

フラストレートした量子多体系

東京大学総合文化研究科 堀田 知佐

物性とは、物質中の電子がもつ電荷・スピン・軌道などの自由度が互いに相互作用しあった結果、マクロな(熱力学的)物理量に見出される性質である。その際、系のエネルギー E とエントロピー S の兼ね合いがものを言う。「この二つの熱力学量がどのような性質を持つか」と「ミクロな自由度同士がどのような相互作用をもつか〜つまりどのようなミクロなモデルで系が表されるか」の間を繋ぐのが理論研究の役割といっていだろう。ごく一般の系では、温度が下がるにつれエントロピーが比熱という形で放出され、エネルギーが最も低く、エントロピーがゼロの状態が最終的に極低温で実現する。これが熱力学第三法則である。エントロピーが低い状態とは、自由度が何らかの形で「秩序化」した状態に相当する。ところが、フラストレート系と呼ばれる系では、エントロピーがなかなか放出されず、そのために低エネルギー状態が混沌としてしまう。そこに何らかの新しい物理が生まれる〜特異な揺らぎが発生して、通常とは異なった秩序や「相」が実現したり、特徴的なダイナミクスや応答が得られる場合もある。本稿では、このようなフラストレート系のエッセンスを、イジングモデルやハイゼンベルグモデル、 tV モデルなどのミニマル有効モデルをもとに大掴みに捉え、それをどう理論的に「調理する」かについて解説する。

1 基本的なこと

統計力学で学ぶことの一つに、エントロピー S は示量性 ($\sim O(N)$, N :システムサイズ) の物理量であり、 $\frac{\partial S}{\partial E} = T^{-1} > 0$ なので、 $S(E) \equiv s(E)N$ はエネルギー E の増加関数である、というくだりがある。そのため、どんな系であっても多体の状態密度 $\Omega(E) \propto e^{s(E)N}$ は E とともに指数関数的に増大する (図 1(a))。理想的な状態密度の例として、図 1(b) の正方格子イジングモデルの場合が挙げられる。最低エネルギーでは $\Omega(E) \sim O(1)$ で、 $\ln \Omega(E)$ は上に凸の E の増加関数(熱力学関数の凸性)である。自由エネルギー $F = E - TS$ が最低の状態が各温度で実現するので、低温ほど低エネルギー、低エントロピーの状態が好まれ、 $T = T_c$ で二次相転移を起こして比熱が発散、それより低温で秩序化する。フラストレート系ではこれがどう変わるのだろうか? 図 1(c) の三角格子反強磁性イジングモデルの場合を見てみると、最低エネルギーのところは、状態密度がそれまでの連続曲線が途中で止まった形になっている。この状態数(絶対零度での縮退度)は、エントロピーで見積もると

$S(T=0) = 0.323k_B N$ ^{*1} で全エントロピー $(\ln 2)k_B N$ の半分弱に相当する。比熱の温度依存性を見ても、緩やかなピークをもちながら低温に向けて減少していくだけで何ら異常はみられない。つまり絶対零度まで無秩序の状態を保っているのである。次節で詳しく述べるが、このような 低エネルギー状態の「マクロな縮退」 はフラストレート系の特徴である。

物質中のフラストレーションとはそもそも、局所的な相互作用エネルギーを最も得するような配置を同時に全体が満たすことができない状況をいう。つまり系全体のエネルギーが最低になるような配置は各パーツが少しずつ我慢しあうことで成り立っているため、どこが我慢するかを選び方が $\sim O(N)$ 程度生じて、これがエネルギーレベルの縮退として顕れるのである。

本稿では 2 次元格子上的電子系およびスピン系を取り扱う。一般にはフラストレーションと一口に言っても様々な種類があるが、今回は近接サイト間の 2 体相互作用の幾何学的フラストレーションに着目する。^{*2}

^{*1} Wannier の原著論文 [1] には $0.338k_B N$ とあるがこちらがより正確な見積である。久保健・田中秀数、「磁性」で指摘。

^{*2} フラストレーション系を設計するには、たとえば距離とともに減衰する長距離相互作用を導入する、フラットバンドを作る(量子的フラストレーション)、などいくつかの方法がある。後者は幾何学的フラストレーションと関係している。

ここでフラストレーション以外に「量子効果」というキーワードを簡単に説明しておこう。多くの格子モデルで扱われる相互作用は、「古典的」および「量子的」といわれるものに分けることができる。量子力学では、粒子が実空間において古典力学でのようには局在せず、波として広がった状態にあると捉える。つまり「量子状態」とは、実空間で全自由度がとる配置のスナップショットが、複数パターン重なり合ったものと言える。たとえばスピンの N 個ありそれぞれが $\uparrow, \downarrow$ の二状態を取りうる場合を考えてみよう。 N スピン状態の基底は $|\uparrow\downarrow\uparrow\cdots\downarrow\rangle$ などのように $\Lambda = 2^N$ 通り、スピン配置を並べたものになる。これらを $|n\rangle$ ($n = 1 \sim \Lambda$) と表そう。この基底によるハミルトニアン行列表現は、

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \Psi^\dagger \hat{H} \Psi \\ &= (|1\rangle, |2\rangle, \dots, |\Lambda\rangle) \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots \\ h_{21} & h_{22} & \\ \vdots & & \ddots \\ h_{\Lambda 1} & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1| \\ \langle 2| \\ \vdots \\ \langle \Lambda| \end{pmatrix}, \\ h_{ij} &= \langle i | \hat{H} | j \rangle \end{aligned} \quad (1)$$

となる。もし h_{ij} が対角要素 $i = j$ のみノンゼロならば、各基底はハミルトニアンの固有状態となっている：これは「古典的」状態である。ところがもしハミルトニアンの非対角要素が存在した場合、行列 (h_{ij}) を対角化すること、つまり基底をユニタリ変換して重ね合わせることで固有状態が構築される。これを「量子状態」として捉える。実空間での自由度の配置で基底を張った時に、それらの間がハミルトニアンによって混じる ($i \neq j$ で $h_{ij} \neq 0$) ことが量子効果である。

本稿で扱うハミルトニアンをいくつか紹介しておこう (図2参照)。まず電荷自由度のモデルとして tV モデルを挙げる。

$$\mathcal{H}_{tV} = \sum_{\langle ij \rangle} \left(-t_{ij} c_i^\dagger c_j + \text{H.c.} + V_{ij} n_i n_j \right) \quad (2)$$

$c_j^\dagger / c_j$ は j 番目の格子点での spinless fermion の生成/消滅演算子、 $n_j = c_j^\dagger c_j$ は数演算子である。 t_{ij} , V_{ij} は、 i - j サイト間のは遷移積分とクーロン相互作用である (以後、一様と考え t , V と書く)。このモデルの Fock 空間は 2^N 個の多粒子基底で、fermion がインデックス $\{m\}$ で指定された一連のサイトにいるとして $\prod_{\{m\}} c_m^\dagger |0\rangle$ と表される。 t を含む hopping 項はこれらの基底を混

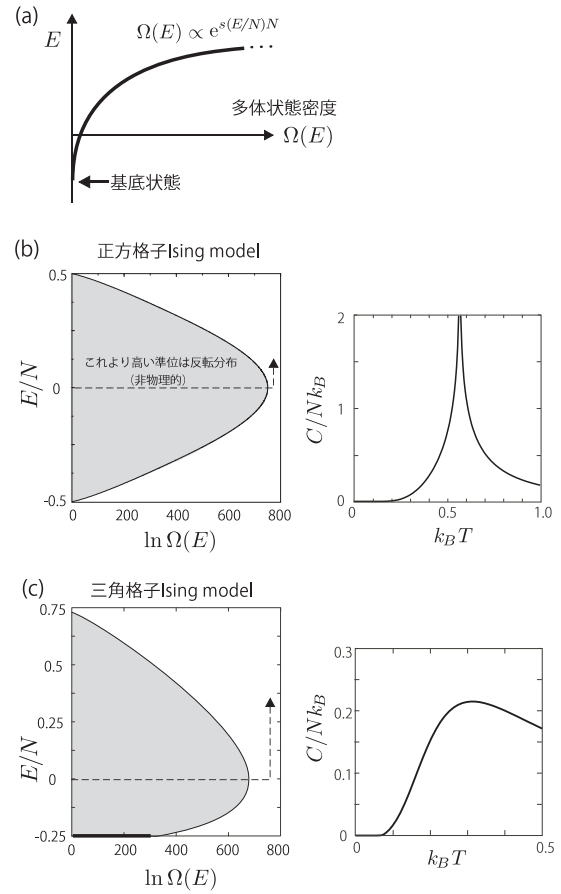


図1 (a) 多体状態密度 $\Omega(E)$ のエネルギー依存性, (b) 正方格子イジングモデルの状態密度と比熱 C . $T_c = 0.5673J$. (c) 同様に三角格子イジングモデルの場合. 式(3)で $J = 0, J_z = 1$ とした。

ぜ、量子的に働く。一方、 V の項を基底に演算しても状態を変えないのでこれは h_{jj} という対角項 (古典的) に相当する。

$S=1/2$ 局在スピン自由度のみを考えたモデルとして XXZ モデルがある。

$$\mathcal{H}_{\text{xxz}} = \sum_{\langle ij \rangle} J (\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y) + J_z \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \quad (3)$$

$\hat{S}_i^\alpha$ は i 番目のスピンの $\alpha = x, y, z$ 成分のスピン演算子、 $J, J_z > 0$ は反強磁性スピン交換相互作用、 J_z/J は相互作用の異方性をあらわす。ここで z 方向を量子化軸にとって $|\uparrow\downarrow\cdots\rangle$ などのスピン配置を $\prod_{\{j\}} S_j^\dagger |0\rangle$ と表し、基底とすることができる。上向きスピンを“仮想的な粒子が存在する”, 下向きスピンを“粒子がない”と解釈すると、 tV モデルの演算子と $n_j - 1/2 \leftrightarrow \hat{S}_j^z$

や $c_j^\dagger/c_j \leftrightarrow \hat{S}_j^{+/-}$ という対応関係が得られる. 実際, スピン自由度に相当する仮想的粒子は, 1 サイトに最大で 1 粒子しか入れられないという **hard core** 条件をもつボゾン (**hard core boson**) である.^{*3} このことを念頭に置くと, ハミルトニアン $\hat{H}$ の XY 項 $\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y = (\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+)/2$ はボゾンがサイト間を遷移する量子的な項, Z 項は tV モデルのクーロン項と同様の古典的な項であることがわかる.

スピンの量子性は S の大きさが小さいほど大きい. そのため式 (3) で $J = J_z$ としてスピンの大きさを $S \rightarrow \infty$ とすると, スピンを古典的なベクトルとみなした古典ハイゼンベルグモデルとなる.

そのほかに横磁場イジングモデルを挙げておこう.

$$\mathcal{H}_{\text{tri}} = \sum_j \Gamma \hat{S}_j^x + \sum_{\langle ij \rangle} J_z \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \quad (4)$$

これはイジングモデルに $\hat{S}_j^x = (\hat{S}_j^+ + \hat{S}_j^-)/2$ という, スピンの z 方向成分を上下にフリップする横磁場が加わったものであり, この横磁場 Γ が量子効果を担う.

これらのハミルトニアンはいわゆる格子上的強相関電子系のミニマルモデルであるといってよい. 我々が念頭に置くのは遷移金属化合物の d 電子系や, 2次元有機 π 電子系など, 各原子や分子上に局在したワニエ関数が電子軌道のよいユニットとして成り立っている系である. これらの系では一般にクーロン相互作用が強く, 電子が量子性を持ちながらも相互作用の効果で各軌道に局在しやすくなっている. このような強相関系のモデルの一つとして最後の節で取り上げる拡張ハバードモデルを紹介しておく.

$$\mathcal{H}_{\text{ext}} = \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(-t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.} + V_{ij} n_i n_j \right) + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (5)$$

電子は同じ軌道/サイトに $\sigma = \uparrow, \downarrow$ の2つの電子が同時に入るとオンサイトクーロン相互作用 U を感じる. また近接サイト間でもクーロン相互作用 V_{ij} をもつ.

$V_{ij} = 0$ の場合がハバード模型である. ここで U が非常に強く, かつ電子数が格子の数と同じ (**half-filling**) 場合には, 一つの軌道あたり電子が1つずつ局在した

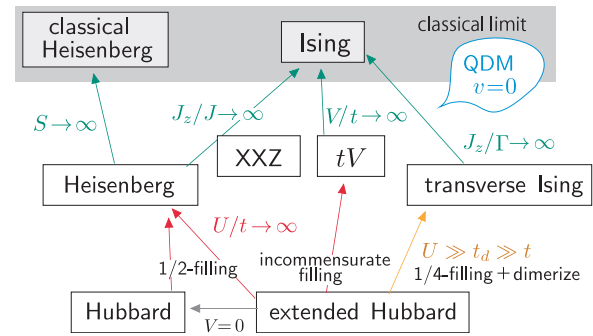


図2 モデル間の相関図.

モット絶縁体となる. モット絶縁体の磁性は各サイトの電子のスピンの自由度が担う. その一番シンプルなハミルトニアンが式 (3) で $J = J_z = 4t^2/U$ としたハイゼンベルグモデルである. しかし一般に物質にはしばしば磁気異方性が存在するため, J_z/J が1からずれることもある. $J_z/J \rightarrow \infty$ の極限では **toy model** の代表格であるイジングモデルが実現する.

一方, **half-filling** からずれたところではたとえ $U \rightarrow \infty$ の場合でも電子は動き回ることができる. この電荷自由度に着目すると, $V_{ij} \neq 0$ もとりいれた tV モデルが実現する. このとき, スピン自由度もちろん存在するが簡単のため無視している.

1/4-filling (1 サイトあたり電子 0.5 個) で, サイトが強い遷移積分 t_d でペアを組んだダイマーが, モット絶縁体を形成しているときには, $U = \infty$ かつ V_{ij} が強い領域で, 電荷がダイマー当たり1つずつ局在しながらダイマーの2サイトを揺らぐため, 横磁場イジングモデルがよい有効模型となる [2].

強相関系で良く扱われるハバードモデルなどのモデル自体も, 固体に内在する多くの自由度の影響を繰り込んで十分単純化された低エネルギー有効モデルだが, 実際にこれら量子多体モデルを真正面から解くことは多くの場合困難である. そこでこれら有効モデルの特定のパラメタ領域において, さらに高エネルギー自由度を繰り込むと上記のようなより扱いやすい模型に変換される. このような変換をどれくらい巧みに行うかによって注目する物理現象を理解できるか否かが決まるといってよい. これについては §3, §4 で述べる.

^{*3} tV モデルと XXZ モデルの違いは粒子が位置を交換する際にフェルミ統計に従うか ボーズ統計に従うか, であり, 1次元系では両者は Jordan-Wigner 変換によって (多くの短距離相互作用ハミルトニアンでは) 両者は厳密に一致する.

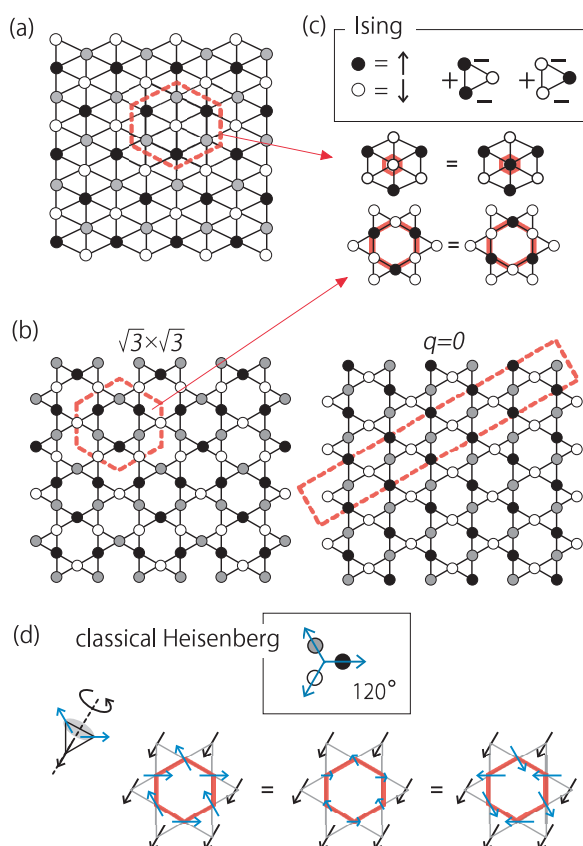


図3 (a) 三角格子の3副格子構造と(b) カゴメ格子の3副格子構造 ($q=0$) および $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造. (c) イジングモデルと (d) 古典ハイゼンベルグモデルにおける縮退に関係した局所磁気構造.

2 古典系におけるエネルギーレベルの縮退

隣接サイト間で古典的な反強磁性相互作用するスピン系を考える. まず1つの三角形を考え, その頂点を黒白灰の三色に塗り分ける. この三角形の辺をつなぎ合わせて作ったのが三角格子, 頂点をつないだのがカゴメ格子である (図3(a),(b)). このとき一様に黒白灰に色分けした構造を“3副格子構造”という.

イジングモデルでは, 1つの三角形あたり 三辺の相互作用エネルギーの和が一番低い $e = -J/4$ となるのは $\uparrow 2$ つに $\downarrow 1$ つの場合, あるいはその逆の場合である. そこで 黒を $\uparrow$, 白を $\downarrow$ とみなそう. 図3(a) で灰をすべて白に塗り替えても黒に塗り替えても, ランダムに白黒を選んでエネルギーは変わらない. 次に格子からある6つの三角からなる六角形を切り出し, 図3(c)のように頂点の灰色を全部白に変えると, もともと白

だった中央のサイトは周りの白3 + 黒3と相互作用しているため, 黒に変えてもエネルギーは変わらない. そのため更に白黒を入れ替える選択肢が生まれる. 同様にカゴメ格子で6個の三角からなる星型構造を切り出したとき, 中央の六角形上に白黒が交互に並んでいる場合には, 白黒を逆にしてもエネルギーは変わらない. このような局所的な spin flip が許されているために基底状態がマクロに縮退する. 三角格子とカゴメ格子それぞれの場合の縮退度はそれぞれ $W \sim e^{0.323N}$, $e^{0.502N}$ [3] で, 後者はヒルベルト空間の次元の半分を超える巨大さである.

次にスピンを3次元のベクトルとみなした古典ハイゼンベルグモデルを見てみよう. 1つの三角形上で三辺の相互作用エネルギーの和が一番低いのは図3(d)にある 120° 構造と呼ばれる配置で $e = -J/3$ である. ところが今回は三角格子ではイジングモデルのような局所的なフリップは許されない. 六角形の中央サイトが周りの白黒のスピンの配置でがっちり固められているからである. それに対して, カゴメ格子のほうはそもそも規則的に3色に塗り分ける方法にも $q=0$, $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ などの選択肢があり, その縮退数は 1.13471^N にも及ぶ [4]. これらはスピンの同じ面に並んでいるので coplaner 状態と呼ばれる. さらに, 破線で囲まれた部分で二種類の向きのスピンの交互に並んでおりそれを取り囲むスピンの残りの1色だった場合, 交互に並んだスピンの磁化している面 (格子の面ではない) を一斉に 2π の範囲で自由に回転させることができる. このように局所的に一斉回転させることのできるスピンの並びは閉曲線を成しており, line defect や weathervane mode などと呼ばれる. マクロに縮退した状態はすべて, 特定の状態から出発してこれらの操作で生成することができる [5].

一般にフラストレートしたユニット, つまり最低エネルギーが一意に定まらないユニットを用意して, カゴメ格子のように頂点共有 (corner sharing) という方法で格子を作ると フラストレートした系が得られることが知られている. 代表例には checkerboard 格子, pyrochlore 格子などがあり, 其々 四角および正四面体をユニットに持つ.

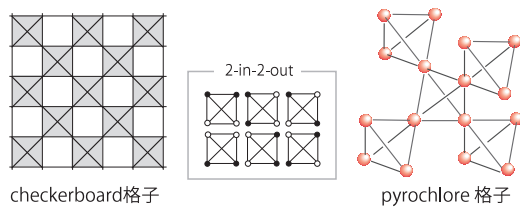


図4 corner sharing で構成されたフラストレート格子.

〈付記〉: corner sharing 構造の縮退度の簡単な見積りを紹介しておこう. n 個の古典スピンからなるユニットが N_u 個集まってできた $N = nN_u/2$ 個のスピン系を考える:

- イジングスピンの場合, ユニットの最低エネルギー状態数 d として縮退度 $W = 2^N(d/2^n)^{N_u}$. カゴメ格子では $n = 3, d = 3$ なので $W = 2^N(3/8)^{2N/3}$ である. checkerboard 格子, pyrochlore 格子は ice rule という規則で知られるように 最低エネルギーを持つのが 2-in-2-out という 2 つのスピンが内向き 残り 2 つが外向きの状態なので $n = 4, d = 6$ で $W = 2^N(6/16)^{N/2}$ である. この ice rule による縮退は氷の残留エントロピー問題で古くから有名である [6]. また pyrochlore 磁性体は, 同様の縮退がイジングスピンによっておこる spin ice 物質として近年活発に研究されている [7].
- スピンが連続値をとる場合, 各スピンの n 個成分をもつとして, ある回転軸を用意し それを基準に全スピンの $N(n-1)$ 個の値を決めると状態が決まる. 一方, q スピンからなるユニット内でエネルギーを最低にする条件数を c 個とすると $f = N(n-1) - cN_u = N_u(q(n-1)/2 - c)$ だけの自由度が基底状態に残る. checkerboard 格子, pyrochlore 格子では $q = 4$ で $c = 3$ (ユニット内の $\sum S_j = 0$ となる条件数) なのでハイゼンベルグモデル $n = 3$ では $f = N_u$ つまりマクロな数の自由度が残る. 一方, カゴメ格子 ($q = 3$) のハイゼンベルグモデルの場合や, pyrochlore 格子 roter (2 次元ベクトル) モデル ($n = 2$) では, それぞれ $c = n - 1 = 3, 2$ とすると $f = 0$ となってしまう. これらの場合, 実際にはユニット間のスピンの関係から拘束条件数は $c < n - 1$ となるために上記に述べたような縮退は残る. そのためこの条件式は正確ではないのだが, フラストレーションの度合いの大まかな目安は与えてくれる. 実際, 同じ古典ハイゼンベルグモデルでも, カゴメ格子では次に述べる order by disorder が起こるのに対し, フラストレーションがより強い pyrochlore 格子では古典スピン液体的な状態を極低温まで保っている [8].

3 order by disorder

一般に縮退といえば, ハミルトニアンと可換な演算子が存在してその演算子に対応する対称性 (主に空間群) によって守られた essential degeneracy であり, そ

の対称性が保たれる限り縮退は守られる. これに対してフラストレート系の縮退は accidental degeneracy に相当するので, 揺らぎに弱い のが特徴である. 揺らぎといえば次節で議論する量子揺らぎ以外に温度揺らぎがある: 絶対零度では縮退した無秩序 (disorder) 状態が有限温度で秩序化 (order) するという一見, 熱力学に反した現象が起こることがある^{*4}. このとき $k_B T = 0$ が特異点となり $k_B T \neq 0$ になった瞬間異なった状態になる. このような現象は “order by disorder” とよばれ Villain によって提唱された [9].

カゴメ格子古典ハイゼンベルグモデルは order by disorder の代表例である [5]. 前節で述べたようにマクロに縮退した基底状態には, defect line による零モードが無数に存在する. その中でもスピンのすべて同じ面内に拘束された特定の coplaner 状態は零モードの数が他の状態に比べて多い. 実際, 図 3(b) の $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 状態では, $N/3$ 個ある六角形がすべて零モードを形成する. この零モードの数は大雑把にいうと揺らぎの強さを反映しており, coplaner 状態は, 有限温度になった途端この揺らぎで結ばれる状態の数が他の基底状態に比べて多い. そのため coplaner 状態が, エントロピーの利得により, $k_B T < 10^{-3}|J|$ の領域で実現することが解析的な見積もりやモンテカルロ計算などで確かめられている [10, 11]. $10^{-3}|J| \leq k_B T \leq 0.1|J|$ においては, 各三角形のスピンは 120° 配置をとるが, 120° スピンの作る面が向く方向は三角形ごとにバラバラになった, いわゆる古典的スピン液体状態が安定で, さらに温度を上げるとようやく系は普通の常磁性へと移行する. 特徴的なのは状態密度で, $\ln \Omega(E)/\Omega(E_0) = \gamma \ln(E - E_0)/|J|$ という 冪がちょうど低温比熱 $C/k_B = \gamma = 11/12$ [5] の値となるような状態がほぼ全域にわたって続く [12].

なお coplaner 状態の磁氣的性質は長年問題になっていた. nematic [5], octapole [10] など 120° スピンの面ベクトルが多重極秩序をもつ節が有力と考えられて

^{*4} 通常はより高温の, エントロピーが高い状態のほうが無秩序となる. しかし, 基底状態よりもエントロピーが高い低エネルギー励起状態が存在する場合, その状態が有限温度で出現しうる. 本稿の古典カゴメハイゼンベルグモデルの例では, マクロな基底状態がいくつかの部分空間に分けられ, その中で特にエントロピーが高い特定の部分空間が有限温度で選ばれて “擬秩序” が成立する.

きたが, 最近になってモーメントの大きさが $1/10$ 程度まで縮んだ $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ の磁気秩序が立っているという結果も報告されている [11]. ^{*5} 古典系でもこのようにデリケートで数値的取り扱いが難しく, ごく最近になっても議論が沸騰する問題はいくつか存在するのである.

4 有効ハミルトニアン

多体系のヒルベルト空間の次元 Λ はシステムサイズ N とともに $\sim \exp(N)$ 的に増大することは §1 で述べた. そのため, 量子多体ハミルトニアン[†]の基底状態および低エネルギー状態を理解するにあたって有限サイズ効果は宿敵である. しかしそもそも, たとえばハバードモデルやハイゼンベルグモデル自体, もとものの物質をモデル化するにあたって状況に応じて大幅な簡単化を行ったものである. それをさらに簡単化して解ける問題に落とすことは自然な成り行きである.

ハミルトニアン $\mathcal{H}$ とその固有値 E , 固有状態 $|\psi\rangle$ を求めたい.

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad |\psi\rangle \in \mathcal{W} \quad (6)$$

これに対して, ヒルベルト空間 $\mathcal{W}$ のうち特定の部分空間 $\mathcal{W}_0$ にのみ属する波動関数 $|\phi\rangle$ について次の関係を満たすような有効ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ を得たい, というのが問題設定である.

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}|\phi\rangle = E|\phi\rangle, \quad |\phi\rangle \in \mathcal{W}_0 \quad (7)$$

ここで, $\mathcal{W}_0$ に射影する演算子 $\mathcal{P}$, およびその直交補空間 $\mathcal{W}_\perp$ への射影演算子 $\mathcal{Q}$ を用意すると, $\mathcal{P} + \mathcal{Q} = 1$ を式 (6) の両辺に作用させて,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{P}|\psi\rangle + \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{Q}|\psi\rangle &= E\mathcal{P}|\psi\rangle \\ \mathcal{Q}\mathcal{H}\mathcal{P}|\psi\rangle + \mathcal{Q}\mathcal{H}\mathcal{Q}|\psi\rangle &= E\mathcal{Q}|\psi\rangle \\ \rightarrow \mathcal{H}_{\text{eff}}|\psi\rangle &= E\mathcal{P}|\psi\rangle \\ \mathcal{H}_{\text{eff}} &= \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{P} + \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{Q} \frac{1}{E - \mathcal{Q}\mathcal{H}\mathcal{Q}} \mathcal{Q}\mathcal{H}\mathcal{P} \end{aligned} \quad (8)$$

^{*5} 注意しておきたいのは, この系は 2 次元で連続対称性をもつので Mermin-Wagner の定理からこれらの“秩序”は真の長距離秩序にはなりえず幕的に減衰する臨界的な“秩序”であることだ. 1 次元の場合と同様, このようなときはどの“秩序”が最も長距離まで相関を伸ばしているかを議論する.

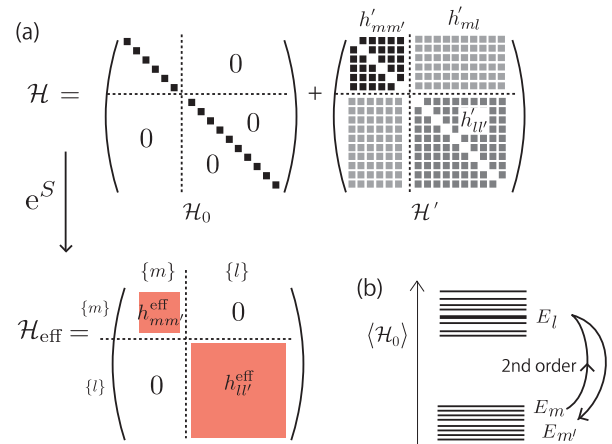


図 5 (a) Schrieffer-Wolff 変換の模式図. (b) 非摂動ハミルトニアンの $\mathcal{W}_0, \mathcal{W}_\perp$ での期待値 $E_m = \langle m|\mathcal{H}_0|m\rangle, E_l = \langle l|\mathcal{H}_0|l\rangle$.

この表式は厳密だが, 未知の E をあらわに含んでいるので実際にこのまま使えるわけではない. そこで近似の出番である. 第二項は, 捨てた空間 $\mathcal{W}_\perp$ からの寄与を繰り込む効果に相当しており, この効果をどれくらいうまく取り込むかで得られる波動関数やエネルギーの精度が決まってくる. 式 (8) の第二項を実効的に $\mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{Q}$ で展開したものに相当する Rayleigh-Schrödinger 摂動論が, 過去の夏の学校でも紹介されているので参照されたい [13]. 摂動論以外にも近似の仕方にはいろいろな種類があり, 特に有限格子系の数値計算ではいろいろな方法論が開発されている.

一方, ハミルトニアン[†]のエルミート性を保持しながら質的には Rayleigh-Schrödinger と同等の結論が得られる摂動論として Schrieffer-Wolff 変換がある [14]. 今回のように $\mathcal{W}_0$ に縮退がある場合には見通しが良い. ハミルトニアンを $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$ のように非摂動項と摂動項に分け, $\mathcal{H}_0|m\rangle = E_m|m\rangle, \mathcal{H}_0|l\rangle = E_l|l\rangle$ となるように $\mathcal{W}_0$ の基底を $\{|m\rangle\}$, $\mathcal{W}_\perp$ の基底を $\{|l\rangle\}$ を選ぶ. これに対して, S をうまく選ぶことによって,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} &= e^{-S} \mathcal{H} e^S, \quad S^\dagger = -S \\ e^S &= 1 + S^{(1)} + \frac{1}{2!} S^{(2)} + \frac{1}{3!} S^{(3)} + \dots \end{aligned} \quad (9)$$

のように $\mathcal{H}$ をユニタリ行列 e^S で正準変換した形, $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ が, $\mathcal{W}_0$ と $\mathcal{W}_\perp$ の間の行列要素 $\langle m|\mathcal{H}_{\text{eff}}|l\rangle = 0$ となるようにできる (図 5). $S^{(n)}$ は $\mathcal{H}'$ の n 次を含む項である. 計算の詳細は省くが, $\mathcal{H}'$ について各次数で $\langle m|\mathcal{H}'^{(n)}|l\rangle = 0$ となるように小さな n から逐次的に

$S^{(n)}$ を求め, それを使って $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(n)}$ を求めると, たとえば 2 次以下の項は以下ようになる: $h_{mm'}^{\text{eff}} = \langle m | \mathcal{H}_{\text{eff}} | m' \rangle$,

$$\begin{aligned} h_{mm'}^{\text{eff}(0)} &= E_m \delta_{mm'} \\ h_{mm'}^{\text{eff}(1)} &= h'_{mm'} \\ h_{mm'}^{\text{eff}(2)} &= \frac{1}{2} \sum_l h'_{ml} h'_{lm'} \left(\frac{1}{E_m - E_l} + \frac{1}{E_{m'} - E_l} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

2 次の項は $|m\rangle \rightarrow |l\rangle \rightarrow |m'\rangle$ のように W_0 に $\mathcal{H}'$ を演算すると $W_\perp$ に遷移してまた戻ってくるプロセスをすべて足し合わせたものである. 注意したいのは $E_m \neq E_{m'}$ でも構わないことであり, $E_l \gg E_m, E_{m'}$ であること (図 5(b) のように W_0 と $W_\perp$ が $\mathcal{H}_0$ についてエネルギー的によく分離していること) が, 摂動が良い近似になる条件である. 3 次以上が登場することは普通の系の場合にはあまりないが, フラストレート系の場合, 高次のリング交換項が特定のループの周りの重要な揺らぎを担うことがある. 得られた有効ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{mm'} |m\rangle h_{mm'}^{\text{eff}} \langle m'| \quad (11)$$

と表せる. しばしば, これと同じ行列表現が同じ空間 W_0 について得られるように, $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ を具体的に新たな有効演算子を導入して表すことが多い. 典型的な例では, ハバードモデルの $U \rightarrow \infty$ 極限での t/U に関する 2 次摂動の有効ハミルトニアンとして, スピン演算子を導入して得られるハイゼンベルグモデルである.

5 量子揺らぎ

§1 で述べたように, 古典的な状態は, 実空間で, 粒子が局在したり, あるいはスピンの配置が一意に定まるような状態である. 量子揺らぎはそれらを混ぜる働きをする. 注意してほしいのは対称性が異なる状態は混成しないこと, 混成の度合いは古典的なエネルギーが近いほど大きいこと, である. フラストレート系でこの揺らぎの効果が特に顕著なのは, マクロな数の状態が縮退, あるいは擬縮退しており, それらが対称性と関係ない縮退であるからである.

ハイゼンベルグモデルなどでよく行われる処方箋としてスピン波理論がある. $S = \infty$ の古典極限から出発して $1/S$ でハミルトニアンを展開することによって量

子揺らぎを取り入れていく. ところがこの方法の場合は, 出発点である古典極限の状態が well defined でなくてはならない. マクロな縮退があるような disorder 状態はよい出発点とはならないのである.

前述の縮退のある摂動論はその点, 非常に有用である. 古典極限の縮退している基底状態全体を W_0 として, 量子揺らぎの項を摂動的に $\mathcal{H}'$ として扱って有効モデルハミルトニアンを導出する例を以下でいくつか取り上げてみる.

5.1 XXZ と tV モデルの強結合理論

§1 の式 (3) で取り上げた三角格子上的 XXZ モデルを考えよう. 出発点は $J/J_z \rightarrow 0$ のイジングモデルで, 基底状態のエネルギーは $J_z N/4$ でマクロに縮退している. 摂動項 $\mathcal{H}' = J \sum_{ij} \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y$ は, (S_i^z, S_j^z) の $(\uparrow, \downarrow) \leftrightarrow (\downarrow, \uparrow)$ という 2 つの状態を混成する. このことから直ちに $h_{mm'}^{\text{eff}(1)}$ のレベルで古典極限の基底状態のうちで total S^z を変えないもの同士が混成することがわかる^{*6}. その結果, t の 1 次で縮退が解け, 古典状態の重ね合わせによって図 6 にあるような supersolid 状態が実現する [15]. これは 1 つの副格子が S^z の対角長距離秩序を持ち, 他の 2 つの副格子が S^x の非対角長距離秩序をもった状態で, 前者が固体, 後者が honeycomb 格子上的液体と読めるので super solid と呼ばれる. supersolid は元来これら 2 種類の秩序が系全体で一様に共存する状態として探索されていたが実際に格子系で見つかったのは 2 つの秩序が空間的に住み分かれた状態であった.

spinless fermion の tV モデルでも統計性が異なれども同様の現象が起こり, 筆者らが pinball liquid と名付けた状態が形成される [16]. このあたりは詳しくは固体物理の解説記事を参照されたい [17]. Fermion を電荷自由度と捉えれば, pinball liquid は絶縁体 (固体) と金属 (液体) が共存した状態とみなせる. tV モデル自体は極限まで電子系を単純化したモデルだが, 最近, これより一段二段と複雑なハバードモデルや 2 軌道金森ハミルトニアンなどでも pinball liquid が実現することも分かっており [18], 現実にその候補物質 AgNiO_2 などが見つかってきている.

^{*6} 数値的に有限サイズ系で W_0 で S^z が等しいすべての状態間が $\mathcal{H}'$ でつながってまじりあうことは筆者も確かめてある.

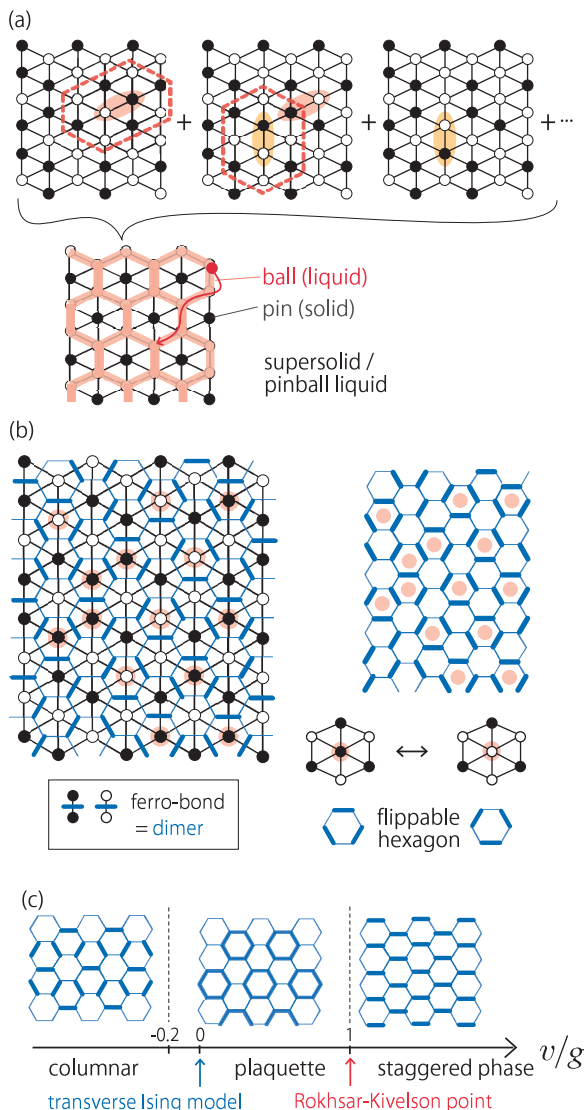


図6 (a) 三角格子上的 XXZ モデル, tV モデルの強結合領域での基底状態 (supersolid, pinball liquid): J/J_z および t/V 1 次の摂動の範囲で, 古典イジングモデルの基底状態をウェイトをかけて重ね合わせたものになっている. (b) 横磁場イジングモデルの強結合領域での基底状態. dual lattice である honeycomb 格子上的 quantum dimer モデルの $v=0$ の場合に相当する. 太線は dimer を示す. (c) QDM の基底状態の相図.

5.2 横磁場イジングモデルと QDM

同じイジングモデルから出発して今度は式 (4) で横磁場を摂動項として加えてみよう. すると, 更に少し面白い状況が生じる. まず, 図 6(b) にあるように dual 格子である honeycomb 格子を三角格子に重ねて描き, 三角格子の各ボンドの両端が同じ色の

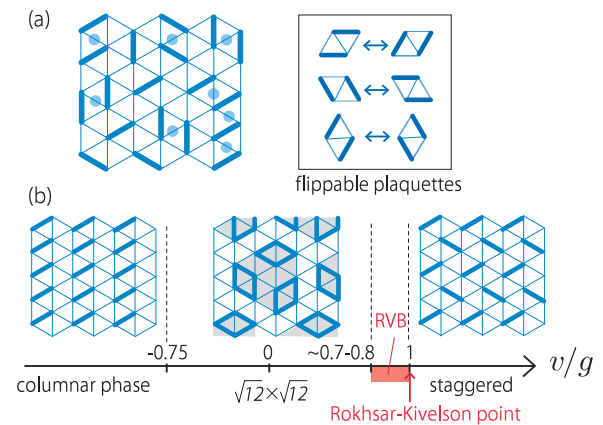


図7 (a) 三角格子上の QDM の (a) 模式図と (b) 基底状態の相図. 丸印は flippable plaquette を示す.

場合 (ferro bond) にそれと直交する honeycomb bond に "dimer" と呼ばれる太い線を置いてみよう. イジングモデルの基底状態ではすべての三角形の頂点が黒黒白, 黒白白の組み合わせのいずれかなので, honeycomb 格子の各頂点から必ず 1 つの dimer が出ている. このような配置を "dimer covering" と呼ぶ. ここに横磁場項 $\Gamma(S_i^+ + S_i^-)/2$ を加えると Γ/J の一次でこれらの dimer covering 状態が混じり合う. 具体的には三角格子の六角ユニットを取り出したとき周囲の 6 サイトが黒白交互に 3 つずつからなる場合, 中央のサイトの色を Γ 項によって黒 $\leftrightarrow$ 白のようにひっくり返せる. これは dimer の言葉で言うと honeycomb 格子のユニット六角形の辺に沿って dimer が 1 つおきに並んでいる場合にそれらを $\pi/6$ だけ回転させることに相当する. このような六角形を "flippable hexagon" という. 実はこのような dimer を主役にしたモデルは Quantum dimer model (QDM) と呼ばれ [19], 以下のようなハミルトニアンで表される.

$$\mathcal{H}_{\text{qdm}} = \sum_{\langle ij \rangle} -g \left(|\uparrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\uparrow| + \text{H.c.} \right) + v \left(|\uparrow\uparrow\rangle\langle\downarrow\downarrow| + |\downarrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\uparrow| \right) \quad (12)$$

flippable hexagon の運動エネルギーが g で, 相互作用エネルギーが v である. $v=0$ の場合が強結合の横磁場イジングモデルに相当する. honeycomb 格子 QDM の基底状態はモンテカルロ計算で調べられており 図 6(c) のような相図が得られている [20]: columnar, plaquette, staggered という 3 つの相はい

ずれも dimer が空間対称性を破った長距離秩序状態である。plaquette 状態は六角形上でダイマーが混成した unit が、並進対称性を破って valence bond crystal(VBC) を作った状態である。これを横磁場イジングモデルに戻すと bond order と呼ばれる、有限温度まで広がった相に対応する。

次に QDM を nonbipartite な格子に拡張することを考えよう。その代表例が三角格子である。ハミルトニアンは次式で与えられ、dimer covering のルールは前と同じである (図 7(a))。

$$\mathcal{H}_{\text{qdm}} = \sum_{\square} -g \left(|\square\rangle\langle\square| + \text{H.c.} \right) + v \left(|\square\rangle\langle\square| + |\square\rangle\langle\square| \right) \quad (13)$$

今回は plaquette(平行四辺形) 上に dimer を交互に並べた flippable なユニットが g で量子的に揺らぐ。相図を honeycomb 格子の場合と比べてみると、 $g \lesssim v$ あたりに short range RVB 相が出現しているのかわかるだろう [21]。この RVB 相は理論モデルで同定されている、数少ない、トポロジカル秩序相 (スピン液体) の一つである。QDM はもともと正方格子において Rokhsar-Kivelson (RK) point $v = g$ で RVB 相を実現するモデルとして提案された [19]。しかし正方格子や honeycomb 格子のような bipartite 格子の場合には 1 点でしか RVB 相が出なかったため他の格子での探索が進んだのである。このことを念頭に少し詳しく QDM を見てみよう [21]。

まず、RK point $v = g$ では、すべての dimer covering のパターンを同じ重みで足し合わせた RK 状態が厳密な基底状態となっている。このことは、系を孤立した plaquette の集合とみなして議論すると見通しが良い: まず flippable plaquette の総数を N_{fl} とする。nonflippable plaquette は $\mathcal{H}_{\text{qdm}}$ を演算すると消えてしまうのでエネルギーは零、flippable plaquette はポテンシャルエネルギー v 、運動エネルギーを高々 $-g$ だけもつので、基底エネルギーは $E_0 \geq \min(0, N_{fl}(v - g))$ と評価される。一方、RK 状態 $|\text{RK}\rangle = N_c^{-1/2} \sum_{c=1}^{N_c} |c\rangle$ ($|c\rangle$ は dimer covering 配置、全部で N_c 個存在する) のように書けるのでそのエネルギーは $E_{\text{RK}} = \langle \text{RK} | \mathcal{H}_{\text{qdm}} | \text{RK} \rangle = (v - g) \langle \hat{n}_{fl} \rangle$ と表せる ($\hat{n}_{fl}$ は flippable hexagon の数演算子)。RK

point では E_{RK} も基底エネルギーの下限 E_0 も零となるので $|\text{RK}\rangle$ が基底状態となるのである。もともと Anderson-Fazekas によって提案された RVB、つまり Resonating valence bond 状態は [22]、スピン液体という概念の原型で、ざっくりいうと spin singlet を dimer とみなしたとき、それが格子を動き回るような形で量子力学的に揺らいだ状態である。この概念がより具体性を帯びたのがフラストレーション系の理論研究が進んだ 2000 年代であり、実際、RK 状態はまさに最初に提案された概念通りの状態になっている。

Staggered 状態は $N_{fl} = 0$ なので $v > g$ でエネルギーが零の基底状態となることは上記の議論から自明である。一方最も左側の columnar 状態については $v/g = -\infty$ の極限から出発しよう: 極限で最低エネルギーをもつのは様々な古典的な maximally flippable な ($\langle \hat{n}_{fl}(c) \rangle$ が最大の) dimer 配置 $\{c\}$ で $\mathcal{O}(e^L)$ 程度縮退している。そのうち $g/v (\ll 1)$ の 4 次および 6 次の摂動で irregular な配置はエネルギーが下がりきらず、columnar 状態が選ばれる^{*7}。これは量子揺らぎによる order by disorder の一例である。

5.3 カゴメ格子上のスピン系

それでは長らく探索されたスピン液体が実現した三角格子 QDM は、どんな系の低エネルギー有効モデルになっているのだろうか? そこで再びカゴメ格子に戻り、XXZ モデルを考えよう [23]。最近接の相互作用 J 以外に各六角形内の次近接および J' 、2 つおきの J'' という相互作用を加え、 $J = J' = J''$ および $J_z = J'_z = J''_z$ とするとカゴメの h 番目の六角形の 6 つのスピンの総和を $\hat{S}_h$ として $\mathcal{H} = \sum_{h=\text{hex}} J_z \hat{S}_h^2 + J(\hat{S}_h^2 + \hat{S}_h^2) + \text{const}$ のように表すことができる。§2 でみたように縮退した状態をもつユニットを corner sharing で組み合わせた格子は高い縮退度をもつ。今回のユニットはカゴメの六角形で、 $J_z/J \rightarrow \infty$ の古典極限で $S_h^z = 0$ (白 3 黒 3) の 20 通りの状態が最低エネルギーをもつ。そこで、格子全体の古典的基底状態を、今度は六角形の中心を結んでできる三角格子 (図 8(a)) で表してみよう。三角

^{*7} やる気のある読者は $|m\rangle \rightarrow |l\rangle \rightarrow |l'\rangle \rightarrow |l\rangle \rightarrow |m\rangle$ という 4 次摂動のプロセスのエネルギー利得 $h'_{ml}h'_{ll'}h'_{l'l}h'_{lm}/\prod_{s=l,l'}(\epsilon_m - \epsilon_s)$ を columnar 状態および irregular な配置の一例で評価してみよう。

格子の各 bond が元の格子点の白 ($\downarrow$) をよぎるときその bond に dimer を置く操作をすると, 前述の QDM での dimer covering とは異なった dimer 配置が得られる (図 8(b)): 今回のルールは 三角形の各サイトから 3 つの **dimer bond** が出ていることである. 次に J/J_z による摂動に移ろう: 有意な最低次のプロセスとして 2 次で縮退した状態を混ざる ring exchange 項がある. 図 8(b) の bowtie の 4 つの頂点のスピンを考え, J あるいは J' の項を 2 回演算するとスピンが交互に並んでいるときそれら 4 つが巡回して (ring exchange) 別の古典的基底状態にうつる. 有効ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{ring}} = -J_{\text{ring}} \sum_{\text{bowtie}} (S_1^+ S_2^- S_3^+ S_4^- + \text{H.c.})$$

$$J_{\text{ring}} = 2(J^2 + J'^2)/J_z \quad (14)$$

であり, これは QDM で dimer を flip する操作そのものである. つまりこの拡張カゴメ XXZ モデルは三角格子 QDM の $\nu = 0$ の場合に相当する. 但し dimer covering のパターンが前節の場合と異なるので, 式 (13) が演算するヒルベルト空間の構成が変わることからこれを extended QDM と呼ぼう. 基本的には extended QDM も QDM と同様の基底状態を持つと考えられている [23].

ちなみに, 拡張カゴメ XXZ モデルに磁場 H をかけると $-H \sum_j \hat{S}_j^z$ という Zeeman 項が生じるので磁場の強さに応じて系の磁化 $M = \sum_j S_j^z$ の値が変化する. 特に $M/M_s = 1/3, 2/3$ (全スピンが上向きの場合の磁化 $M_s = N/2$) の場合は六角形の 6 スピンを $\uparrow\downarrow=4:2$, および $5:1$ の割合で割り振った状態に相当する. これらの状態は三角格子 QDM の異なったヒルベルト空間にマップされる: 後者は三角格子 1 サイトあたり 1 dimer を割り振った通常の dimer covering が実現する. 一方, 前者は 2dimer/1 サイトなので図 8(c) のように dimer をつないだ閉曲線が交わることなく格子を覆いつくす "fully packed loop covering" と呼ばれる dimer 配置となる. そこに $\mathcal{H}_{\text{ring}}$ を作用させると loop が 2 つつながって大きな 1 つの loop になる, loop が融合して 1 つになるなど, loop が構造を変えながら格子空間を動き回るといった状況が生じる [24].

$M/M_s = 0, 1/3, 2/3$ のいずれの場合も QDM や extended QDM の $\nu = 0$ で実現するのは valence bond crystal 相である. 実際, スピン液体を得るためには

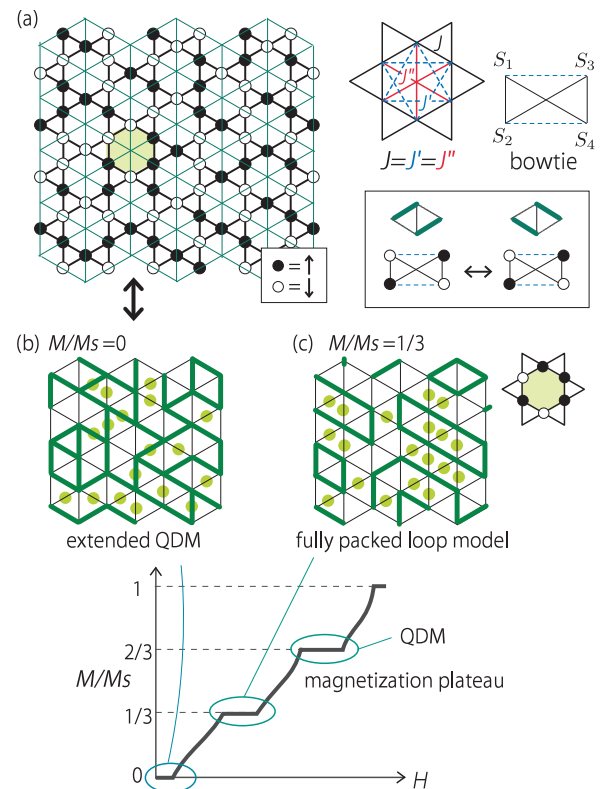


図 8 (a) カゴメ格子 XXZ モデルの古典的基底状態の例と, (b) 対応する三角格子 QDM の dimer 配置. bowtie 上の 2 次のスピントリッププロセスが dimer flip に相当する. (c) 磁場 H をかけたときに現れる $1/3$ 磁化プラトー相に相当する fully packed loop model.

QDM の相互作用 ν 項を元のハミルトニアンに戻して得られる やや複雑で非現実的な項を加えねばならない. もともと $J = J' = J''$ の設定自体, かなり非現実的な設定なので, QDM におけるスピン液体相を現実的なモデルで得るにはまだまだ相当の努力が必要ということになる. ちなみに, $J' = J'' = 0$ のカゴメ格子ハイゼンベルグモデルはスピン液体の有力候補であり, その低エネルギー有効モデルとして QDM より少し複雑な dimer model が盛んに研究されている. その結果, 有効 dimer model がスピン液体相と非常に近いパラメタ領域にいることも報告されている [25]. またハイゼンベルグモデル自体も J' を入れるとスピン液体が安定化するという結果もある [26].

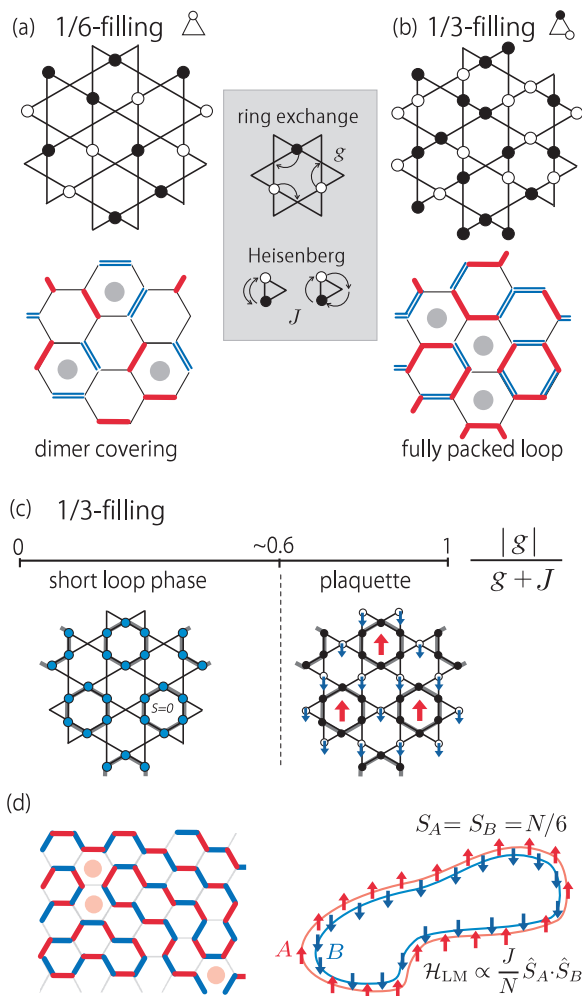


図9 カゴメ格子拡張ハバードモデルの $U \gg V \gg t$ 領域における有効モデル. (a) 1/6- (b) 1/3-filling の古典的基底状態の例. dimer model の太線は $\uparrow$, 二重線は $\downarrow$ の電子をあらわす. (c) 1/3-filling の基底状態の相図 [29]. (d) $g \gg J$ における fully packed loop 上の動的 AB 副格子構造. 印をつけられた flippable hexagon を回転させると, loop の組み換えが起こる.

5.4 カゴメ格子上の電子系

ここまでは量子スピン系の話が多かったが, 電子系でもこのような物理が生じる例を, 筆者の仕事も交えて紹介したい. カゴメ格子上で, 式 (5) の拡張ハバードモデルの $U/t \rightarrow \infty$, $U \gg V$ の強結合極限 (古典極限) を考える. 電子密度が $\rho = N_e/N = 1/3$ 及び $2/3$ (1/6- 及び 1/3-filling) の場合, 電子は三角形 1 個あたり各々 1 及び 2 電子が, 二重占有なしで存在する, という拘束条件が最低エネルギー状態に課せられる. 前か

ら何度も述べたようにこれらはマクロに縮退している.

まず図 9(a) の 1/6-filling の場合を見てみよう. dual の honeycomb 格子をつくり, カゴメで電子がいるサイトを honeycomb dimer bond でおきかえると, QDM で出てきた dimer covering 構造が得られる. $t/U \ll 1$ の摂動を考えると, dimer covering のマクロな縮退を解くプロセスは, 電荷がカゴメ格子の六角形に 1 つおきに並んでいるときに隣のサイトに順次飛び移る 3 次の ring exchange 項である. これは dimer flip 項に相当し, 式 (12) の第一項で $g = 6t^3/V^2$ としたものである. そのため電荷自由度は QDM の $v=0$ における plaquette VBC に相当する長距離秩序を形成する. ここで各電荷自由度には, スピンがのっかっていることも忘れてはならない. dimer もスピンの $\uparrow, \downarrow$ に対応して二種類に塗り分けておく. しかし, 元々この摂動の範囲ではスピン間の直接の交換相互作用はないわけだから一見ただの free spin の常磁性が起こりそうだ. ところが flippable hexagon の存在がヒルベルト空間を混ぜこぜにするため, 長岡強磁性と同じ機構で kinetic ferromagnetism が生じることがわかっている [28].

1/3-filling の場合の電子配置は (図 9(b)), honeycomb 格子の fully packed loop 構造にマップされる [29]. loop はすべて閉曲線を成し, 互いに交わらない. loop がないところ (hole 描像に相当) に着目するとこれは dimer covering と同じ構造になっているわけなので, 結局この場合も QDM の $v=0$ と同様の, g による電荷のダイナミクスが実現する. ところが今回は電荷が loop 上で隣同士になるので ring exchange 以外にハイゼンベルグ相互作用 $J = \frac{2t^2}{U-V} + \frac{2t^3}{V^2}$ が顕わに存在する. この J には, 通常の 2 次摂動のスピン交換プロセス以外に, 三角形の空いているサイトを利用した 3 次のプロセスも加わっていることに留意したい. つまり U と V の大きさの具合, および t の符号に応じて J は負 (強磁性的) にもなりうるのである.

そこで 1/3-filling の場合はスピンの相互作用 J と電荷のゆらぎ g の両方を考えねばならない. 図 9(c) にあるように J と g の大小で系の基底状態は 2 つに分けられる: $g=0$ 側ではじまる short loop 相とはそもそも電荷が動き回れない/動きづらい場合に生じる. このときハイゼンベルグ J 項によってスピンは反強磁性

的相関を loop 上で発達させる. 系全体で loop を全部合わせた長さはボンド $N/3$ 本分で一定値なので, これをどんな長さの何個の独立な loop に分けるかを考えよう. そのために loop 上のスピン系の 1 ボンド当たりのエネルギーを知る必要がある. ~ 1 次元の有限サイズ L のハイゼンベルグスピン鎖のエネルギー $E(L)$ は L の関数として厳密に求まっている. そして L が短いほど $E(L)/L$ が低いのである. 今回許される配置で最も短い loop は 6 ボンドからなるものであり, 実際 J によって電荷が図のように秩序化し, 有限の電荷ギャップを生じる. このときスピンは六角形内で短距離反強磁性相関を発達させた $S = 0$ の状態にある. これが short loop phase である.

g が大きいときは もっと奇妙な状況が生まれる. $J = 0$ において loop は g によって格子を動き回って分離したり融合したりしている. この loop は動的な 2 つの副格子 AB に分けられる. 動的とは loop が組み変わっても常に各 loop 内で ABAB... という構造が保たれるという意味であり, ある特定の bond に着目してもこの bond は g に応じて A にも B にも, 電荷がない状態にもなりうる. loop の dynamics によって A と B が混ざることはないので, A の運動は B と独立に考えられる. その結果, 其々の副格子が kinetic ferromagnetism の機構でスピンを揃えることになる. $\sim 1/6$ -filling 系が二つ合わさって loop を作っていると思えばイメージしやすいかもしれない. これらの g によって生じた二つの巨大な副格子スピンの J によって相互作用して 反強磁性長距離秩序を形成しているのである. loop が動き回った結果 plaquette VBC 構造ができるのだが, plaquette 上には A 副格子の $\uparrow$ スピンが, そのまわりに B 副格子の $\downarrow$ が配置したような構造をとっている. 一見ただの磁気秩序のようだがその背後にはフラストレーション系ならではの電荷のダイナミクスがあるのである. このように, g と J の大小の両側の領域でそれぞれ, スピンと電荷の自由度がフラストレーションによって絡み合って互いに影響を及ぼしあう事態が, 何の変哲もない拡張ハバードモデルで起こっていること自体ちょっと不思議なことではないだろうか.

6 おわりに

以上駆け足で, 物性理論研究でよく顔を出す横磁場イジングモデル, XXZ モデル, 拡張ハバードモデルなどがフラストレートした格子の上に乗ったときに多彩な状態が得られる様を紹介してきた. 本稿で一貫して行った処方箋は, 強結合 (古典) 極限のマクロに縮退した低エネルギー状態から出発して, 低エネルギー自由度のみを取り出して量子揺らぎの効果を摂動で取り入れ, 有効モデルを構築する, というものである. そこで新たな形をとった自由度が動きまわり, 重ね合わさって order by disorder による nontrivial な秩序や, スピン液体のような量子力学的な無秩序状態を形成する. 見ての通り 様々なモデルは互いに密につながっており, あるモデルで得られる描像が他のモデルで, 一見雲をつかむようだった量子多体状態の性質を浮き彫りにしてくれる.

これらの研究の蓄積は, 量子力学や多体問題といった基本的な物理を実地で教えてくれるのだがどのようなトピックスでもそうであるように, すでに解説に書かれているような話の多くは既に過去の話である (今からこのような研究を始めようと思っただけではない!). それではフラストレート系に残っている大きな問題とは何だろうか? すぐ念頭にあがることの一つは 本稿でも紹介したスピン液体相の同定の方法論, および現実的なスピン液体相を発見することである. こちらも 2000 年代に入ってから相当研究が進んではいるが, その一角であるトポロジカル秩序相 (本稿でてきた QDM の RVB 相もその一つで, 分数量子ホール効果と同じクラスの状態である) を同定する方法がいくつか提案されたものの (例えば [26, 30] など), まだ議論は沸騰しており その全体像はまだわかっていない. そもそもトポロジカル秩序というものはいわゆる秩序パラメタのような熱力学量で同定されるものではなく (比熱や磁化率などの熱力学量の異常で相転移が同定されるものではなく) 量子力学ならではの波動関数系全体にわたる非局所構造によって特徴づけられたものである. そのつかめるようでつかめなところどころが面白いところではあるのだが, それだけに 多くの努力が今後も求められていることは間違いないだろう. 物性物理の概念は, 実験で証明されて初めてそれが

現実の物理として受け入れられる。だからこそ、実験的なアプローチが困難なこうした問題に対しても、toy model における解析で終わるのではなく、現実実験で観測できるような「物理量」は存在するのか？存在するならばそれをどうやって探せばよいか？を常に念頭におきながら理論を展開したいものである。

参考文献

- [1] H. Wannier, Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
- [2] C. Hotta, Phys. Rev. B **82**, 241104R (2010).
- [3] K. Kano and S. Naya, Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
- [4] R. J. Baxter, J. Math. Phys. **11**, 784 (1970).
- [5] J. T. Chalker, P. C. W. Holdsworth, E. F. Shender Phys. Rev. Lett. **68**, 855 (1992).
- [6] J. D. Bernal and R. H. Fowler, J. Chem. Phys. **1**, 515 (1933); L. Pauling, J. Am. Chem. Soc. **27**, 2680 (1935).
- [7] 例えば T. Fennell, *et al.*, Science **326**, 415 (2009).
- [8] R. Moessner, J. T. Chalker, Phys. Rev. B **58**, 12049 (1998)
- [9] J. Villain *et al.*, J. Phys. (Paris) **41**, 1263 (1980).
- [10] M. E. Zhitomirsky, Phys. Rev. B **78**, 094423 (2008).
- [11] G.-W. Chern, R. Moessner, Phys. Rev. Lett. **110**, 077201 (2013).
- [12] S. Schnabel, D. P. Landau, Phys. Rev. B **86**, 014413 (2012).
- [13] 倉本 義夫, 物性研究 **87**(5) 727(2007).
- [14] J. R. Schrieffer, P. A. Wolff, Phys. Rev. **149**, 491 (1966).
- [15] S. Wessel, M. Troyer, Phys. Rev. Lett. **95**, 127205 (2005); D. Heidarian, K. Damle, *ibid.* **95**, 127206 (2005); R. G. Melko, A. Paramekanti, A. A. Burkov, A. Vishwanath, D. N. Sheng, L. Balents, *ibid.* **95**, 127207 (2005).
- [16] C. Hotta, N. Furukawa, Phys. Rev. B **74**, 193107 (2006).
- [17] 堀田 知佐, 古川 信夫, 固体物理 **45**, 255 (2010); C. Hotta, Crystals **2**, 1155 (2012).
- [18] L. Cano-Cortés, J. Merino, S. Fratini, Phys. Rev. Lett. **105**, 036405 (2010) ; A. Ralko, J. Merino, S. Fratini, Phys. Rev. B **91**, 165139 (2015).
- [19] D. S. Rokhsar and S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **61**, 2376 (1988).
- [20] R. Moessner, S. L. Sondhi, P. Chandra, Phys. Rev. B **64**, 144416 (2001).
- [21] R. Moessner, S. L. Sondhi, Phys. Rev. Lett. **86**, 1881 (2001).
- [22] P. W. Anderson, Mater. Res. Bull. **8**, 153 (1973); P. Fazekas and P. W. Anderson, Philos. Mag. **30**, 423 (1974).
- [23] L. Balents, M. P. A. Fisher, and S. M. Girvin, Phys. Rev. B **65**, 224412 (2002).
- [24] X. Plat, F. Alet, S. Capponi, K. Totsuka, Phys. Rev. B **92**, 174402 (2015).
- [25] 例えば, D. Poilblanc, M. Mambrini, D. Schwandt, Phys. Rev. B **81**, 180402R (2010).
- [26] H.-C. Jiang, Z. Wang, L. Balents, Nature Phys. **8**, 902 (2012).
- [27] S. S. Gong, W. Zhu and D. N. Sheng, Sci. Rep. **4**, 6317 (2014).
- [28] F. Pollmann, P. Fulde, K. Shtengel, Phys. Rev. Lett. **100**, 136404 (2008).
- [29] F. Pollmann, K. Roychowdhury, C. Hotta, K. Penc, Phys. Rev. B **90**, 035118 (2014).
- [30] M. Levin, X-G. Wen, Phys. Rev. Lett. **96**, 110405 (2006); A. Kitaev, J. Preskill, Phys. Rev. Lett. **96**, 110404 (2006).