

新しい秩序相としての量子液体相

東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻

初貝安弘

1 はじめに

この度、藤原先生が東京大学の定年をお迎えになるに当たって、大学院入学以来の長年のご指導ご鞭撻に感謝しつつ、固体中の電子に关します私の最近の研究の一端をご紹介させていただきたいと思ひます。ただし、対象は専門家ではなく、学部の学生程度を念頭に教育的意義に主点をおいたものとしたいと思ひます。万一誤解を招く表現等がありましたら、ご指摘の上お許しください。

2 幾何学的位相

まず、量子力学ならび量子力学に従う物理系においては複素数が本質的であり複素数は絶対値と位相に分けられることに注意します。そこで量子力学での位相の効果のどうしても取り除けない「本質的」部分が「幾何学的位相」であると言ひます。技術的には量子系における記述はある空間での演算子並びにある基底によるその行列要素を用いてなされます。そこでは種々の基底変換の自由度があり、それに対応して複素量としての行

列要素は変更を受けることに注意しましょう。この基底変換の自由度は完全に自由ですが、実際の量子系における物理現象はこの任意の変換の自由度に影響を受けることは決してなく、不変な形で表現されなければなりません。数学的にはここでの(基底)変換に対応してある種のゲージ変換が引き起こされることになるのですが、物理量はこのゲージ変換に対して不変であるというわけです。簡単な多くの場合、基底変換は行列要素の複素数としての位相の変化をもたらします。古い量子力学の教科書等ではこの基底変換に伴って起こる位相変化は意味がないとの記述すらあるのですが、波動関数の位相なら何でもゲージ変換で完全に消去できるわけではなく、一見この勝手に変化する位相のなかにも決して無視できない物理的意義を持つものがあり、それらを称して幾何学的位相と呼ぶのです。

物性論における重要な概念である「量子力学的揺らぎ」、「量子干渉効果」その他、いわゆる「量子効果」は最終的にはこの幾何学的位相として理解されることが多いのです。

この幾何学的位相が重要な寄与をする物理現象の典型例としては量子ホール効果、ベリー位相、アハロノフ・ボーム効果、分数統計粒子系などがあげられます。

3 対称性の破れと秩序変数

世の中には極めてたくさんのもつまり物質があり、それらはいろいろな形態をとっています。たとえば、水、炭酸ガス、シリコン、鉄などの物質が氷、水蒸気、ドライアイス、結晶、非結晶、磁石、等の形態をとっているわけです。これら物質の形態の違いをきちんと理解することが物性物

理の基本であり、物質を用いた物質科学もこの作業なくしては近年のめざましい発展はあり得ないものでした。これら物質の形態は物理的には「相」として表現されます。水蒸気と氷は水という同じ物質ではあるがその「相」が異なるというわけです。物理学は現代科学ですから「相」に対する（原理的には必ずしも定量的であることは必要ではありませんが）科学的な記述法を必要とします。その科学的記述の作業対象が「秩序変数」と呼ばれるものです。「秩序変数」を観察、考察することにより物質の相を判定するわけです。水の密度、鉄の磁石としての強度（磁化）がこの秩序変数として使われています。たとえば、温度を変化させることで水の密度の変化を観察することが秩序変数の温度依存性を議論することとなります。ここである場所、ある時間での水の密度、鉄の磁化を議論することを局所的な秩序変数を考えるといいます。多くの場合物質の「相」を特定するためには、この局所的な秩序変数を考えることが重要です。（双対変換等、非局所的な理論的読み直しがこの局所的描像を使うために必要なことも時々あります。）

物理学、物性科学においては物質の「相」を特定することは物理系の対称性と密接な関係があります。現代の物理学においては対称性を用いて物質の相を区別するといった方が適切です。気体である水蒸気では水分子は全くランダムに運動していると考えられますので、ある水の分子の近くを見たとき隣の水分子は特定のどこかに存在しやすいことはありません。つまりすべての方向は同等、一様です。一方、固体の水を考えたときは、隣の水分子は全く無関係な位置にあるのではなくある秩序を持ってある方向に存在することは想像できると思います。つまり固体の水の相においては方向の一様性が失われていると考えられます。空間をある水分子の周り

に回転させるという操作を考えたとき水蒸気はその操作で不変、つまり対称ですが、氷はその操作で不変でなく対称でないわけです。水蒸気を球にたとえれば、氷は角がある箱だということになります。同じ水という物質がその温度が変化することでその対称性を変えるわけです。水分子をたくさん集めたとき特定の方向が特別な意味を持つことはなく、どちらの方向も当然同等なはずです。その「同等性」が温度を変えるだけで、水分子のお互いの相互作用により外力等を必要とせず、自発的に失われ特定の方向に隣の分子が居やすいという特別な意味が生まれるのです。これが「対称性の自発的破れ」と呼ばれる現代物理学におけるもっとも基本的な概念の一つです。

より定量的な科学的議論においては、今の議論において、ある特定の水分子の周りでは次の分子がどのあたりに居るのかを考えたことが極めて重要です。つまり局所的な密度としての秩序変数を用いて異なる場所における秩序変数同士の関係、つまり相関により物質系の「相」を特定したわけです。ここに秩序変数として局所的なものを考えることの重要性が典型的に表れています。現在の物理学においては、極めて多くの場合にこのような局所的秩序変数による相転移理論が広く用いられています。物理的にはこれらの「相」が変化する際の「相転移」が重要かつ興味深い問題となります。「相転移」とは「相」が違うほど全く異なるもの同士が入れ替わるわけで、物質の応用、その機能性を考えたときにも、非常に大きな潜在的可能性を含む現象が「相転移」であるわけです。この相転移を対称性の破れの観点からみると、転移点の近傍では対称性の破れを規定する局所的な規則が必ずしも常に満足されないという形で現れてきます。水蒸気が液化するぎりぎりの温度ではある水分子の周りに他の水分子が完全にランダ

ムにあるわけではないが、水や、氷の場合ほどはっきりした方向の異方性を持つわけではない、といったこととなるわけです。この状況は相転移の転移点（臨界点）近傍では秩序変数並びにその相関における局所的揺らぎが増大すると表現できます。ここでも秩序変数の局所性の重要さは見て取れると思います。

もちろん非局所的な概念も現代の物理学においては登場しますが、どうやら認識論的にいっても非局所的な概念はわかりにくいらしく、その多くの場合、非局所的な概念は、ある種の双対変換により局所的なものへ置き換えて理解されることが多いのです。特に場所と時間ごとに定まる「場の量」をその作業変数とする局所場の理論の臨界現象の理論における大成功をその背景とし、局所的秩序変数を用いた「相」の概念および「相転移理論」は現代物理学における概念的基礎の大きな部分となっています。

それではここで説明した局所変数による「相」の分類は十分なのでしょうか？

実は近年の研究において量子系特に量子多体系においては新しい概念がどうしても必要であることがあきらかになりつつあります。これが量子液体相における新しい秩序概念です。これについては別な節でまたご説明しましょう。

4 量子液体

気体という「相」においてはその構成粒子のあいだに特定の位置の相関がなく、固体は粒子同士が規則的に並ぶといった強い位置の相関によって特徴付けられます。液体はその中間程度の位置の相関を持った相であると

いえます。このように古典的な物理としても液体は少々微妙な位置にあることにまず注意しましょう。 それでは現代科学がその基礎とする量子力学的な世界観にたって現在の物性科学を考えてみましょう。通常の生活においては量子力学によらず、ニュートン以来の古典力学が十分正確であることに疑いはありません。これは十分高温（室温は物性論的には通常十分高温です）であれば量子論は古典論に帰着することによります。水蒸気が氷になるように、量子的な系でも一般的な物質は高温では秩序を持たない対称性の高い相をとり、温度を下げていくに従って自発的に対称性が破れた低温の秩序相へ相転移するのが基本的な振る舞いです。よく知られた例としては（量子的な）磁性体が高温での非磁性状態から低温の磁性状態へ転移する磁気転移があります。また量子系固有の現象として特に有名な超伝導転移もその相転移としての性質は基本的にはここで議論した局所的な秩序変数を用いた通常対称性の破れとしてされます。ただし超伝導の場合の対称性の破れはゲージ対称性の破れと呼ばれる極めて特徴的なものではありますが、ここではあまり強調しません。通常量子系は高温で対称性の高い相をとり低温で対称性が低い相へ転移するのが一般的なシナリオで、その転移は自発対称性の破れ概念により局所的秩序変数を用いた秩序形成の物理として一般的に理解されます。

ところが最近その秩序形成がきわめて起こりにくい系がいろいろな意味で興味を集めています。量子系においては古典的な系における熱揺らぎだけでなく量子系固有の量子揺らぎが存在します。標語的にいえばハイゼンベルグの不確定性に対応する物理量の不確定性起因の揺らぎが存在すると考えればよいでしょう。特に1次元、2次元系といった低次元系においてはその低次元性と量子性があいまって通常秩序形成が大きく妨げられ

ることがしばしば起こります。その典型例が分数量子ホール系におけるラフリン状態とよばれる多粒子状態です。電子は電荷を持っていますのでその間にはクーロン斥力が働きます。よって電子集団を考えたときの振る舞いは電子の運動エネルギーとクーロン斥力の関係により定まることとなります。簡単な考察から電子密度が高いと運動エネルギーがクーロン斥力より主な寄与をすることがわかり、実際に高密度の極限では電子系は電子ガスとよばれる気体の相をとります。また電子密度が小さいときは運動エネルギーよりもクーロン斥力が主な寄与をあたえ、電子系はウィグナー結晶とよばれる固体の相をとることが知られています。これらの特徴的な極限の密度以外の中間的な電子密度では複雑な相が現れる可能性があることは容易に想像できるでしょう。

実際、電子を2次元の平面に閉じこめさらに磁場をかけたときには、この中間の電子密度においてさらにある特定の電子密度においては固体のような長距離の秩序は持たないが気体としての完全な一様性ももたず、近距離の密度密度相関のみを持つ「液体」状態が現れることが知られています。これがラフリン状態とよばれるもので、標語的にはウィグナー結晶（固体）が量子効果で融解した「量子液体」であるということが出来ます。この系は液体という少々わかりにくい微妙な相である一方具体的な波動関数が書き下されているため、多くの研究がなされこの系から非常に多くのそして驚くべきことを現代の物性科学者は学びました。

たとえば電子は電荷 e を持つフェルミ粒子なのですが、この分数量子ホール系において活躍する粒子（準粒子）は $e/$ 奇数といった半端な電荷をもちさらにはその統計さえもフェルミ粒子とボーズ粒子の中間のものであるということです。（この統計は Fermion と Boson の中間という意味で

Anyon と呼ばれます) このようにラフリン状態は極めて特異で興味深い系であることはわかったのですが、その「相」としての特徴は「量子液体」として固体でも液体でもないというどっちつかずの理解にとどまらざるを得なかったのです。

このような量子液体状態は例外的なのでしょうか？

振りかえってこの10年、20年の物性科学をふりかえると例外どころか、実は量子液体こそが物性科学の興味を中心であったとすらいえま。微妙によくわからないものにこそ多くのミステリーが潜み、そして多くの知的興味をひいてきたのです。その典型例が高温超伝導体におけるいわゆる RVB 状態です。これは和訳すれば「共鳴結合ボンド状態」でしょうか。2次元反強磁性の秩序を持ったスピンは強制的にホールをドーピングすることにより磁気秩序相としての固体が融解して特異な「量子液体状態」をつくると考えられたのです。実際の高温超伝導体におけるこの状態の実現可能性に関しては百花総攬、人々によって意見が全く異なり、軽々に結論はでないのですが、理論的にはその量子液体状態としての意義の大きさは明らかです。また古い問題でありかつまた最近興味が再燃しつつあるフラストレートした磁性体の問題においても量子液体状態としての量子状態が重要であることは間違いありません。

5 トポロジカル秩序と量子秩序

考察する量子系のハミルトニアンがある対称操作のもとで不変であるにも関わらず観測される物理量がその対称操作のもとで不変でないとき(少々不正確ではありますが)自発的に対称性が破れているといえます。

異方性をもたないスピン同士の間相互作用をもつ磁性体において低温で全体のスピンの方向を向いたり特定のスピンのパターンをもつ相が実現する例がもっとも典型的な対称性の自発的破れです。この対称性の破れは現代物理学において極めて基本的な役割を持っており、多様な物質の多様な物質相の多くはこの対称性の破れ概念により基本的に区別されてきたのです。一方で近年の物性科学の進歩により、必ずしも対称性の破れを伴わないが極めて特徴的な物質相が存在することが明らかとなりました。歴史的にみて、その典型例が量子ホール効果における種々の物質相です。2次元的に閉じこめられたお互いに斥力相互作用しあう電子群が磁場下に置かれたとき電子密度および磁場の強度をいろいろと変化させると驚くほど多様な物質相が現れることが知られるに至りました。ところがその多くの物質相の間で古来用いられてきた局所的な秩序変数により記述されるような対称性の違い、区別はその多くの場合全くなく、対称性的には同一の物質相として考えざるをえないのですが、明らかに一連の物質相の性質は特徴的に異なり同一とはどうしてもいいがたいのです。そこで考えられたのがトポロジカル秩序といわれる新しい概念です。

トポロジカル秩序とは局所秩序変数が局所場の場の理論にその起源をもつのに対応してトポロジカルな場の理論において使われたいくつかの概念との類似性を元に提案がなされたものです。たとえば、状態の縮退度が物理系の大域的な構造どのように依存するか等を相の特定に使おうというわけです。私は近年より広く、量子系固有の幾何学的位相を用いてトポロジカル秩序の概念より広くは量子秩序と呼ばれるものを利用して古典的対称性の観点からは特徴を見いだすににくい系の特徴付けを行うための具体的手法を提案しいくつかの具体的試みを行っております。

振り返ってこの20年来の物性物理を考えるといくつもの新規な物質相が発見されてきましたが、真に興味深いのは、いわば未だによくわからない量子液体相であると考えられます。これら量子液体相においてこそ、幾何学的秩序をもちいて拡張された新しい秩序概念としてのトポロジカル秩序および量子秩序が極めて有用なものとなると考えられるのです。これについては節を変えてまたご説明したいと思います。

6 量子液体の特徴付け

前節にて説明しましたように近年の物性科学の進歩により見いだされてきた量子液体とは古典的な秩序変数並びに相分類の手法、概念にうまくマッチしないものであり、新しい物性科学における概念的進歩を要求するものです。それはこの10年から20年の間に多く興味をあつめた物性科学における現象においてこの量子液体相が現れてきたことと無関係ではないと考えられます。そのいくつかを列挙すれば、高温超伝導体におけるRVB状態、フラックス相等時間反転対称性を破る状態、整数、分数量子ホール効果、分数統計による超伝導、Haldane相等整数スピン鎖、梯子形スピン系、フラストレートしたスピン系、カーボン2次元系とナノチューブにおける磁気秩序、異方的超伝導と時間反転対称性の破れ等があげられます。量子液体はその名前にもあるように本質的に量子効果をその基盤とするものです。そう考えると幾何学的位相が量子系の本質的側面を記述していると見なしたとき、幾何学的位相により量子液体相を記述、特徴付けようとするのは極めて自然であるとすらいえます。量子的状態とは近年量子計算等の研究の進展で広く知られるに至りましたがその局所摂動に対

する応答ですら局所的ではなく系全体に及びます。よって量子的波動関数
を作業対象とする幾何学的位相を用いた相分類、特徴付けを考えることは
局所場の理論に基づく局所秩序変数に基づくこれまでの相分類、相転移理
論とは本質的に異なるものとなります。

すこし細かくなりますが、幾何学的位相を用いた量子液体の特徴付け
に関する私の研究をすこし紹介しましょう。量子液体では通常の秩序変数
が使えないわけと何度もいいましたが、では何を作業変数として物理を
やればよいのでしょうか？ 私は、この問いに対する答えとしてその作業
変数として幾何学的位相を用いた「トポロジカルもしくは量子的な量」を
用いることを提案し具体的なスキームを具体例とともに提示しています。
ここで物理量といわず「量」といったのは通常の古典的対応物の存在する
物理量はエルミート演算子に対応するわけですが、ここでの「量」は演算
子としての対応物を持たないからです。この理論では、エルミート演算子
ではなく、ベリー位相の議論の際に用いられたベクトルポテンシャルを一
般化したベリー接続と呼ばれるものを基本的作業変数として議論を進めま
す。その際、系の特徴付けを行うためには密度、磁化、等の様な連続量を使
うこともできますが、ここでの理論では「量子化」された「トポロジカ
ルな量」を構成することを目指します。量子化された量をもちいれば相の
分類が明確であることは明らかでしょう。これを用いると古典的秩序変数
とは異なるトポロジカルな秩序変数を構成することもできるのです。量子
液体相では本質的な局所的な秩序変数は存在しないと繰り返してきました
がこの古典的対応物を持たない量を用いることで量子液体相に対するトポ
ロジカルな局所的秩序変数を構成することができるのです。最近その一般
論をつくとともに重要ないくつかの例であるフラストレートしたスピ

ン系、2量体(ダイマー)化した電子系に関してその一般論を適用しその有効性を示すとともに、より一般的な量子液体相での有効性を探りつつあります。例えば、高温超伝導体等においてはいわゆる Zhang-Rice シングレットと呼ばれる動き回る電子対が重要な役割を果たすと考えられています。シングレットと呼ぶようにこの対はスピンとしてゼロでありスピンは運ばないのですが、実はベリー位相としては という非自明な値に量子化したいわばトポロジカルなチャージを運ぶことが示せるのです。

7 終わりに

この場を借りまして少々変わった研究をご紹介させていただきましたが、この話題は、実は固体の電子論におきます大問題であるところの電子の遍歴性と局在性に深く関わるものであることを指摘し、より詳しいことは今後の研究にて、ご報告させていただきたいと考えております。