

# 電子ガス系：2つの予期せぬ発見 ——励起子集団モードとエキシトロン

高田 康民 (東京大学物性研究所 takada@issp.u-tokyo.ac.jp)

電子ガス系は単純金属の標準模型であり、これをランダウのフェルミ流体理論 (FLT) で解析すると、単純金属の低温物性がよく説明される。このため、単純金属は FLT が適用される典型物質とされる。ただ、これによって FLT の基盤であるランダウの **1対1対応の仮説** が電子ガス系で厳密に立証されたとは言い切れない。

このランダウ仮説を数学的に検証する際に FLT を暗黙裡に仮定した理論、例えば、自由電子ガスを無摂動系とした多体摂動理論は使えず、何らかの非摂動的手法が必要になる。この観点から **量子モンテカルロ法 (QMC)** は注目される。実際、1980 年以降、電子ガス系に QMC を適用する動きが強まっている。確かに、初期には基底状態エネルギーなど、FLT の検証に無関係な計算であったが、後には **静的応答関数**、近年では **動的応答関数**、さらには FLT の基礎概念に関わる準粒子の繰り込み因子や有効質量もかなりの精度で計算されている。

しかし、QMC 計算は全電子数  $N$  が有限の系でのみ遂行されるので、 $N \rightarrow \infty$  への外挿なしにはバルク系の情報は得られず、しかも、現在実行可能な  $N$  は 100 程度が上限なので、得られる物理量の運動量空間や温度空間の分解能、 $\Delta k$  や  $\Delta T$ 、は低い。具体的には、 $k_F$  をフェルミ運動量、 $\epsilon_F$  をフェルミエネルギーとして  $\Delta k \approx 0.1k_F$ 、 $k_B \Delta T \approx 0.1\epsilon_F$  がせいぜいである。これでは  $k \approx k_F$  かつ  $k_B T \ll \epsilon_F$  での 1 電子励起スペクトルの  $k$  や  $T$  依存性の詳細を見ることは難しく、それゆえ、1対1対応や FLT の妥当性を十分に吟味できない。

この状況を鑑みて、筆者は密度分極関数  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$  と自己エネルギー  $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$  を自己無撞着に計算する独自の非摂動計算スキームを開発した。そして、このスキームで既知の保存則や総和則、正しい漸近形がすべて自動的に満たされ、かつ、QMC からの情報を正しく組み込んだ逐次近似計算コー

ドを実装し、それを用いて  $\Delta k \approx 10^{-4}k_F$  かつ  $k_B \Delta T \approx 10^{-4}\epsilon_F$  の分解能で収束解を得た。その結果、予期せぬ発見が  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$  と  $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$  に関連して一つずつあった。

まず、 $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$  から得られる動的構造因子  $S(\mathbf{q}, \omega)$  を調べると、単純金属ではプラズモンのみが集団励起として確認されるが、より低電子密度の系では、これ以外に  $|\mathbf{q}| \sim 2k_F$  で  $\omega < 0.2\epsilon_F$  の領域に新たな集団励起があることが 2016 年に発見された。筆者はこれを **励起子集団モード** と名付けた。2年後、ドルンハイム (T. Dornheim) らは QMC でこのモードの存在を確認し、同時に単純金属密度で  $|\mathbf{q}| \sim 2k_F$  かつ  $\omega \sim 0$  の領域に見られる励起子の短距離揺らぎはこのモードの前駆現象として捉えられるとした。

次に、 $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$  から計算される 1 電子スペクトル関数  $A(\mathbf{k}, \omega)$  を単純金属密度領域で調べると、鋭く高いピークとして準粒子の存在が確認されるが、2024 年、この他に  $k_B T < 10^{-3}\epsilon_F$  の低温では準粒子の約半分の励起エネルギーを持つ新たなピークを発見した。これは上述の短距離揺らぎの励起子雲を伴った電子に由来するので、筆者は **エキシトロン** と名付けた。ちなみに、 $\omega$  平面での解析性は準粒子は極であるが、縦方向に 1 次元的に広がる励起子雲を伴うエキシトロンは 1 次元ラッティンジャー液体に現れる分岐線の特異性で特徴づけられる。なお、準粒子ピークはエキシトロンのそれより約百倍も大きいので、バルクの単純金属の低温物性は FLT でよく記述される。

このように、たとえ単純金属とはいえ、十分低温で詳細に見ると、ランダウ仮説に反するエキシトロンが出現して非フェルミ流体の物理が顔を出す可能性がある。このエキシトロンが 1 meV 以下の高分解能を持つ角度分解光電子分光で実際に観測されれば、単純金属の物理を一層深められるとともに強相関係物理の観点からも興味深く意義深い実験結果となるであろう。

## 用語解説

### 1対1対応の仮説：

自由電子ガスの低励起状態は電子間相互作用の断熱的印加とともに相互作用する電子系の低エネルギー個別励起 (準粒子) 状態に 1対1対応を保ちつつ連続変形で繋がるといふ仮説。

### 量子モンテカルロ法：

波動関数の振幅を確率と解釈し、和を厳密に評価する代わりに確率過程に置き換えて重要な寄与のみを足し上げる計算手法。

### 静的および動的応答関数：

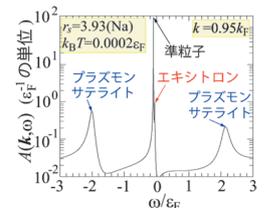
周波数  $\omega$  で時間変化をする入力に対する物理系の応答の特性を記述する関数を動的応答関数といい、そのうち特に  $\omega = 0$  の場合を静的応答関数という。

### 励起子集団モード：

電子ガス系では高周波数・長波長領域で電子正孔対が多数励起された状態であるプラズモンが存在する。このとき、励起された各電子正孔間に相関はない。一方、相関を持って電子正孔対 (すなわち、励起子) が低周波数・短波長領域で多数励起された状態を励起子集団モードと名付けた。

### エキシトロン：

電子の周りにフォノン雲を伴ったものをポーラロンというが、フォノンの代わりに励起子の短距離揺らぎによる分岐の雲を伴ったものをエキシトロンと名付けた。



ナトリウム密度の電子ガス系での 1 電子スペクトル関数  $A(\mathbf{k}, \omega)$ 。  $T = 7.5$  K で  $k = 0.95k_F$  とした。