

量子多体系と向き合って45年 —理論手法の開発と物理概念の発見・深化—

高田康民

§1 はじめに

本年3月末に31年間お世話になった東大物性研を定年退職して、現在は自宅で悠々自適の生活を送っている。在職中はまとまった時間を取れず先延ばしにした各種依頼原稿の執筆に励む傍ら、これまで続けてきた理論物理の研究を一層集中して行っている。退職後に「一層集中」と書くと違和感を与えるが、退職時の研究進捗状況が物性研着任時に私が想定していた最終研究目標にまだ少し距離があるので、現役時と同じ気力・体力・知力が続く限りはその距離を少しでも縮めたいと願っている次第である。

それでは、若い頃の私は何を知りたいと考え、何を最終目標としたのであろうか。この小稿では、大学2年後期に一番の趣味の対象を数学から理論物理に変えて以来45年、真剣にその道を追求してきた状況とその間に得られたいくつかの研究成果を報告するとともに、残された問題に触れる。読者、とりわけ若い方が興味を持っていただければ幸いである。

§2 東大大学院入学までの状況

小学生時代から私は数学が大好きで、高校では数学教師の勧めもあって高木貞治の「解析概論」やユークリッドの「幾何原論」を読んだ。大学入学後も当初は数学を主に勉強したが、その延長で勉強し始めた量子力学や場の量子論を通して次第に理論物理に惹かれていった。そして、2年生後期に知った電子ガス系に対するBohm-Pines(BP)理論¹⁾を契機に量子多体問題が勉強の中心になっ

た。BPに興味を持った理由はいくつかある。まず、相互作用する多電子系では電子個々の性質とは定性的に異なる集団励起(プラズモン)が出現し、同時に電子間には元の長距離クーロン力ではなく短距離斥力が働くという概念構築が見事だったからである。次に、理論の定式化の観点ではBPは泥臭く、プラズモンの自由度数の決定も曖昧なので、私でもこれを超越する理論を作れると思えたからである。もちろん、歴史的には1953年のBPは1957年のGell-Mann-Brueckner(GB)理論²⁾で超えられたのだが、面白いことに、多体摂動論に沿ったエレガントな定式化と乱雑位相近似(RPA)の導入で問題を解いたGBでは、物理概念がBPほどの迫力で伝わってこない。さらに、その余りに簡便な近似のため、そこで無視された効果で結論がいかにか変わるかの方が気になってしまい、爾来今日に至るまで何度かの中断期間を挟みつつ、私は電子ガス系に関わりながら、数値的にはRPAをはるかに超えた(ほぼ厳密な)高精度解を求めつつ、概念的にはプラズモン以上に面白い新しい物理の発見を夢見てきた。

さて、4年生の夏が過ぎて大学院の進学先を決める時期になった。当時、物性理論の研究室といえば、久保亮五教授か植村泰忠教授かの2つの選択肢があった。私の趣向と研究室の色合いから久保研が本線と思ったが、理論手法のさらなる研鑽よりも今は物理概念構築に向けた修行が重要と考えて、植村研を選んで植村先生の物理観を学ぼうと思った。この頃、久保先生は「物性物理の主な問題は終わった」とのご意見であったこと³⁾も久保研を避けた大きな理由であった。

大学院合格発表後、植村先生をお訪ねして、物

理のアイデア発想力を磨く方法を伺ったところ、いつも通りのゆったりとした調子で、「まあ、そう焦らずにおやりなさい。気になるなら、Feynman Lecture を味わってご覧なさい。」とお答えになった。そのレベルの教科書の内容自体はすでによく理解していたが、物理的感覚とは何かを考えつつ4年後期に全3巻をじっくり読み返した。また、4年後期の理論演習も植村研で履修した。植村先生はW. Kohnの密度汎関数理論(DFT)の論文⁴⁾とそれに基づく金属(正確にはジェリウム)表面に関するLang-Kohnの一連の論文⁵⁾を卒論レポートのテーマに選定されたので、安藤恒也助手(当時)の厳しいご指導の下でこれらの論文と格闘した。ちなみに、当時の私はDFTの哲学がグリーン関数法などの量子多体理論本流のそれとはまったく異なる⁶⁾とは想像すらしていなかったので、Hohenberg-Kohnの定理の数学的な証明は一応理解できて、また、Lang-Kohnでは(鏡像力ポテンシャルは別として)物理的に妥当な結果が局所密度近似(LDA)で得られることはわかったとしても、(今日の言葉で言う)ν表示可能性の問題、運動エネルギー汎関数 $T_s[n(r)]$ の意味、交換相関エネルギー汎関数 $E_{xc}[n(r)]$ の決定法、そして、何よりもKohn-Sham法が何故正確な基底電子密度分布 $n(r)$ を与える厳密手法といえるのかが十分に納得できず、それゆえ、DFTは単に多体問題を一体問題に近似・還元する手法の一つに過ぎないのではないかと考えていた。

§3 東大大学院から東大助手の時代

研究者の多くは、その研究指向(課題や手法の選択)が大学院で課題とどのように関わったかという原体験に強く規定されており、私も例外ではない。1975年当時、川路紳治先生(学習院大)がInAs表面に自然にできるn型反転層で超伝導(転移温度 T_c は約3K)を観測した⁷⁾が、植村先生から示唆された私の最初の課題はその発現機構の考察であった。この系の特徴として電子密度が低く、フェルミエネルギー E_F がフォノンのデバイエネルギー ω_D と同程度なのでエリアシュバーク理論の範疇に収まらず、そもそも、電子フォノン

相互作用が弱すぎて観測された T_c が通常のフォノン機構では得られない。実際、バルクのInAs半導体ではいくらドーピングしても超伝導の気配はない。しかし、電子系を2次元化するとこのような“高い” T_c になる可能性があるかが問われた訳である。

さて、温度グリーン関数法に基づくと、電子対の異常グリーン関数 $F(\mathbf{p}, i\omega_p)$ を決める厳密なギャップ方程式は電子間既約有効相互作用 $\tilde{J}(\mathbf{p}, i\omega_p; \mathbf{p}', i\omega_{p'})$ を用いて

$$F(\mathbf{p}, i\omega_p) = -G(\mathbf{p}, i\omega_p)G(-\mathbf{p}, i\omega_p) \times T \sum_{\omega_p'} \sum_{\mathbf{p}'} \tilde{J}(\mathbf{p}, i\omega_p; \mathbf{p}', i\omega_{p'}) F(\mathbf{p}', i\omega_{p'}) \quad (1)$$

と書ける。 $E_F \approx \omega_D$ の状況を考慮してフェルミ面近傍だけに問題を限定せず、また、フォノン交換引力と同時に、それと同じ立場でクーロン斥力も取り込むことを考えて、式(1)で1電子グリーン関数 $G(\mathbf{p}, i\omega_p)$ を裸のそれ $G_0(\mathbf{p}, i\omega_p)$ に、また、 $\tilde{J}(\mathbf{p}, i\omega_p; \mathbf{p}', i\omega_{p'})$ を電子フォノン全系に対するRPAで計算した $V(\mathbf{p}-\mathbf{p}', i\omega_p-i\omega_{p'})$ に置き換えるという近似(いわゆる G_0W_0 近似*)を導入する。すると、 T_c を決定するギャップ方程式は

$$\Delta_p = - \sum_{\mathbf{p}'} \frac{\Delta_{\mathbf{p}'}}{2\xi_{\mathbf{p}'}} \tanh\left(\frac{\xi_{\mathbf{p}'}}{2T_c}\right) K_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \quad (2)$$

となる。ここで、 ξ_p はフェルミ準位を起点とした裸の1電子分散関係、“ギャップ関数” Δ_p は $F(\mathbf{p}, i\omega_p)$ を実軸上に解析接続した $F^R(\mathbf{p}, \omega)$ の虚部を振動数積分したもので、

$$\Delta_p = 2|\xi_p| \int_0^\infty \frac{1}{\pi} d\omega \operatorname{Im} F^R(\mathbf{p}, \omega) \quad (3)$$

*1 L. Hedin は G と電子間有効相互作用 W 、パーテックス関数 Γ の3つの積を内部の運動量と振動数で積分すると厳密な自己エネルギー Σ が得られること(記号的には $\Sigma = -GWT$)を示した⁸⁾。この W は裸の相互作用 V_0 と電子分極関数 $\Pi(-GGT)$ を用いて $W = V_0/(1+V_0\Pi)$ で与えられる。実際の数値計算では、Hedin は $\Gamma=1$ と仮定し、 G_0 を裸の G として、 $G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma$ 、 $\Sigma = -GW$ 、 $W = V_0/(1+V_0\Pi)$ 、 $\tilde{\Pi} = -GG$ の4つの式を自己無撞着に解くことを提唱した。これを Σ の表式に注目して「GW近似」と呼ぶ。なお、第一近似(ワンショットGW)では $\Sigma = -G_0W_0$ 、 $W_0 = V_0/(1+V_0\Pi_0)$ 、 $\Pi_0 = -G_0G_0$ となり、これを「 G_0W_0 近似」と呼ぶ。 V_0 は電子ガス系ではクーロン斥力であるが、電子フォノン系ではクーロン斥力と裸のフォノン媒介力の和である。ちなみに、超伝導状態では、エリアシュバーク理論はGW近似に対応し、その第一近似が G_0W_0 近似である。

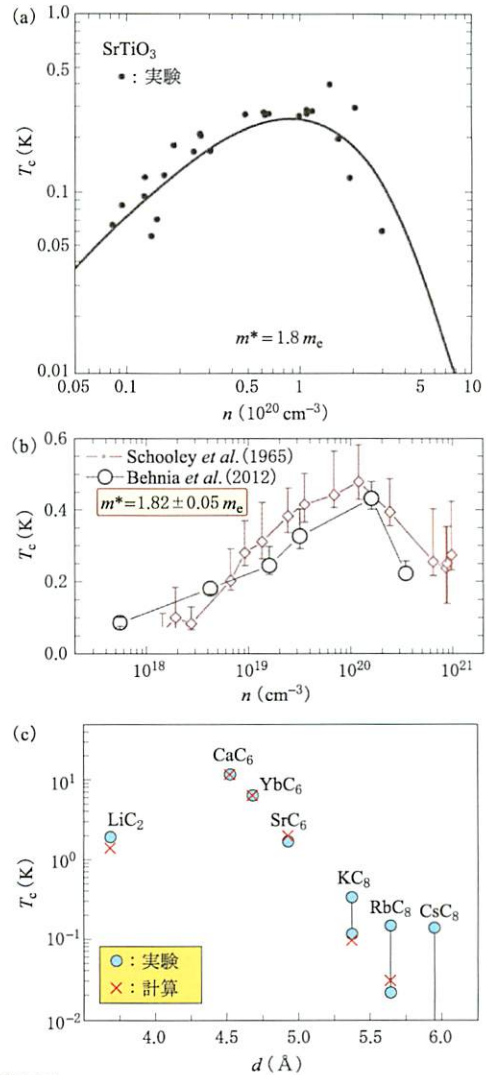
で定義される．また，式(2)のBCS型のギャップ方程式における対相互作用 $K_{p,p'}$ は

$$K_{p,p'} = \int_0^\infty \frac{2}{\pi} d\Omega \frac{|\xi_p| + |\xi_{p'}|}{\Omega^2 + (|\xi_p| + |\xi_{p'}|)^2} \times V(p-p', i\Omega) \quad (4)$$

で第一原理的に計算されるものであって，BCS理論のように外部パラメータとして与えられるものではない．特に，クーロン斥力の効果は現象論的な擬クーロンポテンシャル μ^* ではなく，式(2)を自己無撞着に解くことで評価⁹⁾される．この T_c を第一原理から決定するスキームを用いて，SrTiO₃¹⁰⁾ やアルカリ挿入黒鉛¹¹⁾ などの具体的な物質で超伝導機構を定量的に特定することに成功した [第1図(a)-(c)参照]．

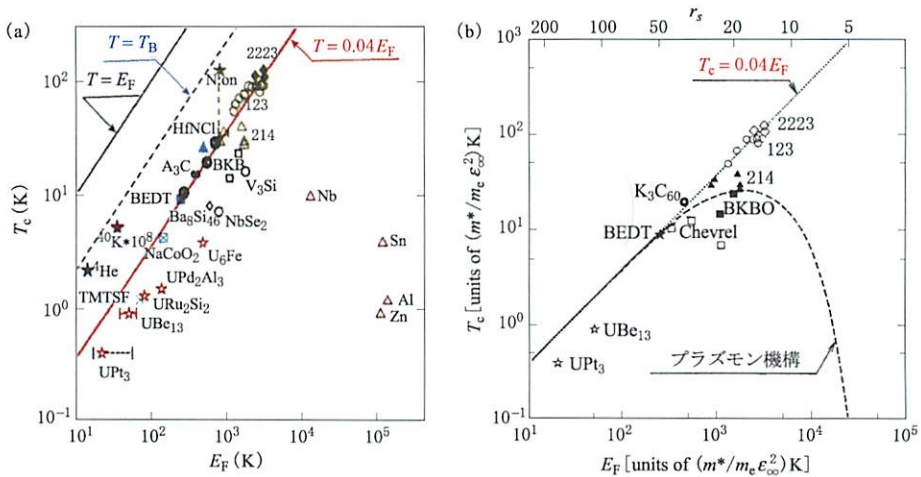
ところで，このスキームをフォノンを一切含まない電子ガス系に適用すると，低電子密度領域で超伝導が出現した．しかも T_c がかなり高く，低密度極限では $T_c/E_F \approx 0.04$ に達する．これは驚くべき結果であるが，先に触れた Bohm-Pines 理論によれば，たとえ1成分電子ガス系とはいえ，短距離斥力が働く準粒子からなる多電子系とプラズモン系の複合系と見なせるので，フォノンの代わりにプラズモンを媒介とした引力で準粒子間のクーバー対を形成するという「プラズモン機構」⁹⁾ を考えれば，原理的に超伝導が出現しうるのは容易に理解される．ちなみに，低密度極限の金属で，そのフェルミ波数が格子定数よりずっと大きくなると，あらゆる金属を記述するハミルトニアンは電子ガス系のそれに帰着される．したがって，この電子ガスの結果が正しいとすると，この極限で超伝導が見られる場合，物質によらずに $T_c/E_F \rightarrow 0.04$ であることを予言している．(この極限ではフォノン機構の働きも限定的であることを確認している．) この予言の正しさはいわゆる「植村プロット」¹²⁾ で実証されている (第2図参照)．また，このプラズモン機構では，プラズモン分散関係の違いから3次元系よりも2次元系の方が有利になる．その観点から，低密度2次元電子系でのクーロン斥力の重要性を指摘し，それを利用したプラズモン機構や音響プラズモン機構の超伝導で川路らの実験を考察した¹³⁾．

このプラズモン機構の概念を生み出した研究



第1図

- (a) n 型にドーブした SrTiO₃ の超伝導転移温度 T_c と電子密度 n の関係．強誘電ソフトフォノン機構で T_c を計算したが，1980年当時，そのフォノン分散や電子フォノン結合定数は実験でわかっていたが，電子の有効質量 m^* だけは不明であった．そこで， m^* をパラメータとして T_c と n の関係を第一原理的に計算し， $m^* = 1.8m_e$ (m_e は自由電子質量) と選ぶと実験が再現されることを示した．
- (b) 2012年， $m^* = 1.82m_e$ が実験で観測された．
- (c) グラファイト層間化合物(GIC)の T_c と最隣接層間距離 d の関係．1982年に KC₈ の T_c (=0.1 K) を第一原理的に再現した計算コードをそのままの形で物質パラメータのみを変更して2005年に発見された $T_c = 11.5 \text{ K}$ (100倍!) の CaC₆ に適用したところ，定量的に実験結果を再現した．これによってGIC超伝導体全般に適用される超伝導の標準機構が明らかになった．



第2図

(a) 2006年度版の植村プロット. 1991年以来幾度かの更新がある.

(b) プラズモン機構の3次元電子ガスの超伝導転移温度 T_c とフェルミエネルギー E_F の関係.

は、その8年後(1986年)に出現した銅酸化物高温超伝導体を契機にして盛んになった擬2次元系でのクーロン斥力起源の各種超伝導理論の先駆けであった。ただ、私の提案にはいくつかの難問が残っていた。たとえば、実際のInAs反転層が提案に沿う正常相かどうか不明で、これも含めて一般にIII-V族半導体、特にバンドギャップ ϵ_g が狭くてバンド分散関係の非放物性が強い系の反転層における電子構造が問題であった。なお、 ϵ_g がごく小さいと反転層のサブバンドとバルクの価電子バンドの間で共鳴状態が出現する可能性も生じる。また、電子間相互作用の計算に用いたRPAの妥当性も問題で、確かにRPAでもプラズモン自体はうまく取り込めるが、本来、低密度電子系でのクーロン斥力による電子相関はそれでは正しく記述されない。そこで、RPAを越えて電子相関の問題を電子ガス系で徹底的に研究する必要があった。

博士号取得後、植村研助手となり、研究室の主要テーマへの貢献としてInSbや $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 等の表面にできる反転層での電子状態計算に真剣に取り組んだ。その結果、バンドの非放物性や(表面ポテンシャルに起因してスピン軌道相互作用を通して誘起される)スピン分裂を数値的に厳密に計算する新技法¹⁴⁾を開発し、実験で測定されていたサイクロトロン質量や光吸収スペクトルを第一原理計算で再現した。以降、この技法はこの分野

の基本手法となったが、これはバンドギャップがゼロの、いわゆるディラック・コーンの問題にも適用可能で、グラフェンを $k \cdot p$ 摂動で第一原理から研究する際に、また、スピントロニクスで最近話題になっているスピン分裂の評価の際にも有効になる。反転層に関連してこれ以外でも、一軸圧力下Si反転層での電子構造やサイクロトロン共鳴での多体効果¹⁵⁾を考えた。とりわけ、1次転移(「谷密度波」の概念で捉えられる状態の出現)の可能性を示唆したが、それは19年後の1997年に実験で立証された¹⁶⁾。

このような研究歴を経て、(i)第一原理のハミルトニアンから出発する、(ii)正常状態を記述する際に基礎になる一体問題も高精度に解く、(iii)それに立脚してクーロン相互作用を丁寧に扱う多体理論の立場から多体効果を定量的に議論するなど、その後の私の研究指針やスタイルが確立された。実際、この45年にわたって私の主な研究動機は、突き詰めれば、第一原理のハミルトニアンに基づく多電子問題、とりわけ超伝導機構を完全に把握したい、そのために一体問題、多体問題を問わず、高精度でありながら実行可能な計算手法を開発し、それを駆使して新しい物理概念を発見したいということに尽きる。

§4 アメリカ滞在期

30歳になって、オーバーハウザー効果やSDW/CDWの予言で有名なA. W. Overhauser教授(Purdue大)に招請されて渡米した。ポスドク着任後1週間も経たないうちにOverhauser先生は「Frölich模型の多ポーロン系では高い T_c のバイポーロン超伝導が起こる」というご託宣をされ、これをSchafroth-Blatt-Butler(SBB)理論に沿って証明せよという課題を出された。(若き日の松原武生先生も研究された)SBBをご存じの方は多くはないと思うが、今風に言えば、BEC(Bose-Einstein Condensation)描像の超伝導理論で、平均場近似がうまく働くBCS理論に比べて格段に難しいものである。

グリーン関数法で考えると、強いポーロン効果を無視しているエリアシュバーク理論のレベルをはるかに超えて適切なパーテックス補正を取り込んだ多ポーロン超伝導理論の建設が要求されるが、とりあえずこの難問を回避して、各種の変分理論を中心に半年間懸命に研究した。しかし、残念ながら肯定的な答えに至らなかったため、まず、2電子系に限定して考えたが、クーロン斥力に打ち勝ってバイポーロンを形成するためには非現実なほどに強い電子フォノン結合が必要であった。ちなみに、そのような強結合系ではバイポーロンの有効質量が極端に大きくなり、その結果、BEC転移温度は大変小さくなる。これでは新奇高温超伝導物質の探索を促す理論予言としての価値はほとんどない。

このような訳で、ご託宣を否定する論文¹⁷⁾の出版だけに終わり、大変落ち込んだ。しかしながら、後年、これが私がポーロンやバイポーロンの物理に踏み込む契機となった。また、半年にわたる密度の濃い交流でOverhauser先生独特の思考に深く触れた。主な論争点は多体摂動計算では不可避の無限級数発散の問題で、Overhauser先生はグリーン関数法における通常の部分和の取り方が恣意的で信用できないと主張された。そこで、Overhauser先生を説得する目的でグリーン関数法と変分法を融合させた「有効ポテンシャル展開(EPX)法」¹⁸⁾を考案した。これは多体基底状態

の高精度解を与える汎用処方箋で、ハミルトニアン H の系の試行基底状態 $|\Psi_0\rangle$ は量子化学でよく使われるCoupled Cluster(CC)理論のそれと同じであるが、基底状態エネルギー E_0 の計算法が違っていて、CCではSlater行列式の状態 $|0\rangle$ で表わすと、 $E_0 = \langle 0|H|\Psi_0\rangle / \langle 0|\Psi_0\rangle$ で計算されるが、変分法に従うEPXでは $E_0 = \langle \Psi_0|H|\Psi_0\rangle / \langle \Psi_0|\Psi_0\rangle$ となる。この E_0 の最小化を目指して $|\Psi_0\rangle$ を最適化することになるが、この $|\Psi_0\rangle$ は裸の相互作用 V ではなく、有効相互作用 \tilde{V} の摂動展開で与えられる。すると、最適化条件は \tilde{V} を決めるBethe-Salpeter型の積分方程式に還元される。そして、この \tilde{V} を使う最大の利点は、 \tilde{V} 展開の収束半径が V 展開のそれよりも通常ずっと大きくなり、無限級数の発散の問題が(まったく消えるわけではないが)かなり軽減されるということである。また、この \tilde{V} の導入はOverhauser先生もお気に入りの「局所場補正」¹⁹⁾という概念と整合的である。

滞米2年目の晩秋、カリフォルニア大学サンタバーバラ校(UCSB)理論物理学研究所のポスドク公募広告がPhysics Todayに出たので応募したところ、W. Kohn先生からオファーがあった。以前に格闘したDFTの本家入門するとは夢にも思わなかったが、何かの縁と思い、1983年7月からUCSBに異動した。その当時、表面物理が一種の流行で、そのテーマの滞在型研究会がUCSBでたびたび開かれ、D. C. LangrethやJ. P. Perdewと知り合う機会を得た。Kohn先生が私に出された課題も関連するテーマのもので、「金属表面でのHe原子線回折実験の解析に関係して原子表面相互作用の計算法を考えよ」であった。これは内部構造を持つ2つの系の間の相互作用であり、 $O(N^{-1})$ の量である。それを第一原理から高精度に計算せよという難問だが、反転層での共鳴状態を考えた際によく勉強した散乱理論(特に、S行列理論)を復習して、S行列の概念の拡張できれいな定式化に至ることを思いついた。具体的には、減衰波に対する(すなわち、負の入射エネルギーを持つ電子に対する)S行列を用いた一般的定式化²⁰⁾を行い、それによって「有効媒質理論」の妥当性や金属電子がHe原子内に侵入した際の

電子相関(原子内分極効果)の重要性を議論した。この分極効果の取り込みは後年問題になったファンデアワールス力をDFTの $E_{xx}[n(r)]$ に組み込む試みの先駆けである。

実は、Kohn先生は本年4月19日に93歳でお亡くなりになられた。訃報を受けたとき、これまでの思い出²¹⁾が走馬燈のように蘇ってきた。私のUCSB滞在時にKohn研究室では、E. K. U. (Hardy) GrossがDFTを、E. KrotscheckがCorrelated Basis Function (CBF)法という多体変分理論を研究していた。私の興味と重なるので彼らとはいろいろと議論し、勉強になった。特に、Kohn先生も含めて彼らとの交流を通して徐々にDFTの哲学が頭に入ってきた⁶⁾。また、数多くの著名な学者がKohn先生を訪ねてUCSBに滞在されたが、彼らの滞在中にKohn先生は一緒に食事に連れ出してくれた。その食事での話の延長として、(共著論文を書くには至らなかったが)R. E. Peierlsとは液体金属の電気伝導、また、J. M. Luttingerとはポーラロンの計算法について深く討論した。さらに、Peierls先生との有益な議論のお陰もあって原子核物理におけるKohnの公式を参考にしながら原子表面非弾性散乱に対する変分的な定式化も提案した²²⁾。

4年余りの米国滞在中に強く感じたことは自分に合ったスタイルで研究する気楽さであった。日本で物性理論の研究を始めると、空理空論になることを恐れるあまり、「実験に沿った理論」、「現象や物質の解明に役立つ理論」ということを強く刷り込まれ、知らず知らずとその雰囲気を意識した研究になってしまう。渡米前の私も例外でなく、新たに合成された物質や実験で発見された面白い現象に耳をそばだて、たとえ陳腐な理論でもよいから、それら新奇物質や新奇現象をうまく説明する論文を他者に先駆けて出版したいと願っていた。渡米後、最初のボスであるOverhauser先生は実験に役立つ理論ではなく、「新奇現象の理論的予言」が先にあり、それを証明するための実験の解釈や提案を行っていた。次のボスであるKohn先生はDFTの応用ではなく、DFT自身に興味があって、いわば「理論のための理論」を研究していた。このような理論研究は「はじめに実

験ありき」という風潮とはまったく違う動機のもので、実際のところ、私には大変心地のよいものであった。そして、これこそが数学が好きな私の研究スタイルであると気づかされ、また、私の考える理論物理学の醍醐味であると感じ、研究が一層楽しくなった。

§5 物性研所員時代

1985年7月に帰国して東大物性研に所員として赴任した。初めの3年間は助手も大学院生もいなかったため、研究室の体をなしていなかったが、他の大研究室と同じ雑務が次々に降りかかってくるに驚いた。研究の方は安原洋先生(東北大)を共同研究者として電子ガス系の基底状態を詳細に調べることから始めた。この系での多体問題における要諦は、RPAのリング型ダイアグラムで表現される長距離相関と梯子型ダイアグラムで取り扱える短距離相関、および、パウリ原理による交換効果をバランスよく取り込むことである。EPXはこれを可能にする一つの方法で、8年間にわたりこの方法を発展させつつ、最終的には約1万個の摂動項を評価して金属密度領域(いわゆる電子密度径数 r_s が $1 \leq r_s \leq 5$)の相関エネルギー ϵ_c ²³⁾や圧縮率 κ 、スピン帯磁率 χ 、有効質量 m^* ²⁴⁾、スピン依存対相関関数 $g_{\sigma\sigma'}(r)$ 、および、運動量分布関数 $n(p)$ ²⁵⁾を計算した。得られた ϵ_c や κ は量子モンテカルロ計算の結果を再現する高精度のものであり、 $n(p)$ についてもFeynmanの定理を変形して導かれる $n(p)$ と ϵ_c の間の厳密な関係式を満たすことから、このEPXによる計算の精度の高さが証明されている。

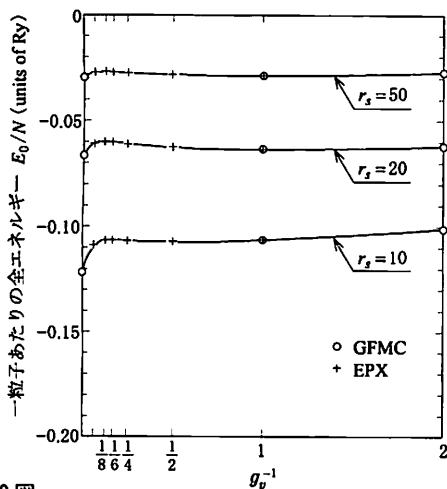
ところで、多谷構造の伝導帯を持つ縮退半導体では谷縮重度 g_v (スピンと併せて全体で $2g_v$)の自由度がある「多谷電子ガス系」が出現する。これにEPXを適用し、 g_v の関数として基底状態エネルギー E_0 を計算すると、これは強磁性系($g_v=1/2$)や通常の常磁性系($g_v=1$)、そして、荷電ボソン系($g_v \rightarrow \infty$)に対するグリーン関数モンテカルロ(GFMC)法の結果を再現する(第3図参照)ので、フェルミ系とボソン系は g_v を介在として結びつくこと(「Fermion-Boson変換」という概念²⁶⁾)にな

り、大変興味深く、この変換により電子ガス系の超伝導はボソン系の BEC に連続的に繋がることになる。

ちなみに、EPX でも電子ガス系の超伝導を調べた。その際、BCS 状態に相関演算子を作用させて $|\Psi_0\rangle$ を構成するので、「相関のある BCS 状態」を研究²⁷⁾したことになる。また、エリアシュバーク理論において局所場補正を用いてバーテックス補正を考慮する Kukkonen-Overhauser 型の相互作用ポテンシャル²⁸⁾で電子間既約有効相互作用を近似した計算も行った。得られた T_c はいずれも G_0W_0 近似の結果を支持している。そして、低密度電子ガスの超伝導は「電子対結晶」²⁹⁾の融解で出現した「ウィグナー結晶状態近傍のクーロンホールを媒介としたクーバー対形成である」との観点³⁰⁾も提示した。

基底状態とその近傍に限定される EPX を用いた研究が一段落した1990年代中頃、励起状態の情報も精度よく計算したいと思い始めた。その際、グリーン関数法に立脚しながらも、EPX や通常の多体摂動論のように摂動項一つ一つを計算するのではなく、自己エネルギー Σ とバーテックス関数 Γ の間の正確な関数関係に焦点を当てた非摂動論的なアプローチにおける汎用手法の開発を目指した。

一般に、多体問題をグリーン関数法で数值的に



第3図 多谷電子ガス系の基底状態エネルギー E_0 と谷縮重度 g_r の関係。

解く場合、Baym-Kadanoff (BK) 法³¹⁾に基づくことが多い。BK 法は近似解法だが、各種の保存則を満たしつつ Σ や Γ 、そして、各種相関関数を自己無撞着に計算する基本的アルゴリズムである。ところで、1995年、私はこの BK 法のプロセスを何度も繰り返しながら Σ を改訂していくと、 Σ の初期値によらずに無限回の操作後には厳密に正確な Σ に到達すること³²⁾を見いだした。これは BK 法のアルゴリズムを越えて、正確な Σ を求める基本的処方箋が発見されたことを意味し、「自己エネルギー改訂演算子理論」と名付けた。この理論の核心は正確な Σ をその不動点とする演算子 $\mathcal{F}[\Sigma]$ の存在証明であるが、この $\mathcal{F}[\Sigma]$ の作用を計算機上で遂行できる形にうまく近似することが次の段階の基本課題となる。私が1993年に提案していたワード恒等式を利用した「ゲージ不変自己無撞着(GISC)法」³³⁾はこの課題に簡便に答えているが、得られる Σ の運動量依存性に問題が残る。

2001年、この GISC 法で仮定された Γ の汎関数形を改善する鍵は Γ と電流バーテックス関数の縦成分の比で定義される「比関数」 R の導入であることを見いだした。そして、量子モンテカルロ計算によって得られる正確な静的物理量の情報をこの R に取り入れることによって Γ に対してワード恒等式を常に満たす高精度の近似汎関数形³⁴⁾を導いた。さらに、その Γ の汎関数形を自己エネルギー改訂演算子理論に組み込むと、 Σ を決定するスキームが得られ、それを「GWT 法」と名付けた。この GWT 法を通常金属密度領域 ($1 \leq r_s \leq 5$) の電子ガス系に適用して1電子スペクトル関数 $A(p, \omega)$ を高精度に計算し、準粒子やプラズマロン(実励起のプラズモンを纏った電子)の様相を定量的に詳細に調べた。特にナトリウム ($r_s = 4$) では、準粒子バンド幅は裸のバンド幅よりも数パーセント広がることを確認するとともに、角度分解光電子分光の実験結果をほぼ完璧に再現した。

ところで、前述したようにフェルミ波数が逆格子ベクトルよりもずっと小さい低密度金属では、その電子イオン格子系を記述する第一原理のハミルトニアンは電子ガス系のそれに還元される。この意味で、 $r_s > 1$ である低密度電子ガス系の研究

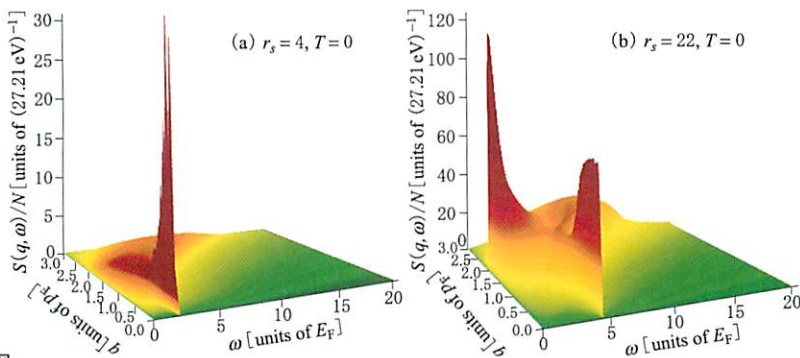
は意義深く、その情報を通してあらゆる低密度金属系の様相は普遍的に理解される。この低密度電子ガス系の大きな特徴は、電荷揺らぎの静的長波長応答を記述する圧縮率 κ が r_s の増大とともに増大し、ついには $r_s = 5.25$ で発散し、さらに r_s が増大すると κ は負になり、それに伴って圧縮率総和則で結びついた静的誘電関数は長波長領域で負になるという「誘電異常」が起こることである。

2005年、GWT法を用いて $r_s < 5.25$ で動的誘電関数を計算し、得られた低エネルギー励起状態の振る舞いを解析して負の κ に至る物理的要因は「電子正孔対励起における励起子効果の増大」であると結論づけた³⁵⁾。また、2009年、超臨界状態のアルカリ液体金属で観測されたイオン間相関関数の異常現象³⁶⁾を定量的に再現し、この現象は誘電異常の物理的帰結として出現したことを明確にした³⁷⁾。

しかしながら、2001年版のGWT法では誘電異常領域で Σ の収束解が得られないことが判明した。そこで2011年、この困難を避けて $r_s > 5.25$ でも Σ の自己無撞着収束解を導くように改良したGWT法を発表した³⁸⁾。これを用いると、原子や分子、半導体、絶縁体のようにエネルギーギャップがある系では、その準粒子エネルギーの値は G_0W_0 近似の値にほぼ厳密に一致することが解析的に示され、 G_0W_0 近似が自己無撞着なGW近似^{*1}よりも実験によく合うとの事実をよく説明した³⁹⁾。また、この方法は汎用性が広く、フェルミ流体だけがその適用範囲ではない。実際、1次元

Luttinger 流体に適用すると、これは Dzyaloshinskii-Larkin 理論⁴⁰⁾に正確に帰着される。2014年、さらに解析を進めて、1次元金属で spinon や holon と並んで「擬電子」という準粒子様の励起があることを導き、低励起のスピン電荷分離の物理から高励起の自由電子描像への変遷の全容を解明した⁴¹⁾。3次元電子ガス系への応用では、2015年末までに r_s が10まで Σ が得られ、さらに2016年5月、 r_s が20を超えても運動量分布関数 $n(p)$ や動的構造因子 $S(q, \omega)$ が高精度に得られた。その結果、 $n(p)$ には $r_s \approx 22$ で相転移を暗示する異常を、フェルミ面直上の有効質量にはその密度近傍でゼロに近づく異常(「軽いフェルミオン問題」という概念)を見いだした。さらに、 $S(q, \omega)$ にはプラズモンピークよりずっと大きな寄与になる「励起子集団モード」の巨大ピーク[第4図(b)参照]が低励起エネルギー領域に出現する。このように、低密度電子ガス系の動的応答にプラズモンよりも面白い新しい物理を発見し、大学2年生のときに抱いた夢が45年後に実現された。

さて、現実の結晶では常にフォノンが存在するので、たとえクーロン斥力起源の超伝導を考えたとしても、ある特定物質の超伝導機構を完全に把握するにはフォノンの考察も不可避である。余り強くない電子フォノン相互作用 H_{e-ph} の場合、 G_0W_0 近似で式(2)と式(4)に従ってフォノン媒介引力を取り入れることができるが、 H_{e-ph} が強くなるとポーラロン効果やバイポーロン形成効果



第4図

電子ガス系での動的構造因子 $S(q, \omega)$ 。(a)は通常金属電子密度のもので、プラズモンピークが圧倒的であり、電子正孔対励起での励起子効果はある[文献42]ものの明確なピーク構造はない。(b)はそれよりも約170分の1の電子密度の $S(q, \omega)$ で、プラズモンピークを凌駕する励起子集団モードの巨大ピークが見られる。

PRB94, 245106 (2016); Editors' Suggestion

を含む定式化が必要になる。この強結合領域に通用する汎用手法は未開発であるが、クーパー対のコヒーレンス長が短いときは小さなクラスターの問題に還元できることを指摘し、その場合の T_c の計算法を提案した⁴³⁾。具体的にはアルカリ添加フラレンで、 C_{60} の表面振動フォノンを媒介とする引力とクーロン斥力の拮抗による「ポーロン液体状態」の形成とそこでの短コヒーレンス長の超伝導発現という観点から実験を統一的に説明した⁴⁴⁾。特に、 $^{12}C_{60}$ を半分だけ $^{13}C_{60}$ に分子置換した際の T_c の特異な同位体効果は私の理論でのみ説明されている⁴⁵⁾。

必ずしも超伝導に関係しないが、ポーロンの物理についてもいくつかの研究をした。まず、Hubbard-Holstein 模型では「動的局在化」の概念⁴⁶⁾を得た。また、half-filled の電子密度でクーロン斥力とフォノン媒介引力が拮抗した場合、CDW から SDW への転移領域で金属相(超伝導相)が出現する可能性⁴⁷⁾を示唆し、その際のフォノン非調和性の効果⁴⁸⁾も検討した。Jahn-Teller 系ではポーロンの有効質量に対する新たな解析的表式⁴⁹⁾を導くとともに、軌道自由度に関連した対称性の存在と有効質量の関係を定量的に調べた⁵⁰⁾。

最後に、朝倉物理学大系シリーズの教科書執筆に際してその内容を充実させる目的で行った研究に触れておこう。この教科書で標榜したのは「第一原理からの多体問題」⁵¹⁾であるので、第一原理から出発した物性理論の構造を改めて深く考え直した。その結果、多くの概念上重要な未研究課題を見いだした。たとえば、原子核の量子振動は化学結合の概念をどう変えるかという問題⁵²⁾、断熱近似に関連して Jahn-Teller 効果とそれに伴う Berry 位相という概念があるが、それが伝導電子に対する Bloch の定理をどう変えるかという問題⁵³⁾、相関のある電子波や Luttinger 流体における Bragg 反射とは何かという問題⁵⁴⁾などである。また、これらから派生して、イオンの量子振動に関連して超高压下の固体水素の構造相転移を調べ、新たに「高温での C_{mc} 相の存在」を理論的に予言⁵⁵⁾し、Berry 位相の観点から Mn 酸化物で観測されている軌道密度波やストライプ構造の形

成⁵⁶⁾を議論し、同時に幾何学的な保存量である巻き数に関連して「幾何学的エネルギー」という概念⁵⁷⁾を提唱した。さらに、電子ガス系の静的局所場補正を自己無撞着に計算する古典的手法である Singwi-Tosi-Land-Sjölander (STLS) 理論⁵⁸⁾を拡張して超強磁場下グラフェイトでの交換相関効果を研究し、1998年に 50 T 近傍の磁場で電子相転移を予言した⁵⁹⁾。2015年、 $H=53$ T に対応する電子相転移が実験で確認され⁶⁰⁾、この予言は立証された。また、STLS 理論そのものの改良をごく一般的な自己無撞着計算の改善法の一例として提案した⁶¹⁾。不純物電荷 Z_e に対する金属遮蔽の問題についても、古典的な Thomas-Fermi 理論の誘電電荷共鳴という概念だけでなく、 Z が奇の正整数では近藤スピン共鳴と電荷共鳴の競合が問題になることを初めて指摘し、具体的に $Z=1$ の陽子を電子ガス系に挿入した場合の近藤スピン共鳴状態の出現条件と出現時の近藤温度 T_K を拡散モンテカルロ計算で定量的に決定した⁶²⁾。この結果は金属遮蔽におけるパラダイムシフトの発見といえるが、同時に、重い電子系の物理において近藤格子系では超伝導が $T_c \approx 0.1 T_K$ で出現することが周知の事実であるので、陽子が最も安定的に挿入され、 $T_K \approx 2000$ K である $r_s \approx 4$ の状態でマクロな数の陽子が規則的に挿入され、RKKY 相互作用の強さが T_K と拮抗する量子臨界状態になると室温超伝導が望みうる。これは超高压下で $r_s < 2$ である固体水素や硫化水素と違って、「常圧下の水素合金での高温超伝導発見」への期待につながる。10年から20年後のこの方面の発展が楽しみである。

§6 おわりに

2007年、私は物性研で DFT 関連の滞在型国際ワークショップを主催し、Hardy Gross を招待した。Hardy は約 1 ヶ月滞在し、その間、密度汎関数超伝導理論(SCDFT)⁶³⁾について詳しく教わった。この SCDFT では、 T_c を厳密に決定するギャップ方程式は

$$\Delta_i = - \sum_r \frac{\Delta_r}{2\xi_r} \tanh\left(\frac{\xi_r}{2T_c}\right) K_{i,r} \quad (5)$$

で与えられる⁶⁴⁾。ここで、厳密に正しい基底電子密度 $n(r)$ を与える Kohn-Sham (KS) 軌道 i の (フェルミ準位を起点とした) 軌道エネルギーが ξ_i 、エネルギーギャップが Δ_i である。また、対相互作用 $K_{i,i'}$ は交換相関エネルギー汎関数の電子対密度についての 2 階汎関数微分である。そして、 ξ_i や Δ_i は物理的実態でないが、 $K_{i,i'}$ の汎関数形が正しく与えられる限りは、いかなる場合でもこの式(5)で T_c は厳密に正しく決定される。

ところで、均一密度系では KS 軌道は平面波になるので、式(5)は式(2)に還元される。そして、 $K_{i,i'}$ に対する近似汎関数形が $V_{i,i'}(\omega)$ を軌道 ii' 間の電子間有効相互作用として

$$K_{i,i'} = \int_0^\infty \frac{2}{\pi} d\Omega \frac{|\xi_i| + |\xi_{i'}|}{\Omega^2 + (|\xi_i| + |\xi_{i'}|)^2} \times V_{i,i'}(i\Omega) \quad (6)$$

であるとする、 G_0W_0 近似とまったく同じになる。この事実は私の 30 年来の疑問、すなわち、「 G_0W_0 近似で計算すると、弱結合領域と言えないために得られるギャップ関数が実験にあまり合っていないのに、何故 T_c 自体は実験値をよく再現するのだろうか?」を解決してくれた。同時に、 $K_{i,i'}$ に対する汎関数形としては Hardy の提案するもの⁶⁵⁾より式(6)がよいものであることを示している。実際、これは均一系の弱結合極限で厳密に正しいもので、正常状態に対する近似でいえば LDA に対応する。この対応から、LDA と同じように、式(6)の適用範囲は弱結合領域を大きく超えているものと考えられる。しかも、Hardy のものと違って式(6)の場合は(いかなる種類のものであれ)クーロン斥力起源の機構を簡単に取り込めて、それによってフォノン媒介引力との競合も容易に計算できる。

しかしながら、LDA では強相関領域が取り扱えないのと同じように、強結合領域になってポーラロン効果が強くなると式(6)は無力である。実際、これでは 35 年前の Overhauser 先生のご託宣が吟味できない。今後はこの問題の解決に向けて、微力ながらいろいろな角度から挑戦するつもりである。

謝辞

ここで紹介した研究のすべてを私一人で遂行したのではなく、参考文献の中でお名前を出しているように、多くの共同研究者と行ったものである。ここで改めて共同研究者の皆様にお礼を申し上げます。

【参考文献】

- 1) D. Bohm and D. Pines: Phys. Rev. 92 (1953) 609; *ibid.* 626.
- 2) M. Gell-Mann and K. Brueckners: Phys. Rev. 106 (1957) 364.
- 3) 1974 年秋に共立講堂で永宮健夫阪大教授の退官記念講演会があり、私も聴講に出かけた。久保先生は第一講演者として、日本での固体物理研究の歴史と今後を展望する中で、「残された問題がただ困難だ、という以上に、問題の選択がだんだん難しくなっていることは明らか」と述べられ、固体物理の研究が峠を超えたことを添ませた。この講演会のプロシーディングは「固体物理—その発展と現代の焦点—」芳田奎編(1976年)として岩波書店から出版されている。
- 4) W. Kohn: "A New Formulation of the Inhomogeneous Electron Gas Problem", in *Many-Body Theory—1965 Tokyo Summer Lectures in Theoretical Physics* (Syokabo, Tokyo, Japan and Benjamin, New York 1966) p. 73. これは 1965 年 7 月に神奈川県大磯で久保先生が主催した国際理論物理学「夏の学校」で発表されたもの。有名な 2 つの論文、P. C. Hohenberg and W. Kohn: Phys. Rev. 136 (1964) B864 と W. Kohn and L. J. Sham: Phys. Rev. 140 (1965) A1133、を一つにまとめ上げたものであるが、単にそれだけでなく、原子の殻構造を反映した電子密度の振動は金属のフリーデル振動と連続的につながる概念であるという面白い言及も見られる。
- 5) N. D. Lang and W. Kohn: Phys. Rev. B 1 (1970) 4555; *ibid.* 3 (1971) 1215; *ibid.* 7 (1973) 3541.
- 6) 拙著「多体問題特論(朝倉物理学大系15巻)」(2009年)の第1章、特に1.1節はこのときの経験を踏まえて DFT に向き合う際の心構えを意識して書いたものである。
- 7) S. Kawaji, S. Miki, and T. Kinoshita: J. Phys. Soc. Jpn. 39 (1975) 1631.
- 8) L. Hedin: Phys. Rev. 139 (1965) A796.
- 9) Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 45 (1978) 786.
- 10) Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 49 (1980) 1267; X. Lin, Z. Zhu, B. Fauque, and K. Behnia: Phys. Rev. X 3 (2013) 021002.
- 11) Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 51 (1982) 63; *ibid.* 78 (2009) 013703.
- 12) Y. J. Uemura, L. P. Le, G. M. Luke, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. H. Brewer, T. M. Riseman, C. L. Seaman, M. B. Maple, M. Ishikawa, D. G. Hinks, J. D. Jorgensen, G. Saito, and H. Yamochi: Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 2665; Y. J. Uemura, A. Keren, G. M. Luke, L. P. Le, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. H. Brewer, R. L. Whetten, S. M. Huang, S. Lin, R. B. Kaner, F. Diederich, S. Donovan, G. Grüner, and K. Holczer: Nature 352 (1991) 605; Y. Uemura: Physica B 374-

- 375 (2006) 1; Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 61 (1992) 3849.
- 13) Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 49 (1980) 1713.
- 14) Y. Takada, K. Arai, N. Uchimura, and Y. Uemura: J. Phys. Soc. Jpn. 49 (1980) 1851; Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 50 (1981) 1998.
- 15) Y. Takada and T. Ando: J. Phys. Soc. Jpn. 44 (1978) 905.
- 16) J. Lutz and F. Kuchar: Phys. Rev. B 55 (1997) 2315.
- 17) Y. Takada: Phys. Rev. B 26 (1982) 1223.
- 18) Y. Takada: Phys. Rev. A 28 (1983) 2417.
- 19) Overhauser 先生は電子間の交換相関効果を局所場補正で捉えるコツを丁寧に教えて下さった。そして、拙著「多体問題(朝倉物理学大系9巻)」(1999年)の4.5節はOverhauser 先生の局所場補正に関する講義を下敷きにして書いたものである。
- 20) Y. Takada and W. Kohn: Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 470; Phys. Rev. B 37 (1988) 826.
- 21) M. Scheffler and P. Weinberger (editors): *Walter Kohn* (Springer, 2003); 高田康民: 固体物理 34 (1999) 68.
- 22) Y. Takada: Phys. Rev. A 38 (1988) 98.
- 23) Y. Takada: Phys. Rev. B 35 (1987) 6923.
- 24) Y. Takada: Phys. Rev. B 43 (1991) 5979.
- 25) Y. Takada and H. Yasuhara: Phys. Rev. B 44 (1991) 7879.
- 26) Y. Takada: Phys. Rev. B 43 (1991) 5962.
- 27) Y. Takada: Phys. Rev. B 37 (1988) 155.
- 28) C. A. Kukkonen and A. W. Overhauser: Phys. Rev. B 20 (1979) 550.
- 29) K. Mouloupoulos and N. W. Ashcroft: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 2555.
- 30) Y. Takada: Phys. Rev. B 47 (1993) 5202.
- 31) G. Baym and L. P. Kadanoff: Phys. Rev. 124 (1961) 287; G. Baym: Phys. Rev. 127 (1962) 1391.
- 32) Y. Takada: Phys. Rev. B 52 (1995) 12708.
- 33) Y. Takada: J. Phys. Chem. Solids 54 (1993) 1779.
- 34) Y. Takada: Phys. Rev. Lett. 87 (2001) 226402.
- 35) Y. Takada: J. Superconductivity 18 (2005) 785.
- 36) K. Matsuda, K. Tamura, and M. Inui: Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 096401.
- 37) H. Maebashi and Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 053706.
- 38) H. Maebashi and Y. Takada: Phys. Rev. B 84 (2011) 245134.
- 39) Y. Takada: Molecular Phys. 114 (2016) 1041.
- 40) I. E. Dzyaloshinskii and A. I. Larkin: Sov. Phys.-JETP 38 (1974) 202.
- 41) H. Maebashi and Y. Takada: Phys. Rev. B 89 (2014) 201109 (R).
- 42) Y. Takada and H. Yasuhara: Phys. Rev. Lett. 89 (2002) 216402.
- 43) Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 1544; Int. J. Mod. Phys. B 21 (2007) 3138.
- 44) Y. Takada and T. Hotta: Int. J. Mod. Phys. B 12 (1998) 3042.
- 45) Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 3134.
- 46) T. Hotta and Y. Takada: Phys. Rev. Lett. 76 (1996) 3180; Phys. Rev. B 56 (1997) 13916; Y. Takada: in *Proceedings of the International School of Physics 'Enrico Fermi' Course CLXI—Polarons in Bulk Materials and Systems with Reduced Dimensionality*, edited by G. Iadonisi and J. Ranninger (IOS Press, Amsterdam, 2006) pp. 207–226.
- 47) Y. Takada and A. Chatterjee: Phys. Rev. B 67 (2003) 081102(R).
- 48) A. Chatterjee and Y. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 73 (2004) 964.
- 49) Y. Takada: Phys. Rev. B 61 (2000) 8631.
- 50) Y. Takada and M. Masaki: J. Molecular Structure 830 (2007) 207; J. Superconductivity and Novel Magnetism 20 (2007) 629.
- 51) これについて「物性科学ハンドブック——概念・現象・物質——」(朝倉書店, 2016)pp. 88–150も参考にされたい。
- 52) Y. Takada and T. Cui: J. Phys. Soc. Jpn. 72 (2003) 2671; M. Shimomoto and Y. Takada: *ibid.* 78 (2009) 034706.
- 53) H. Koizumi, T. Hotta, and Y. Takada: Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 4518.
- 54) Y. Takada and M. Kido: J. Phys. Soc. Jpn. 70 (2001) 21.
- 55) T. Cui, Y. Takada, Q. Cui, Y. Ma, and G. Zou: Phys. Rev. B 64 (2001) 024108.
- 56) T. Hotta, Y. Takada, H. Koizumi, and E. Dagotto: Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 2477.
- 57) Y. Takada, T. Hotta, and H. Koizumi: Int. J. Mod. Phys. B 13 (1999) 3778.
- 58) K. S. Singwi, M. P. Tosi, R. H. Land, and A. Sjölander: Phys. Rev. 176 (1968) 589.
- 59) Y. Takada and H. Goto: J. Phys.: Condensed Matter 10 (1998) 11315.
- 60) K. Akiba, A. Miyake, H. Yaguchi, A. Matsuo, K. Kindo, and M. Tokunaga: J. Phys. Soc. Jpn. 84 (2015) 054709.
- 61) K. Yoshizawa and Y. Takada: J. Phys.: Condensed Matter 21 (2009) 064204.
- 62) Y. Takada, R. Maezono, and K. Yoshizawa: Phys. Rev. B 92 (2015) 155140.
- 63) L. N. Oliveira, E. K. U. Gross, and W. Kohn: Phys. Rev. Lett. 60 (1988) 2430.
- 64) この式導出の解説は、「計算科学3. 計算と物質」(岩波書店, 2012)第8章, pp. 256–258を参照されたい。
- 65) M. A. L. Marques, M. Lüdgers, N. N. Lathiotakis, G. Profeta, A. Floris, L. Fast, A. Continenza, E. K. U. Gross, and S. Massidda: Phys. Rev. B 72 (2005) 024546.