

強相関電子系

東北大学理学部 酒井治

磁性の起源に関する研究は固体物理の研究のなかでも最も古い起源を持つもののひとつである。この研究分野は長い歴史を持ち幾多の重要な発見や進展を重ねてきたにも拘わらず、常にその時代その時代の固体物理学研究の最先端の課題に係わる位置を保持し続けてきた。新しい技術の発展や新しい物質群が発見される度に、それ以前の理論や概念の陰に隠れていた重要で本質的な問題が顕になり、進展を繰り返してきた。

現状に於いて、重い電子系と呼ばれる4fや5f電子の関与した金属性と、銅酸化物高温超伝導体の電子状態に関する研究をあわせて強相関電子系の研究と称される分野は磁性の起源に関する研究のひとつの最先端分野であろう。今回のセミナーではこの分野の入門的な話から始め、現在に於ける状況、そして、今なにが問題であるかを取りあげたい。筆者はこの分野で主に電子計算機を利用した計算物理学的手法により研究をしているが、セミナーの内容は余り計算物理の話に偏らず、電子相関と磁性の起源の物理に関することに力点を置きたい。

電子はその量子力学的運動エネルギーを下げるため、結晶格子中に隈無く遍在しようとする傾向がある一方、電子同士のクーロン相互作用による斥力のため互いに相手を避けあい個々の領域に局在（偏在！）する傾向をも持つ。強相関電子系と呼ばれる状態では、後者の効果により運動が強く制限されながら残された量子力学的自由度により前者の性質も持つ緊迫した状態にあると考えられる。

大雑把なイメージで示すと、ある短い時間の瞬間瞬間で見ると、図1のように電子は互いに相手を避けあって局在しているかのように見えるであろう。しかしある程度の時間をかけて見れば、図2のように、電子は近傍の適当な相手を見つけて互いに位置を入れ替えながら運動をしているであろう。そして、十分に長い時間で見れば、図3のように、各々の電子は結晶全体中を殆ど隈無く遍歴している量子液体となっているのであろう。図1では電子スピン向きに関する膨大な縮重度が残る。パウリの禁制則を考え合わせると、電子が位置を入れ替えるときには、周囲のスピン配位が重要になる。これは磁氣的相関の起源である。時間とエネルギー、位置と運動量の間の量子力学的関係式から考えれば、現象を測定する手段の特徴的なエネルギーや運動量のやり取りの大きさ、温度等に依存して、電子系が多彩な応答を示すことが予想されよう。また、微妙な量子力学的効果も随所に顔

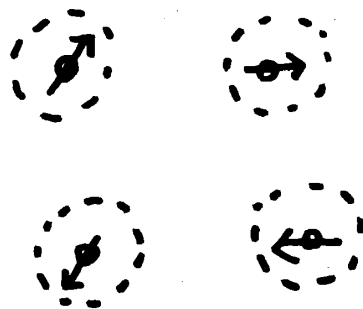
を出すであろう。このように複雑で多彩な様相を見せる系の全体像を捉えるのは一筋縄でなく、理論的には大変難しい問題である。それだけにまた、若い研究者の斬新なアイデアを必要としている分野でもある。

このような強相関電子系の研究に於いてハバード模型やアンダーソン模型と呼ばれる模型がしばしば登場する。これらの模型は強相関電子系の持つ特徴を極限まで単純化したものであり、現実の現象の解析には他の複雑な事柄を考慮しなければならぬことも多い。しかしながら、運動エネルギーと相互作用エネルギーの拮抗により、絶縁体状態が生じたり、非常に電子相関の効果の強い金属状態が生じたり等重要な現象を示しうる模型であることが、近年、かなり厳密に明らかになってきた。相関の強い金属状態では、電子の運動が強く制限されるため、電子の有効質量が通常の電子の数10倍から1000倍以上にもなることもある。これが重い電子系と呼ばれる由来である。その他にも磁性や伝導等に特徴のある物理現象が発現する。アンダーソン模型のうち、金属中の一個の磁性イオン、つまり相互作用効果の大きいイオンが一個のみ存在する場合を想定した模型は不純物アンダーソン模型とよばれる。これは、電子相関の効果調べる上で最も簡単なものであり、かつまた、近藤問題と呼ばれる金属中の磁性不純物による多電子効果を研究する模型として非常に深く研究されてきたものである。この模型の研究自体が電子相関による複雑精妙な効果を我々に教えてきたものであるが、最近、また別の観点から研究が進められている。空間の次元を現実の3次元からずらして無限次元である場合を考えたとき、格子系の電子状態を求める問題がある種の一不純物問題の解を求めることに対応づけられることが示されたからである ($d=\infty$ モデル)。本セミナーでは、この一不純物模型から出発して、 $d=\infty$ モデル等の話もしたい。

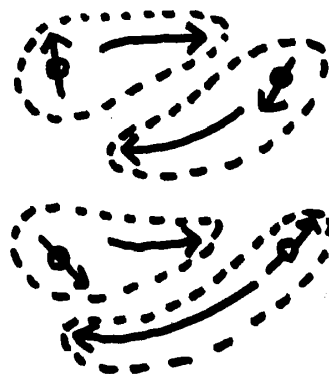
これらの研究の進展には、一方では量子力学的多体系にたいする理論の発展と、一方では大型電子計算機を利用したいわゆる計算物理学的研究の発達に寄与が大きい。もちろん、超並列型機であっても現実の量子多体系をそのまま調べることは出来ないから（例えば、20個の格子上に10個の電子の存在する系の自由度を想定して、固有値方程式を解くことを想起せよ）、量子モンテカルロ法や数値繰り込み群等巧妙な方法が発展させられてきたし、また、現在もいろいろなアイデアや新しい手法が試みられている。これもまた若い研究者の新鮮な頭脳を必要としている領域である。

磁性の起源と強相関電子系に関しては日本人による優れた教科書がある。例えば、磁性物理の全般的なものとしては芳田奎：磁性（岩波書店）、近藤問題については近藤淳：金属電子論（裳華房）、電子相関については山田耕作：電子相関（岩波書店）等である。

- 図1 電子は自分の領域に局在している。
スピンの向きはほぼばらばらである。
これに関連した膨大な縮重度が残る。



- 図2 電子は互いの位置の入れ替えを行っている。
電子のスピンは互いにある種の相関をもった
配位をする傾向がある。



- 図3 電子はほぼ全領域を遍歴してあるき、量子流体的
になっている。スピンについては相互に複雑な
相関をもちながら時間空間的に揺らいでいる。

