

物性研を離れて

高田 康民

本年3月末に物性研を定年退職して2ヶ月半が経ちました。想像した以上に簡単に毎日を自宅で過ごす新たな生活リズムに慣れました。研究活動や各種原稿の執筆に楽しく(ある意味、現役時代よりも集中して)励んでいます。物性研着任は1985年7月でしたので、ほぼ31年にわたって物性研にお世話になりましたが、この長い在任期間は心ならずのものとも言えます。その理由は二つあります。一つは、物性研の(特に、理論の)所員は人事の流動性確保のため、一定の在任期間を経れば他大学に転任すべきであるとの物性研設立期からの暗黙の了解に沿っていないからです。もう一つは、(時流に乗ったテーマを追求しない)私の研究スタイルが高度の情報処理能力が要求される物性研理論所員の理想像に合致しないと自覚しているからです。このような理由から、常々、よい機会があれば所外の適当なポジションに移ることを考えて種々の可能性を探りましたが、いろいろな意味での私の能力不足とうまくタイミングが合わなかったことなどから、ついつい長居をしてしまいました。この点のご批判には弁解の余地はありません。

今、「私の研究スタイル」と申しましたが、これを明確にしたもの一つとして1984年の物性研理論所員公募に応じて提出した私の研究計画書があります。そこでの記述では、米国での約4年にわたるポスドク経験を通して得た自分の能力に対する自己評価から、実験に導かれてそれに沿って構成する理論研究ではなく、逆に、実験家に対して新しい指針を与える理論物理の追求、とりわけ、基本的に難しく大きな進展が容易ではない(多くは強結合強関連多体問題に起因する)物理の問題を考え、それにふさわしい数学的手法を新たに編み出し、それを駆使して得られる結論を実験家に提示するスタイルを進みたいとしている。実際、このような困難な問題に真摯に立ち向かうことは学部学生の教育に煩わされずに研究に専念できるパーマネント職に就くものの責任であり、かつ、義務であるとして、着任以降31年間、誠実にこの目的の遂行に励んできた。ただ、研究活動の進展状況として、残念ながら自分の想定した目標から少し距離があると認めざるを得ないので、気力・体力・知力が続く限りはその目標点を目指し続ける所存です。

さて、まだ最終目標に到達していないとはいえ、それを目指す途上でこれまでに得られている具体的な研究成果のいくつかに触れておこう。なお、私の研究業績について、もっと包括的で参考文献も明示している解説記事は「固体物理」(出版社:アグネ技術センター)に近々掲載されることになっている。

まず、在任中に最も意を注いだ**多体問題の汎用解法の開発**に関する研究から報告しよう。多体問題をグリーン関数法で数値的に解く場合、Baym-Kadanoff (BK) 法に基づくことが多い。BK法は近似解法であるが、各種の保存則を満たしながら自己エネルギー Σ やバーテックス関数 Γ 、そして、各種相関関数を自己無撞着に計算する一般的で基本的な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の後には厳密に正確な Σ が得られることを見いだした。これはBK法のアルゴリズムを越えて、正確な Σ を求めるための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 $\mathcal{S}[\Sigma]$ の存在証明であるが、この $\mathcal{S}[\Sigma]$ 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**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。

そこで、このGISC法で仮定された Γ の汎関数形を改善するためにいろいろな試行錯誤を行った。その結果、2001年には、 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 の導入が鍵であることを見だし、この R に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組み込むと、 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が導かれた。そして、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んで Σ を決定するアルゴリズムを**GW Γ 法**と名付けた。このGW Γ 法を通常金属密度領域の(いわゆる電子密度径数 r_s が1から5の範囲にある)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共に、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、フェルミ波数が逆格子ベクトルに比べて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、 $r_s \gg 1$ 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とになる。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 の増大と共に増大し、ついには $r_s = 5.25$ で発散し、更に 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(誘電異常)になることである。2004年、GW Γ 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。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。

しかしながら、2001年版のGW Γ 法では誘電異常領域で Δ の収束解が得られないことが判明した。そこで2009年、この困難を回避して $r_s > 5.25$ でも Δ の自己無撞着収束解を与えるように改良したGW Γ 法を発表した。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ワンショット GW 近似(いわゆる 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近似よりも実験によく合うとの事実をよく説明した。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次元ラッティンジャー流体に適用すると、これはDzyaloshinskii-Larkin理論に正確に帰着される。2014年、更に解析を進めて、1次元金属でスピノンやホロン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、低励起のスピンの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。3次元電子ガス系への応用では、2015年末までに r_s が10程度まで Δ が得られるようになり、更に先月、 r_s が20を超える場合まで運動量分布関数 $n(p)$ や動的構造因子 $S(q, \omega)$ の高精度解を得た。その結果、 $r_s \sim 22$ で $n(p)$ に相転移を暗示する異常を見いだすと共に、その密度近傍でフェルミ面直上の有効質量がゼロに近づくこと(軽いフェルミオン問題)や $S(q, \omega)$ に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(図1(b))を発見した。このように、低密度電子ガス系は今後の大きな発展が期待される興味深い未発見の新概念・新現象の宝庫といえよう。

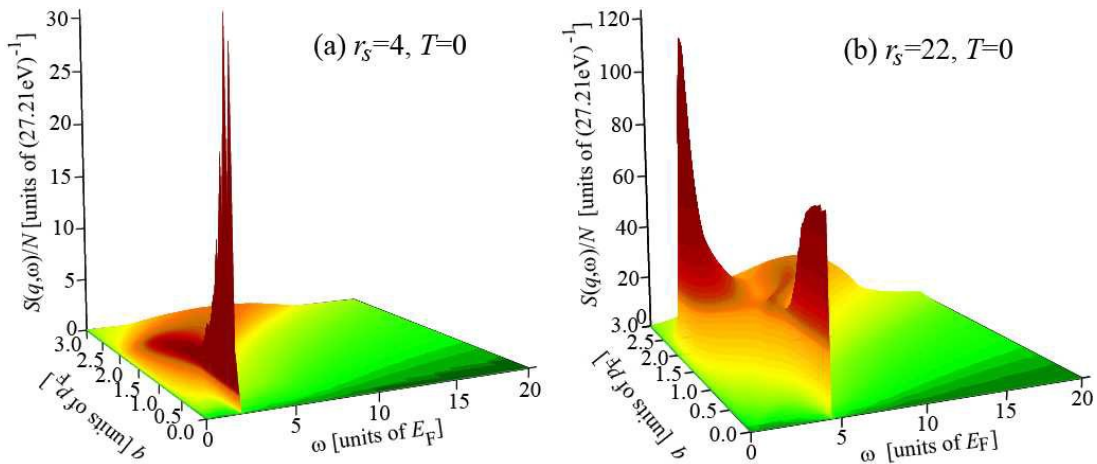


図1. 電子ガス系での動的構造因子 $S(q, \omega)$: (a)は通常の金属電子密度におけるもので、プラズモンピークが圧倒的であり、電子正孔対励起における励起子効果はあるもののはっきりとしたピーク構造は与えない。(b)はそれよりも約170分の1の電子密度の系での $S(q, \omega)$ で、プラズモンピークを凌駕する励起子集団モードの巨大ピークが見られる。

第一原理からの超伝導転移温度 T_c の決定理論の構築とそれによる超伝導機構の提案・同定は私のもう一つの主要研究課題である。まず、大学院生から東大助手であった 1978-1981 年にかけて擬クーロンポテンシャル μ^* の決定も含めて G_0W_0 近似でギャップ方程式を数値的に解き、*n* 型 SrTiO_3 縮退半導体やアルカリ原子挿入グラファイト層間化合物(GIC)などの低電子密度系での超伝導は極性結合したフォノン機構で捉えられることを明らかにし、同時に、新規に電子ガス系

での**プラズモン機構**を提案した。この G_0W_0 近似を超える試みとして、1988 年には多体摂動理論と多体変分法を融合した**有効ポテンシャル展開(EPX)法**を BCS 状態に適用して、関連のある BCS 状態でのクーロン斥力起源の超伝導を論じた。1993 年にはバーテックス補正を GISC 法や局所場補正で取り扱い、アルカリドープの C_{60} での超伝導を論じた。また、低密度電子ガスの超伝導は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パー対形成**によるとの見方を示した。特に、この場合、 T_c とフェルミエネルギー E_F の比は 0.04 であり、その比は植村プロットにおける低密度極限での値に一致した。これはその極限ではあらゆる金属は電子ガス系に還元されることと整合的である。2005 年、Hardy Gross らは密度汎関数超伝導理論(SCDFT)に立脚して μ^* も含めて T_c を第一原理的に決定する理論を展開した。またこの年、実験でアルカリ土類原子挿入 GIC の T_c はアルカリ原子挿入 GIC のそのの 100 倍になると観測された。2009 年、私は G_0W_0 近似で導かれるギャップ方程式が SCDFT のそれと同等であると気づき、両者を詳細に比較して G_0W_0 近似の真の意味、とりわけ相関効果の入り方を明確に理解した。また、この G_0W_0 近似をアルカリ土類原子挿入 GIC に適用して実験の T_c を定量的に再現し、**GIC 超伝導体全般に適用される標準超伝導機構**を提唱した。

最後になったが、私の 3 人の恩師、植村泰忠先生(1920-2005)、Al Overhauser 先生(1925-2011)、Walter Kohn 先生(1923-2016)に改めてお礼を申し上げたい。Kohn 先生は 1989 年、1990 年、そして、1998 年のノーベル化学賞受賞後の 2002 年、2006 年の合計 4 回、物性研を訪問して下さい(図 2)ほか、私が GW Γ 法を提唱した翌年の 2002 年には客員教授としてサンタバーバラに招聘して下さい。同年、Overhauser 先生も Purdue 大に招待して下さい。偉大な先輩であり、共同研究者である安原洋先生(1940-2014)と安藤恒也先生(東工大)には有益なアドバイスを沢山受けました。助手・助教として研究室の研究・運営に多大の貢献をしてくれた北孝文さん(北大)、堀田貴嗣さん(首都大学東京)、前橋英明さん(東大)には感謝申し上げます。それから、物性研では外国人客員所員制度や外国人ポスドク、滞在型国際ワークショップなどを通して著名な教授を含めて外国人研究者の招聘が比較的簡単に行えるメリットがあり、私も大いに利用させていただいた。これらの制度を生かして、長年の友人の Andreas Savin(パリ第 6 大)や Hardy Gross(マックスプランク研究所 Halle)、Giovanni Vignale(ミズーリ大)らと親交を深められたほか、Vladimir Nazarov(台湾中央研究院)や Tian Cui(吉林大)、Hang Zheng(上海交通大)、Ashok Chatterjee(ハイデラバード大)らと重要な共同研究が行うことが出来た。国内的にも共同利用・共同研究制度や特任研究員制度を利用して、山上浩志さん(京都産業大)や小泉裕康さん(筑波大)、前園涼さん(北陸先端大)、吉澤香奈子さん(RIST)、後藤尋規さん(セイラシステム)らと大変有益な共同研究が出来た。共同研究には至らずにお名前を挙げていないが、有益な議論をしていただいた 10 名を超える多くの国内外の研究者の訪問や長期滞在もあった。もちろん、これらの研究者にも大変感謝している。そして、このような素晴らしい研究環境を提供して下さい物性研とそれを支える同僚の教員、技術職員、事務職員、学生、秘書の皆さんに心からお礼を申し上げます。特に、私の研究室に所属した 15 名の大学院院生との研究だけに止まらない色々な交流を今更ながら懐かしく思い出すと同時に、彼らの今後一層の成功を祈念している。末筆ながら、16 年以上支えてくれた光富恵美子さんを含む過去 9 名の秘書の方に改めて感謝の言葉を贈りたいと思います。どうもありがとうございました。

(2016 年 6 月 17 日記)

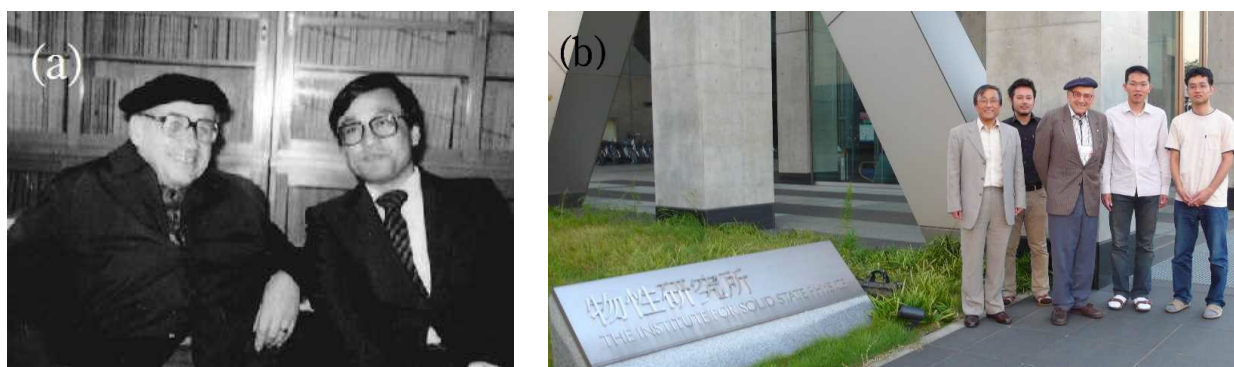


図 2. 本年 4 月 19 日に亡くなられた 1998 年度ノーベル化学賞受賞者の Walter Kohn 教授が、(a)1990 年に六本木の、(b)2006 年に柏の私の研究室を訪問されたときに撮影したもの。