

強相関とトポロジー

川上則雄

京都大学 大学院理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻

アブストラクト

凝縮系物理学において重要な概念である強相関現象およびトポロジカル現象について入門的な講義を行う。特にその絡み合いから生じる「強相関トポロジカル現象」について議論する。まず、強相関の基礎から始める。強相関の本質は「近藤効果」と呼ばれる多体効果に集約されるといつても過言ではない。近藤効果は古くから研究されてきたが、物理学のいたるところに顔を出す、とびっきり重要な概念である。近藤効果に基づいて、強相関系相転移の典型例である「モット転移」の話をしたいと思う。近藤効果とモット転移が理解できれば、強相関の基礎はバッチリである。この強相関の考え方を基礎として、トポロジカル現象への相関効果について議論する。トポロジカル絶縁体・超伝導体の研究は、この十年くらいで一気に進み、特に弱相関系のトポロジカル現象はよく理解されている。一方、強相関トポロジカル現象に関してはまだ理解が十分とは言えず、現在、精力的に研究が進められている。ここでは、まず相互作用のないトポロジカル絶縁体から話を始め、強相関効果を取りこむ。トポロジカル近藤絶縁体、トポロジカルモット絶縁体、相互作用による分類のリダクションなどを例にとって、最近の話題を紹介する。

第1章 はじめに

「もののことわり」を探求する物理学はいつの時代も人々の心を魅了してやまない。中でも物性物理学の話題はたいへん豊富になっており、超伝導や磁性などの伝統的なものから最先端テクノロジーによるナノ量子系までカバーしている。このような物性物理学において、「強相関効果」の研究が盛んに行われている。例えば、固体中の電子は、周りにいる電子の動きを感じ相互に関係をもちながら複雑に運動している。これが「強相関効果」である。この研究は、高温超伝導に代表される物性物理の中心課題を含んでいる。

このような従来からの定番のテーマに加えて、近年、トポロジカル現象に大きな注目が集まっている。トポロジカル現象の先駆的な例は、量子ホール効果における「ホール伝導度の量子化」であるが、これは強磁場中の2次元電子系という特殊な条件下で実現されたものである。この分野に新たなブレークスルーをおこしたのは「量子スピinnホール効果」の予言(2005年)と、2次元量子井戸HgTe/CdTeでの実現である(2007年)。ここでは磁場は必要なく、時間反転対称性が保たれた系でトポロジカル現象が発現する。これに続き、Bi₂Se₃などの3次元系でも次々とトポロジカル物質が発見されてきた。これらの物質群は「トポロジカル絶縁体」と呼ばれ、物質科学の新たな研究舞台を創り出した。

这样に世界的潮流になってきたトポロジカル量子現象であるが、物理学の基礎概念として根付くには未開拓の部分が残されている。特に、粒子間の相互作用に起因する強相関効果の解明が、新たな物質開発だけでなく学理構築の鍵となる。この領域での研究を推進することにより、強相関物理とトポロジカル物理が融合した新たな研究舞台が拓かれる期待される。

本講義では、強相関トポロジカル現象を理解することを目的とし、強相関の基本的な考え方とそのトポロジカル現象への応用を紹介する。

まず、電子相関の話題から始める。電子相関効果が最もよく理解されている現象は、間違いなく「近藤効果」である。近藤効果は金属中の磁性不純物の問題に端を発したものであるが、物性物理のみならず物理学全体に著しい影響を与えてきた。近藤効果には「強相関効果」の本質が凝縮している。「平均場」で電子相関効果を扱うというユニークな理論を用いて相互作用による「電子の繰りこみ」の考え方を分かり易く紹介する。一方、金属状態において相関効果がどんどん強くなると、電子系は最終的にモット絶縁体に転移する。近藤効果で用いた「平均場」の拡張版である「動的平均場」を導入することで、モット転移なども含め強相関を統一的に理解する。

以上の強相関の考え方を基礎として、トポロジカル現象への相関効果について議論する。トポロジカル絶縁体・超伝導体の研究はこの十年くらいで一気に進み、特に弱相関系のトポロジカル現象はよく理解されている。一方、強相関トポロジカル現象に関してはまだ理解が十分とは言えず、現在、精力的に研究が進められている。ここでは、まず相互作用のないトポロジカル絶縁体から話を始め、強相関効果を取りこむ。トポロジカル近藤絶縁体、トポロジカルモット絶縁体、相互作用による分類のリダクションなどを例にとって、最近の話題を紹介する。

第2章 近藤効果：電子相関の典型例

2.1 抵抗極小と近藤効果

近藤効果は、金属中に混入した希薄な磁性不純物が引き起こす抵抗極小の現象である。通常の残留抵抗とは異なり、抵抗は低温で $\log T$ タイプの異常な増加を示す（図 2.1）。よく知られている例としては、銅の中にマンガン不純物が混入している系がある。1964 年に、近藤によって磁性不純物による散乱に関する摂動論で抵抗極小はうまく説明されたが、同時に、低温で種々の物理量に発散が生じるという困難を伴った[1, 2]。この理論の困難さの起源が不純物スピンによる多体効果であることが示され、近藤効果が多体問題の本質にふれるものであることが広く認識された。その後の多くの研究で低温における本質は明らかにされ[3, 4, 5]、全温度領域での振舞いは Wilson の繰り込み群によって解明された[6]。これは Wilson のノーベル賞の主業績ともなった。Wilson の理論に続き、近藤効果の厳密解が導出され[7]、さらには共形場理論による解析も行われるなど[8]、近藤効果は「ほぼ完全に解明された稀有な多体問題」と認識されている。実験的にも、近藤効果は物理学の至る所に現れる。重い電子系と呼ばれる希土類化合物、量子ドット系、金属表面の吸着子などなど、近藤効果の出現する現象は枚挙にいとまがない。物理学における近藤効果の重要性を決定的にしているのは、「繰りこみ群の具現化」であろう。近藤効果において、高温から低温へ至る物理量の変化を観測することは、弱い相関の領域から強い相関の領域への「繰りこみフロー」を追いかけることに他ならない。

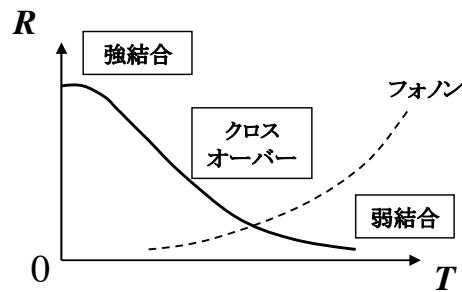


図 2.1: 近藤効果における抵抗 R の温度依存性。通常、抵抗は温度を下げるときオノン散乱がおさまるので残留抵抗値に近づくが、近藤効果では低温で逆に抵抗は増加し($\log T$ の依存性)、さらに低温では一定値に近づく。実線(破線)は磁性不純物(オノン)からの寄与。

近藤効果では、伝導電子が磁性不純物により $J\mathbf{S}_{\text{imp}} \cdot \mathbf{S}_c$ タイプの交換相互作用で散乱される。重要なことは、散乱の際に不純物スピン (\mathbf{S}_{imp}) と伝導電子のスピン (\mathbf{S}_c) が反転を起こすことである（図 2.2）。このような散乱を通して、伝導電子は不純物のスピンを遮蔽し始める ($J > 0$ 、反強磁性的な結合の場合)。この遮蔽のプロセスに伴い、物理量には対数的な温度依存性が現れる。さらに温度が下がり絶対零度付近になると、局在スピニンは完全に凍結し強結合領域に入る。この低温の状態は「局所フェルミ液体」と呼ばれており、ここでは種々の物理量の温度依存性は正常なものとなる。どのように小さい J の値

(弱結合)から出発しても必ずこの繰り込みが生じ、低温では強結合のフェルミ液体(強結合)へと移り変わっていく(図2.1)。



図2.2: 近藤効果における伝導電子と局在スピンとの散乱。スピン反転を伴う。

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

2.2 アンダーソンモデルとハートリーフォック近似

近藤効果を含み、金属中の磁性不純物の生起の問題まで立ち返って考えることのできるのが、アンダーソンモデル[2, 3, 4, 5]

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V \sum_{k,\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) + \varepsilon_d \sum_{\sigma} c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \quad (2.1)$$

である。近藤理論が提出される数年前の1961年にアンダーソンによって提案され、同氏のノーベル賞受賞の一翼を担った業績でもある[9]。ここで c^\dagger , c 等の演算子が導入されているが、これらは伝導電子、不純物電子の生成・消滅を表す演算子である。また、 $n_{d\sigma} = c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma}$ は、局在 d 電子の個数演算子である。このモデルの意味するところは、 ε_k のエネルギーを持つ伝導電子が混成項 V によって不純物(エネルギーレベル ε_d 、2電子間クーロン反発 U)とカップルする、というものである。アンダーソンモデルは、強相関の極限で近藤モデルに帰着する。一方で、このアンダーソンモデルを眺めてみると、これが量子ドット系のモデルともみなされることに気づく。不純物を量子ドットと解釈し、これがリードすなわち伝導電子とトンネル効果で結びついているというものである。量子ドットにおいても1998年に近藤効果が観測され[10]、その後、量子ドットの研究において重要な位置を占めている。

まずは、金属中の局在スピンの生起を議論するため、アンダーソンの原論文に従って、上記のクーロン反発の項を平均場近似(ハートリーフォック近似)で取り扱う[9]。まずクーロン反発がないとき($U = 0$)、不純物電子は伝導電子と V を通して混成するので、不純物レベルは有限の寿命を持ち、共鳴幅 Δ だけ広がる(図2.3)。さて、相互作用の部分の演算子は

$$n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} = n_{d\uparrow} \langle n_{d\downarrow} \rangle + \langle n_{d\uparrow} \rangle n_{d\downarrow} - \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle + \Delta n_{d\uparrow} \Delta n_{d\downarrow} \quad (2.2)$$

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

この平均場近似の範囲では、一つの不純物レベル ε_d (\uparrow スピンとしよう) がフェルミ面より十分深く、クーロン斥力を感じた \downarrow スピンのレベル $\varepsilon_d + U \langle n_{d\uparrow} \rangle$ がフェルミ面の上方にあれば、 \uparrow スピンのみを詰めて \downarrow スピンを空にした不純物状態が安定である。すなわち、磁気モーメントが生成することになる(図 2.3)。具体的に磁気モーメントが生成する条件を求めてみると、不純物部分のフェルミ面での状態密度 $\rho_d(0)$ を用いて

$$\rho_d(0)U \geq 1 \quad (2.3)$$

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

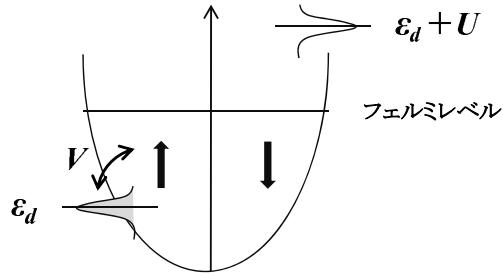


図 2.3: アンダーソンモデルの平均場近似：磁気モーメントの生起

以上がアンダーソンの原論文の概略であり、金属中の磁性不純物の生起に関する実験事実を定性的に説明するものである[9]。しかしながら、多体効果である近藤効果はこの取り扱いでは記述することができない。平均場に基づいて揺らぎを無視しているので、この扱いは高エネルギー領域でのみ意味を持つ。量子揺らぎが重要となる近藤効果では、低エネルギー領域での多体効果が本質的となる。以下に、この効果に注目してみる。

2.3 局所フェルミ液体：繰りこまれた電子

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

話の見通しをよくするため、 $U \rightarrow \infty$ の強相關アンダーソンモデルを考えよう。この極限では、不純物における電子の二重占有は禁止され、可能な不純物の配置は、 $\uparrow, \downarrow, \text{空}$ の3種類となる。そこで、これらの電子の状態を生成する演算子を新たに $d_{\downarrow}^{\dagger}, d_{\downarrow}^{\dagger}, b^{\dagger}$ としよう。これらの統計性はそれぞれフェルミ、フェルミ、ボースとする。演算子の種類がもとの2から3に増えていることに注意。これらの演算子はもとの電子の生成、消滅演算子と次のような関係があることが直ちにわかる。

$$c_{d\sigma}^{\dagger} = d_{\sigma}^{\dagger} b, \quad c_{d\sigma} = d_{\sigma} b^{\dagger} \quad (2.4)$$

すなわち、拡張された空間では、電子を作るためにまず空の状態を b で消し去り、その後に d_{σ}^{\dagger} で電子をつけるという作業をおこなうことになる。この表示にしたがうと、

アンダーソンモデルは

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,\sigma} (V c_{k\sigma}^\dagger b^\dagger d_{\sigma} + h.c.) \quad (2.5)$$

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

$$d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} + d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} + b^\dagger b = 1 \quad (2.6)$$

が課される。すなわち、物理的に実現してよいのは、 $\uparrow, \downarrow, \text{空}$ の 3 種類のいずれかである、という条件である。多体効果としての困難さを、この拘束条件に押し付けてしまったことになる。この方法はしばしばスレーブボゾン法と呼ばれる [11]。

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

さて、最も簡単な近似として、ボゾン場 b に「平均場近似」を用いてみよう。まず、ボゾン場 b を時間に依存しない平均値 $\langle b \rangle$ で置き換える。このようにすれば、ハミルトニアンは一体問題に帰着する。拘束条件 (2.6) を扱うために、よく知られているラグランジュの未定乗数法を用いる。 $\mu(d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} + d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} + b^\dagger b - 1)$ をハミルトニアンに追加して、エネルギー期待値を計算し、その極値から実現する状態を求めるという手続きである。この際、拘束条件 (2.6) も期待値で置き換える。この手続きにより、混成項 V は繰りこまれ、有効的に $V^* = \langle b \rangle V$ となる。この繰りこみのため、 V の 2 乗に比例する不純物の共鳴幅 Δ は、

$$\Delta^* = |\langle b \rangle|^2 \Delta, \quad |\langle b \rangle|^2 = 1 - n_d \quad (2.7)$$

のように繰りこまれる [11]。2 番目の式は、拘束条件そのものである。変分を行って、繰りこまれた共鳴幅と不純物レベルの具体的な表式を求めてみると、

$$\Delta^* = D \exp[\pi \varepsilon_d / (4\Delta)], \quad \varepsilon_d^* = \varepsilon_d + \mu \sim (\Delta^*)^2 / \Delta \quad (2.8)$$

となる。 D はバンド幅である。この結果は、繰りこまれた共鳴が近藤共鳴に他ならないことを意味している [2, 3, 4, 5]。また、繰りこまれたレベル ε_d^* はゼロに近いことから、近藤共鳴はフェルミ面付近に形成されることがわかる。この繰りこみの概略を図 2.4 に示した。

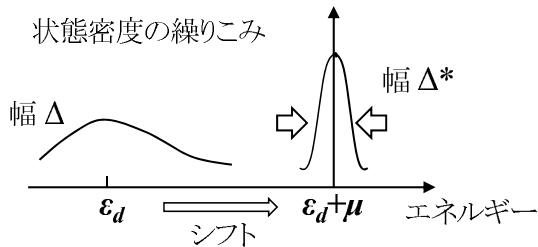


図 2.4: 近藤効果による繰りこみ：もとの不純物共鳴は、フェルミ面までシフトし繰りこまれてシャープな共鳴（近藤共鳴）になる。

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

2.4 多体効果の本質： 繰りこみはなぜ起きる？

では、近藤効果における繰りこみ効果、すなわち電子相関効果をなぜ平均場で導出できたのであろうか。これを考察することは、動的平均場の基本を理解する上で重要である。これを見るため、一粒子グリーン関数を眺めてみよう [2, 3, 4, 5]（グリーン関数のエッセンスは講義で紹介する）。

$$G(\omega_+) = [\omega_+ - \varepsilon_d + i\Delta - \Sigma_d(\omega_+)]^{-1} \quad (2.9)$$

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

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

$$\Sigma_d(\omega_+) \sim \mu + a_1 \omega_+ + O(\omega_+^2) \quad (2.10)$$

この式をグリーン関数の表式に代入し、少しだけ変形すると

$$G(\omega_+) \sim z[\omega_+ - z\varepsilon_d^* + i\Delta^*]^{-1} \quad (2.11)$$

となることがすぐ分かる。ここで

$$z = 1/(1 - a_1), \quad \Delta^* = z\Delta, \quad \varepsilon_d^* = (\varepsilon_d + \mu) \quad (2.12)$$

である。この結果は、もとの不純物共鳴がフェルミ面付近 ε_d^* に移動し、その幅が z という因子だけ縮まり、繰りこまれた共鳴（近藤共鳴）に変化する、ということを意味している。この繰りこみが「フェルミ液体の形成」のエッセンスでもある [2, 3, 4, 5]。以上は、絶対零度の結果である。温度が上昇すると、多体効果で生じた近藤共鳴は徐々に消失していくことになる。

ここで、上に述べた平均場近似との関係を見てみよう。スレーブボゾン平均場では、伝導電子と不純物の混成項の係数を平均場 $\langle b \rangle$ がコントロールしており、その結果、共鳴幅が $|\langle b \rangle|^2$ の因子だけ縮む。これを自己エネルギーの展開の表式と比較すると、 ω の1次の係数 a_1 の部分が、ちょうど $|\langle b \rangle|^2$ の役割を担っていることがわかる。このように、スレーブボゾン平均場は時間に依存しない静的な近似であるにも関わらず、「 ω の一次の係数を平均場」としているために、量子揺らぎによる「繰りこみの効果」を取り入れができるのである。これと対照的に、アンダーソンによる通常の平均場近似（ハートリーフォック近似）は ω のゼロ次の項のみを扱うので、繰りこみ効果は入らない。

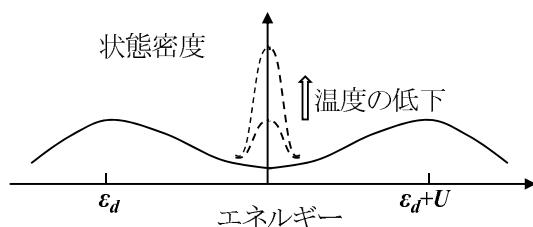


図 2.5: アンダーソンモデルの状態密度。中央の幅の狭い構造が近藤ピーク。

2.5 正確な描像

上に紹介した2つの平均場近似の答を組み合わせると、近藤効果を定性的に正しく描写することができる(図2.5)[2, 3, 4, 5]。まず、高温では多体効果は熱擾乱のためかき消される。したがって、状態密度に現れるのは、高エネルギーの近似として導入したハートリーフォック近似(図2.3)の2つの山のみである。ただし、ハートリーフォック近似とは異なり局在スピンの向きは固定されず、自由スピンが実現している。温度を下げていくと、不純物スピンの遮蔽が徐々に生じ、同時にフェルミ面付近に近藤ピークが成長していく(図2.5)。この近藤ピークの成長に伴い、物理量には異常な振る舞いが現れる。その一つが抵抗極小の現象として観測された $\log T$ タイプの抵抗増加である(図2.1)。さらに低温になると、近藤ピークは飽和して絶対零度のものに落ち着く。このような低温では、 $\log T$ のような異常な温度依存性はすべておさまり、物理量の振る舞いは正常なものとなる。この性質は「繰りこまれた共鳴状態」すなわち近藤共鳴状態を用いて表される。これが「局所フェルミ液体」と呼ばれているものに他ならない[2, 3, 4, 5]。近藤共鳴は、実際に光電子分光やSTMなどによって直接観測されている。

このように、近藤効果では、高温の自由スピン(弱結合)の領域から、温度の低下とともにクロスオーバーが起き、最終的に低温のフェルミ液体(強結合)の領域に落ち着く。繰りこみ群のフローが、まさに物理量の温度変化に実現されているわけである。このような観点から、最初に示した抵抗極小の現象(図2.1)を見直してみると、近藤効果に潜む深遠な物理が自然に浮き上がってくるのではないだろうか。

第3章 強相関系のモット転移

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

近年、系の空間次元が大きい極限からのアプローチとして[12]、動的平均場理論が提案されている。この方法は、局所的な電子相関効果を正確に取り入れることのできる方法である。現在、動的平均場理論は強相関電子系を研究する強力な理論的枠組みとして確立され、実験の解析にも広く用いられている[13, 14, 15]。非常に汎用性が高く、強相関系を扱うスタンダードな方法となっている[3, 5]。以下では、この理論のエッセンスを紹介する。

3.1 動的平均場

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

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (3.1)$$

で与えられる。ただし、和 $\langle i, j \rangle$ は最近接格子点のみを取るものとする。この系のある格子点のスピンに注目すると、有効磁場 $\mathbf{H}_i = \sum_j J_{ij} \mathbf{S}_j$ が働いているとみなすことができる。 \mathbf{S}_j は量子的にゆらぐため、有効磁場も揺らぐことになる。格子点 i の最近接格子点の数を M とし、 M が十分大きい極限で相互作用を $J_{ij} = J/M$ とスケールしよう。このとき

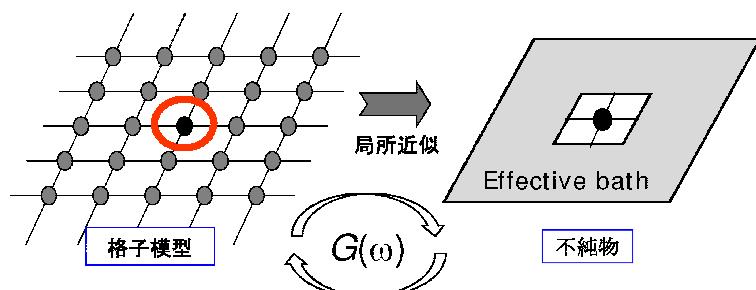


図 3.1: 動的平均場近似：格子模型の1つのサイトに着目し、周りのサイトからの寄与を動的な有効場として取り入れ、有効不純物模型へマップする。

$M \rightarrow \infty$ の極限で、有効磁場は $\sum_j J_{ij} \langle S_j \rangle = J \langle S \rangle$ のようにスピンの平均値 $\langle S \rangle$ を用いて記述することができる。すなわち、平均値からのずれである揺らぎの効果を無視することができる。このことは、「静的」平均場近似が無限次元の極限で正確になることを示している。

以上の話は、局在スピンに関してよく知られたものであるが、「動きまわる電子」に関してはそれほど事情は単純ではない。無限次元においても「量子揺らぎ」が無視できないのである。この量子揺らぎを扱う枠組みが動的平均場理論である。この理論では、ハバード模型などの格子模型が有効的な不純物模型にマップされる(図 3.1)。この不純物模型は、動的な(すなわち時間に依存して揺らぐ)平均場と結合しているところが通常の「静的」平均場近似と異なる。

以下では、第二章でも登場したハバード模型

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (3.2)$$

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

$$\varepsilon_k \rightarrow \varepsilon_k + \Sigma_k(\varepsilon) \quad (3.3)$$

とすれば、 $\Sigma_k(\varepsilon)$ が「動的揺らぎを含んだ平均場」とみなすことができるであろう。ここで、一般的には波数 k 依存性もあるとして添え字に k をつけた。実は、 $\Sigma_k(\varepsilon)$ は、前章でふれたグリーン関数に現れる「自己エネルギー」に他ならない[3, 5]。したがって、「動的な平均場」を導入する場合、その自然な候補として自己エネルギーあるいは、その元締めであるグリーン関数が浮かびあがってくる。実際には、波数 k 依存性まで含めて $\Sigma_k(\varepsilon)$ を見積もることは困難なので、波数依存性を落とした $\Sigma(\varepsilon)$ を有効場と考えるのが、動的平均場の枠組みである。すなわち、局所的な量子揺らぎを正確に扱うアプローチである。このように波数依存性を落とすことが正当化されるのは系が無限次元の時である。この事情は通常の静的平均場とも共通している。

このような空間次元の大きい極限では、もとの格子模型は、「動的平均場に埋め込まれた有効不純物模型」に帰着される。図 3.1 に、もとの格子模型から有効不純物模型へのマッピングを模式的に示した。動的平均場は、通常の静的平均場と同様、自己無撞着に決定されなければならない。これについて、以下に簡単にまとめる。

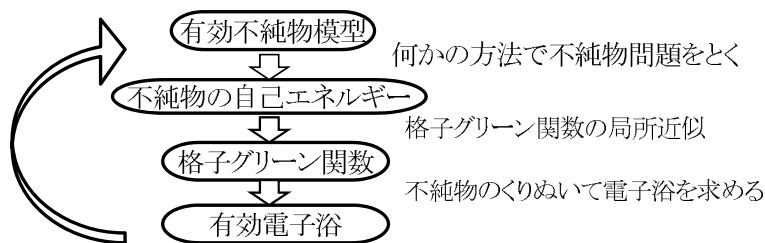


図 3.2: 動的平均場近似における自己無撞着ループ

ステップ (1):

まず、有効不純物模型を解く。この不純物模型における無摂動グリーン関数を $G_\sigma(\omega)$ と書

くことになると、これが時間に依存した有効場を記述する(図3.1の右図)。この有効模型において、相互作用を含むグリーン関数 G_σ は自己エネルギー Σ_σ を用いて、次式の関係式(ダイソン方程式と呼ばれる)[3, 5]

$$G_\sigma = \mathcal{G}_\sigma + \mathcal{G}_\sigma \Sigma_\sigma G_\sigma \quad (3.4)$$

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

ステップ(2):

次に、伝導電子のグリーン関数を求める。グリーン関数 G_σ は、あるサイトにおける局所的なグリーン関数であるので、これはもとの模型(3.2)の伝導電子の局所グリーン関数と一致しなければならない。(3.2)式のハミルトニアンに対する局所グリーン関数は、

$$G_\sigma(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + \mu - \Sigma_\sigma(\omega)} \quad (3.5)$$

と書くことができる。ただし、 μ は化学ポテンシャル。 k の和を取ることで、グリーン関数が局所的なものになっている。結局、(3.4)式と(3.5)式を用いて、有効場を記述するグリーン関数 \mathcal{G}_σ は

$$\mathcal{G}_\sigma^{-1}(\omega) = \left[\frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + \mu - \Sigma_\sigma(\omega)} \right]^{-1} + \Sigma_\sigma(\omega) \quad (3.6)$$

のように求めることができる[3, 5]。

ステップ(3):

再び、不純物模型を解く。有効場 \mathcal{G}_σ が一旦求められれば、有効不純物模型を解くことで自己エネルギー Σ_σ を計算することができる。 Σ_σ が得られると(3.6)式よりグリーン関数 \mathcal{G}_σ を計算できるので、これらは自己無撞着方程式を構成している。第3.2図に動的平均場理論の自己無撞着ループを示した。

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

3.2 繰り込まれた粒子とモット転移

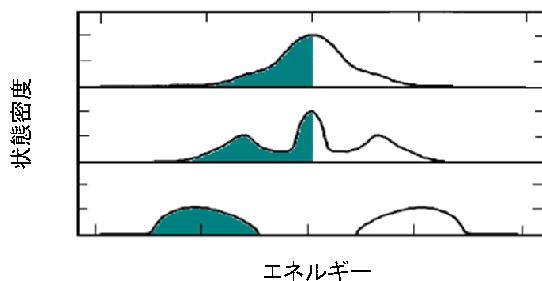


図3.3: 動的平均場理論で計算された状態密度:上の図から順に $U/W = 2, 4, 8$ である(W はバンド幅)。

以上の手続きで、遍歴電子系の多体問題が不純物系の多体問題（近藤効果）にマップされた。後者の問題で解析の中心となるのは前章に登場したアンダーソンモデルであり、残された問題はこれをどのように解くかである。アンダーソンモデルの動的性質を調べるには、種々の方法がある。（1） U に関する摂動論、（2）Wilson 数値繰りこみ群法、（3）量子モンテカルロ法、（4）密度行列繰りこみ群法、（5）数値的厳密対角化法、（6）グリーン関数切断近似法、などが代表的である。どれも一長一短があるが、（2）-（4）の数値的方法は信頼度がかなり高い。

例として、ハバード模型に動的平均場近似を行い、量子モンテカルロ法で不純物問題を解いて得られたモット転移の結果を図3.3に示す[13]。ハバード相互作用 U がないときは通常の金属であるが、 U を大きくしていくと、次第にフェルミ面付近に状態密度の細いピークが現れる。これは、繰りこまれた電子がフェルミ面付近に形成されたことを示している。いわゆる「フェルミ液体」の状態が実現する。さらに U を大きくしていくと、フェルミ面に電荷ギャップが形成され系はモット絶縁体に転移する。動的平均場理論は、これまでにハバード模型や周期アンダーソン模型などに適用され多くの成功を収めてきた[13, 14, 15]。

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

第4章 トポロジカル絶縁体

トポロジカル絶縁体に話を移そう。冒頭でもふれたように、近年トポロジカル現象の重要性が物質科学において認識されている[16, 17, 18]。この現象の基礎は量子ホール効果にあるが、これは長い間、磁場中（時間反転対称性を破る条件）にある2次元電子系の特殊な性質と思われていた。しかしながら近年の研究で、これは2次元磁場中の特殊性ではなく次元をとわず発現する現象であることが認識された。このとき磁場の代わりに活躍するのはスピン軌道相互作用である。スピン軌道相互作用のおかげで、時間反転対称性を維持しつつ有効的に磁場効果を生み出すことができる。スピン軌道相互作用の強い物質は世の中にたくさんあり、その中でトポロジカル物質に分類されるものが存在する。現在では、「トポロジカル物質」、「トポロジカル量子現象」という言葉が広く使われるようになっている[16, 17, 18]。

量子ホール系でよく知られているように、トポロジカル絶縁体では、バルクは文字通り絶縁体となっている。一方、その表面状態（エッジ状態）はギャップレスとなっており、非磁性の摂動に対して robust である（トポロジーに守られたエッジ状態）。このエッジ状態はバルクがどのような性質をもっているかを反映する。これはバルク・エッジ対応と呼ばれる重要な概念の一例であり、トポロジカル物質を議論する際には欠かすことのできない概念である。

以下では、まず量子ホール系から始めて、2次元のトポロジカル絶縁体について必要な事柄を簡単にまとめておく。

4.1 量子ホール効果とチャーン絶縁体

整数量子ホール効果は、1980年に発見された、強磁場中の2次元電子系で生じる著しい量子効果である。磁場を変化させたとき、ホール伝導度は $\sigma_{xy} = Ne^2/h$ のように量子化されたとびとびの値をとる。ここで e は素電荷、 h はプランク定数である。量子化を特徴づける整数 N は系の端に現れるエッジ状態の本数と一致する。磁場がかかっているので、エッジ状態は一方向のみにカレントが流れる。これをカイラルエッジ状態とよぶ（図4.1）。

整数量子ホール効果におけるトポロジカルな性質は、チャーン数 N で記述されることが知られている[19]。

$$N = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} d^2\mathbf{k} \left(\frac{\partial a_{n,y}}{\partial k_x} - \frac{\partial a_{n,x}}{\partial k_y} \right) \quad (4.1)$$

ここで BZ はブリルアンズーンで、波数空間での有効ゲージ場は $a_n(\mathbf{k}) = -i\langle u_{n\mathbf{k}} | \partial/\partial\mathbf{k} | u_{n\mathbf{k}} \rangle$ （ここで \mathbf{k} は波数）。ただし、波動関数 $u_{n\mathbf{k}}$ はハミルトニアン H に対して定義されるプロックハミルトニアン $H_k = \exp(-ik \cdot \mathbf{x}) H \exp(ik \cdot \mathbf{x})$ に対する固有関数である。これが有名な、サウレス-甲元-ナイチンゲール-デン・ニース (TKNN) 公式である[19]（2016年ノーベル賞の受賞理由にも含まれている）。チャーン数は整数のトポロジカル数であるが、これが有限の量子ホール系の境界に現れるエッジ状態の数に対応している。上に述べた「バルク・エッジ対応」の具体例である（図4.1）。

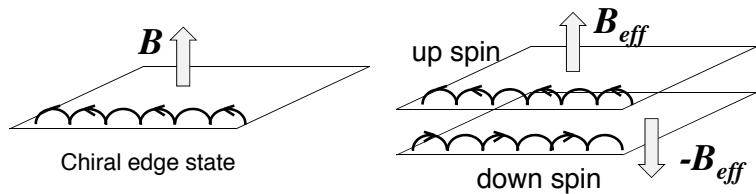


図 4.1: 左図：量子ホール系とカイラルエッジ状態、右図：2次元トポロジカル絶縁体とヘリカルエッジ状態

トポロジカル現象を理解する上で次の重要なステップは、Haldaneによってなされた[20]（2016年ノーベル賞の受賞理由に含まれている）。量子ホール系と同様な状況は格子系においても実現可能であり、またその際、実際の磁場は必要ではないということが示された。Haldaneが提案したのは蜂の巣格子上のタイトバインディング模型である（ハミルトニアンの形は次節参照）。この系に対し最近接のホッピングだけでなく複素振幅を持つ次近接のホッピングを導入する。この複素の次近接ホッピングのため、磁場の場合と同様に時間反転対称性は破れており量子ホール効果を示す。このように時間反転対称性が破れ、整数のチャーン数 N で特徴づけられるトポロジカル絶縁体のことを「チャーン絶縁体」と呼ぶ。

4.2 2次元トポロジカル絶縁体

この Haldane の成果をさらなる高みへと導いたのが、Kane-Mele による 2 次元トポロジカル絶縁体（量子スピンホール絶縁体）の理論である[21]。これはグラフェン（蜂の巣格子）の電子状態にスピン軌道相互作用を取り入れたモデルである。同じく、HgTe/CdTe の量子井戸に対しても理論提案がなされ[22]、これは直ちに実験で観測された[23]。これらの研究がトポロジカル絶縁体の研究に火をつけた。

ここでは、2 次元量子スピンホール絶縁体のモデルとして知られる Kane-Mele モデルを取り上げる。これは上記の Haldane のモデルを 2 枚分コピーして（↑スピン、↓スピン）重ねたものと解釈できる（図 4.1）。すなわち、Kane-Mele モデルは蜂の巣格子上の電子ハミルトニアンであり、次で与えられる。

$$H_{KM} = t \sum_{\langle i,j \rangle; \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + i\lambda_{so} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle; \sigma, \sigma'} \nu_{ij} c_{i\sigma}^\dagger s_{z, \sigma\sigma'} c_{j\sigma'} + m \sum_{i; \sigma} \xi_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad (4.2)$$

ここで $c_{i\sigma}(c_{i\sigma}^\dagger)$ は電子の消滅（生成）演算子であり、 i は蜂の巣格子上の 2 サイト（A,B）の副格子の位置、 $\sigma = \uparrow, \downarrow$ はスピンを表す。 $\langle i, j \rangle$ は最近接格子のペアを $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ は次近接格子のペアを表す。第二項はスピン軌道相互作用の項で、 λ_{so} はスピン軌道結合の強さを表す。 ν_{ij} は i から j への次近接格子のホッピングが反時計回りのとき +1 を、時計周りの時は -1 の値をとる。 s_z は電子スピンに関するパウリ行列である。この項により有効的な磁束を獲得するため、時間反転対称性を持つ。第三項は、格子ごとに交代するポテンシャルで、 m はその強さを表し、 $\xi_i = \pm 1$ の値を副格子 i 每にとる。このモデルでは、↑スピン（↓スピン）は運動量に依存する有効的な磁場 B_{eff} ($-B_{eff}$) を受けており、時間反転対称性を守りつつもスピンチャーン数で特徴付けられる量子スピンホール効果を示す。

トポロジカル相にある Kane-Mele モデルの有限系の 1 粒子スペクトルを図 4.2(a) に示している[21]。ジグザグエッジの蜂の巣格子に対する計算結果である。このモデルはヘリカルエッジ状態をもつ（図 4.2(b)）。すなわち、ひとつのエッジに注目したとき、アップ（ダウン）スピンの右向き（左向き）電子とのセットからなる（あるいはその逆）。このヘリ

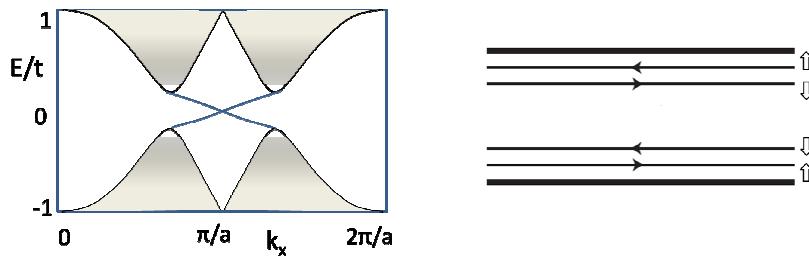


図 4.2: (a) 有限系での 1 粒子スペクトル、(b) ヘリカルエッジ状態 [21]。

カルエッジ状態の特徴は、スピンを保存するような不純物散乱の影響を受けないことがある（時間反転対称性に守られた状態）。

より一般にスピンを保存しないラシュバタイプのスピン軌道相互作用が入ると、分類は整数 Z ではなく、二値を持つ Z_2 トポロジカル不变量によって特徴づけられる (Z_2 トポロジカル絶縁体)。すなわち偶数枚の量子スピンホール絶縁体を合わせると自明な相になるということである。 Z_2 トポロジカル絶縁体のエッジ状態も時間反点対称性をもつ不純物散乱に対して robust である。この Z_2 トポロジカル絶縁体は 3 次元系にも拡張され、 Bi_2Se_3 などの多くの物質で実現されている。3 次元の場合、表面状態にはディラック準粒子が現れる。

4.3 エッジ状態と実験的観測

トポロジカル絶縁体の実現は、まず 2 次元の HgTe/CdTe 量子井戸での観測から始まった。この系では、輸送現象の測定からトポロジカルな性質が明らかにされた。その後、 Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 などの 3 次元のトポロジカル絶縁体が続々と発見されてきた。この場合、トポロジカルな性質を特定するのに威力を発揮してきたのが光電子分光による観測である。光電子分光は表面の電子状態を観測するのに適しており、表面状態としてのディラック錐がきれいに観測されている。さらに、スピン分解光電子分光を用いることで、トポロジカル表面状態に特有のスピン・運動量ロッキングも観測されている。この他多くの実験手法でトポロジカル絶縁体の実証がなされている。個々の論文の引用をすることは紙面の都合上できないので、詳細は教科書等を参照されたい [16, 17, 18]。

さらに結晶の対称性に基づくトポロジカル相の理解も進み、トポロジカル結晶絶縁体と呼ばれている。例えば、結晶のミラー対称性を考慮したトポロジカル絶縁体の研究が進み、 SnTe など具体的な物質が多く見つかっている。

このようにトポロジカル絶縁体の研究が大きく進展した一つの理由は、この系が「弱相関の系」であることである。例えば、光電子分光スペクトルで表面状態がきれいに観測されたことには、この系が弱相関であることが幸いしている。一方で、以下で扱う強相関の物質では実験はそれほど簡単ではない。種々の実験結果に、相関効果による繰り込みや寿命の効果などが現れるためである。このような強相関系に関しても、着実に実験研究が進んでいる。以下で、本講義の主題のひとつである強相関トポロジカル絶縁体を議論する。

第5章 強相関トポロジカル絶縁体

以上のように自由電子系でのトポロジカル相の理解が進む一方で、最近では電子間相互作用を有する系でのトポロジカル絶縁体に興味が持たれている。相互作用があるときの理論的取り扱いの困難は、自由電子のときに有効であるバンド理論が使えないことである。前の章でも述べたが、一電子状態が簡単には定義できないのである。

トポロジカル絶縁体に相互作用を入れていったときに期待される現象にいくつかの可能性がある。トポロジカルな分類は変わらないが物理的性質が変更を受ける、あるいはトポロジカルな分類そのものが変更を受ける、などがある。

前者の例としてトポロジカル近藤絶縁体やトポロジカルモット絶縁体がある。トポロジカル近藤絶縁体の候補は、希土類化合物の SmB_6 である。「トポロジカルモット絶縁体」は最初イリジウム化合物に対して提案され、その後詳細な研究が進められている興味深い相である。

後者の「トポロジカルな分類そのものが変更を受ける」場合もある。相互作用によって分類のリダクションが起こると表現される。例えば、整数 Z のトポロジカル数を持つ相が Z_8 にリダクションを起こす、といった例がある。このようなリダクションを実験的に調べる候補物質についても最近、提案がなされている。

以下では、主にトポロジカル近藤絶縁体とトポロジカルモット絶縁体について説明し、分類のリダクションについては、最後に簡単にふれることにする。

5.1 トポロジカル近藤絶縁体

強相関トポロジカル相として有力視されているのが、トポロジカル近藤絶縁体である。近藤絶縁体は重い電子系で発現する強い相関を持つ絶縁体である。前に述べた近藤効果が各格子点で起こり、その結果として重い電子が形成される。トポロジカル近藤絶縁体の候補として考えられているのが SmB_6 である [24, 25]。この物質は、1970年ころから長く研究されてきた。その中で謎とされていたのが低温における抵抗の飽和である [25]。すなわち絶縁体にも関わらず、低温では金属的に見えるということである。多くの研究によつて、この金属的な振る舞いは表面の性質に由来するものであることが分かった。しかしながら、この表面電流の起源は明らかにされていなかった。

最近、この表面電流はトポロジカル絶縁体の表面状態によるものであるという提案がなされ、トポロジカル近藤絶縁体というアイデアが導入された [26, 27]。実験的にも多くのチェックが行われてきた。まだ完全にコンシステントにはなっていないが、トポロジカルな性質を示唆する多くの実験が提出されている [25]。このほかに YbB_{12} も候補物質として提案されている [28]。

1次元トポロジカル近藤絶縁体

SmB_6 のバンド構造はかなり複雑であり、必ずしも本質をつかみやすいとは言えない。ここでは、トポロジカル近藤絶縁体が通常の近藤絶縁体とどのように違うかを説明するために1次元の近藤格子を考えてみる [29]。近藤格子モデルは、各格子点に近藤不純物を配置したものであり「重い電子系」のカノニカルなモデルと考えられている。近藤効果が各

サイトで生じるために相關の強い「重い電子」が現れる。電子のフィリングがちょうど絶縁体になる条件（ハーフフィリング）で近藤絶縁体となる。

ここでは、 p -波的な相互作用を持つ次のような近藤格子模型を考える。

$$H_{KL} = -t \sum_{j\sigma} [c_{j+1\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.}] + \frac{1}{2} J_K \sum_{j,\sigma\sigma'} \mathbf{S}_j \cdot p_{j\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'} p_{j\sigma'} + J_H \sum_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} \quad (5.1)$$

ここで、 $\sigma_{\sigma\sigma'}$ はパウリ行列であり、サイト j に関する和は1次元格子上でとる。 t は最近接の伝導電子のホッピング、 J_K は近藤カップリングである。取り扱いを簡単にするため、局在スピンの間の最近接ハイゼンベルク反強磁性相互作用 J_H も導入している。

通常の（自明な）近藤絶縁体では $p_{j\sigma} = c_{j\sigma}$ であり、局在スピンと伝導電子が同一サイトで相互作用する（図 5.1(b)）。一方、トポロジカル近藤絶縁体を得るには、

$$p_{j\sigma} = c_{j+1\sigma} - c_{j-1\sigma} \quad (5.2)$$

となることが必要である（図 5.1(b)）。すなわち、局在スピンは隣の格子点の伝導電子と非局所的に（ p -波的に）結合している。これがトポロジカルな性質を生み出す。したがって、トポロジカルに自明（非自明）な相は局所的（非局所的）な近藤シングレット形成で特徴づけられる。

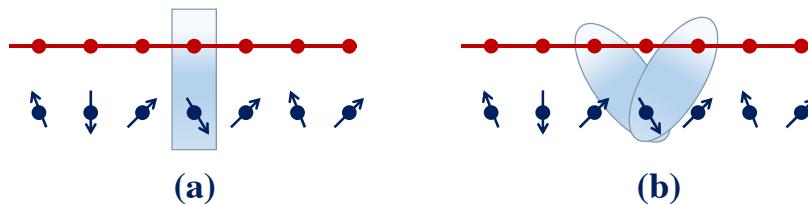


図 5.1: 近藤格子のシングレット形成：(a) 通常の近藤絶縁体、(b) トポロジカル近藤絶縁体

ここで、近藤効果の節で紹介した「平均場」を用いて、この強相關系を扱ってみよう。まず、局在スピン演算子 \mathbf{S}_j をフェルミオン演算子 $f_{j\sigma}$ (Abrikosov擬フェルミオン) を用いて次のように表す：

$$\mathbf{S}_j = \sum_{\sigma\sigma'} f_{j\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'} f_{j\sigma'} \quad (5.3)$$

この変換において、近藤効果の場合と同じく $\sum_\sigma f_{j\sigma}^\dagger f_{j\sigma} = 1$ という拘束条件が課される。

この表示で、(5.1) の近藤結合の部分 H_K とハイゼンベルク結合 H_H は

$$H_K = -J_K \sum_{j\sigma\sigma'} (f_{j\sigma}^\dagger p_{j\sigma})(p_{j\sigma'}^\dagger f_{j\sigma'}), \quad H_H = -J_H \sum_{j\sigma\sigma'} (f_{j+1\sigma}^\dagger f_{j\sigma})(f_{j\sigma'}^\dagger f_{j+1\sigma'}) \quad (5.4)$$

となる。

ここで、相關効果を取り込む平均場は、上記の4つの演算子の積の2つの演算子をその平均値で置き換えるものである。すなわち、 H_K においては $V^* = -J_K \langle f_{j\sigma}^\dagger p_{j\sigma} \rangle$ 、 H_H においては $\Delta^* = -J_H \langle f_{j\sigma}^\dagger f_{j+1\sigma} \rangle$ を導入する。これにより繰り込まれた近藤結合とハイゼンベルク結合は、

$$\tilde{H}_K = V^* \sum_{j\sigma\sigma'} (p_{j\sigma'}^\dagger f_{j\sigma'}) + \text{H.c.}, \quad \tilde{H}_H = \Delta \sum_{j\sigma\sigma'} (f_{j+1\sigma}^\dagger f_{j\sigma}) + \text{H.c.} \quad (5.5)$$

となる。この平均場近似によって、相互作用の項が一体の混成 \tilde{H}_K と f 電子のホッピング \tilde{H}_H になった。したがって、全ハミルトニアンは簡単に対角化することができる。電子相

関の効果は繰り込まれたパラメタ V と Δ に入っていることを思い出そう。これらは変分パラメタとしてセルフコンシスティントに決定される。特に、 V は近藤効果による繰り込み効果を含み、2.3節でふれた近藤エネルギーと密接に関係している。

上記の表式は運動量空間で表示すると、見通しがよくなる：

$$H_{MF} = \sum_k (c_{k\sigma}^\dagger, f_{k\sigma}^\dagger) \begin{pmatrix} -2t \cos k & -2iV^* \sin k \\ 2iV \sin k & 2\Delta \cos k - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\sigma} \\ f_{k\sigma} \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

ここで、 λ は粒子数の拘束条件のため導入したケミカルポテンシャルの項である。この λ が相関効果で f レベルをフェルミ面付近まで持ち上げる。この式からわかるように、2つのバンドの混成項が $-2iV^* \sin k$ という特殊な形をしている。これがトポロジカルな性質を生み出す源である。ちなみに通常の近藤絶縁体では、この混成項が定数になっている。

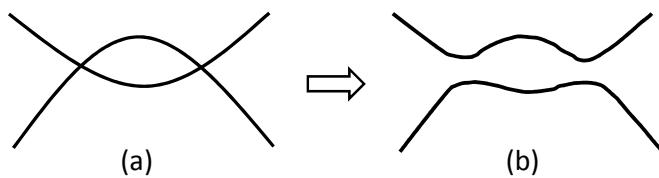


図 5.2: バンド構造：(a) 近藤混成なし、(b) 近藤混成あり。中央の波数 ($k = \pi$) 付近でバンド反転が生じている。

図 5.2 にバンド構造の模式図を示した。バンド反転した伝導電子と f 電子が混成することで、トポロジカル絶縁体となる。注意してほしいのは、このバンドギャップは相互作用で繰り込まれたものであり近藤温度程度の大きさをもつことである。

3次元の候補物質 SmB₆

SmB₆ は CsCl タイプの立方晶で、Sm²⁺[(4f)⁶] と Sm³⁺ [(4f)⁵(5d)¹] の状態が混成している。価数の平均は 2.7 程度と考えられている。Sm の 4f 電子が狭いバンドを形成し、Sm の 5d が広いバンドを形成している。これらの間の混成によってギャップが生じ絶縁体（半導体）となる。相関が強いので近藤絶縁体（半導体）と呼ばれている。この物質は高温から 50K くらいまでは絶縁体的な抵抗を示すが、5K くらいで抵抗が飽和し金属的になる。この低温での金属的な振る舞いの起源に関して、長い間議論がなされてきた。最近になって、この金属性がトポロジカルな表面状態に起因するものとの理論提案がなされ、これをサポートする実験が多く出された。伝導度測定、量子振動、光電子分光、STM などトポロジカル近藤絶縁体をサポートする多くの実験が出された。これについては講義でスライドを用いて説明する予定である。

この中で、強相関効果が特徴的に現れるのは、電子の有効質量の温度変化である：SmB₆ の表面状態は、高温では軽い電子のように振る舞うが低温では重くなる、という二重性が実験的に観測された。これに関してはトポロジカルな性質だけから単純に解釈できない。最近、強相関効果を取り入れることで、この有効質量の温度変化を説明する理論が提出されている [30]。

トポロジカルな性質をサポートする実験が多くあるものの、まだすべての実験が整合しているわけではない。最終的な結論に至るまでには、今しばらく時間がかかりそうである。また最近、SmB₆ に加えて YbB₁₂ がトポロジカル近藤絶縁体の候補として精力的に研究され始められている [31]。これには、我が国の研究者が大きな寄与をしており、研究の動向が見逃せない面白いテーマとなっている。

5.2 トポロジカルモット絶縁体

トポロジカルモット絶縁体は、3次元のイリジウム化合物に関して Pesin-Balents により提案された [32]。その後、2次元系の研究が行われたが [33, 34, 35]、実際にこの相が実現しうるかどうかは明確ではなかった [36]。その後、1次元でトポロジカルモット絶縁体が生じることが示され [37]、2次元でも発現することが分かっている [38, 39, 40]。

トポロジカルモット絶縁体では、相互作用に出現によってバルクの性質は基本的に変化しないが、エッジ状態のみが変更を受ける。すなわち、エッジ状態には電荷励起にギャップが開く一方で、 спин励起はギャップレスのままである。エッジ状態のみがモット絶縁体の性質を示す。Pesin-Balents は、3次元のパイロクロア構造を持つハバードモデルについて平均場的な扱いでこれを議論したが、その正当性については議論の余地が残っている。

以下では、まず1次元系で正確な取り扱いを行い、その後2次元系のトポロジカルモット絶縁体について議論する。特に後者では、トポロジーと相関の絡み合いによってエッジ状態に奇妙な現象が現れることを見る。

1次元トポロジカルモット絶縁体

1次元のトポロジカル相としてよく知られているものに、ポリアセチレンのモデルとして提案された Su-Schrieffer-Heeger モデルがある(図 5.3)。

$$\begin{aligned} H &= H_{SSH} + U \sum_{i\alpha} n_{i\alpha\uparrow} n_{i\alpha\downarrow} + J \sum_i \mathbf{S}_{ia} \cdot \mathbf{S}_{ib} \\ H_{SSH} &= \sum_{i\sigma} (-t c_{i+1a\sigma}^\dagger c_{ib\sigma} + V c_{ia\sigma}^\dagger c_{ib\sigma} + h.c.) \end{aligned} \quad (5.7)$$

ここで $n_{i\alpha\sigma} = c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma}$ である。 $c_{i\alpha\sigma}^\dagger (c_{i\alpha\sigma})$ は、格子点 i 、軌道 $\alpha = a, b$ 、スピノン $\sigma = \uparrow, \downarrow$ の状態にある電子の生成(消滅)演算子である。相互作用として同一格子点でのハバード相互作用 U に加えて、軌道間の強磁性交換相互作用 J も導入している。相互作用が無いとき ($U = J = 0$) の時、 $-t < V < t$ の領域でトポロジカルであることが知られている。このトポロジカル相を特徴付けるのは巻き付き数 Z である(BDI クラスと呼ばれる)。

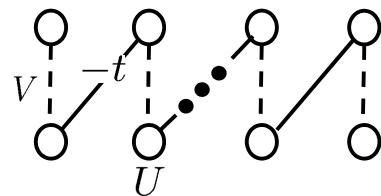


図 5.3: Su-Schrieffer-Heeger モデル

上記のモデルにおける電子相関効果を解析するため、密度行列繰り込み群を呼ばれる方法を用いて、種々の物理量が計算されている [37]。図 5.4 に、例としてバルクとエッジにおける電荷とスピノンのギャップの値をハバード相互作用 U の関数として示した。図には示していないが、このパラメタ領域で巻き付き数は 1 となり、系は常にトポロジカルな状態にある。相互作用 U の増加に伴ってバルクの電荷励起ギャップ(スピノンギャップ)は増大する(減少する)。これらは電子相関効果に典型的な振る舞いである。一方でエッジ状態では、電荷ギャップは開くが、スピノン励起はギャップレスのままである(モット状態)。いわゆるエッジモット状態を伴うトポロジカルモット絶縁体が発現していることが分かる。

これを自由電子系のトポロジカル絶縁体と比較してみよう。自由電子の場合、エッジでは「一粒子スペクトル」がギャップレスである。このことは、電荷励起もスピノン励起も

ギャップレスであることを意味している。相互作用 U の効果で、このうち電荷励起のみにギャップが開いたことになる。

ここでは詳細を省くが、 U と J を変化したときには、通常のトポロジカル相転移とは少し異なる相転移が起こる [37]。一般に、バルクのトポロジカルな構造が変化する際（例えば巻き付き数が 1 から 0 に変化）にはバルクギャップが閉じる。一方で、今考えている強相関系ではトポロジカル相転移点でバルクの一粒子励起のギャップは閉じないがスピンギャップのみが閉じる。このようなトポロジカルモット転移は自由電子のトポロジカル系では起こらないものである。

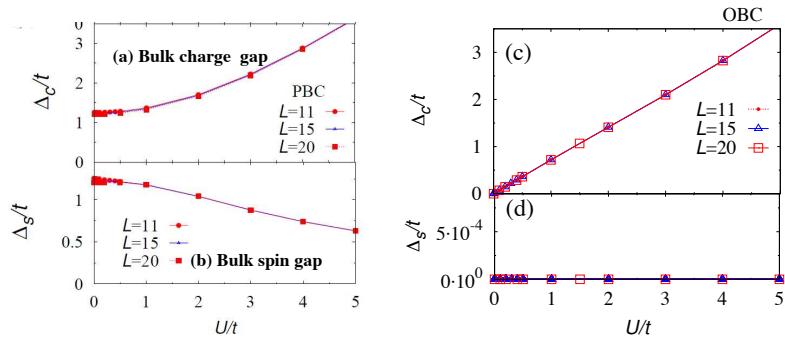


図 5.4: 左図：バルクでの電荷励起ギャップ（上）とスピン励起ギャップ（下）、右図：エッジ状態における電荷励起ギャップ（上）とスピン励起ギャップ（下）。 $(J, V) = (0, -0.4)$ の結果。[文献 [37] より転載]

2次元トポロジカル絶縁体

上記のトポロジカルモット絶縁体の形成は、1 次元の特殊性のため生じたと思われるかもしれない。そこで、2 次元のトポロジカル絶縁体が実現可能かどうか調べてみる。単層の2次元系ではトポロジカルモット絶縁体の出現を示すことは容易でない。

ここでは、2 層構造の強相関系を用いることで（図 5.5）、2 次元でもトポロジカルモット絶縁体を実現しうることを示す。考えるモデルは、Kane-Mele モデルを 2 枚重ねて、ハバード相互作用 U と層間の反強磁性交換相互作用 J を導入したものである。

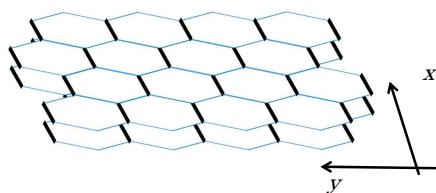


図 5.5: 2 層の Kane-Mele モデル

図 5.6 に動的平均場近似で計算したエッジでの局所状態密度を示した。 U が小さいときはハバードギャップに加えて、エッジ状態に対する小さなピークがゼロエネルギー付近に見えている。 U を大きくしていくと、このピークは消えてエッジ状態が絶縁体になる。これはまさに強相関の効果である。この時、エッジにおけるスピン励起はギャップレスであることが示される。したがって、2 次元においてもエッジモット状態を伴うトポロジカルモット絶縁体が実現する。

この 2 次元トポロジカルモット絶縁体では有限温度の振る舞いに興味深い現象が現れる。すなわち、エッジ状態は低温でモット絶縁相にあるが、有限温度になるとここに電子的なギャップレスモードが誘起される。モット絶縁体ではボーズ統計に従うギャップレス

のスピン励起が存在するので、これが温度の上昇と共にフェルミ統計に従う電子的な励起に移り変わる。このように温度を変えることによりボゾンとフェルミオンの間にクロスオーバー的な振る舞い（少々荒っぽい言い方であるが）が見られる。このような現象はトポロジーと強相関の絡み合いによって初めて現れるものである[38]。

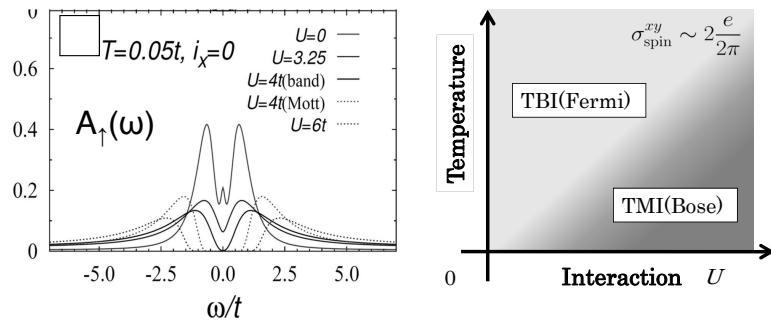


図 5.6: エッジでの状態密度と有限温度の相図

上で議論した2次元トポロジカルモット絶縁体の実験舞台として、磁場をかけた2層グラフェン[39]、SmB₆の薄膜[40]などが候補として挙げられている。

残念ながら、3次元のトポロジカルモット絶縁体に関しては、依然として理論的にも実現し得るかどうか確固とした結論は出されていない。

5.3 分類のリダクション

以上の例では、相互作用によってトポロジカルな分類は変化しない。しかし、一般には相互作用の出現によって、自由フェルミオンに対して得られた分類は使えなくなる可能性がある。この問題は「トポロジカル分類のリダクション」と呼ばれ、Fidkowsky-Kitaevによって、まず1次元系に関して調べられ[41]、その後、2次元、3次元系にも理論が拡張されている[42, 43, 44, 45, 46]。

分類のリダクションを調べるにはいくつかの方法があるが、エッジ状態の性質を調べる方法が分かり易い。この方法は「対称性に守られたトポロジカル相」に対しては有効である（ただし、トポロジカル秩序を持つような系には適用できない）。

Fidkowsky-Kitaevは1次元の超伝導鎖（キタエフ鎖）を考えた[41]。これを8本用意して、その間に相互作用をいれると、エッジ状態として現れるマヨラナ状態がギャップを持ちうることを示した。彼らの用いたモデルはBDIクラスと呼ばれるもので、時間反転対称性、粒子・ホール対称性、カイラル対称性をもつ。これは整数 Z で特徴付けられる。したがって、相互作用の出現によって1次元のBDIクラスでは、 Z から Z_8 への分類のリダクションが生じる。

これまで分類のリダクションの理論はかなり整備されてきたが、具体的にどのような物質でこれを観測しうるのか、という問題は残されたままである。この問題に対して、最近、重い電子系の超格子が候補物質として提案された[47]。講義の時間が許せば、このあたりの話題にもふれたいと思う。

第6章 おわりに

強相関の研究は長年にわたって行われており、いつの時代にも新鮮で面白いテーマを提供してきた。凝縮系物理に無くてはならない研究のプラットフォームである。特に我が国は近藤効果を始めとし、この分野に多大な貢献をしてきた。ここでは強相関のエッセンスを含む近藤効果とモット絶縁体に関して概説した。

一方、トポロジカル量子現象の研究はトポロジカル絶縁体の発見を契機として急速に進展し、今まさに隆盛を極めている感がある。特に半導体などを中心とした「弱相関」のトポロジカル絶縁体の研究に関しては、その本質はほぼ明らかにされてきた。この研究の延長線上のテーマとして、結晶の対称性を利用したトポロジカル「結晶絶縁体」・「結晶超伝導体」に関する研究が進められている。さらに、最近のホットな話題として、トポロジカル半金属がある。ワイル半金属やディラック半金属などのポイントでノードを持つものに加え、ラインでノードをもつ半金属の研究も精力的に行われている。通常、ギャップの閉じた状態ではトポロジカルな性質が議論できないように思えるが、ディラックコーンやワイルコーンに関するトポロジカル数が、これを特徴づける。実験的にも多くの物質が発見されている。

ここで紹介した強相関トポロジカル相の研究は、これまでの半導体の研究と強相関系の研究の橋渡しとなる重要なものである。例えば、トポロジカルモット絶縁体のところで述べたように、1次元の弱相関トポロジカル絶縁体は、強相関領域で量子スピン系のハルディン相のスピン液体に連続的につながる。強相関トポロジカル相の典型例として、量子スピン系の研究も今後さらに進展していくものと思われる。

本講義では触れることができなかつた強相関系のトピックとして「トポロジカル秩序」に関する研究がある。通常のトポロジカル絶縁体・超伝導体は長距離のトポロジカル秩序を持たない。いわゆる短距離相の「対称性に守られたトポロジカル相」である。これに対して、トポロジカル秩序相の典型例は分数量子ホール状態であり、分数励起の存在と基底状態の縮退で特徴づけられる。トポロジカル秩序に関しては、量子スピン系も含めた強相関トポロジカル相に関する重要なテーマとして研究が進められている。

長い研究の歴史をもつ強相関系とトポロジーの概念が結びつくことで、強相関トポロジカル相の研究はたいへん魅力的な研究舞台を提供している。新しい研究テーマであるので、特に若い人たちが活躍できる舞台となることが期待される。

謝辞：強相関トポロジカル相の研究を中心的に進めている吉田恒也（京都大学）氏には多くのことを教えて頂きました。また、藤本聰（大阪大学）、ロバート・ピータース（京都大学）、柳瀬陽一（京都大学）、手塚真樹（京都大学）、中川大也（理研）、松田冬樹（京都大学）、高三和晃（京都大学）、大同暁人（京都大学）の各氏にもお世話をになりました。この場をかりて感謝します。

関連図書

- [1] J. Kondo, Prog. Theor. Phys. **32**, 37 (1964)
- [2] 近藤淳, 「金属電子論」(裳華房, 1983年)
- [3] 山田耕作, 「電子相関」(岩波現代の物理学 **16**, 1993)
- [4] 芳田奎, 「磁性」(岩波書店, 1991)
- [5] 斯波弘行, 「電子相関の物理」(岩波書店, 2001)
- [6] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975)
- [7] N. Andrei, K. Furuya and J. H. Lowenstein, Rev. Mod. Phys. **55**, (1983) 331; 興地斐男、川上則雄、日本物理学会誌 **38**, 716 (1983)
- [8] I. Affleck and A.W.W. Ludwig, Phys. Rev. **B48**, 7297 (1993)
- [9] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961)
- [10] D. Goldhaber-Gordon *et al.*, Nature (London) **391**, 156 (1998); S. M. Cronenwett *et al.*: Science **281**, 540 (1998)
- [11] 永長直人, 「電子相関における場の理論的方法」(岩波書店, 1998年)
- [12] W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989)
- [13] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996)
- [14] T. Pruschke, M. Jarrell and J. K. Freericks, Adv. Phys. **44**, 187 (1995)
- [15] G. Kotliar and D. Vollhardt, Physics Today **53** (2004)
- [16] 安藤陽一「トポロジカル絶縁体入門」(講談社サイエンティフィック, 2014)
- [17] 斎藤英治・村上修一「スピン流とトポロジカル絶縁体」(共立出版, 2014)
- [18] 野村健太郎「トポロジカル絶縁体・超伝導体」(丸善, 2016))
- [19] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982)
- [20] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988)
- [21] C.L.Kane and E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005)
- [22] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, Science **314** 1757(2006)
- [23] M. Koenig, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, Science **318**, 766 (5851)
- [24] A. Menth, E. Buehler, and T. H. Geballe, Phys. Rev. Lett. **22**, 295 (1969); J. W. Allen, B. Batlogg and P. Wachter, Phys. Rev. **B20**, 4807 (1979)

- [25] 最近のレビューとして、J. Allen, *Philosophical Magazine*, **96**, 3227(2016)
- [26] M. Dzero, K. Sun, V. Galitski, and P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 106408 (2010), M. Dzero, K. Sun, P. Coleman, and V. Galitski, *Phys. Rev. B* **85**, 045130 (2012)
- [27] M.-T. Tran, T. Takimoto, and K.-S. Kim, *Phys. Rev. B* **85**, 125128 (2012),
- [28] H. Weng, J. Zhao, Z. Wang, Z. Fang, and X. Dai, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 016403 (2014)
- [29] V. Alexandrov and P. Coleman, *Phys. Rev. B* **90**, 115147 (2014)
- [30] R. Peters, T. Yoshida, H. Sakakibara, and N. Kawakami, *Phys. Rev. B* **93**, 235159 (2016)
- [31] K. Hagiwara et al., *Nature Communications* **7**, 12690 (2016)
- [32] D. A. Pesin and L. Balents, *Nature Physics* **6**, 376 - 381 (2010)
- [33] Y. Yamaji and M. Imada, *Phys. Rev. B* **83**, 205122 (2011)
- [34] T. Yoshida, S. Fujimoto, and N. Kawakami, *Phys. Rev. B* **85**, 125113 (2012)
- [35] Y. Tada, R. Peters, M. Oshikawa, A. Koga, N. Kawakami, and S. Fujimoto, *Phys. Rev. B* **85**, 165138 (2012)
- [36] See for a review, M. Hohenadler, F. F. Assaad, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 143201 (2013)
- [37] Tsuneya Yoshida, Robert Peters, Satoshi Fujimoto, and Norio Kawakami, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 196404 (2014)
- [38] T. Yoshida and N. Kawakami, *Phys. Rev. B* **94**, 085149 (2016)
- [39] Zhen Bi, Ruixing Zhang, Yi-Zhuang You, Andrea Young, Leon Balents, Chao-Xing Liu, and Cenke Xu, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 126801(2017)
- [40] R.-X. Zhang, C.Xu, and C.-X. Liu, *Phys. Rev. B* **94**, 235128 (2016)
- [41] Lukasz Fidkowski and Alexei Kitaev, *Phys. Rev. B* **81**, 134509 (2010)
- [42] H. Yao and S. Ryu, *Phys. Rev. B* **88**, 064507 (2013)
- [43] Y.-Z. You and C. Xu, *Phys. Rev. B* **90**, 245120 (2014)
- [44] C Wang, AC Potter, T Senthil, *Science* **343**, 629(2014)
- [45] H. Isobe and L. Fu, arXiv:1502.06962 (2015)
- [46] T. Morimoto, A. Furusaki, and C. Mudry, *Phys. Rev. B* **92**, 125104 (2015)
- [47] T. Yoshida, A. Daido, Y. Yanase, and N. Kawakami, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 147001 (2017)