

磁束線ピン止め・非局在転移・非エルミート量子力学

羽田野直道 <Theoretical Division, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545, USA e-mail: hatano@viking.lanl.gov>

非Hermiteなハミルトニアンを持つ量子力学の新しい模型が提案され、その興味深い性質が明らかにされつつあります。この解説ではその模型を研究する物理的動機を説明し、性質の一端を紹介します。この非Hermite系の示すAnderson局在という現象と、高温超伝導体中の磁束線ピン止めという物理現象が、Feynman経路積分を通してつながっていることを示します。そして、非Hermite系の複素エネルギー・スペクトルが磁束線のピン止め破壊転移をどのように記述するかを議論します。非Hermite系は従来「物理的でない」と考えられがちでしたが、様々な分野で物理現象を有効的に記述する模型として、ここ数年で急速に研究が進み始めました。

1. はじめに

妙な題名の記事だと思われるかもしれませんが、本稿の目的は、題名にある三つの話題を三題噺のように関連づけて一つの話に仕上げることにあります。最初の二つは既に多くの人が研究しています。それらを、これまで（特に物性の分野で）あまり注目されてこなかった「非Hermite量子力学」が結びつけることを説明していきます。一見無関係と思われる現象が関係づけられただけで理解が深まるということが物理の歴史の中で何度もありました。以下で述べるような対応づけがそのような役割を果たすことを期待しています。

まず第1節で三つの話題のそれぞれを簡単に説明します。第2節で磁束線ピン止めの現象論的模型を紹介し、それが非Hermite模型と数学的に等価であることを第3節で示します。前者のピン止め破壊転移と後者の非局在転移の関係を第4節で議論し、第5節でその非局在転移の興味深い性質を紹介します。最後に第6節でこの非Hermite模型の今後の発展の可能性について触れます。

1-1. 高温超伝導体の磁束線ガラス相とピン止め破壊転移

第一の話題「磁束線ピン止め」は、高温超伝導体の発見から派生してきました。まず磁場中の超伝導体の振舞から説明しましょう。¹⁾ 第二種超伝導体に磁場を加えていくと、磁場が超伝導体から排除されるMeissner相がまず現われます。次に、超伝導自体は保ちつつも、一本一本が磁束 $\Phi_0 = h/(2e)$ を持つ磁束線が超伝導体の中に侵入する相が現われます。Abrikosovの平均場理論によると、この第二の相では侵入した磁束線がお互いの間の反発力から三角格子を組みます（図1(a)）。高温超伝導体発見以前に知られていた第二種超伝導体ではこの平均場理論で十分でした。ところが高温超伝導体では、磁束線が格子を組まずに大きく揺らぐ相が広く存在することがわかってきました（図1(b)）。この相を磁束線の「液体相」と呼びます。これは三角格子を組む相を磁束線の固体に見立てたものです。

このような「固体」や「液体」は線状の物体から構成される点で、点状の原子・分子から成る従来の固体や液体と

は違う新たな物理を生みだしつつあります。¹⁾ またそのような純粹に物理的な興味だけでなく、工学的見地からも磁束線の液体相の解明は重要です。この液体相では実質的に超伝導が破壊されてしまうからです。液体相の高温超伝導体に電流を流すと磁束線にLorentz力が加わります。液体相では磁束線は拘束が弱いので動きだし、このときエネルギー散逸が伴います。つまり電流を流した途端に抵抗が発生してしまうのです。

この状況を回避するために、超伝導体に不純物や格子欠陥を導入して磁束線をピン止める技術が開発されてきました。磁束線は本来ならば超伝導状態とは相容れないので、不純物によって局所的に超伝導が破壊された場所があれば、できるだけそこに留まろうとします。こうして電流によるLorentz力に対抗しようというわけです。不純物によって回復されるこのような超伝導相は、上の固体相・液体相に

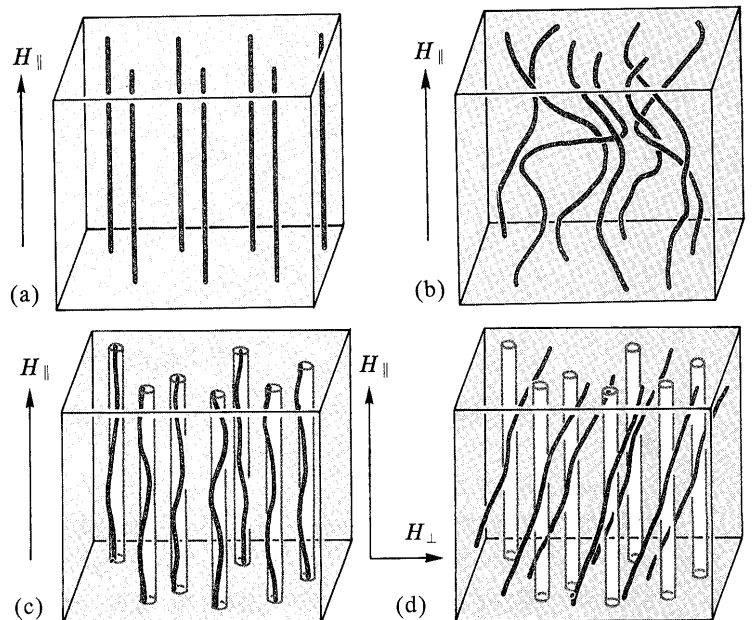


図1 第二種超伝導体中の磁束線（赤線）の振舞。(a) 磁束線の固体相。上から見ると磁束線が三角格子を組んでいます。(b) 液体相。横向きに電流を流すと磁束線が直ちに動き出します。(c) 柱状欠陥によるガラス相。柱状欠陥の内側では超伝導状態が破壊されているので、磁束線はそこに留まろうとします。つまり横向きの電流に対して磁束線がピン止めされます。(d) ピン止め破壊転移。ある角度以上に磁場を傾けるとピン止めがはずれ、横向きの電流に対して磁束線は再び動き出します。

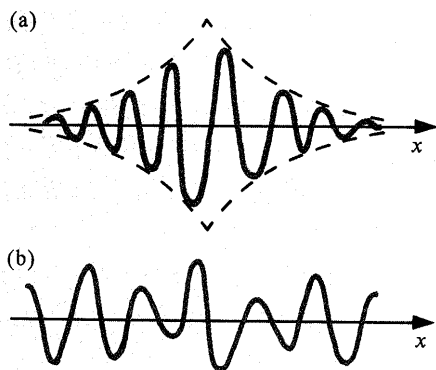


図2 (a) 空間的に局在した状態と (b) 空間全体に広がった状態。

なラって磁束線の「ガラス相」と呼べるでしょう。

不純物によるピン止めの中でも実際に製品開発に利用されている技術が、本稿の背景となる「柱状欠陥」です。超伝導体に重イオンを照射すると図1(c)のように互いに平行な柱状の格子欠陥がランダムに生じます。外部磁場がこの柱状欠陥に平行な場合、侵入した磁束線が欠陥にピン止めされやすいことはすぐにおわかり頂けると思います。

ここで外部磁場が傾いたときにどうなるかという疑問が湧きます。これが本稿で扱う話題の一つです。このとき次のようなピン止め破壊転移が予想されます。まず外部磁場の傾きが小さいうちは磁束線はピン止めされた状態に留まります。この現象を「横方向 Meissner 効果」と呼びます。²⁾ というのは、外部磁場のうち柱状欠陥に垂直な成分に対しては内部磁場が消滅し、この方向について完全反磁性になるからです。更に磁場を傾けるとある角度でピン止めが壊れ、磁束線が斜めになりながら超伝導体中を動き回る液体相に入ります(図1(d))。この横方向 Meissner 効果が壊れる転移は最近の実験で確認されています。³⁾

1-2. Anderson 局在と非局在転移

上で述べたピン止め破壊転移を「非 Hermite 量子力学」を通して「非局在転移」と結び付けるとというのが本稿の粗筋です。そこで次に量子力学における局在について説明します。⁴⁾

最も単純な問題として一粒子の「Anderson 模型」

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - V(x) \quad (1)$$

を考えましょう。ここで $p \equiv -i\hbar\partial/\partial x$ は運動量演算子、 $V(x)$ はランダム・ポテンシャル、 Δ はラプラシアンです。このハミルトニアン固有状態が一箇所に局在した束縛状態(図2(a))か空間全体に広がった非束縛状態(図2(b))かを調べるのが Anderson 局在の典型的な問題です。もちろんこれは問題にする固有状態のエネルギー固有値にもよりますし、ランダム・ポテンシャルの種類や強さにも依存します。

Anderson 模型(1)については繰り込み群から多くのこと

がわかっています。一次元と二次元では少しでも乱雑さが入れば全エネルギー領域で固有状態は局在すると広く考えられています。三次元以上では状態が局在するエネルギー領域と、状態が非局在化するエネルギー領域が分かれて存在します。(一般に高次元ほど粒子が不純物を避けやすいので状態が広がる傾向にあります。)

さて Anderson 模型(1)には様々な拡張が考えられてきましたが、本稿ではある方式で非 Hermite 的に拡張した場合を議論します。非 Hermite 性を強くしていくと、それまで局在していた状態が次々と非局在転移を起こし、一次元ですら最終的に全状態が非局在化することを示します。そしてこの非局在転移が第1-1節で述べたピン止め破壊転移と等価であることを説明します。

1-3. ランダム系の非 Hermite 量子力学

時折「非 Hermite 量子力学」と聞いただけで拒否反応を起こす人に出会います。しかし非 Hermite 系自体はそれほどエキセントリックな話題ではありません。光学模型は教科書にも載っているほど有名な非 Hermite 量子力学系です。この散乱問題の模型では、入射粒子が標的に吸収される効果を複素スカラー・ポテンシャルが有効的に表現します。最近の例では、量子系のカオスやカイラル対称性の破れた QCD の模型として非 Hermite 系が現われます。いずれも物理現象を有効的に記述する模型として導入されています。以下で議論する非 Hermite 系もそのような模型の一つです。

本稿の非 Hermite 系は光学模型と相補的な形で非 Hermite 性を持つと言えます。複素スカラー・ポテンシャルでなく虚数のベクトル・ポテンシャルを使うからです。具体的には Anderson 模型(1)に新たなパラメタ $\mathbf{g}$ を導入して

$$\mathcal{H} = \frac{(\mathbf{p} + i\mathbf{g})^2}{2m} + V(x) = -\frac{1}{2m} (\hbar\nabla - \mathbf{g})^2 + V(x) \quad (2)$$

と拡張します。⁵⁾ 式(2)は通常のベクトル・ポテンシャル $e\mathbf{A}$ を $i\mathbf{g}$ で置き換えた形になっています。但し以下では $\mathbf{g}$ は空間的にも時間的にも定数とします。

式(2)の形の演算子は量子力学以外の文脈でも現われます。時間変化する確率分布に演算した場合、第一項は流れ $\mathbf{g}$ の中の拡散を、第二項は一次反応による指数の成長や崩壊を表わすと考えられます。この第二項が空間的に変化するような反応拡散方程式(例えば触媒が空間分布している場合)は実は余り研究されていません。⁶⁾ また反応拡散方程式と Schrödinger 方程式では確率の定義が違うので、結果の物理的解釈が異なる点も注意が必要です。この点は第6節で再び触れます。

それでは式(2)はハミルトニアンとして一体どのような物理現象を表わすのでしょうか。動機づけがなければ、このような非 Hermite 系の研究は無意味です。この動機づけを説明するのが本稿の目的の一つです。つまり式(2)が図

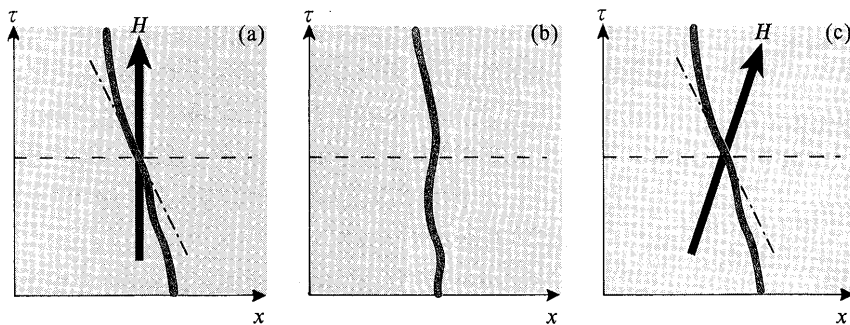


図3 (a) 式 (3) の第一項. 赤い太線が磁束線 $x(\tau)$, 一点鎖線が磁束線の τ 軸からの局所的な傾き $dx/d\tau$ を表わします. (b) 式 (3) の第二項. 磁束線は柱状欠陥の中にいた方がエネルギー的に安定です. (c) 式 (4) の第一項. 外部磁場が傾いている場合, エネルギー損失を傾いた軸から展開します.

1(d) のピン止め破壊転移を記述するのです. しかしその対応を説明するには第3節まで待たねばなりません.

2. 磁束線の現象論的模型

第1-1節で磁束線の物理をおおまかに説明しましたが, これをもう少し定量的に扱うための現象論的な模型を説明します.²⁾ より微視的な取扱いも研究されていますが, ここでは触れません. 以下では議論を簡単にするため磁束線は一本だけとします.

説明の都合上, 柱状欠陥に垂直な方向の座標軸を x , 平行な方向の座標軸を τ とします. 柱状欠陥のあるガラス相では, 磁束線はほぼ欠陥に沿って走っていると考えられます. そこでその配置を一価関数 $x(\tau)$ で近似します. (つまり $-\tau$ 方向に逆戻りすることはないと仮定します.) 外部磁場が柱状欠陥と平行に (τ 軸の方向に) かけられているとき, 磁束線 (flux line) のエネルギーが現象論的に

$$E_{\text{flux}}[x(\tau)] = \int d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \right] \quad (3)$$

の形に近似されることが以下のように議論できます.

まず τ をある値に固定して, 超伝導体を横に切った断面を考えます (図3). 第一項は次のように導かれます. 不純物がなければ磁束線は外部磁場に平行なのが最も安定です. 従って図3(a)のように外部磁場が τ 軸方向にある場合, 磁束線が τ 軸から傾くと有効的にエネルギーが増加すると想像できます. その局所的なエネルギー増加をそこでの磁束線の傾き $dx/d\tau$ で Taylor 展開します. (ここで再び, 柱状欠陥があるために磁束線の傾きが小さいと仮定しています.) すると, 対称性から最低次が傾きの二次の項になります. 式 (3) の第一項は, このような近似の結果として導かれます. なお m はここでは単なる展開係数ですが, 式 (1) や (2) の m と対応することが第3節で明らかになります.

式 (3) の第二項は次のように導かれます. 第1-1節で説明したように, 磁束線は超伝導状態内にいるよりも柱状欠陥内にいる方がエネルギー的に安定です (図3(b)). そこで

柱状欠陥が磁束線にとって有効的に引力ポテンシャルになると考えられます. この有効ポテンシャルは τ 方向には一様ですので, 式 (3) 第二項の形に表わされます. 一本一本の柱状欠陥が x 方向にはおよそ井戸型ポテンシャルの形をしているので, 図1(c)の場合の $V(x)$ は幾つもの井戸型ポテンシャルをランダムに重ね合わせたものになります.

さて, そもそも議論したいのは外部磁場が傾いたときのピン止め破壊転移でした.

外部磁場が τ 軸 (柱状欠陥の方向) から傾

いたときには式 (3) の第一項が変わります. 磁束線の最も安定な角度が傾くからです (図3(c)).

その安定

点から磁束線が更に傾くときのエネルギー増加は

$$E_{\text{flux}}[x(\tau)] = \int d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx(\tau)}{d\tau} - \frac{g}{m} \right)^2 + V(x(\tau)) \right] \quad (4)$$

の形に表わされます. ここで $g \equiv \Phi_0 H_{\perp} / (4\pi)$ は外部磁場の傾きを示すパラメータで, Φ_0 は一本の磁束線の持つ磁束 $h/(2e)$, $H_{\perp}$ は傾いた外部磁場のうち柱状欠陥に垂直な方向の成分です.

こうして, 磁束線を現象論的に弾性的紐として扱えるようになります. ただしエネルギーを定めただけでは不足です. この紐は超伝導体の温度のもとで揺らぐからです. つまりエネルギー (4) に基づいた統計力学の問題を解かなければいけません. そこでカノニカル分布の処方箋に従って分配関数を

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}x e^{-E_{\text{flux}}/T} \quad (5)$$

と定義します. ここで紐の形 $x(\tau)$ に関する和を $\int \mathcal{D}x$ と書きました. また T は温度です.

この現象論的模型の統計力学からは様々な予言が導かれます. 例えば $H_{\perp} (= |H_{\perp}| \propto |g|)$ をゼロから増やしたときに超伝導相 (磁束線のガラス相) の臨界温度が $T_c(0) - T_c(H_{\perp}) \sim H_{\perp}^{1/2}$ の形で下がると予想されます.²⁾ この臨界指数が $z \sim 6$ であることが実験と数値計算の両方で確認されています.⁷⁾

このように, 分配関数 (5) をそのままの形で計算して磁束線の物理を議論することはもちろん可能です. しかし本稿ではそれをせずに, 次節で述べる別の視点からこの問題を眺めることにしましょう.

3. Feynman 経路積分と統計力学

この節ではいよいよ, 上で導入した現象論的模型 (4) と非 Hermite-Anderson 模型 (2) との数学的対応を説明します. そのためにまず経路積分の初歩的な説明から始めまし

よう。

量子系の時間発展を記述する方法には二つあります。一つが Schrödinger 方程式、もう一つが経路積分です。これはちょうど古典力学でのハミルトニアン形式とラグランジアン形式に対応します。ラグランジアン形式の古典力学では粒子の運動を「世界線」と呼ばれる時空間中の線 $x(t)$ でとらえます。この線の汎関数として「作用」 $S[x(t)]$ を定義し、作用が最小になるような世界線を粒子が辿ると考えます。

量子系になると粒子は最小作用の世界線を辿るとは限らず、その周りを揺らぎます。そこで粒子がある世界線 $x(t)$ を辿る確率（正確には「確率振幅」）は $e^{iS[x(t)]/\hbar}$ に比例すると仮定します。物理量の期待値は、その物理量にこの確率振幅を掛けてからあらゆる世界線 $x(t)$ について足し上げたものになります。これが経路積分です。このときの規格化因子が実は Schrödinger 方程式の Green 関数に対応します：

$$\int \mathcal{D}x e^{iS[x(t)]/\hbar} = \langle \phi_f | e^{-i\tau \mathcal{H}/\hbar} | \phi_i \rangle. \quad (6)$$

ここで、あらゆる世界線について足し上げる操作を $\int \mathcal{D}x$ という記号で表わしました。また $|\phi_i\rangle$ と $\langle \phi_f|$ は時間発展の始状態と終状態です。

話を具体的にするために一粒子のポテンシャル中の運動を考えましょう。粒子の量子力学的運動はハミルトニアン (1) を使った Schrödinger 方程式で記述されます。その同じ運動を、式 (6) のように作用を使って等価に記述できる、というのが経路積分の主張です。このときの作用は古典力学から

$$S[x(t)] = \int dt \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx(t)}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right] \quad (7)$$

で与えられます。両者の等価性をより詳しく示すことが可能ですが、ここでは紙幅の制限のため割愛します。

さて次に、数学的な操作として式 (6) の時間 t に「虚時間」 $-i\tau$ を代入してみましょう。すると左辺が分配関数 (5) と同じ形に変換されることがわかります：

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}x e^{-E_{\text{flux}}[x(\tau)]/\hbar} = \langle \phi_f | e^{-\tau \mathcal{H}/\hbar} | \phi_i \rangle. \quad (8)$$

但しここでの E_{flux} は式 (3) です。統計力学系の温度 T が量子系の $\hbar$ に相当することがわかります。つまり上の操作 $it \rightarrow \tau$ では量子揺らぎを温度揺らぎに読み替えたことになります。

式 (8) は、弾性紐 (3) の平衡統計力学がハミルトニアン (1) の Green 関数として計算できることを意味します。その対応を一言で言うと、紐の空間中の配置を量子的粒子の世界線と解釈し直すということです。但しこの対応は純粋に形式的なものです。一つ注意しておきますと、量子的粒

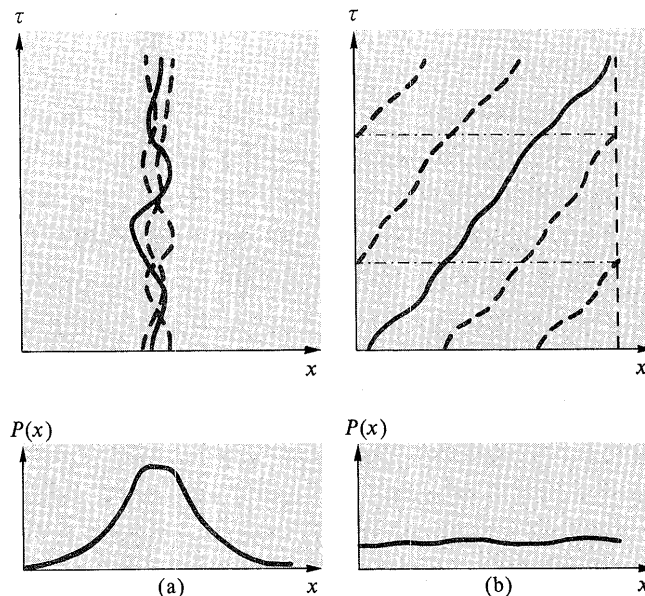


図4 上段が超伝導体中の磁束線の様子を表わしています。磁束線は温度によって揺らぐので、実線と点線のように様々な配置を取ります。但しピン止め状態 (a) ではピン止め中心の付近で揺らぐのに対し、非ピン止め状態 (b) では系全体を経巡るように揺らぎます。 x 方向の周期境界条件のために、(b) の上段では右端に達した磁束線が左端に戻っていることに注意してください。下段に示したのは、ある τ で超伝導体を横に切った断面での、温度揺らぎによる磁束線の分布関数の概形です。この分布関数が (a) のように局在しているか (b) のように非局在かで、ピン止め状態と非ピン止め状態を区別できます。

子が x で表わされる d 次元空間を運動しているとすると、弾性紐は (x, τ) で表わされる $(d+1)$ 次元空間の中で揺らいでいます。古典力学系で単なる空間軸の一つだった τ 軸が量子系では形式的に虚時間軸になりますので混乱しないようにして下さい。

上では式 (3) の E_{flux} と式 (1) の $\mathcal{H}$ の関係として式 (8) を導きましたが、 E_{flux} を外部磁場が傾いた場合の式 (4) に置き換えると、対応する $\mathcal{H}$ は非 Hermite 模型 (2) になります。この対応も詳しく示すことが可能ですが、やはり割愛します。⁹⁾

4. 非局在転移とピン止め破壊転移

前節の結果をまとめると次のようになります。量子系の時間発展を計算するのに経路積分と Schrödinger 方程式という二つの方法があるのと同じ意味で、磁束線の統計力学を解くにはエネルギー (4) の分配関数を使う方法と非 Hermite-ハミルトニアン (2) の Green 関数を使う方法があるということです。

数学的には両者は等価ですが、実際の計算の手間は違ってきます。非 Hermite 系の方法では、線状の物体だったものを見慣れた点状の粒子として扱う点が優れています。量子力学の授業で Schrödinger 方程式を経路積分より先に習うのも同じ理由でしょう。特に $g=0$ で、よく研究されてきた Anderson 局在の問題に帰着するのが非 Hermite 系を使う大きな利点です。（一方、Monte Carlo シミュレーション

ジョンをする場合にはエネルギー (4) の分配関数を使う方が便利です.)

こうして非 Hermite 系 (2) を研究する動機づけができました. そこで次に磁束線の様々な性質を非 Hermite 系の言葉に翻訳する必要があります. 本稿に興味があるのは $H_{\perp}$ を増やしたときに図 1(c) と (d) の間で起こる磁束線のピン止め破壊転移です. そのため, 磁束線が $g (\propto H_{\perp})$ の小さいピン止め状態にあるのか, g の大きい非ピン止め状態にあるのかを, 非 Hermite 系でどのように区別するかが問題になります. 第 1-2 節で触れたように, 非 Hermite 系が局在状態にあるか非局在状態にあるかでこれが区別できるのです. つまり非 Hermite 系の局在・非局在転移を調べることが磁束線のピン止め破壊転移を調べることに直結しているのです.

以下で, 磁束線の状態と非 Hermite 系の波動関数の対応を説明します. 簡単のため幾つか仮定を置きます. まず磁束線は一本だけの場合を考えます. また超伝導体の τ 方向の大きさを L_{τ} と書いて, L_{τ} は非常に大きいとします. 更に x 方向には周期境界条件を課します.

ある τ で超伝導体を切った断面を想像して下さい. 磁束線がピン止め状態にあれば, この断面上で磁束線はピン止め中心の付近を僅かに温度揺らぎするでしょう (図 4(a)). 一方ピン止めが壊れた状態では磁束線は断面上のどの場所を横切ってもおかしくありません (図 4(b)). ピン止めされていない磁束線は系を一方の端から他方の端へ斜めに横切り, 周期境界条件のために元の端に戻って同じことを繰り返します. つまり螺旋のように系に巻きつきます. 螺旋がどこから出発しても系全体のエネルギーはほとんど変わらないので, ある断面上で見たときに磁束線はどこにでも存在し得るのです.

こうして, ある断面上での磁束線の分布関数が局在しているか非局在かで, その磁束線がピン止めされているか動き回っているか区別できます. この分布関数を, 磁束線の統計力学でなく, それに対応する量子力学で計算してみましょう. 第 3 節で示された磁束線と粒子の世界線との対応から考えて, ある時刻 τ における粒子の存在確率の分布を計算すればよいでしょう. この分布は式 (8) の右辺の Green 関数にならって

$$P(x) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \langle \phi_{\tau} | e^{-(L_{\tau}/2)\mathcal{H}/\hbar} | x \rangle \langle x | e^{-(L_{\tau}/2)\mathcal{H}/\hbar} | \phi_i \rangle \quad (9)$$

となります. $\tau=0$ や $\tau=L_{\tau}$ での表面効果を極力排除するため, 断面は $\tau=L_{\tau}/2$ としました. 右辺の右側の行列要素は時刻 0 に始状態を出発した粒子が時刻 $\tau=L_{\tau}/2$ で x に達する確率振幅, 左側の行列要素がそこから $\tau=L_{\tau}$ での終状態に達する確率振幅です.

ここで超伝導体は τ 方向には非常に大きいとして, 式

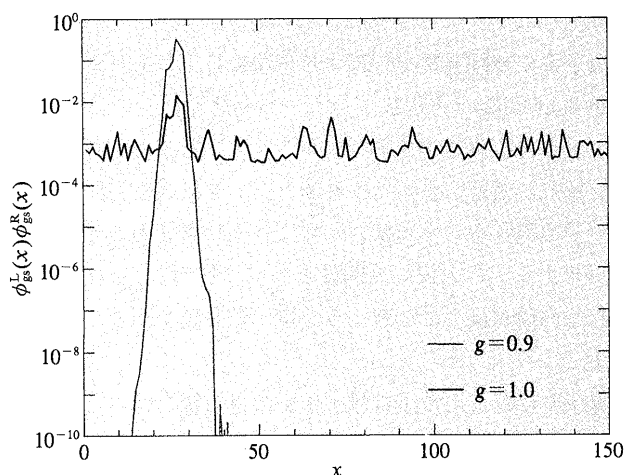


図5 一次元非 Hermite 格子模型 (11) を数値対角化した計算結果の半対数プロット. 計算した系のサイト数は 1,000 ですが, ここには $1 \leq x \leq 150$ の部分だけを示しました. $t_{\text{hop}}=1$ とし, V_x は各 x について $[-1, 1]$ からランダムに選んでいます. 関数 $\phi_{\text{gs}}^L \phi_{\text{gs}}^R$ は $g=0.9$ では $x \approx 27$ 付近に局在していますが, $g=1.0$ では系全体に広がっています. この図から $0.9 < g < 1.0$ の間で磁束線のピン止め破壊転移が起こることがわかります.

(9) で極限 $L_{\tau} \rightarrow \infty$ を取ります. するとハミルトニアン $\mathcal{H}$ の基底状態だけが抽出されて, 励起状態は指数関数的に消えます. (なお基底状態はエネルギーの実部が最小の状態と定義します.) 分母の分配関数から出てくる因子にも注意すると

$$\lim_{L_{\tau} \rightarrow \infty} P(x) = \langle \phi_{\text{gs}} | x \rangle \langle x | \phi_{\text{gs}} \rangle = \phi_{\text{gs}}^L(x) \phi_{\text{gs}}^R(x) \quad (10)$$

という結果が得られます.⁵⁾ ここで基底状態 $\langle \phi_{\text{gs}} | x \rangle$ と $\langle x | \phi_{\text{gs}} \rangle$ をそれぞれ ϕ_{gs}^L と ϕ_{gs}^R と書いたのは, それらがハミルトニアンの左固有状態と右固有状態だからです. ハミルトニアンが非 Hermite だと通常の量子力学での常識 ($\langle \phi_{\text{gs}} | x \rangle$)* = $\langle x | \phi_{\text{gs}} \rangle$ が通用しません. (Hermite の極限 $g=0$ で $(\phi^L)^* = \phi^R$ に帰着します.)

上の結果から, ハミルトニアン (2) の基底状態を求めて, その積 $\phi_{\text{gs}}^L \phi_{\text{gs}}^R$ が局在か非局在かを調べると, 磁束線のピン止め破壊転移点を決められることがわかります. 図 5 に一次元での数値計算例を示します. 外部磁場を傾けたとき, つまり g を増やしたときに非局在転移が起こるのが見て取れます. 一次元でも非局在転移が起こる点に注目して下さい. 第 1-2 節で述べたように通常の Anderson 模型では低次元で状態が強く局在しますが, 非 Hermite-Anderson 模型では全く新しい現象としてあらゆる次元で非局在転移が起こります.

なお, 図 5 はハミルトニアン (2) の代わりに, それに相当する格子模型を使った数値結果です. この格子模型は通常の「タイト・バインディング模型」を拡張したもので, そのハミルトニアンの行列要素が一次元で

$$\mathcal{H}_{xx'} = -\frac{t_{\text{hop}}}{2} (e^g \delta_{x, x'+1} + e^{-g} \delta_{x, x'-1}) + V_x \delta_{x, x'} \quad (11)$$

と表わされます. 係数 t_{hop} は正とし, V_x は各サイトでラン

ダムに選びます。通常のタイト・バインディング模型ではベクトル・ポテンシャルの効果を $e^{-ieA}\delta_{x,x'+1}+e^{ieA}\delta_{x,x'-1}$ の形のホッピング項として取り入れます。粒子の移動に伴って波動関数に位相因子 $e^{\pm ieA}$ が加わるようになっています。このホッピング項に第1-3節で触れた置き換え $eA \rightarrow ig$ をそのまま適用すると、式(11)の第一項となることがわかります。その結果、粒子が $+x$ 方向へ動く行列要素と $-x$ 方向へ動く行列要素が異なり、粒子を一方向へ押し流そうとする外場が表現されます。これとランダム・ポテンシャルとの競合から非局在転移が起こるのです。従来の模型との本質的な違いは、外力がスカラー・ポテンシャルの傾きとして入っているのではないという点です。

図5では格子模型(11)の行列表現

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} V_1 & t_- & & & & & t_+ \\ & V_2 & t_- & & 0 & & \\ & & t_+ & V_3 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & & & V_{N-1} & t_- \\ t_- & & & & & & V_N \end{pmatrix} \quad (12)$$

を数値対角化しました。ここで $t_{\pm} \equiv -t_{\text{hop}} e^{\pm g/2}$ です。また図5では $N=1,000$ です。なお基底状態関数はあらゆる x について正にとれることが Perron-Frobenius の定理からわかるので、 $\int \phi_{gs}^L \phi_{gs}^R dx = 1$ と規格化すれば式(10)のように確率分布としての意味を持ちます。

5. 複素固有値と非局在転移

前節で磁束線のピン止め転移と非 Hermite 系の非局在転移の等価性を議論しました。この節ではハミルトニアン(2)の固有値を調べるだけでその状態が局在か非局在かわかることを説明します。(一般に固有値を求める方が波動関数を求めるより簡単です。)これは通常の局在問題には現われない、非 Hermite-Anderson 模型の著しい特徴です。具体的には、複素数の固有値を持つ状態は非局在状態であるということがわかります。この性質のために、この非 Hermite-Anderson 模型が数理論理的にも興味深い問題となっています。⁹⁾

なお、ここでは状態の「局在」と「非局在」はあくまで積 $\phi^L \phi^R$ の空間的広がり度で定義します。固有関数 ϕ^L と ϕ^R それぞれの単体での振舞は第6章で少し触れることにします。

議論を簡単にするために空間を一次元に限ります。まずイメージをつかむために、再び非 Hermite 格子模型(11)の数値結果を示します。図6が g を増やしたときのエネルギー・スペクトルの変化です。 $g=0$ ではハミルトニアンが Hermite ですから全固有値が実数です。 $g=0.1$ ではハミルトニアンが非 Hermite であるにも拘わらず全固有値が実数のままです。 $g=0.3$ で初めて複素固有値が現われ、 $g=1.0$

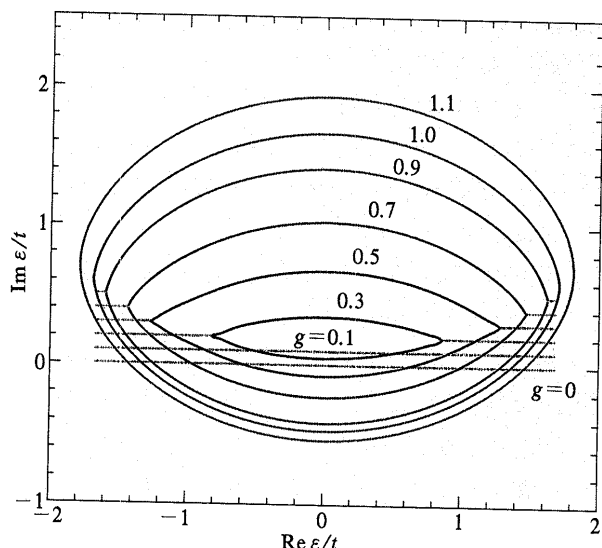


図6 一次元非 Hermite 格子模型(11)の複素エネルギー・スペクトル。各固有値が微小な十字でプロットされています。系のサイト数は1,000、 t_{hop} と $\{V_i\}$ は図5と共通です。見やすくするため $g>0$ のスペクトルは縦軸の原点をずらしてあります。赤でプロットしてある固有値が局在状態、黒が非局在状態です。

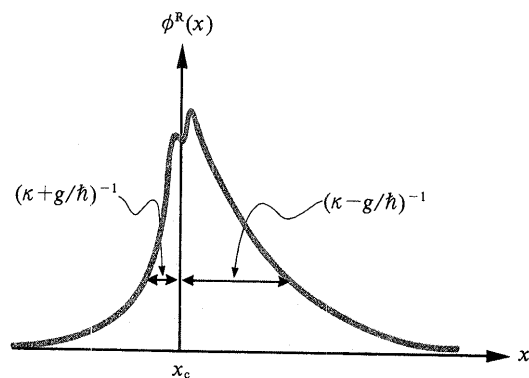


図7 波動関数(13)。この解は領域 $|g| < \hbar \kappa$ でしか成立しません。

で(スペクトルの左端と右端を除いて)全て複素固有値となります。

このスペクトル上(右端と左端を例外として)、実数固有値を持つ状態が局在状態で、複素数固有値を持つ状態が非局在状態なのです。⁹⁾ 図6では $0.9 < g < 1.0$ で複素固有値の領域が基底状態に達していますが、確かにこのとき図5で基底状態が非局在化しています。

この性質は以下のように説明できます。まず Hermite の場合 ($g=0$) から出発します。図6の系は一次元ですから、第1-2節で触れたように全状態が局在しています。その関数形を $\phi_0(x) \sim e^{-\kappa|x-x_c|}$ と仮定します。 κ は局在長の逆数、 x_c は局在中心です。この形は局在中心から十分離れたところでは正しいと考えられます。

次に $g \neq 0$ の場合を考えます。ここで、第1-3節で指摘したように g が虚数ベクトル・ポテンシャルに相当している事実を思い出しましょう。するとゲージ変換によって波

動関数が求められるのではないかという考えが浮かびます。具体的には以下のようになります。 $g=0$ のときのハミルトニアン $\mathcal{H}_0$ の固有方程式 $\mathcal{H}_0\phi_0(x)=\varepsilon_0\phi_0(x)$ が解けたとしましょう。ゲージ変換できるとすると、 $g\neq 0$ での固有方程式 $\mathcal{H}(g)\phi^R(x;g)=\varepsilon(g)\phi^R(x;g)$ の解 (右固有関数) は

$$\phi^R(x;g)=e^{g(x-x_0)/\hbar}\phi_0(x)\sim e^{g(x-x_0)/\hbar-\kappa|x-x_0|} \quad (13)$$

と求められ、固有値は変化しない ($\varepsilon(g)=\varepsilon_0$)、つまり実数のままであるという結論になります。

しかし上の議論はある領域でしか成り立ちません。その領域とは $|g|<\hbar\kappa$ です。このとき式 (13) は図 7 のように $+x$ 方向にはおよそ $(\kappa-g/\hbar)^{-1}$ の、 $-x$ 方向にはおよそ $(\kappa+g/\hbar)^{-1}$ の広がりを持った、非等方的に局在した波動関数です。同じ領域で左固有関数は $\phi^L(x;g)=e^{-g(x-x_0)/\hbar}\phi_0(x)^*$ で与えられるので、式 (10) の分布関数 $\phi^L\phi^R$ は g に依存せず、 $|\phi_0(x)|^2$ のまま局在状態に固定されます。これは領域 $|g|<\hbar\kappa$ が磁束線ピン止め相に対応していることを示しています。

パラメタ g が領域 $|g|>\hbar\kappa$ に入ると、上の議論は周期境界条件の下では成立しません。式 (13) は一方向に増加し反対方向に減少するので周期境界上で矛盾をきたします。(正確には領域 $|g|<\hbar\kappa$ でも周期境界上で微妙な齟齬が生じますが、これは系を非常に大きくすると解消されます。) この矛盾を解決するために状態が非局在化するのです。上のゲージ変換の議論が破綻するのでエネルギー固有値はもはや実数値 ε_0 に固定されず、 g に依存するようになります。このとき初めて固有値が複素数になることが許され、特殊な状態を除いて実際に複素数化します。(対称性のため、スペクトルの右端や左端の固有値は実数のまま g に依存して変化します。)

状態が非局在化した途端に固有値が複素数化することを厳密に示すのは必ずしも容易ではありませんが、以下に幾つか議論を挙げます。まず不純物が一個しかない場合には上の議論が厳密になります。式 (2) で $V(x)=\delta(x)$ とすれば $g=0$ の基底状態は厳密に $\phi_{gs}=e^{-\kappa|x|}$ の形をとり、 $|g|<\hbar\kappa$ での厳密解は $\phi_{gs}^R(x;g)=e^{g(x-x_0)/\hbar-\kappa|x|}$ です。一方 $|g|>\hbar\kappa$ では大きな系の極限で平面波 $\phi_k^R(x)=e^{ikx}$ が厳密な固有状態となり、デルタ・ポテンシャルは有限サイズ効果としてしか現われなくなります。⁵⁾ 固有値は $(k+ig)^2/(2m)$ となり ($k=0$ を除いて) 複素数です。

実は一般のランダム・ポテンシャルについても、繰り込み群を使うと領域 $|g|>\hbar\kappa$ で $V(x)$ が「イレレバント」であることが示せます。¹⁰⁾ 従って積 $\phi^L\phi^R$ の長距離での振舞はやはり平面波で記述され、状態の固有値は複素数です。実際に図 6 で $g=1.1$ の場合のスペクトルは、ランダム・ポテンシャルがない時の $g=1.1$ のスペクトルとほとんど変わりません。

次に、非局在状態と複素固有値の関係を磁束線の物理に戻って説明してみましょう。第 4 節で議論したように非局在状態はピン止めされていない磁束線に対応しています。そして図 4(b) に示したように、ピン止めされていない磁束線は周期境界条件のために系に巻きつくような配置をとり、 τ 方向に周期性を持ちます。そこで非局在状態も τ に関する時間発展に周期性を持つはずですが、実際に固有値に虚部をもった状態の時間発展には $e^{-i\tau\text{time}}$ のような振動因子があり、これが図 4(b) のような配置を記述していると解釈できます。こうして複素固有値が非局在状態に対応することが磁束線の物理を通して理解できます。

この他にも、 $|g|>\hbar\kappa$ で波動関数がカレントを持つ、固有値と固有関数が境界条件に強く依存する、などの議論ができますが割愛します。詳しくは原著論文を参照して下さい。^{5, 6, 10)}

以上をまとめると、 $g=0$ のときに局在長が κ^{-1} だった状態は $g_0=\hbar\kappa$ で非局在転移し、同時に複素固有値を持つことがわかりました。図 6 で $\text{Re}\varepsilon=0$ 付近の状態が一番最初に複素固有値を持つのは、その付近の状態の κ が最も小さいからです。

6. 今後の展望

本稿では (i) 磁束線ピン止めの模型と非 Hermite-Anderson 模型が経路積分を通してつながっている、(ii) 前者のピン止め破壊転移が後者の非局在転移に対応している、(iii) 一次元でも非局在転移が起こる、(iv) その非局在転移は非 Hermite 模型の固有値を計算するだけで調べられる、ということを説明してきました。

最後に今後の発展の可能性を幾つか述べます。本稿の議論では状態の「局在」と「非局在」を右固有関数と左固有関数の積の振舞で定義しましたが、右固有関数と左固有関数の個別の振舞も興味深い点です。両者がそれぞれ超伝導体の $+x$ 方向の表面と $-x$ 方向の表面における磁束線の分布を表わしているからです。(式 (9)-(10) と同様の議論で示せます。) また第 1-2 節で触れたように式 (2) を反応拡散方程式の演算子と解釈すると、固有関数そのものが確率分布の意味を持ちます。実は状態が非局在であっても、即ち $\phi^L\phi^R$ が通常の意味での非局在関数であっても、 ϕ^R と ϕ^L は個々には通常の非局在関数とは異なる振舞をすることが最近わかってきました。^{6, 10)} これは局在の物理での新しい発見です。

以上ではほとんど議論を一次元に限りましたが、実際には三次元の超伝導体は二次元の非 Hermite 系に対応します。そこで議論を二次元に拡張すると興味深い現象が見られます。簡単のため $g=(g_x, 0)$ とします。第 5 章と同じ議論から $|g_x|>\hbar\kappa$ において x 方向に状態が非局在化することはす

ぐにわかります。このとき y 方向には状態は局在するでしょうか。繰り込み群を使った議論から、状態は y 方向にも非局在であることがわかります。但し x 方向の状態の広がりがある方向の系の大きさ L_x に比例して大きくなるのに対し、 y 方向の広がり $L_y^{2/3}$ に限られると予想されます。⁶⁾ この指数 $2/3$ を実験的または数値的に検出するのは興味深い課題です。

本稿では磁束線間相互作用は全く無視しましたが、実際には反発力が存在します。外部磁場が強くて磁束線が超伝導体内に密に侵入する場合はこの相互作用を考慮する必要があります。磁束線間反発力は非 Hermite 系に変換した後も粒子間斥力として残るので、非 Hermite 多体系の局在という未知の問題を取り扱うことになります。²⁾ (なお粒子の統計は Bose 統計になります。) 最近、スカラー・ポテンシャルが周期的な場合については議論されましたが、ランダム・ポテンシャルの場合は未解決の課題です。¹¹⁾

これまで磁束線の物理を非 Hermite 系の研究動機として強調しましたが、他にも様々な動機が考えられます。特に興味深いのは Hermite 系の局在問題の研究に寄与できる可能性です。前節の議論から $g_e = \hbar\kappa$ で固有値が複素数になることがわかりました。これを逆に読み直すと、ある値 $g = g_e$ で固有値が複素数になるような状態は、 $g=0$ のときの局在長が $\kappa^{-1} = \hbar/g_e$ であるような状態だったということです。これは、非 Hermite 系のスペクトルから Hermite 系の局在長が計算できることを示唆しています。⁹⁾ Hermite

系の局在長は多くの場合 Green 関数から計算しますが、非 Hermite 系によって新しい計算方法が与えられる可能性があります。

他にも、非 Hermite 系 (2) を電荷密度波や量子カオスの模型として扱った研究があります。¹²⁾ 非 Hermite 系はこれまであまり注目されてこなかっただけに、今後の発展が期待されます。

参考文献

- 1) G. W. Crabtree and D. R. Nelson: Phys. Today **50** (1997) No. 4, 38. [邦訳, パリティ **13** (1998) No. 1, 6].
- 2) D. R. Nelson and V. Vinokur: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 2398; Phys. Rev. B **48** (1993) 13060.
- 3) I. M. Obaidat, et al.: Phys. Rev. B **56** (1997) R5774.
- 4) 福山秀敏:『アンダーソン局在』物理学最前線 **2** (共立出版, 1982) p. 57.
- 5) N. Hatano and D. R. Nelson: Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 570; Phys. Rev. B **56** (1997) 8651.
- 6) D. R. Nelson and N. Shnerb: Phys. Rev. E **58** (1998) 1383.
- 7) W. Jiang, et al.: Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 550. H. Safar, et al.: Phil. Mag. B **74** (1996) 647.
- 8) R. P. Feynman: *QED: The Strange Theory of Light and Matter* (Princeton Univ. Press, 1985). 釜江常好, 大貫昌子訳:『光と物質のふしぎな理論』(岩波書店, 1987).
- 9) N. Hatano: Physica A **254** (1998) 317. A. Zec: *ibid.* (1998) 300.
- 10) P. G. Silvestrov: preprint, cond-mat/9802219. N. Hatano and D. R. Nelson: Phys. Rev. B **58** (1998) 8384.
- 11) R. A. Lehrer and D. R. Nelson: preprint, cond-mat/9806016.
- 12) L.-W. Chen, et al.: Phys. Rev. B **54** (1996) 12798. K. B. Efetov: Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 491; Phys. Rev. B **56** (1997) 9630.

(1998年5月22日原稿受付)



結晶の転位と塑性ホモロジー

鈴木 敬愛

〈東京大学生産技術研究所 106-8558 東京都港区六本木 7-22-1 e-mail: suzukit@iis.u-tokyo.ac.jp〉

4000年前に起った石器から金属器への移行は塑性変形の獲得であった。しかし、塑性が物理の対象となったのは、やっと75年前に「転位」の概念が生まれてからである。転位を張力のある“ひも”と見做し、結晶の周期性を表わす Peierls ポテンシャルの上に置くことによって、鉄など体心立方金属の塑性がよく理解される。一方、Si など半導体結晶の塑性を記述する一般的な関係が経験的に求められているが、物理的な理解は十分でない。

1. はじめに

「ダイヤモンドはあらゆる固体の中で最も硬い」と中学校の理科で教わるが、その理由は固体物理の教科書にも書いてない。転位論あるいは結晶塑性学がこれに答える責任があるが、その分野の専門家に聞くと、「共有結合結晶は Peierls ポテンシャルが高いから」という風な答が返ってくるかも知れない。固体の「硬さ」というのは必ずしも物理的に明確に定義された量ではなく、測定方法も含めて定義

しなければならない。固体を非可逆的に永久変形(塑性変形)するのに必要な力を「降伏応力」というが、硬いとは降伏応力が高く、軟らかいとは降伏応力が低いことを意味する。降伏応力のことを降伏強度、または単に強度ということもある。後に出てくるように、純鉄は液体 He 温度でも塑性変形するが、ダイヤモンドを室温で塑性変形することは事実上不可能である。¹⁾

固体は原子で構成されているのだから、弾性変形も塑性