

分子場 RVB 理論に現れる スピノンとホロンの局在と閉じ込め

北海道大学 理学部 物理学科
大川 房義

(1995 年 3 月 17 日受理)

Abstract

高温超伝導理論の一つ、分子場 RVB 理論ではスピノンとホロンと呼ばれる二つの素励起が現れ低エネルギー励起の本質的部分を担う。RVB 理論で、この素励起が遍歴的であることは言うまでもない。しかし、理論の出発点で要求されている局所粒子数保存則を厳密に考慮すると、スピノンとホロンの局在を示すことができる。さらに、この素励起には無限に大きい励起エネルギーが必要であること、すなわちスピノンとホロンの閉じ込めも示すことができる。

1 はじめに

銅酸化物系における高温超伝導発見 [1] から 10 年弱の間の実験事実の集積により、高温超伝導理論の可能性はだいぶ絞りこまれてきている。初期の段階から現在まで引き続き有力な理論の一つとみなされている理論に、分子場 RVB 理論とその拡張理論がある [2, 3, 4, 5]。しかし、この理論には筆者を長く悩まして一つの疑問がある [6, 7]。「この理論で中心的役割を演じるスピノンとホロンと呼ばれる素励起が、現実の素励起とどんな関係にあるのだろうか？」この疑問を検討するのが本稿の目的である。以下の議論で理解のいたらない点は御教示頂ければ幸いである。

2 分子場 RVB 理論

銅酸化物系の高温超伝導は CuO_2 面で起きている。この超伝導現象の最も簡単な有効ハミルトニアンは正方 2 次元格子上的強相関ハバード模型であると考えられている [2]。

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + U \sum_i a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow}. \quad (1)$$

ここで $\langle ij \rangle$ は最近接格子点についての和であり、 $a_{i\sigma}^\dagger$ と $a_{i\sigma}$ はそれぞれ電子の生成、消滅演算子である。強相関の条件は

$$U/|t| \gg 1, \quad (2)$$

で与えられる。現実の系ではオンサイトの斥力 U は約 8eV であり、トランスファー積分 t は約 0.5eV であるから (2) 式は十分に満足されている。強相関の極限では、一つのサイトをアップスピンとダウンスピンの 2 個の電子が占拠することはない。すなわち、二重占拠状態の排除という条件がつく。強相関領域では、ハバード模型 (1) は t - J 模型に写像できる [8]。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{t-J} = & -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \frac{1}{2} J \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ \alpha\beta\gamma\delta}} \frac{1}{4} \left[\sum_{\eta} \sigma_{\eta}^{\alpha\beta} \sigma_{\eta}^{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right] a_{i\alpha}^\dagger a_{i\beta} a_{j\gamma}^\dagger a_{j\delta} \\ & + J \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ \alpha\beta\gamma\delta}} \frac{1}{4} \left[\sum_{\eta} \sigma_{\eta}^{\alpha\beta} \sigma_{\eta}^{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right] a_{i\alpha}^\dagger a_{i\beta} a_{j\delta}^\dagger a_{j\gamma}. \end{aligned} \quad (3)$$

ただし、ハミルトニアン (3) は強相関の極限からの展開として得られるので、演算されるヒルベルト空間に二重占拠状態の排除という制限がつく。(3) 式で $\sigma_\eta^{\alpha\beta}$ はパウリ行列 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の $(\alpha\beta)$ 成分である。第三項の $\langle i; jjj \rangle$ では、 j サイトと jj サイトは i サイトの最近接サイトであるが、 $j \neq jj$ である。

以下の議論には関係ないことであるが、次の事実は注目に値する。(3) 式の第二項は、いわゆる超交換相互作用である [9]。スピン揺動という観点から眺めると、この相互作用は上部・下部ハバードバンド間の高エネルギースピンの励起の仮想交換過程からも導ける [10]。超交換相互作用は高エネルギースピンの揺動効果の一つである。高エネルギー過程から導ける効果であるから、低エネルギー過程に対しては周波数依存性と虚数部分は無視できる。低エネルギースピンの揺動効果との大きな対比点である。(1) 式に現れるパラメータを用い、交換相互作用の強さ J は

$$J = -\frac{4t^2}{U} \simeq -0.12\text{eV}, \quad (4)$$

と計算できる。この大きさは高温超伝導の高い転移温度を再現するのに必要として期待されている大きさである。

二重占拠状態の排除という制限のため、 t - J 模型 (3) は取り扱いが難しい。このため、補助粒子を導入して (3) を書き換える。ここで便宜的に補助粒子を s 粒子、 b 粒子と呼び、その生成演算子をそれぞれ $s_{i\sigma}^\dagger$ と $b_i^\dagger$ と書く。電子が占拠するサイトに対応し s 粒子を占拠させ、空虚のサイトに対応し b 粒子を占拠させる。局所補助粒子数についての拘束条件

$$Q_i \equiv s_{i\uparrow}^\dagger s_{i\uparrow} + s_{i\downarrow}^\dagger s_{i\downarrow} + b_i^\dagger b_i = 1, \quad (5)$$

を課せば、二重占拠状態の排除という条件は満足される。対励起

$$\tilde{a}_{i\sigma}^\dagger \equiv s_{i\sigma}^\dagger b_i, \quad \tilde{a}_{i\sigma} \equiv b_i^\dagger s_{i\sigma}, \quad (6)$$

を考える。補助粒子の統計性がいずれか一方がフェルミ粒子で、他方がボーズ粒子とすれば、(5) 式で制限されたヒルベルト空間内で、対励起の演算子はフェルミ粒子の交換関係

$$\tilde{a}_{i\sigma}^\dagger \tilde{a}_{j\tau} + \tilde{a}_{j\tau} \tilde{a}_{i\sigma}^\dagger = \delta_{ij} \delta_{\sigma\tau}, \quad (7)$$

を満足する。(6) で定義される対励起が電子に対応し、電子のトランスファー積分による移動は s 粒子と b 粒子との間の交換過程に対応する。

以上の考察に基づき、(3) 式で定義される t - J 模型は補助粒子を使い次のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{t-J} = & -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} s_{i\sigma}^\dagger b_j^\dagger s_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} s_{i\sigma}^\dagger s_{i\sigma} \\ & + \frac{1}{2} J \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ \alpha\beta\gamma\delta}} \frac{1}{4} \left[\sum_{\eta} \sigma_\eta^{\alpha\beta} \sigma_\eta^{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right] s_{i\alpha}^\dagger s_{i\beta} s_{j\gamma}^\dagger s_{j\delta} \\ & + J \sum_{\substack{\langle i;jjj' \rangle \\ \alpha\beta\gamma\delta}} \frac{1}{4} \left[\sum_{\eta} \sigma_\eta^{\alpha\beta} \sigma_\eta^{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right] s_{i\alpha}^\dagger s_{i\beta} s_{j\gamma}^\dagger b_j b_{j'}^\dagger s_{j'\delta}. \end{aligned} \quad (8)$$

第二項の μ は電子の化学ポテンシャルである。第四項は基底状態エネルギー等を問題にするときは無視できないが、超伝導を議論するときは本質的役割を演じないので、通常無視される。ここでも第四項は無視する。

まず、ハミルトニアン (8) の持つ重要な対称性、局所粒子数保存の対称性、あるいは局所ゲージ変換に対する対称性を注意する。

$$[\mathcal{H}_{t-J}, Q_i] = 0. \quad (9)$$

局所粒子数の拘束条件 (5) を課すことと首尾一貫している。局所ゲージ対称性 (9) が破れていないとき異なるサイト $i \neq j$ にたいして

$$\langle s_{i\sigma}^\dagger s_{j\sigma} \rangle = 0, \quad \langle b_i^\dagger b_j \rangle = 0. \quad (10)$$

すなわち、補助粒子である s 粒子と b 粒子は局在している。また、サイト対角成分は局所ゲージ変換に対して不変量であるので、零でない値を持つ。

$$\langle s_{i\sigma}^\dagger s_{i\sigma} \rangle = n_{s\sigma}, \quad \langle b_i^\dagger b_i \rangle = 1 - n_{s\uparrow} - n_{s\downarrow}, \quad (11)$$

$$n_{s\sigma} = \frac{1}{N} \sum_i \langle a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle \tilde{a}_{i\sigma}^\dagger \tilde{a}_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle s_{i\sigma}^\dagger s_{i\sigma} \rangle. \quad (12)$$

RVB理論においては補助 s 粒子がスピノン、補助 b 粒子がホロンと呼ばれる。統計性については先に述べたように、一方がフェルミ粒子で他方がボーズ粒子であればよい。スピノンがフェルミ粒子でホロンがボーズ粒子という理論枠組みを一般にスレイブボゾンの方法と呼ぶ。いっぽう、スピノンがボーズ粒子でホロンがフェルミ粒子という理論枠組みをスレイブフェルミオンの方法と呼ぶ。いずれの方法も、厳密に扱えば、あるいは合理的な近似で扱えば同じ結果を与えるべきである。しかし、分子場近似では大きな違いがあることが知られている。たとえば、最も大きな違いの一つはフェルミ面の大きさである。後で議論するように、分子場近似では局所ゲージ対称性を破り、スピノンとホロンは遍歴的である。電子数が半分詰まった場合よりすこし少ないときを考えよう。スレイブボゾンの方法では電子をフェルミ粒子のスピノンに対応させるのでフェルミ面は大きい。一方、スレイブフェルミオンの方法では、空虚のサイトをフェルミ粒子のホロンに対応させるので、フェルミ面は小さい。フェルミ面の大きさばかりでなく総合的に分子場近似の段階でも合理的とみえる結果が得られるとの理由で、スレイブボゾンの方法がとられることが多い。ここでも、スレイブボゾンの方法をとる。

ハミルトニアン (8) を扱う方法はいろいろあるが、平均場RVB理論との関連でまず凡関数積分法をとろう。分配関数は正規化因子を除き、次の凡関数積分で与えられる。

$$Z = \int Ds^\dagger Ds Db^* Db D\lambda \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \left(L(\tau) + i \sum_j \lambda_j(\tau) (Q_j(\tau) - 1) \right) \right], \quad (13)$$

$$L(\tau) = \sum_{j\sigma} s_{j\sigma}^\dagger(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} s_{j\sigma}(\tau) + \sum_j b_j^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} b_j(\tau) + \mathcal{H}_{t-J}(\tau). \quad (14)$$

ここで $s_{i\sigma}^\dagger(\tau)$ と $s_{i\sigma}(\tau)$ はフェルミ粒子に対応しグラスマン数であり、 $b_i^*(\tau)$ と $b_i(\tau)$ はボーズ粒子に対応し複素数である。同様に $Q_i(\tau)$ と $\mathcal{H}_{t-J}(\tau)$ も対応するグラスマン数と複素数の関数で

ある。すなわち、(5) 式と (8) 式で演算子に対応するグラスマン数と複素数で置き換えればよい。また、 $\lambda_i(\tau)$ は実数である。積分は $s_{i\sigma}^\dagger(\tau)$ 、 $s_{i\sigma}(\tau)$ 、 $b_i^*(\tau)$ 、 $b_i(\tau)$ 、 $\lambda_i(\tau)$ についての凡関数積分である。(13) で β はスピンでなく、温度 T の逆数 $\beta = 1/k_B T$ である。ここで、 k_B はボルツマン定数である。

$$\delta(Q_i(\tau) - 1) = \Delta\tau \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_i(\tau)}{2\pi} \exp[-i\Delta\tau\lambda_i(\tau)(Q_i(\tau) - 1)], \quad (15)$$

の関係式に注意すれば、実数ボーズ粒子的補助場 λ の導入により局所粒子数の拘束条件 (5) が満足させられることがわかる。ここで $\Delta\tau$ は (13) で現れる τ 積分の微少積分要素である。

補助場 $\lambda_i(\tau)$ の τ 依存性は無視することもできる。局所粒子数保存則 (9) のために、

$$Q_i(\tau) = (\text{一定}), \quad (16)$$

であり、ある τ たとえば $\tau = 0$ でだけ拘束条件を課すのでもよい。その場合は、正規化因子を除き分配関数は

$$Z = \int Ds^\dagger Ds Db^* Db \prod_j d\lambda_j \exp \left[- \int_0^\beta d\tau L(\tau) - i\beta \sum_j \lambda_j (Q_j(0) - 1) \right], \quad (17)$$

と $D\lambda$ の凡関数積分でなく単なる $d\lambda$ の積分で書ける。

凡関数積分 (13) を簡単に扱うには、さらにスピノンが遍歴的になる揺動を表す複素数ボーズ粒子的補助場 $\xi_{ij}(\tau)$ を導入する。ハミルトニアン (8) の第三項は

$$\frac{1}{4} J \sum_{\langle ij \rangle_{\sigma\tau}} s_{i\sigma}^\dagger s_{j\sigma} s_{j\tau}^\dagger s_{i\tau}, \quad (18)$$

と書ける。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} J \sum_{\langle ij \rangle_{\sigma\tau}} s_{i\sigma}^\dagger s_{j\sigma} s_{j\tau}^\dagger s_{i\tau} - \frac{1}{J} \sum_{\langle ij \rangle} \left(\xi_{ij} - \frac{1}{2} J \sum_{\sigma} s_{i\sigma}^\dagger s_{j\sigma} \right) \left(\xi_{ij}^* - \frac{1}{2} J \sum_{\tau} s_{j\tau}^\dagger s_{i\tau} \right) = \\ & = \sum_{\langle ij \rangle} \left[-\frac{1}{J} |\xi_{ij}|^2 + \frac{1}{2} \xi_{ij} \sum_{\sigma} s_{j\sigma}^\dagger s_{i\sigma} + \frac{1}{2} \xi_{ij}^* \sum_{\sigma} s_{i\sigma}^\dagger s_{j\sigma} \right], \end{aligned} \quad (19)$$

の関係式を使うと、正規化因子を除き分配関数は

$$Z = \int Ds^\dagger Ds Db^* Db D\lambda D\xi^* D\xi \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \left(\tilde{L}(\tau) + i \sum_j \lambda_j(\tau) (Q_j(\tau) - 1) \right) \right], \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \tilde{L}(\tau) = & \sum_{j\sigma} s_{j\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial\tau} - \mu \right) s_{j\sigma}(\tau) + \sum_j b_j^*(\tau) \frac{\partial}{\partial\tau} b_j(\tau) \\ & - t \sum_{\langle ij \rangle_{\sigma}} s_{i\sigma}^\dagger(\tau) b_i(\tau) b_j^*(\tau) s_{j\sigma}(\tau) \\ & + \sum_{\langle ij \rangle} \left[-\frac{1}{J} |\xi_{ij}(\tau)|^2 + \frac{1}{2} \xi_{ij}(\tau) \sum_{\sigma} s_{j\sigma}^\dagger(\tau) s_{i\sigma}(\tau) + \frac{1}{2} \xi_{ij}^*(\tau) \sum_{\sigma} s_{i\sigma}^\dagger(\tau) s_{j\sigma}(\tau) \right], \end{aligned} \quad (21)$$

と書ける。グラスマン数の凡関数積分を実行した後、残りの補助場 ξ 、補助場 λ とボーズ粒子場 b についての凡関数積分を鞍点近似で計算するのが鞍点近似理論である。

鞍点近似の結果は、元の t - J 模型 (8) において分子場近似を行うことによって得られる。補助場 $\lambda_i(\tau)$ についてはそのサイト i 依存性を無視して

$$i\lambda_i(\tau) = -\lambda_0, \quad (22)$$

と鞍点解の λ_0 で近似する。これは、もとの補助粒子の t - J 模型において補助粒子に一樣な化学ポテンシャル項を導入したことに対応する。

$$\mathcal{H}_{t-J} \Rightarrow \mathcal{H}_{t-J} - \lambda_0 \sum_i (Q_i - 1). \quad (23)$$

化学ポテンシャル λ_0 は粒子数の条件 (11) と (12) から決めてもよい。鞍点近似で補助場 ξ が零でない値が鞍点値であるということは、

$$\langle s_{i\sigma}^\dagger s_{j\sigma} \rangle \neq 0, \quad (24)$$

に対応する。物理的には局所ゲージ対称性が破れて s 粒子、スピノンが遍歴的になることに対応する。これに引きずられ b 粒子、ホロンが遍歴的になり、

$$\langle b_i^\dagger b_j \rangle \neq 0. \quad (25)$$

ホロンが遍歴的になれば、ボーズ凝縮が可能である。実際、ホロン場 b が零でない値が鞍点値であるということは

$$\langle b_i^\dagger \rangle \neq 0, \quad (26)$$

であり、ホロンのボーズ凝縮がおきていることに対応する。さらに超伝導状態を扱うときは、スピノンのクーパー対の凝縮も起こるとして

$$\langle s_{i\uparrow}^\dagger s_{j\downarrow}^\dagger \rangle \neq 0. \quad (27)$$

局所ゲージ対称性の破れに伴うこれらの異常平均値を自己無撞着に決める理論が分子場 R V B 理論である。

3 補助粒子の局在と閉じ込め

対称性 (9) は元々の t - J 模型 (3) を補助粒子 t - J 模型 (8) に写像するにあたり、自然に付随してきたものである。したがって、対称性の破れ (24)、(25)、(26)、(27) に対応する現象は元々の t - J 模型には存在しない。このことを確かめるために、局所粒子数の拘束条件をきちんと扱ってみよう。拘束条件は

$$\begin{aligned} \delta(Q_i(\tau) - 1) &= \lim_{U_\infty \rightarrow +\infty} \Delta\tau \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_i(\tau)}{2\pi} \exp \left[-\Delta\tau \left\{ \frac{1}{2U_\infty} \lambda_i^2(\tau) + i\lambda_i(\tau)(Q_i(\tau) - 1) \right\} \right] \\ &= \lim_{U_\infty \rightarrow +\infty} \Delta\tau \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_i(\tau)}{2\pi} \exp \left[-\Delta\tau \left\{ \frac{1}{2U_\infty} \left(\lambda_i(\tau) + iU_\infty(Q_i(\tau) - 1) \right)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{2} U_\infty (Q_i(\tau) - 1)^2 \right\} \right], \end{aligned} \quad (28)$$

の関係式を用いても課すことができる。(28) 式を用いて補助場 λ についての凡関数積分を実行すれば、ハミルトニアン (8) を局所拘束条件 (5) 付きで扱うことはハミルトニアン

$$\mathcal{H}_\infty = \mathcal{H}_{t-J} + \frac{1}{2} U_\infty \sum_i (Q_i - 1)^2, \quad (29)$$

をヒルベルト空間についてのなんら制限条件なしに扱うのと同じであることはすぐわかる。ただし (28) 式は U_∞ が無限に大きい極限で成立するのであるから、ハミルトニアン (29) でも $U_\infty \rightarrow +\infty$ の極限をとる必要があるのは言うまでもない。ハミルトニアン (29) も局所粒子数保存の対称性を持つことはすぐわかる。

$$[\mathcal{H}_\infty, Q_i] = 0. \quad (30)$$

したがって、異なる $\{Q_i\}$ の配位を持つヒルベルト空間は決して混じらない。言い換えれば、異なる $\{Q_i\}$ の配位を持つヒルベルト空間の間の線形結合が固有状態になることはない。ハミルトニアン (29) の第二項に新たに現れた項の物理的意味は明らかである。 $Q_i \neq 1$ の場合を含むヒルベルト部分空間は排除される。

大きな U_∞ の極限をとることに多少の疑問を持つかもしれない。しかし、大きな U_∞ の果たす役割は、互いに混じりあわないヒルベルト部分空間をエネルギー的に取捨選択することだから、大きな U_∞ の極限で元の t - J 模型に含まれない物理現象が、たとえば偽りの相転移が、引き起こされるとはとうてい思えない。 $U_\infty = +\infty$ は特異点ではない。

スレイブボソンの方法を取り、スピノンの一粒子グリーン関数を考えよう。

$$S_{ij\sigma}(\tau) = - \langle T_\tau s_{i\sigma}(\tau) s_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle. \quad (31)$$

ここで、 $s_{i\sigma}^\dagger(\tau)$ と $s_{i\sigma}(\tau)$ はそれぞれの理論形式にしたがい、ハイゼンベルグ表示の演算子、あるいはグラスマン数である。スペクトル表示で書くと

$$S_{ij\sigma}(i\epsilon_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\epsilon_n \tau} S_{ij\sigma}(\tau) = \int dx \frac{\rho_{ij}(x)}{i\epsilon_n - x}, \quad (32)$$

で、スペクトルは

$$\begin{aligned} \rho_{ij}(\epsilon) = \frac{1}{Z} \sum_{|g\rangle} e^{-\beta E_g} & \left[\sum_{|\ell\rangle} \langle g | s_{j\sigma}^\dagger | \ell \rangle \langle \ell | s_{i\sigma} | g \rangle \delta(\epsilon - E_g + E_\ell) \right. \\ & \left. + \sum_{|m\rangle} \langle g | s_{i\sigma} | m \rangle \langle m | s_{j\sigma}^\dagger | g \rangle \delta(\epsilon + E_g - E_m) \right], \end{aligned} \quad (33)$$

と計算できる。ここで $|g\rangle$ 、 $|\ell\rangle$ と $|m\rangle$ はハミルトニアン (29) の固有状態である。

$$\mathcal{H}_\infty |g\rangle = E_g |g\rangle, \quad \mathcal{H}_\infty |\ell\rangle = E_\ell |\ell\rangle, \quad \mathcal{H}_\infty |m\rangle = E_m |m\rangle. \quad (34)$$

また

$$Z = \sum_{|g\rangle} e^{-\beta E_g}, \quad (35)$$

は分配関数である。ここであらためて、異なった $\{Q_i\}$ の配位を持つヒルベルト空間の線形結合が固有状態になることはないことに注意しよう。大きな U_∞ の極限では、(33) と (35) の $|g\rangle$ についての和はボルツマン因子のため

$$\{\text{すべてのサイトに対して } Q_{ii} = 1\}, \quad (36)$$

のヒルベルト空間に限定される。その結果、(33) 式の $|l\rangle$ についての和は

$$\{Q_i = 0 \text{ かつ } i' \neq i \text{ のサイトに対して } Q_{ii'} = 1\}, \quad (37)$$

に限定され、(33) 式の $|m\rangle$ についての和は

$$\{Q_j = 2 \text{ かつ } j' \neq j \text{ のサイトに対して } Q_{jj'} = 1\}, \quad (38)$$

に限定される。また、この時

$$E_l - E_g = \frac{1}{2}U_\infty + t \times O([t/U_\infty]^0), \quad (39)$$

$$E_m - E_g = \frac{1}{2}U_\infty + t \times O([t/U_\infty]^0). \quad (40)$$

(36) 式、(37) 式 と (38) 式との制限から、(33) 式そして一粒子グリーン関数 (32) がサイト対角的であることを見るのは容易である。

$$S_{ij\sigma}(i\varepsilon_n) = \delta_{ij} S_{ii\sigma}(i\varepsilon_n). \quad (41)$$

スピノンは、局在している。

(39) 式と (40) 式で、 U_∞ のオーダーの項のみとるとスピノンの一粒子グリーン関数は

$$S_{ij\sigma}(i\varepsilon_n) = \delta_{ij} \left[\frac{n_{s\sigma}}{i\varepsilon_n - \frac{1}{2}U_\infty} + \frac{1 - n_{s\sigma}}{i\varepsilon_n + \frac{1}{2}U_\infty} \right], \quad (42)$$

と計算できる。(33) 式で定義されるスピノンのスペクトル関数は U_∞ 程度の無限に大きなエネルギー領域のみで大きな値を持つことがわかる。したがって、粒子数は

$$\lim_{U_\infty \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left(-\frac{1}{\pi} \right) \text{Im} S_{ii\sigma}(\varepsilon + i0) = n_{s\sigma} > 0, \quad (43)$$

と零でない値となる。ここで

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon} + 1}, \quad (44)$$

はフェルミ分布関数である。しかし、スピノンの一粒子グリーン関数は有限の ε_n に対して、大きな U_∞ の極限では消える。

$$\lim_{U_\infty \rightarrow +\infty} S_{ij\sigma}(i\varepsilon_n) = 0. \quad (45)$$

(45) 式はいかなる i サイトと j サイトについても、たとえゲージ不変量であるサイト対角的な成分 ($i = j$) についても成立する。この結論は t/U_∞ についての高次項を考慮しても同じことは明らかである。スピノンは有限の励起エネルギーでは決して単独では出現しないという意味で閉じ込められている。同様にホロンも局在し、かつ閉じ込められている。局在と閉じ込めについて、同じ結論をスレイブフェルミオンの方法で導くことができるのも自明だろう。

4 議論と疑問

鞍点近似、あるいはそれに対応する分子場近似は保存則 (9) の破れた状態、あるいは局所ゲージ対称性の破れた状態を扱っている。しかし、この破れは近似のためであり、理論を正しい方向に改良すれば対称性の回復が起きるべきであることは自明だろう。

鞍点解の回りの揺動を取り込む方向の改良が考えられる。たとえば、 $\langle \xi_{ij} \rangle$ に対応する鞍点解回りの揺動効果を取り込み、ゲージ不変でない物理量の平均値を消すことを考えよう。揺動があるということは、排除されるべきであるヒルベルト空間

$$\{\text{少なくとも一つのサイトについて } Q_i \neq 1\}, \quad (46)$$

に、量子力学的線形結合状態として、あるいはまた、熱的に留まることを意味する。ヒルベルト空間が二重占拠排除という (5) に制限されていれば、ここで考えている揺動は起き得ない揺動である。平均として消したのでは、完全には拘束条件を満足していることにはならない。しかも、ゲージ不変量である「スピノン」と「ホロン」の一粒子グリーン関数のサイト対角的成分を消すことは難しそうである。唯一可能な例外は、揺動のエネルギー尺度が無限に大きい場合である。この時は、ゲージ不変量である「スピノン」と「ホロン」の一粒子グリーン関数のサイト対角的成分も、有限のエネルギーに対して消すことができそうである。事実、補助場 λ のエネルギー尺度が U_∞ の程度、すなわち無限大であることは (28) 式から見てとれる。いっぽう、補助場 ξ のエネルギー尺度は (20) と (21) から $|J|$ 程度とみえる。しかし エネルギー尺度が無限大の補助場 λ の揺動が存在するとき、エネルギー尺度が有限の補助場 ξ の揺動はたとえ存在しても無視できるマイナーな効果というのが正しい物理でないだろうか。エネルギー尺度が無限大の揺動により、平均として異常平均値を消すのならば、最初から対称性を破らない理論と実質的に同じになりそうである。同じことは、ゲージ場の導入で対称性の回復を狙っても事情は同じように見える。

凡関数積分法による鞍点近似理論を、単に数学的に自由エネルギーあるいは基底状態エネルギーを精度よく手軽に計算する一方法と見よう。こう見ると、事実としてかなり良い近似になっている。同様なことは希薄磁性合金の問題、近藤効果の問題では詳しく調べられている [11, 12]。アンダーソン模型や s - d 模型に対する鞍点近似は基底状態エネルギーについては正確であることが知られている。特に、局在準位の縮重度が無限大のとき、あるいはスピンの大きさが無限大のとき、そしてそれに伴い伝導電子帯の縮重度も同じだけある模型、すなわち $SU(N)$ 模型で大きな N の極限では基底状態エネルギーは厳密解と一致する。

大きな N の極限の分子場理論では、もちろん対称性は破れている。一般に、対称性の破れに伴い様々な興味ある現象が現れる。その一つに、基底状態の無限自由度の縮退がある。この問題での縮退は異なるヒルベルト空間 $\{Q_i\}$ 間、あるいはその線形結合間の縮退だろう。もし、縮退した状態間の線形結合をとり、制限されたヒルベルト空間内にはないが、しかし極めて近い状態が作れるなら、すなわち $Q_i \neq 1$ とする状態の係数が無限小に小さいような線形結合状態が作れるなら、それはほぼ拘束条件付きでの正しい解とみなせそうである。しかし、基底状態エネルギーが厳密解と一致するといっても、それは励起状態まで正しいということではない。事実、鞍点近似解は大きな N の極限でも温度の上昇とともに近似が悪くなることが知られている。事情はハバード模型あるいは t - J 模型でも同じであると期待できる。

5 おわりに

基底状態エネルギーが妥当な正確さで欲しい時には鞍点近似あるいは平均場近似理論は簡単で有力な方法である。しかし、状態の対称性が問題になるとき、たとえば超伝導状態が問題になるとき鞍点近似がどれほど現象の本質をついているのかは検討が必要に思える。

凡関数積分法で補助ボーズ粒子場 $\lambda_i(\tau)$ を導入して局所粒子数拘束条件を課すことは、3 節の議論で、まず大きな U_∞ の極限をとることに対応する。したがって、補助ボーズ粒子場を正しく扱う理論ならばスピノンとホロンは局在しかつ閉じ込められているはずである。この点から見れば、鞍点近似理論は全く正しくない。鞍点近似理論のひとつの拡張は、鞍点解回りの揺動、あるいはゲージ場の揺動を取り込むことである。揺動効果でゲージ不変でない一粒子グリーン関数のサイト非対角的な成分 $S_{ij\sigma}(i\epsilon_n)$ 、ただし $i \neq j$ 、を消しゲージ不変性を回復するのは正しい方向のように見える。しかし、ゲージ不変量である一粒子グリーン関数のサイト対角的な成分 $S_{ii\sigma}(i\epsilon_n)$ を (45) 式のように消すという意味で、揺動効果により補助粒子を閉じ込めることは、揺動の典型的エネルギー尺度が無限に大きな場合を除けば、普通はできない。スピノンとホロン、また対称性を回復する揺動効果が現実の低エネルギー現象に直接効いてくるシナリオは信じがたい。

最も本質的なことは、補助粒子の持つ物理的意味である。補助粒子のスペクトル密度が有限のエネルギーでは消えている事実は、補助粒子は拘束条件のためにフェルミ粒子とかボーズ粒子、あるいはまた半端な統計にしたがうエキゾティックな粒子とかの範疇に入る「粒子」ではないことを意味する。そして、分子場 R V B 理論に現れるスピノンとホロンは元の t - J 模型とはなんら関係ない励起であると推論したくなる。もし推論が正しければ、スレイブボゾンの方法とスレイブフェルミオンの方法とでフェルミ面の大きさが異なるということは元の t - J 模型とはなんら関係なく、またなんら問題になることでもないことになる。

付 録

最近の研究によれば、単一サイト近似は無限大次元で厳密である [13]。そして、ハバード模型を単一サイト近似で解くことはアンダーソン模型を解くことに帰着できる [14, 15]。アンダーソン模型への帰着は補助粒子模型でも示すことができる。この場合、有限の U のため二重占拠状態が許される。そのため二重占拠状態に対応する、もう一つの補助粒子を導入する必要がある。この補助粒子模型で、局所ゲージ対称性は破れていず補助粒子は局在しているとしないと、実粒子模型と同じく無限大次元で厳密な単一サイト近似理論の構築ができない。これも補助粒子は局在しているべきであるという一つの傍証である。

参考文献

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986).
- [2] P. W. Anderson, Science **235**, 2 (1987).
- [3] R V B 理論についての日本語の解説は多い。以下に引用するのはその一部である。
芳田 奎、超伝導新理論の展望、数理科学、1988年4月号、22頁。

- [4] 福山秀敏、高温超伝導－物質、物性、理論－、固体物理、1990年10月号、174頁。
- [5] 最新の解説としては、
永長直人、固体物理、1994年9月号、12頁。
- [6] F. J. Ohkawa, J. Phys. Soc. Jpn. **57**, 3920 (1988).
- [7] F. J. Ohkawa, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 4156 (1989).
- [8] C. Gros, R. Joynt, and T. M. Rice, Phys. Rev. B **36**, 381 (1987).
- [9] P. W. Anderson, Phys. Rev. **115**, 2 (1959).
- [10] F. J. Ohkawa and N. Matsumoto, J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 602 (1994).
- [11] s - d 模型で局在スピンを拘束条件付きの補助粒子で表し分子場近似でその拘束条件を破り簡単にエネルギー値を計算する理論として、古くは、
F. Takano and T. Ogawa, Prog. Theor. Phys. **35**, 343 (1966).
- [12] $1/N$ 展開の次の解説のなかに、 s - d 模型とアンダーソン模型とにおける補助粒子を用いた理論についての議論がみられる。
N. E. Bickers, Rev. Mod. Phys. **59**, 846 (1987).
- [13] W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
- [14] F. J. Ohkawa Phys. Rev. B **44**, 6812 (1991).
- [15] F. J. Ohkawa J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 3218 (1991).