

量子スピン系の理論

Haldane Gap, Disordered Ground States, Quantum Spin Liquid and All That in Quantum Spin Systems

(1992 年 4 月 6 日受理)

田崎 晴明

(たざき はるあき)

171 豊島区目白 学習院大学 理学部

tasaki@tkyvax.phys.s.u-tokyo.ac.jp

Hal Tasaki

Department of Physics, Gakushuin University

Mejiro, Toshima-ku, Tokyo 171

1 はじめに	124
2 スピンの定義など	125
3 スピン 2 つの系：ウォーミングアップおよび何故量子反強磁性体が面白い いかというデモンストレーション	
3.1 どういう問題を考えるか	128
3.2 古典的スピン 2 つの系	128
3.3 量子的スピン 2 つの系	129
4 1 次元の反強磁性スピン系：Bethe ansatz と Haldane 予想	
4.1 強磁性の系	132
4.2 $S = 1/2$ の反強磁性の系	133
4.3 universality 信仰の話	135
4.4 Haldane の予想	135
5 Haldane Conjecture の理論的な理解に向けて	
5.0 個人的な意見	138
5.1 反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態の一般的な性質	
— Perron-Frobenius の定理と Marshall-Lieb-Mattis の定理	139
5.2 Lieb-Schultz-Mattis の結果	
— 1 次元の半奇数スピンの系では、ギャップがないのが自然であるという 定理	143
5.3 Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki の結果	
— Haldane gap に関連した定理	146
6 Valence-Bond States	
6.1 Valence-Bond とは何か	148
6.2 RVB	148
6.3 Majumdar-Ghosh model	152

7 Valence-Bond-Solid (VBS) 状態

7.1 VBS 状態の構成	154
7.2 一般の VBS 状態	156

8 高次元の問題

8.1 長距離秩序	158
8.2 高次元の VBS 状態	159
8.3 擬 1 次元系の問題	161

9 Haldane gap 系の隠れた構造

9.1 隠れた秩序と量子スピン液体	162
9.2 有限系での擬似 4 重縮退	164
9.3 さいごに	166

Appendix 無限自由度系の取り扱いについて

A.1 無限系の状態	168
A.2 基底状態、エネルギーギャップ	169
A.3 簡単な例	170
A.4 対称性の破れのある場合 — 例	173
A.5 Pure States への分解	175

1 はじめに

これは、1990年の物性若手夏の学校のサブゼミで、2日間話をしたときの講義録です。量子力学の基礎はしっかり身に付けたマスターくらいの人達に、量子スピン系の最近のトピックスを紹介して、もし面白がっていただければ幸いと思って話しました。

そのときの話を、世話人の筑波大の渡辺浩志さんが、丁寧にノートにとった上に、講義を録音したテープをもとにして加筆を行ない、立派な講義ノートにしてくださいました。それを妻がワープロに打ち込んだものに、私が手を入れてできたのがこの講義録です。最後のステップにやたら時間がかかってしまって、もう 1992 年です！すっかり遅くなってしまったことを、渡辺さんをはじめ、この講義に関心を持ってくださった皆さんにお詫びいたします。また学習院大学の島田宗嗣さんは、卒業研究の過程で、この講義ノートに様々なアイデアを提供してくれた上に、最終的な原稿の critical reading を行なってくれました。このノートをまとめるのにお世話になった全ての皆さんに感謝します。

Fractals, chaos, conformal field theory, anyon といったポップな用語の飛び交う今日の統計物理、物性物理の世界で、「量子スピン系」、あるいは「量子反強磁性体」の問題などというと、どうも地味そうな雰囲気が出てしまいます。しかし（少なくとも今は）これはとても面白くて、生き生きとした研究分野です。私はアメリカに出稼ぎに行っているときにこの分野に手を出しはじめたのですが、その後は純粋に面白いので続けています。そろそろやめにして他のことをやろうと時々思うのですが（そしてちょっとは他のこともやりましたが）、どうも量子スピン系で面白いことが次々でてきてやめられずにいます。

この講義の内容は、基本的には私が最近興味を持っている Haldane gap という現象が中心になっています。聞き手としてはマスターの学生の人達を念頭においていますので、なるべく予備知識や周辺の関連する話題にも時間を割くように努めました。といっても教科書ではなく、講義のスタイルをそのまま文章にしたものですので、self-contained でないところもあるかもしれません。実際に講義をしているのであれば、中断して質問していただければよいのですが、このように印刷メディアに乗ってしまうとそうもいきません。何かおかしいところがありましたら、何らかの形でご一報下さい。

当然ながら、夏の学校が終わってから今日までに、この講義に関連した内容についても少なからぬ進歩がありました。それらの新しい話題を次々この講義ノートに盛り込んでいくと、当分の間はこれを完成することはできそうにありません。残念ですが、最近の進歩については、ごく軽く触れるだけにとどめました。

また名古屋大学に集中講義に行った際に、高野健一さん（現在は豊田工大）と量子スピン系や電子系について色々と議論していただきました。そのときに、無限自由度系の取り扱いの微妙さが話題になったので、ここでは Appendix でそのテーマについて少し詳しくまとめてみました。

2 スピンの定義など

今更スピンとは何かなどというお話しをすることもないでしょう。スピンとは、量子力学における偉大な、偉大な、偉大な発見の1つです。昔の人が、電子という大きさを持たない点状の粒子が、磁石の様に振る舞うことをみつけたわけです。電荷を持った大きさのある球が、地球のように自転していれば、そこに電流が流れて磁石のように振る舞うのは当然ではないかとも思うのですが、そういう説明では色々と困ることがあります。

その1つが、ご存じのように角運動量の大きさの問題です。古典力学でもお馴染みの軌道角運動量というのを、真面目に量子力学で取り扱おうと、量子力学の角運動量の表現論ができます。ここでは、角運動量の大きさは $\hbar$ の整数倍という限られた値しか取ることができません。ところが驚いたことに電子のスピン角運動量というのは $\hbar/2$ だったわけです。電子のスピンというのは、普通の意味での回転運動とは考えることのできない回転運動だったということになります。(角運動量の大きさが $\hbar$ の整数倍に限られるか、 $\hbar/2$ の整数倍かということは、数学的には $SO(3)$ と $SU(2)$ の違いということになります。我々の住んでるのは3次元の空間のようですから、そこでの回転を表す群 $SO(3)$ が物理にでてくるのは当然のこととってよいでしょう。 $SU(2)$ というのは $SO(3)$ よりちょっと(2倍ほど)大きいことを除けば、とても $SO(3)$ とよく似た性質を持った群です。だから $SO(3)$ を考えるのなら、 $SU(2)$ も考えるというのは数学的には極めて自然なことです。しかし現実の物理でもやはり $SU(2)$ が顔を出してくるというのはとても面白く不思議なことです。)

いずれにせよスピンというのは、基本的には角運動量の一種です。一般に物がグルグルと回っている様子を定量的に表そうとすると、回転軸の方向と、回転の速さを指定することになります。すると方向と大きさがあるので、ベクトルができることになります。こういう精神で、スピンは $\mathbf{S}$ という3次元のベクトルで書きます。

$$\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z)$$

各成分は量子力学的な演算子になっていて、次のような交換関係を満たしています。

$$[S^x, S^y] = iS^z, [S^y, S^z] = iS^x, [S^z, S^x] = iS^y$$

簡単のために $\hbar$ が1になる単位を使っています。これからずっとこれでいきます。スピンの大きさと呼ばれているのは、次の式にでてくる S という量です。

$$S^2 = S(S+1)$$

ここで左辺は operator ですが、右辺はただの数です。これが素直に $S^2 = S^2$ とならない

ことも昔の人には驚きだったわけです。

こういった性質を持つ演算子は全て、具体的に行列で表現できます。先ず基本的な $S = 1/2$ の場合は、ご存じのように

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, S^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

とできます。このように S^z を対角化するような表現をとるのが業界の習わしです。けれど別に z 軸を特別扱いしているわけではありません。このような表示を取ることを「量子化軸を z 軸に取った」ということがあります。これは明らかに悪い用語です。軸を決めなければ「量子化」できないわけではないし、「量子化軸」を変えたからといって物理が変わるわけでもないのです。（悪い用語といえ、そもそも「量子力学」というのはよくないですね。「量子」＝「とびとび」というのが、この理論の本質というわけではないですから。）

あとスピンの上げ下げ演算子というのを次のように定義しておく、なにかと便利です。

$$S^{\pm} = S^x \pm iS^y$$

これらの演算子が作用するのは、2次元の（複素）ベクトル空間です。普通は基底ベクトル（basis vector）です。日本語は basis state も ground state もどちらも「基底状態」になってしまうので、とても不便です。）として、次の up state と down state を取ります。

$$\text{up state: } |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{down state: } |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

この2つの状態の任意の線形結合が、 $S = 1/2$ のスピン1つの系の状態ということになります。

$S = 1/2$ のスピンの1個だけの場合などは、なかなか試験問題にもなりません、それでも直感的にはわからないことだらけです。たとえば上の2つの basis vectors の線形結合で、

$$|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle$$

などなどの状態を作ることができますが、これらがどういうスピンの状態を表現しているかわかりますか。答えは少し計算すればわかるはずですが、その答えを直感的に納得することができますか？（私はなかなか納得できない。）

電子の問題を考えると、あくまでも $S = 1/2$ が基本ですが、電子が2個あれば、結果的にもっと大きな S の表現がでてくることがあります。（次の節で議論します。）今回

の話では Haldane gap というのがでるために $S = 1$ が大事になってきますので、特にこの場合の表現を書いておきましょう。

$$S^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

basis vectors は 3 つあります。

$$\text{up state: } |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{zero state: } |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{down state: } |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

一般にスピンの大きさ S を大きくする極限を取れば、量子効果が消えて、いわゆる「古典スピン系」になるといわれています。しかしこれはかなり微妙な話で、私にはよくわかりません。

3 スピン2つの系：ウォーミングアップおよび何故量子反強磁性体が面白いかというデモンストレーション

3.1 どういう問題を考えるか

まずとても簡単な練習問題を考えます。電子が2つあって、何らかの理由でそれらの軌道運動の自由度は固定されてしまっているとします。すると2つのスピン（大きさは $1/2$ ）の自由度だけが残ることになります。（もちろんスピン系の一般的なのりで、「スピンが2つあって相互作用している」と言ってしまうっていいわけですが。）これらのスピンの演算子を S_1, S_2 と書くことにします。（この場合の状態は、4つのbasis vectors

$$|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2$$

の任意の線形結合です。ケットの1とか2とかいうのは、スピン1、2の状態という意味です。一般にスピンの個数が N 個あっても同じようにスピン1個ずつの状態をずらりと並べて、全系の状態を作ります。だから表現空間の次元は 2^N です。）

2つのスピンの相互作用の形として、最も基本的なのは次のような回転対称なものです。

$$H_{\text{ferro}} = -S_1 \cdot S_2, \quad H_{\text{antiferro}} = S_1 \cdot S_2$$

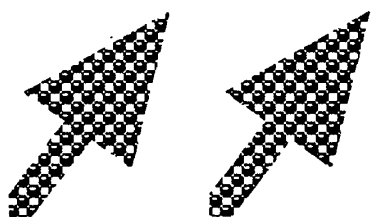
ここで内積の前にマイナスがついていると、1と2のスピンがそろったときエネルギーを得します。こういうのを強磁性的（ferromagnetic）な相互作用といいます。逆にマイナスがないと1と2が反対向きするときエネルギーを得しますが、これが反強磁性的（antiferromagnetic）な相互作用です。

以下これらのハミルトニアンについて基底状態（ground state、一番エネルギーの低い状態です）を求めていきます。基底状態というのは要するに絶対零度で実現される状態のことです。なぜ有限温度をやらないかという、絶対零度だけ見ても難しくかつ面白い問題があるからです。

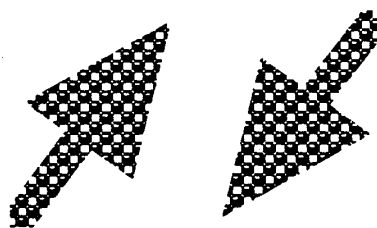
3.2 古典的スピン2つの系

まずスピンを $|\mathbf{S}_1| = |\mathbf{S}_2| = 1$ を満たす（古典的な）ベクトルだと思いうことにしましょう。すると上のハミルトニアンの基底状態を求めるのは全くの朝飯前です。

強磁性の場合1と2のスピンがそろっていさえすれば、後はどうでもよい。2つがそろったまま、どちらを向いても構わないので、基底状態は無限にあります。反強磁性の場合は、 $\mathbf{S}_2 \rightarrow -\mathbf{S}_2$ とでも変換してやると、強磁性のときとまったく同じになってしまいます。特に面白くありません。（図を見よ）



ferromagnet



antiferromagnet

3.3 量子的スピン2つの系

ところが、量子系では基底状態において強磁性と反強磁性の間に違いがあります。特に最も基礎的な $S=1/2$ の場合を考えてみましょう。まずハミルトニアンをちょっといじると、

$$H = \pm \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \pm \frac{1}{2} \left\{ (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 - \frac{3}{2} \right\}$$

と書けます。 ($(\mathbf{S}_i)^2 = S(S+1)$ を使いました。) するとハミルトニアンの固有状態を求めるのは、合成角運動量の固有状態を求めるのと全く同じだということになります。そこで各々の場合について基底状態を求めると、次のようになります。

強磁性

基底状態は無限個あります。次の3つの状態 (triplet) の任意の線形結合が基底状態です。基底エネルギーは $-1/4$ です。

$$|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, \quad |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2)$$

3つめの状態は1と2のスピンが反対向きになっているのみに見えますが、実は全体として横向きになっているのです。この辺りも量子力学のワナですね。

あと、上の3つの状態に演算子 $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ を作用させてみると、まさに $S=1$ の場合のスピン表現ができたことが分かります。これが合成角運動量ということの意味ですね。

とにかくこれらの基底状態では、2つのスピンはそろっていて、ある特定の方向を向いていることが分かります。これだけですと、なんだ量子スピン系と特に断っていても古典とほとんど変わらないじゃないかと思われるかもしれません。しかし、反強磁性になると話は全然違います。

反強磁性

古典のときのように $\mathbf{S}_2 \rightarrow -\mathbf{S}_2$ という変換をすると、スピン演算子の交換関係が目茶苦茶になってしまいます。あくまで真面目に基底状態を探さなくてはなりません。

角運動量の合成を考えれば、基底状態は次のようないわゆる singlet で、基底エネルギーは $-3/4$ です。

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow>_1 |\downarrow>_2 - |\downarrow>_1 |\uparrow>_2)$$

ここでこれまでと、決定的に違うことが1つあります。それは、

基底状態は唯ひとつしかない

ということです。2つのスピンの逆を向いていけばよいという古い考えでは、基底状態は無数にあるはずですが、それでは、このひとつ以外の反対向きの連中はどこへいったのかという問題になります。実はもう少しよく調べてみるとわかることなのですが、この基底状態はどこにも向いていないのです。実際

$$(S_1 + S_2)(|\uparrow>_1 |\downarrow>_2 - |\downarrow>_1 |\uparrow>_2) = 0$$

となっています。スピンを α 軸 ($\alpha = x, y, \text{ or } z$) のまわりに角度 θ だけ回転する演算子は、

$$\exp(i\theta(S_1^\alpha + S_2^\alpha))$$

ですから、上の状態が任意の (スピン空間で) 回転について不変であることがわかります。このように回転対称な状態を俗に「まるい」と言うようです。

以上のことを表にまとめますと次のようになります。2つのスピンの系の基底状態は、

	量子系	古典系
強磁性	まるくない、無限個	まるくない、無限個
反強磁性	まるい、ただ一つ	まるくない、無限個

です。こうして見ていくと、反強磁性—量子系というのだけが、他と際だって違うことが分かります。

反強磁性—量子系だけがなぜ他と違うのかと言うと、実はそれが、「量子ゆらぎ」によるのだということになっています。他の3つは、量子ゆらぎが小さいので、ハミルトニアンで命令したとおりの方向に向くわけです。でもこれだけは、量子ゆらぎが大きいため、色々な方向を向いた状態がグチャグチャに混ざって、結局「まるく」なるのだと思うことができます。

もちろん「グチャグチャ混ざってまるくなる」などといっても何のことやら全く分かりません。しかし回転対称な基底状態がでてくるといえるのは、数学的な事実です。だい

たい量子力学というのは、こういう直感を越えたことがいっぱいできます。電子の2重スリットによる干渉実験なんかでも、電子が1つのスリットを通ってくる様子は容易に想像できるけれども、同時に2つのスリットを通ってくる様子なんて想像できない。しかし、ちゃんと干渉じまはできてしまうのです。

スピンがたった2つだけでも量子ゆらぎの大きいところでは、人類の直感にそぐわない現象が起こるのだから、これがスピンのもっと多くなったら、もっととてつもなく面白い事が見られるんじゃないだろうか？というわけで、これから量子反強磁性体の問題を真剣に考えていくことになります。

4 1次元の反強磁性スピン系：Bethe ansatz と Haldane 予想

4.1 強磁性の系

今度は1次元の格子を考えて、格子点の上に大きさ S のスピンののっているとします。（もちろん現実の物質は3次元なのですが、“quasi-one dimensional” と呼ばれる一連の物質は、ある方向の相互作用だけが特に強いのでかなり1次元的に振る舞います。（日本では、低次元系の研究は実験、計算機、理論ともども非常に盛んです。）もちろん理論は面白いからやるので、実験があるかどうかを気にする必要はないのですが。）各々のスピンを表現する空間の次元が $2S+1$ ですから、格子点が L 個あれば、全体の表現空間の次元は $(2S+1)^L$ になります。格子点を $i=1, 2, \dots, L$ という整数で指定し、格子点 i の上のスピン演算子を S_i と書きます。

これからは、隣り合う格子点にあるスピンどうしが相互作用し合っているような系を考えます。

まずは前座の強磁性の問題を考えます。簡単のため、 $S=1/2$ とします。ハミルトニアンは、

$$H = -\sum_{i=1}^L S_i \cdot S_{i+1}$$

です。（これは強磁性ハイゼンベルグモデルと呼ばれています。）ここでは周期的境界条件を取り、 $L+1$ は 1 に等しいことにします。強磁性の場合、励起状態はとても面白いのですが、この講義の主題である基底状態では非常に簡単になってしまいます。

とにかくそろっていればいいので、

$$|all\ up\rangle = |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_3 \dots |\uparrow\rangle_L$$

というように、全部上を向けてやれば基底状態になりそうなものです。ここでハミルトニアンを

$$H = -\sum_{i=1}^L \left\{ \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + S_i^z S_{i+1}^z \right\}$$

と書き直しておきます。この形で H を $|all\ up\rangle$ に作用させてやると、明らかに上げ下げ演算子の方は0になります。それで $|all\ up\rangle$ はハミルトニアンの固有状態になっていることはわかりました。これが実際に基底状態であることを示すのは後一步ですので、気になる人は証明を考えてみてください。ヒントは、さっきやった2つのスピンの問題の結果を使うと楽だということです。

今考えているハミルトニアンは回転対称で、今作った基底状態は上を向いていますか

ら、当然他の方向を向いた基底状態もあるはずです。これを探すためには、基本的にはスピン空間での回転を $|\text{all up}\rangle$ に施してやればよいわけです。また $S^- = \sum_{i=1}^L S_i^-$ という演算子が H と交換することを利用すると、もう少し楽に全ての基底状態を求めることができます。

というわけで、相変らず強磁性の基底状態というのはスピンの同じ方向にそろって、どちらか特定の方向を向いているのです。あまり「量子的」ではないということでしょう。

4.2 $S = 1/2$ の反強磁性の系

いよいよ反強磁性の問題を考えましょう。ハミルトニアンはいうまでもなく

$$H = \sum_{i=1}^L \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} = \sum_{i=1}^L \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + S_i^z S_{i+1}^z$$

です。（これは反強磁性ハイゼンベルグモデルです。）

対応する古典系（スピンをただのベクトルと思う）の基底状態は、隣り合うスピンの互い違いに逆の方向を向いた状態です。基底状態は無数個あって、いわゆる長距離秩序（long range order）を持っています。その意味は、もし仮に原点でのスピンのどちらを向いているかを知っていたとすると、どんな遠くにあるスピンについても、その向きが（正確に）予言できるということです。

念のために、量子系では当たり前前の状態が基底状態にならないことを確認しておきましょう。反強磁性では、隣り合うスピンの逆を向いたがっていることを考慮して、次のような基底状態の候補を考えます。

$$|\text{Néel}\rangle = |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_3 |\downarrow\rangle_4 \cdots |\uparrow\rangle_{L-1} |\downarrow\rangle_L$$

ここで Néel というのは、昔この手の事を考えた人の名前です。先程と同じように、 H をこの状態にかけてみます。すると今度は上げ下げ演算子がちょうどうまくいところにかかると

$$S_i^+ S_{i+1}^- \cdots |\uparrow\rangle_{i-1} |\downarrow\rangle_i |\uparrow\rangle_{i+1} |\downarrow\rangle_{i+2} \cdots = \cdots |\uparrow\rangle_{i-1} |\uparrow\rangle_i |\downarrow\rangle_{i+1} |\downarrow\rangle_{i+2} \cdots$$

のように、欲しくもない状態がでてきます。つまり $|\text{Néel}\rangle$ はハミルトニアンの固有状態ではないのです。この辺が量子系で強磁性と反強磁性が圧倒的に違うところです。

というわけで、反強磁性の場合基底状態を求めるのはそう簡単ではなさそうです。この問題を最初にきちんとやったのは、あの Bethe です。多分 Bethe ansatz（ベーテ仮説）という言葉は皆さん聞いたことがあるのではないのでしょうか。これは、Bethe がこの問題を解いたときに「ハミルトニアンの固有状態はこのような形をしているに違いない」といって持ち込んだ作業仮説のことです。

作業仮設というのは、単なる仮定や仮説とは違います。はじめは作業仮設を仮定して理論計算を進めるのですが、答え（この場合は固有状態の候補）が出た段階で、それが本当に正しい答え（真の固有状態）になっているかどうかを、（はじめの仮定には拠らずに）厳密にチェックするのです。このチェックがうまく行けば、得られた答えは厳密に正しいことになります。チェックに合格しない場合は、仮設を建て直すところから再出発です。「仮設」というのは、建物を建てるときの足場の様なものです。建築中には足場に頼っていますが、工事が終われば足場を取り払っても建物はしっかりと立っています。逆に「仮説」に依存した理論というのは、足場の骨組みの上に作ってしまった建物のようなものでしょう。建物ができて、人が住んでいても、足場の骨組みを外すとガラガラと崩れていきます。

最近では Bethe ansatz の専門家も「ベーテ仮説」という訳語を用いているので、ちょっとひっかかります。たしかに最近では asymptotic Bethe ansatz というのも使われていて、これはどうも「漸近ベーテ仮説」と呼ぶべきもののようですが。

Bethe ansatz は、量子スピン系の問題に限らず、場の量子論や統計力学の問題にも（うまくいく場合には）頻繁に応用されています。今でも Bethe ansatz で飯を食っている人はかなりいます。やっぱり偉い人は偉いんですね。

Bethe は、 $S = 1/2$ の場合に上のハミルトニアンの固有状態を（おそらく）全て求めてしまいました。これは実に 1930 年代の仕事です。そこで Bethe（及び後の人々）のやったことから、1 次元の $S = 1/2$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルについては、以下のことが（全てが完全に厳密というわけではないけれど）わかっています。

1. 基底状態は、（無限体積極限で）唯一とつである
2. 基底エネルギーの上にエネルギーギャップはない（つまりいくらでも小さな励起エネルギーを持った励起状態がある。）
3. 基底状態での相関関数は、ゆっくりべき的に減衰する
（具体的には $\langle S_i \cdot S_j \rangle \sim |i-j|^{-1}$ という具合に（遠方で）減衰していくとされています。ただしこの -1 乗の前に対数の補正がつくのではないかという説もあります。）

1 は、この 1 次元系の場合にもやはり量子ゆらぎがとても強いことを示しています。古典系の場合には基底状態は長距離秩序を持って特定の方向を向いていたわけですが、ここでは基底状態はまた「まるく」なってしまったのです。2, 3 の性質は、場の理論に通じた人なら “massless” と、相転移の話を知っていれば “critical”（臨界点っぽい）といたくなるようなものです。（たとえば 2 次元以上での強磁性イジングモデルでは、臨界点 T_c 直上に限り相関関数がべき的に減衰することが知られています。）量子ゆらぎは、（古典的な）長距離秩序を破壊してしまったわけですが、まだスピン達の間には秩序への未練が残っているのでしょう。（なにしろここは絶対零度ですから。）ちょうど秩序と無秩序の境目ともいえる massless = critical な振る舞いを示しているのです。

4.3 universality 信仰の話

突如話は変わるようですが、統計力学の世界には“universality”（普遍性）という信仰があります。信仰なので、明確な定義はありませんが、ここでは

（ある種の）物理現象の本質は、モデルの詳細には依存しない

とでも表現しておきましょう。こういう考え方が最も華々しく成功したのは、おそらく臨界現象の理論でしょう。たとえば強磁性体の（有限温度での）相転移の問題というのを考えると、先ず面白そうな量として相転移温度 T_c というのがあります。ところがこの T_c という量は、全く普遍的ではない。交換相互作用やら飽和磁化やら様々なパラメーターの影響を微妙に受けて値が決まってくる。こういうものを扱うためには物質のパラメーターを色々持ち込んで、何かちまちました計算をしなければならなくなる。ところが、 T_c よりももっと面白そうな量として、相転移点近傍での特異性を表す臨界指数という一連のものがあつたわけです。こちらは、じつに普遍的な量になっていて、モデルのパラメーターをちょっとやそっと変えてやっても値は変わらないらしい。これは大事なことで、イジングモデルなどという数学のおもちゃみたいなものを研究していても、鉄の相転移ででてくるのと同じ指数が現われてくるということです。

ランダムさのない強磁性の相転移の問題では、スピンの対称性と、系の次元だけを決めてやれば、臨界指数は一意的に決まってしまうのではないかということが主張され、今でもだいたいにおいて信じられています。（といってもたいした根拠はまだありませんが。）他にも相転移のあるなしなど定性的な問題には、普遍性が成り立つと（漠然と）信じられてきました。

4.4 Haldane の予想

ここで、やっと量子反強磁性体の問題に戻ります。Bethe が解いたのは $S = 1/2$ の場合で、その他の S については何もいってはいません。でも universality の敬虔な信者なら、他の S で物事が変わるなどとは想像もしないでしょう。（別に universality が嫌いでも、何かが変わるなんて思う理由はないですね。）ところが、1983 年に Haldane はとても面白いことを言いだしました。(F.D.M. Haldane, Phys. Lett. 93A (1983) 464, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 1153)

まず、 $S = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ という半奇数スピンの場合については、Bethe の話とほぼ一致しています。基底状態は、上の 1, 2, 3 を満たすと言います。ところが $S = 1, 2, 3, \dots$ という整数スピンのときは全く話が違って、次のようになっているということです。

1. 基底状態は唯ひとつ

2. 基底状態のエネルギーの上にエネルギーギャップがある (Haldane gap)

（つまり基底状態から励起してやるためには、ある有限のエネルギーを加えてやらなけ

ればならない。)

3. 基底状態での相関関数は指数関数的にすばやく減衰する

(つまり特徴的な長さ ξ があって、 $\langle S_i \cdot S_j \rangle \approx \exp(-|i-j|/\xi)$ という具合に相関が減衰するということ。)

3の性質は、まるで強い熱的ゆらぎで秩序を壊された高温領域にあるイジングモデルのようです。ところが今考えているのは基底状態です！ゆらぎの原因は温度ではなく、量子効果なのです。

2,3のような振る舞いを場の理論的に解釈すると、“massive”であるということが出来ます。統計物理的には、乱れている (“disordered”) とでもいえるのでしょうか。

以上のような Haldane の主張を Haldane conjecture と呼びます。物理の理論は、ほとんど全てが数学の目から見れば “conjecture” です。それなのにわざわざ Haldane の話だけ conjecture よばわりされるのは、これを信じない人が多かったからです。Haldane の論文が極めて難解であるというだけではなく、その結果が従来の常識とは大きくかけ離れていたことがその理由だと思います。Haldane の話のどこがそんなに驚きだったかを考えてみると、次のようなことが挙げられます。

驚き1 整数スピンと半奇数スピンの系の性質が、定性的に違う。これは universality に反する。なにか critical な S の値を境目にして性質が変わるというのならまだ馴染みがあるが、 $S=1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, \dots$ とスピンを大きさの順に並べたとき、ひとつおきに性質が行ったり戻ったりして変わるなどというのはきちがいじみている。

驚き2 整数スピンの方は、これだけでも不思議。無限系であってハミルトニアンが回転対称であるにもかかわらず、ギャップがある。(回転対称なら、基底状態を (スピン空間で) ゆるやかに「ねじって」やれば、非常に波長の長い励起状態 (= spin wave excitation) が作れそうに思うからです。5.2節を参照。)

驚き3 Spin Wave Theory では整数スピンと半奇数スピンのちがいはみえない。

Haldane がどうやってこの予想を導いたかをまだ話していませんでした。量子スピン系での $S \rightarrow \infty$ の極限が topological term 付きの nonlinear sigma model になるという議論なのですが、これに深入りする気はありません。Ian Affleck の書いた review 中の説明が比較的分かりやすいので、興味のある人はそっちを覗いてみてください。(Ian Affleck, Quantum Spin Chains and the Haldane Gap, J.Phys. Condensed.Matter.1, 3047 (1989).)

その後 Haldane conjecture はどうなったかというと、 $S=1$ の系についての膨大な数値計算や、 CsNiCl_2 、NENP といった擬1次元系の実験が、彼の結論と一致することが分かって、今では多くの人に信じられています。(計算機の方はやればできるということこ

ろがありますが（失礼！）、実験の人たちが $S = 1$ の擬 1 次元系を素早くみつげてくるというのは驚異的ですね。）しかし理論的にはまだまだです。最も面白そうな $S = 1$ の反強磁性ハイゼンベルグモデルの場合に Haldane の言ったことが本当だという証明はまだありません。私も、とにかくこれを証明してやろうと思いつけているのですが、どうもうまくいきません。かといって、何もできていないというわけではなくて、理論的にも面白いことがどんどん分かってきました。そういう話をこれからします。

5 Haldane Conjecture の理論的な理解に向けて

5.0 個人的な意見

寺田寅彦の文章の中に、ある生物の会議か何かにでていたら、「この結果は未だに定量的なものに過ぎず、定性的な理解はこれから」というようなことを言っている人がいて、寅彦は大変感心したという話があります。（どうもこんな風に書くと格調がなくなるので、皆さん原文に接してください。全集の第3巻です。）物理屋は、先ず「定性」的な研究があって、それが「定量」化されていくというパターンを盲信しているところがあるけれど、これが逆転することもありある。中身がろくにわからないのに、数値だけ出して悦に入っているというケースも多いしなあというわけです。

現在の「理論」物理というのは、圧倒的な「定量」先行型になっています。とにかく、「理論」と称していても、コンピューターをがんがん回して作り上げた美しいグラフと膨大な数値のいっばいのっている論文がやたら出回っています。こういうのを見ても、何が起きているか外面的に分かるだけで、物理現象のストーリー（定性的理解）はちょっとわかりません。

もちろん「実験」がなければ、事実そのものも分からない場合が多々ありますから、私も計算機「実験」そのものは極めて重要なものだと思います。特にカオスの発見みたいなことは（ある意味では）コンピューター上での実験がなければ不可能だったわけで、現代と未来の科学にとってコンピューターで見える世界というのが重要な研究対象になってくとも思います。しかし実験はあくまで「見る」ことが最終目標であって、科学する人間は見えたものを「理解」したい、背後にあるストーリーを自分のものにしたいと思わなければいけないはずです。（別に実験家と理論家を分業しようといっているわけではありません。自分で「見た」ことを自分で「わかる」のが最高なわけです。）

最近分野を問わずコンピューターに依存して仕事をしている「理論」物理学者が実にたくさんいます。そういう中で、本当に優れた理論家はちゃんと自分の頭を使って理論もやっています。たとえば人類の理論の能力でできるぎりぎりのところまでを全て厳密にやっておいて、最後どうしてもないところをコンピューターに渡すというやり方。

（これを数学でやる場合には、いわゆる computer aided proof にもっていくのが最終目標になります。）あるいは、現実世界の理解されていない物理現象の本質をじっと見据えて、新しいコンピューター上のモデルを構築するというやり方、などなどがあります。

こういう一流の人々はよいのですが、そうでない人もいます。本人は自分は理論物理をやっていると主張してますが、要するに頭を使うのはアルゴリズムの最適化とかメモリー領域のなんたらとかばかり。自分で物理を考えるよりは、先生に言われた（あるいは世間で流行っている）モデルのシミュレーションをしたほうが（楽だし）なにせ論文もいっばい書ける。うまくあてれば有名になれる。

計算機実験家も必要だと認めた以上、だからどうした何が悪いと反論されるかもしれませんが。確かに何も悪いことはない。こういうのは趣味の問題ですよ。またダイアグラム計算なんかはコンピューターとは違うけど、特に頭を使わないでも聞雲にできてし

もう点は似たようなものでしょう。でも敢えて年寄に徹して言わせてもらえば、若いころに頭を使わないと、歳を取ってからでも使えるようにはならないということはあるんじゃないでしょうか。大学院で研究したことを一生研究し続けるなどというのは、全く愚かな考えですが、大学院で本当の研究をしなかったら、その後（就職してから）本当の研究を突然始めるなんていうのはかなり困難だと思うのですが。

計算機で論文を書きためて、学位を取るというのは「理論」の院生にとってかなり安全性の高い選択です。下手にハードな理論に突っ走って論文が1つも書けないくらいなら... という発想が頭に浮かぶ気持ちは分かります。でもね...

というあたりで、歳よりの愚痴は終わりにしておきましょう。（夏の学校のコンパのときには、もっと過激なことを言ったかもしれないけど。）

などと、本来の話から大きく逸れてしまいましたが、これからやっと Haldane 予想の話に戻ります。前にもいったとり、Haldane の話がみんなに受け入れられるようになったのは、彼の結論を裏付けるようなコンピューターシミュレーションがいっぱいできたからです。人によっては、コンピューターシミュレーションで出れば、それでいいじゃないかとも思うでしょうが、しつこく言っているように「出る」と「わかる」というのはやはり違います。おまけに（これは好みの問題ではなく）計算機で取り扱うことができるのは、有限の大きさの系だけです。我々が今興味を持っているのは無限系の問題ですから、計算機だけでは決して本当の答えは出ません。やっぱり理論としてもうすこし深く探っていききたいわけです。

この節では手始めに、従来の理論でなんとかかなりそうなところからつつき初めることにしましょう。（Haldane gap の話だけが知りたい人は、5.1, 5.2 を軽く眺めてから 5.3 に進んでもいいと思います。）

5.1 反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態の一般的な性質

— Perron-Frobenius の定理と Marshall-Lieb-Mattis の定理

まずは、Marshall-Lieb-Mattis の定理の話をしてしましょう。（昔 Marshall が、1次元の場合をまだるっこしく証明したのを、その後（といってもやっぱり昔だけど）Lieb と Mattis が、ずっと一般的にずっと簡単に証明したものです。）これは、Haldane の話とは直接のつながりはない結果です。ただし反強磁性の場合の基底状態の基本的な性質を教えてくれるので、知っているとなんか重宝します。ただし後で言いますが、この定理の意味を誤解して不必要なことで悩んでしまっている人も少なからずいるようですので、その辺は気を付けましょう。

さてこの定理を話す前に、数学で Perron-Frobenius の定理と呼ばれているもの（の最も簡単な場合）を紹介しておきます。これを知っていれば、目指す Marshall-Lieb-Mattis の定理も簡単に証明できますし、他にも役に立つことがあるかも知れません。

Perron-Frobenius の定理 (対称行列の場合)

次のような性質を持った $N \times N$ 行列 $H = \{h_{ij}\}$ を考えます。(当然物理への応用ではこれはハミルトニアンになります。)

i) $h_{ij} = h_{ji}$ で、全ての成分は実数

ii) $i \neq j$ ならば $h_{ij} \leq 0$

iii) 任意の $i \neq j$ は、 h_{ij} の 0 でない成分でつながっている。もう少し正確にいうと、 $i_1, i_2, \dots, i_M$ があって、 $i_1 = i, i_2 = j$ および $h_{i_k i_{k+1}} \neq 0$ が $k = 1, 2, \dots, M-1$ について成立する。

すると行列 H の最低固有値に属する固有ベクトル (つまり基底状態!) は (定数倍を除いて) 唯一つで、その成分は全て正にとることができる。

証明:

1) まず次のような事実を証明します。

ベクトル $\mathbf{u} = \{u_i\}$ が H の固有状態で、 $u_i \geq 0$ (for all i) を満たすならば、 $u_i > 0$ (for all i) が成立する。

逆を仮定します。つまり $u_i = 0$ (for some i) とします。これを固有値方程式

$$\varepsilon u_i = \sum_j h_{ij} u_j$$

に代入すれば、性質 ii) から、 $h_{ij} \neq 0$ となる j について $u_j = 0$ でなければならないことがわかります。この論法を繰り返し、かつ性質 iii) に注意すれば $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ となり、矛盾です。

2) 続いて、 H の最低固有値に属する固有ベクトル $\mathbf{u} = \{u_i\}$ は、 $u_i > 0$ (for all i) (あるいは $u_i < 0$ (for all i)) を満たすことを証明します。

また逆を仮定します。つまり H の最低固有値に属する固有ベクトル $\mathbf{v} = \{v_i\}$ が、適当な i, j について $v_i > 0, v_j < 0$ を満たすとします。ここで $\mathbf{u} = \{u_i\} = \{|v_i|\}$ と置くと、性質 ii) から、

$$E_0 = \sum_{i,j} v_i h_{ij} v_j \geq \sum_{i,j} u_i h_{ij} u_j$$

が成立します。 E_0 は H の最低固有値ですので、不等式の右辺も E_0 に等しくなければならないことになります。つまり $\mathbf{u}$ も H の最低固有値に属する固有ベクトルです。1) の結果から、 $u_i > 0$ (for all i) であること、および性質 ii), iii) から、上の不等式は、

$$E_0 = \sum_{i,j} v_i h_{ij} v_j > \sum_{i,j} u_i h_{ij} u_j$$

のように等号を含まない形に強めることができます。しかし、これは E_0 が H の最低固有値であることと矛盾します。

3) 最後に、最低固有値に属する固有ベクトルが 1 つしかないことをいいます。

2 つ以上あったとすれば、直交する 2 つの固有ベクトル $\mathbf{u}, \mathbf{v}$ を取ることができます。

ところが2) から直ちに $(u, v) \neq 0$ となり矛盾です。

証明終わり

応用に入る前に少し注意すべき事を言っておきます。上の定理ででてきた行列やベクトルについての条件は、どれも線型空間の基底の取り方に依存した性質です。だから具体的な問題に応用するときに、演算子の行列表示をひとつ作って上の性質が満たされていないといってもあきらめてはいけません。別の表示を取ればうまくいくかもしれません。

この定理は使えない状況では当然何の御利役もありますが、たまたまこれが威力を発揮する状況というのもありまして、そういうときにはこれを知っているかいないかは大きな違いになってきます。何か量子力学の問題を考え始めるときには、先ず Perron-Frobenius が使えるかどうかを試してみるべきでしょう。基底状態についてかなり強力な情報が得られることになります。

少し前に Hubbard model の「長岡の定理」というのを一般化する論文 (H. Tasaki, Phys. Rev. B40, 9192 (1989)) を書きました。これはたいしたことのない話なのですが、長岡先生が結構長い論文で延々と計算して証明している内容を (かなり一般化して) 雑誌のページ裏表1枚で証明したというのが取柄です。この論文の唯一のポイントは、長岡先生の証明の本質は Perron-Frobenius に尽きていると気づいたことです。(といっても最初から Perron-Frobenius だと狙いをつけていたわけではありません。ごちゃごちゃやっているうちに、自分のやっているのは Perron-Frobenius だと気づくわけです。)

ではようやく本題の Marshall-Lieb-Mattis の定理に入ります。本当はもっと一般の場合ができていますが、必要以上に一般化してもややこしいのでここではほどほどに一般化したものを紹介します。(E.H.Lieb, D.Mattis, J. Math. Phys. 3, 749 (1962).)

Marshall-Lieb-Mattis の定理

ここでは、1次元格子に限らず一般の有限の大きさの格子を考えます。格子点全体を A, B という2つの部分格子に分けておきます。2つの部分格子の格子点の数は等しいとしておきます。(1次元格子の場合は、偶数番目の格子点と奇数番目の格子点に分けます。) 各格子点の上に大きさ S のスピンを置きます。ハミルトニアンとしては、かなり一般的なハイゼンベルグ型のものを取ります。

$$H = \sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j, \quad J_{ij} \geq 0$$

ここで相互作用の J_{ij} は、 i, j が同じ部分格子に属するときには0であると仮定します。また0でない J_{ij} だけを辿って格子全体を歩き回ることができるものとします。

定理の主張は、この系の基底状態は唯一つで、合成スピン0を持つ

$$(\sum_i S_i)^2 |G.S.\rangle = 0$$

ということです。さらに基底状態を展開したときの係数の符号までわかってしまいます。(証明を参照。)

以前の言葉でいえば、上のようなハミルトニアン基底状態はいつでも「丸くて、1つしかない」ということです。

ただし、この主張から直ちに反強磁性ハイゼンベルグ模型では次元によらず対称性の破れがなく唯1つの基底状態がでてくると結論するのは性急です。上の定理が扱っているのはあくまで有限の大きさの格子での基底状態の性質でしかありません。ここで無限体積の極限を取るとどうなるかというのは、また全然別の話です。2次元以上では、無限体積の格子での基底状態は対称性を破るのが普通だと思われています。(かなりの場合に厳密な証明があります。)このあたりの事情をもう少し理解したい人は8.1節とAppendixを見てください。

Marshall-Lieb-Mattis の定理の証明

$S^z = \sum_i S_i^z$ はハミルトニアンと交換するので、 H と S^z の同時固有状態を考えます。 S^z の固有値を M と書きます。エネルギーの固有値 E 、 S^z の固有値 $M > 0$ を持つ固有状態 $|\varphi\rangle$ があったとします。 H と $S^- = \sum_i S_i^-$ が交換することを使うと、

$$H \{ (S^-)^M |\varphi\rangle \} = (S^-)^M H |\varphi\rangle = E \{ (S^-)^M |\varphi\rangle \}$$

となるので、エネルギーの固有値 E 、 S^z の固有値 $M=0$ を持つ固有状態があることがわかります。そこで以下 $M=0$ の状態にのみ注目することにします。この空間での基底を次のように取ります。

$$|m_1, m_2, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{i \in A} (m_i - S)} |m_1\rangle_1 |m_2\rangle_2 \dots$$

ここで (-1) の肩の和は部分格子 A の格子点についてです。また $m_i = -S, -S+1, \dots, S$ で、各スピンについての固有ベクトルは、

$$S_i^z |m\rangle_i = m |m\rangle_i, \quad \langle m | (S_i^+)^{m-m'} | m'\rangle_i > 0$$

を満たすように取ることにします。(これは、普通のやり方です。)

この基底は次のような性質を満たします。(証明は少し計算すればできます。)

- i) 任意の2つの異なった基底ベクトルについて $\langle m'_1, m'_2, \dots | H | m_1, m_2, \dots \rangle \leq 0$ となる。
- ii) 任意の2つの基底ベクトルは、ハミルトニアンの0でない行列要素でつながっている。

つまり Perron-Frobenius の定理が使えるわけです。その結果、 $M=0$ の空間では基底状態は一つで、

$$|G.S.\rangle = \sum_{m_1, m_2, \dots} \varphi_{m_1, m_2, \dots} |m_1, m_2, \dots\rangle, \quad \varphi_{m_1, m_2, \dots} > 0$$

と書けるということになります。

この状態が合成スピン 0 を持つことを示せば証明は終わります。そのために

$$H_0 = \left(\sum_{i \in A} S_i \right) \cdot \left(\sum_{i \in B} S_i \right)$$

というおもちゃのようなハミルトニアンを考えます。このハミルトニアンの基底状態 $|G.S.\rangle$ はかなり簡単に求めることができ、

$$\left(\sum_i S_i \right)^2 |G.S.\rangle = 0$$

を満たす事がわかります。

ところでハミルトニアン H_0 も Marshall-Lieb-Mattis の条件を満たすので、基底状態 $|G.S.\rangle$ も $|m_1, m_2, \dots\rangle$ に正の係数をつけた線型結合で書くことができます。よって $\langle G.S. | G.S. \rangle \neq 0$ がわかります。 $|G.S.\rangle$ は $(\sum_i S_i)^2$ の固有状態ですから（理由は考えてみてください）、結局その固有値は $|G.S.\rangle$ と同様に 0 でなければなりません。

証明終わり

5.2 Lieb-Schultz-Mattis の結果

— 1次元の半奇数スピンの系では、ギャップがないのが自然であるという定理

いよいよ Haldane gap と密接に関係のある話に移ります。前の節の最後で、回転対称な系ではエネルギーギャップがないと考えるのが普通だと言いましたが、これからその常識をもう少し真剣に数学にしてみます。常識の背後にある思想は、回転対称な系であれば、基底状態をゆるやかに「ねじって」やれば非常にエネルギーの低い長波長の励起モード（スピン波）が作られるだろうということでした。

しつこいですが、念のために思い出しておくと、Haldane は整数スピンの 1次元ハイゼンベルグ模型はエネルギーギャップを持つと主張して、波紋を巻き起こしたのです。Haldane が正しければ、上の考え方は（少なくとも整数スピンについては）どこかがおかしいということになります。

これからの話は、昔 Lieb, Shultz, Mattis (Ann.Phys. 16, 407 (1961)) が $S=1/2$ についてやったものを、Haldane の話との絡みで Affleck, Lieb (Lett. Math. Phys. 12, 57 (1986)) が一般の S に拡張したものです。ただし同じような事に気づいていた人は結構いたようです。

たとえば Kolb (Phys. Rev. B31, 7494 (1985)) にも同じ事が書いてあるようです。

ここではスピン S の 1 次元反強磁性ハイゼンベルグモデルを考えます。格子点の数 L は有限で偶数、後の都合上格子点には $i = -L/2, \dots, L/2$ と番号を付け、周期的境界条件で両端を同一視しておきます。Marshall-Lieb-Mattis の定理により、この系の基底状態 $|0\rangle$ は唯一つに決まって、回転対称である事がわかっています。

次に $r (< L/2)$ という数をとってきて、 $-r$ から r の範囲で基底状態をゆるやかにねじってやることを考えます。もともとの基底状態が回転対称なので、ゆるやかな「ねじり」によって非常に低いエネルギーの励起状態が作られるのではなかろうかというのがねらいです。ねじるために次のような unitary operator を作ります。

$$U_r = \exp\left(\sum_{j=-r}^r i \theta_j S_j^z\right), \quad \theta_j = \left(\frac{j}{r} + 1\right) \pi$$

この operator は、 j 番目の格子点のスピンを θ_j だけ z 軸の回りに回転します。 θ_j は $-r$ から r のところで丁度 1 回転するようにつくってあります。となり同士はほんのわずかの回転 ($1/r$ のオーダー) にすぎません。こうして

$$|\text{Twist}_r\rangle = U_r |0\rangle$$

は、 r 程度の波長をもった励起状態の候補となるわけです。(この候補と言うところがミソです。) r を十分に大きく取れば、望むだけ低いエネルギーの励起状態がでてきそうに思われます。この「ねじれ」によってどれくらいエネルギーが上がるかを評価してみましょう。エネルギーの期待値の差は、

$$\begin{aligned} & \langle \text{Twist}_r | H | \text{Twist}_r \rangle - \langle 0 | H | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | (U_r^{-1} H U_r - H) | 0 \rangle \end{aligned}$$

です。ここでハミルトニアン H のユニタリー変換を真面目に計算すると (これはそれなりにやりがいのある計算です) これは更に、

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \sum_{j=-r}^r \langle 0 | \{ (e^{i\pi j/r} - 1) S_j^+ S_{j+1}^- + \text{h.c.} \} | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{2} (\cos \frac{\pi}{r} - 1) \sum_{j=-r}^r \langle 0 | S_j^+ S_{j+1}^- + \text{h.c.} | 0 \rangle \\ &= O(r^{-2}) O(r) = O(r^{-1}) \end{aligned}$$

と (厳密に) 評価することができます。

ここで r を大きくしていけば、エネルギーの差はいくらでも小さくなります。格子の長さ L を無限にとばした極限では、 r の方もいくらでも大きくできますから、任意のスピン S に対してギャップがなくなっているようにみえます。実際にこれだけから Haldane conjecture は死んだと思った人もいました。

しかし、ここにはまだ落とし穴があります。上のようにして作った状態 $|\text{Twist}\rangle$ は、必ずしも励起状態になっているとは限らない、もっと正確に言えば基底状態と直交しているかどうかはわからないということです。古典的直感では、ぐるりと「ねじれば」新しい状態になるのは自明なような気がします、これは量子力学の問題ですから直感を盲信するのは危険です。この直交性の問題を真面目に考えてみましょう。

そのために、次のようなユニタリー変換を考えます。

$$R(S_j^x, S_j^y, S_j^z)R^{-1} = (-S_j^x, S_j^y, -S_j^z)$$

これは、格子全体の空間的な反転とスピン空間での y 軸のまわりの π の回転の組み合わせです。基底状態は唯1つですから、

$$R|0\rangle = |0\rangle$$

となります。（ $R|0\rangle = -|0\rangle$ の可能性もありますが、そのときには R の定義にマイナスの符号を付けてやれば、上のようにできます。）一方

$$\begin{aligned} R|\text{Twist}_r\rangle &= R U_r R^{-1} R|0\rangle \\ &= \exp\left(-\sum_{j=-r}^r i\theta_j S_j^z\right) |0\rangle \\ &= \exp\left(-2\pi i \sum_{j=-r}^r S_j^z\right) |\text{Twist}_r\rangle \\ &= \begin{cases} |\text{Twist}_r\rangle & S: \text{integer} \\ -|\text{Twist}_r\rangle & S: \text{half-odd-integer} \end{cases} \end{aligned}$$

という風にねじった状態の方はスピンによって、パリティが変わってきます。そこでこの話の結論はスピン S が半奇数か整数かによって違ってきます。

S が半奇数の場合には、 $|0\rangle$ と $|\text{Twist}\rangle$ は、異なるパリティに属しているので必然的に直交します。つまり $|\text{Twist}\rangle$ は（ハミルトニアン固有状態であるはずはありませんが）励起状態のみの重ね合わせでできているのです。よって長さ L の系のエネルギーギャップについて、

$$\Delta E_L \leq \text{const. } r^{-1}$$

という上限が証明されたことになります。ここで $r=L/2$ とでもして L を大きくしていけば、右辺はいくらでも小さくなります。

こうして、この系はエネルギーギャップを持ちえない事が結論できそうに思えます。これはほぼ正しいのですが、よく考えてみるともう1つ可能性が残っています。無限系で起こり得るのは

A) 基底状態は唯1つでエネルギーギャップはなし

B) 対称性が破れて、基底状態は2つ以上ある

の2種類です。今の場合にはAが起きると信じられているわけですが、どちらが実際に起きるかを、このような soft argument だけから決めることはできません。（Bが起きるような例もあります。6.3節や Appendix を見てください。）ただし次のことが起こらないことだけは厳密に断言できます。

C) 基底状態は唯1つでエネルギーギャップあり

これは S が半奇数の場合の話ですから、Haldane の言ったことと完全につじつまが合っています。つまり Haldane conjecture の半分は厳密に証明されたのです。

問題の S が整数の場合にはどうなるかというと、残念ながら、なにも言えません。 $|0\rangle$ と $|\text{Twist}\rangle$ は同じパリティを持っているので、これらが直交しているかどうかはわかりません。 $|\text{Twist}\rangle$ が $|0\rangle$ に励起状態をほんの少し足しただけのものなのかも知れないわけです。もしそうであれば、 $|\text{Twist}\rangle$ と $|0\rangle$ のエネルギーの差を見てもギャップについては何の情報も得られないわけです。

こうして、決戦は S が整数の場合に持ち込まれたのです。

5.3 Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki の結果

一 Haldane gap に関連した定理

いよいよ整数スピンについて何か言うことにします。全く残念なことに、本来のハイゼンベルグ模型については Haldane の主張を裏付けるような厳密なことはまだ何も言えていません。これは完全な open problem です。私は一時量子スピン系の話は一先ずやめようと思っていたのですが、これが解けないのがしゃくで、ついつい舞い戻ってしまったりしています。未だにこの最大の課題は解けていないのですが、幸いなことに Haldane gap の陰に潜んでいた面白いストーリー＝構造が色々とわかってきました。

それでも整数のスピンについて言えていることはあります。 $S=1$ の次のようなハミルトニアンを持つ1次元スピン系を考えます。

$$H = \sum_i S_i \cdot S_{i+1} + \frac{1}{3} (S_i \cdot S_{i+1})^2$$

第1項が支配的なので、このハミルトニアンは反強磁性的性格を持っており、さらに回転対称性もあります。我々 (I.Affleck, T.Kennedy, E.H.Lieb, H.Tasaki, Phys. Rev. Lett. 59, 799 (1987), Commun. Math. Phys. 115, 477 (1988).) は、次のような結果を厳密に得ました。

1. 基底状態は唯一つつ
2. 基底状態のエネルギーの上にエネルギーギャップがある (Haldane gap)
3. 基底状態での相関関数は指数関数的にすばやく減衰する
 実際相関関数は正確に計算できて、 $\langle S_i \cdot S_j \rangle = (-1)^{|j-i|} \frac{4}{3} 3^{-|j-i|}$

こうして Haldane が言いだした整数スピン系の変わったふるまいが実際に現われ得ることがはじめて厳密に示されたのです。(我々の扱ったハミルトニアンも回転対称性を持っていますから、前節で述べた「驚き」はここでも通用します。)

上のモデルは、基底状態をあらわに書き下すことができるという意味で正確に解けるモデルです。7節ではこの厳密解 (VBS 状態) について説明します。VBS 状態はただ単に特殊な解けるモデルの基底状態であるばかりではなく、Haldane gap が出現するような状況の本質的な特徴を調べる重要な鍵にもなります。(9章参照。)

6 Valence-Bond States

6.1 Valence-Bond とは何か

Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki の定理に深入りする前に、valence-bond を使って量子反強磁性体の基底状態を作るという話をしておこうと思います。これは、もちろん我々の定理の背景にはこういうアイデアがあるからなのですが、このアプローチは量子スピン系の問題にパターンの統計力学的な視点を与えてくれるという意味でとても面白いものです。valence-bond という用語は一頃高温超伝導で騒がれた（そしてその後すたれた）Resonating-Valence-Bond (RVB) などではさんだことのある人も多いのではないのでしょうか。ここでは（ついでとっては何ですが）RVB とは何かという事も教養のために話しておきましょう。

Valence-Bond というのは元来化学用語で、価電子結合とかそういう意味だそうです。量子スピン系でこの用語を用いるときには、2つの電子のスピンの状態がこの結合のようになっているときに、valence-bond ができているといいます。これは前にでてきた言葉で言えば、単に2つの $S = 1/2$ のスピンの pair を作っているという事です。（だから RVB じゃなくて Resonating Singlet-Pairs なんかもよいわけですが、どういうわけか valence-bond というのがかっこいいということになったようです。）

3節と同じように2つの $S = 1/2$ のスピンを考え、それらを i, j と呼ぶことにします。valence-bond = singlet は、

$$i \text{ --- } \rightarrow \text{ --- } j = |\psi_{ij}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_i \downarrow_j\rangle - |\downarrow_i \uparrow_j\rangle)$$

と定義します。これは2つのスピンの合成スピンを最低にするように結合した「丸い」状態です。

左側のダイアグラムは、スピン i スピン j が pair になっている雰囲気は何となく線で結んで表したものです。こういう図はこれからいっぱい用います。また線に矢印を付けたのは、上の valence-bond state の定義で i と j をひっくり返すと符号が変わるので、その非対称性を表現するためです。つまり

$$i \text{ --- } \leftarrow \text{ --- } j = - i \text{ --- } \rightarrow \text{ --- } j$$

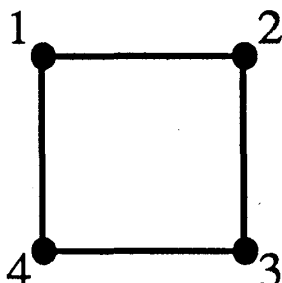
ということです。但しこの矢印が不必要でわずらわしい場合には、省略することになります。

6.2 RVB

valence-bond states を使って、あるハミルトニアン基底状態を正確に書き下すことが

できるでしょうか。3節で既にそういうことが可能な例をひとつ見えています。2つの $S = 1/2$ のスピンの反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底状態は、そのものずばり valence-bond です。

もう少し当たり前でない例として4つの $S = 1/2$ のスピンの正形状に並んでいる系を考えます。



ハミルトニアンは、隣り合うスピンの反強磁性的に相互作用するハイゼンベルグ型のものを取ります。

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

固有状態ではないのはわかっているけれども、まず Néel state についてエネルギーの期待値を調べてみましょう。

$$|\text{Néel}\rangle = |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_3 |\downarrow\rangle_4$$

とすると、

$$\langle \text{Néel} | H | \text{Néel} \rangle = -1$$

です。-1 という値はだいたい低いですが、もっと低い固有値もあります。実際に valence-bond state を用いると

$$\langle v_{12} | \langle v_{34} | H | v_{12} \rangle | v_{34} \rangle = -1.5$$

と更に期待値は下がります。しかしこの valence-bond state もまだ基底状態ではありません。

一般に valence-bond state にハイゼンベルグ型の operator が作用するとどうなるかを見てみましょう。先ず既に知っているように valence-bond にもろにかかるときは、

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad i \bullet \longrightarrow \bullet j = -\frac{3}{4} \quad i \bullet \longrightarrow \bullet j$$

という風に固有状態になります。ところが valence-bonds がないところにかかる、

$$S_i \cdot S_j \begin{array}{c} \bullet_i \\ \downarrow \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet_j \\ \uparrow \\ \bullet \end{array} = \frac{1}{4} \begin{array}{c} \bullet_i \\ \downarrow \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet_j \\ \uparrow \\ \bullet \end{array} - \frac{1}{2} \begin{array}{c} \bullet_i \rightarrow \bullet_j \\ \bullet \leftarrow \bullet \end{array}$$

という具合に新しく valence-bond が作られてしまいます。(この式は、valence-bond の定義に戻ってひたすら計算すればできます。RVB の心を肌で理解したい人は是非やってみてください。実はこの式の右辺に現われる 2 つの valence-bond states は互いに直交していません。その辺も実は色々注意が必要です。)

この結果を見れば、どうやって H の固有状態を作ればよいかがすぐにわかります。

$$|RVB\rangle = \begin{array}{c} \bullet_1 \\ \downarrow \\ \bullet_4 \end{array} \begin{array}{c} \bullet_2 \\ \uparrow \\ \bullet_3 \end{array} + \begin{array}{c} \bullet_1 \rightarrow \bullet_2 \\ \bullet_4 \leftarrow \bullet_3 \end{array}$$

と置いてやれば、上の式から

$$H |RVB\rangle = -2 |RVB\rangle$$

となり、エネルギーはかなり下がりました。実は $|RVB\rangle$ は単に固有状態であるだけではなく、基底状態になっています。この事を厳密に示すには H を必死で対角化しなければいけないような気がしますが、実はもっと賢い方法があります。前の節で証明した Marshall-Lieb-Mattis の定理を用いればよいのです。どうやるかは考えてみてください。

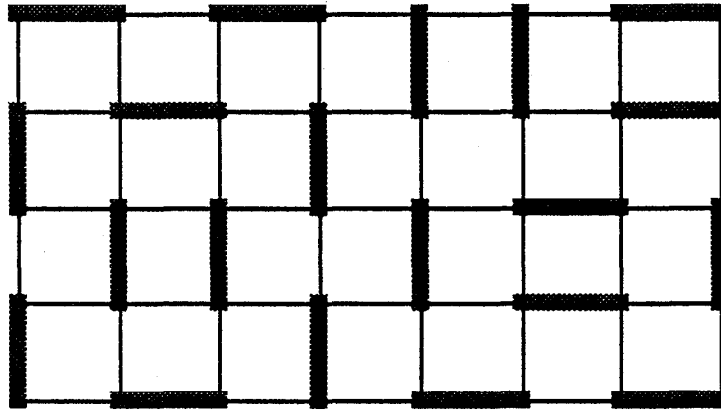
このような基底状態の構成の仕方には、2 つの大切な考え方がこめられています。1 つめは、valence-bonds を基本要素として状態を書こうという思想です。valence-bond には既に反強磁性的な相互作用と量子ゆらぎが取り入れられているので、これは量子ゆらぎの強い反強磁性の問題を扱うにはかなり有望なやり方だと言えそうです。

もう 1 つのポイントは、2 つの valence-bond states をちょうど良い係数で足し合わせているということです。上の定義で + の代わりに - を用いてもハミルトニアン の固有状態にはなりますが、固有値はもっと高くなってしまいます。つまり 2 つの valence-bond states が巧みに resonance し合って、エネルギーを下げているというわけです。

というわけで、上のようなタイプの状態を Resonating-Valence-Bond (RVB) State と呼ぶわけです。ときどき RVB というのは Anderson が導入した概念だと書かれていることがありますが、これはどうも違うようです。valence-bonds を用いて電子の状態を記述しようというアプローチは、1930 年代に有名な Pauling をはじめとした化学の人達によって発展させられていました。昨今用いられているテクニックの多くも当時発見されたものです。RVB という用語もこのころから用いられていたようです。

今の話は RVB で厳密に基底状態が書ける特殊な問題でしたが、いわゆる Anderson's Short-Range RVB というのはもうちょっといい加減な話です。

(有限の大きさの) 2次元の正方格子を考えます。格子上の dimer covering というのは、各々の格子点がちょうどひとつの dimer (=格子間隔と同じ長さの線分) に属するように格子上に dimers をばらまくことです。たとえば



という具合。よく考えてみると、これは日本間を畳で敷きつめるやり方に対応しています。

各々の dimer に valence-bond を対応させれば、ひとつの dimer covering から量子スピン系の状態 (dimer state) を作ることができます。(valence-bond の矢印をどうとるかという不定性があります。これは、常に部分格子 A から部分格子 B に矢印を向けることにしておきます。) Anderson's Short-Range RVB とは、

$$|RVB\rangle = \sum_{\text{dimer coverings}} |\text{dimer}\rangle$$

のようにありとあらゆる dimer covering を考え、それらに対応する dimer state を resonate させたものです。上で考えた4つのスピンの系の基底状態は、ちょうどこの形の特殊な場合になっています。(この場合は2畳の部屋の畳の並べ方に対応しています。寂しいことですが、2畳間の畳の並べ方は2通りしかありません。)

Anderson はこの $|RVB\rangle$ が正方格子上のハイゼンベルグ反強磁性体の基底状態の良い近似になっていると主張したのです。(元来 Anderson が RVB を言い出したのは、3角格子上のハイゼンベルグ反強磁性体の問題についてでした。) この主張そのものは、結局それほど的確を得た予想ではなかったわけですが、RVB の思想はその後様々な方向に発展(?) していきました。(随分多くの人が、一般化された RVB だの色々な事を言っ、色々な論文がでました。しかし、はっきり言うと、量子スピン系関連のこの手の仕事のレベルは余り高いものではなかったようです。特に困ったのは、1930年代以来の蓄積で周知の事実を再発見して論文にしようというの、結構あったことです。)

RVB の話になるとついつい言ってしまうのですが、(酸化物超伝導体みたいに) 電

子がぴたりと half-filled ではなく holes がいる場合には、resonance がおこる原因に、上で解説したスピン系の交換相互作用と、holes の運動との 2 種類があることを正確に認識する必要があります。以前これらの 2 つのメカニズムの作り出す RVB は、実は本質的に異なった性質を持つということを指摘したことがあります。(H. Tasaki, M. Kohmoto, Phys. Rev. B42, 2547 (1990)) これは、holes の入った系への RVB 的なアプローチを行なう上では、かなり重要な指摘だと思うのですが、あまり評判はよくなく、おまけにほとんど誰も RVB を本気で考えないのでいよいよ出番がないままに忘れられてしまいました。こういった話では K. Takano, K. Sano, Phys. Rev. B39, 7367 (1989) などが着実に好きです。

6.3 Majumdar-Ghosh model

次のようなハミルトニアンを持つ 1 次元の $S = 1/2$ の系を考えます。

$$H = \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}$$

このように通常のハイゼンベルグモデルに次近接相互作用を付け加えると、Bethe ansatz など使わずに簡単に解けてしまうのです。ハミルトニアンを少し変形すると、

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{4} \sum_i \{ (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{S}_{i+2})^2 - \frac{9}{4} \} \\ &= \frac{1}{4} \sum_i \{ 3 P_{i, i+1, i+2}^{S=3/2} - \frac{3}{2} \} \end{aligned}$$

ここで $P_{i, i+1, i+2}^{S=3/2}$ は、3 つの格子点上のスピン合成が最大の $3/2$ になる空間への projection operator です。(つまり $P_{i, i+1, i+2}^{S=3/2} |S=3/2\rangle = |S=3/2\rangle$, $P_{i, i+1, i+2}^{S=3/2} |S=1/2\rangle = 0$ ということです。) エネルギーに定数を足しても定数を掛けても物理は全く変わりませんから、これからは

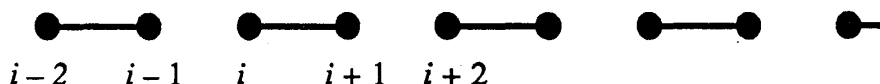
$$H = \sum_i P_{i, i+1, i+2}^{S=3/2}$$

がこのモデルのハミルトニアンだと思う事にします。

この系の基底状態は valence-bonds を使って次のようにきれいに書くことができます。

$$|\text{Ground State}\rangle = \begin{cases} \prod_m |v_{2m, 2m+1}\rangle \\ \prod_m |v_{2m-1, 2m}\rangle \end{cases}$$

私の趣味に従って図で表すと、



というのと、



というのです。ちょうど格子間隔1つ分だけずれた2つの状態があるわけです。

なぜこれが基底状態になるかは、すぐにわかります。先ず projection operator の性質から $P_{i, i+1, i+2}^{S=3/2} \geq 0$ 。これを足したのがハミルトニアンだから

$$H \geq 0$$

つまり H の固有値は全て0以上です。そこでもし固有値0を持つ固有状態があれば（必ずしもある必要はないけれど）、それは基底状態です。

さて上の2つの状態で、格子点 $i, i+1, i+2$ に注目してみると、いずれの状態でも3つの格子点の内の2つは valence-bond を構成しています。ということとは、これらの2つの格子点の合計スピンは0です。今注目している3つの格子点の合計スピンはというと、既に2つが0になってしまっているので残り1個が頑張って $S_{\text{TOTAL}} = 1/2$ という事になります。よって projection operator $P_{i, i+1, i+2}^{S=3/2}$ （そしてハミルトニアン H ）がこれらの状態にかかれば、0がでるというわけです。

これらの基底状態は、明らかに並進対称性を破っており、しかも2つ存在しています。前述の Lieb - Shultz - Mattis theorem の2番目の選択肢が実現されていることがわかります。さらに Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki の論文の中で次のような定理も証明しました。

基底状態は2つだけ

この系は有限の energy gap をもつ

7 Valence-Bond-Solid (VBS) 状態

7.1 VBS 状態の構成

さてそろそろ、Affleck, Kennedy, Lieb, Tasaki の定理の証明について、出発点だけでもお話ししておきましょう。証明の出発点は、ハミルトニアン

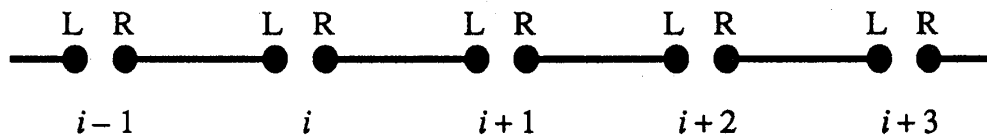
$$H_{\text{VBS}} = \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{3} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2$$

の正確な基底状態を書き下すことでした。この基底状態は VBS (Valence-Bond-Solid) 状態と呼ばれています。

まず $S=1$ のスピンを表現するために、 $S=1/2$ のスピンを 2 つ用意しましょう。(現実の物質でも、2 つの電子のスピンの Hund's rule とかいうもので合成されて $S=1$ になっています。) まず、便宜的にこれら 2 つのスピンを区別することにして、格子点 i には (i, L) , (i, R) というラベルのついた $S=1/2$ のスピンのついているとします。(L, R は left, right の頭文字。) VBS 状態の一手手前として

$$|\text{pre-VBS}\rangle = \prod_i |v_{(i, R), (i+1, L)}\rangle = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_{i, R} |\downarrow\rangle_{i+1, L} - |\downarrow\rangle_{i, R} |\uparrow\rangle_{i+1, L})$$

という状態を定義しましょう。これは、隣り合う格子点どうしを valence-bond で結んだ状態で、これまでと同じように図で表すと、



と描けます。

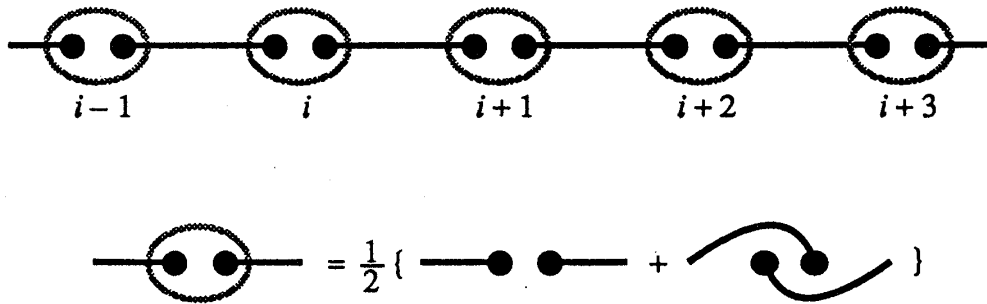
pre-VBS 状態では、同じ格子点上にある 2 つの $S=1/2$ のスピンの間に全く相関がなく、このままでは $S=1$ の系の状態にはなっていません。そこで格子点 i の上の 2 つのスピンを対称化する演算子

$$\text{Sym}_i(|a\rangle_{i, L} |b\rangle_{i, R}) = \frac{1}{2} (|a\rangle_{i, L} |b\rangle_{i, R} + |b\rangle_{i, L} |a\rangle_{i, R}), \quad a, b = +, -$$

を用いて、

$$|\text{VBS}\rangle = \left(\prod_i \text{Sym}_i \right) |\text{pre-VBS}\rangle$$

という状態を作ります。これが VBS 状態です。図で表すと、



となります。新しい記号ですが、2つの点を囲む丸は、2つのスピンの対称化の操作を表しています。この図のように、valence-bonds が格子を完全に覆い尽くしていることから、この状態を Valence-Bond-Solid (VBS) と呼んだわけです。

実は、対称化の演算子 Sym は、2つのスピンの合成が1になる空間への射影演算子になっています。 $SU(2)$ の表現論に明るい人にとっては、これは当たり前のことでしょうが、そうでない人はちょっと計算してチェックしてみてください。この事実は、VBS の構成の際に最も本質的な点の1つです。そういうわけで、VBS 状態というのは、各格子点に $S=1$ のスピンのつた状態になっているのです。pre-VBS 状態は、独立な valence-bonds の積だったのですが、対称化を施して作られる VBS 状態は、もはや独立な状態の積にはなっていません。この事はじっくり納得しておいてください。

それでは、なぜ VBS 状態が問題のハミルトニアン基底状態になるのかを見てみましょう。すでに Majumdar-Ghosh model の話をしたので、ネタは割れていると思います。我々のハミルトニアンも、

$$H_{\text{VBS}} = \sum_i 2P_{i,i+1}^{S=2} - \frac{2}{3}$$

というように射影演算子で書くことができるのです。ここで $P_{i,i+1}^{S=2}$ は、格子点 $i, i+1$ の上のスピンの合計が2になる空間への射影演算子です。

VBS 状態は、

$$P_{i,i+1}^{S=2} |\text{VBS}\rangle = 0$$

という関係を全ての i について満たします。すると前と同じ様に $P_{i,i+1}^{S=2} \geq 0$ であることから、VBS 状態が我々のハミルトニアンの基底状態 (の1つ) であることが結論できます。

上の関係を示すのは簡単です。格子点 $i, i+1$ の上にある4つの $S=1/2$ のスピンの内の2つは、既に合計スピン0の singlet を組んでいます。だから全体の合計スピンは高々

1にしかねないというわけです。ここで Sym が単にスピンを入れ替えるという演算子であることは、本質的です。もしここにもっとややこしい射影演算子がかかっていれば、この話はだめになってしまいます。

VBS 状態では、比較的簡単に相関関数を計算することができます。(実はこれにも色々やり方があります。AKLT の論文を書いた時点で、2つの計算法があったのですが、このうちの1つはあまりにも面倒だったので、簡単な方が書いてあります。その後 Arovas, Auerbach, Haldane (Phys. Rev. Lett. **60**, 531 (1988)) が賢いことに気づいて、計算がぐんと楽になりました。きわめつけの4つ目の計算法は最新のものです。Kennedy, Tasaki (Phys. Rev B in press) が作った nonlocal unitary transformtaion を使うと、びっくりするほど簡単に計算できます。) VBS 状態では、任意の相関関数が指数的に減衰することがでできます。これは VBS 状態が、valence-bond の担っていた強い量子的ゆらぎを受け継いでいるためだと解釈することができるでしょう。

さらに Affleck, Kennedy, Lieb, Tasaki では、VBS 状態がこのハミルトニアンのもとの基底状態であること、この系がエネルギーギャップを持つことを証明しています。ただしここに書いてある証明は、今から思うと悲惨なもので、読みたいと思えるようなものではありません。幸いその後、もっときれいな証明が得られています。有限系の基底状態は、VBS 状態に限られるということを示す部分は、Kennedy, Lieb, Tasaki (J. Stat. Phys. **53** (1988) 383) でずっと一般的にしかも簡単に証明し直しました。ギャップの方は、S. Knabe (J. Stat. Phys. **52** (1988) 627) が面白い証明を作りました。これは一種の computer aided proof になっていて、有限系のギャップについてのある情報が得られれば、無限系のギャップについて厳密な定理が証明されるという仕掛けです。なかなかよくできているし、あくまで初等的な数学しか使っていないので、一度覗いてみてください。

最近かなり数学っぽい人たちが VBS をネタにして仕事をしているようです。相関関数のしつこい計算、ギャップの存在の別証明、モデルの一般化などをやっているようです。

7.2 一般の VBS 状態

同じような思想で、一般の整数のスピンの系について VBS 状態と、対応するハミルトニアンを作ることができます。前と同じ様に大きさ S のスピンを、 $2S$ 個の $S = 1/2$ のスピンの対称化によって表現します。一般化された VBS 状態は、

$$|VBS\rangle = \left(\bigotimes_i \text{Sym}_i \right) \prod_i \left\{ \bigotimes_{n=1}^S |v_{(i, n), (i+1, n+S)}\rangle \right\}$$

と書くことができます。ここで格子点 i の上にのっている $2S$ 個の $S = 1/2$ のスピんに、 $(i, n), n=1, 2, \dots, S$ と名前を付けました。今度は隣り合う格子点を S 本の valence-bonds が結んでいるわけです。たとえば $S=2$ のときの VBS 状態を図示すると、



となります。ちなみにこの一般化された VBS 状態は、

$$H_{VBS} = \sum_i \sum_{S'=2S+1}^{4S} a_{S'} P_i^{S'}, \quad a_{S'} > 0$$

というハミルトニアン基底状態になっています。ここに出てきたのは、2つの格子点の合成スピンの S' になる空間への射影演算子です。この状態でも、相関関数は指数的に減衰します。

ところが S が半奇数のときには、事情が全く変わってきます。今までのように長さが 1 の valence-bonds を組み合わせて、並進不変な状態を作ることはいけません。たとえば $S = 1/2$ の系で、長さ 1 の valence-bonds から作られるのは前節で見た 2 つの dimerized states です。 $S = 3/2$ なら



みたいな状態になって、やはり並進不変にはできません。

このような違いを考えてみると、何故整数スピンの系と半奇数スピンの系のふるまいが本質的に異なっているのかというミステリーにも、ある程度直観的に答えることができます。

S が整数のときには、とにかく VBS 状態という並進不変で、しかもゆらぎの強い乱れた状態があります。ハイゼンベルグハミルトニアンの正確な基底状態は、決して VBS 状態ではありません。しかし真の基底状態が、VBS 状態になんらかの short range の摂動を加えたものになっている可能性はあるわけです。

他方 S が半奇数のときには、そのような乱れた状態はありません。残された可能性は、並進不変性を破って乱れた基底状態をとるか、長い valence-bonds を次々とつけ加えていって並進不変性を達成するかの 2 つでしょう。後者の選択をすれば、長い valence-bond が比較的長距離にわたる相関を生み、系はもはや「乱れ」てはいないことになるでしょう。これは Lieb-Schultz-Mattis theorem の許す選択肢と完全に一致していることに注意してください。

8 高次元の問題

8.1 長距離秩序

この節では、高次元の量子反強磁性体の基底状態の問題に簡単に触れることにします。今回の講義は、Haldane gap 関連の話が主になってしまったので、この辺の話はちょっとした寄り道と行った取り扱いになります。もちろん重要で、面白い問題です。

何と言っても、中心になる問題は、 d 次元の正方格子上に定義されたスピン S の反強磁性ハイゼンベルグ模型

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

の基底状態の性質です。特に注目するのは、Néel order と呼ばれる長距離秩序があるかないかです。Néel order の有無は、次のような Néel order parameter m をはかることによって、判定できます。

$$(-1)^{|\mathbf{l}-\mathbf{j}|} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle \rightarrow m^2, \quad \text{as } |\mathbf{l}-\mathbf{j}| \rightarrow \infty$$

もちろん d 次元の反強磁性ハイゼンベルグ模型などは、誰にも解けませんから、 m の正確な計算などできません。昔の人はスピン波近似というので一生懸命計算しましたし、最近の人は計算機を回したりします。

しかし、正確に解けなくても厳密に何かを言うことはできないわけではありません。たとえ m の正確な値は知らなくても、 m がある有限の値より大きいと言えれば、Néel order の存在は証明できるわけです。こういう事は、言うは易く、行なうのはとても大変なのですが、この問題の場合は幸いにもある程度の結果が得られています。

昔、古典スピン系の相転移に関する数理論理学と、構成的場の量子論とが、緊密に相互作用し合いながら、驚異的な発展を遂げた時期がありました。（これは、70年代から、80年代前半まででしょう。これから述べる infrared boundsなどは、比較的初期の素晴らしい成果の1つです。80年代の成果は、Aizenman, Fröhlich の ϕ^4 triviality や Gawedzki, Kupiainen らの厳密なくりこみ群などでしょうか。）その中で、古典的な XY 模型やハイゼンベルグ模型など、回転対称性をもったスピン系の相転移の存在を如何に示すかという大問題が、Fröhlich, Simon, Spencer によって解かれました。彼らは reflection positivity という場の量子論に端を発する概念=道具を巧みに用いて、infrared bounds というスピン波のアイディアをある意味で厳密化するような不等式を導きました。infrared bounds は、単独の不等式としては、極めて多彩で重要な応用を持っていました。その1つが、3次元以上の殆ど一般の古典強磁性スピン系についての、有限温度での相転移の存在証明だったのです。

この仕事を量子スピン系に拡張したのが、Dyson, Lieb, Simon です。これは、随分昔の話です。Dyson, Lieb, Simon の論文は、あまりにもごちゃごちゃしていて読みにくいせいもあって（古典スピン系の方の論文は、とても美しい）、それほど読まれることもなく、

歳月が流れていきました。

ところが最近になって、急にこれが復活します。突如襲ってきた酸化物高温超伝導騒ぎの中で、2次元の $S=1/2$ の反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態が Néel order を持つか否かが、重大な関心事になったからです。少し前の Jordao Neves, Fernando Perez (これで2人です。たとえば Jordao の方が父親の名字で、こっちが子供に受け継がれます。Neves は母親の名字です。決して J. Neves とやってははいけません。) による2次元の基底状態への拡張に続いて、Kennedy, Lieb, Shastry が新しいアイディアを用いて、Dyson らの結果を拡張しました。日本でも、Kubo, Kishi や Ozeki, Nishimori らが Dyson, Lieb, Simon の結果の拡張に取り組みました。その結果 d 次元の反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態については、次のことが厳密にわかっています。

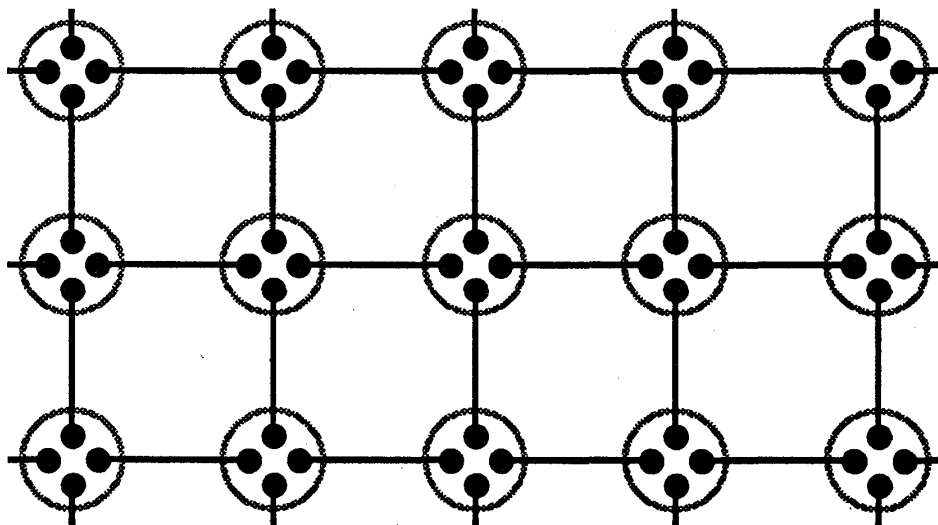
$d \geq 3, S$ は任意で、 $m > 0$ (この結果は有限温度にも拡張される。)

$d = 2, S \geq 1$ で、 $m > 0$

酸化物超伝導で最も騒がれた $d=2, S=1/2$ の場合は、未だに証明がありません。これが、確かに(2次元以上では)最も量子ゆらぎの強い系ですから、もしかしたら秩序が破壊されている可能性があったわけです。今のところ、計算器実験などの結果から、この系にも反強磁性的な長距離秩序があると考えられています。だから酸化物の話が即座にどうにかなるというわけではありません。超伝導の系は、hole が入っていたりして、全く別のものです。

8.2 高次元の VBS 状態

前節で解説した VBS 状態の話は、1次元に限らず、一般の格子にもある程度拡張することができます。たとえば2次元の正方格子上に $S=2$ のスピンを置き、次の図のような VBS 状態を構成することができます。



例によって4つの $S=1/2$ のスピンの対称化で、 $S=2$ のスピンを作っています。線分は

valence-bond です。もちろん、これが基底状態になるようなハミルトニアンを書くことはできます。

この状態でも、2点相関関数が指数関数的に減衰することは、証明しました。（前出の Kennedy, Lieb, Tasaki の論文。）ただし、これは1次元の場合の様に簡単ではありません。この2次元の VBS 状態では、相関関数を具体的に計算することは（今のところ）できないのです。

このように、2次元で回転対称なハミルトニアンを持つ系でも、強い量子ゆらぎのために、基底状態が無秩序状態になり得ることはあるのです。これは、ある意味で Haldane gap の高次元版ということができるとでしょう。さらに3次元以上の格子でも、一部のものについては、同様の無秩序な基底状態を持つモデルを作ることができます。universality の漠然たる教えによれば、3次元以上の回転対称なスピン系は、十分低温では長距離秩序を持つはずでした。しかし、何事にも例外はあるのです。

2次元で量子ゆらぎのために秩序を破壊された反強磁性体の系があるかという問題は、酸化物話との関連もあって、注目を集めています。私の知るかぎり、この2次元 VBS model が、そういう事が起こると証明されている唯一の nontrivial な例です。

2次元の VBS model で、我々が最も強い結果を持っているのは、6角格子上に $S = 3/2$ を置いた系の場合です。ハミルトニアンは、

$$H_{VBS} = \sum_{\langle i,j \rangle} P_{ij}^{S=3}$$

です。和は隣り合う格子点の組について取ります。もちろんこれだってスピン演算子の組み合わせで書くことができます。しかし唐突に

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{116}{243} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 + \frac{16}{243} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^3 \right\}$$

なんていうハミルトニアンを書いて、「これを解きます」と言うのも何か悪趣味ですね。さてこの系については、

1. 無限体積極限での基底状態は、ただ1つで、これはVBS 状態である。
2. この基底状態では、任意の相関関数が指数関数的に減少する。

ということが証明されています。残念ながらエネルギーギャップの存在証明はできていません。証明には、convergent cluster expansion という厳密統計力学の恐怖のテクニック

を使います。しかもこの場合には、展開の収束を保証するために、小さくできるようなパラメーターが1つありません。収束の証明には、計算機も少し使っています。

さて、このように見てくると、VBS 状態というのは、いつでも「乱れて」いて指数関数的に減衰する相関関数を持っている、と思い込みがちです。ところが、ところが、世の中そう単純ではありません。次元が高くなると、たとえ VBS 状態といえども、無限体積極限では、反強磁性的な長距離秩序を持つてしまうらしいのです。このあたりの話については、元祖 AKLT の論文を見てください。

要するにたとえ VBS 状態のようにコンパクトに状態の表式が書き表されても、その状態の性質（ギャップの有無、相関関数のふるまい、など）は単純には決まてこないということです。Ising model の定義式を知っても、与えられた温度で model がどのような性質を持つかを決定するのはとても難しい—ということと似たような状況だと言うことができるでしょう。

8.3 擬1次元系の問題

高次元の乱れた基底状態の話がでましたので、ついでに、VBS とは無関係ですが、擬1次元系の問題というのに触れておきましょう。実験で Haldane gap が観測されたという場合に、本当に1次元の実験をしているわけではありません。実際には、擬1次元系といって、本当は3次元なんだけれども、ある一方向の相互作用が他の方向に比べて十分に大きいような系を扱っているわけです。

従来 of 常識では、こういう擬1次元系というのは、ある程度温度が高いと、弱いほうの相互作用が無視できてまるで1次元系のようにふるまうけれど、温度が下がってくると、次第に弱いほうの相互作用も効いてきて3次元系としてふるまいはじめるはずでした。普通の3次元系は十分低温で長距離秩序を持つことになっています。実際、Haldane gap 系として最初に注目を集めた CsNiCl_2 という物質の場合には、冷やしていくと長距離秩序を持つようになります。

ところが、次の世代の Haldane gap 系の NENP という物質は、非常に根性がある、1.2 K まで冷やしても長距離秩序を示さないそうです。極めて1次元に近い擬1次元系だということができます。ここで疑問になってくるのは、たとえば NENP をもっともっと低温にしたとき、長距離秩序がでるのかどうか、ということです。このモデルは先程の六角格子などとは違い実現可能なモデルなので、特に意味があります。

これは実はかなり微妙な問題で、普通に漠然と考えたり近似したりしていても、説得力のある答えはでてきません。私 (H.T. PRL 64, 2066 (1990)) は、この問題を非摂動論的に扱って、3次元方向の結合が十分に弱ければ、基底状態でも長距離秩序は出現しないという結果を得ました。

9 Haldane gap 系の隠れた構造

9.1 隠れた秩序と量子スピン液体

さて、いよいよ最後のセクションになりました。ここでは、もう皆さんにお馴染みの 1 次元の $S=1$ の VBS 状態をもう少しじっくり調べてみます。するとどうも尋常でない性質が（大きく分けて）2 つでてきます。これらの性質については、我々も最初の AKLT の論文を書いたころから気づいてはいた（論文にも書いた）のですが、当時は、これは解けるモデル特有の変態なふるまいなのかもしれないという気もしていました。ところが、その内、VBS 状態でみつかった変態な性質は、Haldane gap が出現しているときにはいつでも現われる普遍的な構造を反映していることがわかってきたのです。

ここでは、VBS 状態から出発して、特異な性質を導くところだけを話します。なぜそういった性質が普遍的なのだろうかという辺りの話は、参考文献を見てください。私自身は、夏の学校で VBS などについて講義していた頃、Haldane gap 系の隠された構造について必死で考えていました。（そして夏の学校が終わった後の夏休みに、これからお話しする「隠れた反強磁性秩序」が、Haldane gap 系の本質と見做し得ることにとうとう気づきました。量子スピン系を経路積分で 2 次元系に書き直し、そこでパーコレーションなどの幾何学的なアイデアと手法を目一杯使って、こういう結論に到達したのです。この話が出来上がったときはかなり興奮して騒いでいたのですが、実は少し前に den Nijs と Rommelse という人達が、結晶の界面の問題からアプローチして本質的に同じ描像に達していたことが、後でわかりました。）

さて VBS 状態は、7 節でやったのように valence-bonds を使って表現すると、とても簡単な状態に見えます。けれど、表示を変えて、通常のように各格子点で S_i^z を対角化する基底で展開すると、その様子はかなり変わってしまいます。 $\sigma_i = 0, \pm 1$ をとる数の集まり $\sigma = \{\sigma_i\}$ に対して、 $|\sigma\rangle$ を $S_i^z |\sigma\rangle = \sigma_i |\sigma\rangle$ を満たす基底ベクトルとする。すると VBS 状態は、

$$|VBS\rangle = \sum_{\sigma} (-1)^{z(\sigma)} 2^{n(\sigma)/2} |\sigma\rangle$$

のように展開することができます。ここで $z(\sigma)$ は $\sigma_i = 0$ である奇数の格子点の総数、 $n(\sigma)$ は $\sigma_i = \pm 1$ である点の総数です。さらに上の和に寄与するスピン配位 σ から 0 を取り去ると、残りは + と - が正確に交互に並んでいなければならないのです。たとえば

+ - 0 + - 0 + 0 - 0 + - 0 + 0 - 0 0 + - + 0 0 - + 0 -

+ - + - + - + - + - + - + - + - + - + - + -

といったスピン配位が許されますが、

+ - + - 0 0 0 - + -

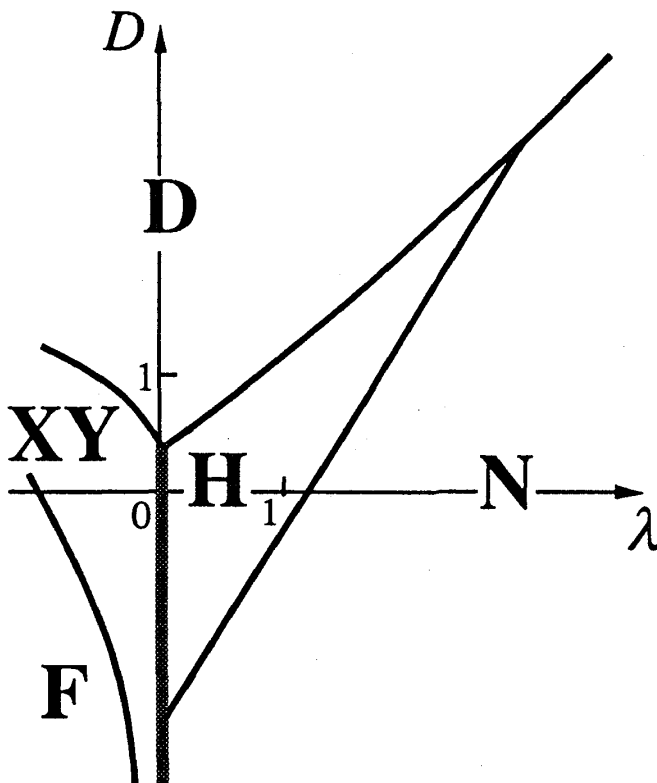
はだめです。上の VBS の展開には、このような条件を満たす σ が全て寄与するのです。

このように表現すると VBS 状態は少しも “solid” には見えません。むしろ 0 という背景の中で +, - という粒子が高密度で激しくゆらいでいる “liquid” の様相を呈しています。しかもこの液体には、+ と - の粒子が (0 を間にはさみつつ) 交互に出現するという「隠れた反強磁性的秩序」が内在しているのです！

このような「隠れた反強磁性秩序を持った量子スピン液体」という VBS 状態の側面は、Haldane gap を伴った基底状態の普遍的な性質であることが明らかになってきました。話は変わるようですが、 $S=1$ の

$$H = \sum_i S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \lambda S_i^z S_{i+1}^z + D (S_i^z)^2$$

という一軸異方性を持ったハミルトニアンは、Haldane gap の話によくでてきます。



基底状態の相図は、数値計算や近似理論からかなりよくわかっていて、この図のようになると思われます。ここで D というのは、large- D phase と呼ばれる相で、ここでは基底状態はただ 1 つしかなく、基底状態での相関関数は指数的に減衰し、エネルギーギャップも有限です。こう書くと、Haldane gap のある状況と変わらないような気がしてしまうでしょう。しかし、これから述べるように、両者の間には決定的な違いがあります。(私が、Haldane gap 系の隠された構造に気がついたのは、この large- D phase と Haldane phase の本質的な違いについて考えていたからでした。) N と書かれている領域は、Néel phase です。ここでは反強磁性的な長距離秩序があります。当然 H というのは、Haldane phase です。

今回の話には、直接はできませんが、 F というのは強磁性の長距離秩序を持った Ferromagnetic phase、 XY というのは (私には) 訳のわからない XY phase です。Haldane phase と XY phase の境目では、例の Kosterlits-Thouless 転移が起きているそうです。その

ために、この境界線を計算器実験で確定するのは極めて困難だということです。

den Nijs, Rommelse (Phys. Rev. B40 (1989) 4709) と Tasaki (Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 798) は、この相図を、経路積分を通した幾何学的な観点から議論しました。その話のさわりだけをお話すると、次のようになります。(こういう「話」の部分だけを見れば、私がやったのは、den Nijs-Rommelse の再発見に過ぎません。しかし私の仕事には、量子スピンスピン系でこのような描像が成立するというかなりしっかりした状況証拠が挙げられています。)

まず “large- D phase” は “gas” であると解釈されます。基底状態に寄与する典型的な状態は、

$$000+-000-0+0000-00+00000+-0$$

というように、0の海の中に+と-の粒子が、低濃度で2つずつ対になって現われるようなものだからです。“Néel phase” は “solid” です。基底状態では、

$$+-00+-+0-0+-++--00-+-+--+$$

のように+と-が交互に並ぶ Néel 状態の間に、0が2つずつ対になって現われます。“Haldane phase” は、もちろん “liquid” です。基底状態では、

$$+-0+-0+0-0+-0-0+00+-+00-+0-$$

のように+と-は激しくゆらぎながらも、隠れた反強磁性的な秩序を保っています。

(ただし局所的に偶数個の+,-が反転することは許されます。) これらの3つの相は、経路積分の時空間でのパーコレーションというアイデアを用いて、明確に区別することができます。

「隠れた反強磁性的秩序」の存在は、Haldane gap 系のふるまいを理解する上での重要な鍵になります。たとえば、Haldane gap 系の磁化過程の実験をすると、磁化曲線に激しい立ち上がりが見られます。これは、「隠れた反強磁性的秩序」が破壊される相転移であることがわかっています。(H.T., J. Phys. C3 (1991) 5875) den Nijs, Rommelseは、隠れた反強磁性秩序は、string order parameter と呼ばれる量によってはかることができると指摘しました。最近 string order parameter に関する精力的な計算機実験が行なわれています。(S.M. Girvin, D. Arovas, Physica Scripta, T27 (1989) 156, Y. Hatsugai, M. Kohmoto, Phys. Rev. B to appear, K. Hida, preprint, K. Kubo, unpublished, N. Ichikawa, M. Kaburagi, I. Harada, T. Tonegawa, unpublished)

9.2 有限系での擬似4重縮退

VBS 状態には、他にも尋常でない性質があります。前に述べたように、無限系での VBS ハミルトニアン基底状態は唯一つしかありません。また有限系でも、周期的境界条件をとれば、基底状態は1つしかありません。ところが両端が切れている有限系では、(2)の基底状態は4重に縮退しているのです！というのも、有限系で VBS 状態を構成す

ると、



というように両端の $S = 1/2$ のスピンの1つずつ valence-bond を組まずに余ってしまいます。(ここで人間関係にたとえたりすると、ばかにされるので、止めておきます。) これらの $S = 1/2$ のスピンの up でも down でも、最終的に作られる状態はハミルトニアン (2) の基底状態になります。(なぜだかわからない場合は、もう1度7節を見てください。) この場合の VBS 状態は両端に自由に動くことのできる $S = 1/2$ のスピンの自由度を持っているということが出来ます。

もちろんこれらの自由な $S = 1/2$ のスピンも、同じ格子点上のもう1つの $S = 1/2$ のスピンと対称化されなくてははいけません。ですから、余分な $S = 1/2$ のスピンの自由度は、図から受ける印象とは違って、両端の格子点に完全に局在しているわけではないのです。実際に $\{1, 2, 3, \dots\}$ という半無限の格子で、端 ($i = 1$) に $S = 1/2$ の up のスピンを置いた場合の VBS 状態で、スピンの期待値を計算すると、

$$\langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle = 0, \quad \langle S_i^z \rangle = -2(-3)^{-i}$$

となります。余分な up のスピンの影響は、格子の端から離れるにつれて小さくなっていきますが、決して $i = 1$ に局在しているわけではありません。ここで上の期待値を全格子点について足せば

$$\sum_{i=1} \langle S_i^z \rangle = -2 \sum_{i=1} (-3)^{-i} = \frac{1}{2}$$

と、ちょうど $1/2$ がでてきます。余分な $S = 1/2$ のスピンは、こういう具合に、格子端の近傍にしみだして存在しているのです。

このような端のある有限系での基底状態の縮退は、解けるモデルの特殊性ではありません。Kennedy は、 $S = 1$ ハイゼンベルグモデルなど Haldane phase にあるモデルは、端のある有限系では、「擬似4重縮退」を示すことを指摘しました。エネルギーの最も低い4つのレベルはほとんど縮退していて、それらと残りのレベルの間に大きな Haldane gap が開いているということです。(前節で述べた量子スピン液体の描像からも、このような現象を説明することができます。) 格子を大きくしていくと、4つのレベルのエネルギーの差は指数的に0に減衰し、4つの(擬似)基底状態は1つの(無限系の意味での)基底状態に収束します。この場合にも擬似4重縮退の原因は、格子の端に現われた $S = 1/2$ のスピンの自由度のためであると考えられます。

驚くべきことに、Hagiwara, Katsumata, Affleck, Halperin, Renard (Phys. Rev. Lett. 65, 3181 (1990)) は、このような擬似4重縮退を実験的に観測したと報告しました。擬似4重縮退は、Haldane gap 系以外では全く見ることのできない極めて特異な現象なので、この実

験結果は重要な意味を持っています。いったいどうやって実験では測れる有限系を作るのだろうと疑問に思われるかもしれませんが、これは意外に簡単です。Haldane gap 物質の NENP の中に不純物を混ぜていったのです。すると NENP の磁性を担っていた Ni の代わりに不純物の原子（この場合は Cu）が入り、そのあたりだけスピン系の結合の様子が変わってきます。この場合には、Cu のためにスピンの間の相互作用が極端に弱くなって、有限で端のある 1 次元格子に近いものになります。このような系での ESR の測定結果（エネルギーレベルが見えると思ってよい）が、まさに擬似 4 重縮退の存在を反映したものになっていたのです。

既に強調したように、擬似 4 重縮退は VBS 状態のみの特性ではなく、Haldane gap を示す系で普遍的に出現します。Hagiwara らの論文には「VBS 状態の存在を確認した」という書き方がしてありますが、これは少し言い過ぎです。というより、彼らが観測したといっているのは、狭義の VBS 状態ではなく、VBS 状態と本質的に類似した「量子スピン液体状態」のことだと解釈すべきなのでしょう。

上の実験で不純物として用いられた Cu はそれ自身 $S = 1/2$ のスピンを持っているのですが、端のある 1 次元格子を作り出すためには、このスピンはどちらかというと邪魔になります。最近、スピンをもたない（業界用語で言えば、nonmagnetic な）不純物を用いた同様の実験が行なわれています。（S.H. Glarum et al. Phys. Rev. Lett. 67, 1614 (1991)）このようなサンプルがあると、ESR だけではなく、弱い磁場での磁化過程を見てやると面白いはずです。不純物のない NENP は Haldane gap 物質なので、（Haldane gap より）弱い磁場を加えても磁化は 0 です。ここに磁性を持たない不純物（Zn など）を加えていくと、（端に現われる $S = 1/2$ の自由度のために）弱い磁場でも磁化が現われるようになるはずです。なんと磁性を持たない物質に、磁性を持たない不純物を混ぜると、磁性が現われてくるという不思議なことがおきるのです。

9.3 さいごに

Haldane は、整数スピンの 1 次元ハイゼンベルグ模型が新しいタイプの乱れた基底状態を持つことを予言しました。当初人々が思い描いたのは、「量子ゆらぎ」によってことごとく秩序を破壊された荒涼たる砂漠のような世界だったでしょう。ところが様々な道を辿って砂漠に分け入っていくと、そこは無味乾燥であるどころか、複雑で精妙な構造を持った豊かな世界だったのです。

最近 Kennedy, Tasaki (Phys. Rev. B45, 304 (1992) and Commun. Math. Phys. to appear) は $S = 1$ の系での Haldane gap をめぐる不可思議な現象が、全て「隠れた対称性の破れ」の帰結として極く自然に理解できることを見いだしました。我々の導入した非局所的なユニタリー変換を用いると、標準的なハミルトニアンは、 $Z_2 \times Z_2$ という離散的な対称性を持ったハミルトニアンに変換されます。そして変換を施した系で、 $Z_2 \times Z_2$ の対称性が自発的に破られると、変換前の系に、エネルギーギャップ、隠れた反強磁性的秩序、擬似 4 重縮退が必然的に現われるのです。（この仕事は、前に私がやった経路積分の話 (H.T. PRL 66 (1991) 798) よりは、文句なく 1 ランク上のできだと私は思っています。しかし同じ雑誌に出したところ、強烈な referee が登場して、とうとう引き下がらざるを得ませ

んでした。これが、世間で PRL は Physical Review Letters だといわれる所以でしょう。)

「隠れた対称性の破れ」の発見によって、Haldane の見いだした「砂漠」の様相は、かなり見通しの良いものになってきたと私は考えています。しかし、決してこれで Haldane gap の問題に終止符が打たれた訳ではありません。1 より大きい整数の S を持つ系や、高次元の量子スピン液体については、「隠れた秩序」や「隠れた対称性」の特定は完全には成功していません。 $S=1$ の系についてでさえ、さらなる隠された構造があることを示唆する結果が得られつつあります。また励起状態の構造については、計算機実験と現象論があるのみで、微視的な理論は全く展開されていません。より根本的な問題は、いくら隠された構造が明らかになってきたところで、我々はそのような構造が出現する理由を本当には理解していないということです。ハイゼンベルグ模型における Haldane gap の存在が未だに厳密に証明されていないのは、単に数学的なテクニックが不足しているということではなく、この現象についての物理的な理解が未だ不完全だということを意味しているのです。

これまでの Haldane gap の研究は、実験、計算機実験、(数理物理さえ含んだ) 理論の3種類のアプローチが、積極的に相互作用し合うというほぼ理想的な状況の中で進んできました。これまでの研究の成果は、単に社会学的な成功に留まらず、いくつかの新しい視点やアイディアを物理学に付け加え得るレベルに達していると言っていると思います。しかし将来この問題が、単に面白いが特殊な例として扱われることになるのか、それとも、より普遍的な物理的、数理的構造の理解へ到る出発点になり得るのかは、現時点では全くわかりません。近年 Haldane gap 系と分数量子ホール効果や界面の問題との数学的な類似性が指摘されているのは心強いことです。

天然のあるいは人工の「世界」の中から、様々な「面白い」ストーリーを見いだしていくのが物理のとても大事な側面だと思います。特に物理全体を支配する使命感みたいなものの希薄になった現代では、なるべく広い分野の人々の間で面白さを分かち合えるような「普遍的な面白さ」を持ったストーリーたちをできるだけたくさん集めておくべきなのではないか、それが次の世代の物理(という名前じゃなくなるかもしれないけど)が生まれる為のとてもよい土壌になるのではないかと私は思っています。どうやれば「普遍的な面白さ」に到ることができるのかは、私ごときにはまだまだわかりません。さしあたっては、自分にとって最も面白い個々のストーリーを追及することによってこそ「普遍的な面白さ」に到る道が拓けるという楽観的だけれど健全な夢を信じ続けたいと思います。

この(かなりまとまりを欠く)講義録を最後まで読んでくださってどうもありがとう。

Appendix 無限自由度系の取り扱いについて

A.1 無限系の状態

通常、物理のコースで習う量子力学や統計力学は、基本的には有限自由度の問題を扱ったものです。ところが、相転移、Haldane gap などなどの現代的な「面白い」問題は、ほとんどが無限自由度の系で起きるとされています。（もちろん現実の物理系でスピンの数が無限個などということはあり得ません。「無限」というのは、「非常に大きな数」の理想化です。）有限自由度で培った直観と方法論で、無限自由度の問題に立ち向かうと、たまに思わぬ落とし穴に落ちてしまうことがあります。実際、量子スピン系の専門家でも、どこかで足を取られて、自己矛盾に陥っていたり、意味のない問題で悩んだりすることがあります。小口先生の有名なスピン系の教科書の中にも、無限系と有限系の違いに気づかずに、Marshall-Lieb-Mattis の定理の物理的な意味を誤解している部分があります。

そこで、ここでは無限自由度系の取り扱いの要点を簡単にお話ししておきます。基本的なアイデアだけをまとめますので、詳しく知りたい方は、何らかの文献に当たって下さい。手頃なところでは、岩波講座の「量子力学 II」（古いのを持っていれば、III です）に江沢先生が明快な解説を書かれています。（しかし、この講座ももはや絶版だといえるのですから、世も末です。みんなで、岩波に抗議の署名でも出すべきかもしれませんね。）こういうことを扱う C^* algebra という数学を知りたければ、O. Bratteli, D. W. Robinson, “Operator algebras and quantum statistical mechanics I & II” (Springer, 1981) という本が出ていますが、これはどうしようもないほど「数学」ですから、お勧めはしません。

（またDomb-Green の Phase Transitions and Critical Phenomena のシリーズの 1 巻にEmch という人が C^* algebra の解説を書いています。これはちょっと古いですね。但し同じ巻のGriffiths の厳密統計力学についての解説は、古くなっても色褪せない名作です。）

なお以下の説明では、数学的な詳細にはこだわらないことにしますから、（数学者の意味では）完全に厳密でないところもあります。

いうまでもなく、有限系の量子力学的状態は、Hilbert space の 1 つのベクトルで表現されます。しかし無限自由度では、状態をベクトルに対応させようとすると様々な問題がでてきます。ここでは Hilbert 空間を用いない定式化を解説します。

まず local operator というのは、有限個のスピン演算子をかけたり、線形結合を取ったりして作られる operator であると定義します。元になるスピン演算子は、有限個でありさえすれば、何個でもいいし、どれほど離れた格子点から取ってきてもかまいません。こんな演算子は少しも local に見えないかもしれませんが、無限個のスピンが係わるような量に比べれば local だということです。

無限系の状態 ω とは、任意の local operator A に対して、その期待値 $\omega(A)$ を対応させる汎関数で、次のような性質を満たすもののことです。

線形性 $\omega(\lambda A + \nu B) = \lambda \omega(A) + \nu \omega(B)$

正值性 $\omega(A^* A) \geq 0$

規格化 $\omega(1) = 1$

ここで A, B は任意の local operators、 λ, ν は任意の複素数です。有限系であれば、規格化された状態ベクトル $|\varphi\rangle$ を用いて、 $\omega(A) = \langle \varphi | A | \varphi \rangle$ のように汎関数 ω を作ることができます。

いうまでもなく、2つの状態 ω_1 と ω_2 が等しいというのは、

$$\omega_1(A) = \omega_2(A)$$

が全ての local operator A について成立することです。この定義はとても「物理的」だということを強調しておきましょう。2つの状態が同じか、異なっているかを判断するためには、可能なありとあらゆる観測を行ない、その結果が完全に一致するか、不一致の点があるかを調べようというのです。

A.2 基底状態、エネルギーギャップ

Hilbert 空間を持ちださず、期待値の汎関数 ω だけを用いて、基底状態やエネルギーギャップといった概念を定式化することができます。ある無限自由度のスピン系のハミルトニアンを H とします。普通考えられるハミルトニアンは、無限個の項の和ですから、 H は当然 local operator ではありません。ですから基底状態を定義するのに、安直に「 $\omega(H)$ を最低にするような ω 」などというわけにはいきません。そもそも無限系でのエネルギーの期待値 $\omega(H)$ はほとんどの場合無限大で、考えても意味はありません。

ところが、 H が local でなくても local operator A との commutator $[H, A]$ は local になります。（具体的に考えればわかります。）このことを利用して、基底状態を次のように定義します。

定義 期待値汎関数 ω がハミルトニアン H の基底状態であるとは、任意の local operator A について、

$$\omega(A^*[H, A]) \geq 0$$

が成立することである。

この定義の意味は、仮に有限系を考えて、期待値汎関数を具体的に状態ベクトルで書いてみればわかります。つまり状態ベクトル $|\varphi\rangle$ が基底状態なのは、任意の operator A について

$$\langle \varphi | A^* H A | \varphi \rangle - \langle \varphi | A^* A H | \varphi \rangle \geq 0$$

となること。仮に $|\varphi\rangle$ が固有状態でそのエネルギーが E_0 であるとし、さらに $|\psi\rangle =$ と書けば、これは、

$$\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$$

ということです。つまり状態 $|\varphi\rangle$ に任意の local な変形を加えてやっても、エネルギーは上がりこそすれ下がらないということです。つまり有限系では、上の定義は通常基底状態の定義と一致するわけです。

同じような思想で、エネルギーギャップを定義すると次のようになります。

定義 ハミルトニアン H の基底状態 ω がエネルギーギャップ m を持つというのは、 $\omega(A)=0$ を満たす任意の local operator A について

$$\omega(A^*[H, A]) \geq m \omega(A^*A)$$

が成立することである。

この定義を、有限系の場合に吟味して、通常定義に一致することを確認するのは、読者におまかせします。

さて、ここで当然でてくる疑問は、このようなまだるっこしい定式化が本当に必要なのだろうかということです。有限系で、基底状態やエネルギーギャップを求めておいて、適当に系のサイズを大きくしたのでは、いけないのでしょうか？私の理解するかぎりでは、やはり新しい定式化は必要です。もう少し言えば、無限系では期待値汎関数を元にした定義の方が、より物理的なのです。これは、以下 A.3 と A.4 で挙げる例を見ていただければ納得できると思います。

A.3 簡単な例

やや人工的な簡単な例を用いて、上のような定義がどういう意味を持つかを考えてみましょう。次のようなハミルトニアンを持つ 1 次元の $S=1/2$ のスピン系を考えます。

$$H = \sum_i S_i^z S_{i+1}^z - \sum_i S_i^z$$

反強磁性のイジング模型に、上向きの一様な磁場がかかっていて、たまたま交換相互作用の大きさと、磁場の大きさが等しくなっています。 S_i^z を対角化する表示で、このハミルトニアンは対角化されます。（これはどちらかというと古典スピンの問題です。）

基底状態を求めるのは、とても簡単です。各々のスピンは、2つの交換相互作用と、1つの磁場の相互作用を感じるわけですから、結局交換相互作用の方が優勢になります。無限系での（偶数格子点分の並進について不変な）基底状態は、

... + - + - + - + - + - + - ...

という Néel 状態と、スピンを全て反転した状態の2つだけです。これらが、無限系の意味での基底状態になっていることを確かめるのは簡単です。（実は、並進不変でない状態の中にも基底状態になるものがでてきてしまいますが、今はそれについては考えません。）

無限系の問題はできたわけですが、ここで敢て有限の系を考えてみましょう。偶数個の格子点を持った両端のある鎖 $\{-L+1, -L+2, \dots, L-1, L\}$ の上で、先程のハミルトニアンを取り、基底状態を探します。当然、

+ - + - + - ... + - + - + -

と

- + - + - + ... - + - + - +

の2つが基底状態だと言いたくなります。しかしよく考えてみると、鎖の端にあるスピンは、交換相互作用を1つ分しか感じていないので、これに作用する磁場と交換相互作用の大きさが等しくなります。そこまで考えれば、この有限系の基底状態は、

| | |
|-------------|-----------------------------|
| φ_1 | + - + - + - ... + - + - + - |
| φ_2 | + - + - + - ... + - + - + + |
| φ_3 | - + - + - + ... - + - + - + |
| φ_4 | + + - + - + ... - + - + - + |

の4つであることがわかります。

このように、端のある鎖の上の系では、基底状態は4重縮退しています。しかもこの事情は、 L をいくら大きくしてやっても変わりません。そこで

$$(\text{無限系の基底状態の個数}) = \lim_{L \rightarrow \infty} (\text{有限系の基底状態の縮重度})$$

という（多くの量子スピン系の専門家に愛用されている）「公式」を使えば、無限系には4つの基底状態があるという誤った答えがでます。先ほど得た基底状態は2つという結果と全く矛盾しています！

この例はかなり trivial なものですが、ここで何がおこっているのかをじっくり理解するのは、無限系に慣れるためには大切なことです。上の φ_1 と φ_2 の基底状態は、右端のスピンが up か down かという点で異なっています。どんなに L が大きくても、この2つの状態は（Hilbert 空間のベクトルという意味で）直交しています。

これら2つの状態を元にして、無限系での状態を次のように定義します。

$$\omega_1(A) = \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \varphi_1 | A | \varphi_1 \rangle$$

for any local operator A

$$\omega_2(A) = \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \varphi_2 | A | \varphi_2 \rangle$$

φ_1 と φ_2 が任意の L について直交していたことを考えれば、 ω_1 と ω_2 も「直交」しているのではないかと思いたくなるでしょう。しかし ω_1 と ω_2 はもはや Hilbert 空間のベクトルではないのです。真面目に定義を眺めて、 ω_1 と ω_2 にどのような違いがでてくるかを吟味しなくてははいけません。上の極限操作では、local operator を 1 つ固定して、 L を無限大にとばしていることに注意してください。operator A が、如何に多数のスピン演算子の組み合わせで書かれていても、 L がどんどん大きくなって行けば、いずれ問題の右端の格子点は、 A の及ぶ範囲よりもずっと外側にでてしまいます。つまり上の極限で定義される $\omega_1(A)$ と $\omega_2(A)$ の値は、どのような local operator A についても、全く等しいのです。つまり ω_1 と ω_2 は、同じ 1 つの状態を表しているのです！結局、4 つの有限系の基底状態の内、2 つずつが同じ無限系の状態に収束し、無限系の状態は 2 つしかないということになります。

こうしてパラドックスは回避されたわけですが、どうも居心地の悪いような感じが残っているという人は多いと思います。実際、ここまで丁寧に説明して、納得してもらっても、再び「でも 2 つの状態は直交してるわけでしょう...」とやり始める量子スピン系の専門家はたくさんいます。我々は、有限系の量子力学の線型代数的な定式化に、あまりにも深く馴染み過ぎているのだと思います。ここで再び 2 つの定義の違いを考え直してください。そして（もっと大切なことですが）この問題の無限系での基底状態を 2 つであると定義するのと、4 つであると定義するのとどちらが「物理的」かを、自分なりに考えてみてください。（私はときどき、 φ_1 と φ_2 をそれぞれ 4.000...0000 と 3.999...999 という長さ L ケタの有理数に喩えて説明します。 L を無限大にすれば、どちらの数も 4 を表していて、これらを区別する理由はありません。）

同じハミルトニアンを使って、少し別のデモンストレーションもできます。有限系を考えると、奇数個の格子点を持った端のある鎖 $\{-L, -L+1, \dots, L-1, L\}$ を取ります。すると今度は基底状態は

$$+ - + - + - \dots - + - + - +$$

というの 1 つしかありません。おまけにこの基底状態はエネルギーギャップ（大きさは 2）を持っていて、その大きさは L によらずです。「基底状態はただ 1 つで、エネルギーギャップを持つ」という何か聞き慣れた状況になってしまいました。いったい何がどうおかしくなっているのかを検討するのは、読者におまかせします。

既に強調してきたように、ここで取り上げた例はあくまでも trivial なものです。ある程度物理の見えている人ならば、この問題では偶数個の格子点を持つ閉じた（周期的境界条件の）鎖を考えるはずで、そうすれば、目新しい無限系の取り扱いなど知らなくても、「基底状態は2つある」という正しい答えにすぐに到達できます。

だからといって、我々が上で見てきた困難がうわべだけの技術的なものだと考えてはいけません。全ての問題で a priori に「物理が見えている」ということはあり得ないのです。表面的にはまっとうに見える手続きから「基底状態は4つある」、「基底状態は1つで、その上にはエネルギーギャップがある」といった全く矛盾する答えがでてしまうというのは、おそろべき事実です。

さらに（これぞ重要なことですが）、次の節で見るように、量子ゆらぎが効いてくる問題になると、境界条件の取り方を変えた程度では、問題は解決されなくなります。こうなると無限系の期待値汎関数による定式化は避けて通れないものになります。

A.4 対称性の破れのある場合 — 例

いよいよ専門家でも間違いをおかす微妙な状況を考えることにしましょう。一般論を展開するかわりに、1つ比較的わかりやすい例を中心に話を進めます。次のようなハミルトニアンを持った $S = 1/2$ の1次元スピン系を考えます。（この例は、5.2節で挙げた Affleck, Lieb の論文から取りました。）

$$H = \sum_i S_i^z S_{i+1}^z + \delta (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y)$$

ここで、 δ は1よりも十分に小さな正の定数であるとし、つまりこれは反強磁性のイジング模型に非常に弱い（量子的な）摂動が加わったものです。

まずこの問題を有限鎖の上で考えます。偶数個（ L 個）の格子点を持った鎖を取り、境界条件は周期的でも、自由端でもよいことにします。すると Marshall-Lieb-Mattis の定理と Lieb-Schultz-Mattis の定理の拡張により、次の事実が証明できます。（具体的な証明は、Affleck, Lieb の論文を見てください。）

定理 偶数個の格子点を持った有限鎖上では、（任意の $\delta > 0$ について）ハミルトニアン H の基底状態は、ただ1つで、

$$\sum_i S_i^z |\varphi\rangle = 0$$

を満たす。さらに基底状態の上のエネルギーギャップは、 $1/L$ 以下のオーダーである。

ところが、無限系では、次のような事実を証明することができます。

定理 無限系では、 δ が十分に小さければ、ハミルトニアン H の（偶数格子点分の並進について不変な）基底状態はちょうど2つある。これらの状態を ω_1, ω_2 とする。 P を全てのスピンを x 軸の周りに π だけ回転する演算子（スピン反転）とすると、 $\omega_1(A) = \omega_2(PAP)$ が成立する。さらにこれらの状態は次のような意味で長距離秩序を持つ。

$$(\text{長距離相関}) \quad \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} (-1)^{|i-j|} \omega_1(S_i^z S_j^z) > 0$$

$$(\text{自発的対称性の破れ}) \quad (-1)^i \omega_1(S_i^z) > 0$$

このような定理は、厳密な摂動論を用いて証明することができます。数理物理の方では、そういうテクニックはかなり発達しています。例えば、Kennedy, Tasaki (Commun. Math. Phys. to appear) には、量子スピン系の厳密な摂動論が、かなり一般的に展開されています。この論文は、証明の中身を知らなくても、厳密な摂動論の結果だけは使えるようにと、「実用的に」書いてありますので、必要になった人は覗いてみてください。

再び、有限系と無限系との結果に食い違いがでました。しかも今回は、反強磁性の問題に最も適しているはずの偶数個の格子点を持つ周期的境界条件の鎖を使っているにもかかわらず、変なことになったのです。（奇数個の格子点を持つ系を考えても、ややこしくなるだけで、不一致は解消しません。）

ここで、有限系ででてくる唯一の基底状態というのが、どういうものを調べてみましょう。（technical な理由で、格子点の個数 L は4の倍数であるとします。） $\delta=0$ のときの基底状態である2つの Néel states を

$$\varphi_1 = |+-+---\dots +--+ \rangle, \quad \varphi_2 = |-+-+\dots -++ \rangle$$

と書きます。 δ が（1に比べて）充分小さな正の数であるときには、（有限系の）基底状態はこれらの線型結合で、

$$|\text{Ground State}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2) + (\text{small correction})$$

と書けます。 $1/L$ のオーダーのギャップを持つという第1励起状態は、

$$|\text{1st excited state}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 - \varphi_2) + (\text{small correction})$$

になります。つまり δ の付いた項が「量子ゆらぎ」を産み出し、2つの Néel states が resonate してしまったわけです。

無限系で現われる2つの基底状態というのは、言うまでもなく上の2つの Néel states

にわずかな摂動を加えたものです。つまり L が無限大になる極限では、有限系の基底状態と第 1 励起状態が再編成されて、 $|\text{Ground state}\rangle \pm |\text{1st excited state}\rangle$ の 2 つ（の極限）が基底状態になるのです。しかし L が有限であるかぎりには、このような再編成は決しておこらず、基底状態は唯一つしかありません。

3.2 節で Lieb-Schultz-Mattis の定理の応用を話したときに、有限系のエネルギーギャップが $1/L$ のオーダーである場合、無限系では「基底状態は唯一つで、エネルギーギャップはなし」という素直な可能性のほかに、「対称性が破れて、基底状態は 2 つ以上ある」というケースがあり得ると言いました。今の例が、この 2 つ目の可能性が実現している典型的な状況です。

A.5 Pure States への分解

たとえば計算機実験から、有限系は唯一つの基底状態を持ち、エネルギーギャップが $1/L$ のオーダーであることがわかったとします。しかし、これだけでは、無限系で許される 2 つの可能性の内のどちらが実現するかはわかりません。計算機実験から得られた基底状態についての知識から、どちらが実現するかを判定することはできないのでしょうか。

この問題を考えるために、前節の例をもう少しじってみます。仮に我々が有限系の基底状態しか知らずに、無限系の問題にアプローチしたとします。すると有限系の基底状態を用いて、

$$\omega_0(A) = \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \text{Ground State} | A | \text{Ground State} \rangle$$

のようにして無限系の状態を構成することになるでしょう。状態 ω_0 が（無限系の意味でも）基底状態であることは、すぐに確かめられます。しかし状態 ω_0 は全く対称性を破っていませんから、このハミルトニアンの基底状態としては unphysical なものに思えます。 ω_0 の何らかの性質を調べて、これが unphysical であるという兆候を見つけることができないものでしょうか？

状態 ω_0 が次のような性質を持つことはすぐに証明できます。

(長距離相関) $\lim_{|i-j| \rightarrow \infty} (-1)^{|i-j|} \omega_0(S_i^z S_j^z) > 0$

(対称性を破らないこと) $(-1)^i \omega_0(S_i^z) = 0$

この 2 つは、物理屋の常識からして、なんとなくアンバランスです。特にこれらを組み合わせると、次のように、truncated correlation function（ゆらぎの相関）が、2 つのスピンが離れても 0 に減衰しないことがわかります。

$$\lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \left| \omega_0(S_i^z S_j^z) - \omega_0(S_i^z) \omega_0(S_j^z) \right| \neq 0$$

短距離の相互作用を持つ物理系では、ゆらぎの相関は減衰するのが普通です。どうも ω_0 はこの辺りから責め始めれば、ほろを出しそうに思われます。

ここで突如として一般論に移ります。無限系の状態は、pure state と呼ばれるものと、そうでないものに分けられます。詳しい話はしませんが、物理的に意味があるのは pure state であるとされています。（御存知のように、有限自由度の統計力学にも pure state, mixed state というのがでてきます。しかし、今導入した pure という概念は、通常のものとは区別して、無限系でのみ意味を持つものと思ってください。（もちろん両者に関係はあります。））ある状態が pure state であることは、任意の local operators A, B について、

$$\omega(AB_i) - \omega(A) \omega(B) \rightarrow 0, \quad \text{as } |i| \rightarrow \infty$$

という clustering property が成立することと同値です。（実はこの辺も超厳密にいうとややこしいのですが、. . .）ここで B_i は、operator B を格子点 i のところまで平行移動したものです。

忙しいですが、再び例題に戻って、検討してみましょう。上で見たゆらぎの相関のふるまいは、状態 ω_0 が pure state ではないことを表しています。ここで、

$$|\text{Ground State}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2) + (\text{small correction})$$

という表式を用いて、状態 ω_0 の定義を具体的に

$$\begin{aligned} \omega_0(A) &= \frac{1}{2} \lim_{L \rightarrow \infty} (\langle \varphi_1 | + \langle \varphi_2 |) A (| \varphi_1 \rangle + | \varphi_2 \rangle) + (\text{correction}) \\ &= \frac{1}{2} \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \varphi_1 | A | \varphi_1 \rangle + \langle \varphi_2 | A | \varphi_2 \rangle + 2 \operatorname{Re}(\langle \varphi_1 | A | \varphi_2 \rangle) + (\text{correction}) \end{aligned}$$

と書き直すことができます。注目したいのは最後の行の第3項です。 φ_1 と φ_2 が2つの Néel states であったことを思いだせば、行列要素 $\langle \varphi_1 | A | \varphi_2 \rangle$ が0でないためには、 A は L 個のスピンを全て反転させる演算子になっていなくてはなりません。ところが、上の極限では local operator A を固定して、 L を大きくするわけですから、この行列要素は必ず消えてしまいます。（このような状況を標語的に「 L が無限大の系では、状態 φ_1 と φ_2 は異なった super selection sectors に属する」と表現することがあります。有限系の選択則 (selection rule) は、ハミルトニアンを持つ何らかの対称性からでてくるわけですが、

超選択則 (super selection rule) は無限自由度のために生じるものです。異なった super selection sectors の間を結ぶ local operator は全く存在しないという極めて強い選択則になっています。) 結局

$$\omega_1(A) = \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \varphi_1 | A | \varphi_1 \rangle + (\text{correction}), \quad \omega_2(A) = \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \varphi_2 | A | \varphi_2 \rangle + (\text{correction})$$

という状態を用いて、状態 ω_0 は

$$\omega_0(\cdot) = \frac{1}{2} \{ \omega_1(\cdot) + \omega_2(\cdot) \}$$

のように分解できることになります。ここに現われた ω_1 と ω_2 は、前節で議論した無限系の2つの基底状態に他なりません。もちろん ω_1 と ω_2 は pure states です。

一般に pure でない状態 ω は、

$$\omega(\cdot) = \sum_i \rho_i \omega_i(\cdot), \quad \rho_i > 0$$

のように pure states の線型結合に分解できることが知られています。(ここでの和は、無限和、あるいは積分になることもある。)

以上のことを標語的にまとめておくと

1 物理的に意味のある無限系の状態は pure state である。pure state では、ゆらぎの相関が距離とともに減衰する。

2 pure でない状態は、pure states の和に分解できる。

ということです。

有限系の計算機実験の結果から如何に無限系での情報を引き出すかという始めの設問への答えは、「基底状態での相関関数の挙動を調べることで、その無限体積極限が pure になるか否かを調べよ」ということになります。多くの計算機実験家は、言われなくても、こういうことを実行しています。

連続的な対称性が破られる場合にも、事情は (より複雑で難しくなりますが) 同様です。たとえば2次元の正方格子上の標準的な反強磁性のハイゼンベルグ模型では、 $S \geq 1$ の場合に長距離秩序の存在が厳密に示されています。(8.1節参照。) しかし Marshall-Lieb-Mattis の定理によれば、有限の大きさの正方格子 V の上に定義されたモデルの基底状態は唯一つで、一切の対称性を破りません。この基底状態を $|\phi_V\rangle$ と書くこ

とにしましょう。長距離秩序の存在の厳密証明によってわかっているのは、 V によらない定数 $c > 0$ があって、任意の V について

$$(-1)^{|i-j|} \langle 0_V | (S_i \cdot S_j) | 0_V \rangle \geq c, \quad \text{for any } i, j$$

が成立するという事です。

ここで無限系の状態 ω を

$$\omega(A) = \lim_{|V| \rightarrow \infty} \langle 0_V | A | 0_V \rangle$$

と定義すると、上の関係と $\omega(S_i) = (0, 0, 0)$ から ω が pure でないことがわかります。ですから ω は pure states の和に分解されることになります。mixed state である ω は、回転対称性を破りませんが、分解によって得られた pure state は、対称性を破るはずです。

この場合の分解は、立体角をパラメーターにして、

$$\omega(\cdot) = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \omega_\Omega(\cdot)$$

となると期待されます。ここで ω_Ω は、スピンの Ω 方向に向いた様な状態で、

$$\omega_\Omega(S_i) = \text{const. } (-1)^i \Omega$$

を満たします。残念ながら、この事実の証明はまだないようです。さらに上の分解に登場する pure state ω_Ω は、

$$H_\Omega = \sum_{\langle i, j \rangle} S_i \cdot S_j - h \sum_i S_i \cdot \Omega$$

という磁場の入った系の（無限系での）基底状態で、（無限体積極限の後に）磁場 h を 0 にする極限を取ったものと一致すると予想されます。このような極限で得られた状態（おそらくは pure state）が、対称性を破ることが証明できれば望ましいのですが、これもまだできていません。