

講義ノート

量子スピン系における秩序

青山学院大学理工学部物理学科 久保健

(2000 年 7 月 17 日受理)

0 はじめに

この講義ノートは、1999 年 1 月に京都大学理学研究科で著者が行った集中講義を京大理学部水崎研究室の大学院生である山口真澄さんが記録したノートをもとに、筆者が筆を加えたものである。題名は「量子スピン系における秩序」としたが、量子系に限らず古典スピン系あるいは一般の秩序について成り立つ基礎的な事柄で、一応知っておいた方が良いのではないかと筆者が日頃考えている内容が多く含まれている。そういうわけで通常集中講義に期待されている最先端の内容はあまり多くない。定理の証明も易しいものはなるべく詳しく書いてある。詳細にあまり興味の無い人は証明の計算の部分はとばして読んでもらえばよい。

なおこの講義を準備するにあたり、筑波大学物理学系の桃井勉博士に多くの事を教えて頂いた。また式の多いノートをタイプして下さった山口真澄さんに心から感謝する。

なおこのノートに含まれる誤りはすべて筆者の責任であり、誤りを指摘して頂ければ有難い。また文献リストは不完全なものであるが、ご容赦頂きたい。

1 Spin Hamiltonian

1-1 有効スピンハミルトニアン^{1,2)}の導出

電子や ^3He 原子などのスピンを持つ相互作用の強いフェルミ粒子多体系の基底状態が局在状態にある場合を考えよう。例えば電子であれば、絶縁体化合物やウイグナー結晶、 ^3He であれば固体状態がこれに対応する。相互作用が強いと十分低温では粒子の運動はほとんど起こらない。もし粒子が各サイトに完全に局在してしまえばそれらの持つスピンのような状態にあってもエネルギーは変わらない。しかしわずかに残った粒子のトンネリングにより、スピンの異なった状態間にエネルギー差が生じる。このとき系の低エネルギー励起状態はスピン自由度の変化による励起状態と見なすことができる。(励起エネルギーは実際には軌道状態の変化に起因する。)これらの低エネルギー励起状態を記述する有効ハミルトニアンはスピン自由度のみを用いて書き表すことができ、これを通常スピンハミルトニアンと呼んでいる。最初にその導出をおこなう。

N 個のフェルミ粒子を含む系のハミルトニアンは次のように表される。

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$$

相対論的效果を考えない限りハミルトニアンはスピンを含まない形をしており、 $\mathbf{r}_i$ の置換に対して不変である。サイト1に粒子1、サイト2に粒子2、… が局在している状態を表す波動関数 $\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ が上のハミルトニアンの基底状態の良い近似となっている場合を考える。

$\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ に対して粒子座標の置換を行って得られる波動関数

$$\Phi(\mathbf{r}_{p_1}, \dots, \mathbf{r}_{p_N}) = (P^{(R)})^{-1} \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$$

はサイト1に粒子 p_1 、サイト2に粒子 p_2 、… が局在している状態を表すが、この状態も

$\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ と同じ程度に基底状態の良い近似である。ここで $P^{(R)}$ はサイトの交換演算子で、

$(P^{(R)})^{-1}$ は波動関数の粒子の座標の置換を表す。少々ややこしいのだが、議論の都合上このよう

に書き表す。粒子が区別できると考えれば、この系では基底状態の近傍に $N!$ 個のほぼ縮重した状態が存在することになる。真の固有状態はこれらの1次結合で表され、そのレベル構造を決めるのはこれらの状態間のハミルトニアンの行列要素

$$\left\langle (P^{(R)})^{-1} \Phi | H | \Phi \right\rangle \equiv J_p$$

である。この J_p を交換積分と呼ぶ。この $N!$ 次元空間でのハミルトニアンは可能なすべての置換についての和をとって

$$H_{\text{eff}} = \sum_P J_P \left(P^{(R)} \right)^{-1}$$

となる。以下では簡単化のために $N!$ 個の状態 $P^{(R)}\Phi$ は規格直交化されていると仮定する。

フェルミ粒子はスピンをもっているから、スピン状態も含んだ波動関数を考えなくては
いけない。粒子1がサイト1でスピン状態 m_1 、粒子2がサイト2でスピン状態 m_2 、 $\dots$ にある
局在波動関数を

$$\Psi_M(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$$

とあらわす。ここで ξ_i は粒子 i のスピン変数、 $M \equiv \{m_1, m_2, \dots, m_N\}$ は全系のスピン配列をあらわ
す。この波動関数に粒子の置換を施すと座標とスピンの両方を置換するので、

$$P\Psi_M = \Psi_M(\mathbf{r}_{p_1}, \mathbf{r}_{p_2}, \dots, \mathbf{r}_{p_N}; \xi_{p_1}, \xi_{p_2}, \dots, \xi_{p_N}) = \left(P^{(R)} \right)^{-1} \left(P^{(\sigma)} \right)^{-1} \Psi_M(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$$

なる。ここで $P^{(\sigma)}$ はスピンの状態を置換する演算子であり、粒子の置換 P は

$$P = \left(P^{(R)} P^{(\sigma)} \right)^{-1}$$

であらわされる。ここまでは粒子が区別できるかのように議論してきたが、フェルミ粒子系であ
るから反対称化した波動関数

$$\psi_M \equiv A \sum_P (-1)^P P \Psi_M$$

を用いねばならない。こうするとこの空間には表面上もはやスピン状態の自由度 M しか残ってい
ない。この波動関数にハミルトニアンを作用させると

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} \psi_M &= \sum_{P'} J_{P'} \left(P'^{(R)} \right)^{-1} \left\{ A \sum_P (-1)^P \left(P^{(R)} P^{(\sigma)} \right)^{-1} \Psi_M \right\} \\ &= \sum_{P'} J_{P'} (-1)^{P'} P'^{(\sigma)} \left[A \sum_P (-1)^{PP'} \left\{ (PP')^{(R)} (PP')^{(\sigma)} \right\}^{-1} \Psi_M \right] \\ &= \sum_{P'} J_{P'} (-1)^{P'} P'^{(\sigma)} \psi_M \end{aligned}$$

となる。従って、ハミルトニアンはこの基底で張られる部分空間（スピン1/2粒子系では次元は
 $N!$ ではなく実は 2^N しかないことに注意）ではスピン状態の置換演算子のみを含むスピンハミル
トニアン

$$H_{\text{spin}} = \sum_P (-1)^P J_P P^{(\sigma)}$$

として表現される。このようにスピンハミルトニアンを用いてその系のスピン自由度のみを取り

扱うとき、その系をスピン系と呼ぶ。一般にスピンハミルトニアンはすべての置換を含んでいるが、そのうちの簡単な置換演算子を具体的に書き表してみよう。

1-2 2体交換相互作用

スピン1/2の粒子の交換では、パウリ行列を σ^x 、 σ^y 、 σ^z とあらわすと

$$\sigma_i \cdot \sigma_j = 2(\sigma_i^+ \cdot \sigma_j^- + \sigma_i^- \cdot \sigma_j^+) + \sigma_i^z \cdot \sigma_j^z \quad \text{であるから}$$

$$\begin{aligned} \sigma_i \cdot \sigma_j |\uparrow\rangle_i |\uparrow\rangle_j &= |\uparrow\rangle_i |\uparrow\rangle_j \\ \sigma_i \cdot \sigma_j |\uparrow\rangle_i |\downarrow\rangle_j &= 2|\downarrow\rangle_i |\uparrow\rangle_j - |\uparrow\rangle_i |\downarrow\rangle_j \end{aligned}$$

等がなりたち、 i サイトのスピンと j サイトのスピンの交換演算子 $P_{ij}^{(\sigma)}$ は

$$P_{ij}^{(\sigma)} = \frac{1}{2}(1 + \sigma_i \cdot \sigma_j)$$

と書くことができる。但し $\hbar=1$ とした（以後もすべて $\hbar=1$ とおく）。

ゆえに2体の交換による相互作用は定数項をのぞけばスピンの内積を用いて

$$-2J_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

と表される。これはよく知られているハイゼンベルク交換相互作用である。通常はトンネリングの経路が長くなると J_p が小さくなるので2体交換のみを考えればよく、例えば化合物磁性体中の電子では通常2スピン相互作用のみが重要である。（ただし化合物中のハイゼンベルク型交換相互作用は上述のような単純な2体交換から得られるものではない。）

1-3 多体交換相互作用

^3He 固体やウィグナー結晶では2個以上のスピンの交換相互作用も重要である。図1の3個の粒子の循環置換から生ずる3体交換演算子はパウリ行列を用いて、

$$\begin{aligned} P_{ijk}^{(\sigma)} &= P_{ij}^{(\sigma)} P_{ik}^{(\sigma)} = \frac{1}{4}(1 + \sigma_i \cdot \sigma_j)(1 + \sigma_i \cdot \sigma_k) \\ &= \frac{1}{4}\{1 + \sigma_i \cdot \sigma_j + \sigma_i \cdot \sigma_k + \sigma_j \cdot \sigma_k + i\sigma_i \cdot (\sigma_j \times \sigma_k)\} \end{aligned}$$

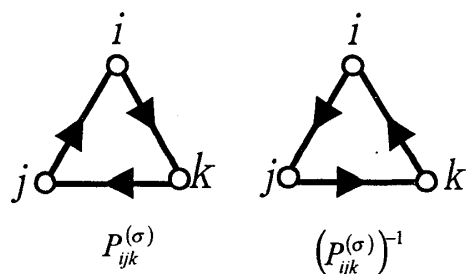


図1 3スピンの交換

となる。逆回りの3体交換 $(P_{ijk}^{(\sigma)})^{-1}$ に対する交換積分の値は通常等しいのでそれを加えると、3体相互作用は定数項を除き

$$\frac{J_3}{2}(\sigma_i \cdot \sigma_j + \sigma_i \cdot \sigma_k + \sigma_j \cdot \sigma_k)$$

となる。3体交換も2体交換と同じハイゼンベルク型の相互作用を与える。但し、磁場中の電子系の場合は右回りの置換に対する交換積分と左回りの置換に対する交換積分の値が違ってくるため、ハミルトニアンの中にスカラー3重積の項が残る。

図2に示す4体交換についても逆回りの置換を足し合わせた後の結果だけ示すと、

$$P_{ijkl}^{(\sigma)} + (P_{ijkl}^{(\sigma)})^{-1} = \frac{1}{4} \left\{ 1 + \sum_{\alpha < \beta} \sigma_\alpha \cdot \sigma_\beta + (\sigma_i \cdot \sigma_j)(\sigma_k \cdot \sigma_l) + (\sigma_i \cdot \sigma_l)(\sigma_j \cdot \sigma_k) - (\sigma_i \cdot \sigma_k)(\sigma_j \cdot \sigma_l) \right\}$$

となる。この式にはハイゼンベルク型ではない4個のスピン積からなる項が含まれる。 ^3He のbcc固体ではu2d2構造という特殊なスピン構造が低温で実現するが、このとき4体交換相互作用が重要な役割を果たしている。 ^3He 固体ではさらに多体の5体、6体の交換相互作用も無視できないことが知られている。²⁾

1-4 一般スピン間の相互作用

スピンハミルトニアンで記述される代表的な磁性物質は3d遷移金属の化合物であるが、3d金属イオン内部の3d電子間には強いクーロン相互作用が働いている。その結果、これらのイオンはいわゆるフント則に従い、イオン全体として通常1/2より大きい決まった大きさの合成スピンを持つ。この場合スピンハミルトニアンはこの大きいスピンの間の相互作用として書き表すことができる。従って以下でスピンハミルトニアンに表れるスピンは、とくに断らない限り一般の大きさ S をもつものとする。

上で導いたようにもともとスピンによらないハミルトニアンから出発すれば、スピン間相互作用はスピン空間において等方的であるが、現実の物質では相対論的効果であるスピン軌道相互作用が存在するため、2体交換相互作用は一般には

$$J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y + J_{ij}^z S_i^z S_j^z$$

の形になり異方性が存在する。相互作用以外にも（むしろ相互作用の異方性は通常小さい）、磁場との相互作用（ g factor）の異方性や1イオン異方性が存在する。2次の1イオン異方性が存在するとき、各サイトでスピンハミルトニアンに

$$D(S_i^z)^2 + E[(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2]$$

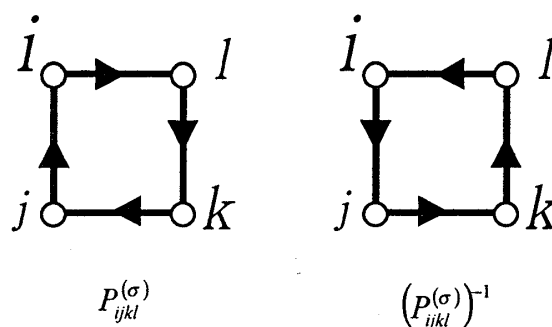


図2 4スピンの交換

の項がつけ加わる。スピンは $E=0$ かつ $D>0$ なら xy 面内、 $E=0$ かつ $D<0$ なら z 軸方向に向きたがる。 $S=1/2$ のときはこの項は存在しない。スピン空間での異方性は系の統計力学的性質に大きい影響をあたえる。

2 簡単な例

2-1 ハイゼンベルク模型

ハイゼンベルク模型は次のハミルトニアンであらわされる。

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

ここで $\mathbf{S}_i$ の大きさを S_i とあらわす。ただし特に断らない場合は $S_i = S$ でスピンの大きさはサイトによらないものとする。この系の基底状態は J_{ij} の値により以下のように変化する。

強磁性ハイゼンベルク模型 : $J_{ij} < 0$

この場合基底状態では図3のようにすべてのスピンが同じ方向を向く。系の全スピン $\mathbf{S}_T \equiv \sum_i \mathbf{S}_i$ の大きさはスピンの総数を N とすると SN である。

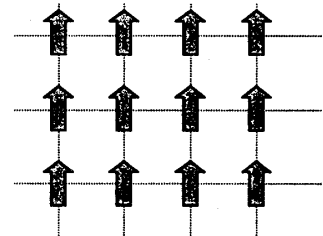


図3 強磁性スピン状態

反強磁性ハイゼンベルク模型 : $J_{ij} > 0$

この場合 $\mathbf{S}_i$ 、 $\mathbf{S}_j$ はお互いに反平行になろうとするが、基底状態は一般には自明でない。以下に簡単な2つの例を挙げる。

1) 正方格子上で最近接相互作用のみがある場合

全格子を図4のようにAとBの二つの部分格子に分ける。

図4に示されている部分格子Aと部分格子Bのスピンの向きを向くNeel状態が古典的な描像での基底状態である。しかしこの状態は本当のエネルギー固有状態ではない。量子スピン系では、量子揺らぎのためにこのNeel状態が壊されるか壊されないかが重要な問題となる。

A	B	A	B
B	A	B	A
A	B	A	B

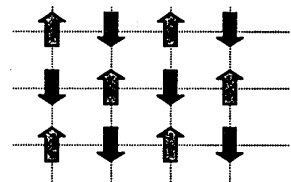


図4 Neel 状態

2) 三角格子上で最近接相互作用のみある場合

この場合全格子を2つの部分格子にうまく分けられないので、正方格子のようにNeel状態が作れない。このようにハミルトニアンの要素がお互いに競合していて、すべての要素（この場合は各格子点対間の相互作用）を同時に最小化する古典的な状態が作れないことを指して“フラスト

レーションが存在する” という。この場合、古典（分子場）近似では基底状態は図5に示す 120° 構造となる。

2-2 分子場近似（基底状態）

この節ではハイゼンベルク模型の基底状態を、スピンを大きさ S の古典的なベクトルとみなして（古典近似）前節より一般的な場合に求める。フーリエ変換を用いてハイゼンベルクハミルトニアンを書き直せば

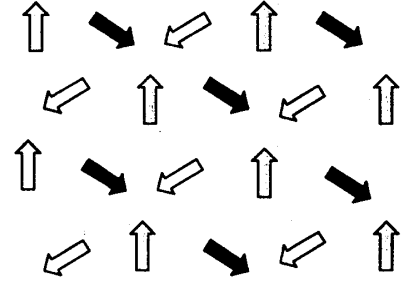


図5 120° 構造

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{q}) \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \quad .$$

ここで $\mathbf{S}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \mathbf{S}_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}$ 、 $J(\mathbf{q}) = \sum_i J_{ij} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}$ である。

基底状態の $\mathbf{S}_{\mathbf{q}}$ はハミルトニアンの最小値を与えるように決まるのであるが、各スピンの大きさが S だから、 N 個の条件

$$\mathbf{S}_i^2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_i} = S^2$$

を同時に満たしていなければならない。これらの条件のうち $\sum_i \mathbf{S}_i^2$ に対する条件のみを取り入れ

てラグランジュの未定係数法を用いると

$$\delta \left(H - \lambda \sum_i \mathbf{S}_i^2 \right) = 0, \quad \text{従って} \quad (J(\mathbf{q}) - 2\lambda) \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} = 0 \quad \text{を得る。}$$

$J(\mathbf{q})$ の最小値を与える $\mathbf{q}$ を $\mathbf{Q}$ （一つとは限らない）とする。そのような波数成分のみをもつ状態が上の N 個の条件を満たしていれば、それはすなわち基底状態である。そこでまず $\mathbf{Q}$ の値がどうなるかをいくつかの例について示す。

1) 強磁性ハイゼンベルク模型： $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$

2) 反強磁性ハイゼンベルク模型（ d 次元超立方格子上で最近接相互作用のみがある場合）：

（以後とくに断らないかぎり格子定数を 1 とする）

$$J(\mathbf{q}) = 2J \sum_{m=1}^d \cos q_m \quad \text{であるから} \quad \mathbf{Q} = (\pi, \pi, \dots)$$

3) 1 次元反強磁性 $J_1 - J_2$ 模型（図 6）：

$$J_2 = \lambda J_1 \quad (J_1 > 0, \lambda > 0) \quad \text{とすると、} \quad J_q = 2J(\cos q + \lambda \cos 2q) \quad \text{は} \lambda \text{ の値により } \mathbf{Q} \text{ の値}$$

が異なり

$$\lambda \leq \frac{1}{4} \text{ の時 } Q = \pi$$

$$\lambda > \frac{1}{4} \text{ の時 } Q = \pm \cos^{-1} \left(\frac{1}{4\lambda} \right)$$

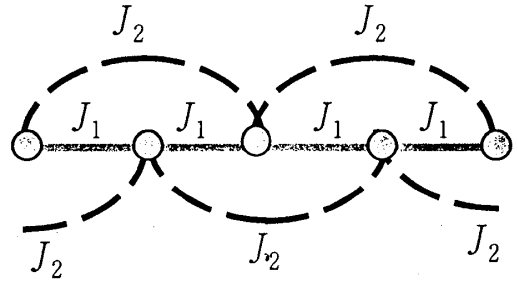


図6 1次元 J_1 - J_2 模型

例3) では J_1 と J_2 の間に競合があるために、波数空間の中途半端な点に Q が表れる。このように2個の波

数ベクトル $\mathbf{q} = \pm \mathbf{Q}$ だけで $J(\mathbf{q})$ が最小値をとる ($\mathbf{Q} \neq \mathbf{0}$ かつ $\mathbf{Q} \neq (\pi, \pi, \dots)$) の場合について基底

状態を具体的に考えてみよう。この場合

$$\mathbf{S}_{\mathbf{Q}} = \mathbf{R} + i\mathbf{I}, \quad \mathbf{S}_{-\mathbf{Q}} = \mathbf{R} - i\mathbf{I}$$

これ以外の $\mathbf{q}$ で $\mathbf{S}_{\mathbf{q}} = \mathbf{0}$ となる。元の N 個の条件は各 i について

$$N S^2 = 2(\mathbf{R}^2 + \mathbf{I}^2) + 2(\mathbf{R}^2 - \mathbf{I}^2) \cos 2\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i - 4\mathbf{R} \cdot \mathbf{I} \sin 2\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i$$

であるから $|\mathbf{R}| = |\mathbf{I}| = \frac{\sqrt{N}S}{2}$ かつ $\mathbf{R} \perp \mathbf{I}$ とおけば満たされるが、このとき

$$\mathbf{S}_i = \frac{2}{\sqrt{N}} (\mathbf{R} \cos \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i - \mathbf{I} \sin \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i)$$

である。この状態のエネルギーはもちろん

$$E = \frac{1}{2} N J(\mathbf{Q}) S^2 \text{ である。この状態のスピンは } \mathbf{Q} \text{ に垂直な格子面内で平行にそろっていて、} \mathbf{r}$$

だけ離れた2個の面内のスピンの向きはお互いに角度 $\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}$ だけずれている (図7)。このようなスピン構造をスパイラル構造と呼ぶ。³⁾

$J(\mathbf{q})$ を最小にする $\mathbf{q}$ が3個以上ある場合も同様な方

法で基底状態が求められるが、一般に基底状態は (全体の回転、併進等を除いても) 一意的には決まらない。

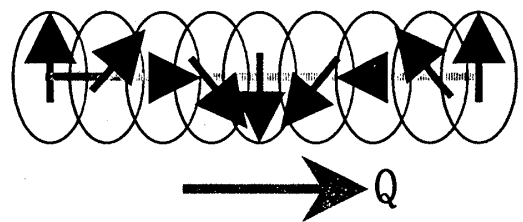


図7 スパイラル構造

2-3 二部 (bipartite) 格子系

図4に見られるように、全格子がAとBの2つの部分格子から構成され

- 1 i, j が異なる部分格子に属するとき $J_{ij} \geq 0$ 。
- 2 i, j が同じ部分格子に属するとき $J_{ij} \leq 0$ 。

という条件を満たす系を、この講義では二部格子系と呼ぶ。二部格子系ハイゼンベルク模型はフラストレーションのない系であり、古典近似における基底状態はNeel状態である。しかし量子系の基底状態でこのようなNeel秩序 (このことの正確な意味については後で説明する。) が存在す

るかどうかは、次元性、 J_{ij} の詳細に依るので簡単には判らない。Neel 秩序が存在する場合の例としては最近接格子点間のみ相互作用をもつ超立方格子 ($d \geq 2$)、蜂の巣格子などがある。一方一次元系では Neel 秩序は存在しない。二次元でも CaV_4O_9 構造のように同等でない J_{ij} を含むような系では J_{ij} の値により Neel 秩序が存在しない場合がある。

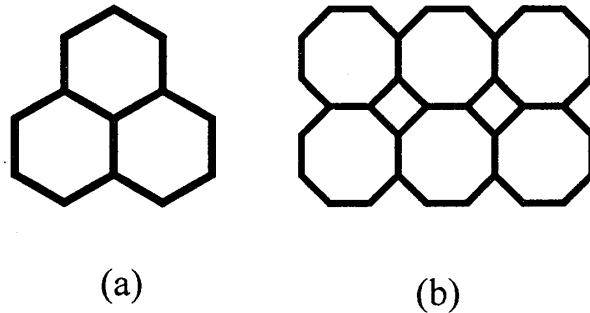


図8 (a)蜂の巣格子(b) CaV_4O_9 構造

しかし、二部格子系では次の一般的な定理がなりたつ。

2-4 Marshall-Lieb-Mattis の定理

この定理は二部格子上のハイゼンベルク模型の基底状態のスピン量子数に関する一般的な定理である。二つの部分格子はどのような配置であってもよく、また格子点上のスピン大きさにも制限はない。

[定理] (Marshall-Lieb-Mattis) ⁴⁾

N ($< \infty$) 格子点上のハイゼンベルクハミルトニアン

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

が以下の条件を満たすとする。

1. J_{ij} が二部格子系の条件を満たす。
2. 全スピンが J_{ij} によって繋がっている。すなわち任意の i, j に対し適当な経路 $i, i_1, i_2, \dots, i_n, j$ を選ぶことにより $J_{ii_1} J_{i_1 i_2} \dots J_{i_n j} \neq 0$ とできる。

このとき次の事が成り立つ

- 1) 基底状態の全スピンの大きさ S_T は $S_T = S_0 \equiv |S_A - S_B|$ である。ここで S_A (S_B) は副格子 A (B) 上の各スピンの大きさの総和。全スピンの大きさが S である固有状態の最低固有エネルギーを $E(S)$ と表すと $S \geq S_0$ の時 $E(S+1) > E(S)$ 。

- 2) 基底状態での相関関数を $g(i, j) \equiv \langle S_i^x S_j^x \rangle$ とすると

$$\begin{aligned} i, j \text{ が同じ副格子に属するとき} & \quad g(i, j) > 0 \\ i, j \text{ が異なる副格子に属するとき} & \quad g(i, j) < 0 \end{aligned}$$

この定理により超立方格子上的最近接反強磁性ハイゼンベルク模型の基底状態は $S_T = 0$ の状態であることが直ちに導かれる。

異方的ハミルトニアンへの拡張

XXZ 模型

$$H_{XXZ} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z)$$

では次の定理が成り立つ。 Δ は交換相互作用の異方性を表すパラメタである。

[定理] (Mattis, Nishimori) ⁵⁾

J_{ij} が上と同じ条件を満たすとき基底状態における S_T^z の固有値について以下のことがなりたつ。

1. $\Delta < -1$ の場合 (Ising 的強磁性模型) 基底状態は二重縮退、 $S_T^z = \pm \sum_i S_i$
2. $|\Delta| < 1$ の場合 (XY 的強磁性模型または XY 的反強磁性模型) $S_T^z = 0$ または $\pm 1/2$
3. $\Delta > 1$ の場合 (Ising 的反強磁性模型) 基底状態は二重縮退、 $S_T^z = \pm S_0$

Marshall-Lieb-Mattis の定理は基底状態でのスピン固有値に関する知見を与えるが、基底状態が秩序状態かどうかについての知見は一般には与えない。また、この定理によって有限系が唯一の基底状態を持つ場合でも、無限系は唯一の基底状態を持つわけではないことに注意が必要である。しかし Marshall-Lieb-Mattis の定理から直ちに秩序の存在が結論できる場合がある。それは図9に示すようなフェリ磁性の場合であるが、これについては秩序の定義を明確に行った後で説明する。

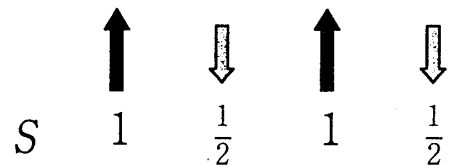


図9 混合スピン鎖のフェリ磁性

[証明の概要] (Marshall-Lieb-Mattis の定理)

まず部分格子A上のスピンを S^z 軸の回りに角度 π だけ回転する正準変換をハミルトニアンに施す。この変換によってA上のスピンは $S_i^x \rightarrow -S_i^x$ 、 $S_i^y \rightarrow -S_i^y$ 、 $S_i^z \rightarrow S_i^z$ と変換される。部分格子B上のスピンは変えない。変換後のハミルトニアンは

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \left\{ -\frac{|J_{ij}|}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J_{ij} S_i^z S_j^z \right\}$$

となる。 $S_T^z = \sum_i S_i^z$ は保存量なので $S_T^z = M$ の部分空間での固有値問題を考える。

この部分空間の基底を

$$\phi_\alpha = N_\alpha \prod_i (S_i^+)^{m_i} \Phi_0$$

と選ぶ。ただし $\alpha \equiv \{m_1, m_2, \dots, m_N\}$ 、また Φ_0 はすべての i で $S_i^z \Phi_0 = -S_i \Phi_0$ を満たす。このときこの部分空間内でのハミルトニアン of 行列要素は

- 1) 任意の $\alpha \neq \beta$ に対し $\langle \phi_\alpha | H | \phi_\beta \rangle \leq 0$ 、
- 2) 適当な $n > 0$ を選べば $\langle \phi_\alpha | H^n | \phi_\beta \rangle \neq 0$ 、

の二つの性質を満たす。従って Perron-Frobenius の定理によって次の補助定理がなりたつ。

[補助定理]

$S_T^z = M$ の部分空間の基底状態は唯一であり、その状態を $\psi_M = \sum_\alpha c_\alpha \phi_\alpha$ とあらわしたとき、すべての α にたいし $c_\alpha > 0$ とできる。

つぎに基底状態の全スピンの大きさを決めるために、同じ格子上で定義された簡単なハミルトニアン H_{ref} を導入する。

$$H_{\text{ref}} = \left(\sum_{i \in A} \mathbf{S}_i \right) \cdot \left(\sum_{j \in B} \mathbf{S}_j \right) = \mathbf{S}_A \cdot \mathbf{S}_B$$

このハミルトニアンの固有値は簡単にわかり、 $S_T = S_0$ の場合が基底状態である。 H_{ref} に対して補助定理がなりたつので、 $S_T^z = M$ の部分空間の基底状態を ψ_M^{ref} とおくと $\langle \psi_M^{\text{ref}} | \psi_M \rangle \neq 0$ である。このことから ψ_M^{ref} と ψ_M は同じ全スピンをもつ状態であることがいえる。相関関数の符号は c_α の定符号性から直ちに得られる。

拡張された場合についても基本的に同じやり方で証明できる。Perron-Frobenius の定理を用いる議論は物理の様々な局面で顔を出すので、知っておくのは悪くない。また相関関数の符号が確定していることもフェリ磁性秩序の存在証明等に役立つ。

3 長距離秩序 (long-range order)

この章では秩序があるとはどういうことかを明確に定義する。また量子スピン系において存在する代表的な秩序を紹介する。

3-1 長距離秩序と自発的な対称性の破れ

強磁性状態の自発磁化のように、秩序状態において秩序を特徴づける量を秩序変数 (order parameter) と呼ぶ。秩序変数は秩序演算子 O の期待値 (基底状態での期待値あるいは熱平均値) $\langle O \rangle$ によって与えられる。通常 O は局所的な秩序演算子 O_i の和として表される。

$$O = \frac{1}{N} \sum_i O_i$$

たとえば2章で紹介した秩序状態を特徴づける秩序変数は以下のようにになる。

秩序状態	秩序変数	O_i
強磁性	自発磁化	S_i
反強磁性	staggered 磁化	$(-1)^i S_i$
スパイラル	スパイラル磁化	$e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i} S_i$

ハミルトニアンには通常各種の対称性がある。たとえば、イジング模型はスピンの反転、ハイゼンベルク模型はスピン空間の回転に対し不変である。それらの対称操作をあらわすユニタリー変換を U とおくと、任意の物理量 A の有限系における平均値はこの変換に対して不変である。すなわち

$$UHU^\dagger = H \quad \text{の時} \quad \langle UAU^\dagger \rangle = \langle A \rangle。$$

従って秩序変数 O が変換によって符号を変えるとき

$$\langle O \rangle = \langle UOU^\dagger \rangle = -\langle O \rangle = 0$$

であり、有限系ではこのような秩序は現れないことがわかる。イジング模型におけるスピンの反転がこの例である。ハミルトニアンに連続的な対称性が存在する場合はどうだろうか。例としてハイゼンベルク模型に対してスピン S^z 軸の回りの回転

$$U(\alpha) = \exp[i\alpha S_T^z]$$

を考えると

$$U(\alpha) S_i^x U(\alpha)^\dagger = \cos \alpha S_i^x + \sin \alpha S_i^y$$

$$U(\alpha) S_i^y U(\alpha)^\dagger = \cos \alpha S_i^y - \sin \alpha S_i^x$$

である。この変換でハイゼンベルクハミルトニアンは不変であるから、任意の物理量 A に対して

$$\langle U(\alpha)AU(\alpha)^\dagger \rangle = \langle A \rangle。$$

したがって

$$\frac{d}{d\alpha} \langle U(\alpha)AU(\alpha)^\dagger \rangle = i \langle [S_T^z, A] \rangle = 0$$

が成り立つ。 A として S_i^x を選ぶと

$$\langle S_i^y \rangle = -i \langle [S_T^z, S_i^x] \rangle = 0$$

が成り立つ。このように連続対称変換の generator との交換子で表される量の有限系での期待値はゼロになることが判る。

しかし、無限系ではこのような秩序変数が有限になりうる。このときの無限系の状態はハミルトニアンの持つ対称性の破れた状態であり、このような状態が実現することを‘自発的な対称性の破れ’と呼ぶ。このことを正確に議論するためには、無限系における期待値を定義しておかねばならない。この講義では、ハミルトニアンの対称性を破る外場 B を導入して

$$o_s \equiv \lim_{B \downarrow 0} \lim_{N \uparrow \infty} \langle O \rangle_{N,B}$$

と無限系の秩序変数を定義する（Bogoliubov の quasiaverage⁶⁾）。ここで $\langle O \rangle_{N,B}$ は

$H_{N,B} = H_N - NBO$ による平均で N は系が含むサイト数である。 $o_s \neq 0$ の時自発的な対称性の破れが存在するという。

このように人工的な外場 B を導入しなくても、無限系では本来秩序は存在しているはずである。それを表現するのが長距離秩序（long-range order）である。 $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \rightarrow \infty$ の極限で相関

関数 $\langle O_i O_j \rangle$ が o_L^2 に収束し、 $o_L \neq 0$ のとき長距離秩序が存在するという。 o_L は

$$o_L = \lim_{N \uparrow \infty} \sqrt{\langle O^2 \rangle}$$

とあらわすことができる。

長距離秩序が存在すれば対称性の破れが起こることは次の定理で一般的に証明されている。

[定理] (Griffiths-Koma-Tasaki)^{7,8)}

系が（短距離相互作用をしているたいていの系は満たしている）通常の性質を持っていれば、

$$|o_s| \geq o_L$$

が成り立つ。

とくにハイゼンベルク模型のように、秩序変数が3次元ベクトルで系がその空間で等方的な場合は、 o_L の定義では秩序変数の方向について平均されるので $|o_s| = \sqrt{3}o_L$ が成り立つことが予想されるが、 $|o_s| \geq \sqrt{3}o_L$ が成り立つことが厳密に証明されている。⁸⁾ この定理によって長距離相関の存在が秩序にとって本質であることがわかる。定理の一般的な証明は Koma-Tasaki の論文を参照してほしい。基底状態のみに関する証明 (Kaplan-Horsch-von der Linden)⁹⁾ は比較的簡単で教育的である。

3-2 フェリ磁性

ここで9図に示した混合スピン系における秩序について考えてみよう。この場合A副格子上で $S=1$ 、B副格子上で $S=1/2$ である。全格子点数を N とおくと、 $S_A = \frac{N}{2}$ 、 $S_B = \frac{N}{4}$ であるので、Marshall-Lieb-Mattis の定理により全スピンの大きさは $S_T = |S_A - S_B| = \frac{N}{4}$ となる。全スピンの大きさがマクロな大きさなので強磁性の長距離秩序をもつことがただちに言える。この場合有限系の基底状態は $\frac{N}{2} + 1$ 重に縮退しているが、そのうちで $S_T^z = 0$ の状態を選ぶと強磁性の秩序演算子 (S^x 方向) O_F については

$$N \rightarrow \infty \text{ のとき } \langle O_F^2 \rangle = \left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_i S_i^x \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{2N^2} \langle (\sum_i S_i)^2 \rangle \rightarrow \frac{1}{32}$$

一方反強磁性の秩序演算子 $O_{AF} = \frac{1}{N} \sum_i (-1)^i S_i^x$ に対して Marshall-Lieb-Mattis の定理から導かれる相関関数の性質を用いると

$$\langle O_{AF}^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_j (-1)^{i-j} \langle S_i^x S_j^x \rangle \geq \frac{1}{N} \sum_j \langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle O_F^2 \rangle$$

したがってこの系では強磁性秩序と反強磁性秩序が同時に存在する。このような秩序をフェリ磁性と呼ぶ。

3-3 いろいろな秩序

前節および前々節にあげた秩序は各サイトのスピンの方向が一定の方向を向くことにより生ずるもので、量子性に関係なく現われうる秩序であるが、量子スピン系にはさまざまな秩序が現われうる。以下にそれらのいくつかをあげる。

1. ダイマー秩序

簡単に言えば図10のようにスピンの二個づつ強く結合した対を作る秩序である。以下では簡単のために $S=1/2$ の系を考えるが、一般の S の系でもダイマー秩序は存在する。

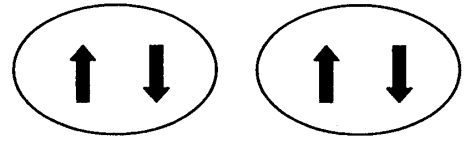


図10 ダイマー秩序状態

秩序オペレータは

$$O_i = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+d} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i} \quad (\mathbf{Q} \neq 0)$$

$\mathbf{d}$ は通常最近接サイトへの格子ベクトル。この秩序は一次元スピン鎖の基底状態で実現することがよく知られている。例えば一次元交替鎖

$$H = J \sum_i (1 + (-1)^i \delta) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$$

($J > 0, 1 > \delta > 0$) の基底状態では、 i が偶数の時 $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$ が奇数の時より強くカップルしており、

ダイマー秩序がある。この場合はハミルトニアンが明瞭に長周期構造をもっているので、ダイマー秩序が現れることは不思議ではないが、フラストレーションがあるときダイマー秩序が自発的な併進対称性の破れを伴って現れることは自明ではない。図6に示した1次元反強磁性 J_1 - J_2 模型を考える。

$$H = J \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \lambda \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) \quad J > 0, \lambda > 0$$

古典系の基底状態は $\lambda > 1/4$ の時スパイラル状態であるが、量子系では異なる。 $\lambda = 1/2$ のとき(これを Majumdar-Ghosh 模型とよぶ。)にハミルトニアンを書き直すと

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

となる。この和の各項の固有値は3個のスピンのうちの2個が $\mathbf{S} = \mathbf{0}$ の状態にあるとき最小である。従って全系の基底状態は周期境界条件のもとで2重縮退しており波動関数は各々

$$\Psi_1 = \prod_i \psi_S(2i-1, 2i), \quad \Psi_2 = \prod_i \psi_S(2i, 2i+1)$$

とあらわされる。¹⁰⁾ ここで $\psi_s(2i, 2i+1)$ は $2i$ および $2i+1$ サイトのスピンの作る 1 重項波動関数。 Ψ_1 、 Ψ_2 は隣り合う 2 個のスピンのシングレット対を作り、その外側と相関のない状態である。一般の λ に対する詳しい数値的解析 (Okamoto-Nomura) によれば、 $\lambda > 0.241$ でダイマー秩序が存在するが、この場合の基底状態の波動関数は上のように簡単なものではなく、相関は対の外側にも及んでいる。¹¹⁾ 一般にダイマー秩序が存在する場合には励起状態と基底状態の間にエネルギーギャップが存在することが知られている。

この種のより一般的な秩序として n 個のスピンの強く結合したクラスター秩序が存在する。たとえば図 8 の CaV_4O_9 構造では 4 個のスピンの強く結合した秩序状態の実現するパラメタ領域がある。

2. ベクトル・カイラル (vector chiral) 秩序¹²⁾

この秩序が存在する例として三角格子反強磁性体の古典的基底状態である 120° 構造 (3 副格子構造) がある。

図 11 に示したサイト 1, 2, 3 からなる三角形上のカイラルベクトルを

$$\mathbf{V} = \mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \times \mathbf{S}_1$$

と定義する。ここで 1, 2, 3 は (例えば) 左回りにとるものと決めておく。三角格子上の秩序変数は

$$\left\langle \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{v}_i \right\rangle$$

ととればよい。ここで和は格子上の上向きの三角形についてすべてとる。 120° 構造では一つの三角形あたりのカイラルベクトルは $\frac{3\sqrt{3}}{2} S^2 \mathbf{e}$ 。ここで $\mathbf{e}$ はスピンの揃う面に垂直な単位ベクトルである。この秩序が存在する状態では空間反転対称性が破れている。

3. スカラー・カイラル (scalar chiral) 秩序¹³⁾

図 11 の三角形上のスカラー・カイラリティーを

$$\chi = \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3$$

と定義する。三角格子上の上向きの三角形すべてについて和をとり

$$\left\langle \frac{1}{N} \sum_i \chi_i \right\rangle$$

が秩序変数となる。 120° 構造ではスピンの一つの面内にそろうので、この秩序は存在しない。

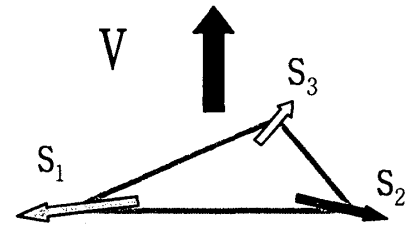


図11 ベクトルカイラル秩序

スカラー・カイラリティーの存在する古典的秩序状態として、図 12 に示す三角格子上の四面体状態（4 副格子構造）がある。¹⁴⁾ この状態では各副格子のスピンは、正 4 面体の中心からその各頂点に向かう方向にそろう。異なる副格子のスピンベクトル同士の内積は $-S^2/3$ であるから一つの三角形上のカイラリティーの大きさは

$$4S^2/(3\sqrt{3}) \text{ で、すべての上向きの三角形が同じ}$$

大きさのカイラリティーを持つ。この秩序が存在する状態では、空間反転と時間反転に対する対称性がともに破れている。

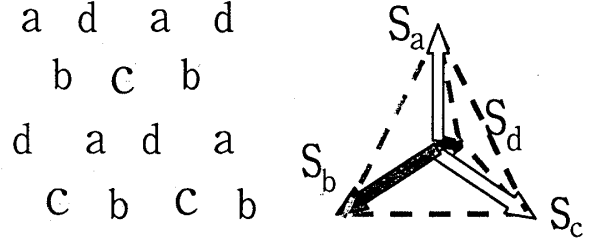


図 12 三角格子の四面体状態

この秩序は古典的な磁気秩序を持たない状態でも実現するのではないかと考えられている。たとえば正方形上の 4 個の $S=1/2$ スピンが作る $S=0$ の状態は二重に縮退しているが、それ

らを $\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{6}}(\phi_1 + \omega_{\pm}\phi_2 + \omega_{\pm}^2\phi_3)$ とあらわすことができる。ここで $\omega_{\pm} = \exp\left(\pm \frac{2\pi}{3}i\right)$ 、

$\phi_1 = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$ 、 $\phi_2 = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$ 、 $\phi_3 = |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ である。このとき $\psi_{\pm}$

はスカラーカイラリティーが正と負の状態である。基底状態において、格子上のすべての正方形でこのような状態になっていればその状態はスカラーカイラル秩序をもつ。しかし、そのような基底状態を持つ簡単なハミルトニアンは今のところ見つかっていない。

4. ストリング (string) 秩序¹⁵⁾

この秩序は一次元 $S=1$ 反強磁性ハイゼンベルク模型の Haldane 状態で存在する秩序である。この秩序は簡単な秩序変数で表すことはできない。 $j-i \rightarrow \infty$ の極限で次のような相関が有限に残るときストリング秩序が存在する。

$$\left\langle S_i^z \exp \left[i\pi \sum_{l=i+1}^{j-1} S_l^z \right] S_j^z \right\rangle$$

この秩序は 1 次元 $S=1$ ハイゼンベルク模型に適切なユニタリー変換を施すことにより、通常の秩序変数で表すことができる。

4. スピン波

この章では磁気秩序のある基底状態からの励起状態を議論する。この場合低エネルギーの励起状態はスピン秩序のゆらぎが空間的に波として伝わる状態である。この波をスピン波、それを量子化したものをマグノンと呼ぶ。

4-1 強磁性スピン波

強磁性の基底状態として、すべてのスピンの向きが z 方向にそろった状態を選ぶ。

$$S_i^z|\varphi_0\rangle = S|\varphi_0\rangle$$

スピン波の計算をする際にはスピンをボース演算子で書き表すと便利である。ここでは Holstein-Primakoff の変換を行う。

$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i, \quad S_i^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad S_i^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} a_i$$

ここで $\left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{\frac{1}{2}}$ を展開すると、 S^{-1} についての展開が得られる。 S^1 の項まで正しいハミルトニ

アンは次のように書ける。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} [S^2 - 2S a_i^\dagger a_i + 2S a_i^\dagger a_j]$$

ここで a_i のフーリエ変換

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}}$$

を用いてハミルトニアンを書き直すと

$$H = E_0 - S \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} [J(0) - J(\mathbf{k})]}_{\omega_{\mathbf{k}}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad .$$

$a_{\mathbf{k}}^\dagger$ は量子化されたスピン波 (マグノン) を 1 個作る演算子、 $\omega_{\mathbf{k}}$ はスピン波の振動数で k が小さいとき

$$\omega_{\mathbf{k}} = -S \sum_j J_{ij} (1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}) \equiv Dk^2 \quad (1 \text{ 次の項は足しあわせると } 0)$$

となる。 $D (> 0)$ はスピンのひねりに対する強磁性状態の剛性を表す量で spin stiffness constant と呼ばれる。強磁性ハイゼンベルク模型の場合、マグノンが 1 個励起された状態は正確な固有状態であることを注意しておく (後で述べる反強磁性の場合はそうではない)。2 個以上マグノンが励起された状態は固有状態ではなく、マグノンの間には相互作用が存在する。マグノンが多数励

起された状態には、1 個のサイトに $2S$ 個以上のマグノンが存在する状態が含まれるが、これはもとのスピン系の状態空間には含まれていなかった状態であり、近似によって混ってきたものである。しかしマグノンの励起が少ない場合にはこのような状態の影響は小さいと考えて議論を進める。

つぎにスピン波の自発磁化への影響を計算する。

$$M = \sum_i S_i^z = NS - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = NS - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta\omega_{\mathbf{k}}} - 1}$$

低温では長波長領域の寄与が大きいので $\omega_{\mathbf{k}} \cong Dk^2$ を代入すると、スピン波の励起による磁化の補正は d を次元数として

$$\Delta M \propto - \int \frac{k^{d-1} dk}{e^{\beta Dk^2} - 1}$$

$d = 3$ の時は $X = \beta Dk^2$ とおいて

$$\Delta M \propto (\beta D)^{-\frac{3}{2}} \int \frac{X^{1/2} dX}{e^X - 1} \propto (k_B T)^{\frac{3}{2}}$$

となり、マグノンの励起による自発磁化の減少は温度の $3/2$ 乗に比例する。

$d = 2$ の時、長波長領域の積分は

$$\int \frac{k dk}{e^{\beta Dk^2} - 1} \sim \int \frac{k dk}{k^2}$$

となり ΔM は $-\infty$ に発散してしまう。この結果は、 $d = 2$ の時有限温度では自発磁化が消失して、 $M = 0$ となることを示していると解釈されている。このようなスピン波理論の低次元における破綻は修正スピン波理論等¹⁷⁾によって改良されたが、2 次元以下では有限温度で磁化が消失するという結論自体は正しいことが 4 章で厳密に示される。

修正スピン波理論等の詳しい紹介はここでは行わないが、それらによればスピンの相関距離 ξ は低温で指数関数的に増大する。この事は以下のように簡単に理解できる。有限温度の 2 次元系で強磁性の秩序が有限の相関距離 ξ を持っているとき、 ξ より小さい波長領域ではスピン波は励起のよい記述になっているが、波長が ξ より大きいスピン波の描像は成り立たない。そこで $k > \xi^{-1}$ を満たす波数を持つスピン波だけが存在すると考えると

$$-\Delta M = \sum_{k > \xi^{-1}} n_k \approx \frac{2\pi N}{(2\pi)^2} \int_{\xi^{-1}}^{k_m} k dk \frac{1}{\beta Dk^2} \sim \frac{N}{2\pi} \frac{k_B T}{D} (C - \ln \xi^{-1})$$

有限温度で $M = 0$ であるとすれば $-\Delta M = NS$ となるので

$$\xi^{-1} \propto \exp \left[\frac{2\pi S D}{k_B T} \right]$$

となり、相関距離が指数関数的に増大する結果が得られる。

4-2 反強磁性スピン波

二部格子上的反強磁性ハイゼンベルク (AFH) 模型の分子場近似による基底状態は Neel 状態であるが、これは真の基底状態ではない。このことは $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$ を Neel 状態に作用させてみればすぐにわかる。真の基底状態は Neel 状態に量子ゆらぎの補正が加わったものとするのが最も自然な考え方である。この補正が単に数値的補正にとどまるのか、それとも Neel 状態の秩序がゆらぎによって完全に壊されてしまうのかという問題が量子スピン系の重要な問題の一つである。反強磁性の場合もゆらぎが波として伝搬するスピン波の考えが有効なので、以下に反強磁性スピン波について説明する。

この場合は A, B の副格子に分けて Holstein-Primakoff 変換を行う。¹⁸⁾

i が A 副格子に属するとき

$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i, \quad S_i^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad S_i^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} a_i,$$

j が B 副格子に属するとき

$$S_j^z = -S + b_j^\dagger b_j, \quad S_j^+ = \sqrt{2S} b_j^\dagger \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2S}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad S_j^- = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{b_j^\dagger b_j}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} b_j$$

S^{-1} 展開の S^1 の項まで残すとハミルトニアンは

$$H_{sw} = -\frac{1}{2} N z J S^2 + J S \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger b_j^\dagger + a_i b_j + a_i^\dagger a_i + b_j^\dagger b_j),$$

z は最近接格子点の数である。ここで a_i, b_j をフーリエ変換する。

$$a_i^\dagger = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad a_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}},$$

$$b_j^\dagger = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} b_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad b_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} b_{\mathbf{k}},$$

Neel 状態では unit cell が 2 倍になっているので、 $\mathbf{k}$ は reduced Brillouin zone 内のベクトルとする。ハミルトニアンを書き直すと、

$$H_{sw} = -\frac{1}{2} N z J S^2 + z J S \sum_{\mathbf{k}} \{a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}})\}$$

ここで $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta_i} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_i}$ 、 δ_i はある格子点から i 番目の最近接格子点への位置ベクトルである。

上のハミルトニアンを Bogoliubov 変換

$$\begin{cases} \alpha_k = a_k \cosh \theta_k + b_k^\dagger \sinh \theta_k \\ \beta_k^\dagger = a_k \sinh \theta_k + b_k^\dagger \cosh \theta_k \end{cases}$$

によって対角化する。

$$[\alpha_k, \alpha_k^\dagger] = \cosh^2 \theta_k [a_k, a_k^\dagger] + \sinh^2 \theta_k [b_k^\dagger, b_k] = \cosh^2 \theta_k - \sinh^2 \theta_k = 1$$

より $[\alpha_k, \alpha_k^\dagger] = 1$, $[\alpha_k, \beta_k^\dagger] = 0$ etc を満たすから、 α_k 、 β_k は Bose 演算子である。

ハミルトニアンを対角化するには $\tanh 2\theta_k = \gamma_k$ を満たすように θ_k を選ばねばならない。このときハミルトニアンは

$$H_{sw} = -\frac{1}{2} zJSN(S+1) + \sum_k \omega_k [\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k + 1]$$

となる。スピン波の振動数は

$$\omega_k = zJS\sqrt{1-\gamma_k^2} \quad .$$

$k \equiv 0$ のとき d 次元超立方格子では

$$\gamma_k = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \cos k_i \equiv \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \left(1 - \frac{1}{2} k_i^2 + \dots \right) \equiv 1 - \frac{1}{2d} k^2 + \dots$$

であるから

$$\omega_k \equiv \frac{zJS}{\sqrt{d}} k$$

となり、長波長の極限で ω_k は k に比例することがわかる。スピン波による基底エネルギーの補正を計算すると

$$\Delta E_0 = -\frac{1}{2} zJSN + \sum_k \omega_k = zJS \sum_k \left(\sqrt{1-\gamma_k^2} - 1 \right) < 0$$

スピンの量子ゆらぎを取り込んだ基底状態のエネルギーは、Neel 状態のエネルギーより低くなっている。具体的な結果を以下に示す。

d	1	2	3	...	∞
$\left \frac{\Delta E_0}{E_0} \right * S$	0.363	0.158	0.097		0

この補正を加えた基底状態のエネルギーは、正確な値の非常に良い近似値を与えている。たとえば、1次元 $S=1/2$ 系の場合正確解の $E/NJ = -0.443$ に対し、スピン波近似の値は -0.432 、2次元の場合は数値計算の結果は -0.67 、スピン波近似の結果は -0.608 である。

次に副格子磁化 (Staggered magnetization) を計算すると

$$\begin{aligned}\sum_{i \in A} \langle S_i^z \rangle &= \frac{1}{2} NS - \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{1}{2} NS - \sum_{\mathbf{k}} \left(\cosh^2 \theta_{\mathbf{k}} \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle + \sinh^2 \theta_{\mathbf{k}} \langle \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \right)\end{aligned}$$

$T=0$ の時は $\langle \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle = 1$ 、 $\langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = 0$ であるから、 $\mathbf{k}$ についての和は d 次元の場合

$\sum_{\mathbf{k}} \sinh^2 \theta_{\mathbf{k}} \sim \int \frac{k^{d-1} dk}{k}$ となる。この積分は $d \geq 2$ では収束するが $d=1$ では発散する。この結果は量子ゆらぎのために Neel 秩序が 1 次元では基底状態でも破壊されてしまう事を意味している。有限温度では

$$\langle S_i^z \rangle_T - \langle S_i^z \rangle_0 = -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\cosh^2 \theta_{\mathbf{k}} + \sinh^2 \theta_{\mathbf{k}} \right) \frac{1}{e^{\beta \omega_{\mathbf{k}}} - 1} = -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}} \frac{1}{e^{\beta \omega_{\mathbf{k}}} - 1}。$$

$k \approx 0$ のとき $\omega_{\mathbf{k}} \approx ck$ 、 $\frac{1}{e^{\beta \omega_{\mathbf{k}}} - 1} \approx \frac{k_B T}{ck}$ であるから

$$\langle S_i^z \rangle_T - \langle S_i^z \rangle_0 \propto -k_B T \int \frac{k^{d-1} dk}{k^2}$$

となり、積分は $d=3$ では収束するが、 $d \leq 2$ で発散する。従って強磁性の場合と同様に、有限温度の Neel 秩序は 2 以下の次元では存在しないと考えられる。

5 Mermin-Wagner の定理と Goldstone モード

この章では連続的な対称性の自発的な破れが 2 次元以下では有限温度で起こらないことを示す Mermin-Wagner の定理と、この定理と密接な関係のある Goldstone モードについて述べる。

5-1 各種の相関関数とスペクトル関数

ここでは後で用いる各種の相関関数について説明する。この説明は Shastri の論文に従っている。¹⁹⁾ 一般に 2 個の演算子 A 、 B の直接相関関数 $\langle \{A, B\} \rangle$ は次のように定義される。

$$\begin{aligned}\langle \{A, B\} \rangle &\equiv Z^{-1} \text{Tr} \left[e^{-\beta H} (AB + BA) \right] = Z^{-1} \sum_{\mu\nu} e^{-\beta E_\nu} \left(1 + e^{-\beta(E_\mu - E_\nu)} \right) \langle \nu | A | \mu \rangle \langle \mu | B | \nu \rangle \\ &= \int d\omega P_{AB}(\omega)\end{aligned}$$

ここにあらわれた $P_{AB}(\omega)$ をスペクトル関数と呼ぶ。

$$P_{AB}(\omega) \equiv Z^{-1} \sum_{\mu\nu} e^{-\beta E_\nu} \langle \nu | A | \mu \rangle \langle \mu | B | \nu \rangle (1 + e^{-\beta \omega}) \delta(E_\mu - E_\nu - \omega)$$

各種の相関関数はスペクトル関数を用いて以下のように表される。

$$1) \langle [A, B] \rangle = \int d\omega \tanh \frac{\beta\omega}{2} P_{AB}(\omega)$$

$$2) \langle [[A, H], B] \rangle = \int d\omega \omega \tanh \frac{\beta\omega}{2} P_{AB}(\omega)$$

$$3) (A, B) = \int_0^1 dx \langle A(\beta x) B \rangle = \beta^{-1} \int d\omega \omega^{-1} \tanh \frac{\beta\omega}{2} P_{AB}(\omega)$$

ここで $A(\tau) \equiv e^{\tau H} A e^{-\tau H}$ である。3) の相関関数はカノニカル相関関数あるいは Duhamel

2点関数と呼ばれる。

$P_{AB}(\omega)$ は以下の性質をもつ。

1) A, B に関して bilinear

$$2) P_{AB}(\omega) = P_{A^\dagger B^\dagger}^*(\omega) = P_{AB}(-\omega)$$

$$3) P_{A^\dagger A}(\omega) \geq 0$$

$$4) |P_{A^\dagger B}(\omega)|^2 \leq P_{A^\dagger A}(\omega) P_{B^\dagger B}(\omega)$$

5) 任意の関数 $f(\omega)$ 、 $g(\omega)$ に対して

$$\left| \int f(\omega) g(\omega) P_{A^\dagger B}(\omega) d\omega \right|^2 \leq \int |f(\omega)|^2 P_{A^\dagger A}(\omega) d\omega \int |g(\omega)|^2 P_{B^\dagger B}(\omega) d\omega$$

上の性質のうち 1) ~ 3) は自明であろう。4) は $P_{A^\dagger B}(\omega)$ を内積とみなしたときの Schwartz

の不等式、5) は 4) と Schwartz の不等式をさらにもう一度用いて導ける。

5-2 相関不等式

上記の性質から以下の相関不等式が導かれる。このなかにはこの講義で使わないものもあるが、参考のために挙げておく。

$$1) (A^\dagger, A) \leq \frac{1}{2} \langle [A^\dagger, A] \rangle$$

これは $x^{-1} \tanh x \leq 1$ と $P_{AB}(\omega)$ の性質 3) から直ちに導かれる。

2) (strong) Bogoliubov 不等式

$$|\langle [A, C] \rangle|^2 \leq \beta (A^\dagger, A) \langle [[C^\dagger, H], C] \rangle$$

3) (weak) Bogoliubov 不等式

$$\left| \langle [A, C] \rangle \right|^2 \leq \frac{\beta}{2} \langle \{A^\dagger, A\} \rangle \langle [[C^\dagger, H], C] \rangle$$

4) Pitaevskii-Stringari の不等式 (不確定性関係)

$$\left| \langle [A, B] \rangle \right|^2 \leq \langle \{A^\dagger, A\} \rangle \langle \{B^\dagger, B\} \rangle$$

5) Shastri 不等式

$$\langle \{A^\dagger, A\} \rangle \geq \frac{\left| \langle [A^\dagger, B] \rangle \right|^2}{\sqrt{\langle [[B^\dagger, H], B] \rangle} \beta(B^\dagger, B)} \coth \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\frac{\langle [[B^\dagger, H], B] \rangle}{\beta(B^\dagger, B)}} \right)$$

6) Falk-Bruch 不等式

$$\beta(B^\dagger, B) \geq \frac{\beta}{2} \langle \{B^\dagger, B\} \rangle f_{\text{FB}} \left(\frac{\beta \langle [[B^\dagger, H], B] \rangle}{2 \langle \{B^\dagger, B\} \rangle} \right)$$

ここで f_{FB} は $f_{\text{FB}}(x \tanh x) = x^{-1} \tanh x$ によって定義される関数である。

Falk-Bruch 不等式を使えば $b_0 \geq \beta(B^\dagger, B)$ 、 $c_0 \geq \langle [[B^\dagger, H], B] \rangle$ を満たす b_0 と c_0 に対して

$$\langle \{B^\dagger, B\} \rangle \leq (b_0 c_0)^{\frac{1}{2}} \coth \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{\frac{b_0}{c_0}} \right)$$

が導ける。この不等式は直接相関関数の上限を与えている。

これらの不等式の証明は長くなるので詳しく述べないが、Shastri の論文にまとめて書いてあるので詳しく知りたい場合は参照して欲しい。ここでは一例を示す。

[strong Bogoliubov 不等式の証明]

$$B = [H, C] \quad \text{とすると} \quad P_{A^\dagger B}(\omega) = \omega P_{A^\dagger C}(\omega), \quad P_{B^\dagger B}(\omega) = \omega^2 P_{C^\dagger C}(\omega)$$

ここで、 $f(\omega) = g(\omega) = \left(\omega^{-1} \tanh \frac{\beta \omega}{2} \right)^{\frac{1}{2}}$ と選べば

$$\int d\omega f(\omega) g(\omega) P_{A^\dagger B}(\omega) = \langle [A, C] \rangle$$

$$\int d\omega |f(\omega)|^2 P_{A^\dagger A}(\omega) = \beta(A^\dagger, A)$$

$$\int d\omega |g(\omega)|^2 P_{B^*B}(\omega) = \langle [[C^\dagger, H], C] \rangle$$

これらを $P_{AB}(\omega)$ の性質 5) の不等式に代入すれば最終結果が得られる。

5-3 Mermin-Wagner の定理

この節では短距離相互作用系における連続的な対称性の自発的破れは $d \leq 2$ 、 $T > 0$ では起こらないことを、スピン系に限らず一般的に示す。格子上の次のハミルトニアンを考える。

(20, 21)

$$H_0 = \sum_{\langle ij \rangle} \phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) h_i^\dagger h_j$$

ここで h_i は格子点 i 上の局所演算子、 $\phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ は格子点 i と j の間の相互作用定数である。具体的にはハイゼンベルク模型におけるスピン演算子と交換相互作用定数を考えればよい。格子点 i と j の間の相互作用が複数の演算子の間にある場合も以下と同様の議論ができる。今後出てくる局所演算子はすべて有界で、異なる格子点の演算子はお互いに交換すると仮定する。上のハミルトニアンは連続的な対称性をもつとする。つまり変換 $U(\alpha) = e^{i\alpha J}$ に対して

$$U(\alpha) H_0 U^\dagger(\alpha) = H_0$$

が成り立つ。ここで $J = \sum_i J_i$ 、 J_i はエルミート演算子である (ハイゼンベルク模型の場合に

$U(\alpha)$ として S_z 軸の回りの角度 α の回転を考えると $J_i = S_i^z$)。対称性の破れを示す秩序変数

は $\langle O \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle O_i \rangle$ 。ここで $O_i = \gamma [J, X_i]$ 、 γ は適当な c-数

である (ハイゼンベルク模型の場合、 $X_i = S_i^y$ 、 $O_i = S_i^x$ 、 $\gamma = -i$)。従って

$$O = \frac{\gamma}{N} \left[J, \sum_i X_i \right]$$

とあらわされる。自発的対称性の破れを議論するために外場 B を導入して、 $H = H_0 - BN O$ で

の平均値 $\langle O \rangle$ をもちいる。このとき次の定理が成り立つ。

[定理] (Mermin-Wagner)

相互作用が短距離の場合、すなわち適当な定数 $M > 0$ に対して

$$\sum_j |\phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)| |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2 < M$$

が成り立つとき、 $T > 0$ 、 $d \leq 2$ では $o_s = \lim_{B \downarrow 0} \lim_{N \uparrow \infty} \langle O \rangle = 0$ となりたつ。つまり、自発的な対称性の破れは存在しない。

[証明]

weak Bogoliubov 不等式

$$\left| \langle [J_{-\mathbf{k}}, A_{\mathbf{k}}] \rangle \right|^2 \leq \frac{1}{2} \beta \langle A_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^\dagger + A_{\mathbf{k}}^\dagger A_{\mathbf{k}} \rangle \langle [[J_{-\mathbf{k}}^\dagger, H], J_{-\mathbf{k}}] \rangle$$

において $A_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i X_i \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i]$ 、 $J_{-\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i J_i \exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i]$ とおくと

$$\langle [J_{-\mathbf{k}}, A_{\mathbf{k}}] \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle O_i \rangle = \frac{1}{\gamma} \langle O \rangle \quad .$$

ここで $\left[\sum_i J_i, H_0 \right] = 0$ であることを用いると、任意の数 a に対して

$$[J_{-\mathbf{k}}^\dagger, H] = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i [J_i, H_0] (\exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i] + a) - B\sqrt{N} \sum_i [J_i, O_i] \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i]$$

同様にして、任意の数 a 、 b に対して

$$[[J_{-\mathbf{k}}^\dagger, H_0], J_{-\mathbf{k}}] = \frac{1}{N} \sum_{i,j} [[J_i, H_0], J_j] (\exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i] + a) (\exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j] + b)$$

が成り立つ。ここで

$$[[J_i^\dagger, H_0], J_j] = 2 \sum_l \{ \phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_l) [[J_l, h_i] h_l, J_j] \}$$

であることを用いて、 $a=1, b=-1$ 及び $a=-1, b=1$ としたものを足しあわせ計算すると

$$[[J_{-\mathbf{k}}^\dagger, H_0], J_{-\mathbf{k}}] = \frac{2}{N} \sum_{i,j} \{ \phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) [\cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) - 1] [J_i, h_i^+] [h_j, J_j] \}$$

従って

$$[[J_{-\mathbf{k}}^\dagger, H], J_{-\mathbf{k}}] = \frac{2}{N} \sum_{i,j} \{ \phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) [\cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) - 1] [J_i, h_i^+] [h_j, J_j] \} - \frac{1}{N} B \sum_i [[J_i, O_i], J_i]$$

J_i 、 h_i 、 O_i は有界であるから、適当な $C_1, C_2 > 0$ に対して

$$\left| \langle [J_i, h_i^+] [h_j, J_j] \rangle \right| \leq C_1$$

$$\left| \left\langle \left[[J_j, O_i], J_i \right] \right\rangle \right| \leq C_2$$

が成り立つ。ここで $\left| \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) - 1 \right| \leq \left[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right]^2$ が成り立つことと短距離相互作用の仮定を用いると、適当な C_3 に対し

$$\left| \left\langle \left[[J_{-\mathbf{k}}^\dagger, H], J_{-\mathbf{k}} \right] \right\rangle \right| \leq C_3 k^2 + B C_2$$

が成り立つ。これを Bogoliubov 不等式に代入すると

$$\left\langle \{A_{\mathbf{k}}^\dagger, A_{\mathbf{k}}\} \right\rangle = \frac{2}{N} \sum_i \langle X_i^2 \rangle \geq \frac{2}{\beta} \frac{\langle O \rangle^2}{C_3 k^2 + B C_2}$$

この左辺は X_i が有界であるから有界である。この不等式の両辺を $\mathbf{k}$ について平均しても、不等式は成り立つ。 $N \rightarrow \infty$ の極限で $\mathbf{k}$ の和を積分に置き換えると、右辺は

$$2k_B T o_s^2 \int \frac{d^d k}{C_3 k^2 + B C_2}$$

となるが、 $B \rightarrow 0$ の時 2 以下の次元ではこの積分は発散する。従って有限温度で上の不等式が成り立つためには $o_s = 0$ でなくてはならない。

2 以下の次元では連続的な対称性が有限温度で自発的に破れないという結論は、連続空間で定義された系でも古典系でも成り立つ非常に一般的な性質である。²²⁾ これは対称性が自発的に破れているとき、長波長の極限でエネルギーが波数とともにゼロになる励起が必ず存在し、その励起による揺らぎのため秩序が壊されることによる。この励起モードを Goldstone モードという。強磁性状態および反強磁性状態のスピン波はその例である。

5-4 Goldstone mode²³⁾

この節では、連続的な対称性が自発的に破れているとき、励起エネルギーが長波長の極限で波数 k に比例して（あるいはそれより速く）ゼロに近づく励起状態が存在することを示す。このような励起モードを Goldstone モードと呼ぶが、このモードを励起する演算子は $k \rightarrow 0$ の極限で対称操作の generator に一致する。

この節では $T = 0$ と仮定して議論を進める。準備として $T = 0$ における各種の相関関数をスペクトル関数

$$P_{AB} = \sum_{\mu} \left\{ \langle 0 | A | \mu \rangle \langle \mu | B | 0 \rangle \delta(\omega - E_{\mu} + E_0) + \langle 0 | B | \mu \rangle \langle \mu | A | 0 \rangle \delta(\omega - E_0 + E_{\mu}) \right\}$$

で表しておく。ここで $|0\rangle$ は基底状態、 E_0 は基底エネルギーを表す。そうすると

$$\langle [[A, H], B] \rangle = \int |\omega| P_{AB}(\omega) d\omega = \int_0^\infty \omega S_{A,B}(\omega) d\omega$$

が成り立つ。ここで $S_{A,B}(\omega) \equiv (P_{AB}(\omega) + P_{AB}(-\omega))$ は $\omega > 0$ で定義されている。

$\beta(A, B)_{T \rightarrow 0} \equiv \chi_{A,B}$ は $T = 0$ での応答関数をあらわし

$$\chi_{A,B} = \int_0^\infty |\omega|^{-1} S_{AB}(\omega) d\omega.$$

前節で用いた J_k が Goldstone モードを励起する演算子であることが以下の議論でわかる。

$A = J_k^\dagger$ 、 $B = J_k$ と選び $S(\mathbf{k}, \omega) \equiv S_{J_k^\dagger J_k}(\omega)$ (スピン系の動的構造因子にあたる) とあらわ

せば

$$\langle [[J_k^\dagger, H], J_k] \rangle = \int_0^\infty \omega S(\mathbf{k}, \omega) d\omega$$

となる。ここで $\langle \mu | J_k | 0 \rangle \neq 0$ を満たす励起状態のエネルギーの内の最小値を $\omega_0(\mathbf{k})$ とおく。この

$\omega_0(\mathbf{k})$ が Goldstone モードのエネルギーである。仮定により $\omega < \omega_0(\mathbf{k})$ では $S(\mathbf{k}, \omega) = 0$ である

から、 $S(\mathbf{k}, \omega)$ が次の形をしていると仮定する。

$$S(\mathbf{k}, \omega) = S_0(\mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_0(\mathbf{k})) + S_c(\mathbf{k}, \omega)$$

ただし $S_c(\mathbf{k}, \omega)$ は $\omega = \omega_0(\mathbf{k})$ で δ 関数的な振る舞いはしないものとする。実際スピン系の動的構造因子は通常このような形をしており、第 1 項はスピン波、第 2 項はその上の連続励起の寄与を表す。この形を用いると

$$\begin{aligned} \langle [[J_k^\dagger, H], J_k] \rangle &= [\omega_0(\mathbf{k})]^2 \left\{ \frac{S_0(\mathbf{k})}{\omega_0(\mathbf{k})} + \int_{\omega_0(\mathbf{k})}^\infty \frac{\omega}{\omega_0(\mathbf{k})^2} S_c(\mathbf{k}, \omega) d\omega \right\} \\ &\geq [\omega_0(\mathbf{k})]^2 \left\{ \frac{S_0(\mathbf{k})}{\omega_0(\mathbf{k})} + \int_{\omega_0(\mathbf{k})}^\infty \frac{1}{\omega} S_c(\mathbf{k}, \omega) d\omega \right\} = [\omega_0(\mathbf{k})]^2 \chi_{J_k^\dagger J_k} \end{aligned}$$

従って

$$[\omega_0(\mathbf{k})]^2 \leq \frac{\langle [[J_{\mathbf{k}}^\dagger, H], J_{\mathbf{k}}] \rangle}{\chi_{J_{\mathbf{k}}^\dagger J_{\mathbf{k}}}}$$

が成り立つ。秩序演算子が $\frac{1}{N} \sum_i O_i = [A_{-\mathbf{k}}, J_{\mathbf{k}}]$ と表されるとき strong Bogoliubov 不等式より

$$(\chi_{J_{\mathbf{k}}^\dagger J_{\mathbf{k}}})^{-1} \leq o_s^{-2} \langle [[A_{-\mathbf{k}}^\dagger, H], A_{-\mathbf{k}}] \rangle$$

これを上の $\omega_0(\mathbf{k})^2$ の上限に代入すると、最終的な $\omega_0(\mathbf{k})$ の上限

$$\omega_0(\mathbf{k}) \leq o_s^{-1} \langle [[J_{\mathbf{k}}^\dagger, H], J_{\mathbf{k}}] \rangle^{\frac{1}{2}} \langle [[A_{-\mathbf{k}}^\dagger, H], A_{-\mathbf{k}}] \rangle^{\frac{1}{2}}$$

が得られる。前節でみたように短距離相互作用をする系では、 $\langle [[J_{\mathbf{k}}^\dagger, H], J_{\mathbf{k}}] \rangle$ は k^2 に比例する

項で抑えられる。従って $o_s > 0$ の場合には適当な $C' > 0$ に対して $\omega_0(\mathbf{k}) \leq C'k$ が成り立つことが

わかる。これが Goldstone の定理である。

実際、反強磁性スピン波の例にみるように、Goldstone モードの振動数は長波長のとき通常 k に比例している。一方強磁性 Heisenberg 模型のスピン波の場合にはスピン波は長波長のとき k^2 に比例していた。この理由も今求めた $\omega_0(\mathbf{k})$ の上限を用いて説明できる。この場合には、秩序演算

子を $O = \frac{1}{N} \sum_i S_i^x$ とすると、 $J_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i S_i^y e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$ 、 $A_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i S_i^z e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$ である。系がスピン空間で等方的であるため、 $k \rightarrow 0$ の極限で $A_{\mathbf{k}}$ も対称操作の generator になっていることがわかる。

つまり $[J_{\mathbf{k}=0}, H] = [A_{\mathbf{k}=0}, H] = 0$ である。この場合 $\langle [[A_{-\mathbf{k}}^\dagger, H], A_{-\mathbf{k}}] \rangle^{\frac{1}{2}}$ から k に比例する因子が

でてくるので、適当な $C'' > 0$ に対し $\omega_0(\mathbf{k}) \leq C''k^2$ が成り立つ。この場合、秩序変数は保存

量である。ハイゼンベルク・フェリ磁性体のスピン波の音響分枝の振動数が k^2 で抑えられることが上の議論からわかる。

我々が取り扱う多くの系では短距離相互作用の仮定は満たされているが、クーロン相互作用のような長距離相互作用の場合は上の定理は成り立たない。 S 波超伝導体でエネルギーギャップの中に励起が存在しないのはこのためである。

5-5 1次元反強磁性の長距離秩序

反強磁性スピン波の理論によれば、1次元では基底状態でも Neel 秩序が存在しない。このことは最近接相互作用のみをもつ模型に対して Shastri によって厳密に証明された。¹⁹⁾ この定理の証明には、鏡映正值性という性質を用いているので、 J_1-J_2 模型のように相互作用の競合がある場合には拡張できない。より一般の系については次の定理が成り立つ。

[定理] (Momoi)²⁴⁾

短距離相互作用をする 1次元系で連続対称性が自発的に破れている場合は、その秩序に対応する波数ゼロの感受率が発散してはならない。

この定理により、強磁性とフェリ磁性の秩序は一次元スピン系の基底状態でも連続対称性を破る方向に存在しうが、単純な反強磁性秩序は存在できないことが判る。

6 有限系の低エネルギー励起状態

対称性を破る秩序状態の実現は、必ず基底状態の縮退を伴う。イジング的 XXZ 模型のように二回対称性が破れていれば基底状態は二重に縮退しているし、ハイゼンベルク反強磁性模型の場合 staggered 磁化はどちらの向きを向いてもよい訳だから基底状態は無限に縮退している。これは無限系の話であるが、対応する有限系の基底状態では、対称性は通常破れておらず、基底状態は縮退していないか、せいぜい数重の縮退しか存在しないのが普通である (Marshall-Lieb-Mattis の定理が成り立つ場合を考えてみよ)。そのような場合、有限系の低エネルギー状態の内には系を大きくするに従い基底状態に近づいてゆき、無限系の基底状態になるものが無限個あることになる。それらはどのような状態で、どのように基底状態に近づいてゆくのかをこの章で議論する。

6-1 厳密な議論

この節では上に述べた問題について、厳密に証明できていることを紹介する。秩序演算子がハミルトニアンと交換しないとき、有限系では対称性は破れないが、このときつぎの定理が成り立つ。

[定理](Horsch - von der Linden)²⁵⁾

無限系の基底状態にハミルトニアンと交換しない秩序演算子の長距離秩序が存在するとき、サイズ N の有限系には励起エネルギーが N^{-1} に比例するかあるいはそれより速く N の増大とともにゼロに近づく励起状態が存在する。

[証明] サイズ N の系の秩序演算子を $O_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O_i$ 、基底状態を Φ_0 、基底エネルギーを $E_0^{(N)}$ と

する。有限系の基底状態では対称性は破れていないので、 $\langle \Phi_0 | O_N | \Phi_0 \rangle = 0$ である。このとき

$$\Phi_1 = \frac{O_N \Phi_0}{\|O_N \Phi_0\|} \quad \text{とおくと} \quad \langle \Phi_1 | \Phi_0 \rangle = \frac{\langle \Phi_0 | O_N | \Phi_0 \rangle}{\|O_N \Phi_0\|} = 0 \quad \text{だから、この状態は基底状態と直交し}$$

ている。この状態のエネルギー期待値を $E_1^{(N)}$ とすると

$$\begin{aligned} E_1^{(N)} - E_0^{(N)} &= \frac{1}{\|O_N \Phi_0\|^2} \left[\langle \Phi_0 | O_N H O_N | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | O_N^2 | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle \right] \\ &= \frac{1}{2\|O_N \Phi_0\|^2} \langle \Phi_0 | [[O_N, H], O_N] | \Phi_0 \rangle \end{aligned}$$

短距離相互作用系では $\langle \Phi_0 | [[O_N, H], O_N] | \Phi_0 \rangle$ は $O(N^{-1})$ の量である。一方無限系で LRO が存

在するとき、十分大きな N に対して適当な $\mu > 0$ を選べば $\langle \Phi_0 | O_N^2 | \Phi_0 \rangle \geq \mu^2$

となり、定理が成り立つ。

実際 $N \rightarrow \infty$ の極限で Φ_1 と Φ_0 が縮退し、これらの 1 次結合は対称性の破れた基底状態を与える。
すなわち $\Phi = \alpha \Phi_0 + \beta \Phi_1$ ($\alpha^2 + \beta^2 = 1$) と状態を選ぶと

$$\langle \Phi | O_N | \Phi \rangle = (\alpha^* \beta + \alpha \beta^*) \frac{\langle \Phi_0 | O_N^2 | \Phi_0 \rangle}{\|O_N \Phi_0\|} \approx (\alpha^* \beta + \alpha \beta^*) \rho_L$$

となる。イジング的な反強磁性の場合、 $\alpha = \pm \beta = 1/\sqrt{2}$ の 2 個の状態が Neel 秩序状態に対応している。

$N \rightarrow \infty$ で連続的な対称性の破れが起こる場合には、無限に多くの状態が基底状態に縮退することが証明されている。

[定理] (Koma-Tasaki)²⁶⁾

連続的な対称性 ($U(1) \times Z_2$) のある系の基底状態が、 $N \rightarrow \infty$ の極限で $U(1)$ 対称性を破るとする (具体例として XY 模型で S^x が秩序変数の場合を考えればよい)。このとき系が十分大きければ、 M 個の励起状態 Φ_k ($k=1, 2, \dots, M$) ($M \leq C_1 N^{1/2}$) が存在し、

$$\langle \Phi_k | H | \Phi_k \rangle - \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle \leq \frac{C_2}{N}$$

を満たす。ここで C_1, C_2 は適当な正数。

この定理は基底状態に縮退する状態がすくなくとも $N^{1/2}$ に比例する数だけ存在することを保証し

ている。

6-2 物理的描像 (tower spectrum)

前節で述べた連続的対称性を持つ有限系の低エネルギー励起状態はどのような性格のものであるだろうか？この節ではそのことについて直感的な議論を行い、それに対する数値的な証拠を示す。

最初に単純な Neel 秩序をもつ AFH 模型を用いて議論を進める。秩序演算子である staggered 磁化は本来ハミルトニアンと交換しないのだが、無限系ではマクロな量となり基底状態で固定した値をもつ。ここで staggered 磁化を

$$\mathbf{M}_S \approx M_S \mathbf{n}$$

とあらわす ($|\mathbf{n}|=1$)。大きいサイズの有限系では staggered 磁化の絶対値はすでに十分成長してマクロな大きさになっている (つまり $M_S \sim O(N)$) のだが、その方向 $\mathbf{n}$ は非可換性のためにゆらいでいる。系は等方的であるから、このゆらぎは staggered 磁化ベクトルの自由回転にほかならない。したがって低エネルギー状態に対する有効ハミルトニアンはベクトル $\mathbf{M}_S$ の回転に対する全角運動量 $\mathbf{T}$ を用いて

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2I} \mathbf{T}^2$$

と表される。 I は $\mathbf{M}_S$ の回転運動に対する有効慣性モーメントであり、 N に比例して大きくなる

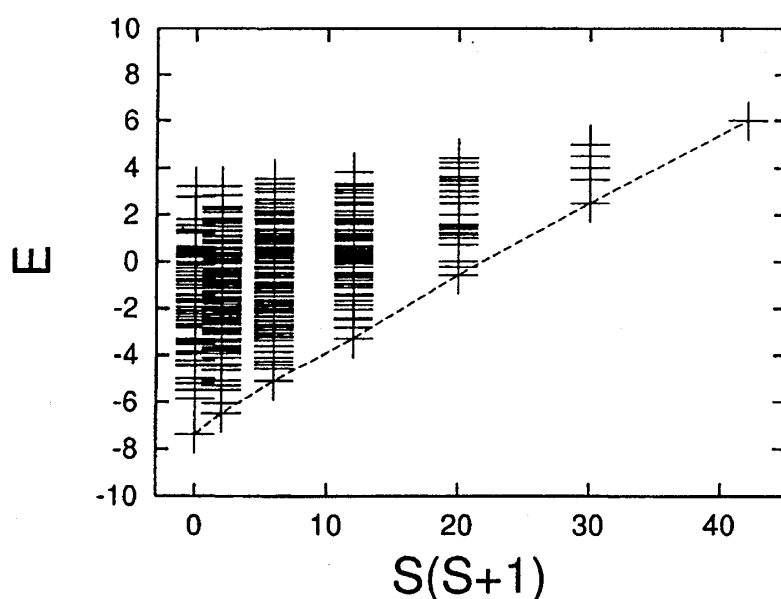


図13 12個のスピンを含む正方格子AFH模型のエネルギー準位

と考えられる。従って低エネルギー固有状態の励起エネルギーは $\frac{T(T+1)}{2I}$ で近似され、 N^{-1} に比

例して小さくなることが予想される。実際、正方格子上的反強磁性ハイゼンベルク模型(1 2 スピン)のエネルギー準位は図 1 3 に示すようにこの予想と一致している。

また全スピンの大きさ T 、 z 成分が M である固有関数は球面調和関数を用いて近似的に

$$\Phi_{T,M} = Y_{T,M}(\mathbf{n}) F(M_S)$$

と表されると考えると、有限系の基底状態が $T=0$ のとき、この状態での $(M_S^z)^2$ の期待値は球面

調和関数の性質を用いて $\left\langle (M_S^z)^2 \right\rangle_{T=0, M=0} \cong \frac{1}{3} \langle M_S^2 \rangle$ 。一方、 $T=1, M=0$ の励起状態では

$\left\langle (M_S^z)^2 \right\rangle_{T=1, M=0} \cong \frac{3}{5} \langle M_S^2 \rangle$ となる。従って大きなサイズの有限系では

$$R = \frac{\left\langle (M_S^z)^2 \right\rangle_{1,0}}{\left\langle (M_S^z)^2 \right\rangle_{0,0}} \cong 1.8$$

が成り立つことが予想される。Tang - Hirsch による正方格子反強磁性ハイゼンベルク模型の有限系の対角化の結果を示すと以下のとおりである。²⁷⁾

N	ground state ($T=0$)	$T=1, M=0$ の excited state	R
18	0.089534	0.159249	1.7786
20	0.085910	0.153242	1.7838
26	0.077966	0.139677	1.7914

確かに、サイズとともに R は 1.8 に近づいており、上に述べた描像が正しい事がわかる。ここで述べた議論は Neuberger-Ziman の論文²⁸⁾に詳しく述べられている。

三角格子反強磁性ハイゼンベルク模型の場合には図 5 で示した $1\ 2\ 0^\circ$ 構造が古典的な基底状態である。量子系でもこの構造の長距離秩序ができるとすれば、有限系では 3 個の副格子磁化がお互いに $1\ 2\ 0$ 度の角度を保ったまま全体として回転する運動で低エネルギー状態を記述できる。これは対称コマの自由回転運動であるから、有効ハミルトニアンは

$$H_{\text{eff}} = \frac{\mathbf{T}^2}{2I_{\perp}} + (T^z)^2 \left(\frac{1}{2I_{\parallel}} - \frac{1}{2I_{\perp}} \right)$$

と表される。ここで $I_{\perp}$ 、 $I_{\parallel}$ はそれぞれ 120 度構造を作るスピン面に垂直な方向と平行な方向の慣性モーメントであり、 N に比例して増大する。このハミルトニアン固有状態は T, M, M' の 3 個の量子数で指定され、エネルギーは全角運動量の大きさ T と M のみで

$$\frac{T(T+1)}{2I_{\perp}} + M^2 \left(\frac{1}{2I_{\parallel}} - \frac{1}{2I_{\perp}} \right) \text{ と与えられるが、} M, M' \text{ はともに } 2T+1 \text{ 個の値をとりうるので、}$$

各 T に対して $(2T+1)^2$ 個のエネルギー固有状態が存在する。

秩序演算子の運動によって現れる励起エネルギーが N^{-1} に比例する低エネルギー準位は **tower spectrum** と呼ばれている。一方、無限系の励起状態であるスピン波が励起された状態は 2 次元では励起エネルギーが $N^{-1/2}$ に比例するのでこれらの準位とははっきり区別できる。

Bernu ら²⁹⁾は有限サイズ三角格子上の $S=1/2$ 反強磁性ハイゼンベルク模型の準位構造を詳しく調べ、実際に上に述べた低エネルギー励起状態がすでに $N=10$ 位の系からあらわれることを示した。彼らはこの結果に基づいて、三角格子上の $S=1/2$ 反強磁性ハイゼンベルク模型が無限系では 120 度構造の長距離秩序をもつことを結論した。量子スピン系で長距離秩序が存在するかどうかを数値的に判定する場合、通常有限系の基底状態における相関関数を計算しそれを無限系に外挿することにより結論を導いているが、**tower spectrum** のような低エネルギーの準位構造を詳しく調べるにより、秩序の性格に関してより詳しい情報が得られ、信頼性の高い結論を導くことができる。

7 1次元系の Haldane 状態

1次元スピン系は理論的に最も取り扱いやすい多体系として、古くから研究されてきたが、最近は多くの準1次元物質が合成され、実験的にも活発な研究が行われている。基底状態の問題だけでも楽に1冊の本が書けるくらいその内容は豊富であり、とてもこの講義でその多くを議論することはできないし、著者にはその能力もない。ここでは1次元に固有の状態である Haldane 状態について簡単に紹介する。

7-1 $S=1/2$ XXZ 模型

まず1次元スピン系のもっとも基本的な模型である $S=1/2$ XXZ 模型について、わかっていることを簡単にまとめておこう。XXZ 模型を

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

と書き表す。 Δ は異方性を表すパラメタである。この系は J と Δ の符号を同時に変えても同等な

ので以下では $J > 0$ を仮定する。この模型は $S = 1/2$ の時 Bethe の方法によって正確に解かれている。³⁰⁾

基底状態の性質は Δ の値によって以下の表ようになる。

$S = 1/2$ XXZ 模型の基底状態

	長距離秩序の有無	Spin相関	基底状態	excitation
$\Delta > 1$	Ising的強磁性秩序	$\langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle \sim (-1)^r$	2重縮退	gapfull
$\Delta = 1$	長距離秩序はない	$\langle S_i^\alpha S_{i+r}^\alpha \rangle \sim \frac{(-1)^r}{r} (\log r)^{\frac{1}{2}}$	singlet unique	gapless $\omega_k = \frac{\pi J}{2} \sin k $
$-1 < \Delta < 1$	長距離秩序はない	$\langle S_i^x S_{i+r}^x \rangle \sim \frac{(-1)^r}{r^\eta}$ $\eta = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arcsin \Delta$	unique	gapless $\omega_k \propto k$
$\Delta = -1$	強磁性秩序	$\langle S_i^\alpha S_{i+r}^\alpha \rangle = 1$	$N/2$ 重縮退	gapless $\omega_k \propto k^2$
$\Delta < -1$	Ising的強磁性秩序	$\langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle = 1$	2重縮退	gapfull

この結果をみると、系が Ising 的異方性 ($|\Delta| > 1$) をもつ場合は基底状態に長距離秩序が存在し励起にエネルギーギャップがあるが、XY 的異方性 ($|\Delta| < 1$) の場合は、長距離秩序は存在せず励起はギャップレスである。 $|\Delta| > 1$ の場合は 2 以上の次元の結果と定性的に同じである。一方 $-1 < \Delta \leq 1$ の場合は基底状態において連続的対称性を破る秩序が現われない点に 1 次元の特殊性が表れていると考えることができる。

7-2 Haldane の予想

$S \geq 1$ の XXZ 模型には $S = 1/2$ の場合と異なり一般に正確解は存在しないが、その基底状態はどのようなものであろうか？相転移における universality の考えがここでも成り立つとすれば、基底状態の性質は空間の次元と秩序変数の対称性のみによって決まり、スピンの大きさ S は影響を与えないと考えるのが自然である。しかし Haldane は、場の理論的考察に基づき、 S が半奇整数 ($S = 1/2, 3/2, \dots$) の AFH 模型 ($\Delta = 1$) の基底状態の性質は $S = 1/2$ の場合と本質的に同じだが、 S が整数ならば $S = 1/2$ の場合と全く異なる基底状態になるという予想を 1983 年に発表した。³¹⁾ この予想は直ちに賛否両論を巻き起こしたが、その後の $S = 1$ の系に対する詳しい

数値計算と理論の発展により、現在では正しいことが認められている。

Haldane の予想によれば、 S が整数のとき唯一の基底状態が存在し、基底状態と励起状態の間にエネルギーギャップが存在する。またスピン相関は距離とともに ξ を相関距離とする指数関数的な減少を示す ($\sim \frac{(-1)^r}{r^{1/2}} e^{-r/\xi}$)。 $S=1$ AFH 鎖の励起エネルギーのモンテカルロ法による計算結果を図 14 に示す。³²⁾ これは 32 個のスピンまでの結果であるが、外挿の結果無限系のエネルギーギャップを $0.41J$ と評価している。密度行列繰り込み群によるより正確な結果では $0.41050(2)J$ である。³³⁾

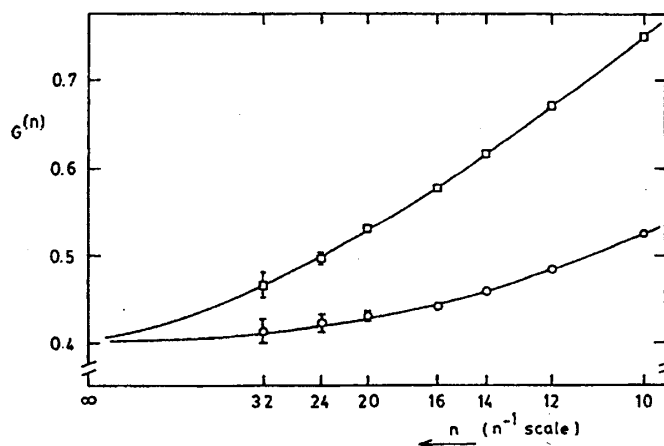


図14 $S=1$ AFH模型のエネルギーギャップ (文献32より転載)

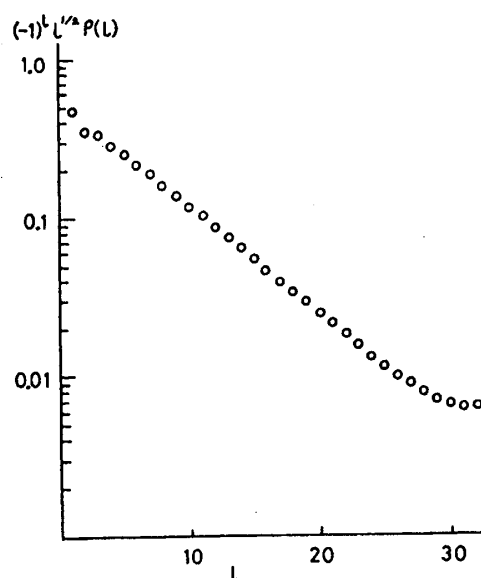


図15 $S=1$ AFH模型のスピン相関関数 (文献34より転載)

図 1 5 は相関関数の距離依存性を示すモンテカルロ計算の結果である。³⁴⁾ この計算では $\xi \cong 6.25$ と評価している。

Haldane の予言した整数スピン系の基底状態の物理的描像を明らかにしたのは、次に述べる Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) の理論である。

7-3 Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki の模型³⁵⁾

次のハミルトニアンで表される $S=1$ スピン模型 (AKLT 模型) の基底状態は正確に求まる。

$$H_{\text{AKLT}} = \sum_i P_2(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1})$$

ここで $|\mathbf{S}_i|=1$ 、 $P_2(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1})$ は $|\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}|=2$ への射影演算子である。これを具体的に表すために、

2 個の $S=1$ スピンの合成を考えると

$$\begin{array}{lll} |\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}| = 2 & \text{のとき} & (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}) = \frac{S(S+1)-4}{2} = 1 \\ 1 & \text{のとき} & -1 \\ 0 & \text{のとき} & -2 \end{array}$$

したがって

$$P_2(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}) = \frac{1}{2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{6} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2 + \frac{1}{3}$$

ここで 1 個の $S=1$ スピンが 2 個の $S=1/2$ スピンの合成によってできたものと考え。その状態を具体的にあらわすと

$$\Psi_{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha \otimes \psi_\beta + \psi_\beta \otimes \psi_\alpha] \quad \begin{cases} \psi_1 = |\uparrow\rangle \\ \psi_2 = |\downarrow\rangle \end{cases}$$

となる。ここで ψ_1 、 ψ_2 は $S=1/2$ スピンの状態で $\Psi_{\alpha\beta}$ は $S=1$ スピンの S^z 固有状態と

$$\Psi_{11} = \sqrt{2} |1\rangle \quad \Psi_{12} = \Psi_{21} = |0\rangle \quad \Psi_{22} = \sqrt{2} |-1\rangle$$

の関係で結ばれている。ある状態が AKLT ハミルトニアンの基底状態であるための十分条件は隣り合う $S=1$ スピンの合成スピンの 2 であるような成分を含まないことである。そのためには構成要素である 4 個の $S=1/2$ スピンのうち 2 個が $S=0$ の状態にカップルしていればよい。2 個の $S=1$ スピンの場合 (図 1 6) を式で

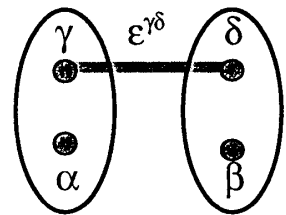


図 16 2 個の $S=1$ スピン

あらわせば $\Psi_{1,\alpha 1} \Psi_{2,2\beta} - \Psi_{1,\alpha 2} \Psi_{2,1\beta} = \Psi_{1,\alpha\gamma} \epsilon^{\gamma\delta} \Psi_{2,\delta\beta}$ とあらわされ ($\epsilon^{\gamma\delta}$ は反対称テンソル、 γ 、 δ は dummy index)

$$P_2(\Psi_{1,\alpha\gamma} \epsilon^{\gamma\delta} \Psi_{2,\delta\beta}) = 0 \quad .$$

このようにして全系の波動関数を作れば H_{AKLT} の基底状態が作られる。 N スピン系の基底状態は図 17 のようにあらわされ

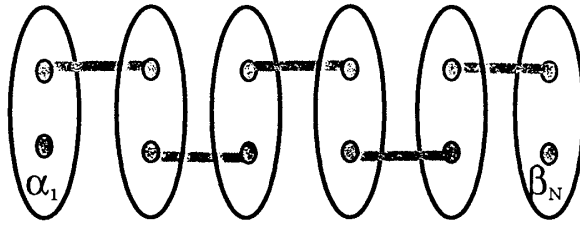


図 17 N 個の $S=1$ スピンの VBS 状態

$$\Psi_{\alpha_1\beta_N}^{(N)} = \Psi_{1,\alpha_1\beta_1} \epsilon^{\beta_1\alpha_2} \Psi_{2,\alpha_2\beta_2} \epsilon^{\beta_2\alpha_3} \dots \epsilon^{\beta_{N-1}\alpha_N} \Psi_{N,\alpha_N\beta_N}$$

開放境界条件の場合には α_1, β_N はどんな組み合わせでも良いので、基底状態は 4 重に縮退している。周期境界条件の場合は、この 4 つの状態に $\epsilon^{\beta_N\alpha_1}$ を掛けて加え合わせ唯一の基底状態が得られる。この状態のスピン相関は簡単に計算できて $\langle S_0^\alpha \cdot S_r^\alpha \rangle_0 \sim \frac{4}{3} \left(-\frac{1}{3} \right)^r$ 、従って相関距離は $\xi = 1/\ln 3$ である。また励起エネルギーにギャップが存在することが厳密に示せる。この状態は仮想的に導入した $S=1/2$ スピンが、隣同士がっちりと一重項状態 (valence bond) を作っているので valence bond solid (VBS) 状態と呼ばれる。

Kennedy は有限サイズの $S=1$ AFH 模型のエネルギー固有状態を開放境界条件のもとで数値計算し、基底状態とほぼ等しいエネルギーを持つ 3 個の低エネルギー励起状態が存在し、励起エネルギーは $\Delta E \sim \exp[-N/\xi]$ の形でサイズ N とともにゼロに近づくことを示した。³⁷⁾ これは $S=1$ AFH 模型でも開放端に自由な $S=1/2$ スピンが残っている事を示唆しており、基底状態が VBS 状態であることの証拠の一つである。

実験的には、 Ni^{2+} を含む準 1 次元反強磁性体 $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}(\text{ClO}_4)$ (NENP) の強場磁場中の磁化曲線の測定により、エネルギーギャップが勝又らにより観測された。³⁸⁾ また開放端における $S=1/2$ スピン自由度の存在も NENP に Cu^{2+} をドーピングした系の ESR 測定により、確認されている。³⁹⁾ 現在では NENP 以外にも多くの Haldane 基底状態を持つ準 1 次元反強磁性体が知られている。

各スピンの S^z を対角化する基底を選ぶと VBS 状態は多数の基底の 1 次結合であるが、含まれる基底はすべて図 18 のように $S^z = 0$ のスピンを除いてみると $S^z = 1$ のスピンと $S^z = -1$ のスピンが交互に並んだ状態である。これが string 秩序と呼ばれる VBS 状態のもつ “隠れた”

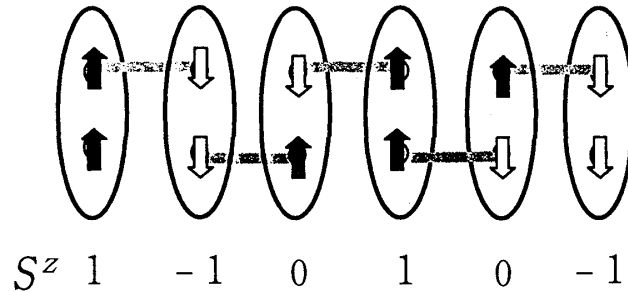


図18 VBS状態におけるstring 秩序

秩序である。¹⁵⁾

この秩序の秩序変数は $j-i \rightarrow \infty$ における $\left\langle S_0^z \exp \left[i\pi \sum_{l=1}^{j-i} S_l^z \right] S_i^z \right\rangle$ の極限值で、VBS 状態では、 $-\frac{4}{9} = -0.4444$ である。AFH 模型でも数値計算により -0.3743 と評価されている。この秩序が存在することは AFH 模型の基底状態が VBS 状態であることのもう一つの証拠である。

7-4 Nonlocal unitary 変換

この節では Kennedy-Tasaki によって導入された非局所的ユニタリー変換を紹介する。

⁴⁰⁾ 1次元 $S=1$ スピン系にこの変換を施すと string 秩序が局所的な秩序演算子であらわせ、VBS 状態は簡単な状態に変換される。AFH 模型にこの変換を施すと、簡単な平均場理論により基底状態が VBS 状態であることが導かれるので、大変教育的である。ここでは少し形を変えた次のユニタリー変換を考える。⁴¹⁾ 取り扱う系は開放境界条件に従うものとする。

$$U = \prod_i U_i$$

ただし

$$U_i = \frac{1}{2}(1+f_i) + \frac{1}{2}(1-f_i)\exp[i\pi S_i^x], \quad f_i = \exp\left[i\pi \sum_{l=1}^{i-1} S_l^z\right]$$

である。 $\frac{1}{2}(1+f_i)$ 、 $\frac{1}{2}(1-f_i)$ は各々端から i 番目のスピンまでに $S^z = \pm 1$ のスピンが偶数個ある

状態と奇数個ある状態への射影演算子であり、 $\exp[i\pi S_i^x]$ は S_i^x の回りの π 回転である。従って

このユニタリー変換は端からあるスピンまでに $S^z = \pm 1$ のスピンが奇数個あれば、 S^z の向きを逆にしなさいということであり、 $U = U^{-1}$ である。 $[U_i, U_j] = 0$ なので容易にこの変換は計算できて

$$\begin{aligned} US_i^z U^{-1} &= f_i S_i^z \\ US_i^x U^{-1} &= S_i^x \exp \left[i\pi \sum_{l=i+1}^N S_l^x \right] \\ US_i^y U^{-1} &= f_i S_i^y \exp \left[i\pi \sum_{l=i+1}^N S_l^x \right] \end{aligned}$$

となる。この変換によって string 秩序は

$$US_i^z \exp \left[i\pi \sum_{l=i+1}^{j-1} S_l^x \right] S_j^z U^{-1} = S_i^z S_j^z$$

となり、通常の強磁性秩序に変換される。

XXZ 模型に結晶場による 1 イオン異方性の項を加えた次のハミルトニアンにこの変換を施す。

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

変換をハミルトニアン各项について計算すると

$$\begin{aligned} US_i^z S_{i+1}^z U^{-1} &= f_i S_i^z f_{i+1} S_{i+1}^z = \exp(-i\pi S_i^z) S_i^z S_{i+1}^z = -S_i^z S_{i+1}^z \\ US_i^x S_{i+1}^x U^{-1} &= S_i^x \exp \left[i\pi \sum_{l>i} S_l^x \right] S_{i+1}^x \exp \left[i\pi \sum_{l>i+1} S_l^x \right] \\ &= S_i^x \exp \left[i\pi S_{i+1}^x \right] S_{i+1}^x = -S_i^x S_{i+1}^x \\ US_i^y S_{i+1}^y U^{-1} &= f_i S_i^y \exp \left[i\pi \sum_{l>i} S_l^x \right] f_{i+1} S_{i+1}^y \exp \left[i\pi \sum_{l>i+1} S_l^x \right] \\ &= S_i^y \exp \left[i\pi S_i^z \right] \exp \left[i\pi S_{i+1}^x \right] S_{i+1}^y = -T_i^y T_{i+1}^y \end{aligned}$$

ここで T_i^y は

$$S_i^y \exp \left[i\pi S_i^z \right] = \exp \left[i\pi S_i^x \right] S_i^y \equiv -iT_i^y$$

によって定義した。従って

$$UHU^{-1} = -\sum_i (S_i^x S_{i+1}^x + T_i^y T_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z) + D \sum_i (S_i^z)^2 \quad .$$

変換によって得られたハミルトニアンは簡単なスピンハミルトニアンではない。このハミルトニアンは S^x, S^z についての反転対称性はあるが回転対称性がない形をしており、 $Z_2 \times Z_2$ 対称性をも

っている。上の計算は具体的にマトリックス表示を用いるとわかりやすい。

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

$$\exp[i\pi S_i^x] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T_i^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{etc.}$$

$\Delta > 0$ の場合に分子場近似により基底状態を求めてみよう。

$$\Psi_0 = \prod_i \Phi_i, \quad \Phi_i = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

の形に基底状態の波動関数を仮定する。この状態のエネルギー期待値を最小にするよう Φ_i を決めると、 D と Δ の値により図 19 の 4 種類の状態があらわれる。

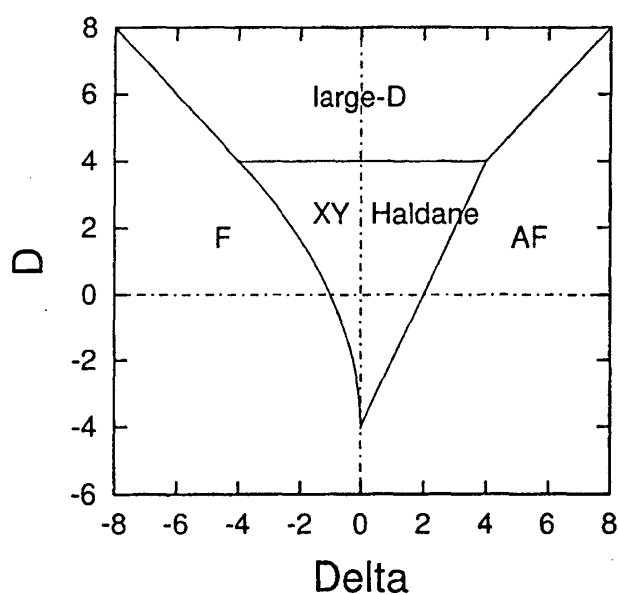


図19 分子場近似によるS=1鎖の相図

- 1) large D singlet 状態 $\alpha = \gamma = 0 \quad \beta = 1$
- 2) Neel 状態 $\alpha = 1 \quad \beta = \gamma = 0$ または $\gamma = 1 \quad \alpha = \beta = 0$
- 3) XY singlet 状態 $\alpha = \beta = \frac{\sqrt{4-D}}{4} \quad \gamma = \sqrt{\frac{4+D}{8}}$
- 4) Haldane 状態 $\alpha = \sqrt{\frac{D-4}{2(\Delta-4)}} \quad \beta = \pm \sqrt{1 - \frac{D-4}{2(\Delta-4)}} \quad \gamma = 0$

$$\text{または } \alpha=0 \quad \beta=\pm\sqrt{1-\frac{D-4}{2(\Delta-4)}} \quad \gamma=\sqrt{\frac{D-4}{2(\Delta-4)}}$$

Haldane 状態は 4 重に縮退している。特に AFH 模型にあたる $D=0$ 、 $\Delta=1$ の場合の基底状態は

$$\alpha=\sqrt{\frac{2}{3}}, \quad \beta=\pm\sqrt{\frac{1}{3}}, \quad \gamma=0 \quad \text{あるいは} \quad \alpha=0, \quad \beta=\pm\sqrt{\frac{1}{3}}, \quad \gamma=\sqrt{\frac{2}{3}} \quad \text{となるが、これらは AKLT}$$

の波動関数と正確に同じものになっている。たとえば $\alpha=\sqrt{\frac{2}{3}}, \quad \beta=\sqrt{\frac{1}{3}}, \quad \gamma=0$ の波動関数を

使って $\langle S_i^z \rangle$ を計算すると

$$\langle S_i^z \rangle = \left(-\frac{1}{3}\right)^{i-1} \frac{2}{3}, \quad \left\langle \sum_i S_i^z \right\rangle = \frac{1}{2}$$

となり、この系の端に $1/2$ の大きさの磁化が表れていることが判る。基底状態エネルギーは $-4/3$ であって、数値計算による値 -1.4105 の比較的良好な近似になっている。このように非局所的ユニタリー変換をあらかじめ行っておくと、簡単な近似で Haldane 状態を良く記述できることは面白い。

7-5 Lieb-Shultz-Mattis の定理の一般化

$S=1/2$ のとき AFH 模型の励起状態系がギャップレスであることは Lieb-Shultz-Mattis⁴²⁾ によりすでに 1961 年に示されていた。その後この証明は、Affleck-Lieb⁴³⁾ と Oshikawa-Yamanaka-Affleck⁴⁴⁾ により一般化された。これらの結果は、励起状態がギャップを持つための必要条件を与える。

ここでは、有限個のスピンからなる単位胞が 1 次元的につながった系を考える。たとえば n 本の鎖からなる梯子スピン系は単位胞として n 個のスピンが横に並んだものを考えればよい。ここで単位胞の個数 N は偶数とし、系は周期的境界条件を満たすものとする。 j 番目の単位胞を Λ_j とあらわす。系は以下の性質を満たすものと仮定する。

- 1) 併進対称性: Λ_j に属する演算子 A_j は併進をあらわすユニタリー演算子 T によって、

$$T^\dagger A_j T = A_{j+1} \text{ と変換される。このときハミルトニアン } H \text{ は } T^\dagger H T = H \text{ を満たす。}$$

- 2) 全スピンの z 成分 S^z (Λ_j の全スピンを S_j^z とするとき $S^z = \sum_j S_j^z$) が保存量である。

- 3) 空間反転対称性: 空間反転を表すユニタリー演算子 $P(=P^\dagger)$ に対し $PHP=H$ が成り立つ。

4) 有限系の基底状態 $|\psi\rangle$ は唯一である。

このとき次の定理が成り立つ。

[定理](Lieb-Shulz-Mattis, Affleck-Lieb, Oshikawa-Yamanaka-Affleck)

単位胞中のスピンの大きさの和を S 、基底状態における S^z の値を M とする。

$S - \frac{M}{N}$ が整数でないならば、 $N \rightarrow \infty$ の極限で励起エネルギーがゼロになる励起状態が存在する

か、それとも $N \rightarrow \infty$ の極限で基底状態に縮退が存在する。

[証明] ハミルトニアンを具体的に次のようにあらわす。

$$H = \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha} (A_{j,\alpha}^{\dagger} B_{j+1,\alpha} + B_{j+1,\alpha}^{\dagger} A_{j,\alpha}) + \sum_{j=1}^N C_j$$

ここで $A_{j,\alpha}$ 、 $B_{j,\alpha}$ は S_j^z を Δ_{α} (=整数) だけ増加させ、 C_j は S_j^z を保存する演算子とする。すなわち

$$[S_j^z, A_{j,\alpha}] = \Delta_{\alpha} A_{j,\alpha}, \quad [S_j^z, B_{j,\alpha}] = \Delta_{\alpha} B_{j,\alpha}, \quad [S_j^z, C_j] = 0.$$

また Λ_j と Λ_{j+1} の間に鏡映面があり $PA_{j,\alpha}P = B_{j+1,\alpha}$ が成り立つものとする。

ユニタリー演算子 $U = \prod_j U_j$ ($U_j = \exp\left[i\frac{2\pi}{N} j S_j^z\right]$) を用いて定義した状態

$|\phi\rangle \equiv U|\psi\rangle$ が $N \rightarrow \infty$ の極限で励起エネルギーがゼロとなる励起状態であるかどうかを調べる。

励起エネルギーは

$$\delta E \equiv \langle \phi | H | \phi \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | U^{\dagger} H U - H | \psi \rangle.$$

$$U_j^{\dagger} A_{j,\alpha} U_j = \exp\left[-i\frac{2\pi j \Delta_{\alpha}}{N}\right] A_{j,\alpha}, \quad U_j^{\dagger} A_{j+1,\alpha}^{\dagger} U_j = \exp\left[i\frac{2\pi j \Delta_{\alpha}}{N}\right] A_{j+1,\alpha}^{\dagger}, \quad U_j^{\dagger} C_j U_j = C_j \quad \text{より}$$

$$U^{\dagger} H U = \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha} \left\{ \exp\left[-i\frac{2\pi \Delta_{\alpha}}{N}\right] A_{j,\alpha}^{\dagger} B_{j+1,\alpha} + \exp\left[i\frac{2\pi \Delta_{\alpha}}{N}\right] B_{j+1,\alpha}^{\dagger} A_{j,\alpha} \right\} + \sum_j C_j.$$

ここで $\exp[i2\pi \Delta_{\alpha}] = 1$ であることを用いた。したがって

$$\delta E = \sum_{\alpha} \left\{ \left(\cos \frac{2\pi \Delta_{\alpha}}{N} - 1 \right) \sum_{j=1}^N \langle \psi | A_{j,\alpha}^{\dagger} B_{j+1,\alpha} + B_{j+1,\alpha}^{\dagger} A_{j,\alpha} | \psi \rangle - i \sin \frac{2\pi \Delta_{\alpha}}{N} \sum_{j=1}^N \langle \psi | A_{j,\alpha}^{\dagger} B_{j+1,\alpha} - B_{j+1,\alpha}^{\dagger} A_{j,\alpha} | \psi \rangle \right\}$$

ここで併進対称性より $\langle \psi | A_{j,\alpha}^\dagger B_{j+1,\alpha} - A_{j,\alpha} B_{j+1,\alpha}^\dagger | \psi \rangle$ が j によらないことと、反転対称性より

$\langle \psi | A_{j,\alpha}^\dagger B_{j+1,\alpha} | \psi \rangle = \langle \psi | B_{j+1,\alpha}^\dagger A_{j,\alpha} | \psi \rangle$ であることを用いると

$$\delta E = \sum_{\alpha} \left\{ \left(\cos \frac{2\pi \Delta_{\alpha}}{N} - 1 \right) \sum_{j=1}^N \langle \psi | A_{j,\alpha}^\dagger B_{j+1,\alpha} + B_{j+1,\alpha}^\dagger A_{j,\alpha} | \psi \rangle \right\} \sim O\left(\frac{1}{N}\right).$$

したがって δE は $N \rightarrow \infty$ で 0 に近づく。 $|\phi\rangle$ が励起状態であるためには $\langle \psi | \phi \rangle = 0$ が言えればよい。そこで

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \langle \psi | U | \psi \rangle = \langle \psi | T^\dagger U T | \psi \rangle = \left\langle \psi \left| T^\dagger \exp \left[i \frac{2\pi}{N} \sum_j j S_j^z \right] T \right| \psi \right\rangle \\ &= \left\langle \psi \left| \exp \left[i \frac{2\pi}{N} \sum_j j S_{j+1}^z \right] \right| \psi \right\rangle = \langle \psi | U \exp [2\pi i S_1^z] | \psi \rangle \exp \left[-\frac{2\pi i}{N} M \right] \end{aligned}$$

1) 単位胞中のスピンの大きさの総和 S が半奇整数の場合 $\exp[2\pi i S_1^z] = -1$ だから

$$\left(1 + \exp \left[2\pi i \frac{M}{N} \right] \right) \langle \phi | \psi \rangle = 0 \quad \text{つまり } \frac{M}{N} \text{ が半奇整数でないときは } \langle \phi | \psi \rangle = 0.$$

たとえば $M=0$ の場合 ($H=0$) はギャップレスの励起状態が存在するか、あるいは無限系では基底状態に縮退が存在するかのどちらかである。

2) S が整数の場合は $\exp[2\pi i S_1^z] = 1$ だから

$$\left(1 - \exp \left[2\pi i \frac{M}{N} \right] \right) \langle \phi | \psi \rangle = 0 \quad \text{つまり } \frac{M}{N} \text{ が整数でない限り } \langle \phi | \psi \rangle = 0 \text{ となる。}$$

結局、 $S - \frac{M}{N}$ が整数の時には励起エネルギーにギャップが存在し得るが、それ以外のときは、

たとえばダイマー状態のような長周期構造が表れて基底状態が縮退しない限り励起状態はギャップレスであることがわかる。

強磁場中の磁化曲線において磁場の有限な領域で磁化が増加せず磁化曲線が平坦になる磁化プラトーの問題が最近興味を呼んでいる。⁴⁵⁾ z 方向に磁場をかけたとき $S^z = M$ の状態に磁化プラトーが存在することは、 $S^z = M$ と $S^z = M+1$ の状態の間にエネルギーギャップが存在することを意味する。上の議論で考えてきた励起状態は基底状態と同じ S^z の値をもつ状態であったから、そのまま磁化プラトーの問題に適用することはできない。なぜなら、 $S^z = M$ と

$S^z = M+1$ の状態間にエネルギーギャップがあっても $S^z = M$ の部分空間にギャップがあるとは言えないからである。しかしこれまで見出された磁化プラトーはすべて $S - \frac{M}{N} = \text{整数}$ という条件が成り立つ場合に起こっており、この条件が磁化プラトールの起こる条件を与えていると考えられている。

8 フラストレーションの強い量子スピン系

フラストレーションのある系では、量子効果のために量子スピン系と古典スピン系ではまったく別の秩序が起こることがある。たとえば 1 次元 $J_1 - J_2$ 模型では、古典系ではスパイラル秩序があらわれるのに $S=1/2$ 系ではダイマー秩序があらわれる。このようにフラストレーションの強いスピン系は量子効果の最も強くあらわれる系として理論的に非常に興味深い。この章ではそれらの系のうちいくつかの例を紹介する。フラストレーションの強いスピン系については、1 次元の場合を除き現状ではまだ十分理解が進んでいない。それはこのような系を研究するための有効な方法が今のところ存在しないからである。フラストレーションの無い場合に有効な経路積分の考えに基づくモンテカルロ法は、フラストレーションのある系では負符号問題のために実行が難しく、理論的研究の手法は（修正）スピン波理論や少数系の数値対角化などに限られている。

8-1 RVB (resonating valence bond) 描像と spin liquid

フラストレーションの強い系として最もよく知られているのは 3 角格子上の AFH 模型であろう。ここでは最初にこの系に対して提案された resonating valence bond 描像⁴⁶⁾を紹介する。この系は図 5 で示された格子を上向きの 3 角系の集合と考えると $H = \sum_i h_i$ とあらわされる。ここで h_i は 3 角形 1 個のハミルトニアンである。スピン 1、2、3 からなる 1 個の 3 角形をとると、

$$h_i = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_1) = \frac{J}{2}(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3)^2 - \frac{3J}{2}\mathbf{S}^2$$

と書けるので $\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 = 0$ の時エネルギーが最低になり、古典的近似では $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3$ が互いに 120° を向いた 120° 構造が基底状態になる。このときスピン 1 個あたりのエネルギーは $3J\left(-\frac{1}{2}\right)\mathbf{S}^2 = -\frac{3J}{8}$ である。

$S=1/2$ スピン系であれば $|\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3| = \frac{1}{2}$ が h_i の基底状態を与えるが、この状態は 4 重縮退しており、その各々は 3 個のスピンの中の 2 個がシングレット対を作り残る 1 個は自由な状態と考えることができる。このように考えると 3 角形のかわりにボンドを単位に考える方が良

さそうに思われる。シングレット対1個のエネルギーは $-\frac{3}{4}J$ であるから、すべての格子点がいずれかのシングレット対に属するようにシングレット対を格子上に敷きつめるとスピン 1 個あたりのエネルギーは

$$-\frac{3}{4}J \times \frac{1}{2} = -\frac{3}{8}J$$

となり基底状態のエネルギーは

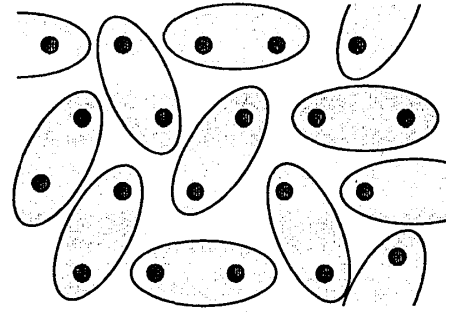


図20 RVB状態のイメージ

120° 構造の時と同じになる。しかしこの敷きつめ方は無数にあるので、基底状態をこれらの適当な線形

結合 $\psi = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \phi_{\alpha}$ にとれば C_{α} のコヒーレンスによりエネルギーを下げるができる。ここ

で α は最近接シングレット対の配列をあらわす。これが Anderson によって提案された resonating valence bond (RVB) 状態 (図20) である。

Anderson は、三角格子の基底状態ではこのような状態が実現していて、120 度構造の秩序は存在しないと主張した。最近接シングレット対だけの配列だけでなく遠く離れたスピン間のシングレット対もとり入れれば近似はさらに良くなる。たとえば Lee-Feng の変分計算ではスピン 1 個あたりの基底エネルギーは $-0.484J$ である。⁴⁷⁾ しかし可能なシングレット対の配列全体は全スピン $S=0$ の空間の (overcomplete な) 基底となるので、すべての可能な配列を含むような状態まで可能性を広げると、それは基底状態が $S=0$ の状態であることを意味するにすぎず、RVB 状態の意味が無くなってしまう。ここでは次のような性質をもつ状態を RVB 状態と呼ぶことにしよう。

- 1) $S=0$
- 2) いかなる長距離秩序ももたない。
- 3) すべての相関関数が短距離相関である。つまり、有限の相関距離をもつ。

RVB 状態を上記の3条件を満たす状態とすると、このような基底状態状態をもつ系は現在のところ知られていない。6章に述べたように三角格子AFH模型では120度構造の秩序が存在すると考えられている。1次元 $S=1$ AFH 模型は string 秩序をもつ。

最近RVB状態と同様な意味をもつ言葉として、spin liquidという言葉が使われている。spin liquid が正確にどういう状態をさすのか確立した定義は無いように思われるが、上記の性質のうちの2) を持つ状態の意味で使われているようである。その場合には相関関数が冪関数で減衰する場合も含まれる。1次元 $S=1/2$ AFH 模型は spin liquid 状態が基底状態になっている系の例である。これまで知られている spin liquid は相関関数が冪関数で減衰し、励起エネルギーギャップを持たないものである。長距離秩序が何もないのにエネルギーギャップが存在するということが可能なのかわからない。

基底状態が RVB あるいは spin liquid 状態である可能性が議論されている二次元系には正方格子上の J_1-J_2 模型、カゴメ格子 AFH 模型、3 角格子上の多スピン交換模型等がある。

8-2 正方格子上の J_1-J_2 模型

この模型は酸化物超伝導体の CuO_2 面の磁性に関連して盛んに研究された。図 21 のように最近接交換相互作用 J_1 と次近接交換相互作用 $J_2 = \lambda J_1$ が働いている。 $J_1 > 0$ 、 $\lambda > 0$ のときどのような基底状態が実現するかが問題である。この系では λ の変化によりフラストレーションの強さをコントロールできる。

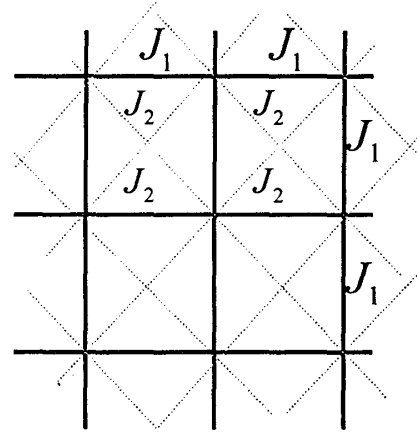


図21 正方格子 J_1-J_2 模型

まず古典近似でどのような状態が安定か考えてみると

$$J(\mathbf{q}) = 2J \left[\cos q_x + \cos q_y + \lambda \left\{ \cos(q_x + q_y) + \cos(q_x - q_y) \right\} \right]$$

$$= 4\lambda J \left[\left(\cos q_x + \frac{1}{2\lambda} \right) \left(\cos q_y + \frac{1}{2\lambda} \right) - \frac{1}{4\lambda^2} \right]$$

であるが、 λ の値によって異なる $\mathbf{q}$ が $J(\mathbf{q})$ の最小値を与える。

- (1) $0 < \lambda \leq \frac{1}{2}$ のとき $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ 、 $J(\mathbf{Q}) = -4J(1 - \lambda)$ (Neel 状態)。
- (2) $\lambda > \frac{1}{2}$ のとき $\mathbf{Q}_1 = (\pi, 0)$ or $\mathbf{Q}_2 = (0, \pi)$ 、 $J(\mathbf{Q}) = -4\lambda J$ 。

(2) の場合の基底状態は $\mathbf{S}_{Q_1} \cdot \mathbf{S}_{Q_2} = 0$ 、 $\mathbf{S}_{Q_1}^2 + \mathbf{S}_{Q_2}^2 = NS^2$ を満たす $\mathbf{S}_{Q_1}$ と $\mathbf{S}_{Q_2}$ だけを含むが、 $\mathbf{S}_{Q_1}$ と $\mathbf{S}_{Q_2}$ の大きさは決まらない。この状態は図 22 に示すように、2 つの副格子が各々独立に Neel 状態になっている状態で、2 つの Neel 状態のスピン軸のなす角 θ は任意である。

任意の θ の状態からのスピン波には 4 個のモードが存在する。そのうち gapless のモードは長波長の極限で

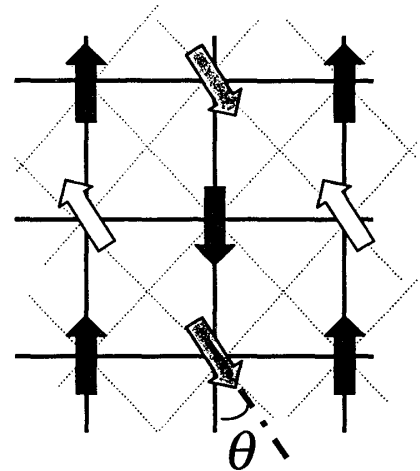


図22 4副格子状態

$$\omega_k^{(1)} \propto \sqrt{(2\lambda + \cos\theta)\{(2\lambda - 1)k_1^2 + (2\lambda + 1)k_2^2\}}$$

$$\omega_k^{(2)} \propto \sqrt{(2\lambda - \cos\theta)\{(2\lambda + 1)k_1^2 + (2\lambda - 1)k_2^2\}}$$

となり、基底状態の零点振動によるエネルギーの θ 依存性を調べると $\cos\theta = \pm 1$ で最小値となり、スピン軸がそろった collinear 状態が安定になる。⁴⁸⁾ これは量子ゆらぎによって秩序状態が安定化する現象 (order from disorder) ⁴⁹⁾ の一例である。

丁度 $\lambda = \frac{1}{2}$ の時には $\omega_k^{(1)}$ 、 $\omega_k^{(2)}$ が長波長で k の2次の項に比例するため、スピン波近似に

よる副格子磁化の補正項が発散してしまう。この結果に基づき $\lambda \cong \frac{1}{2}$ では spin liquid 状態が実現

するという主張が Chandra-Doucot⁵⁰⁾により行われた。一方 Nishimori-Saika⁵¹⁾らは修正スピン波近似を用いて Neel 状態から Collinear 状態への1次転移が起こると結論しており、またダイマー秩序が実現するという理論⁵²⁾も提出されている。実際にどのような基底状態が実現しているか今のところ未解決である。

8-3 フロップスピン系

相互作用間の強い競合のために古典的な基底状態に非常に大きな縮退があらわれる場合がある。カゴメ格子上的 AFH 模型を例にとりて説明すると、この場合すべての3角形の3個のスピンのお互いに120度の角度をなしていれば基底状態となる。基底状態は無数に多くあるが、図23に示した $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 状態もそのひとつである。

この状態では1個の6角形はその外部とお互いに平行な6個のスピンのみを通じて結合している。従って6角形上のスピンを6個のスピンの平行な軸の回りに一斉に θ だけ回転してもエネルギーは不変である。6角形の数全系に

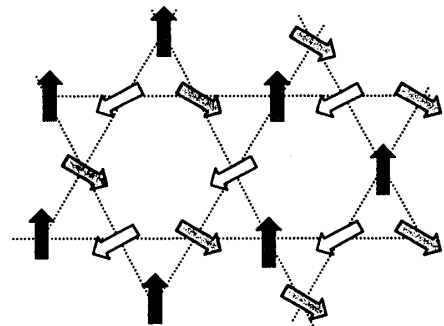


図23 カゴメ格子 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 状態

$O(N)$ 個含まれるからこの系の古典的基底状態は $O(N)$ 個の連続自由度を持つ。簡単に言えばこの系はぐにゃぐにゃして基底状態のスピン配置の決まらない系である。このような系をフロップスピン系と呼ぶ。いささか病的な系であるが、このような系でどのような基底状態が量子効果により実現するかは理論的に興味深い問題である。

クラスター構造をもつ格子上的 AFH 模型がカゴメ格子以外にフロップスピン系として知られている。たとえば図24に示すスピネル構造のBサイトだけからなる格子は正4面体がネットワークを作る構造である。これらの格子構造はグラフ理論で line graph とよばれる一群の

グラフに属している。これはある格子構造 G から出発して、その格子のボンドを新しい格子のサイトと考え、もとの格子の同一のサイトにつながっているボンドに対応するサイト同士をボンドでつなぐことにより得られる格子構造（グラフ）である。カゴメ格子、Bスピネル構造は、それぞれ蜂の巣格子、ダイヤモンド格子の line graph である。これらの格子上の AFH 模型の古典的基底状態の条件は各クラスターで $\sum_{i \in \text{cluster}} \mathbf{S}_i = 0$ が成り立つことである。この条件の数は G のサイト

数に等しい。一方 line graph 上のスピンの数は G のボンド数であるから条件の数より大きくなる。このため line graph 上の AFH 模型の基底状態には大きな縮退が残るのである。

フロピースピン系にスピン波理論を適用すると、任意の $\mathbf{k}$ にたいし $\omega_{\mathbf{k}} = 0$ となるモードがあらわれる。この場合一つの古典基底状態から出発して量子効果をスピン波による補正として扱う近似は良くないであろう。カゴメ格子 AFH 模型の基底状態は LRO のない spin liquid 状態であり、また励起状態も、 $S=1$ の第 1 励

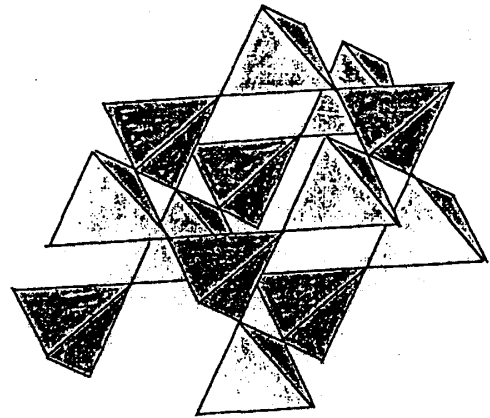


図24 Bスピネル構造(4面体格子)

起状態よりエネルギーの低い $S=0$ の状態がマクロな数 ($O(e^{N\alpha})$) 存在するであろうとの予測が少数系の数値対角化計算に基づいて行われている。⁵³⁾ この多数の $S=0$ 状態は隣りあう 2 個の 3 角形からなるクラスターが作るシングレットを単位とする多数の配置に起源があるという描像も提案されている。⁵⁴⁾ しかし、まだ対角化できる系のサイズは小さいのでさらに詳しい研究が必要であろう。

9 まとめ

この講義ノートではスピンハミルトニアン の導出からはじめてフラストレーションのある系まで、スピン系の秩序状態について概説をおこなった。このうち対称性の破れに関する一般論についてかなり詳しく紹介した。一方長距離秩序の存在を示す議論はこの講義に含めなかった。また各種の具体的な秩序について詳しく述べることはできなかった。これらについて詳しく知りたい人は他の解説⁵⁵⁾を参考にして欲しい。

具体的な問題でははまだ判っていないことも多い。特に 2 次元、3 次元のフラストレーションの強い量子スピン系に関しては、確実に判っていることは少ない。これはこれらの系にたいして有効な解析的あるいは数値的方法が存在しないためである。今後の理解の発展のためには新しい方法論の開発が急務である。若い人達の新鮮な発想に期待したい。

文献

- 1) D.J. Thouless, Proc. Roy. Soc. **86** 893(1965).
- 2) M. Roger, Hetherington and J.M. Delrieu, Rev. Mod. Phys. **55** 1(1983).
- 3) A. Yoshimori, J. Phys. Soc. Jpn **14** 807(1959).
T. A. Kaplan, Phys. Rev. **119** 1460(1960).
- 4) W. Marshall, Proc. Roy. soc **A232**,48(1995).
E. Lieb and D. Mattis, J. Math. Phys. **3** 749(1962).
- 5) D.C. Mattis, Phys. Rev. Lett. **42** 1503(1979).
H. Nishimori, J. Stat. Phys. **26** 839(1981).
- 6) N.N. Bogoliubov, Physica **26** S1 (1960).
- 7) R.B. Griffiths, Phys. Rev. **152** 240(1966).
- 8) T. Koma and H. Tasaki, Commun. Math. Phys. **158** 191(1993).
- 9) T. A. Kaplan, P. Horsch and W. von der Linden, J. Phys. Soc. Jpn. **58** 3894(1989).
- 10) C.K.Majumdar and D.K.Ghosh, J. Math. Phys. **10** 1399(1969).
- 11) K.Okamoto and K.Nomura, Phys. Lett. **A169** 433(1992).
- 12) J.Villain, J. Phys. **C10** 1717(1977).
S. Miyashita and H. Shiba, J. Phys. Soc. Jpn. **53** 1145(1984).
H. Kawamura and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **53** 4138(1984).
- 13) X.G. Wen, F. Wilczek and A. Zee, Phys. Rev. **B39** 11413(1989).
- 14) K. Kubo and T. Momoi Z. Phys. B **103** 485(1997).
- 15) M. den Nijs and K. Rommelse, Phys. Rev. **B40** 4709(1989).
- 16) T. Holstein and H. Primakoff, Phys. Rev. **58** 1908(1940).
- 17) J. Kondo and K. Yamaji, Prog. Theor. Phys. **47** 807(1972).
M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. Suppl. **87** 233(1986); Phys. Rev. **B40** 2494(1989).
- 18) R. Kubo, Phys. Rev. **87** 568(1952).
- 19) B.S. Shastri, J. Phys. **A25** L249(1992)
- 20) N.D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17** 1133(1966).
- 21) P.A. Martin, Nuovo Cimento **68** 302(1982).
- 22) P.C. Hohenberg, Phys. Rev. **158** 383(1967).
N.D. Mermin, J. Math. Phys. **8** 1061(1967).
- 23) J. Goldstone, Nuovo Cimento **19** 154(1961).
H. Wagner, Z. Physik **195** 273(1966).
- 24) T. Momoi, J. Stat. Phys. **85** 193 (1996).
- 25) P. Horsch and W. von der Linden Z. Phys. **B72** 181(1988).

- 26) T. Koma and H. Tasaki, J.Stat. Phys **76** 745(1994).
- 27) S.Tang and J.E. Hirsch, Phys. Rev. **B39** 4548 (1989).
- 28) H. Neuberger and T. Ziman, Phys. Rev. **B39** 2608(1989).
- 29) B. Bernu et.al. Phys. Rev. B **50** 10048(1994).
- 30) L. Hulthen, Arkiv.Mat.Astron.Fysik.**26A** No11(1938).
C.N.Yang and C.P.Yang, Phys.Rev. **150** 321,327 (1966).
- 31) F.D.M. Haldane, Phys. Lett. **A93** 464(1983).
- 32) M.P. Nightingale and H.W. Blote, Phys. Rev. **B33** 659(1986).
- 33) S.R. White and D.A. Huse, Phys. Rev. **B48** 3844(1993).
- 34) K. Nomura, Phys. Rev. **B40** 9142(1989).
- 35) I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb and H. Tasaki, Commun, Math. Phys. **115**
477(1988).
- 36) S. Kanabe, J. Stat. Phys. **52** 627(1988).
- 37) T. Kennedy, J. Phys. Condens. Matter **2** 5737(1990).
- 38) K. Katsumata, H. Hori, T. Takeuchi, M. Date, A. Yamagishi and J.P. Renard,
Phys. Rev. Lett. **63** 86(1989).
- 39) 勝又紘一：固体物理 Vol27.No1 9(1992) およびその引用文献.
- 40) T. Kennedy and H. Tasaki. Phys. Rev. **B45** 304(1992);
- 41) S. Takada and K. Kubo. J. Phys. Soc. Jpn **60**(1991)4026.
- 42) E.H. Lieb, T.D. Shulz and D.C. Mattis, Ann. Phys. (N.Y.) **16** 407(1961).
- 43) I. Affleck and E.H. Lieb, Lett. Math. Phys. **12** 57(1986).
- 44) M. Oshikawa, M. Yamanaka and I. Affleck Phys. Rev. Lett **78** 1984(1997).
- 45) 押川正毅、戸塚圭介、山中正則, 日本物理学会誌 **54** 814(1999).
- 46) P.W. Anderson, Mater. Res. Bull. **8** 153(1973).
P. Fazekas and P.W. Anderson, Philos. Mag. **30** 423(1974).
- 47) T.K. Lee and S. Feng, Phys. Rev. **B41** 11110(1990).
- 48) K. Kubo and T. Kishi, J. Phys. Soc. Jpn. **58** 2547(1990)
- 49) J. Villain, R. Bidaux, J.P. Carton and R. Conte, J. Phys.(Paris) **41** 1263(1980).
C.L. Henley, Phys. Rev. Lett. **62** 2056(1989).
- 50) P. Chandra and B. Doucot, Phys. Rev. **B38** 9335(1988).
- 51) H. Nishimori and Y. Saika, J. Phys. Soc. Jpn. **58** 4454(1990).
- 52) M.P. Gelfand, R.R.P. Singh and D.A. Huse, Phys. Rev **B40** 10801(1989).
- 53) C. Waldtman, H.U. Everts, B. Bernu, C. Lhuillier, P. Sndzingre, P. Lecheminant
and L. Pierre, Eur. Phys. Jour. **B2** 501(1998).

54) F. Mila, Phys. Rev. Lett. **81** 2356(1998).

55) 久保健、岸達也, 固体物理 **26** 125(1991).

雑賀洋平、中村統太、西森秀稔, 物性研究 **57** 709(1992).

A.P. Ramirez, Annu. Rev. Mater. Sci. **24** 453(1994) (実験のレビュー).

K. Kubo and T. Nakamura, *Computational Physics as a New Frontier in Condensed Matter Research*, eds. H. Takayama et. al. pp. 198(1995).

物理学論文選集 **Haldane Gap** 勝又紘一、田崎晴明編集 日本物理学会.
等