et al.: Phys. Rev. B **64** (2001) 195130.
- [59] C. Dahnken et al.: Phys. Rev. B **70**, 245110 (2004).
- [60] 加藤雄介, 倉本義夫, 固体物理 **31** 117 (1995).