量子スピン系に於ける長距離秩序について

筑波大学物理学系　久保 健

1。 はじめに

ハイゼンベルク模型で代表される量子スピン系は、磁性体の相転移を研究する際の典型的な模型として50年以上にもわたり様々な方法により研究されてきた。その性質はフラストレイションのあるような複雑な場合を除きほぼ理解されていると言ってよいだろう。しかしその理解も数学的に確かな議論に基ずいている部分は実は少ない。ここでは低温あるいは基底状態での長距離秩序についてこれまで厳密に分かった事を、ごく簡単に紹介しまた今後の発展のために何がいま必要とされているかを述べたいと思う。

量子スピン系で実現されうる秩序状態には通常の磁気秩序のほかにダイマー秩序、カイラル秩序などがあるが、以下では磁気秩序について述べる。磁気秩序は秩序パラメータ

$$M_{\mathbf{Q}}^{(j)} = |\Lambda|^{-1} \sum_{\alpha \in \Lambda} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{Q}\cdot\boldsymbol{\alpha}} S_{\alpha}^{j}$$

によって特徴づけられる。$\mathbf{Q}$ は秩序のもつ波数ベクトル、$|\Lambda|$ は格子点の数である。

$$[m_{\mathbf{Q}}^{(j)}]^2 = \lim_{|\Lambda|\to\infty} \langle (M_{\mathbf{Q}}^{(j)})^2 \rangle > 0 \tag{1}$$

の時 j 成分の長距離秩序 (LRO) が存在すると言う。秩序状態ではまた通常自発的に対称性が破れているが、それはたとえば

$$m_{B}^{(j)} = \lim_{B\to 0+} \lim_{|\Lambda|\to\infty} \langle M_{\mathbf{Q}}^{(j)} \rangle_B > 0 \tag{2}$$

で定義される (極限の順序に注意！)。ここで $\langle \ldots \rangle_B$ は $M_{\mathbf{Q}}^{(j)}$ に働く磁場 B を加えたハミルトニアン $H_B = H - B|\Lambda| M_{\mathbf{Q}}^{(j)}$ での平均値を表す。

古典系や強磁性のように秩序パラメタがハミルトニアンと交換する場合は LRO が存在すれば自発的に対称性が破れている事が一般的に証明されている。それに反し反強磁性のように交換しない場合は、まだ基底状態の場合しか証明がない。 秩序の存在あるいは不在の証明では、$m_{\mathbf{Q}}^{(j)}$ を議論する場合と $m_{B}^{(j)}$ を議論する場合とがある。いまのところそれらは同等ではない。

2。 方法

大ざっぱに言って、正確解、摂動展開、不等式による方法と三通りの方法に分けられる。

1）正確解

正確解はほとんど一次元の模型に限られる。この場合短距離相互作用ならば基底状態でしか秩序は現れない。一次元 S=1/2 XXZ 模型がベーテの方法で解けることはよく知られている。そのほかに任意の S に対してこの方法で解ける模型の系列がある。基底状態だけが正確に分かっている場合として、S=1/2 の Majumdar-Ghosh 模型、S=1 の Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki 模型などが知られている。

2）摂動展開

秩序の無い温度無限大の状態から出発して、βH を摂動として展開する高温展開は広く用いられている。一般に短距離相互作用の系では展開は十分高温では収束することが示せ、高温での秩序の不在が証明できる。秩序の存在を証明しようとする時は、基底状態の一つから出発して、摂動展開を行いその展開の収束を示す事により、始め仮定した基底状態の持っている秩序の存在を示す。摂動展開は一般的にクラスター展開の形でかきあらわされ、クラスター展開の収束性に関する定理が有用である。この方法は基底状態でも、有限温度でも使える。

3）不等式の方法

よく使われてきた方法として a)Bogoliubov 不等式の方法、b)Peierls の方法、c)Infrared Bounds の方法がある。

a)Bogoliubov 不等式の方法

$$|\langle[C,A]\rangle|^2 \leq \frac{\beta}{2}\langle AA^\dagger\rangle\langle[[C,H],C^\dagger]\rangle \tag{3}$$

を用いて自発的な対称性の破れの不在を証明する。この結果として、次元が 2 以下の場合有限温度では連続的対称性の破れが存在しないという Mermin-Wagner の定理が導かれる。上の不等式は $\frac{\beta}{2}\langle AA^\dagger\rangle$ を $\beta(A,A^\dagger)$ で置き換えてもなりたつ。ここで β は温度の逆数、(A,B) は Duhamel 二点関数あるいはカノニカル相関関数と呼ばれる量で

$$(A,B)=\int_0^1\langle e^{\beta xH}Be^{-\beta xH}A\rangle \mathrm{d}x \tag{4}$$

$\beta(A,A^\dagger)$ は感受率 $\chi_{AA^\dagger}$ であり、こうすれば絶対 0 度でも上の不等式が使える。この方法は最近西森らにより用いられた。

b) Peierls の方法。

この方法は今のところ離散的対称性のある場合しか使えない。例として系がイジング的な対称性をもつ時に強磁性の秩序を証明する場合を考えて見よう。いま勝手な$\alpha \neq \beta$という２個のサイトにあるスピンが各々$+z$方向と$-z$方向を向いている状態の実現する確率が十分小さければ、強磁性のＬＲＯが存在する事が示せる。ところで、うえに述べたような状態ではサイトαを含む$+z$方向スピンのクラスターとサイトβを含む$-z$方向スピンのクラスターとを分けるクラスター境界が必ず存在しなければならない。Peierls の方法ではクラスター境界が生ずる確率の上限をもとめ、それによりＬＲＯの存在を証明する。この方法は次に述べる Infrared Bounds の方法が二次元では基底状態しか議論できないのに較べ、有限温度の秩序も議論できる利点があるが、量子系でクラスター境界が生ずる確率の上限を求めるのはなかなか難しく、強磁性にたいしては適用されていない。反強磁性の場合は、後で述べる鏡映正値性を援用してクラスター境界が生ずる確率を評価する事ができる。

c) Infrared Bounds の方法。

この方法は今のところ秩序の存在を示す方法としては最も強力な方法であり、連続的対称性を破る秩序状態に対しても適用できる。揺らぎの上限を評価して、それがが秩序を壊すほど大きくないことを示そうというのがその考え方である。そのためにたとえばつぎの Sum Rule を利用する。

$$\langle S^j_\alpha S^j_{\alpha+\delta}\rangle = \frac{1}{|\Lambda|}\sum_{\mathbf{p}} g^{(j)}_{\mathbf{p}} \cos \mathbf{p}\cdot\delta. \tag{5}$$

ここで$g^{(j)}_{\mathbf{p}} = \langle S^j_{\mathbf{p}} S^j_{-\mathbf{p}}\rangle$ はスピンのフーリエ成分

$$\mathbf{S}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}}\sum_{\alpha\in\Lambda} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{p}\cdot\alpha}\mathbf{S}_\alpha$$

の相関関数である。反強磁性秩序を問題にするならば、$[m^{(j)}_{\mathbf{Q}}]^2 = \lim_{|\Lambda|\to\infty} |\Lambda|^{-1} g^{(j)}_{\mathbf{Q}}$ である事に注意して (5) を書き直すと

$$[m^{(j)}_{\mathbf{Q}}]^2 = -\lim_{|\Lambda|\to\infty}\langle S^j_\alpha S^j_{\alpha+\delta}\rangle - \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^d} g^{(j)}_{\mathbf{p}}[-\cos \mathbf{p}\cdot\delta]. \tag{6}$$

LRO が存在する為には右辺が正ならばよい。そのために$g^{(j)}_{\mathbf{p}}$の上限$\tilde{g}^{(j)}_{\mathbf{p}}$を知る必要がある。Falk-Bruch

不等式と呼ばれる関係を用いると

$$\tilde{g}_{\mathbf{p}}^{(j)} = \frac{1}{2}(B_{\mathbf{p}}^{(j)} C_{\mathbf{p}}^{(j)})^{1/2} \coth[\frac{\beta}{2}(C_{\mathbf{p}}^{(j)} / B_{\mathbf{p}}^{(j)})^{1/2}], \tag{7}$$

が上限である事がわかる。ここで $B_{\mathbf{p}}^{(j)}$、$C_{\mathbf{p}}^{(j)}$ はそれぞれ

$$(S_{\mathbf{p}}^{j}, S_{-\mathbf{p}}^{j}) \leq \beta^{-1} B_{\mathbf{p}}^{(j)} \tag{8}$$

$$\langle [S_{\mathbf{p}}^{j}, [H, S_{-\mathbf{p}}^{j}]] \rangle \leq C_{\mathbf{p}}^{(j)} \tag{9}$$

を満たす量ならばよい。問題は適当な $B_{\mathbf{p}}^{(j)}$、$C_{\mathbf{p}}^{(j)}$ を求める事に帰着する。$C_{\mathbf{p}}^{(j)}$ の方は簡単であるが、$B_{\mathbf{p}}^{(j)}$ を求めることは難しく一般的処方箋が無い。この事がこの方法にとって最大の障害となっている。いまのところ $B_{\mathbf{p}}^{(j)}$ が求まる為には系のハミルトニアンが特別な形をしていて、鏡映正値性と呼ばれる性質が利用できる場合に限られる。この性質は重要なので、少し粗っぽいが、Infrared Bounds の方法で用いる形で簡単に説明しよう。いま考えている状態空間が $\mathcal{H}$ と $\tilde{\mathcal{H}}$ の二つの同型な空間の直和であるとする。A が $\mathcal{H}$ にのみ作用するオペレータの時、$\tilde{A}$ をそれに対応する $\tilde{\mathcal{H}}$ にのみ作用するオペレータとする。このとき不等式

$$Tr[e^{X}]^2 \leq Tr[e^{Y}] Tr[e^{Z}] \tag{10}$$

が成り立つ。ここで

$$\left\{ \begin{array}{l} X = A + \tilde{B} - \sum_k (C_k - \tilde{C}_k - h_k)^2 \\ Y = A + \tilde{A} - \sum_k (C_k - \tilde{C}_k)^2 \\ Z = B + \tilde{B} - \sum_k (C_k - \tilde{C}_k)^2 \end{array} \right.$$

C_k は実オペレータ、h_k は勝手な実数である。ハミルトニアンが X の様に書き表されるとき、(10) を用いて $B_{\mathbf{p}}^{(j)}$ が求められる。これは強磁性模型や三角格子ではうまく行かない。

3。 これまでに分かった事。

これまで最も詳しく調べられてきたのは XXZ 模型である。この系のハミルトニアンは

$$H = -\sum_{<\alpha,\beta>} J_{\alpha\beta}(S_{\alpha}^{x} S_{\beta}^{x} + S_{\alpha}^{y} S_{\beta}^{y} + \Delta S_{\alpha}^{z} S_{\beta}^{z}) \tag{11}$$

で与えられる。S_{α}^{x} は格子点 α にある大きさ S のスピンの x 成分を表す。$J_{\alpha\beta}$ が正の時は強磁性、負の時は反強磁性相互作用をあらわす。$\Delta(\geq 0)$ は相互作用の異方性を表すパラメタで $\Delta = 0$ 、1 、∞ の時、(11) はそれぞれ XY 模型、ハイゼンベルク模型、イジング模型を表している。

1）秩序の不在

前に述べた様に、次元が 2 以下の場合有限温度では連続的対称性の破れが存在しないという事が、極く一般的にわかっている。基底状態では、一次元でも連続的対称性の破れが存在しないと考えられているがまだ証明はない。一次元では Majumdar-Ghosh 模型、Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki 模型などで、通常の磁気秩序が存在しない事がわかっているが、これらの系の基底状態は、別種の秩序状態である。　ところで (7) 式を考えに入れると、$B_{\mathbf{p}}^{(j)}$ がある場合は $\tilde{g}_{\mathbf{p}}^{(j)}$ が存在する事になり、波数 $\mathbf{p}$ をもつ S^j の LRO が存在しない事が容易に言える事に注意して欲しい。。

2）秩序の存在

最もよく調べられているのは、最近接相互作用をもつ hypercubic lattice の場合である。

a) 強磁性模型

$\Delta > 1$ の時 2 次元以上では充分低温で強磁性 LRO が存在する事が証明されている。ハイゼンベルク模型（$\Delta = 1$）の場合基底状態は全スピンが完全に揃った状態だから LRO が存在する事は自明であるが、有限温度では LRO 存在の証明は無い。XY 模型（$\Delta = 0$）の場合は反強磁性模型と同等で、LRO がある。$0 < \Delta < 1$ の場合は基底状態、有限温度共に厳密な結果は無いようである。

b) 反強磁性模型

この場合 Infrared Bounds の方法が非常に有効である。三次元では、任意の異方性のときに十分低温で反強磁性 LRO がある事がわかっている。二次元では、$S = 1/2$ かつ $0.2 < \Delta < 1.67$ の場合を除き基底状態での LRO がしめされている。また Peierls の方法により、二次元で任意の S にたいして十分低温かつ十分Δが大きければ反強磁性 LRO がある事が示されている。残念ながら、最も関心の集まっている二次元の $S = 1/2$ ハイゼンベルク模型ではまだ LRO の存在は確立していない。

反強磁性模型にかんしては、このほかに擬二次元格子上の S=1/2AFH 模型で面間相互作用と面内相互作用の比が 0.16 以上の時 LRO が存在する事が示されており、また蜂の巣格子や相互作用をさらに一般化した XYZ 模型での LRO が証明されている。

c) フラストレイションのある場合

反強磁性模型でもフラストレイションのある場合は、秩序が無くなったり、あるいは目新しい秩序が現れる可能性があり、特に興味深い。よく知られているのは三角格子上の反強磁性模型であるが、この場合これまで厳密に分かっている事はほとんど無いし方法もできていない。この他では次近接相互作用をもつ正方格子上のハイゼンベルク模型が最近興味を集めている。次近接相互作用と最近接相互作用の強さの比を$\lambda(> 0)$ とすると、$\lambda \leq 1/2$ の時は Infrared Bounds の方法が使えて、例えば S=1 では $\lambda < 0.16$ の領域で通常の反強磁性 LRO の存在が証明されている。$\lambda > 1/2$ の時は鏡映正値性が使えないため、なにもわかっていない。

4。これからの課題。

上に述べた事は、これまで分かった事の全てを尽くしてはいないが、主要な結果は挙げた積もりである。これから分かるように、われわれは最も標準的な模型に対してすら、厳密な理解を十分持っているとは言い難い。いまネックになっているのは、鏡映正値性が成り立たない場合に $B_{\mathbf{p}}^{(j)}$ が求められない事である。この為に強磁性、あるいはフラストレイションのある場合にほとんど手がつけられないのである。全く新しい方法論か、あるいは鏡映正値性をもちいないで $B_{\mathbf{p}}^{(j)}$ を得る方法の発見が待望されている。若い新鮮な頭脳のチャレンジに期待したい。

文献はいちいち挙げなかったが、大部分は

久保健、岸達也　：　固体物理　Vol.26, No2, 125 頁 (1991)

に載っているので参照して欲しい。