量子スピン液体の素励起

学習院大学理学部物理学科 宇田川 将文

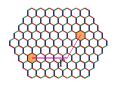
2021年10月15日

1 はじめに

量子スピン液体という言葉が物性物理学の世界に定着してから長い時間が経つように思います。また、時間が経つと共に、この言葉の立ち位置、量子スピン液体という言葉が想起させる物理概念も様々な変遷をたどってきたようにも思います。「スピン液体」という言葉自体の出自は単純で、絶対零度まで秩序を起こさない磁性体は存在するのだろうか?という素朴な興味から、この言葉は生まれました。統計力学を学んだ学部以上の方なら慣れ親しんでいるように、沢山の電子、あるいはスピンから作られた磁性体は、温度を下げていくと、強磁性や反強磁性というような秩序を示します。しかしながら秩序化を妨げるような何かしらの要因があれば、絶対零度までスピンが秩序を示さずに、乱れた状態のまま留まるということもあり得るのではないでしょうか?

秩序を妨げる要因としていかにもあり得そうだと考えられてきたのが幾何学的フラストレーションという要素です。三角形上に配置したスピンが反強磁性的に相互作用したとすると、全体としてスピンのエネルギーをうまく最適化できません。その結果として、「妥協した」スピン配置がエネルギーの低い状態として多数生じることになります。三角形を沢山敷きつめて格子状にすると、その数はマクロなオーダーになり、巨視的に縮退した基底状態を作ることになります。目論み通り秩序は抑えられて、多数の乱れた状態が同居する、スピン液体が現れたわけです。







スピン液体の最初の驚きは、この膨大に縮退した基底状態が、どうやら単なる無秩序な状態というわけではなく、独自の精妙な秩序を持っているらしいという発見でした。そして、この秩序の構造を詳しく教えてくれるのは思いがけなく、我々の身近にある"氷"、そしてその磁石版であるスピンアイスと呼ばれる磁性体なのです。

さて、物性を志す学部学生のみなさんが熱心に学ぶ科目は統計力学の他にもう一つ、量子力学があります。量子力学が基礎を置くのは重ね合わせの原理で、猫には気の毒なことですが、 $|\psi\rangle=|$ 生きた猫 $\rangle+|$ 死んだ猫 \rangle みたいな状態が出てくることになります。さてこの量子力学の基本原理を頭に置いて、先ほどの巨視的に縮退した基底状態を再び眺めてみると何を思うでしょう?二つの状態を重ね合わせるなどケチなことを言わず、縮退したマクロな数の状態を全て重ね合わせたら何が起こるだろうと考えてみたくなりませんか?スピン液体の二つ目の驚きはこのような「シュレディンガーの氷」とでもいうような膨大な数の状態の重ね合わせ、量子スピンアイスの中に見出されます。そこでは「分数化」という現象が起こり、物質を構成する基本単位だったはずのスピンが複数の自由度に分裂して動き回る、ということが起こります。しかもその新しい自由度-モノポール-の従う運動法則は量子電磁気学(QED)、しかも我々の世界を記述するはずの QED とは少し見かけの異なる QED のようなのです。

さて、この分数化という現象は量子力学の別の不思議な側面、「非局所性」と結びついてスピン液体についての三つ目の驚きを提起します。量子力学の非局所性といえば、EPRのパラドックスが有名です。遠く離れた二つのスピンの間の関係性が非局所的に維持される、というのがその本質です。量子スピン液体ではある意味で、EPR 現象を超えた度合いの非局所性が現れます。そこではひとつの量子状態自身が複数に分裂して非局所に保たれるように見えるのです。その舞台となるのが今世紀に提案された新しいスピン液体、Kitaev スピン液体です。

この講義ではこのような、スピン液体の三つの驚きを順を追って見ていきたいと思います。それはある意味、これまでのスピン液体の研究の歴史を追っていくようなことになるでしょう。そして願わくば、この講義ノートのすぐ次のページに、新しい歴史を書き込むための余白がすぐに見つかるような、そんな講義になれば良いなと思っています。

2 スピンアイス

量子スピン液体の性質を理解する基礎として、本章ではスピンアイスを具体例として、基底状態にマクロな縮退をもつ古典的なフラストレート磁性体について紹介する。マクロ縮退をもつ磁性体は、高温の量子スピン液体と位置付けることができる。大規模な縮退をもつ系に対する関心は古く、我々の身近に存在する氷の構造にまで話が遡る *1 。このあたりから話を始めることにしよう。

2.1 磁石の氷

氷のもつ奇妙な性質の多くは、氷の結晶中で水素原子配置が満たす局所的な拘束条件: アイスルールの結果として理解される [2,3]。六方晶 (I_h) と局所的に同型の構造を持つ立方晶 I_c 相の氷を考えよう。この相では、酸素原子 (O) は図 I (a) のようにダイヤモンド格子を作って規則的に配列する。一方、水素原子 (H) は酸素原子と共有結合して局所的に H_2O に近い構造を作ると共に、水素結合を介して隣り合う酸素原子を結びつけ、結晶を安定化する役割も果たす。結果として、水素原子は各 O-O ボンド上に一つずつ存在し、またボンドの中央ではなく、共有結合の相手となる酸素原子側に片寄って位置する事になる。すなわち、結晶全体にわたって以下の二つの条件が満たされる。(1) 各 O-O ボンド上に必ず一つ水素原子が存在する。(2) 各酸素原子から伸びる 4本のボンドのうち、2 つのボンドの上では酸素原子から近い位置に、残りの 2 つのボンド上では遠い位置に水素原子が存在する (2-in 2-out)。(1)、(2) の規則を合わせてアイスルールと呼ぶ [図 1 (a)]。

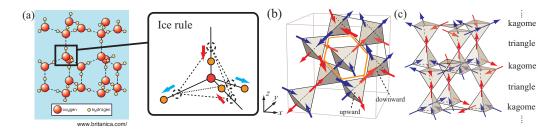


図 1 (a) I_c 相の氷結晶とアイスルールの図 [www.britanica.com/中の図をもとに作成]。水素原子の偏りをスピンと同一視すると、スピンアイスの 2-in 2-out 配置とみなせる。(b) パイロクロア格子上でアイスルールをみたすスピン配置の例。矢印の向きが各サイトのスピンの向きを表す。四面体は向きによって、上向き (upward) と下向き (downward) の二つの種類に分けられる。太線で表す六角形が (四面体に含まれない) 最短のループを表す。このスピン配置はループに沿ってスピンを反転させてもアイスルールを破らない。(c) パイロクロア格子を [111] 方向から見ると三角格子とカゴメ格子の積層構造とみなせる。

ここで、水素原子の偏りを示す矢印をスピンと置き換えてみよう。すなわち、隣り合う二つの酸素原子の中点に新しいサイトを定義し、そこにスピンを定義する。すると、酸素原子の位置するダイヤモンド格子の双対格子として、頂点共有する正四面体からなるパイロクロア格子が生じ、格子の基本ユニットである正四面体上では新しく定義されたスピンが 2-in 2-out の条件を満たして配置することがわかる [図 1 (b)]。このような、パイロクロア格子上で定義された、アイスルールを満たす氷の磁性体対応物をスピンアイスと呼ぶ [4,5]。

スピンアイスを記述する Hamiltonian は非常に単純なものである。パイロクロア格子の各頂点に、 $\sigma_j=\pm 1$ の 2 つの自由度を取るイジング変数 σ_j を定義し、異方軸ベクトル \mathbf{d}_j を用いて $\mathbf{S}_j=\sigma_j\mathbf{d}_j$ と表す。パイロクロア格子には向きの異なる 2 種類の正四面体が含まれる [図 1 (b)] が、例えば上向き (下向き) の正四面体に対し

^{*1} 氷に関する網羅的なレビューとして [1] を挙げる。

てスピンが外 (内) 向きを向く場合に $\sigma_i = +1$ と定める。このイジング変数に対し、

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle j,j' \rangle} \sigma_j \sigma_{j'} \quad (J > 0) \tag{1}$$

という最近接相互作用の反強磁性イジング模型を考えればアイスルールは実現し、基底状態では全ての正四面体で 2-in 2-out の条件が満たされる事になる。この単純な Hamiltonian が実現するために複雑な微視的機構は必要ない。あとで 2.5 節で紹介するように、スピンアイスの典型物質である $\mathrm{Dy_2Ti_2O_7}$ や $\mathrm{Ho_2Ti_2O_7}$ では、磁気モーメント間に働く双極子相互作用が隣接モーメント間に強磁性的な相互作用を及ぼし*2、このような反強磁性イジング模型を導くことが知られている [6]。むしろアイスルールはこのように、ごく単純な相互作用から生じる規則であるため、氷やスピンアイスだけでなく多様な系での実現が期待される。例えば電荷自由度についてのアイスルールも容易に想像できるだろう [7]。また、このような多様性の一方で、アイスルールを満たす事から生じる普遍的な現象がいくつも存在する。

2.2 スピンアイスの基底状態

2.2.1 マクロな縮退

基底状態の巨視的な縮退はスピンアイスの代名詞ともいうべき顕著な性質である。アイスルールは系全体のスピン配置を一意に決めるほど強い条件ではなく、基底状態においても、エネルギー的に等しい異なるスピン配置が巨視的な数存在する。「巨視的な」縮退とはどのような意味か?それは縮退数 Ω がスピンの数 N に対して $\Omega \propto e^{cN}$ (c は定数) とスケールして増加する規模の縮退の度合いを意味する。すなわち、基底状態の巨視的な縮退は絶対零度において、有限の残留エントロピー $S_{\rm res} = \frac{e_N}{N}\log\Omega$ が残ることを意味する。

例えば図 1 (b) の六員環に沿って6つのスピンを同時に反転させてもアイスルールは保たれる。このような 六員環は有限密度で存在できそうだから、スピンアイスが巨視的な縮退をもつことは直感的に理解できるだろう。しかし、その縮退数は具体的にどのくらいの数になるだろうか?残留エントロピーの見積もりについては、 Pauling による方法が標準的な手法として知られている [8]。簡単のために、2 次元のパイロクロア格子ともみ なせる、チェッカーボード格子 [図 2 (a)] を例にとって、この方法を説明しよう。パイロクロア格子の正四面体 は、チェッカーボード格子上では \times が入った正方形 (X 正方形と呼ぶ事にする) に対応する。

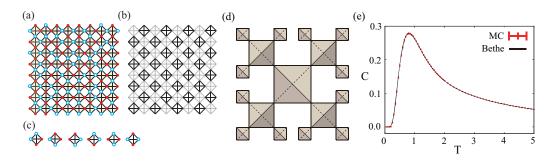


図 2 (a) チェッカーボード格子上のアイスルール配置の例。対角線にボンドが走る黄色の正方形が X 正方形。 (b) グループ A(太線) と B(細線) への X 正方形の分割。 (c) 一つの X 正方形における 6 通りのアイスルール配置。 (d) パイロクロア格子からループ構造を除いて得られる Husimi cactus 構造。 (e) Husimi cactus 上の最隣接スピンアイス [式 (1)] から得られる比熱 [式 (3)] の温度依存性 (Bethe) と古典モンテカルロ法 (MC) により得られた結果の比較。

このチェッカーボード格子の各頂点にイジング自由度として、図 2 (a) のように赤丸または青丸を配置し、全ての X 正方形が二つの赤丸と二つの青丸で占められるという条件を課す。これにより、チェッカーボード格子版のアイスルールを定義する。この時、アイスルールを満たす赤丸青丸の配置数は何通りあるだろうか?

 $^{^{*2}}$ スピンの異方軸がなす角度 θ は 90° より大きいので、強磁性的な相互作用はイジングスピン σ_j にとっては反強磁性相互作用となる。ちなみに θ は H_2O 分子の二つの O-H 結合のなす角にだいたい等しく 109.47° 、 $\cos\theta = -1/3$ をみたす。

Pauling の方法では、まず N 個の X 正方形を二つのグループ A, B に分けて、同じグループに属する X 正方形同士が共有サイトを持たないようにする $[図 \ 2 \ (b)]$ 。この上で、まずグループ A にのみ注目する。一つの X 正方形に対してアイスルールを満たす配置数は 6 通り $[図 \ 2 \ (c)]$ なので、グループ A の X 正方形のみがアイスルールを満たすように粒子を配置するやり方は、 $6^{N/2}$ 通りとなる。しかしながら、この値は、グループ B の制限を無視して得られたものである。

Pauling のアイデアは、一つの X 正方形に赤丸青丸を配置するやり方の総数は 16 通りで、そのうち 6 通りはアイスルールを満たすのだから、グループ B の X 正方形一つあたり 6/16 を掛けてやれば、大雑把には正しい補正を与えるだろう、という大胆なものである。この考えに基づく残留エントロピーの近似値はサイト当たり

$$S_{\rm P} = \frac{1}{2N} k_{\rm B} \log 6^{N/2} \left(\frac{6}{16}\right)^{N/2} = \frac{1}{2} k_{\rm B} \log \frac{3}{2} \simeq 0.203 k_{\rm B}$$
 (2)

となる。この評価は X 正方形間の相関を無視した乱暴なものであるが、実は意外なほど精度の良い近似となっている。チェッカーボード格子の厳密解 $(0.216k_{\rm B})$ [9] と比較すると 6% 程度のずれ、パイロクロア格子に対する数値計算の結果 $(0.205k_{\rm B})$ [10] とは 1% 程度のずれ、と精度の良い一致を見せる。実際、 ${\rm Dy_2Ti_2O_7}$ において、スピンアイスの残留エントロピーは実験的に観測されており、 $0.229k_{\rm B}$ [5] とまずまず、Pauling の見積もりと良い一致を見せている*3。

2.2.2 幾何学的フラストレーション系

チェッカーボード格子でのエントロピー計算の議論から分かるように、アイスルールに類似する規則が定義でき、マクロに縮退した基底状態を示す理論模型は様々な格子上で構築することができる。例えばパイロクロア格子を [111] 方向から見れば、三角格子とカゴメ格子の積層構造と見立てることができるが、カゴメ格子のアイスルール系についても残留エントロピーが評価され、実験との比較が行われている [11, 12]。前節のチェッカーボード格子は \times の入った正方形、カゴメ、三角の両格子は三角形を基本ユニットとする頂点共有の格子構造をもつ*4。これらの基本ユニットに共通する性質は完全グラフということである。すなわち、ユニット上のひとつの頂点は他の全ての頂点とボンドで結ばれる。このような完全グラフ構造をもつ基本ユニットを頂点共有させた格子を考えて、式 (1) にならって反強磁性的に相互作用する最隣接イジング模型を定義すると、スピンアイスの場合と同じく、有限の残留エントロピーをもつ縮退した基底状態が得られる。

2.3 熱力学的性質

さて、スピンアイスはこのように基底状態の巨視的な縮退という特異な性質をもつわけであるが、現実の物質系を考えた場合、基底状態の性質に到達するまでの有限温度の振る舞いにはどのような特徴が生じるかを知りたいと思うのは自然な疑問である。有限温度の熱力学的性質を知ることは、ある物質がスピンアイスに近い性質をもつかどうか実験的に識別するという実用的な目的のためにも重要である。最近接スピンアイス模型 (1) に基づいて考えると、古典的なスピン自由度からなる系なので、熱力学量を調べるためには大きなシステムサイズに対して標準的な平衡モンテカルロ法を用いればよい。低温で緩和時間が増大する困難に対してもループアルゴリズムによる処方が与えられており、熱力学量の温度・磁場依存性を数値的に求めることに大きな困難はない。

一方で、スピンアイスについては数値計算の結果を精度良く再現する近似理論が知られている。熱力学量を精度よく求めるにはパイロクロア格子を図 2 (d) のようにループを含まない樹状のネットワーク、Husimi cactus に置き換えて考察する。このネットワークは再帰的な構造を利用して解析解を求めることが可能で、例えば比熱は 1 スピンあたりの値として、

$$\frac{C}{N} = \frac{24J}{T^2} \frac{3e^{-6\beta J} + 4e^{-4\beta J} + e^{2\beta J}}{(e^{-6\beta J} + 4 + 3e^{2\beta J})^2}$$
(3)

と求まる。この結果は一種の Bethe 近似として解釈される。図 2 (e) に示す通り、古典モンテカルロ法の計算との一致は非常に良い。絶対零度に至るまで相転移は生じず、式 (3) から C/T を全温度領域で積分して得られ

 $^{^{*3}}$ 氷では $0.205k_{
m B}$ である。なお、構造相転移による潜熱の放出を考慮しなければならないなど、やや複雑な事情もある。 $[13,\,14]$

^{*4} 三角格子は辺共有とみなすのが一般的であるが、例えば上向きの三角形のみを基本ユニットとみなすと、3 つの三角形が頂点を共有した格子と見なすことができる。一般に辺共有の格子はユニット間のスピン配置に対する制限が強く、基底状態の縮退度は subextensive、つまりシステムサイズのべき乗に比例する程度となり有限の残留エントロピーを持たない。

る残留エントロピー $S=\frac{k_{\mathrm{B}}}{2}\log\frac{3}{2}$ は上述の Pauling 近似の結果を再現する。また、帯磁率は

$$\frac{\chi}{N} = \frac{2(g\mu_{\rm B})^2}{3T} \frac{1 + e^{2\beta J}}{e^{-6\beta J} + 2 + e^{2\beta J}} \tag{4}$$

と求まる。高温では Weiss 温度 $\theta_{\rm W}=2J$ をもつ強磁性的 Curie-Weiss 則が成り立つのに対し、帯磁率の傾向は $T\sim J$ の温度領域で変化し、低温極限では Curie 則: $\chi\propto\frac{1}{T}$ が成立する*5。低温での Curie 則の由来は全ての正四面体がほぼ 2-in 2-out をとり、温度以外のエネルギースケールが消失するためである*6。

2.4 準長距離磁気相関と pinch point

さて、スピンアイスの基底状態がもつ大規模な縮退は乱れた磁気状態、すなわち磁気相関は短距離であることを示唆する。しかしながら、このナイーブな期待に反して、磁気相関関数は準長距離秩序を示し、ベキ減衰することが知られている。スピンアイスの基底状態が無秩序なスピンの集合というより、無秩序の磁力線の集合、とみなすべきことからこの振る舞いが理解できる。磁力線描像を端的に表す特徴が磁気構造因子に生じる pinch point と呼ばれる特異点構造であり、中性子散乱実験を通じてスピンアイスの象徴ともいうべき美しい回折像が観測されている。

2.4.1 ガウス理論

静的な磁気相関関数 $S_{jj'} \equiv \langle \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j'} \rangle = \langle \sigma_j \sigma_{j'} \rangle \mathbf{d}_j \cdot \mathbf{d}_{j'}$ を求めるには、やはり最近接スピンアイスの Hamiltonian (1) に基づいて古典モンテカルロ法で計算を行えば良い。ここでは Large N 近似に基づいて磁気相関関数の構造を解説する。 Large N 近似はモンテカルロ法の結果を相対比にして 2% 以内の精度で定量的に再現する解析手法であることが知られている [16]。

Large N 近似ではまず、イジング変数 $\sigma_i=\pm 1$ を $[-\infty,\infty]$ の値を取るソフトスピン ϕ_j として再定義し、その長さの平均値が元のイジングスピンと同じ $\langle \phi_j^2 \rangle=1$ となることを要請する。この長さの制約条件はラグランジュ未定乗数 μ_i を導入することにより満たすことができる。

$$\mathcal{H}^{LN} = \frac{J}{2} \sum_{j,j'} \phi_j \phi_{j'} - \sum_j \mu_j (\phi_j^2 - 1)$$
 (5)

さらに長さの制約条件を空間的な平均値として置き換えて: $\sum_j \langle \phi_j^2 \rangle = N$ 、ラグランジュ未定乗数の空間依存性を無視することによって Hamiltonian は格子と同じ並進対称性をもつガウス型となる。この仮定のもと、式 (5) を Fourier 変換して対角化すると、

$$\phi_{i\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n} u_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}n} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{i,\alpha}}$$
(6)

として、

$$\mathcal{H}^{\text{LN}} = \sum_{\mathbf{k} > 0} \phi_{-\mathbf{k}\alpha} H_{\alpha\alpha'}^{\text{LN}}(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}\alpha'} = \sum_{\mathbf{k} > 0} \sum_{n} (\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu) \phi_{-\mathbf{k}n} \phi_{\mathbf{k}n}$$
(7)

となる。ここで $\sum_{\mathbf{k}>0}$ は波数についての和をブルリアンゾーンの半分に制限することを意味する。エネルギースペクトル $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ の特徴的な点は、最低エネルギーの二つのバンドが完全に flat になり縮退していることである [17]。flat band (f.b.) を構成する固有状態はパイロクロア格子の六員環に局在した状態として表現される。さて、この Hamiltonian のもと、運動量表示の磁気相関関数は

$$S_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) \equiv \frac{1}{N_{\rm c}} \sum_{i,i'} \langle \sigma_{i\alpha} \sigma_{i'\alpha'} \rangle \mathbf{d}_{\alpha} \cdot \mathbf{d}_{\alpha'} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_{i\alpha} - \mathbf{r}_{i'\alpha'})} = \sum_{n} \frac{u_{\mathbf{q}\alpha}^{(n)} u_{\mathbf{q}\alpha'}^{(n)}}{\varepsilon_{n}(\mathbf{q}) - \mu} \mathbf{d}_{\alpha} \cdot \mathbf{d}_{\alpha'} \xrightarrow[T \to 0]{} \sum_{n \in \text{f.b.}} u_{\mathbf{q}\alpha'}^{(n)} \mathbf{d}_{\alpha} \cdot \mathbf{d}_{\alpha'}$$
(8)

^{*5} また、 $\frac{\chi(T \to \infty)}{(g\mu_B)^2} = \frac{1}{3T}, \frac{\chi(T \to 0)}{(g\mu_B)^2} = \frac{2}{3T}$ と Curie 定数も温度変化とともに値を変える。この現象は Curie-crossover と呼ばれる [15]。

^{*6} 励起状態との間に有限のエネルギーギャップがあるのに $T\to 0$ で帯磁率が 0 にならないのは、全磁化を $\mathbf{M}=\sum_j \sigma_j \mathbf{d}_j$ と異方軸を考慮して定義しているからである。すなわち、基底状態は様々な磁化の値をもつ状態が混在している。

と表せる。特に絶対零度における磁気相関は flat band の固有関数 $u_{\mathbf{q}\alpha}^{(n)}$ を用いて書くことが可能であり、flat band を作る六員環ループを Fourier 変換したものが相関関数を与え、中性子回折などの実験で磁気構造因子として観測されることになる。特に主要部である $\sum_{n\in\mathrm{f.b.}}u_{\mathbf{q}\alpha}^{(n)}u_{\mathbf{q}\alpha'}^{(n)}$ の具体形を例えば [hhk] 面で書き下すと

$$S_{[hhk]}(\mathbf{q}) = \frac{32(\cos\frac{q_x}{4} - \cos\frac{q_z}{4})^2 \sin^2\frac{q_x}{4}}{5 - \cos q_x - 4\cos\frac{q_x}{2}\cos\frac{q_z}{2}}$$
(9)

となる [16]。

2.4.2 Pinch point

Large N 法によって得られる磁気相関関数 (8) を詳しく解析すると、スピンアイス状態の本質に関わる特異点についての情報を知ることができる。具体的な表式 (9) を見ると、波数 $\mathbf{q}_{\mathrm{p}}=(2\pi,2\pi,2\pi)$ は特異点であり、運動量空間で \mathbf{q}_{p} に近づく方向 $q_x=q_z$ v.s. $q_x=-q_z$ によってその極限値が異なることが分かる。すなわち、[111] 方向から近づく場合、flat な波数依存性を示すのに対し、[1 $\bar{1}1$] 方向に沿う場合は鋭いピークが得られる。この特異点は Pinch point と呼ばれ、 $\mathbf{Ho}_2\mathbf{Ti}_2\mathbf{O}_7$ では中性子回折により実際に観測されている [18]。

この特異点からのわずかなずれに注目して $\mathbf{q}=\mathbf{q}_{\mathrm{p}}+\mathbf{p}$ とおき、長波長極限 $|\mathbf{p}|\to 0$ に注目すると、

$$S_{\mu\nu}(\mathbf{q}) \propto \delta_{\mu\nu} - \frac{p_{\mu}p_{\nu}}{p^2} \tag{10}$$

の形に近似され、実空間の表式に直すことにより、磁気相関が指数関数ではなく、双極子型のベキ減衰を示すことが理解される。スピンアイスの大規模な縮退は強く乱れた磁気状態を示唆するように見えるが、実際は乱れと 秩序の中間的な状態である、準長距離相関を示すのである。

2.4.3 長波長の理論

Pinch point が反映しているスピンアイスの特性はどのようなものだろうか? 2-in 2-out のアイスルールに立ち戻って考えてみる。ここで、スピンを「磁場」になぞらえてみると、2-in 2-out の規則は四面体に入る flux と出る flux が等しいと言う意味で、divergence free の条件と考えることができる。この意味で、スピンアイスは乱れたスピンの集合と言うよりは乱れた磁力線の集合とも言うべきものである。この描像のもと、長波長の理論を作るために、点 \mathbf{r} を中心とする空間領域で粗視化を行ない、含まれるスピン \mathbf{S}_j の平均を $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ と表す。 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ は divergence free の条件: $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ をみたすとする。さらに、粗視化を行なう空間領域内でスピンの偏りが起こる状態の数は自然に少なく、その分布は

$$P(\{\mathbf{B}(\mathbf{r})\}) \propto e^{-\frac{K}{2} \int d\mathbf{r} |\mathbf{B}(\mathbf{r})|^2}$$
(11)

と、ガウス分布に従うとする。この二つの仮定のもとにスピン相関を計算すると、

$$\langle B_{-\mathbf{q}}^{\mu} B_{\mathbf{q}}^{\nu} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\mathbf{B}(\mathbf{q}) \delta(\mathbf{q} \cdot \mathbf{B}_{\mathbf{q}}) B_{-\mathbf{q}}^{\mu} B_{\mathbf{q}}^{\nu} P(\{\mathbf{B}(\mathbf{r})\}) \propto \frac{2}{K} \left(\delta_{\mu\nu} - \frac{q_{\mu}q_{\nu}}{q^2} \right)$$
(12)

と、Large N 法によって得られる長波長極限の式 (10) と一致する結果を得る。すなわち、双極子型の相関、それを特徴付ける pinch point 特異点の起源はアイスルールに込められた divergence free 条件であり、pinch point の観測はアイスルールそのものを見ていると解釈される *7 。

2.4.4 分数励起

さて、このように「乱れた磁力線の集合」として記述される特異な基底状態構造をもつスピンアイスの励起状態はどのような特性を示すだろうか?ここでは、アイスルール系特有の励起の分数化 [19, 20] という現象について紹介したい。

アイスルールを満たすスピンアイスの基底状態から最も簡単に励起状態を作るには、スピンをひとつ反転させればよい。この状態は図3(b)のように二つの隣接する正四面体でアイスルールを破る励起状態となっている。

^{*7} Large N 法では flat band を構成するループ状の固有ベクトルの形が磁力線の構造を反映していたことになる。

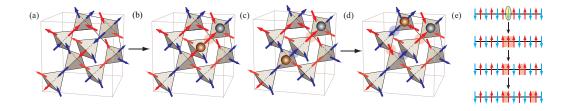


図 3 (a) スピンアイスの基底状態のひとつ。全ての正四面体が 2-in 2-out の条件を満たす。(b) (a) の状態から スピンをひとつ反転し、正のモノポール (1-in 3-out) と負のモノポール (3-in 1-out) の対を生成した図。(c) (b) の状態から、正のモノポールを含む正四面体の out スピンをひとつ反転する。正のモノポールが動く。(d) (c) の 状態から連続的にスピン反転を行ない、モノポール対を引き離したときの配置。(e) 一次元反強磁性体においてスピン反転による局所励起が二つのスピノン励起に分裂する模式図。

次に、この状態から隣接するスピンを反転して行くプロセスを考える。すると図 3(c) のように、スピンの反転はアイスルールを破った正四面体の数を二つに保ったまま、正四面体の場所を移し、スピン反転を続けることによって、正四面体は引き離されて行く事になる [図 3(d)]。つまり、スピンという、系の基本的な量子数の変化が 2 つに分裂し、その各々があたかも独立した粒子のように振る舞うわけである。

類似の現象は 1 次元系のドメインウォール励起に見る事が出来る。図 3 (e) のように、一次元反強磁性鎖を考え、一つのスピンを反転させる。すると、反転させたスピンの両側で強磁性的な配列が生じてエネルギーを損するわけだが、二カ所分の強磁性配列のエネルギーの損を保ったまま、強磁性スピン対 (スピノン励起)を引き離して行く事が出来る。アイスルール系はスピノン励起に類似した分数化を示す高次元の系として興味深い例を提示している。

このスピンアイスの分数励起は、(磁気) モノポールと呼ばれる [19]。2.4.3 節で考えたように、アイスルール条件は粗視化したベクトル場 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ の満たす divergence free 条件とみなせ、 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ を "磁場"と見立てる事が出来た。従って、2-in 2-out の拘束を破る励起が存在する領域では $\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) \neq 0$ となり、 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ を "磁場"に見立てる類比においては、有限の磁荷、すなわちモノポールが存在するというわけである。

2.5 スピンアイスの物質的基礎

さて、ここで理論模型の話から離れて、現実の物質系について見てみよう。スピンアイスを実現する代表的な物質として $\mathrm{Dy_2Ti_2O_7}$ 及び $\mathrm{Ho_2Ti_2O_7}$ が知られている。特に $\mathrm{Dy_2Ti_2O_7}$ においては、Pauling 値に近い残留 エントロピーの値が比熱測定から実際に得られ、 $\mathrm{Ho_2Ti_2O_7}$ では前節で示したように pinch point を含む中性 子回折像が観測され、スピンアイス状態の強い証拠を与えている。これらの物質では、磁性を担う希土類イオン ($\mathrm{Dy^{3+}}$, $\mathrm{Ho^{3+}}$) がパイロクロア格子上に位置し、スピンアイスを作る自由度となる。単一イオンの状態は $\mathrm{Dy^{3+}}$ は $\mathrm{4f^{9}}$ 、 $\mathrm{Ho^{3+}}$ は $\mathrm{4f^{10}}$ 配置を取り、フント則に従って、 $\mathrm{Dy^{3+}}$ は $\mathrm{J}=15/2$ ($\mathrm{S}=5/2$, $\mathrm{L}=5$)、 $\mathrm{Ho^{3+}}$ は $\mathrm{J}=8$ ($\mathrm{S}=2$, $\mathrm{L}=6$) という大きな角運動量をもち、結晶場分裂により二重項の基底配置を取る。角運動量の大きさから見積もられる単一イオンの磁気モーメントは $\mathrm{\mu}\sim10\mathrm{\mu_{B}}$ という大きなものとなる。この大きなモーメントのため、原子間の磁気的な相互作用は電子の運動を介した反強磁性交換相互作用 ($\mathrm{J_{ex}}$) に加えて、磁気モーメント間の直接的な双極子相互作用 (D) が無視できない寄与をもち、以下の形をとる。

$$\mathcal{H}_{\text{dip}} = -J_{\text{ex}} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + Dr_{nn}^3 \sum_{i>j} \frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5}$$
(13)

ここで、磁気モーメントは $\mathbf{S}_i = \sigma_j \mathbf{d}_j$ である。この双極子スピンアイスの Hamiltonian (13) を用いた古典 モンテカルロシミュレーションと実験で得られる比熱を比較することにより、最近接の σ_j に働く相互作用定数 を見積もる事ができ、最隣接スピンアイス模型 (1) の J にあたる定数は正 (σ_j について反強磁性的) で、それぞれ、 $J\sim 1.8\mathrm{K}$ ($\mathrm{Ho_2Ti_2O_7}$), $1.1\mathrm{K}$ ($\mathrm{Dy_2Ti_2O_7}$) と値が得られている。しかしながら、ここで問題になるのは、双極子相互作用の遠距離成分である。最隣接スピンアイス模型の範囲で基底状態に残る大規模な縮退は、一見、余剰の相互作用があれば簡単に解けてしまうように思える

ところが実はこの双極子相互作用の形が絶妙であり、スピンアイスの縮退が特別に保護されるという奇跡的な

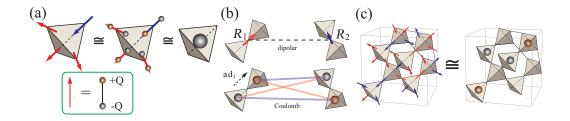


図 4 (a) 磁気モーメントを距離 a 離れた正負の磁荷の対に置き換える。この置き換えにより、例えば 3-out 1-in 配置の正四面体の場合、正四面体の中心に磁荷 -2Q が集まる。(b) 位置 \mathbf{R}_1 と \mathbf{R}_2 にいる 2 スピン間の双極子相 互作用は $\mathbf{R}_1 \pm \frac{a}{2}\mathbf{d}_1$ にいる磁荷対と $\mathbf{R}_2 \pm \frac{a}{2}\mathbf{d}_2$ にいる磁荷対の間のクーロン相互作用と近似することができる。(c) ダンベル近似の範囲で、双極子スピンアイスはクーロン相互作用する磁荷の集団とみなすことができる。

事情がある。この仕組みを理解するために、スピンが磁気双極子であること、そして、磁気双極子とは反対符号の「磁荷」をもつ二つの磁気単極子*8をわずかな距離だけ引き離したものとして表せることを思い出そう。この見方に立ち、 \mathbf{S}_j を磁気双極子と見立て、 $\mathbf{S}_j = Q_j a \mathbf{d}_j$ (a は隣り合う正四面体の中心間の距離) により、磁荷 $Q_j = \sigma_j/a$ を定義する [図 4 (a)]。

この表示を用いると、多極子展開の初項のみを残す近似

$$a\mathbf{d}_1 \cdot \nabla_1 \frac{1}{r_{12}} \sim \frac{1}{|(\mathbf{R}_1 + a\frac{\mathbf{d}_1}{2}) - \mathbf{R}_2|} - \frac{1}{|(\mathbf{R}_1 - a\frac{\mathbf{d}_1}{2}) - \mathbf{R}_2|}$$
 (14)

の範囲で、双極子相互作用の表式は

$$\frac{\mathbf{S}_{1} \cdot \mathbf{S}_{2}}{r_{12}^{3}} - \frac{3(\mathbf{S}_{1} \cdot \mathbf{r}_{12})(\mathbf{S}_{2} \cdot \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^{5}} = (\mathbf{S}_{1} \cdot \nabla_{1})(\mathbf{S}_{2} \cdot \nabla_{2}) \frac{1}{r_{12}} \sim \sum_{\xi_{1}, \xi_{2} = \pm 1} \frac{(\xi_{1}Q_{1})(\xi_{2}Q_{2})}{|(\mathbf{R}_{1} + \xi_{1} \frac{a}{2}\mathbf{d}_{1}) - (\mathbf{R}_{2} + \xi_{2} \frac{a}{2}\mathbf{d}_{2})|}$$
(15)

と表せる [図 4 (b)]。すなわち、位置 \mathbf{R}_1 と \mathbf{R}_2 のスピン間に働く相互作用は各々のスピンを共有する正四面体対上の正負の磁荷の間のクーロン相互作用と置き換えることができるわけである。双極子相互作用 (13) を通じて相互作用するスピン集団は、次の Hamiltonian (16) で表される、クーロン相互作用するダイヤモンド格子上の単極子集団とみなすことができる [図 4 (c)]。

$$\mathcal{H}_{\text{dumb}} = \frac{J}{2} \sum_{p} Q_p^2 + K \sum_{p,q} \frac{Q_p Q_q}{r_{pq}}$$

$$\tag{16}$$

この模型の基底状態は、第一項の隣接サイト間相互作用から来る静磁エネルギーが大きい限り、双極子相互作用の遠距離部分から来る第二項の相互作は無視できて、至る所 $Q_p=0$ のスピンアイス状態となる。もっとも、式 (15) の多極子展開の次項が効く温度スケールでは式 (16) の表現が成立せず、解かれたスピンアイスの縮退は磁気秩序を引き起こす。磁気秩序との関連は定かでないが、比熱測定による残留エントロピーの解放が観測されている [21]。

2.6 モノポール間の相互作用

2.6.1 長距離相互作用

さて、前節でモノポール間に有効的に相互作用が働くこと、そしてそれはスピンアイスの基底状態の縮退を解く方向には作用しにくいことを述べた。一方で、モノポールが外部磁場や温度によって誘起されるような状況ではこの相互作用は大きな意味を持つ。モノポールの存在とモノポール間のクーロン相互作用を証明する実験事実が磁場中のスピンアイスにおいて得られている。スピンアイスに [111] 方向の磁場を掛けると、高磁場では全ての正四面体が 3-in 1-out or 1-in 3-out となり、モノポールを担う事になる。すなわち、磁場はモノポール密度を調節するパラメータとして働く。一方で、長距離の引力クーロン相互作用で引き合う荷電粒子は密度を変化

^{*8} すなわち磁気モノポール。

させることにより気液相転移を起こす。実際に磁場を変化させたときに一次相転移を起こして磁化がとびを示すことが観測されており [22]、これはモノポールの気液相転移として自然に解釈され [19]、モノポールの存在とモノポール間の長距離相互作用を同時に示す実験事実となっている *9 。

2.6.2 エントロピーカ

モノポール間にはまた、双極子相互作用のような「力学的な」相互作用の他に、熱的な相互作用が働く。仮に二つのモノポールを、距離 R だけ離して配置するとしよう。この時、モノポールを囲む周りのスピンがアイスルールを満たす配置数 W は R の関数として、どのように変化するだろうか?格子上で配置数をカウントするのは難しいが、2.4.3 節の場の理論による考察が直感的な描像を与えてくれる。位置 \mathbf{R}_1 と \mathbf{R}_2 にそれぞれ磁荷 Q_1 と Q_2 が存在するとして、式 (12) の代わりに、

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) = Q_1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) + Q_2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)$$
(17)

と、湧き出しをもつ場を仮定し、

$$W \propto \int \mathcal{D}\mathbf{B}(\mathbf{r})\delta(\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) - (Q_1\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) + Q_2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)))P(\mathbf{B}(\mathbf{r})) = e^{-\beta V(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)}$$
(18)

として、このエントロピー力による有効ポテンシャル $V(\mathbf{R})$ を定義すると、 $V(\mathbf{R})$ の形は系の次元 D に本質的に依存し、

$$V(\mathbf{R}) = \begin{cases} -TQ_1Q_2\log|\mathbf{R}| & D=2\\ T\frac{Q_1Q_2}{|\mathbf{R}|} & D=3 \end{cases}$$
 (19)

のように表される。すなわち 3 次元の場合は双極子相互作用に由来するクーロン型 $(\propto \frac{1}{r})$ の有効相互作用が温度 T に比例する係数をもって加わる。一方で、checkerboard 格子のような 2 次元のスピンアイス系ではエントロピー力の寄与は大きく、いわゆる対数的な弱い閉じ込めが生じる事になる。直感的に理解しにくいことではあるが、2 次元の系でモノポールを引き離していくと、周りのスピンが徐々にアイスルールを満たすことができなくなっていくのである。ここで磁気秩序状態ではスピノンのような分数励起は閉じ込められることを思い出してほしい。モノポールの閉じ込めは磁気秩序への傾向を示唆し、2 次元のスピンアイスが不安定であることを意味する。実際、後で議論するように 2 次元系においてはスピンアイスに量子性を印加して生じる量子スピン液体状態は相として不安定であることが予想されている。

^{*9} モノポール間の短距離力についても興味深い事実が多く見つかっている。例えば同符号の磁荷に引力が働くような状況を自然に作り出すことができる [23, 24]。

3 量子スピンアイス

スピンアイスに量子効果が加わったら何が起こるだろうか?本章では前節で紹介した古典スピンアイスの理解に基づいて、量子効果の導入によって現れる量子スピンアイスの振る舞いについて解説する。

3.1 シュレディンガーの氷

膨大に縮退したスピンアイスの基底状態に量子性を加えると何が起こるだろうか?量子力学の根本はシュレディンガーの猫に象徴される重ね合わせの原理である。 $|生きた猫\rangle$ と $|死んだ猫\rangle$ という 2 状態の重ね合わせの代わりに、マクロな個数の状態が本質的に重ね合わさった状態が実現するとなるとどうだろう?量子スピンアイスとはまさにそのような事例を表す。マクロに縮退したスピンアイスの基底状態が重ね合わせを起こした「シュレディンガーの氷」とも言うべき状態が量子スピンアイスの直感的な姿である [図 5 (a)]。

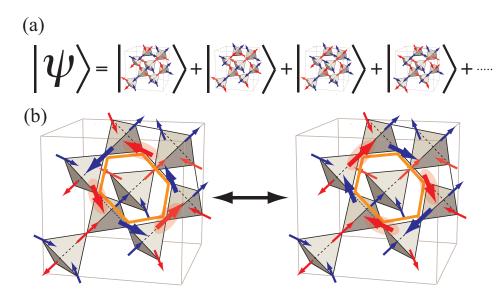


図 5 (a)「シュレディンガーの氷」としての量子スピンアイスの概念図。(b)六角形に沿ってスピンを反転する量子効果の最低次のプロセス。赤い矢印を図のように dimer に置き換えると、スピンアイス配置は各正四面体から dimer が 2 本突き出た dimer 配置に map される。

3.2 量子スピンアイスの物質論

スピンアイスの縮退を解く量子効果としてどのような相互作用を考えるのが自然だろうか?ここでは量子スピンアイスの候補物質の基礎物性に注目して、自然に現れる相互作用の形を調べることにする。量子スピンアイスの候補物質として現在さかんに研究が進められているのは希土類元素からなるパイロクロア酸化物であり、(1) Yb 系: Yb₂Ti₂O₇ など、(2) Pr 系: Pr₂T₂O₇ (T=Zr, Hf, Sn, Ir) など、(3) Ce 系: Ce₂Sn₂O₇ など、が挙げられる*10

3.2.1 1原子問題

まず、単一イオンのエネルギー準位構造について詳しく見てみよう。希土類元素では最外殻の 4f 軌道の電子が全角運動量 J の多重項を構成しており、そのエネルギー準位は 2J+1 重に縮退する。縮退は回転対称性を破

 $^{^{*10}}$ 他にも ${
m Tb_2Ti_2O_7}$ についても多くの研究があるが、結晶場励起が無視できず、スピンアイスに含まれない自由度が大きな寄与をすると考えられている。

る結晶場によって解かれる。希土類元素を囲む酸素原子および遷移金属元素は正四面体の中心を結ぶ 3 回対称軸とその軸に垂直な平面中の 3 本の 2 回対称軸を持ち、 D_{3d} の点群対称性を持つ結晶場中に存在することになる。結晶場分裂の結果、上記の (1)-(3) の系では 2 重項が基底状態を作るが、対称操作に対する変換性はそれぞれ異なる。(1) の Yb 系はスピン 1/2 と同じ変換性を持つクラマース 2 重項である。(2) の Pr 系は非クラマース 2 重項をなし、例えば格子変位などによりその縮退は解かれるため、乱れの影響を受けやすいと考えられている。(3) は "dipolar-octupolar doublet"と呼ばれ、2 重項を作る擬スピンの容易軸成分 s^z は磁気双極子として振る舞う一方、横成分 s^\pm は磁気八極子として振る舞う、複雑な変換性を示すことで知られている。対称操作についての変換性の完全な表が、例えば文献 [25] に与えられている。

3.2.2 2 原子問題

さて、スピン間の相互作用はどのような形を取るだろうか?隣り合う四面体の中心を結ぶ方向を z 軸とする局所座標を選ぶと、独立な相互作用定数を $(J_{zz},J_\pm,J_{z\pm},J_{z\pm})$ と表して、次の量子スピンアイス系を記述する標準形の Hamiltonian を得ることができる [26]。

$$\mathcal{H}_{QSI} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_z S_i^z S_j^z - J_{\pm} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

$$+ J_{\pm\pm} (\gamma_{ij} S_i^+ S_j^+ + \text{H.c.}) + J_{z\pm} [S_i^z (\zeta_{ij} S_j^+ + \zeta_{ij}^* S_j^-) + (i \leftrightarrow j)]$$
(20)

ここで γ_{ij} , ζ_{ij} は 4×4 のユニモジュラー行列の成分を表す *11 。この形の Hamiltonian は前節で挙げた (1)-(3) の全てのタイプの希土類化合物系について成り立つ。また特に (2) の非クラマース系では $J_{z\pm}=0$ となり、Hamiltonian は単純な形となる。これは時間反転操作に対して $s^z\to -s^z$ 、 $s^\pm\to s^\pm$ であるため、 $s_i^z s_j^\pm$ のような項は符号を変えるためである。

3.3 量子スピンアイスの有効 Hamiltonian

スピンアイスに対する量子効果を調べるために、Hamiltonian (20) のうち、最も簡単な J_\pm のみを有限としたパイロクロア格子上の量子 XXZ 模型の Hamiltonian を考える。 *12

$$\mathcal{H} = J_z \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^z s_j^z + J_{\pm} \sum_{\langle i,j \rangle} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y)$$
(21)

$$\mathcal{H} = \frac{3J_{\pm}^3}{2J_z^2} \sum_{\text{hex}} (s_1^+ s_2^- s_3^+ s_4^- s_5^+ s_6^- + \text{H.c.})$$
 (22)

ここで、和はパイロクロア格子の六角形全てについて取る。有効理論の構造を見通しよく解釈するためによく採用されるのが、dimer 表現である。図 5 (b) に示すように赤い矢印を dimer に置き換える。すると、スピンアイス状態は各正四面体から 2 つの dimer が突き出ている dimer 配置に 1 対 1 に map される。この表現において、式 (22) の Hamiltonian は図のように bond が互い違いに覆われた "flippable" な六角形の dimer パターンをひっくり返す運動項と解釈することが出来る。flippable 配置に対する「ポテンシャル項」を加えたHamiltonian

 $^{^{*11}}$ γ_{ij},ζ_{ij} の典型的な表現については例えば、文献 [27] を参照。

^{*} 12 より現実に即して考えるならば、例えば $\Pr_2\operatorname{Zr}_2\operatorname{O}_7$ などの非クラマース系について、モノポール対を誘起する「高エネルギープロセス」である $J_{\pm\pm}$ の項を無視したと考えると、このような Hamiltonian を得ることができる。

 $^{*^{13}}$ ここでは $s_i^z = \pm 1/2$ であることに注意。

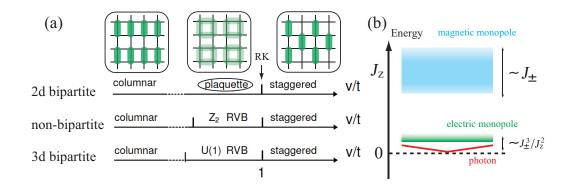


図 6 (a) 量子 dimer 模型の基底状態相図。上から順に 2 次元 bipartite 格子、(2,3) 次元両方の)non-bipartite 格子、(3,3) 次元 bipartite 格子上で定義された量子 dimer 模型の基底状態を v/t の関数として模式的に表示している。特に 2 次元 bipartite 格子の 3 つの相: columnar, plaquette, staggered 相のそれぞれに対応する実空間 dimer パターンを示す。(2,3) 次元両方の)bipartite 格子および 3 次元 bipartite 格子の場合には RK point を端点として量子スピン液体相 (Z_2 RVB, U(1)RVB) が相空間で有限の領域で安定化する。(b) 量子スピンアイスの素励起のエネルギースケールの概念図。 J_z 程度の高エネルギーの領域に位置するのが量子性を獲得した磁気モノポールで、 J_\pm のオーダーのバンド幅をもつ。 J_\pm^3/J_z^2 程度の低エネルギー領域にはギャップを持つ電気モノポールとギャップレスのフォトン励起が存在する。

$$H_{eff} = -t \sum_{O} (|O\rangle\langle O| + H.c.) + v \sum_{O} (|O\rangle\langle O| + |O\rangle\langle O|)$$

は量子 dimer 模型と呼ばれ、量子スピンアイスの低エネルギー有効模型を与える。次節でこの模型について理解されていることを紹介しよう。

3.4 量子 dimer 模型の基底状態相図

量子 dimer 模型の顕著な性質は可解点の存在である。この模型の t=v は Rokhsar-Kivelson(RK) point と 呼ばれ、基底状態の波動関数は全ての dimer covering (d.c.) の等しい重みでの重ね合わせとして厳密に与えられる事が知られている [28]。

$$|\psi_{\rm RK}\rangle = \sum |{\rm dimer\ config.}\rangle$$
 (23)

 $|\psi_{\rm RK}\rangle$ は dimer 配置の同符号での重ね合わせであるため、例えば dimer 表示で対角的な物理量は対応する古典 dimer 模型の高温極限の期待値として計算する事ができる。従って、RK point 直上では基底状態は長距離秩序 をもたず、量子スピン液体状態が実現していることが分かる。dimer 配置とスピンアイスは 1 対 1 対応である から、 $|\psi_{\rm RK}\rangle$ は等しい重みで重ね合わされたシュレディンガーの氷 [図 5 (a)] に他ならない。

しかしながら、もともとの量子 XXZ 模型やそこから導かれる有効 Hamiltonian (22) の基底状態が $|\Psi_{\rm RK}\rangle$ から連続的につながる量子スピン液体相に属しているかは非自明な問題である。この問いに答えるために、 $v=t+\delta v$ とわずかに RK point からずらした点の様子を考察する。

- **■** $\delta v > 0$ **の場合** このときはポテンシャル項をなるべく小さくする、すなわち flip できる plaquette の数を最小化する必要がある。このような考察から、ただちに図 6 (a) の右端のような固体相 "staggered phase"が安定化する。この状態は運動エネルギーがゼロを返すため、厳密な基底状態である。
- $\delta v < 0$ の場合 この場合は、運動エネルギーを最小化する必要がある。その結果は、系の次元に大きく依存する。2 次元では無限小の δv で系は秩序化し、3 次元では有限の δv までスピン液体状態を保つ。3 次元では物理的な模型に対応する v=0 の点もスピン液体相に含まれていると考えられている [29] [図 6 (a)]。

2次元と3次元でのスピン液体相の安定性の違いは、2.6.2 節に挙げた、古典スピンアイスにおけるモノポール間のエントロピー力の振る舞いの違い (19) に示唆される。3 次元ではモノポールは漸近的に自由であり、好きなだけ遠くに引き離すことができた。一方で、2 次元ではエントロピー力による弱い閉じ込めが生じる。すなわち、モノポール対を引き離すほど周りのスピンアイスが苦しくなり、アイスルールを満たすことができなくなってくる。「閉じ込め」の傾向は磁気秩序状態で顕著に現れていたことを思い出すと、2 次元系におけるモノポールの閉じ込めは、RK point におけるスピン液体状態が秩序相に近いことを示唆しているわけである。実際に、2 次元の bipartite な格子上の量子 dimer 模型のスピン液体状態は臨界的であり、相図上 RK point のただ一点だけでスピン液体状態が実現していると考えられている。スピン液体状態の臨界性は 3.5.2 節で紹介する励起状態の変分解析を応用することにより、2 次元では秩序化に伴うソフトモードが存在することから、はっきりと示される。また、2 次元系といっても三角格子のような non-bipartite な格子上の量子 dimer 模型では事情が異なる。この場合は相図上の有限の領域でスピン液体相が安定化すると予想されている [30]。本命の 3 次元 bipartite 格子で量子スピンアイス状態が安定であることは例えば出発点の Hamiltonian であった量子 XXZ 模型 (21) に対する数値計算の結果からも確認されている [31, 32]。

3.5 量子スピンアイスの素励起

さて、前節で、量子スピン液体相が厳密な基底状態として実現すること、そして一般性の高い理論模型において、有限のパラメータ領域で相として安定して存在するらしいことを紹介した。量子スピン液体相の素励起はどのような性質を持つだろうか?前章において、古典スピンアイスの素励起である磁気モノポールはすでに分数化という非自明な現象を示すことを紹介した。量子性を加えることにより磁気モノポールは固有のダイナミクスを獲得するが、その性質は如何なるものだろうか?また、量子スピンアイスにおいては、量子項によりスピンアイスの縮退が解けたあとは、当然、もともと縮退基底状態のメンバーであったほとんどのスピンアイス状態は励起状態に格上げされる。これらの励起状態はスピンアイスの縮退を解く $\frac{J^3}{J_c^2}$ のオーダーの低励起をなす。実はこの低励起のセクターには、大別してギャップレスの励起であるフォトンとギャップをもつ電気モノポールの2種類が含まれる [図 6 (b)]。本節ではまだ未知の部分も多いこれらの3種の励起—量子性を獲得した磁気モノポール、フォトン、電気モノポールーが独立した粒子として、量子力学的にどのように記述されるかを概観する。

3.5.1 量子磁気モノポール

2.4.4 節で詳しく述べたように、古典スピンアイスの素励起は磁気モノポールである。量子 XXZ 模型 (21) を考えると、古典極限 $(J_{\pm}=0)$ ではモノポールはダイナミクスをもたず、正負のモノポール一対を含む古典スピンアイス配置は等しいエネルギー J_z をもって、やはりマクロに縮退している。ここに有限の量子効果を導入したときの変化を J_{\pm} に関する縮退摂動論で調べてみる [33]。

まず、最初に気付くことは、基底状態に対する量子効果が 3 次摂動: $\frac{J_{\frac{1}{2}}^2}{J_{\frac{1}{2}}^2}$ のオーダーで初めて現れたのに対し、モノポールに対する量子効果は J_\pm の 1 次ですでに現れるということである。例えば、図 7 (a) にモノポールを含むスピン配置を示すが、サイト (j,j') のスピン対を反転させることにより、モノポールは隣の正四面体に飛び移る。すなわち、1 次摂動のプロセスが異なるモノポール配置をつなぐわけである。摂動の低次でダイナミクスが生じるということは、基底状態のコヒーレンスが不完全である高温領域でもモノポールの量子効果が現れることを意味し、スピンアイスに対する量子効果は励起状態を通じる方が観測しやすいという事が示唆される。

しかしながら、モノポールの量子ダイナミクスを記述することはそれ程単純ではない。摂動の最低次の範囲では、モノポールは背景のスピン配置の 2-in 2-out 条件を壊さないように動かなければならないため、局所的なスピン配置に応じて運動の方向が限られる。これは一見、不規則ポテンシャル中の粒子の運動に類似した困難な問題に見えるが、実は量子項により引き起こされる、全系のスピン状態の変化の経路を調べることにより、モノポールの運動特性を詳細に理解することができる。

例えば、図 7 (b) のような 3-out 1-in のモノポールを含むスピン配置を考える。スピン反転に伴ってモノポールの数が増えるとエネルギー的に損なので、モノポールを含む正四面体で反転できるスピンは "out"配置をとる 3 スピンである。従って矢印に沿った経路でモノポールを動かし、3 ステップで元の正四面体にモノポールを戻すことができる。この時、注意すべきことは、経路上のスピンは 2 度ずつ反転するので、モノポールの位置のみならず、系の全スピンが元の状態に戻ることである。

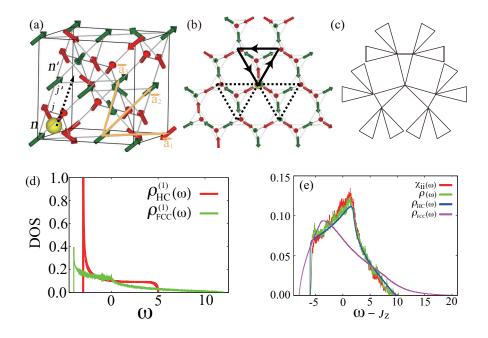


図7 (a) パイロクロア格子上のスピンアイス配置と磁気モノポール。磁気モノポールはサイト (j,j') のスピンを対反転させて次近接の正四面体に飛び移る。すなわち、磁気モノポールは上向き or 下向き正四面体の作る面心立方格子 (FCC 格子) の上を運動する。 (b) モノポールの実空間の運動を追うと、state graph を構成する三角形のユニットが見えてくる。 (c) state graph の局所的に Husimi cactus に類似した構造の図。 (d) state graph を Husimi cactus 近似した場合の 1 モノポール状態密度。スペクトル端に $|\varepsilon-\varepsilon_{\min}|^{-1/2}$ に比例する急激な発散が見える。FCC 格子上の tight-binding 模型の状態密度を比較のため載せる。 (e) 1 モノポール状態密度の畳み込みから得られる 2 モノポール状態密度。厳密対角化の結果と精度よく一致し、実験的に観測可能な局所動的磁気構造因子を正確に記述する。 [文献 [33] より American Physical Society の許可を受けて転載]

同じような 3 ステップの経路を "out"配置をとる他の 2 スピンについても考えることが出来るので、量子項によって移り合うスピン状態を線で結んでグラフ表示すると、図 7 (c) のようなネットワークで表現できることが期待される。このネットワークはモノポールの一体の動きを表すのではなく、ネットワークの頂点は全スピン状態の動きを記述する。その意味で "state graph"と呼ぶべきものである。考えている graph のループ長は長いので、graph 自体をループ構造を含まない、三角形を単位とする tree 状の Husimi cactus とみなす近似が妥当である。モノポールのダイナミクスを背景のスピン構造の変化込みでこの Husimi cactus の上の hopping 問題として記述すると、標準的な Green 関数の解析からその一粒子スペクトルを求める事が出来る。これから導かれるモノポールの一粒子状態密度は

$$\rho_{\rm HC}^{(1)}(\varepsilon) = \frac{3}{2\pi} \frac{1}{6 - \varepsilon} \sqrt{\frac{5 - \varepsilon}{3 + \varepsilon}} \tag{24}$$

のように求めることができ、その形は図 7(d) に表すように、低エネルギー端に鋭い発散をもつ連続スペクトル構造となる。

一対のモノポールを含む系の二粒子状態密度は一粒子状態密度の畳み込み

$$\rho_{\rm HC}(\omega) \equiv \int d\varepsilon \rho_{\rm HC}^{(1)}(\omega - \varepsilon) \rho_{\rm HC}^{(1)}(\varepsilon)$$
 (25)

で近似される *14 。このように state graph から得られた状態密度を、32 サイトからなる有限のパイロクロア格子に対する厳密対角化から得られたものと比較した図が Fig. 7 (e) である。全エネルギー領域に渡り、両者が

 $^{^{*14}}$ このように畳み込みで状態密度を評価できるのは正負のモノポールが異種粒子であり、同種粒子性から来る交換項の寄与がないことがひとつの理由かも知れない。

定量的に一致していることが見て取れる。二粒子状態密度は観測量である局所磁気感受率 $\chi_{ii}(\omega)$ とも定量的に一致する。 $\chi_{ii}(\omega)$ は例えば、非弾性中性子散乱によって得られる磁気構造因子 $\mathcal{S}_{\mathbf{q}}(\omega)$ を波数積分したものから揺動散逸定理によって得ることができる。

3.5.2 フォトン

量子モノポールは縮退したスピンアイス配置の外に出た励起である。一方で量子項によりスピンアイスの縮退が解けたあとは、スピンアイスの縮退を解く $\frac{J_2^2}{J_2^2}$ のオーダーの低励起が生じる。このような励起状態は基底状態と直交するような位相をもつ重みで古典スピンアイス状態を重ね合わせた状態として表現される。

低励起の正体を調べるために、もう一度量子 dimer 模型に立ち返って考える。低励起を理解する出発点としては変分法が便利である。基底状態の波動関数 (23) に位相変調を加えて励起状態を作るには、例えば

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_{i} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{i}} \sum_{\alpha} u_{\alpha}(\mathbf{q})\sigma_{i\alpha}^{z}|\psi_{\mathrm{RK}}\rangle$$
 (26)

のように密度波を模した位相をもつ試行関数が考えられる。ここで、 α は副格子の index、 $u_{\alpha}(\mathbf{q})$ は対応する重みを表す。このような試行関数から得られる励起ギャップは静的磁気構造因子 $\mathcal{S}(\mathbf{q})$ と振動子強度 $f(\mathbf{q})$ を用いて

$$\Delta_{\mathbf{q}} \equiv \frac{\langle \psi_{\mathbf{q}} | H - E_0 | \psi_{\mathbf{q}} \rangle}{\langle \psi_{\mathbf{q}} | \psi_{\mathbf{q}} \rangle} = \frac{f(\mathbf{q})}{\mathcal{S}(\mathbf{q})}$$
(27)

のように上から評価される。すなわち、 $\Delta_{\bf q}$ は波数 ${\bf q}$ の真の励起ギャップよりも大きいことが保証され、仮に $\Delta_{\bf q}=0$ となれば、波数 ${\bf q}$ の励起はギャップレスとなることが厳密に示される。この励起ギャップの変分理論は 例えば、Feynman によって ${}^4{\rm He}$ の素励起の分散を求めるために使われたもの [34] であるが、実際、現在考え ている基底状態波動関数 $|\psi_{\rm RK}\rangle$ はスピンアイス配置の同符号の重ね合わせ-節のない波動関数-という点で ${}^4{\rm He}$ の超流動基底状態と似た構造を持つ。さて、励起ギャップの振る舞いであるが、分母の ${\cal S}({\bf q})$ は例えば精度の良い Large N 法で求めた式 (9) を使うことが考えられる。分子に現れる振動子強度 $f({\bf q})\equiv [\sigma_{\bf q},[H,\sigma_{\bf q}]]$ については、RK point で厳密な評価を与えることができ、ある波数 ${\bf q}_{\bf p}$ で 0 となることが示される。すなわちこの波数で励起ギャップは閉じ、図 ${\bf 8}$ (a) に示すような線形分散を持つギャップレス励起が立ち上がる ${\bf *}^{15}$ 。この素励起はフォトンと呼ばれ、量子スピンアイスの最低励起状態を作る。

さて、ギャップの閉じる波数をよく見てみよう。図 8 (a) の左側のパネルに示したのは古典および量子スピンアイスにおける静的磁気構造因子 $\mathcal{S}(\mathbf{q})$ である。2.4.2 節で見たように、古典スピンアイスの $\mathcal{S}(\mathbf{q})$ には pinch point と呼ばれる特異点が存在する。量子スピンアイスではその特異構造がぼやけているものの、名残りとも言える「くびれ」の構造が残っている。図 8 (a) の右のパネルのように素励起の分散を $\mathcal{S}(\mathbf{q})$ と重ねてみると、ギャップが閉じる $\mathbf{q}_{\mathbf{p}}$ は pinch point の位置に他ならないことがわかる。

3.5.3 電気モノポール

式 (26) の形の試行関数以外にも、基底状態と直交し、かつ励起エネルギーを小さく保つような位相の付け方が考えられる。前節で 4 He とのアナロジーについて簡単に触れたが、 4 He では線形に立ち上がるフォノン励起の他に、閉じた渦環であるロトン励起が存在する。量子スピンアイスについても渦を形作るように位相変調を導入して、低励起を作る可能性が考えられる。まずは理解がし易い 2 次元系を例にとって、量子スピン液体の渦励起の形を見てみることにしよう。

■ vison 励起 2次元の格子上の量子 dimer 模型を考える。non-bipartite な格子、例えば三角格子上では 2次元系であっても量子スピン液体相は安定となり、RK point では図 8 (b) の中段に示すように、dimer 配置が等しい重みで重ね合わせを起こした状態が基底状態を与える。ここに渦対の励起を作るには、三角形のプラケットを二つ選び、string Γ で結ぶ。 Γ が横切る三角格子の bond 上の dimer の数を数えて、そのパリティに従って各 dimer 配置に ± 1 の位相を付ける。このように構成した状態は基底状態と直交することが示され、 Γ で結ばれた両端に渦糸芯をもつ、渦対励起とみなすことができる。

 $^{^{*15}}$ 実は分散の線形性を見るには RK point から離れる必要がある。

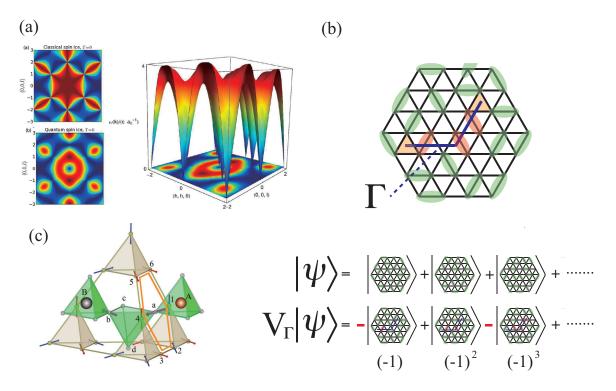


図8 (a) (左上) 古典スピンアイス (左下) 量子スピンアイスの動的磁気構造因子 $\mathcal{S}(\mathbf{q})$ 。(右) $\mathcal{S}(\mathbf{q})$ と重ね合わせたフォトン分散。pinch point の名残の点でフォトンのギャップが閉じる。[文献 [35] より American Physical Society の許可を受けて転載] (b) 三角格子上量子 dimer 模型の RK point の基底状態波動関数と vison の波動関数。vison 対を作る string Γ と Γ が横切る bond。(c) 電気モノポールの概念図。まず、元々のパイロクロア格子の各六員環の中心に新しいサイトを定義して隣接サイトを結ぶと正四面体(図の a, b, c, d)が現れ、この正四面体と頂点共有で連なる別のパイロクロア格子が生じる。電気モノポールはこの「裏パイロクロア格子」の各正四面体の中心(A や B)に定義される。図の六員環に沿うサイト 1-6 で定義された、式 (28) の変分関数の位相が、その六員環の中心に位置する裏パイロクロア格子のサイト a に渦度ベクトル (電場)を作る。この渦度ベクトルの湧き出しと吸い込みがそれぞれ正と負の電気モノポールに対応する。

■電気モノポール励起 3次元の渦励起の構成はやや複雑である。まず、元々のスピン自由度に戻って考えると、渦を作るとは、スピンをその異方軸を中心に少しずつ回転させて、例えば六員環に沿って一周した時の total の回転角を 2π (の整数倍) とするような構造を作ることに他ならない。すなわち、「渦糸」は図 8 (c) に示すように、六員環の中心で定義される。パイロクロア格子は幾何学的に思いがけない美しい特徴を持っており、六員環の中心にサイトを置いて作った双対格子もまた、パイロクロア格子の形状を取る。渦糸はこの「裏パイロクロア格子」のサイトを結ぶ string として定義される。さて、ここで、 4 He と大きく異なるのは、量子スピンアイスの場合、必ずしも渦糸は閉じて環を作る必要が無く、端点をもって途切れても良いことである。この渦糸の端点、渦度ベクトルの湧き出しと吸い込みが、それぞれ正負の電荷を持つ電気モノポールと呼ばれる粒子状の励起をなす [図 8 (c)]。このような正負の電気モノポール対励起を記述する変分波動関数は、RK 波動関数にサイトごとに異なる角度 θ_i でスピンを回転させた次の形で表現される。

$$|\psi\rangle = \sum_{j} e^{i\theta_{j} s_{j}^{z}} |\psi_{\text{RK}}\rangle \tag{28}$$

ここに導入した θ_j は (格子上で定義された) ベクトルポテンシャルと解釈される。そのローテーションを取ったものが「渦糸」に相当する電場、そしてその湧き出しと吸い込みとして電荷としての電気モノポールが定義されることになる [36]。磁気モノポールがスピンそのものをベクトル場と見立てたときの湧き出しと吸い込みとして解釈されたことのアナロジーである。この電気モノポールのエネルギースケールは磁気モノポールに比べて小さく、その観測は容易でない。理論的にもこの粒子励起の分散関係や詳しい性質は理解されていない部分が多

く、その解明は今後の重要な課題と言える。

3.6 量子スピンアイスのいくつかの課題

以上では量子スピンアイスの素励起をそれぞれ「自由粒子」と考えてその特徴づけを与えてきたが、磁気/電気モノポールとフォトンの間には本質的な意味で相互作用が働く。例えば「電気」モノポールという名前は伊達ではない。図 8 (c) から推察できるように、電気モノポールが通過する六員環に沿ってスピンの渦度が変化する、すなわち、あたかも電磁誘導の規則に従うように、「磁場」であるスピンが擾乱を受けるわけである。実際、モノポールとフォトンの間に働く相互作用は量子電磁気学 (QED) で記述されると信じられている。電荷に対応する電気モノポール、磁荷に対応する磁気モノポール、そして光に対応するフォトンと、電磁気学と同じ役割を果たす素粒子がそろって似通った規則に従って運動を行なうのである。

しかしながら、我々の世界を記述する基本法則としての QED とはいくつか異なる点が見受けられる。まず、我々の QED には (今のところ) 磁気モノポールは存在しない。また、エネルギースケールの違いも顕著である。光に対応するフォトンの群速度はそのエネルギースケール $\frac{J_{+}^2}{J_{-}^2}$ に比例し、遅い [図 6 (b)]。素励起のエネルギースケールに関係して最近、いくつかの興味深い提案がなされている。例えば Wilczek らは QED の現象論に基づく結果として、低励起であるフォトンとの結合により、磁気モノポールのスペクトル端に不連続性が生じるとの提案を行なった [37]。興味深いことに、スペクトル端の不連続性の 大きさは QED の現象論に登場する微細構造定数 α に比例するとの結論が出されている。微細構造定数 α については、より直接的な見積もりがある。 α は物理的にはクーロン相互作用と光速度の比を無次元化した定数である。96 サイトという大きなサイト数のスピン系について量子 dimer 模型の Hamiltonian を数値的に対角化することにより、量子スピンアイスでは $\alpha\sim0.1$ 程度となるという見積もりがある [38]。これは我々の住む世界の QED における $\alpha\sim1/137$ よりも 10 倍程度大きい強結合の QED が実現していることを意味している。この数値的な見積もりが特に興味深いのは、格子 QED の数値計算により、 $\alpha\sim0.2$ 程度で閉じ込め転移が予言されているためである [39]。QED の閉じ込め現象を固体中で観測することができるのだろうか?そもそも真空の電磁気学には見られない強結合の電荷 (磁荷) が引き起こす電磁現象を観測できるとすれば非常に興味深いことである。

また、素励起の統計性の問題も興味深い。磁気および電気モノポールはボソンとして振る舞うのが自然に思えるが、それともフェルミ統計性を獲得する可能性もあるのだろうか?分数励起が示す統計性については銅酸化物超伝導体の母体としてのスピン液体が提案されていた時代から長い研究の歴史がある。実は Husimi cactus 上で定義されたスピンアイスの亜種とも呼べる模型においてはモノポールに相当するスピノン励起がフェルミオンとして振る舞うことが簡単な議論により示されている [40]。しかしながら、素励起の統計性に関して何よりも豊かな話題を提供するのは次章で紹介する Kitaev スピン液体である。そこでは 2 次元系特有の (可換) エニオン励起のほか、量子計算の素子としての応用が期待される非可換統計に従う素励起の出現が提案されている。

4 Kitaev スピン液体

前章で紹介したように、量子スピン液体の最も顕著な特徴のひとつは、分数化した素励起の存在である。分数励起は遠方で自由粒子として振る舞う。しかしながら、ゲージ場との相互作用は遠く離れた素励起の間にも、時として強い効果を及ぼす。本章で紹介する Kitaev スピン液体では、非可換統計性をもつ素励起が出現することを紹介する。

4.1 模型の定義

まずは Kitaev 模型の定義とその厳密解の構成について紹介する [41]。Kitaev 模型とは図 9 (a) にあるように六角格子の各頂点で定義されたスピン 1/2 の演算子が相互作用する模型である。隣り合うスピン同士はイジング型の相互作用をするが、ボンドの方向ごとにイジング相互作用の異方軸が異なるため、自明に解くことはできない。Hamiltonian は以下のように表される。

$$\mathcal{H} = -J_x \sum_{\langle j,j'\rangle_x} s_j^x s_{j'}^x - J_y \sum_{\langle j,j'\rangle_y} s_j^y s_{j'}^y - J_z \sum_{\langle j,j'\rangle_z} s_j^z s_{j'}^z$$
(29)

Kitaev 模型は数少ない可解な 2 次元量子スピン模型である。「可解」という言葉にはいくつかのレベルがあり、多くの場合、基底状態が厳密に求まることを指す。しかしながら、Kitaev 模型は完全な可解模型であり、基底状態のみならず、全ての励起状態を厳密に構成することが可能である。

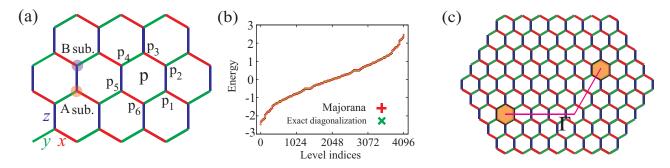


図 9 (a) Kitaev 模型を定義する六角格子。赤、緑、青のボンドに沿って、x,y,z 方向を容易軸とするイジング 形の結合が生じる。(b) Hamiltonian (29) を直接数値対角化したエネルギー準位とマヨラナ表現との比較 [42]。 (c) $W_p = -1$ をとる二つの六角形プラケットとそれを結ぶ string。

4.1.1 マヨラナ演算子

Kitaev 模型を解く手続きを紹介するのに先立って、解の導出に中心的な役割を果たすマヨラナ演算子の性質についてまとめておこう。マヨラナ演算子とは一般に 2N 個のエルミート演算子の集団 $\{c_0,c_1,\cdots c_{2N-1}\}$ で、次の代数関係を満たすものを指す。

$$[c_{i}, c_{j'}]_{+} \equiv c_{i}c_{j'} + c_{j'}c_{i} = 2\delta_{ij'} \tag{30}$$

すなわち、異なるマヨラナ演算子は反可換であり、ひとつのマヨラナ演算子を2乗すると1となる。

■ 複素フェルミオンとの関係 異なるマヨラナ演算子の反交換関係はフェルミオンのみたす代数関係を想起させるが、実際、二つのマヨラナ演算子の線型結合を取ることにより、(複素) フェルミオンを作ることができる。例えば 2m 番目と 2m+1 番目のマヨラナ演算子から

$$a_m = \frac{1}{2}(c_{2m} - ic_{2m+1}), \qquad a_m^{\dagger} = \frac{1}{2}(c_{2m} + ic_{2m+1})$$
 (31)

のように作られた a_m, a_m^\dagger はフェルミオンの生成消滅演算子の代数関係を満たすことがわかる。すなわち、フェルミオン演算子に対するマヨラナ演算子の関係は、ボソンの生成消滅演算子に対する実の正準変数 \hat{x},\hat{p} にあたる、ということができるだろう。ここで、2N 個のうち、どの二つのマヨラナ演算子のペアからフェルミオンを作るかはもちろん自由である。二つのマヨラナ演算子から一つの複素フェルミオンを作られる対応関係を指して、しばしば「マヨラナはフェルミオンの半分」などと言われる。

■ フェルミオンパリティ マヨラナ演算子がフェルミオンの生成消滅演算子の和の形で表されることから推測されるように、対応するフェルミオンの数は保存しない場合が多い。ただフェルミオン数が保存しなくても、フェルミオン数のパリティが保存する場合がある。むしろマヨラナの表示が役に立つ状況は次式で定義するフェルミオンパリティ $(-1)^F$ が保存する場合にほとんど限られるようである。

$$(-1)^F \equiv \prod_{m=0}^{N-1} (ic_{2m}c_{2m+1}) = \prod_{m=0}^{N-1} (1 - 2a_m^{\dagger}a_m)$$
(32)

ここで、式 (31) の表現を用いている。すなわち、 $(-1)^F$ は全フェルミオン数 $\sum_m a_m^\dagger a_m$ の偶奇に応じて ± 1 を返す演算子となっている。定義式の形から分かるように $(-1)^F$ はマヨラナ演算子の順序づけによって値が変わる量である。より一般的には直交行列 Q による変換: $c_j Q_{jj'} = {c'_{j'}}^{*16}$ は式 (30) のマヨラナの代数関係を保つが、この変換により新しいマヨラナのフェルミオンパリティ $(-1)^{F'}$ は

$$(-1)^{F'} = (\det Q)(-1)^F \tag{33}$$

のように変換される。

Hamiltonian の標準形 マヨラナ演算子の二次形式で表される Hamiltonian は容易に対角化することができる。Hamiltonian は $2N \times 2N$ の実反対称行列 A を用いて次の標準形に表すことができる。

$$\mathcal{H} = \frac{i}{4} \sum_{j,j'} c_j A_{jj'} c_{j'} \tag{34}$$

行列 iA の固有値方程式

$$iA_{jj'}u_{j'}^{(m)} = \varepsilon_m u_j^{(m)} \tag{35}$$

の両辺の複素共役を取ると、

$$-iA_{jj'}(u_{j'}^{(m)})^* = \varepsilon_m(u_j^{(m)})^* \Rightarrow iA_{jj'}(u_{j'}^{(m)})^* = -\varepsilon_m(u_j^{(m)})^*$$
(36)

より、 $(u_j^{(m)})^*$ はエネルギー $-\varepsilon_m$ の固有関数となることが分かる。すなわち、iA は (ゼロ固有値がないとすると) 正負の固有値を N 個ずつ持つことになる。

さて、正の固有エネルギー $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \cdots \varepsilon_{N-1}$ に対応する固有関数 $u^{(0)}, u^{(1)}, \cdots u^{(N-1)}$ の実部と虚部を並べて、行列 $\tilde{Q}\equiv [\mathrm{Re}\ u^{(0)}, \mathrm{Im}\ u^{(0)}, \mathrm{Re}\ u^{(1)}, \mathrm{Im}\ u^{(1)}, \cdots \mathrm{Re}\ u^{(N-1)}, \mathrm{Im}\ u^{(N-1)}]$ を作ると、行列 $Q\equiv \sqrt{2}\tilde{Q}$ は直交行列となる。直交行列 Q による変換: $c_iQ_{jj'}=c'_{i'}$ により、

$$\mathcal{H} = \frac{i}{4} c_j A_{jj'} c_{j'} = \frac{i}{4} c Q Q^T A Q Q^T c = \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{N-1} \varepsilon_m (-i c'_{2m} c'_{2m+1}) = \sum_{m=0}^{N-1} \varepsilon_m (\gamma_m^{\dagger} \gamma_m - \frac{1}{2})$$
(37)

ここで、 $\gamma_m = \frac{1}{2}(c_{2m}' - ic_{2m+1}')$ 。 これで Hamiltonian (34) は対角化できたことになり、基底状態は $\gamma_m|0\rangle_{\gamma} = 0$ を全ての m についてみたす、 γ -真空 $|0\rangle_{\gamma}$ となり、対応する基底エネルギーは零点エネルギー: $-\frac{1}{2}\sum_{m=0}^{N-1}\varepsilon_m$ の形をとる。ここで大事なのは対角形 (37) に現れる固有モード (γ_m) の数はマヨラナの数の半分の N であり、正の固有エネルギーに対応するモードのみが現れることである*17。

 $^{^{*16}}$ 以下、式が煩雑になることを防ぐため、適宜断りなく、和の記号を除いた縮約表示を用いる。

^{*17} 同じことであるが、負の固有エネルギーのみを考えることも可能である。

4.1.2 厳密解の構造

さて、前節のマヨラナ演算子の性質をもとに、Kitaev 模型の厳密解を Kitaev 自身の用いたスピン演算子のマヨラナ表現に基づいて導出する。Kitaev 模型を解くために Kitaev は、各サイト j に 4 種類のマヨラナ演算子 $\{c_j,b_i^y,b_i^y,b_i^y\}$ を定義し、

$$s_j^{\alpha} = \frac{i}{2} c_j b_j^{\alpha} \tag{38}$$

の形にスピン 1/2 の演算子を表現した。これらは式 (30) の特殊な場合として、以下の反交換関係をみたす演算子である。

$$[c_j, c_{j'}]_+ = 2\delta_{jj'}, \quad [c_j, b_{j'}^{\alpha'}]_+ = 0, \quad [b_j^{\alpha}, b_{j'}^{\alpha'}]_+ = 2\delta_{jj'}\delta_{\alpha\alpha'}$$

この反交換関係を用いると、式 (38) により定義された s_j^α がスピン 1/2 の演算子が満たす反交換性 $s_j^\alpha s_j^{\alpha'}+s_j^{\alpha'}s_j^\alpha=\frac{1}{2}\delta_{\alpha\alpha'}$ を示すことができる。一方で角運動量演算子のみたす交換関係はこの段階ではみたされない。マヨラナ演算子の間に束縛条件として

$$D_j \equiv c_j b_i^x b_j^y b_i^z = 1 \tag{39}$$

を課す必要がある。式 (39) が満たされる部分空間において、式 (38) により定義される s_j^α は SU(2) の生成子の交換関係 $[s_j^\alpha,s_j^\beta]=i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}s_j^\gamma$ をみたし、式 (38) はスピン 1/2 の演算子のほとんど忠実な表現を与えることになる。「ほとんど」と述べたのは、ひとつのサイトで全てのマヨラナ演算子を -1 倍する変換

$$c_j \to -c_j, b_j^{\alpha} \to -b_j^{\alpha} \quad (\alpha = x, y, z)$$
 (40)

は s_j^{α} を保つ、すなわち (38) の表現は -1 倍の余分さを含むためである。言い換えると、式 (40) は全ての物理量を変化させない局所 Z_2 ゲージ変換を定義する。

さて、マヨラナ演算子を用いて Hamiltonian (29) を書き換えると、 $(J_x=J_y=J_z=J$ として) 次のように表される。

$$\mathcal{H} = i\frac{J}{4} \sum_{i \in \mathcal{A}} \sum_{\alpha = x, y, z} u_i^{\alpha} c_i c_{i_{\alpha}} \equiv \frac{i}{4} \sum_{jj'} c_j A_{jj'} c_{j'}$$

$$\tag{41}$$

ここでサイト i に関する和は A 副格子に限っており、 i_{α} はサイト i から α -bond でつながる隣接サイトである [図 9 (a)]。 u_i^{α} は b-タイプのマヨラナの寄与する部分を集めたもので、 $u_i^{\alpha} \equiv ib_i^{\alpha}b_{i_{\alpha}}^{\alpha}$ と各ボンド上で定義される Z_2 ゲージ場として定義され、 ± 1 の値をとることがわかる。Kitaev 模型が可解なのは $\{u_i^{\alpha}\}$ が Hamiltonian (41) と可換: $[u_i^{\alpha},\mathcal{H}]=0$ であることに由来する。この事実は (39) の代数関係を使って容易に示すことができる。すなわち、 $u_i^{\alpha}=\pm 1$ を全てのボンドに割り振ると、Hamiltonian (41) はマヨラナ $\{c_j\}$ について 2 次形式となり、4.1.1 節で与えた処方箋に従って容易に対角化することができる。

さて、 Z_2 ゲージ場 $\{u_i^{\alpha}\}$ はシステムサイズに比例する量の保存量を構成するが、この保存量を基礎として解を構築するにはひとつ問題がある。ゲージ変換 (40) をサイトi のみに行うと、 Z_2 ゲージ場は $u_i^{\alpha} \to -u_i^{\alpha}$ のように符号を変える。すなわち、 $\{u_i^{\alpha}\}$ はゲージ不変ではなく、複数の $\{u_i^{\alpha}\}$ の配置が同一の物理的な状態に対応することになる。物理的な状態に 1 対 1 に対応する表現が得られるのが好ましいので、ゲージ不変な保存量を探すと、図 9 (a) にあるように、各六角形p に沿ってゲージ場の積を取って得られる Z_2 ゲージフラックス W_p の存在に行き着く。

$$W_p \equiv u_{p_1}^y u_{p_1}^z u_{p_3}^x u_{p_3}^y u_{p_5}^z u_{p_5}^x \tag{42}$$

 W_p も ± 1 の値を取り、こちらはゲージ変換 (40) に対して不変である。

さて、 $W_p=\pm 1$ の値を固定し、そのゲージフラックスの値を導く $\{u_i^\alpha\}$ の組、すなわちゲージを一つ固定する。その上で (41) を対角化すると、今度こそ固有状態 $|\psi\rangle$ を得ることができるのであるが、最後にもうひとつステップが残っている。式 (39) で表される条件が全てのサイトのマヨラナ演算子について成り立たなければな

らない。演算子 D_j は Hamiltonian と可換なので、全ての D_j の値を +1 とする同時固有状態を選ぶことになる。これは固有状態 $|\psi\rangle$ に射影演算子

$$P_{\rm F} \equiv \prod_{i} \left(\frac{1+D_j}{2}\right) \tag{43}$$

を作用することにより実行される。 $P_{\rm F}$ を作用した結果、どのような状態が残るかを一見にして判別することは困難に思える。しかし、 $P_{\rm F}$ によって生成される状態の分類を丁寧に行うことにより、射影の効果はフェルミオンパリティ $(-1)^F$ の選別に帰着されることがわかる。詳しい導出は文献 [43, 44] にゆずるとして、

$$(-1)^F = (-1)^{N_2(N_1-1)} \prod_{i \in A} \prod_{\alpha = x, y, z} u_i^{\alpha}$$
(44)

の条件がみたされる状態のみが射影の結果、生き残る *18 。片方のフェルミオンパリティのみが許されるのは、あくまでも物理的なスピンは (38) 式のように二つのマヨラナの積であり、単一のマヨラナ励起が許されない、つまり $|\psi\rangle$ が物理的に正しい状態なら $c_i|\psi\rangle$ は許されない、という事情による。

さて、以上の考察から、Kitaev 模型の厳密解を求める過程は次の4つのステップにまとめられる。

- (1) ゲージフラックス $\{W_p\}$ の値を全ての六角形 p について ± 1 のいずれかに固定する
- (2) (1) の $\{W_p\}$ を再現するゲージ場 $\{u_i^\alpha\}$ の組をひとつ選ぶ (ゲージ固定)
- (3) マヨラナ 2 次形式の Hamiltonian (41) を対角化: $\frac{i}{4}c_jA_{jj'}c_{j'} = \sum_m \varepsilon_m(\gamma_m^\dagger\gamma_m^\dagger \frac{1}{2})$
- (4) 固有状態 $\gamma_{m_1}^\dagger\gamma_{m_2}^\dagger\cdots\gamma_{m_k}^\dagger|0\rangle_\gamma$ のうち、正しい $(-1)^F$ を持つ状態のみを (44) 式に基づいて選ぶ。

この 4 ステップを踏まえて、基底状態を決定するプロセスに移ろう。ゲージフラックス $\{W_p\}$ の値を固定して、マヨラナ 2 次形式の Hamiltonian (41) の形が決まってしまったあとは、一般的な処方箋 (37) に従えば基底状態 $|0\rangle_\gamma$ と、基底エネルギー $E_0[\{W_p\}] = -\frac{1}{2}\sum_m \varepsilon_m$ が求まる。従って、 $E_0[\{W_p\}]$ を最小化する $\{W_p\}$ の配置を求めることが問題となり、一般には 2^{N+1} 個のフラックス配置*¹⁹から最適なものを選ぶ困難な問題を解く必要があるが、全ての六角形 p について $W_p=1$ のフラックス配置が基底状態を与えることが示されている [45]。

基底状態で $W_p=1$ ということは、別の見方をとると、 $W_p=-1$ の値を持つ六角形プラケットを励起とみなすことができる。まず全ての $W_p=1$ とするゲージとして、全ての (i,α) について $u_i^\alpha=1$ とする。ここから $W_p=-1$ の励起を作るには、 $\prod_p W_p=1$ がみたされなければいけないことから、対励起させることが必要である。これを実現するには、図 9 (c) のように二つの六角形プラケットを string Γ でつなぎ、 Γ が横切るボンド上で $u_i^\alpha=-1$ とすればよい。この励起の作り方は 3.5.3 節で紹介した三角格子上量子 dimer 模型の渦励起の構成と等しく、Kitaev 模型の $W_p=-1$ の値を取るプラケット励起も vison の名前で呼ばれる。実際、 $W_p=-1$ のプラケットに沿って、マヨラナ c を一周させると、string Γ を一回よぎるために位相 π のシフトを受けることになり、vison が渦 π (π -vortex) としての性格をもつ事が理解できる。この vison と、マヨラナ π から得られる fermion π が Kitaev 模型の素励起を作ることになる。

さて、基底状態の波動関数の完全な形は次の形となる。 $u_i^{\alpha}=1$ のゲージを選ぶと、

$$|\psi_{\rm GS}\rangle = P_{\rm F}|0\rangle_{\beta}\otimes|0\rangle_{\gamma} = \prod_{i} \left(\frac{1+D_{i}}{2}\right)|0\rangle_{\beta}\otimes|0\rangle_{\gamma}$$
 (45)

ここで、 $|0\rangle_{\beta}$ はゲージ場 u_i^{α} を全て 1 にする状態を表し、複素フェルミオン $\beta_i^{\alpha}\equiv\frac{1}{2}(b_i^{\alpha}+ib_{i_{\alpha}}^{\alpha})$ の真空として表される。さて、射影 $P_{\rm F}$ は固有関数の形にどのような影響を及ぼすだろうか?状態 $|0\rangle_{\beta}\otimes|0\rangle_{\gamma}$ に対する D_j の作用を見ると、

$$u_j^{\alpha} D_j |0\rangle_{\beta} \otimes |0\rangle_{\gamma} = i b_j^{\alpha} b_{j\alpha}^{\alpha} c_j b_j^x b_j^y b_j^z |0\rangle_{\beta} \otimes |0\rangle_{\gamma} = -D_j |0\rangle_{\beta} \otimes |0\rangle_{\gamma}$$

$$\tag{46}$$

 $^{^{*18}}$ 式 (44) はシステムの幾何学的形状に依存する。今、 $N_1 imes N_2$ 個のユニットセルを敷き詰めた周期的境界条件の系を考えている。

 $^{^{*19}}$ プラケットで定義されるフラックスの他に系を 1 周するようなグローバルループで定義されるフラックスが (周期的境界条件の場合、) 二 つある。

となる。すなわち、 D_j の作用はサイト j につながるゲージ場の値を -1 倍する。 $P_{\rm F}$ は 2N 個のサイトに D_j を作用させるかどうかの選択に応じて 2^{2N} 個の項の和と書ける *20 。従って、 $P_{\rm F}$ による重ね合わせは (ゲージフラックスの値は等しいけれど) ゲージ場の値が異なるマクロな個数の配置に対する重ね合わせを引き起こすことになる。量子スピンアイスの「シュレディンガーの氷」的な膨大な重ね合わせで表現される基底状態描像が Kitaev スピン液体においても成立する。実はこの基底状態の表現は次節で見るように、量子スピン液体のオリジナルの形である RVB 状態に対応していることが分かる。

4.1.3 projected BCS 表現

前節で紹介したように、マヨラナ表現 (38) を選ぶと、相互作用する 2 次元量子スピン系の Hamiltonian (29) が完全に解けてしまうというのは奇跡的にも見える。マヨラナ表現 (38) はどこから降ってきたものであろうか?本節ではこの表現の自然な解釈について考えてみる。そもそもスピン 1/2 の演算子の正体は多くの場合、電子である。例えば Hubbard 模型のような、格子上で定義された電子模型を考えるとき、強相関効果のために二重占有あるいは空孔の状態が許されない低エネルギー領域の有効自由度としてスピン 1/2 が現れる。このように物理的な電子を念頭においたスピン 1/2 の自然なフェルミオン表現として、次の形がある $*^{21}$ 。

$$s_j^{\alpha} = \frac{1}{2} f_{js}^{\dagger} \sigma_{ss'}^{\alpha} f_{js'} \tag{47}$$

ここで「強相関効果」による単一粒子占有条件は以下の形に書ける。

$$f_{i\uparrow}^{\dagger} f_{j\uparrow} + f_{i\downarrow}^{\dagger} f_{j\downarrow} = 1 \tag{48}$$

実はこの電子フェルミオン f_{is} と前節で導入したマヨラナ演算子は次の線形変換で結ぶことができる。

$$\begin{pmatrix}
b^{x} \\
b^{y} \\
b^{z} \\
c
\end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix}
1 & -1 & 1 & -1 \\
-1 & -1 & 1 & 1 \\
1 & -1 & -1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1
\end{pmatrix} \begin{pmatrix}
\alpha_{1} \\
\alpha_{2} \\
\alpha_{3} \\
\alpha_{4}
\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}
\alpha_{1} \\
\alpha_{2} \\
\alpha_{3} \\
\alpha_{4}
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
f_{\uparrow} + f_{\uparrow}^{\dagger} \\
-i(f_{\uparrow} - f_{\uparrow}^{\dagger}) \\
f_{\downarrow} + f_{\downarrow}^{\dagger} \\
-i(f_{\downarrow} - f_{\uparrow}^{\dagger})
\end{pmatrix} (49)$$

また、この表現では強相関条件 (48) は実はマヨラナ演算子間に導入した条件 (39) に他ならない。すなわち、Kitaev によって唐突にもたらされたマヨラナ表現は実際のところ、電子のフェルミオンにその起源を辿ることができる。物理的な電子の立場に立つと、Kitaev 模型の厳密解はいわゆる projected BCS 型の形に書かれることになる。この形の波動関数は量子スピン液体を表す波動関数として、P.W.Anderson によって初めて提案された RVB 状態を表すものとして有名である。ここに歴史の環が一周回り、量子スピン液体の歴史の始まりを与えた RVB 状態が、厳密解という強固な理論基盤を得て Kitaev 模型の文脈で再び登場したことは感慨深い。

4.2 カイラルスピン液体

Kitaev スピン液体のもっとも注目すべき特徴はカイラルスピン液体 (CSL) 相の安定化と CSL 相の示す輸送 現象と素励起の統計性にある。 CSL 相の出現については Kitaev 自身によって、模型の提案を行なったオリジナルの論文 [41] ですでに詳細な議論が提示されている。そこでは Kitaev は磁場の効果がマヨラナ $\{c_j\}$ の次近接ホッピングとして寄与することを示し、有効ハミルトニアンとして以下の形を提案している。

$$\mathcal{H}_{K} = -J \sum_{\langle j,k \rangle_{\alpha}} s_{j}^{\alpha} s_{k}^{\alpha} - 2\kappa \sum_{\langle j,k,l \rangle_{\alpha\beta}} s_{j}^{\alpha} s_{k}^{\beta} s_{l}^{\gamma}$$

$$(50)$$

ここで、 κ が磁場の効果を表し、Kitaev の摂動論的評価によると $\frac{h^3}{J^2}$ のオーダーである *22 。

^{*20} 正確には $\prod_{j=0}^{2N-1} D_j = 1$ なので 2^{2N-1} 個の和となる。実はあるサイトの集合に対する積 $D_{j_1}D_{j_2}\cdots D_{j_k}$ とその補集合に対する積の寄与が消えない条件からフェルミオンパリティの選択則 (44) が現れる。

 $^{^{*21}\,}f_{js}$ は Abrikosov fermion と呼ばれる

 $^{^{*22}}$ しかしながら系の対称性からはより低次の寄与が許され、例えば可解極限から離れ、 Γ' 相互作用の効果を考慮すると大きい κ が実現できるという主張がなされている [46]。

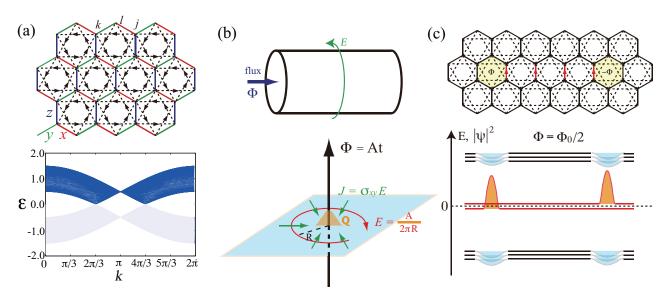


図 10 (a) (上) CSL 相の有効 Hamiltonian の次近接マヨラナ hopping の方向が矢印で表現されている。(下) Kitaev 模型のエネルギースペクトル。正のエネルギー部分のみが実体を持つ。(b) (上) 2 次元系を一方向に丸めて筒状にし、磁束 Φ を通す。(下)2 次元面を貫く細い磁束にホール電流による電荷が蓄積する模式図。(c) (上) 格子系に細い磁束を導入する模式図。" Φ "," Φ "と記した二つのプラケットに磁束 Φ を導入する。(下)対応する実空間における束縛状態および占有/非占有連続スペクトルの様子。 Φ = Φ 0/2 のとき、二つの磁束周りにゼロエネルギー状態が形成する。

4.2.1 熱ホール伝導度の半整数量子化

さて、Hamiltonian (50) をマヨラナ演算子を用いて表すと、

$$\mathcal{H}_{K} = \frac{i}{4} J \sum_{\langle j,j' \rangle_{\alpha}} u_{i}^{\alpha} c_{j} c_{j'} + \frac{i}{4} \kappa \sum_{\langle \langle j,j' \rangle \rangle} u_{i}^{\alpha} u_{i'}^{\alpha'} c_{j} c_{j'} \equiv \frac{i}{4} c_{j} A_{jj'} c_{j'}$$

$$(51)$$

となる。まずは $u_i^\alpha=1$ とゲージ固定した一様フラックスのセクターを考えよう。このセクターでは Hamiltonian (52) は次に表す、グラフェンの電子模型に虚数の次近接ホッピングを導入した Haldane 模型 [47] と類似した形となる [図 10 (a)]。(記号を揃えるために hopping に J,κ を用いている)

$$\mathcal{H}_{\text{Hal}} = J \sum_{\langle j,j'\rangle} a_j^{\dagger} a_{j'} + i\kappa \sum_{\langle \langle j,j'\rangle\rangle} a_j^{\dagger} a_{j'} = a_j^{\dagger} B_{jj'} a_{j'}$$
(52)

実際、ひとつの副格子に対して $a_j \to i a_j$ 、 $a_j^\dagger \to -i a_j^\dagger$ というゲージ変換を行なうと、Hamiltonian 行列 B は Kitaev 模型の行列 A に正確に一致する。すなわち、両模型のエネルギースペクトルは完全に一致し、Dirac cone に $\frac{3\sqrt{3}}{4}\kappa$ のエネルギーギャップが開いた構造をとる。ただ一つ、大きな違いは Kitaev 模型の場合、エネルギースペクトルの正の部分のみが意味を持ち、負の部分は実体を持たないということである。

さて、Haldane 模型の大きな特徴は有限の次近接 hopping $(\kappa \neq 0)$ で系は Chern 数 $\nu=1$ で特徴づけられる Chern 絶縁体相に転移することであった。 Chern 絶縁体は量子化されたホール伝導度 σ_{xy} を示す。

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \to \kappa_{xy}/T = \frac{\pi^2}{3} (\frac{k_{\rm B}}{e})^2 \sigma_{xy} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_{\rm B}^2}{h}$$
 (53)

このホール伝導度の量子化は直感的には図 10 (b) のように、系を一方に丸めた筒状の geometry を考えて、筒に徐々に磁束 Φ を通した時のエッジ状態の示すスペクトラルフローをバルクのホール伝導度に読み代えることによって理解できる。有限温度を考えて、エッジ状態に電子・ホール双方からなる熱励起があれば、Wiedemann-Franz 則から熱ホール伝導度も量子化された値をとるだろう [式 (53)]。

Kitaev 模型では fermion は電荷を持たないため、ホール電流は生じないものの、熱ホール伝導度の量子化は観測される。しかしながら、一点異なるのは、Kitaev 模型ではエネルギースペクトルの正の部分のみが実体を持つ、すなわち粒子励起は存在するけれどもホール励起が存在しない点である。この事情を反映して、熱ホール伝導度は式 (53) の半分の値

$$\kappa_{xy}/T = \frac{\pi^2}{6} \frac{k_{\rm B}^2}{h}$$

に「半整数量子化」された値を取ることになる。

4.2.2 マヨラナゼロエネルギー状態

さて、もう少し Haldane 模型とのアナロジーを続ける。今度は系を丸めるのではなく、図 10 (b) 下段の図のように系の真ん中に細い磁束を通すことを考えよう。系のエネルギーギャップのスケールに比べて十分ゆっくりと磁束を印加すると、電磁誘導の法則により磁束の周りを回る向きに誘導電場が生じる。今、Chern 絶縁体相 $(\nu=1)$ にある Haldane 系では電場に垂直な方向にホール電流が生じ、時間 T の後、磁束の大きさが $\Phi(T)=\frac{hc}{2}n$ に達したところでは、

$$Q = -\int_0^T dt 2\pi R E(t) \sigma_{xy} = \int_0^T dt \sigma_{xy} \frac{d}{dt} \Phi(t) = \sigma_{xy} \Phi(T) = en$$
 (54)

の電荷が蓄積することになる。

さて、この思考実験を格子模型のセットアップで考える。図 10 (c) のように Haldane 模型の六角格子にパイエルス位相を加えて、遠く離れた二つのプラケットに片方は磁束 Φ 、もう片方には磁束 $-\Phi$ を通す。 Φ を徐々に大きくしていくと、上記の思考実験に従って、片方の磁束からもう片方の磁束に電荷が流れ込む。この電荷の流れの微視的な起源を考察すると、磁束の周りに束縛状態が生じるプロセスと解釈できる。すなわち、 Φ を大きくしていくと、占有バンドと非占有バンドからそれぞれ占有/非占有された孤立準位がバンドの中央に近づく。その補償として占有/非占有バンドの電荷の寄与は磁束の周りでくぼみを生じることになる。特に貫く磁束の大きさが磁束量子のちょうど半分: $\Phi = \frac{\Phi_0}{2}$ となるとき、すなわち 2 つの π フラックスがシステムを貫くときには系の対称性から、それぞれの磁束のもとで、ゼロエネルギーに束縛状態が生じることになる。

さて、再び Kitaev 模型に戻ろう。式 (52) で定義される Kitaev 模型の Hamiltonian 行列 A は実であるため、磁束 Φ による複素数の位相を導入することはできない。ただ、 π フラックスの場合は例外である。実際、図 10 (c) のように 2つの π フラックスが貫いた状況は、Kitaev 模型の文脈では 2 つの vison 励起が離れて配置した状態と解釈できる。このアナロジーは興味深い帰結を生む。2 つの vison にはそれぞれゼロエネルギー状態が束縛するのである。二つのゼロエネルギー状態は Haldane 模型では、占有バンドと非占有バンドから昇って/降りてきたものであったが、ここでもう一度マヨラナの重要な性質、占有バンドは実体を持たなかった、ということを思い出してほしい。すなわち、2 つの vison にそれぞれ形成していたと思われる束縛状態の半分は実体を持たない、言い換えると遠く離れた 2 つの vison に実は "ひとつの"束縛状態だけが付随する、ということになる。これがマヨラナゼロモードである。マヨラナゼロモードはゼロエネルギーの状態であり、対応する複素フェルミオンの固有モードの占有/非占有状態は縮退し、ひとつの qubit を作る。この 2 つの vison に非局所的に付随するゼロモードとしての性質が、局所的な摂動に強い頑健な qubit としての特性を作り、また vison の交換は qubit の内部空間に非自明な操作を及ぼして非可換統計に従う粒子としての性質を vison に付与するのである。

謝辞

この講義録を終えるにあたり、物性若手夏の学校での集中講義に招待してくださった、東京大学理学系研究科の加藤将貴さんに厚く御礼申し上げます。共同研究者でもある加藤さんには、講義ノートについての多くの具体的なアドバイスを頂いたほか、講義全般にわたるマネジメントをしていただき本当にお世話になりました。改めてお礼を申し上げます。また、この講義録の多くの部分が2018年に京都大学で行った集中講義をベースとしています。当時、まだこのような講義の経験のなかった私に貴重な機会を与えてくださった、京都大学基礎物理学研究所の戸塚圭介先生にこの場を借りてお礼を申し上げます。また、講義録の作成にあたり、講義中に頂いた多くの質問が助けになりました。遠くニューメキシコから参加くださった高橋淳さんを初めとして、下川統久朗さん、下出敦夫さん、尾崎壮駿さん、清水宏太郎さん、高橋雅大さん、中井宏紀さん、そして講義を受講してくださった皆様に、活発な質問を通じて共に講義を創りあげて頂いたことを感謝いたします。

参考文献

- [1] V. F. Petrenko and R. W. Whitworth, Physics of Ice (Oxford University Press, Oxford, 1999) は 氷についての包括的なレビューである。
- [2] J. D. Bernal and R. H. Fowler, J. Chem. Phys. 1, 515 (1933).
- [3] L. Pauling, J. Am. Chem. Soc. **57**, 2680 (1935).
- [4] M. J. Harris, et al., Phys. Rev. Lett. 79, 2554 (1997).
- [5] A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, R. Siddharthan and B. S. Shastry, Nature 399, 333 (1999).
- [6] R. Moessner, Phys. Rev. B **57**, R5587 (1997).
- [7] P. W. Anderson, Phys. Rev. 102, 1008 (1956).
- [8] L. Pauling, The Nature of the Chemical Bond 3rd ed. (Cornell, Ithaca, 1960).
- [9] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. 18, 692 (1967).
- [10] J. F. Nagle, J. Math. Phys. 7, 1484 (1966).
- [11] M. Udagawa, M. Ogata, and Z. Hiroi, J. Phys. Soc. Jpn. 71, 2365 (2002).
- [12] Z. Hiroi, K. Matsuhira, S. Takagi, T. Tayama, T. Sakakibara, J. Phys. Soc. Jpn. 72, 411 (2003).
- [13] W. F. Giauque and J. W. Stout, J. Am. Chem. Soc. 58, 1144 (1936).
- [14] O. Haida, T. Matsuo, H. Suga, and S. Seki, J. Chem. Thermo. 6, 815 (1974).
- [15] L. D. C. Jaubert et al., Phys. Rev. X 3, 011014 (2013).
- [16] S. V. Isakov, K. Gregor, R. Moessner, S. L. Sondhi, Phys. Rev. Lett. 93, 167204 (2004).
- [17] K. Essafi, L. D. C. Jaubert, M. Udagawa, J. Phys.: Cond. Mat., 29, 315802 (2017).
- [18] T. Fennell et al., Science **326**, 415 (2009).
- [19] C. Castelnovo, R. Moessner, and S. L. Sondhi, Nature 451, 42 (2008).
- [20] P. Fulde, K. Penc, and N. Shannon, Ann. Phys. (Leipzig) 11, 892 (2002).
- [21] D. Pomaranski et al., Nature Physics 9, 353 (2013).
- [22] K. Matsuhira et al., J. Phys.: Cond. Mat. 14, L559 (2002).
- [23] M. Udagawa, L. D. C. Jaubert, C. Castelnovo, and R. Moessner, Phys. Rev. B 94, 104416 (2016).
- [24] T. Mizoguchi, L. D. C. Jaubert, and M. Udagawa, Phys. Rev. Lett. 119, 077207 (2017).
- [25] J. G. Rau, Michel J. P. Gingras, Ann. Rev. Cond. Mat. 10: 357 (2019).
- [26] S. Onoda and Y. Tanaka, Physical Review B 83, 094411 (2011).
- [27] K. A. Ross, L. Savary, B. D. Gaulin, L. Balents, Phys. Rev. X 1, 021002 (2011).
- [28] D. S. Rokhsar and S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. 61, 2376 (1988).
- [29] O. Sikora, F. Pollmann, N. Shannon, K. Penc and P. Fulde, Phys. Rev. Lett. 103, 247001 (2009).
- [30] R. Moessner and S. L. Sondhi, Phys. Rev. Lett. 86, 1881 (2001).
- [31] A. Banerjee, S. V. Isakov, K. Damle, and Y. B. Kim, Phys. Rev. Lett. 100, 047208 (2008).
- [32] Y. Kato and S. Onoda, Phys. Rev. Lett. 115, 077202 (2015).

- [33] M. Udagawa and R. Moessner, Phys. Rev. Lett. 122, 117201 (2019).
- [34] R. P. Feynman, Phys. Rev. **94**, 262 (1954).
- [35] O. Benton, O. Sikora, and N. Shannon, Phys. Rev. B 86, 075154 (2012).
- [36] M. Hermele, M. P. A. Fisher and L. Balents, Phys. Rev. B 69, 064404 (2004).
- [37] S. C. Morampudi, F. Wilczek, C. R. Laumann, Phys. Rev. Lett. 124, 097204 (2020).
- [38] S. D. Pace, S. C. Morampudi, R. Moessner and C. R. Laumann, arXiv:2009.04499.
- [39] G. Cella, U. M. Heller, V. K. Mitrjushkin, and A. Viceré, Phys. Rev. D, 56, 7, 3896 (1997).
- [40] Zhihao Hao, O. Tchernyshyov, Phys. Rev. B 87, 214404 (2013) .
- [41] A. Kitaev, Ann. Phys. **321**, 2 (2006).
- [42] M. Udagawa, J. Phys.: Cond. Mat. **33** 254001 (2021).
- [43] F. L. Pedrocchi, S. Chesi, and D. Loss, Phys. Rev. B 84, 165414 (2011).
- [44] M. Udagawa, Phys. Rev. B 98, 220404 (2018).
- [45] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. **73**, 2158 (1994).
- [46] D. Takikawa and S. Fujimoto, Phys. Rev. B 99, 224409 (2019).
- [47] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett., 61, 2015 (1988).