

量 子 固 体 Ⅲ

京大基研 長 岡 洋 介

§ 5. 交換相互作用

前節で得た波動関数では、各原子は各格子点の付近に局在しているとしており、ボース粒子またはフェルミ粒子としての粒子の置換に対する対称性をみたしていない。いま、原子 1, 2, ……が格子点 $R_1, R_2, \dots$ に局在しているとした波動関数を

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (5.1)$$

と書く。もっとも簡単な Hartree 近似では

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{j=1}^N \phi(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_j) \quad (5.2)$$

である。ボース粒子 ^4He の場合、(5.1) から対称性をみたす波動関数を作るには

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_P P \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (5.3)$$

とすればよい。 P は粒子の置換の演算子、 $\sum_P$ はすべての置換についての和を表わす。この場合、ひとつの Ψ にひとつの対称性をみたす Φ が対応する。もしも $P\Psi$ と $P'\Psi$ ($P \neq P'$) の重なりが 0 であれば、(5.1) と (5.3) には形式的な差しか存在せず、どちらを取っても得られる物理量は全く同じになる。古典的な固体では、わざわざ (5.3) を取る必要は全くないわけである。重なりが 0 でなくても小さいときには、対称化したことによるエネルギー等の物理量への補正も小さい。したがって、 ^4He の場合波動関数の対称化はあまり意味がない(註 1)。

フェルミ粒子 ^3He の場合は事情が全く異なる。このとき、(5.1) には核スピンの波動関数が省略されているので、これを付け加える必要がある。すなわち

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \chi_S(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) \quad (5.4)$$

σ_i は i 原子のスピン座標、添字 S はスピンの配置を表わす。例えば、 $S = (\uparrow, \uparrow, \downarrow, \dots)$ であれば

長岡洋介

$$\chi_{\uparrow\uparrow\downarrow\cdots}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \cdots) = \alpha(\sigma_1)\alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_3)\cdots$$

但し、 $\alpha(\sigma)$ 、 $\beta(\sigma)$ はそれぞれスピン上向き、スピン下向きの状態を表わす波動関数である。(5.4)から反対称化を行うと

$$\Phi_S(1, 2, \cdots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-)^P P \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N) \chi(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_N) \quad (5.5)$$

ここに、 $(-)^P$ は置換 P が偶のときは+1、奇のときは-1である。 $1/\sqrt{N!}$ は便宜上つけた。 $P\Psi$ 間の重なりが0でないときには(5.5)は規格化されていない。この場合も、重なりがすべて0であれば(5.4)と(5.5)の違いは形式的なものとなり、 S についての 2^N 個の Φ_S はすべてエネルギー的に縮退している。しかし、重なりがいかに小さくても0でないならば、この縮退はその効果によって解けることになるので、核スピンの状態を決める上では、(5.5)の反対称化が基本的に重要な意味を持つのである。この核スピンの状態に依存するエネルギーが交換相互作用である。

2粒子の問題について具体的に見よう。粒子がそれぞれの位置に局在しているとして得られた軌道運動の基底状態の波動関数を

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (5.6)$$

とする。核スピンの波動関数は

$$\alpha(\sigma_1)\alpha(\sigma_2), \alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2), \beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2), \beta(\sigma_1)\beta(\sigma_2) \quad (5.7)$$

の四通りで、(5.6)との積をとって反対称化を行うと

$$\begin{aligned} \Phi_{\uparrow\uparrow}(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] \alpha(\sigma_1)\alpha(\sigma_2) \\ \Phi_{\uparrow\downarrow}(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_1)] \\ \Phi_{\downarrow\uparrow}(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2) - \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \beta(\sigma_2)\alpha(\sigma_1)] \\ \Phi_{\downarrow\downarrow}(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] \beta(\sigma_1)\beta(\sigma_2) \end{aligned} \quad (5.8)$$

$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ と $\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ との重なりが0であれば、この四つの状態は縮退している。

重なりが0でないとき、縮退がどう解けるかが問題である。そこで、波動関数を一次結合で

$$\Phi(1, 2) = \sum_S c_S \Phi_S(1, 2) \quad (5.9)$$

と表わす。 $\sum_S$ は $S = (\uparrow\downarrow), (\uparrow\uparrow), (\downarrow\uparrow), (\downarrow\downarrow)$ についての和である。(5.9)を

$$\mathcal{H}\Phi = E\Phi \quad (5.10)$$

に代入し、振巾 c_S に対する式に書き直す。 Φ_S どうしが必ずしも直交していないことに注意して計算すれば

$$\begin{bmatrix} E_0 - E_1 - E(1-S) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0 - E & -E_1 + ES & 0 \\ 0 & -E_1 + ES & E_0 - E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_0 - E_1 - E(1-S) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{\uparrow\uparrow} \\ c_{\uparrow\downarrow} \\ c_{\downarrow\uparrow} \\ c_{\downarrow\downarrow} \end{bmatrix} = 0 \quad (5.11)$$

ただし、

$$E_0 = \int \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mathcal{H} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 \quad (5.12)$$

$$E_1 = \int \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mathcal{H} \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) d\tau_1 d\tau_2 \quad (5.13)$$

$$S = \int \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) d\tau_1 d\tau_2 \quad (5.14)$$

もともと粒子はよく局在していて、 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ と $\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ と重なりがあまり大きくないとすれば、 E_1 、 S は小さい量である。そこで、これにかかる E は第0近似の値 E_0 におきかえてよい。そのとき、(5.11)の行列は

$$\begin{bmatrix} E_0 - J - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0 - E & -J & 0 \\ 0 & -J & E_0 - E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_0 - J - E \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

と近似できる。ただし、

$$J \equiv E_1 - E_0 S = - \int \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) (\mathcal{H} - E_0) P \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 \quad (5.16)$$

長岡洋介

行列 (5.15) は四通りのスピン配列によって張られる部分空間内で働く有効スピンハミルトニアンである。それはスピン置換の演算子 P_s によって

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = E_0 - J P_s \quad (5.17)$$

と書くこともできる。 P_s の働きは、例えば

$$P_s c_{\uparrow\uparrow} = c_{\uparrow\uparrow}, \quad P_s c_{\uparrow\downarrow} = c_{\downarrow\uparrow}$$

である。 P_s はスピン演算子によって

$$P_s = \frac{1}{2} + 2(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) \quad (5.18)$$

と表わされるので、(5.17) は結局

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = (E_0 - \frac{1}{2}J) - 2J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) \quad (5.19)$$

の形になる。

“交換相互作用” J の符号については一般的な議論が可能である。この系のもとのハミルトニアンは直接 スピンに依存していないので、この2粒子系の波動関数は軌道部分 ψ とスピン部分 χ との積に書くことができる：

$$\Phi(1, 2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2) \quad (5.20)$$

固有状態は全スピンの固有状態でもなければならない。すなわち、 χ は singlet χ_s か triplet χ_t のいずれかである：

$$\begin{aligned} \chi_s(\sigma_1, \sigma_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(\sigma_1) \beta(\sigma_2) - \beta(\sigma_1) \alpha(\sigma_2)] \\ \chi_t(\sigma_1, \sigma_2) &= \begin{cases} \alpha(\sigma_1) \alpha(\sigma_2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(\sigma_1) \beta(\sigma_2) + \beta(\sigma_1) \alpha(\sigma_2)] \\ \beta(\sigma_1) \beta(\sigma_2) \end{cases} \end{aligned} \quad (5.21)$$

これらの波動関数は、粒子の置換に対して

$$\chi_s(\sigma_1, \sigma_2) = -\chi_s(\sigma_2, \sigma_1), \quad \chi_t(\sigma_1, \sigma_2) = \chi_t(\sigma_2, \sigma_1) \quad (5.22)$$

の性質があるから、 Φ が反対称であるために、それに対応した軌道部分は

$$\psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_s(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1), \quad \psi_t(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\psi_t(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (5.23)$$

でなければならない。ところで、波動関数は対称な方が node を持たないだけエネルギーが低い。一般に、粒子の置換に対する対称性について全く制限を置かずに考えたとき、もっともエネルギーの低い状態は、粒子の置換に対して対称な状態であることが知られている(註2)。このことから、2粒子系の基底状態は軌道部分の波動関数が対称になる singlet 状態であることが結論づけられている。他方、スピンハミルトニアン(5.19)において、基底状態が singlet になるのは

$$J < 0 \quad (5.24)$$

の場合であり、したがって J は一般に負でなければならない。

多粒子系の場合にも、(5.5)から出発して核スピンの自由度に対する有効ハミルトニアンを導くことができる。それは一般に

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = E_0 - \sum_P (-)^P \mathcal{J}_P P_s \quad (5.25)$$

と書かれる。 $\mathcal{J}_P$ は置換 P に対する交換積分で

$$\mathcal{J}_P = \int \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) (\mathcal{H} - E_0) P \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d\tau_1 d\tau_2 \dots d\tau_N \quad (5.26)$$

と与えられる。スピンに対する置換演算子 P_s をスピン演算子で表わすのは、2体の場合は(5.18)、3体以上では(5.18)をくり返し用いればよい。3粒子の cyclic な置換については

$$P_{123 \rightarrow 312} = P_{31} P_{32} = \left(\frac{1}{2} + 2 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_1 \right) \left(\frac{1}{2} + 2 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_2 \right) \quad (5.27)$$

$$P_{123 \rightarrow 231} = P_{13} P_{12} = \left(\frac{1}{2} + 2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 \right) \left(\frac{1}{2} + 2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \right)$$

明かに、この二つの置換について交換積分は同じ値をとる。したがって、スピンハミルトニアンの3粒子置換から来る部分は、(5.27)をスピンが $1/2$ であることを考慮して書き直すと、

$$2 \mathcal{J}_{\text{III}} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_1) \quad (5.28)$$

長岡洋介

となる。ここで、3粒子置換の交換積分を $\mathcal{J}_{\text{III}}$ と書いた。このように、3粒子の置換までを考慮した範囲では、(5.25)は通常の高ゼンベルク模型の形になる。

4粒子の置換に至ってはじめて、高ゼンベルク模型とは異なる新しい型の相互作用が現れる。それは、4粒子のcyclicな置換の演算子

$$\begin{aligned} P_{1234 \rightarrow 2341} &= P_{14} P_{13} P_{12} \\ &= \left(-\frac{1}{2} + 2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4 \right) \left(\frac{1}{2} + 2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 \right) \left(\frac{1}{2} + 2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \right) \end{aligned} \quad (5.29)$$

を書き直して得られるもので、4スピンの相互作用

$$-2\mathcal{J}_{\text{IV}} [(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)(\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4) + (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4)(\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3) - (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3)(\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4)] \quad (5.30)$$

である。

3体の交換積分についても、その符号について、2体の場合と同様

$$\mathcal{J}_{\text{III}} < 0 \quad (5.31)$$

であることを一般的に示すことができる。3粒子の系でcyclicな置換だけが許されとしよう。輪になった管のなかにhard coreを持つ粒子が3個入っているような系を頭におけばよい。(5.27)で見たように、このような系で起る置換は偶置換だけであるから、波動関数は

$$\phi(123) = \phi(231) = \phi(312) \quad (5.32)$$

と符号を変えない。 ϕ が軌道部分 ψ とスピン部分 χ の積に書かれるとしよう：

$$\phi(123) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \chi(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \quad (5.33)$$

2体の時と同じ議論(註2)から、もっともエネルギーの低い状態は ψ が粒子の置換に対して対称な関数になる場合である。そのとき、(5.32)の性質をみたすには χ もまた対称な関数でなければならない。それは、スピンの揃った全スピン $S = 3/2$ の状態

$$\chi_{3/2}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = \alpha(\sigma_1) \alpha(\sigma_2) \alpha(\sigma_3) \quad \dots\dots \quad (5.34)$$

である。すなわち、この系の基底状態はスピンの揃った“強磁性”状態である。(5.28)の基底状態が強磁性的であるためには、(5.31)でなければならない。

4体以上の交換積分に関しても、同様に

$$\mathcal{J}_P < 0$$

(5.35)

が一般に成り立つと思われる。これも、上と同様の近似によらない証明ができるだろうと思うが、試みてはいない。

このようにして、多粒子系に体してもそのスピン自由度に対する有効ハミルトニアンを導くことができる。ここで、このハミルトニアンを導く上での基本的な仮定及至近似について、もう一度反省しておきたい。

第一は、粒子の軌道運動の状態としては、ひとつの $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ に限定し、その部分空間内でスピン状態を求めることにした点である。一般的に言えば、基底状態と低い励起状態とでスピン状態だけが異なっていて軌道状態は同じものになることが、いつも保証されているわけではない。上の取扱いでは、軌道運動の変化は全く無視された。これは、軌道運動の励起エネルギーがスピン状態の変化に伴うエネルギー変化、すなわち交換エネルギーに比べて十分大きい場合に許される近似である。量子固体の場合、軌道運動の励起状態とは格子振動の励起状態である。その励起エネルギーは、デバイ温度で代表してよいであろう。固体 ^3He の場合、これは数 10 K のオーダーである。これに対し交換エネルギーは 1 mK の程度であることが知られている。この比較からすれば、軌道運動の変化を無視した近似は一まず許されると考えられそうである*)

第二に、 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ は各原子を各格子点に比較的よく局在させた状態であると仮定している。原子の局在が悪ければ、各格子点にスピンが局在しているという描像は明かによくない。原子の局在がよいとすれば、交換積分は Ψ がわかればそれから (5.26) によって計算することができる。そのとき、例えば $1\ 2\ 3 \rightarrow 2\ 3\ 1$ の 3 体の交換積分であれば、1 と 2、2 と 3、3 と 1 の原子の波動関数の重なり積が効いて来る。したがって、この重なりが小さければ、交換積分の値は交換に加わる粒子の数が増すほど小さくなると考えられる。通常の磁性体でハイゼンベルク模型までしか考えないのはこの故であり、その先が効くにしても、(5.25) の和は比較的低次まで考えるので十分であると考えられる。

交換積分の問題には、実は Ψ をどう選ぶか等よく考えてみなければならない問題がある。それについては、Herring が詳しく論じており¹⁾ 固体 ^3He については McMahan

*) ほんとうにこれでよいかどうか、あとでもう一度問題にしたい。

がそれに基づく議論を行っている²⁾。

§ 6. 固体 ^3He のスピンハミルトニアン

前節で一般的に論じたスピン自由度に対する有効ハミルトニアンを、固体 ^3He の場合について具体的に導く。

あとで見るように、固体の体積が減ると交換相互作用は急速に小さくなる。したがって、交換相互作用が大きく比較的高温でその効果が見られるのは低圧の領域である。このような事情から、固体 ^3He の核スピン系の性質が実験的に詳しく調べられているのは、低圧の bcc 相の領域においてである（図 4 の ^3He の相図参照）。そこで、以下でも bcc 相に限定して考えることにする。

この場合、交換積分が比較的大きな値をとると考えられるのは、つぎのようなものである。

- (1) nearest neighbor (nn) 原子間の 2 体交換： $\mathcal{J}_{\text{II}1}$ （図 8 a）
- (2) 2nd neighbor (2n) 原子間の 2 体交換： $\mathcal{J}_{\text{II}2}$ （図 8 a）
- (3) 3 体交換。もっとも大きな値をとると思われるのは図 8 b の原子 1, 2, 3 の cyclic な位置の交換で、この場合、1-2, 3-1 間は nn, 2-3 間は 2n である。 $\mathcal{J}_{\text{III}}$
- (4) 4 体交換。nn の原子を結んで 4 原子が cyclic に位置を交換する道筋には、図 8 c の F 及び P がある。F では対角線で結ばれる 1-3, 2-4 がともに 2n, P では 1-3' が 3rd neighbor (3n), 2'-4' が 2n になる。F は四辺形が折れているので folded, P は四辺形が平面なので planar と呼ぶ。 $\mathcal{J}_{\text{IVF}}, \mathcal{J}_{\text{IVP}}$

もちろん、4 体交換までの範囲でも、もっといろいろな交換の可能性はある。しかし、直感的に見て交換積分が大きな値をとると思われるのはこの程度であろう。ここで、“直感的” といったのは、

- (1) 粒子間の距離が離れるほど交換は起りにくい。
- (2) 交換に加わる粒子数が増すほど、波動関数の重なりが減る（前述）。
- (3) 2 体の交換はお互いの hard core にじゃまされるが、多体の cyclic な交換では hard core のじゃまが少なくてすむ。

(2) と (3) は互に相反する働きをしている。結局、hard core による相関の効果を考慮すると、多体交換積分は 2 体交換積分に比べて波動関数の重なりから予想したほどには小

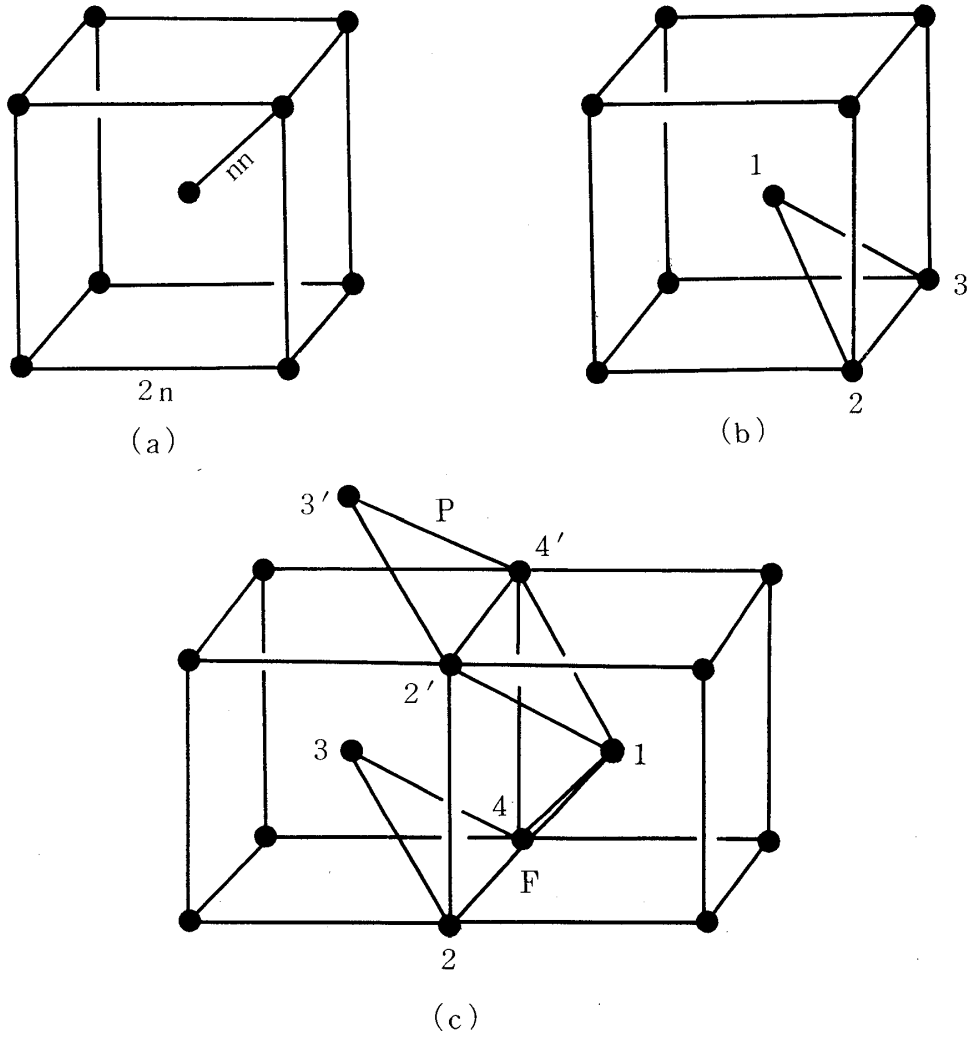


図 8

さくない，ということである。

交換積分として， $\mathcal{J}_{\text{II}1}$ ， $\mathcal{J}_{\text{II}2}$ ， $\mathcal{J}_{\text{III}}$ ， $\mathcal{J}_{\text{W}F}$ ， $\mathcal{J}_{\text{W}P}$ の五つのみを考慮し，有効ハミルトニアン (5.25) をスピン演算子によって書き表わす。 $\mathcal{J}_{\text{III}}$ からは nn 及び 2n 間の 2 スピン相互作用， $\mathcal{J}_{\text{W}F}$ からは nn 及び 2n 間の 2 スピン相互作用と folded 型の 4 スピン相互作用， $\mathcal{J}_{\text{W}P}$ からは nn，2n，3n 間の 2 スピン相互作用と planar 型の 4 スピン相互作用がそれぞれ生じる。結局

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} = & -2 \sum_{\nu=1,2,3} J_{\nu} \sum_{\nu} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - 2 \sum_{\alpha=F,P} K_{\alpha} \sum_{\alpha} [(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)(\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l) \\ & + (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l)(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k) - (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k)(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_l)] \end{aligned} \quad (6.1)$$

となる。 $\sum_{\nu}$ は ν -neighbor の (i, j) の組についての和， $\sum_{\alpha}$ は α 型の (i, j, k, l)

長岡洋介

の組についての和を表わす。 J , K と交換積分との関係は

$$\begin{aligned} J_1 &= \mathcal{J}_{\mathbb{I}1} - 6\mathcal{J}_{\mathbb{I}} + 3\mathcal{J}_{\mathbb{W}\text{F}} + 3\mathcal{J}_{\mathbb{W}\text{P}} \\ J_2 &= \mathcal{J}_{\mathbb{I}2} - 4\mathcal{J}_{\mathbb{I}} + 2\mathcal{J}_{\mathbb{W}\text{F}} + 2\mathcal{J}_{\mathbb{W}\text{P}} \\ J_3 &= 2\mathcal{J}_{\mathbb{W}\text{P}} \\ K_{\text{F}} &= \mathcal{J}_{\mathbb{W}\text{F}} \\ K_{\text{P}} &= \mathcal{J}_{\mathbb{W}\text{P}} \end{aligned} \quad (6.2)$$

(6.1) から核スピン系の性質を調べるのがつぎの課題である。(この節未完)

(註1) 対称な関数としては, (5.3)ではなくて $k=0$ の “ブロッホ状態”

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (\text{A}-1)$$

にすべての粒子が入った状態

$$\Phi'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \prod_{i=1}^N \psi_0(\mathbf{r}_i) \quad (\text{A}-2)$$

を考えることもできる。 Φ' はボース凝縮を起した状態で Φ とは全く異なる。対称化した基底状態の波動関数が Φ' に近いものになるとすれば, 固体 ^4He は一種の超流動状態になるはずで, 対称化は重要な意味を持つことになる。 H_2 分子の問題でいえば, Φ は Heitler-London, Φ' は LCAO-MO の波動関数に当っており, Φ' では一つの格子点は原子がいくつも入る状態を許している。固体 He では原子間に hard core の相互作用が働くから, このような状態はほとんど許されず, 波動関数は Φ に近いはずである。

しかし, 固体 He でも一つの格子点に原子が2個入ることを全く禁止しているわけでもない。その効果を見るため, hard core ではなくて soft core を考え, ボース粒子系に対する “ハバード模型”

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= t \sum_{(i,j)} c_i^\dagger c_j + U \sum_i n_i (n_i - 1) \\ n_i &= c_i^\dagger c_i \end{aligned} \quad (\text{A}-3)$$

を考えてみる。 $c_i^\dagger$, c_i は格子点 i に粒子を生成, 消滅させる演算子である。ここで U

$= 0$ のときの基底状態が ϕ' である。それでは t と U がともに有限の値を持つとき、基底状態にボース凝縮は起こるであろうか。 $|t| \ll U$ で t について摂動が許されるときには、ボース凝縮が起きないことが証明できる³⁾。逆に $|t| \gg U$ であれば、波動関数は ϕ' に近く、ボース凝縮が起きていることはほぼ明かであろう。したがって、 $|t|/U = 0$ (1)のある点で相転移が起きるものと思われる。この相転移は、フェルミ粒子のハバード模型で起きると思われる金属・絶縁体転移に相当している。上の模型では、格子の存在をまず仮定したが、量子固体では格子自体が相互作用によって作られている。したがって、 U を小さくしていくとこの超流動状態への相転移が起こる前に、固体が融解してしまうであろうから、固体でこのような超流動が起ることは期待できない。但し、のちに述べるように基底状態で固体がvacancyをもっていれば話は別になる。

(註2) スピンに依存しないハミルトニアンを持つ、同種粒子の多体系があるとき、その波動関数の粒子の置換に対する対称性になんの制限もしないならば、もっともエネルギーの低い状態の波動関数はどんなものになるだろうか。答は、完全に対称なボース型の波動関数である。直感的にも明かなことであるが、その証明はつぎのようにすればよい。

もっともエネルギーの低い状態の波動関数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ (ψ はrealにとる)がボース型ではなかったとする。そのとき、例えば $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ に関して反対称化をすることができる。すなわち

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) - \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots) \neq 0 \quad (\text{B-1})$$

ψ がボース型なら $\phi \equiv 0$ 。 ϕ も ψ と同じエネルギーを持つ固有状態である。

$$\mathcal{H}\psi = E\psi, \quad \mathcal{H}\phi = E\phi \quad (\text{B-2})$$

ϕ は $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ について反対称であるから、 $\phi = 0$ となる nodal plane を持つ。その面に垂直な直線上で ϕ の振舞いを見ると、図9のようになる。ここで $|\phi|$ という関数を作ると、そのエネルギー期待値は

$$\int |\phi| \mathcal{H} |\phi| d^N \tau = E \quad (\text{B-3})$$

である。 $|\phi|$ は nodal plane で微係数が不連続になるので、運動エネルギーの方が気になるが、この singularity は有限の寄与を生じない。このような singularity を持つ関数は

長岡洋介

固有状態ではあり得ないから、(B-3) から E よりエネルギーの低い固有状態が存在しなければならない。実際図9の点線のように関数を変形することによって、 E より低いエネルギー期待値を持つ関数をつくることができる。これは ψ がもっともエネルギーの低い状態であるという仮定に反する。故に、もっともエネルギーの低い状態の波動関数はボース型でなければならない。

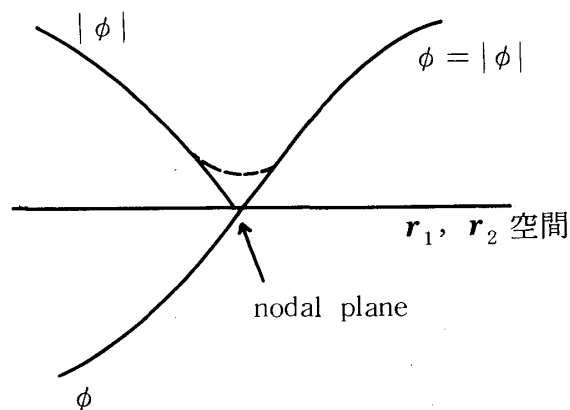


図9

この定理を用いると、本文の3粒子の問題を扱った議論と同じようにして、スピン1/2のフェルミ粒子系で粒子の置換が偶置換でしか起こり得ないような系の基底状態は、すべてのスピンの一方向に揃った強磁性状態であることが証明できる。のちに述べる vacancy が1個だけ存在するフェルミ固体の基底状態が強磁性になるという議論もその一例である。

文 献

- 1) C. Herring, Magnetism Vol. II (Suhl-Rudo 編, Academic Press 1968)
- 2) A. K. McMahan, J. Low Temp. Phys. 8 (1972), 115.
- 3) H. Matsuda and T. Tsuneto, Prog. Theor. Phys. Supplement No. 46, (1970), 411.