

## 量子反強磁性体の基底状態について

東工大理 西森秀稔

### § 1. はじめに

最近，高温超伝導のメカニズムなどに関連して，2次元の量子スピン系の秩序状態に関心が集まっている．本講演では，2次元量子反強磁性体の絶対零度の性質についてどういうことが問題になっているかを紹介する．

この問題に対する理論的なアプローチとしては様々なものがあるが，代表的なものをいくつか挙げると，

(i) 長距離秩序の存在の厳密な証明

(ii) 古典状態のまわりの量子ゆらぎを評価するスピン波理論

(iii) 少数系の対角化，量子モンテカルロ法などの数値計算

(iv) 直観的にもっともらしい変分波動関数を持ってきて，その性質を議論する方法

などがある．これらの方法による解析の結果，実に多様な性質を2次元量子スピン系は持っていることが予想されるようになってきたが，本当にきちんとしたことは，特にスピン1/2の量子効果の大きい系については，ほとんど何も確立されていない．まだ今後大きく進展する余地の残された分野である．

以下，格子の種類，フラストレーションの有無によって場合分けして個々の問題を論ずる．

### § 2. フラストレーションのない正方格子

正方格子上で，最近接相互作用のみをもつ反強磁性体

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z)$$

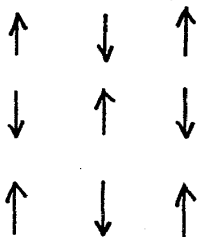
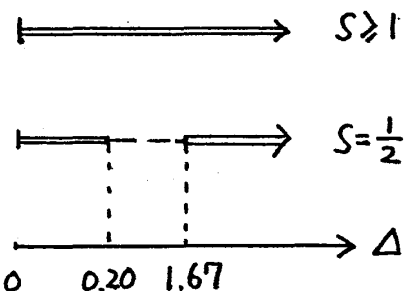


図 1

を考える．ここで， $\Delta$ は異方性のパラメータで， $\Delta=0$ はXY模型， $\Delta=1$ ハイゼンベルグ模型， $\Delta \rightarrow \infty$ がイジング模型に相当する．この系の基底状態は，古典的にはネール状態（図1）である．この秩序状態は，温度が有限になるとこ

図 2



Mermin-Wagnerによって示されたことは良く知られている．

量子ゆらぎが存在すると，基底状態においても図1のような完全なネール状態は実現しないが，本質的にこれと同じ秩序状態が存在することがあるパラメータ領域で

最近証明された<sup>1)</sup>。すなわち、図2に示したように、 $s=1/2$ で $0.20 < \Delta < 1.67$ の範囲を除いて、ネールタイプの長距離秩序が確かに存在するのである。

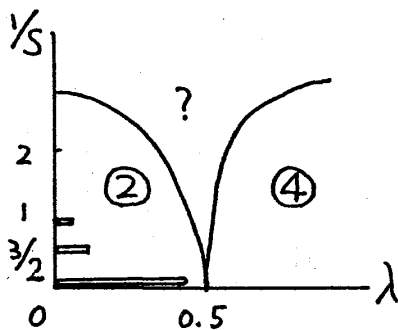
未証明の区間については、 $s=1/2, \Delta \neq 1$ では、 $\Delta$ に関する系の連続性から考えておそらく長距離秩序があることは間違いない。最も量子ゆらぎが大きく、また酸化物超伝導体との関連でも興味深い $\Delta=1$ のハイゼンベルグ模型では、状況はやや微妙になる。スピン波理論はネール秩序の存在を予言しているし、量子モンテカルロ計算のデータも、このスピン波の描像と矛盾しない<sup>2)</sup>。しかしながら、数値計算のデータの解釈には任意性が付きまとうし<sup>3)</sup>、本質的に $1/s$ による漸近展開であるスピン波理論が $s=1/2$ まで適用できるかどうかについては議論の余地がある。専門家の大勢は長距離秩序の存在を支持する方向にあるが、最終的な解決にはまだ遠い。

### § 3. フラストレートした正方格子 ( $\Delta = 1$ の場合)

最近接相互作用のみのとき、 $s=1/2$ でも長距離秩序が存在することを認めることにして、次近接にも反強磁性相互作用を入るとどうなるだろうか。

最近接相互作用に対する次近接相互作用の相対的な強さを $\lambda$ として、古典的な基底状態を求めると、 $\lambda$ が0.5以下のときには図3aのように通常のネール状態であるが、0.5を越えると、図3bに示した4つの副格子を持つネール状態に移行する。すなわち、次近接でネール状態になる2つの系が、任意の相対的な角度で存在するのである。

図 4



古典状態に対する量子ゆらぎをスピン波理論で計算した結果が図4に示してある<sup>4)</sup>。②、④と書いた領域において、それぞれ、図3a、図3bの古典状態が本質的に失われなくて残っている。 $\lambda=0$ から横に伸びている棒は、図3aの秩序が存在することが厳密に証明された部分である<sup>5)</sup>。

②をつけた領域がどういう状態にあるかについてはさまざまな議論がある。例えば、spin Peierls的なdimer状態<sup>6)</sup>、スピンの3次元的にねじれたchiral spin state<sup>7)</sup>などである。特に後者については、分数量子ホール効果との類似性で興味深い<sup>8)</sup>、これらが本当に基底状態を正しく記述しているかどうかについての議論は、まだ憶測の域をでてないように思われる。

図 3a

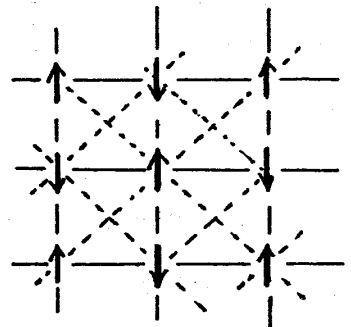
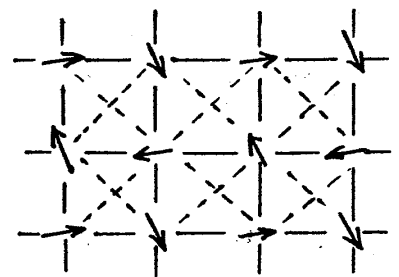


図 3b



#### § 4. 3角格子

3角格子反強磁性体の基底状態は，古典的にはいわゆる  $120^\circ$  構造である（図5）．スピン波理論によると<sup>9)</sup>，この構造は量子ゆらぎに対して安定であるが， $s=1/2$ の場合にスピン波の結果が信頼できるかどうかは自明ではない．少数系の対角化によると，古典状態 + スピン波ゆらぎという描像は，必ずしも状況をうまく説明できない<sup>10)</sup>．

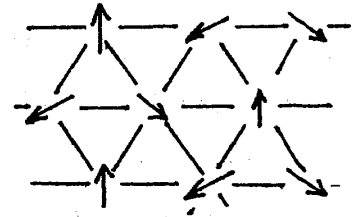


図 5

それでは基底状態はどんなになっている可能性があるだろうか．Andersonの言うRVB状態<sup>11)</sup>がそのまま基底状態になっているとは考えられないが<sup>12)</sup>，非古典的な基底状態は他にも考えられる．例えば，前節で触れたchiral stateや，分数量子ホール効果を示す系の波動関数と類似の変分関数が3角格子についても提案されている<sup>7,8)</sup>．ただし，少数系の対角化のデータは，chiral state的な秩序状態の存在に否定的な傾向を示している<sup>13)</sup>，まだ本当のことはよくわからない．

#### § 5. 6角格子

6角格子反強磁性体にはフラストレーションがなく，ネール状態 + スピン波ゆらぎという描像が一応出来る（図6）．ネール秩序の存在が厳密に示されている領域は， $s \geq 1$ （すべての $\Delta$ ）， $s=1/2$ （ $\Delta > 2.55$ ）である． $s=1/2$ ， $\Delta=1$ のハイゼンベルク模型でネール的な長距離秩序があるかどうか最も興味ある点である．というのは，

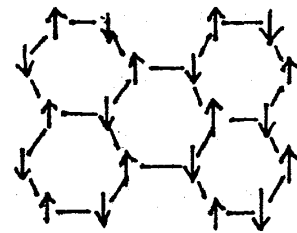


図 6

正方格子にくらべて，6角格子は最近接格子点の数が少なく，量子ゆらぎがより大きな効果を持つと期待されるため，長距離秩序が壊れている可能性が正方格子より強いからである．

実際，スピンの大きさが $3/2$ のときには，ハミルトニアン

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

で記述される系の基底状態は，長距離秩序を持たないことが証明されている<sup>14)</sup>．右辺の第2項，第3項を除く，本来のハイゼンベルク模型では長距離秩序があることは上述の通りであるから，第2，3項による量子ゆらぎが秩序を破壊するわけである．スピン $1/2$ だと，第2，3項とも第1項と同じ形になるので，単純なハイゼンベルク模型で長距離秩序が存在しない可能性がある．今後の研究の進展が期待される．

文献

- 1) T. Kennedy et al: J. Stat. Phys. 53 (1988) 1019, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2582  
K. Kubo and T. Kishi: Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2585  
H. Nishimori et al: J. Stat. Phys. 55 (1989) 259  
Y. Ozeki et al: J. Phys. Soc. Jpn. 58 (1989) 82  
H. Nishimori and Y. Ozeki: J. Phys. Soc. Jpn. 58 (1989) 1027
- 2) J.D. Reger and A. P. Young: Phys. Rev. B37 (1988) 5978
- 3) S. Miyashita: J. Phys. Soc. Jpn. 57 (1988) 1934  
Y. Okabe and M. Kikuchi: J. Phys. Soc. Jpn. 57 (1988) 4351
- 4) P. Chandra and B. Doucot: Phys. Rev. B38 (1988) 9335
- 5) T. Kishi and K. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. 58 (1989) No.7
- 6) M.P. Gelfand et al: preprint  
N. Read and S. Sachdev: Phys. Rev. Lett: 62 (1989) 1694
- 7) X.G. Wen et al: Phys. Rev. B39 (1989) 11413
- 8) V. Kalmeyer and R.B. Laughlin: Phys. Rev. B39 (1989) 11879  
青木秀夫: 固体物理 24 (1989) 777
- 9) T. Oguchi: J. Phys. Soc. Jpn. 52 (1983) Suppl p.183
- 10) H. Nishimori and H. Nakanishi: J. Phys. Soc. Jpn. 57 (1988) 626, and to appear
- 11) P.W. Anderson: Mat. Res. Bull. 8 (1973) 153
- 12) T. Oguchi et al: J. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) 323
- 13) M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. 58 (1989) No.8
- 14) I. Affleck et al: Commun. Math. Phys. 115 (1988) 477