

広田の双線形差分方程式について

(高温超伝導物質における反強磁性の考察)

横浜国大工学部 斎藤 革子 (Noriko Saitoh)

1. 序

広田の双線形差分方程式 (又は離散 3 変数戸田格子)

$$\alpha f_n(l+1, m) f_n(l, m+1) + \beta f_n(l, m) f_n(l+1, m+1) + \gamma f_{n+1}(l+1, m) f_{n-1}(l, m+1) = 0$$

(α, β, γ はパラメーター)

は適当な極限操作によって様々な Soliton 方程式に帰結されることが Hirota によって示されている¹⁾。又、KdV-方程式、Toda lattice、sine-Gordon 方程式をはじめとする Kp- 系列の方程式のすべての解によって満たされることが Miwa によって示されている²⁾等、極めて一般的な性質をもつ完全可積分な 3 次元格子系である。

一方この双線形差分方程式の Bäcklund 変換 (BT) はゲージ不変な形に表現することが出来て^{3) 4)}、この結果ゲージ場と波動関数の間の duality という特徴的な性質が明らかにされている。このゲージ不変な形に表現された広田の双線形差分方程式の BT に現われるパラメーターを微小にとると、この系は面間に弱く相互作用する平面

格子系と考えることもできる。

ところで最近Baskaran-Anderson⁵⁾、及びWiegmann⁶⁾、Matui⁷⁾等はHubbard Model に基づいて高温超伝導現象を解析しているが、その中で重要なことは高温超伝導を引き起こす物質に特徴的な2次元反強磁性をゲージ理論として考察する点にある。

以下において示すようにゲージ理論によるHubbard Model の表現は広田の双線形差分方程式のゲージ不変な形式による表現と同様な意味を持っている。更に、広田の双線形差分方程式は先に述べたように高温超伝導物質のもつ面間の弱い相互作用を表現できる。

以上の理由から広田の双線形差分方程式の応用として、高温超伝導物質をHubbard Model で考えることとし、広田の双線形差分方程式とそのゲージ不変な形式を用いて高温超伝導物質の反強磁性的性質の解析を試みる。

2. 広田のBacklund変換とゲージ不変形式

まず、(1)、(2) 式で与えられる線形方程式の組を考える。

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_+ \psi = E_+ \psi \\ \nabla_- \psi = E_- \psi \end{array} \right. \quad (1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_+ \psi = E_+ \psi \\ \nabla_- \psi = E_- \psi \end{array} \right. \quad (2)$$

但し、ここで D_{\pm} を差分演算子

$$D_+ \equiv e^{\partial_x} - 1, \quad D_- \equiv e^{\partial_m} - 1$$

として ∇_{\pm} 、 E_{\pm} は

$$\nabla_+ \equiv U_+ D_+ U_+^{-1}, \quad \nabla_- \equiv U_- D_- U_-^{-1}$$

$$E_+ \equiv \kappa_+ U_- e^{\partial_l + \partial_n} U_-^{-1}, \quad E_- \equiv \kappa_- U_+ e^{\partial_m - \partial_n} U_+^{-1}$$

で与えられる共変差分演算子及び共変昇降演算子である。 κ_{\pm} は定数、 U_{\pm} はゲージ場である。定義から明らかなように、(1)、(2)はゲージ変換

$$\psi(l, m, n) \rightarrow V(l, m, n) \psi(l, m, n), \quad U_{\pm}(l, m, n) \rightarrow V(l, m, n) U_{\pm}(l, m, n)$$

に対して不変である。

(1)、(2)を具体的に書き表わすと

$$U_+(l, m, n) U_+^{-1}(l+1, m, n) \psi(l+1, m, n) - \psi(l, m, n) = \kappa_+ U_-(l, m, n) U_-^{-1}(l+1, m, n+1) \psi(l+1, m, n+1)$$

$$U_-(l, m, n) U_-^{-1}(l, m+1, n) \psi(l, m+1, n) - \psi(l, m, n) = \kappa_- U_+(l, m, n) U_+^{-1}(l, m+1, n-1) \psi(l, m+1, n-1)$$

となり、これは広田のBäcklund変換¹⁾と等価である。定義から明らかなように $[\cdot, \cdot]$ を交換関係として

$$[\nabla_+, E_-] = [\nabla_-, E_+] = 0$$

が成立するので(1)、(2)の可積分条件は

$$[\nabla_+, \nabla_-] = [E_-, E_+] \quad (3)$$

となり、これはゲージ場 U_{\pm} を決める方程式となっている。このとき ψ は $\{ \cdot, \cdot \}$ を反交換関係として、 U が与えられている時

$$\{ \nabla_+, \nabla_- \} \psi = \{ E_-, E_+ \} \psi \quad (4)$$

で与えられる線形方程式の解である。

ここでゲージ条件が

$$U_-(\ell, m, n+1) = U_+(\ell, m, n) \equiv U(\ell, m, n) \quad (5)$$

である場合を考えれば、可積分条件(3)は

$$\frac{U(\ell+1, m, n)U(\ell, m+1, n)}{U(\ell, m, n)U(\ell+1, m+1, n)} - K_+K_- \frac{U(\ell+1, m, n)U(\ell, m+1, n-1)}{U(\ell, m, n)U(\ell+1, m+1, n)} = -\frac{\beta}{\alpha}$$

となる。但し、一般には β/α は n によらない。ここで

$$K_+K_- = -\frac{\beta}{\alpha}$$

とおけば、線形方程式(1)、(2)の可積分条件(3)は U に対する広田の双線形差分方程式に他ならない。

さて、ゲージ条件(5)の下で、(1)、(2)式に於けるゲージ場 U と波動関数 ψ の役目の読み替えを次のように行う。即ち、

$$U(\ell, m, n) \rightarrow \psi', \quad \psi(\ell, m, n) \rightarrow U(\ell, m, n-1)$$

この時新しい共変差分、昇降演算子を

$$\tilde{D}_+ \equiv U(\ell, m, n)(1 - e^{-\partial_m})U^{-1}(\ell, m, n) \equiv U_+ \tilde{D}_+ U_+^{-1}$$

$$\tilde{D}_- \equiv U(\ell, m, n-1)(1 - e^{-\partial_e})U^{-1}(\ell, m, n-1) \equiv U_- \tilde{D}_- U_-^{-1}$$

$$\tilde{E}_+ \equiv -\kappa_- U e^{\partial_n - \partial_m} U^{-1}, \quad \tilde{E}_- \equiv -\kappa_+ U e^{-\partial_n - \partial_e} U^{-1}$$

と定義すると(1)、(2)式は

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{D}_+ \psi' = E_+ \psi' \end{array} \right. \quad (1)'$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{D}_- \psi' = E_- \psi' \end{array} \right. \quad (2)'$$

と(1)、(2)と dual な形に書き表わされる。そして、(1)、(2)に対し

て成立していたこれまでの議論が(1)'、(2)'に対しても成り立つの

で、(1)'、(2)'に対する可積分条件は(1)'、(2)'におけるU、即ち、(1)、(2)における ψ に対する広田の双線形差分方程式であることがわかる。この時 ψ' 即ち(1)、(2)におけるUは線形方程式の解として求められる。

以上述べたように広田の双線形差分方程式にはゲージ不変なBTが付随し、ゲージ場と波動関数のdualityという特徴的な性質が存在して、このことから非線形方程式の解が線形方程式の解として求められる構造が明らかになったが、これを線形BTと呼んでいる。

3. Hubbard Model の広田の双線形差分方程式による考察

先に述べた様な理由によって、以下ではHubbard Model を広田の双線形差分方程式によって考察し、高温超伝導現象を起こす物質の反強磁性的性質を解析することを試みる。

まず、考察する高温超伝導物質として $\text{La}_{2-\delta}\text{M}_\delta\text{CuO}_4$ をとりあげる。ここでMは La_2CuO_4 にdope される+2価の電子価を持つSr、Ba、Ca等である。一方、銅の電子価を X_{Cu} として

$$3(2-\delta) + 2\delta + X_{\text{Cu}} = 8, \quad \text{i. e.}$$

$$X_{\text{Cu}} = 2 + \delta$$

となり δ は銅siteへのholeのdopingを表わす。

$\text{La}_{2-\delta}\text{M}_\delta\text{CuO}_4$ は図Iに示す様な基本構造をしており、その基底状

態は銅siteに2-sublattice構造を持つ反強磁性状態であることが実験的に確かめられている⁸⁾。これにSr、Ba、Ca等をdopeするとCu-O面の間の相互作用が可能となると考えられるが、このような物理的状況を考えながらHubbard Modelを解析する。

一般にHubbard ModelはHubbard Hamiltonian

$$H = - \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ \sigma}} t_{ij\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} + U \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} n_{i,-\sigma}$$

によって与えられる。ここで c_{ij}^{\dagger} は格子点 i にいる spin σ の電子の波動関数、 n_i は数演算子、 $\langle ij \rangle$ は最隣接格子点の組、 t_{ij} はhoppingのパラメーター、 $U (\geq 0)$ はcoulomb斥力、 μ はchemical potentialを表わす。

ここで $U \geq |t|$ の場合に電子の各siteにおける二重占有を排除してeffective Lagrangeanを t^2/U のorderまで評価すると

$$\begin{aligned} L_{\text{eff.}} = & \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} \frac{d}{d\tau} c_{i\sigma} + \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ \sigma}} t_{ij,\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + \mu \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \\ & + \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ \sigma\sigma'}} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} c_{i\sigma'} c_{j\sigma'} + c_{i\sigma'}^{\dagger} c_{i\sigma} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'}) \\ & (\tau = \frac{1}{kT}, \quad J = \frac{t^2}{U}) \end{aligned}$$

となる。

さて考える系とその表現は先にも述べたような La_2CuO_4 の性質を実現するようなものでなければならないから、Model系とその表現として

- ・ no-doping で two-sub-lattice 構造を持つ系を考え
- ・ 波動関数を sub-lattice を特徴付ける部分と sub-lattice に束縛されない spin 部分との積で表わす。即ち、

$$\begin{aligned}
 C_{i\sigma}^+ &= \psi_{iA}^+ U_{i\sigma} & i \in A\text{-sublattice} \\
 &= \psi_{iB}^+ U_{i\sigma} & i \in B\text{-sublattice}
 \end{aligned}$$

と表現するが、この表現の意味は、Baskaran-Anderson および、Wiegmann が用いたのと同じで、その結果、各関数と状態との対応関係は

$U_{\sigma} \sim$ spin 部分

$\psi_A \sim$ (spin) empty at A-sublattice

$\psi_B \sim$ (spin) empty at B-sublattice

となる。

このように波動関数を積表現することによってゲージの自由度が自然に導入されるが、これは広田の双線形差分方程式の BT をゲージ不変形式に表現したときと全く同一の事情によっている。

さてここで少し kinetic term について考察する。

$$\frac{d}{d\tau} (U_{i+} U_{j-}) = 0 \quad (ij \text{ は最隣接格子点})$$

を仮定すると、

$$\begin{aligned}
 (\text{Left.})_{\text{kinetic term}} &= C_{i\sigma}^+ \frac{d}{d\tau} C_{i\sigma} \\
 &= \sum_{i \in A} \psi_{iA}^+ \left(\frac{d}{d\tau} + A_{i\tau} \right) \psi_{iA} + \sum_{j \in B} \psi_{jB}^+ \left(\frac{d}{d\tau} - A_{j\tau} \right) \psi_{jB} \quad (A_{i\tau} \equiv U_{i+} \frac{d}{d\tau} U_{i+}^{-1})
 \end{aligned}$$

となるから、 $\frac{d}{d\tau} (U_{i+} U_{j-}) \sim 0$ のときには ψ_A と ψ_B の間に $A_{i\tau}$

を媒介にして引力が働くことがわかる。

さて、2次元格子の場合に $\frac{d}{dt} C_{i\sigma} = 0$ とすると

$$L_{\text{Anti-Ferro}} = t \sum_{\langle ij \rangle} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} + \mu \sum_{i\sigma} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} + J \text{の項.}$$

今、一般に反強磁性における spin 状態を A-sublattice では +、

B-sublattice では - とすることができる (図 1) から

$$L_{AF} = t \sum_{\langle ij \rangle} \psi_{iA}^{\dagger} U_{i-} U_{j-}^{-1} \psi_{jB} + t \sum_{\langle ij \rangle} \psi_{iB}^{\dagger} U_{i+} U_{j+}^{-1} \psi_{jA} \\ + \mu \sum_{i \in A} \psi_{iA}^{\dagger} \psi_{iA} + \mu \sum_{i \in B} \psi_{iB}^{\dagger} \psi_{iB} + J \text{の項}$$

となる。第 1 項、第 2 項の hopping を図示すると図 2 のようになる。

L_{eff} の第 1 項にある hopping のうち図 3 に対応するものは実現不可能なのでこれに対応する項のパラメータは 0 と採られる。

次に高温超伝導物質に対する Model Lagrangean を考える。 $\text{La}_2\text{-CuO}_4$ の Cu-O 面にある La^{3+} の一部を Sr^{2+} 等で置き換えると、銅 site の電子価が変化する。このことを反映して、Model 系では La^{3+} を Sr^{2+} 等で置き換えた時、Cu-O 面間の spin 交換が可能になると考える。この面間の spin 交換の例を図 4 に示す。doping によって Cu-O 面に hole が dope される場合、同一面内の spin 交換は図 5 に示すように t^2 の order と考えられるから、面間の hopping に対するパラメータを t^2 に比べてかなり大きくとっておけば、これは無視してよいであ

ろう。

以上の考察に基づいて構成された高温超伝導物質の反強磁性に対する Model Lagrangean は $J \sim 0$ とすると

$$\begin{aligned}
 L = & t \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ i \in A}} \psi_{iA}^+ U_i - U_j^{-1} \psi_{jB} + t \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ i \in B}} \psi_{iB}^+ U_i + U_j^{-1} \psi_{jA} \\
 & + \mu \sum_{i \in A} \psi_{iA}^+ \psi_{iA} + \mu \sum_{i \in B} \psi_{iB}^+ \psi_{iB} \\
 & + K_- \sum_{\substack{(ij) \\ i \in A}} \psi_{iA}^+ U_i + U_j^{-1} \psi_{jB} + K_+ \sum_{\substack{(ij) \\ i \in B}} \psi_{iB}^+ U_i - U_j^{-1} \psi_{jA} \quad (6)
 \end{aligned}$$

で与えられる。但し、 $\langle ij \rangle$ は同一面内の最隣接格子点の組 (i, j) は面内の (hopping 可能な) 最隣接格子点の組を表わす。第 5 項、第 6 項に對対応する面間の hopping をそれぞれ図 6、図 7 で表わす。

この Model Lagrangean から導かれる運動方程式は ψ_{iA}^+ 、 ψ_{iB}^+ に関する変分より

$$t \sum_j \nabla_{ij^-} \psi_{jB} + K_- \sum_{j'} E_{ij'^-} \psi_{j'B} + 4t \psi_{iB} + \mu \psi_{iA} = 0$$

及び

$$t \sum_j \nabla_{ij^+} \psi_{jA} + K_+ \sum_{j'} E_{ij'^+} \psi_{j'A} + 4t \psi_{iA} + \mu \psi_{iB} = 0$$

と求められる。但し $j \in$ 同一面の最隣接 site、 $j' \in$ 隣の面の (可能な) 最隣接 site、 ∇_{ij} を i -site から j -site へ向かった方向の微分として

$$\nabla_{\pm j} \equiv U_{i\pm} (e^{\partial_{ij}^{\pm}} - 1) U_{i\pm}^{-1}$$

$$E_{\pm j} \equiv U_{i\mp} e^{\partial_{ij}^{\pm}} U_{i\mp}^{-1}$$

ここで $\psi_{iA} = \psi_{iB} \equiv \psi_i$ 、 $\mu = -4t = 4$ の場合を考えれば

$$\nabla_{\pm} \psi = \kappa_{\pm} E_{\pm} \psi \quad (7)$$

$$(\nabla_{\pm})_{ij} = U_{i\pm} \left[\sum_j (e^{\partial_{ij}^{\pm}} - 1) \right] U_{i\pm}^{-1}$$

$$(E_{\pm})_{ij} = U_{i\mp} \sum_j e^{\partial_{ij}^{\pm}} U_{i\mp}^{-1}$$

が成り立つ。この時

$$[\nabla_+, E_-] = [\nabla_-, E_+] = 0$$

が成り立つので(7) 式の可積分条件は

$$[\nabla_+, \nabla_-] = \kappa_+ \kappa_- [E_+, E_-]$$

となり、この時 ψ は

$$\{\nabla_+, \nabla_-\} \psi = \kappa_+ \kappa_- \{E_+, E_-\} \psi$$

の解である。

ここで特に(6) 式の Lagrangean において下のような制限をつける。

即ち、同一面内の相互作用においては B から A への hopping に対して

$$\sum_{\substack{\langle +j \rangle \\ i \in A, j = i + \hat{m}}} \psi_{iA}^+ U_{i-} U_{j-}^{-1} \psi_{jB} \quad (8-1)$$

(8 図) に制限し、A から B への hopping に対しては

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \psi_{i \in B}^+ U_{i+} U_j^{-1} \psi_{j \in A} \quad (8-2)$$

$$i \in B, j = i + \hat{e}$$

(9 図) のみに制限する。また、面間の hole- 電子相互作用においては、A の hole には下の面から hop してくる場合のうちで

$$\kappa_- \sum_{\langle i,j \rangle} \psi_{i \in A}^+ U_{i+} U_{j+}^{-1} \psi_{j \in B} \quad (8-3)$$

$$i \in A, j = i + \hat{m} - \hat{n}$$

に対応するものに (10 図) に制限し、更に B の hole には上の面から hop してくる場合のうち

$$\kappa_+ \sum_{\langle i,j \rangle} \psi_{i \in B}^+ U_{i-} U_j^{-1} \psi_{j \in A} \quad (8-4)$$

$$i \in B, j = i + \hat{e} + \hat{n}$$

(11 図) に対応するものに制限する。

この上で $\mu = -t = 1$ とおくと運動方程式は

$$\nabla_{\pm} \psi = \kappa_{\pm} E_{\pm} \psi$$

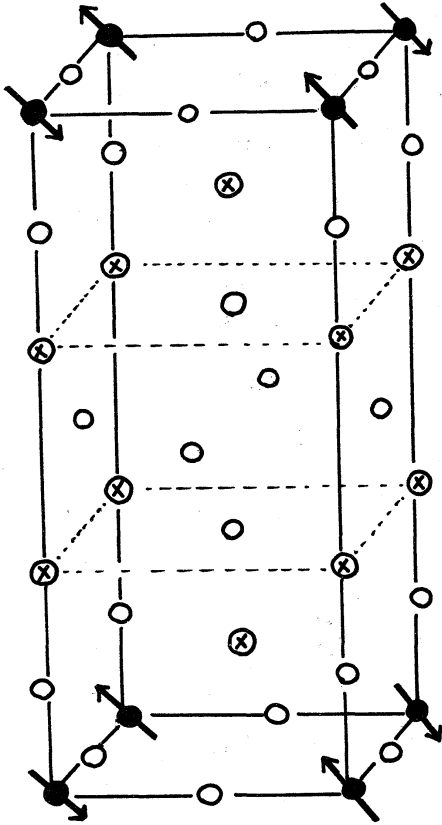
$$\nabla_{\pm} \equiv U_{\pm} (e^{\partial_{\pm}} - 1) U_{\pm}^{-1}$$

$$E_{\pm} \equiv U_{\mp} e^{\partial_{\pm} \pm \partial_n} U_{\mp}^{-1}$$

となり、これは広田の双線形差分方程式のゲージ不変な BT に他ならない。

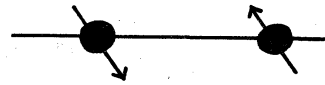
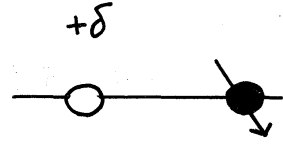
即ち、(8-1) ~ (8-4) の hopping によって特徴付けられる (反強磁性的性質をもつ) 系は広田の双線形差分方程式で表わされる完全可積分系であることが示された。

(図 I)



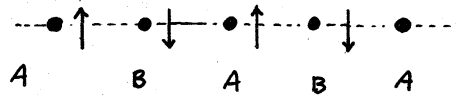
● : Cu^{2+} , ○ : O^{2-} , ⊗ : La^{3+}

doping →

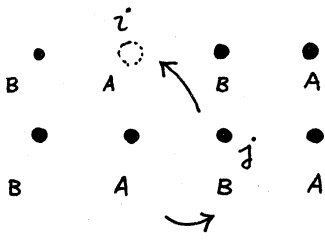


面間相互作用
が可能になる。

(図 1)

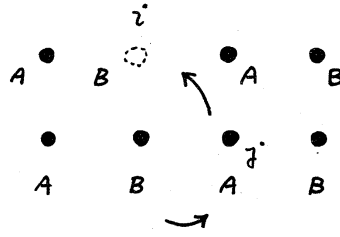


(图 6)



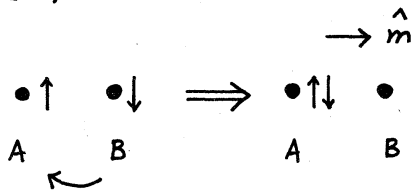
$$\psi_{iA}^+ U_{i+} U_{j+}^{-1} \psi_{jB}$$

(图 7)



$$\psi_{iB}^+ U_{i-} U_{j-}^{-1} \psi_{jA}$$

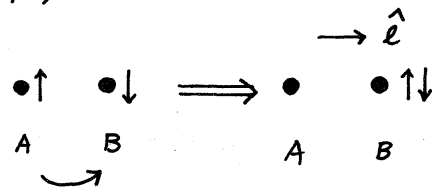
(图 8)



$$\sum_{\langle ij \rangle} \psi_{iA}^+ U_{i-} U_{j-}^{-1} \psi_{jB}$$

$i \in A$
 $j = i + \hat{m}$

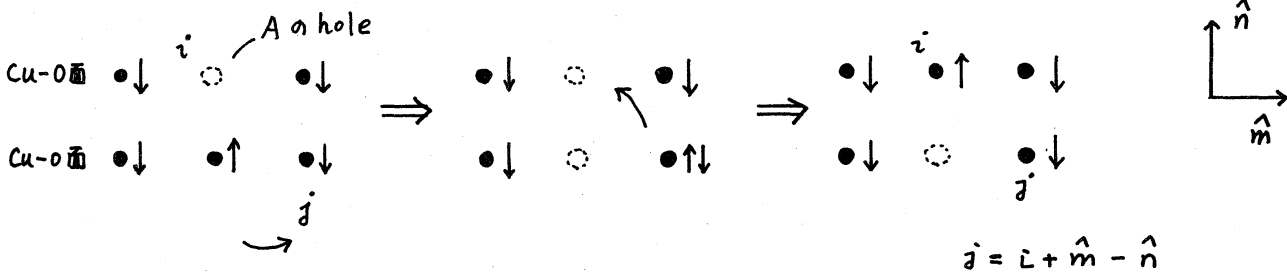
(图 9)



$$\sum_{\langle ij \rangle} \psi_{iB}^+ U_{i+} U_{j+}^{-1} \psi_{jA}$$

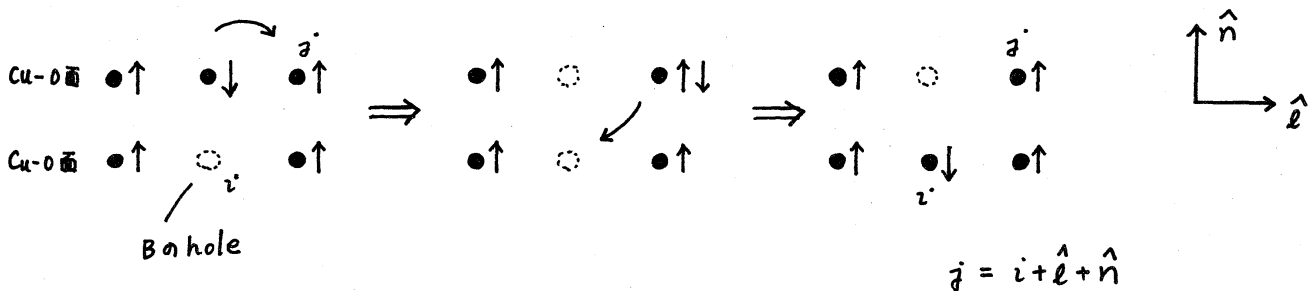
$i \in B$
 $j = i + \hat{l}$

(图 10)



$$j = i + \hat{m} - \hat{n}$$

(图 11)



$$j = i + \hat{l} + \hat{n}$$

References

- 1) R. Hirota; J.P.S.J. 50 (1981) 3785.
- 2) T. Miwa; Proc. Japan Acad. 58A. (1982) 9.
- 3) S. Saito and N. Saitoh; J. Math. Phys. 28 (1987) 1052.
- 4) N. Saitoh and S. Saito; J.P.S.J. 56 (1987) 1664.
- 5) G. Baskaran and P.W. Anderson; Phys. Rev. B 37 (1988)
580
- 6) P.B. Wiegmann; Phys. Rev. Lett. 60 (1988) 821.
- 7) T. Matui; preprints.
- 9) 山田和芳、遠藤康夫; 固体物理 23 (1988) 43.