フラストレートした量子多体系

東京大学総合文化研究科 堀田 知佐

物性とは、物質中の電子がもつ電荷・スピン・軌道などの自由度が互いに相互作用しあった結果、マクロな (熱力学的)物理量に見出される性質である.その際、系のエネルギーEとエントロピーSの兼ね合いがもの を言う.「この二つの熱力学量がどのような性質を持つか」と「ミクロな自由度同士がどのような相互作用 をもつか~つまりどのようなミクロなモデルで系が表されるか」の間を繋ぐのが理論研究の役割といってい いだろう.ごく一般の系では、温度が下がるにつれエントロピーが比熱という形で放出され、エネルギーが最 も低く、エントロピーがゼロの状態が最終的に極低温で実現する.これが熱力学第三法則である.エントロ ピーが低い状態とは、自由度が何らかの形で「秩序化」した状態に相当する.ところが、フラストレート系と 呼ばれる系では、エントロピーがなかなか放出されず、そのために低エネルギー状態が混沌としてしまう.そ こに何らかの新しい物理が生まれる~特異な揺らぎが発生して、通常とは異なった秩序や「相」が実現した り、特徴的なダイナミクスや応答が得られる場合もある.本稿では、このようなフラストレート系のエッセン スを、イジングモデルやハイゼンベルグモデル、tVモデルなどのミニマル有効モデルをもとに大掴みに捉え、 それをどう理論的に"調理する"かについて解説する.

1 基本的なことがら

統計力学で学ぶことの一つに,エントロピー S は 示量性 (~ O(N), N:システムサイズ)の物理量であ り, $\frac{\partial S}{\partial F} = T^{-1} > 0$ なので, $S(E) \equiv s(E)N$ はエネル ギー E の増加関数である, というくだりがある.そ のため、どんな系であっても多体の状態密度 Ω(E) ∝ e^{s(E)N} は E とともに指数関数的に増大する (図 1(a)). 理想的な状態密度の例として,図1(b)の正方格子イ ジングモデルの場合が挙げられる. 最低エネルギー では Ω(E) ~ O(1) で, ln Ω(E) は上に凸の E の増加 関数(熱力学関数の凸性)である.自由エネルギー F = E - TS が最低の状態が各温度で実現するので, 低温ほど低エネルギー,低エントロピーの状態が好ま れ, $T = T_c$ で二次相転移を起こして比熱が発散, そ れより低温で秩序化する.フラストレート系ではこ れがどう変わるのだろうか?図1(c)の三角格子反強 磁性イジングモデルの場合を見てみると, 最低エネ ルギーのところは、状態密度がそれまでの連続曲線 が途中で止まった形になっている.この状態数(絶 対零度での縮退度)は、エントロピーで見積もると

 $S(T = 0) = 0.323k_BN^{*1}$ で全エントロピー $(\ln 2)k_BN$ の半分弱に相当する.比熱の温度依存性を見ても,緩やかなピークをもちながら低温に向けて減少していくだけで何ら異常はみられない.つまり絶対零度まで無秩序の状態を保っているのである.次節で詳しく述べるが,このような低エネルギー状態の「マクロな縮退」はフラストレート系の特徴である.

物質中のフラストレーションとはそもそも、局所的 な相互作用エネルギーを最も得するような配置を同時 に全体が満たすことができない状況をいう. つまり系 全体のエネルギーが最低になるような配置は各パーツ が少しずつ我慢しあうことで成り立っているため、ど こが我慢するかの選び方が ~ *O*(*N*) 程度生じて、これ がエネルギーレベルの縮退として顕れるのである.

本稿では 2次元格子上の電子系およびスピン系を取 り扱う.一般にはフラストレーションと一口に言って も様々な種類があるが,今回は近接サイト間の2体相 互作用の幾何学的フラストレーションに着目する.*²

^{*&}lt;sup>1</sup> Wannier の原著論文 [1] には 0.338k_BN とあるがこちらがよ り正確な見積である. 久保健・田中秀数,「磁性」で指摘.

^{*2} フラストレーション系を設計するには,たとえば距離ととも に減衰する長距離相互作用を導入する,フラットバンドを作 る(量子的フラストレーション),などいくつかの方法があ る.後者は幾何学的フラストレーションと関係している.

ここでフラストレーション以外に「量子効果」とい うキーワードを簡単に説明しておこう.多くの格子モ デルで扱われる相互作用は、「古典的」および「量子的」 といわれるものに分けることができる.量子力学では、 粒子が実空間において古典力学でのようには局在せず、 波として広がった状態にあると捉える.つまり「量子 状態」とは、実空間で全自由度がとる配置のスナップ ショットが、複数パターン 重なり合ったものと言える. たとえばスピンが N 個あり それぞれが ↑、↓ の二状態 を取りうる場合を考えてみよう. N スピン状態の基底 は | ↑↓↑ … ↓〉 などのように $\Lambda = 2^{N}$ 通り、スピン配置 を並べたものになる.これらを $|n\rangle$ ($n = 1 ~ \Lambda$) と表そ う. この基底によるハミルトニアンの行列表現は、

 $\mathcal{H} = \Psi^{\dagger} \hat{H} \Psi$

$$= \left(|1\rangle, |2\rangle, \cdots |\Lambda\rangle \right) \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots \\ h_{21} & h_{22} & \\ \vdots & \ddots & \\ h_{\Lambda 1} & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1| \\ \langle 2| \\ \vdots \\ \langle \Lambda| \end{pmatrix}'$$
$$h_{ij} = \langle i|\hat{\mathcal{H}}|j\rangle \tag{1}$$

となる. もし h_{ij} が対角要素i = jのみノンゼロならば, 各基底はハミルトニアンの固有状態となっている: こ れは「古典的」状態である. ところがもしハミルトニア ンの非対角要素が存在した場合, 行列 (h_{ij}) を対角化す ること, つまり基底をユニタリ変換して重ね合わせる ことで固有状態が構築される. これを「量子状態」とし て捉える. 実空間での自由度の配置で基底を張った時 に, それらの間がハミルトニアンによって混じる $(i \neq j$ で $h_{ij} \neq 0)$ ことが量子効果である.

本稿で扱うハミルトニアンをいくつか紹介しておこう (図 2 参照). まず電荷自由度のモデルとして *tV* モ デルを挙げる.

$$\mathcal{H}_{iV} = \sum_{\langle ij \rangle} \left(-t_{ij}c_i^{\dagger}c_j + \text{H.c.} + V_{ij}n_in_j \right)$$
(2)

 c_j^+/c_j は *j* 番目の格子点での spinless fermion の生成/ 消滅演算子, $n_j = c_j^+c_j$ は数演算子である. t_{ij} , V_{ij} は, *i-j* サイト間のは遷移積分とクーロン相互作用である (以 後, 一様と考え *t*, *V* と書く). このモデルの Fock 空間 は 2^N 個の多粒子基底で, fermion がインデックス {*m*} で指定された一連のサイトにいるとして $\prod_{\{m\}} c_m^+|0\rangle$ と 表される. *t* を含む hopping 項は これらの基底を混



図 1 (a) 多体状態密度 $\Omega(E)$ のエネルギー依存性, (b) 正方格子イジングモデルの状態密度と比熱 C. $T_c = 0.5673J.$ (c) 同様に三角格子イジングモデルの 場合.式 (3) で $J = 0, J_z = 1$ とした.

ぜ, 量子的に働く. 一方, V の項を基底に演算しても状 態を変えないのでこれは *h_{jj}* という対角項 (古典的) に 相当する.

S=1/2 局在スピン自由度のみを考えたモデルとして XXZ モデルがある.

$$\mathcal{H}_{xxz} = \sum_{\langle ij\rangle} J(\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y) + J_z \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \tag{3}$$

 \hat{S}_{i}^{α} は *i* 番目のスピンの $\alpha = x, y, z$ 成分のスピン演算 子, J, J_z > 0 は反強磁性スピン交換相互作用, J_z/J は 相互作用の異方性をあらわす. ここで *z* 方向を量子化 軸にとって | ↑↑↓ …〉などのスピン配置を $\prod_{\{j\}} S_{j}^{+}|0\rangle$ と表し, 基底とすることができる. 上向きスピンを"仮 想的な粒子が存在する", 下向きスピンを"粒子がいな い"と解釈すると, *tV* モデルの演算子と $n_{j} - 1/2 \leftrightarrow \hat{S}_{j}^{z}$ や $c_j^+/c_j \leftrightarrow \hat{S}_j^{+/-}$ という対応関係が得られる. 実際, ス ピン自由度に相当する仮想的粒子は, 1 サイトに最大 で 1 粒子しかいられないという hard core 条件をも つ ボゾン (hard core boson) である. ^{*3} このことを念 頭に置くと, ハミルトニアンの XY 項 $\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y =$ $(\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+)/2$ はボゾンがサイト間を遷移する量子 的な項, Z 項は *tV* モデルのクーロン項と同様の古典的 な項であることがわかる.

スピンの量子性は *S* の大きさが小さいほど大きい. そのため 式 (3) で $J = J_z$ としてスピンの大きさを $S \rightarrow \infty$ とすると, スピンを古典的なベクトルとみなし た古典ハイゼンベルグモデルとなる.

そのほかに横磁場イジングモデルを挙げておこう.

$$\mathcal{H}_{\rm tri} = \sum_{j} \Gamma \hat{S}_{j}^{x} + \sum_{\langle ij \rangle} J_{z} \hat{S}_{i}^{z} \hat{S}_{j}^{z}$$
(4)

これはイジングモデルに $\hat{S}_{j}^{x} = (\hat{S}_{j}^{+} + \hat{S}_{j}^{-})/2$ という,ス ピンの *z* 方向成分を上下にフリップする横磁場が加 わったものであり,この横磁場 Γ が量子効果を担う.

これらのハミルトニアンはいわゆる格子上の強相関 電子系のミニマルモデルであるといってよい. 我々が 念頭に置くのは 遷移金属化合物の d 電子系や, 2 次元 有機 π 電子系など, 各原子や分子上に局在したワニエ 関数が電子軌道のよいユニットとして成り立っている 系である. これらの系では一般にクーロン相互作用が 強く, 電子が量子性を持ちながらも相互作用の効果で 各軌道に局在しやすくなっている. このような強相関 系のモデルの一つとして 最後の節で取り上げる拡張 ハバードモデルを紹介しておく.

$$\mathcal{H}_{\text{exth}} = \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(-t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{H.c.} + V_{ij} n_i n_j \right) + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$
(5)

電子は同じ軌道/サイトに σ =↑,↓ の 2 つの電子が同時に入るとオンサイトクーロン相互作用 *U* を感じる. また近接サイト間でもクーロン相互作用 *V_{ii}*をもつ.

 $V_{ij} = 0$ の場合がハバード模型である. ここで Uが非常に強く, かつ電子数が格子の数と同じ (half-filling)場合には, 一つの軌道あたり電子が 1 つずつ局在した





モット絶縁体となる. モット絶縁体の磁性は 各サイト の電子のスピン自由度が担う. その一番シンプルなハ ミルトニアンが 式 (3) で $J = J_z = 4t^2/U$ としたハイゼ ンベルグモデルである. しかし一般に物質にはしばし ば磁気異方性が存在するため, J_z/J が 1 からずれるこ ともある. $J_z/J \rightarrow \infty$ の極限では toy model の代表格 であるイジングモデルが実現する.

一方, half-filling からずれたところではたとえ $U \rightarrow \infty$ の場合でも電子は動き回ることができる. この電荷 自由度に着目すると, $V_{ij} \neq 0$ もとりいれた tV モデル が実現する. このとき, スピン自由度ももちろん存在す るが簡単のため無視している.

1/4-filling (1 サイトあたり電子 0.5 個) で, サイト が強い遷移積分 t_d でペアを組んだダイマーが, モット 絶縁体を形成しているときには, $U = \infty$ かつ V_{ij} が強 い領域で, 電荷がダイマー当たり 1 つずつ局在しなが らダイマーの 2 サイトを揺らぐため, 横磁場イジング モデルがよい有効模型となる [2].

強相関系で良く扱われるハバードモデルなどのモデ ル自体も,固体に内在する多くの自由度の影響を繰り 込んで十分簡単化された低エネルギー有効モデルだ が、実際にこれら量子多体モデルを真正面から解くこ とは多くの場合困難である.そこでこれら有効モデル の特定のパラメタ領域において,さらに高エネルギー 自由度を繰り込むと上記のようなより扱いやすい模型 に変換される.このような変換をどれくらい巧みに行 うかによって注目する物理現象を理解できるか否かが 決まるといってよい.これについては §3, §4 で述べる.

^{*3} tV モデルと XXZ モデルの違いは粒子が位置を交換する際に フェルミ統計に従うか ボーズ統計に従うか, であり, 1 次元 系では両者は Jordan-Wigner 変換によって (多くの短距離相 互作用ハミルトニアンでは)両者は厳密に一致する.



図3 (a) 三角格子の3副格子構造と(b) カゴメ格子 の3副格子構造(q = 0) および √3 × √3 構造.(c) イ ジングモデルと(d) 古典ハイゼンベルグモデルにお ける縮退に関係した局所磁気構造.

2 古典系におけるエネルギーレベルの縮退

隣接サイト間で古典的な反強磁性相互作用するスピン系を考える.まず1つの三角形を考え,その頂点を黒白灰の三色に塗り分ける.この三角形の辺をつなぎ合わせて作ったのが三角格子,頂点をつないだのがカゴメ格子である (図 3(a),(b)).このとき一様に黒白灰に色分けした構造を"3副格子構造"という.

イジングモデルでは,1つの三角形あたり 三辺の相 互作用エネルギーの和が一番低い *e* = −*J*/4 となるの は ↑2 つに ↓1 つの場合,あるいはその逆の場合である. そこで 黒を ↑,白を ↓ とみなそう.図 3(a) で灰をす べて白に塗り替えても黒に塗り替えても,ランダムに 白黒を選んでもエネルギーは変わらない.次に格子か らある 6 つの三角からなる六角形を切り出し,図 3(c) のように頂点の灰色を全部白に変えると,もともと白 だった中央のサイトは周りの白3+黒3と相互作用し ているため,黒に変えてもエネルギーは変わらない. そ のため更に白黒を入れ替える選択肢が生まれる. 同様 にカゴメ格子で6個の三角からなる星型構造を切り 出したとき,中央の六角形上に白黒が交互に並んでい る場合には,白黒を逆にしてもエネルギーは変わらな い. このような局所的な spin flip が許されているた めに 基底状態がマクロに縮退する. 三角格子とカゴメ 格子それぞれの場合の縮退度は それぞれ W~e^{0.323N}, e^{0.502N}[3] で,後者はヒルベルト空間の次元の半分を超 える巨大さである.

次にスピンを3次元のベクトルとみなした古典ハイ ゼンベルグモデルを見てみよう.1つの三角形上で三 辺の相互作用エネルギーの和が一番低いのは図 3(d) にある 120° 構造と呼ばれる配置で e = - J3/8 である. ところが今回は三角格子ではイジングモデルのよう な局所的なフリップは許されない. 六角形の中央サイ トが周りの白黒のスピンの配置でがっちり固められて いるからである. それに対して, カゴメ格子のほうは そもそも規則的に3色に塗り分ける方法にも q = 0, $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ などの選択肢があり、その縮退数は 1.13471^N にも及ぶ [4]. これらはスピンが同じ面に並んでいる ので coplaner 状態と呼ばれる. さらに, 破線で囲ま れた部分で二種類の向きのスピンが交互に並んでお りそれを取り囲むスピンが残りの1色だった場合,交 互に並んだスピンの磁化している面 (格子の面ではな い)を一斉に 2π の範囲で自由に回転させることがで きる. このように局所的に一斉回転させることのでき るスピンの並びは閉曲線を成しており, line defect や weathervane mode などと呼ばれる. マクロに縮退し た状態はすべて,特定の状態から出発してこれらの操 作で生成することができる [5].

ー般にフラストレートしたユニット, つまり最低エ ネルギーが一意に定まらないユニットを用意して, カ ゴメ格子のように頂点共有 (corner sharing) という 方法で格子を作ると フラストレートした系が得られ ることが知られている. 代表例には checkerboard 格 子, pyrochlore 格子などがあり, 其々 四角および正四 面体をユニットに持つ.



図4 corner sharing で構成されたフラストレート格子.

〈 付記 〉: corner sharing 構造の縮退度の簡単な見積りを紹介しておこう. *n* 個の古典スピンからなるユニットが N_u 個集まってできた $N = nN_u/2$ 個のスピン系を考える:

•イジングスピンの場合,ユニットの最低エネルギー状 態数 d として縮退度 $W = 2^{N} (d/2^{n})^{N_{u}}$. カゴメ格子では n = 3, d = 3 なので $W = 2^{N}(3/8)^{2N/3}$ である. checkerboard 格子, pyrochlore 格子は ice rule という規則で知られるよ うに 最低エネルギーを持つのが 2-in-2-out という 2 つのス ピンが内向き残り2つが外向きの状態なのでn=4,d=6 で $W = 2^{N} (6/16)^{N/2}$ である. この ice rule による縮退は氷 の残留エントロピー問題で古くから有名である [6]. また pyrochlore 磁性体は, 同様の縮退がイジングスピンによっ ておこる spin ice 物質として近年活発に研究されている [7]. •スピンが連続値をとる場合,各スピンが n 個成分をもつと して、ある回転軸を用意しそれを基準に全スピンでN(n-1) 個の値を決めると状態が決まる.一方,qスピンからなるユ ニット内でエネルギーを最低にする条件数を c 個とすると $f = N(n-1) - cN_u = N_u(q(n-1)/2 - c)$ だけの自由度が 基底状態に残る. checkerboard 格子, pyrochlore 格子では q = 4 で $c = 3(ユニット内の \sum S_i = 0$ となる条件数) なので ハイゼンベルグモデルn=3では $f=N_u$ つまりマクロな数 の自由度が残る. 一方, カゴメ格子 (q = 3) のハイゼンベルグ モデルの場合や, pyrochlore 格子 roter(2 次元ベクトル) モ デル (n = 2) では, それぞれ c = n − 1 = 3,2 とすると f = 0 となってしまう. これらの場合, 実際にはユニット間のスピ ンの関係から拘束条件数は c < n-1 となるために上記に述 べたような縮退は残る. そのためこの条件式は正確ではない のだが,フラストレーションの度合いの大まかな目安は与え てくれる. 実際,同じ古典ハイゼンベルグモデルでも,カゴメ 格子では次に述べる order by disorder が起こるのに対し, フラストレーションがより強い pyrochlore 格子では古典ス ピン液体的な状態を極低温まで保っている [8].

3 order by disorder

ー般に縮退といえば, ハミルトニアンと可換な演算 子が存在してその演算子に対応する対称性(主に空間 群)によって守られた essential degeneracy であり, そ の対称性が保たれる限り縮退は守られる. これに対し てフラストレート系の縮退は accidental degeneracy に相当するので, 揺らぎに弱い のが特徴である. 揺ら ぎといえば次節で議論する量子揺らぎ以外に温度揺 らぎがある: 絶対零度では縮退した無秩序 (disorder) 状態が有限温度で秩序化 (order) するという 一見, 熱力学に反した現象が起こることがある *4. このと き $k_BT = 0$ が特異点となり $k_BT \neq 0$ になった瞬間 異なった状態になる. このような現象は **"order by disorder"** とよばれ Villain によって提唱された [9].

カゴメ格子古典ハイゼンベルグモデルは order by disorder の代表例である [5]. 前節で述べたように マ クロに縮退した基底状態には, defect line による零 モードが無数に存在する. その中でも スピンがすべ て同じ面内に拘束された 特定の coplaner 状態は零 モードの数が他の状態に比べて多い. 実際,図 3(b)の √3 × √3 状態では, N/3 個ある六角形がすべて零モー ドを形成する.この零モードの数は大雑把にいうと揺 らぎの強さを反映しており, coplaner 状態は, 有限温 度になった途端 この揺らぎで結ばれる状態の数が他 の基底状態と比べて多い. そのため coplaner 状態が, エントロピーの利得により, $k_BT < 10^{-3}$ |J|の領域で実 現することが解析的な見積もりやモンテカルロ計算な どで確かめられている [10, 11]. $10^{-3}|J| \leq k_BT \leq 0.1|J|$ においては、各三角形のスピンは 120° 配置をとる が、120°スピンの作る面が向く方向は三角形ごとに バラバラになった,いわゆる古典的スピン液体状態 が安定で, さらに温度を上げるとようやく系は普通 の常磁性へと移行する.特徴的なのは状態密度で, $\ln \Omega(E)/\Omega(E_0) = \gamma \ln(E - E_0)/|J|$ という 冪がちょうど 低温比熱 $C/k_B = \gamma = 11/12[5]$ の値となるような状態 がほぼ全域にわたって続く [12].

なお coplaner 状態の磁気的性質は長年問題になっ ていた. nematic[5], octapole[10] など 120° スピンの 面ベクトルが多重極秩序をもつ節が有力と考えられて

^{*4} 通常はより高温の,エントロピーが高い状態のほうが無秩序 となる.しかし,基底状態よりもエントロピーが高い低エネル ギー励起状態が存在する場合,その状態が有限温度で出現し うる.本稿の古典カゴメハイゼンベルグモデルの例では,マク ロな基底状態がいくつかの部分空間に分けられ,その中で特 にエントロピーが高い特定の部分空間が有限温度で選ばれて "擬秩序"が成立する.

きたが, 最近になってモーメントの大きさが 1/10 程 度まで縮んだ √3 × √3 の磁気秩序が立っているとい う結果も報告されている [11]. *⁵ 古典系でもこのよう にデリケートで数値的取り扱いが難しく, ごく最近に なっても議論が沸騰する問題はいくつか存在するので ある.

4 有効ハミルトニアン

多体系のヒルベルト空間の次元 Λ はシステムサイ ズNとともに~ exp(N) 的に増大することは §1 で述 べた. そのため, 量子多体ハミルトニアンの基底状態お よび低エネルギー状態を理解するにあたって有限サイ ズ効果は宿敵である. しかしそもそも, たとえばハバー ドモデルやハイゼンベルグモデル自体, もともとの物 質をモデル化するにあたって状況に応じて大幅な簡単 化を行ったものである. それをさらに簡単化して解け る問題に落とすことは自然な成り行きである.

ハミルトニアン *H* とその固有値 *E*, 固有状態 |ψ⟩ を 求めたい.

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \qquad |\psi\rangle \in \mathbb{W}$$
 (6)

これに対して, ヒルベルト空間 W のうち特定の部分空 間 W_0 にのみ属する波動関数 $|\phi\rangle$ について次の関係を 満たすような有効ハミルトニアン \mathcal{H}_{eff} を得たい, とい うのが問題設定である.

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}|\phi\rangle = E|\phi\rangle, \qquad |\phi\rangle \in \mathbb{W}_0 \tag{7}$$

ここで, W₀ に射影する演算子 *P*, およびそれの直交補 空間 W_⊥ への射影演算子 *Q* を用意すると, *P* + *Q* = 1 を 式 (6) の両辺に作用させて,

$$\mathcal{PHP}|\psi\rangle + \mathcal{PHQ}|\psi\rangle = E\mathcal{P}|\psi\rangle$$

$$\mathcal{QHP}|\psi\rangle + \mathcal{QHQ}|\psi\rangle = E\mathcal{Q}|\psi\rangle$$

$$\rightarrow \mathcal{H}_{\text{eff}}|\psi\rangle = E\mathcal{P}|\psi\rangle$$

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{PHP} + \mathcal{PHQ}\frac{1}{E - \mathcal{QHQ}}\mathcal{QHP} \qquad (8)$$



図 5 (a) Schrieffer-Wolff 変換の模式図. (b) 非 摂動ハミルトニアンの W_0, W_\perp での期待値 $E_m = \langle m | \mathcal{H}_0 | m \rangle, E_l = \langle l | \mathcal{H}_0 | l \rangle.$

この表式は厳密だが, 未知の E をあらわに含んでい るので実際にこのまま使えるわけではない. そこで 近似の出番である. 第二項は, 捨てた空間 W_⊥ から の寄与を繰り込む効果に相当しており, この効果をど れくらいうまく取り込むかで得られる波動関数やエ ネルギーの精度が決まってくる. 式 (8) の第二項を実 効的に *PHQ* で 展開したものに相当する Rayleigh-Schrödinger 摂動論が, 過去の夏の学校でも紹介され ているので参照されたい [13]. 摂動論以外にも近似の 仕方にはいろいろな種類があり, 特に有限格子系の数 値計算ではいろいろな方法論が開発されている.

一方, ハミルトニアンのエルミート性を保持しなが ら質的には Rayleigh-Schrödinger と同等の結論が得 られる摂動論として Schrieffer-Wolff 変換がある [14]. 今回のように W_0 に縮退がある場合には見通しが良 い. ハミルトニアンを $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$ のように非摂動 項と摂動項に分け, $\mathcal{H}_0|m\rangle = E_m|m\rangle$, $\mathcal{H}_0|l\rangle = E_l|l\rangle$ とな るように W_0 の基底を { $|m\rangle$ }, W_\perp の基底を { $|l\rangle$ } を選 ぶ. これに対して, *S* をうまく選ぶことによって,

$$\mathcal{H}_{\rm eff} = e^{-S} \mathcal{H} e^{S} , \qquad S^{\dagger} = -S$$
$$e^{S} = 1 + S^{(1)} + \frac{1}{2!} S^{(2)} + \frac{1}{3!} S^{(3)} + \cdots$$
(9)

のように \mathcal{H} をユニタリ行列 e^{S} で 正準変換した形, \mathcal{H}_{eff} が, $\mathbb{W}_{0} \geq \mathbb{W}_{\perp}$ の間の行列要素 $\langle m | \mathcal{H}_{eff} | l \rangle = 0 \geq$ なるようにできる (図 5). $S^{(n)}$ は \mathcal{H}' の n 次を含む 項である. 計算の詳細は省くが, \mathcal{H}' について各次数 で $\langle m | \mathcal{H}_{off}^{(n)} | l \rangle = 0 \geq$ なるように小さな n から逐次的に

^{*5} 注意しておきたいのは、この系は2次元で連続対称性をもつので Mermin-Wagner の定理からこれらの"秩序"は真の長距離秩序にはなりえず冪的に減衰する臨界的な"秩序"であることだ、1次元の場合と同様、このようなときはどの"秩序"が最も長距離まで相関を伸ばしているかを議論する.

 $S^{(n)}$ を求め,それを使って $\mathcal{H}_{eff}^{(n)}$ を求めると,たとえば2次以下の項は以下のようになる: $h_{mm'}^{eff} = \langle m | \mathcal{H}_{eff} | m' \rangle$,

$$h_{mm'}^{\text{eff }(0)} = E_m \delta_{mm'} h_{mm'}^{\text{eff }(1)} = h'_{mm'} h_{mm'}^{\text{eff }(2)} = \frac{1}{2} \sum_l h'_{ml} h'_{lm'} \Big(\frac{1}{E_m - E_l} + \frac{1}{E_{m'} - E_l} \Big).$$
 (10)

2次の項は $|m\rangle \rightarrow |l\rangle \rightarrow |m'\rangle$ のように W_0 に \mathcal{H}' を 演算すると W_{\perp} に遷移してまた戻ってくるプロセス をすべて足し合わせたものである. 注意したいのは $E_m \neq E_{m'}$ でも構わないことであり, $E_l \gg E_m$, $E_{m'}$ であ ること (図 5(b) のように W_0 と W_{\perp} が \mathcal{H}_0 について エネルギー的によく分離していること) が, 摂動が良い 近似になる条件である. 3 次以上が登場することは普 通の系の場合はあまりないが, フラストレート系の場 合, 高次のリング交換項が特定のループの周りの重要 な揺らぎを担うことがある. 得られた有効ハミルトニ アンは

$$\mathcal{H}_{\rm eff} = \sum_{mm'} |m\rangle \, h_{mm'}^{\rm eff} \, \langle m'| \tag{11}$$

と表せる. しばしば, これと同じ行列表現が 同じ空間 W_0 について得られるように, \mathcal{H}_{eff} を具体的に新たな 有効演算子を導入して表すことが多い. 典型的な例で は, ハバードモデルの $U \rightarrow \infty$ 極限での t/U に関する 2次摂動の有効ハミルトニアンとして, スピン演算子 を導入して得られるハイゼンベルグモデルである.

5 量子揺らぎ

§1 で述べたように、古典的な状態は、実空間で、粒子 が局在したり、あるいはスピンの配置が一意に定まる ような状態である.量子揺らぎはそれらを混ぜる働き をする.注意してほしいのは対称性が異なる状態は混 成しないこと、混成の度合いは古典的なエネルギーが 近いほど大きいこと、である.フラストレート系でこの 揺らぎの効果が特に顕著なのは、マクロな数の状態が 縮退、あるいは擬縮退しており、それらが対称性と関係 ない縮退であるからである.

ハイゼンベルグモデルなどでよく行われる処方箋と してスピン波理論がある. *S* = ∞ の古典極限から出発 して 1/*S* でハミルトニアンを展開することによって量 子揺らぎを取り入れていく. ところがこの方法の場合 は,出発点である古典極限の状態が well defined でな くてはならない.マクロな縮退があるような disorder 状態はよい出発点とはならないのである.

前述の縮退のある摂動論はその点,非常に有用である. 古典極限の縮退している基底状態全体を W₀ として,量子揺らぎの項を 摂動的に H' として扱って有効 モデルハミルトニアンを導出する例を以下でいくつか 取り上げてみる.

5.1 XXZ と *tV* モデルの強結合理論

§1 の式 (3) で取り上げた三角格子上の XXZ モデ ルを考えよう. 出発点は $J/J_z \rightarrow 0$ のイジングモデル で, 基底状態のエネルギーは JzN/4 でマクロに縮退し ている. 摂動項 $\mathcal{H}' = J \sum \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y$ は, (S_i^z, S_j^z) の (↑,↓) ↔ (↓,↑) という2つの状態を混成する. このこと だけから直ちに h^{eff (1)} のレベルで古典極限の基底状態 のうちで total S^z を変えないもの同士が混成すること がわかる*6. その結果, t の1次で縮退が解け, 古典状態 の重ね合わせによって図6にあるような supersolid 状態が実現する [15]. これは 1 つの副格子が S^z の 対角長距離秩序を持ち,他の2つの副格子が S^x の非 対角長距離秩序をもった状態で,前者が固体,後者が honeycomb 格子上の液体と読めるので super solid と呼ばれる. supersolid は元来これら2種類の秩序が 系全体で一様に共存する状態として探索されていたが 実際に格子系で見つかったのは2つの秩序が空間的に 住み分かれた状態であった.

spinless fermion の tV モデルでも統計性が異なれ ども同様の現象が起こり, 筆者らが pinball liquid と 名付けた状態が形成される [16]. このあたりは詳しく は固体物理の解説記事を参照されたい [17]. Fermion を電荷自由度と捉えると, pinball liquid は絶縁体 (固 体)と金属 (液体) が共存した状態とみなせる. tV モ デル自体は極限まで電子系を単純化したモデルだが, 最近, これより一段二段と複雑なハバードモデルや2 軌道金森ハミルトニアンなどでも pinball liquid が実 現することも分かっており [18], 現実にその候補物質 AgNiO₂ などが見つかってもいる.

^{*6} 数値的に有限サイズ系で W₀ で S² が等しいすべての状態間 が *H*' でつながってまじりあうことは筆者も確かめてある.



図 6 (a) 三角格子上の XXZ モデル, tV モデルの 強 結合領域での基底状態 (supersolid, pinball liquid): J/J_z および t/V 1 次の摂動の範囲で, 古典イジングモ デルの基底状態をウェイトをかけて重ね合わせたも のになっている. (b) 横磁場イジングモデルの強結合 領域での基底状態. dual lattice である honeycomb 格子上の quantum dimer モデルの v = 0 の場合に 相当する. 太線は dimer を示す. (c) QDM の基底状 態の相図.

5.2 横磁場イジングモデルと QDM

同じイジングモデルから出発して今度は式(4)で 横磁場を摂動項として加えてみよう.すると,更に 少し面白い状況が生じる.まず,図 6(b)にあるよう に dual 格子である honeycomb 格子を三角格子に 重ねて描き,三角格子の各ボンドの両端が同じ色の



図 7 (a) 三角格子上の QDM の (a) 模式図 と (b) 基 底状態の相図. 丸印は flippable plaquette を示す.

場合 (ferro bond) にそれと直交する honeycomb bond に"dimer"と呼ばれる太い線を置いてみよう. イジングモデルの基底状態では すべての三角形の頂 点が黒黒白,黒白白の組み合わせのいずれかなので, honeycomb 格子の各頂点から必ず1つの dimer が 出ている. このような配置を "dimer covering" と 呼ぶ. ここに 横磁場項 Γ(S⁺_i + S⁻_i)/2 を加えると Γ/J の一次で これらの dimer covering 状態が混じり合 う. 具体的には三角格子の六角ユニットを取り出し たとき周囲の6サイトが黒白交互に3つずつからな る場合,中央のサイトの色を Γ項によって黒↔白 のようにひっくり返せる. これは dimer の言葉で言 うと honeycomb 格子のユニット六角形の辺に沿っ て dimer が1つおきに並んでいる場合にそれらを π/6 だけ回転させることに相当する. このような六 角形を "flippable hexagon" という. 実はこのよう な dimer を主役にしたモデルは Quantum dimer model (QDM) と呼ばれ [19], 以下のようなハミルト ニアンで表される.

$$\mathcal{H}_{qdm} = \sum_{\bigcirc} -g(|\bigtriangledown\rangle\langle\bigcirc| + \mathrm{H.c.}) + v(|\diamondsuit\rangle\langle\bigcirc| + |\diamondsuit\rangle\langle\bigcirc|)$$
(12)

flippable hexagon の運動エネルギーがgで,相互作 用エネルギーがvである. v = 0の場合が強結合の 横磁場イジングモデルに相当する. honeycomb 格 子 QDM の基底状態はモンテカルロ計算で調べら れており 図 6(c) のような相図が得られている [20]: columnar, plaquette, staggered という3つの相はい ずれも dimer が空間対称性を破った長距離秩序状態 である. plaquette 状態は六角形上でダイマーが混 成した unit が, 並進対称性を破って valence bond crystal(VBC) を作った状態である. これを横磁場イジ ングモデルに戻すと bond order と呼ばれる, 有限温 度まで広がった相に対応する.

次に QDM を nonbipartite な格子に拡張すること を考えよう. その代表例が三角格子である. ハミルト ニアンは次式で与えられ, dimer covering のルールは 前と同じである (図 7(a)).

$$\mathcal{H}_{\rm qdm} = \sum_{\square}^{N_p} -g(|\square\rangle \langle \square | + \mathrm{H.c.}) + v(|\square\rangle \langle \square | + |\square\rangle \langle \square |)$$
(13)

今回は plaquette(平行四辺形)上に dimer を交互に並 べた flippable なユニットが g で量子的に揺らぐ. 相 図を honeycomb 格子の場合と比べてみると, g $\leq v$ あたりに short range RVB 相が出現しているのがわ かるだろう [21]. この RVB 相は 理論モデルで同定さ れている, 数少ない,トポロジカル秩序相 (スピン液 体)の一つである. QDM はもともと正方格子において Rokhsar-Kivelson (RK) point v = g で RVB 相を実 現するモデルとして提案された [19]. しかし正方格子 や honeycomb 格子のような bipartite 格子の場合に は 1 点でしか RVB 相が出なかったため 他の格子での 探索が進んだのである. このことを念頭に少し詳しく QDM を見てみよう [21].

まず, RK point v = gでは, すべての dimer covering のパターンを同じ重みで足し合わせた RK 状態が厳密な基底状態となっている. このことは, 系を 孤立した plaquette の集合とみなして議論すると見 通しが良い: まず flippable plaquette の総数を N_{fl} とする. nonflippable plaquette は \mathcal{H}_{qdm} を演算す ると消えてしまうので エネルギーは零, flippable plaquette はポテンシャルエネルギー v, 運動エネ ルギーを高々 -g だけもつので, 基底エネルギーは $E_0 \ge \min(0, N_{fl}(v - g))$ と評価される. 一方, RK 状態 $|\text{RK}\rangle = N_c^{-1/2} \sum_{c=1}^{N_c} |c\rangle$, $(|c\rangle$ は dimer covering 配置, 全部で N_c 個存在する) のように書けるのでそのエ ネルギーは $E_{\text{RK}} = \langle \text{RK} | \mathcal{H}_{qdm} | \text{RK} \rangle = (v - g) \langle \hat{n}_{fl} \rangle$ と 表せる $(\hat{n}_{fl}$ は flippable hexagon の数演算子). RK

point では E_{RK} も基底エネルギーの下限 E_0 も零と なるので $|RK\rangle$ が基底状態となるのである. もともと Anderson-Fazekas によって提案された RVB, つま り Resonating valence bond 状態は [22], スピン液体 という概念の原型で, ざっくりいうと spin singlet を dimer とみなしたとき, それが格子を動き回るような 形で量子力学的に揺らいだ状態である. この概念がよ り具体性を帯びたのがフラストレーション系の理論研 究が進んだ 2000 年代であり, 実際, RK 状態はまさに 最初に提案された概念通りの状態になっている.

Staggered 状態は $N_{fl} = 0$ なので v > g でエネル ギーが零の基底状態となることは上記の議論から自明 である. 一方 最も左側の columnar 状態については $v/g = -\infty$ の極限から出発しよう: 極限で最低エネル ギーをもつのは様々な古典的な maximally flippable な ($\langle \hat{n}_{fl}(c) \rangle$ が最大の) dimer 配置 {*c*} で $O(e^L)$ 程度縮 退している. そのうち $g/v(\ll 1)$ の4次および6次の 摂動で irregular な配置はエネルギーが下がりきらず, columnar 状態が選ばれる ^{*7}. これは量子揺らぎによ る order by disorder の一例である.

5.3 カゴメ格子上のスピン系

それでは長らく探索されたスピン液体が実現した三 角格子 QDM は, どんな系の低エネルギー有効モデル になっているのだろうか? そこで再びカゴメ格子に戻 り, XXZ モデルを考えよう [23]. 最近接の相互作用 J 以外に 各六角形内の次近接および J', 2つおきの J'' という相互作用を加え, J = J' = J''および $J_z = J'_z = J''_z$ とすると カゴメの h 番目の六角形の 6 つのスピンの 総和を Ŝ_h として $\mathcal{H} = \sum_{h=hex} J_z \hat{S}_h^{z2} + J(\hat{S}_h^{x2} + \hat{S}_h^{y2}) + const$ のように表すことができる. §2 でみたように 縮退した状態をもつユニットを corner sharing で組み合わせた格子は 高い縮退度をもつ. 今回のユニットはカゴ $メの六角形で, <math>J_z/J \to \infty$ の古典極限で $S_h^z = 0$ (白3黒 3) の 20 通りの状態が最低エネルギーをもつ. そこで, 格子全体の古典的基底状態を, 今度は六角形の中心を 結んでできる三角格子 (図 8(a)) で表してみよう. 三角

^{*&}lt;sup>7</sup> やる気のある読者は $|m\rangle \rightarrow |l\rangle \rightarrow |l'\rangle \rightarrow |l\rangle \rightarrow |m\rangle$ という4次摂 動のプロセスのエネルギー利得 $h'_{ll'}h'_{ll'}h'_{ll'}n'_{lm}/\prod_{s=l,l',l''}(\epsilon_m - \epsilon_s)$ を columnar 状態および irregular な配置の一例で評価 してみよう.

格子の各 bond が元の格子点の白 (」) をよぎるとき そ の bond に dimer を置く操作をすると, 前述の QDM での dimer covering とは異なった dimer 配置が得ら れる (図 8(b)): 今回のルールは 三角形の各サイトから 3つの dimer bond が出ていること である. 次に J/J_z による摂動に移ろう: 有意な最低次のプロセスとして 2次で縮退した状態を混ぜる ring exchange 項があ る. 図 8(b) の bowtie の 4 つの頂点のスピンを考え, J あるいは J' の項を 2 回演算するとスピンが交互に並 んでいるときそれら 4 つが巡回して (ring exchange) 別の古典的基底状態にうつる. 有効ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{ring}} = -J_{\text{ring}} \sum_{\text{bowtie}} \left(S_1^+ S_2^- S_3^+ S_4^- + \text{H.c.} \right)$$
$$J_{\text{ring}} = 2(J^2 + J'^2)/J_z$$
(14)

であり、これは QDM で dimer を flip する操作その ものである. つまりこの拡張カゴメ XXZ モデルは 三 角格子 QDM の v = 0 の場合に相当する. 但し dimer covering のパターンが前節の場合と異なるので、式 (13) が演算するヒルベルト空間の構成が変わること からこれを extended QDM と呼ぼう. 基本的には extended QDM も QDM と同様の基底状態を持つと 考えられている [23].

ちなみに, 拡張カゴメ XXZ モデルに磁場 H をかけ ると – $H\sum_i \hat{S}_i^z$ という Zeeman 項が生じるので磁場の 強さに応じて 系の磁化 $M = \sum_i S_i^z$ の値が変化する. 特に M/M_s = 1/3, 2/3 (全スピンが上向きの場合の磁 化 M_s = N/2)の場合は六角形の6スピンを ↑:↓=4:2, および 5:1 の割合で割り振った状態に相当する.こ れらの状態は三角格子 QDM の異なったヒルベルト 空間にマップされる:後者は三角格子1サイトあたり 1 dimer を割り振った通常の dimer covering が実現 する. 一方, 前者は 2dimer/1 サイトなので図 8(c) の ように dimer をつないだ閉曲線が交わることなく格 子を覆いつくす"fully packed loop covering"と呼ば れる dimer 配置となる. そこに \mathcal{H}_{ring} を作用させる と loop が2つつながって大きな1つの loop になる, loop が融合して1つになるなど, loop が構造を変え ながら格子空間を動き回るという状況が生じる [24].

 $M/M_s = 0, 1/3, 2/3$ のいずれの場合も QDM や extended QDM の v = 0 で 実現するのは valence bond crystal 相である.実際, スピン液体を得るためには



図 8 (a) カゴメ格子 XXZ モデルの古典的基底状 態の例と, (b) 対応する三角格子 QDM の dimer 配 置. bowtie 上の 2 次のスピンフリッププロセスが dimer flip に相当する. (c) 磁場 *H* をかけたときに 現れる 1/3 磁化プラトー相に相当する fully packed loop model.

QDM の相互作用 v 項を元のハミルトニアンに戻して 得られる やや複雑で非現実的な項を加えねばならな い. もともと J = J' = J''の設定自体, かなり非現実的 な設定なので, QDM におけるスピン液体相を現実的 なモデルで得るにはまだまだ相当の努力が必要という ことになる. ちなみに, J' = J'' = 0のカゴメ格子ハイ ゼンベルグモデルはスピン液体の有力候補であり, そ の低エネルギー有効モデルとして QDM より少し複雑 な dimer model が盛んに研究されている. その結果, 有効 dimer model が スピン液体相と非常に近いパラ メタ領域にいることも報告されている [25]. またハイ ゼンベルグモデル自体も J' を入れるとスピン液体が 安定化するという結果もある [26].



図 9 カゴメ格子拡張ハバードモデルの $U \gg V \gg t$ 領域における有効モデル. (a) 1/6- (b)1/3-filling の 場合の古典的基底状態の例. dimer model の太線 は \uparrow , 二重線は \downarrow の電子をあらわす.) (c)1/3-filling の場合の基底状態の相図 [29]. (d) $g \gg J$ における fully packed loop 上の動的 AB 副格子構造. 印をつ けられた flippable hexagon を回転させると, loop の組み換えが起こる.

5.4 カゴメ格子上の電子系

ここまでは量子スピン系の話が多かったが,電子系 でもこのような物理が生じる例を,筆者の仕事も交え て紹介したい.カゴメ格子上で,式(5)の拡張ハバー ドモデルの $U/t \rightarrow \infty$, $U \gg V$ の強結合極限 (古典極 限)を考える.電子密度が $\rho = N_e/N = 1/3$ 及び 2/3 (1/6-及び 1/3-filling)の場合,電子は三角形1個あた り各々1及び2電子が,二重占有なしで存在する,とい う拘束条件が最低エネルギー状態に課せられる.前か ら何度も述べたようにこれらはマクロに縮退している.

まず 図 9(a) の 1/6-filling の場合を見てみよう. dual の honeycomb 格子をつくり, カゴメで電子が いるサイトを honeycomb dimer bond でおきかえる と, QDM で出てきた dimer covering 構造が得られ る. $t/U \ll 1$ の摂動を考えると, dimer covering のマ クロな縮退を解くプロセスは,電荷がカゴメ格子の六 角形に1つおきに並んでいるときに 隣のサイトに順 次飛び移る 3次の ring exchange 項である. これは dimer flip 項に相当し,式 (12) の第一項で $g = 6t^3/V^2$ としたものである. そのため電荷自由度は QDM の v = 0 における plaquette VBC に相当する長距離秩序 を形成する. ここで各電荷自由度には, スピンがのっ かっていることも忘れてはならない~dimer もスピン の↑,↓に対応して二種類に塗り分けておく.しかし, 元々この摂動の範囲ではスピン間の直接の交換相互作 用はないわけだから 一見ただの free spin の常磁性が 起こりそうだ. ところが flippable hexagon の存在が ヒルベルト空間を混ぜこぜにするため,長岡強磁性と 同じ機構で kinetic ferromagnetism が生じることが わかっている [28].

1/3-filling の場合の電子配置は (図 9(b)), honeycomb 格子の fully packed loop 構造にマップされる [29]. loop はすべて閉曲線を成し, 互いに交わらない. loop がないところ (hole 描像に相当) に着目すると これは dimer covering と同じ構造になっているわけ なので, 結局この場合も QDM の v = 0 と同様の, g に よる電荷のダイナミクスが実現する. ところが今回は 電荷が loop 上で隣同士になるので ring exchange 以 外にハイゼンベルグ相互作用 $J = \frac{2t^2}{U-V} + \frac{2t^3}{V^2}$ が顕わ に存在する. この J には, 通常の 2 次摂動のスピン交 換プロセス以外に, 三角形の空いているサイトを利用 した 3 次のプロセスも加わっていることにも留意した い. つまり U と V の大きさの具合, および t の符号に 応じて J は負 (強磁性的) にもなりうるのである.

そこで 1/3-filling の場合は スピンの相互作用 $J \geq$ 電荷のゆらぎ gの両方を考えねばならない. 図 9(c) に あるように $J \geq g$ の大小で系の基底状態は 2 つに分け られる: g = 0 側ではじまる short loop 相とは そもそ も電荷が動き回れない/動きづらい場合に生じる. こ のとき ハイゼンベルグ J 項によってスピンは反強磁性 的相関を loop 上で発達させる. 系全体で loop を全部 合わせた長さはボンド N/3本分で一定値なので,これ をどんな長さの何個の独立な loop に分けるかを考え よう. そのために loop 上のスピン系の 1 ボンド当た りのエネルギーを知る必要がある~1 次元の有限サイ ズ L のハイゼンベルグスピン鎖のエネルギー E(L) は L の関数として厳密に求まっている. そして L が短い ほど E(L)/L が低いのである. 今回許される配置で最も 短い loop は 6 ボンドからなるものであり,実際 J に よって電荷が図のように秩序化し,有限の電荷ギャッ プを生じる. このときスピンは六角形内で短距離反強 磁性相関を発達させた S = 0 の状態にある. これが short loop phase である.

gが大きいときは もっと奇妙な状況が生まれる. J = 0 において loop は g によって格子を動き回って 分離したり融合したりしている. この loop は動的な 2つの副格子 AB に分けられる. 動的とは loop が組 み変わっても常に各 loop 内で ABAB··· という構造 が保たれるという意味であり,ある特定の bond に着 目してもこの bond は g に応じて A にも B にも, 電子 がいない状態にもなりうる. loop の dynamics によっ て A と B が混ざることはないので, A の運動は B と 独立に考えられる. その結果, 其々の副格子が kinetic ferromagnetism の機構でスピンを揃えることになる ~1/6-filling 系が二つ合わさって loop を作っている と思えばイメージしやすいかもしれない. これらの g によって生じた二つの巨大な副格子スピンが,]によっ て相互作用して 反強磁性長距離秩序を形成している のである. loop が動き回った結果 plaquette VBC 構 造ができるのだが, plaquette 上には A 副格子の↑ス ピンが, そのまわりに B 副格子の↓が配置したような 構造をとっている. 一見ただの磁気秩序のようだがそ の背後にはフラストレーション系ならではの電荷のダ イナミクスがあるのである. このように,gと Jの大小 の両側の領域でそれぞれ,スピンと電荷の自由度がフ ラストレーションによって絡み合って互いに影響を及 ぼしあう事態が,何の変哲もない拡張ハバードモデル で起こっていること自体ちょっと不思議なことではな いだろうか.

6 おわりに

以上駆け足で、物性理論研究でよく顔を出す横磁場 イジングモデル、XXZ モデル、拡張ハバードモデルな どがフラストレートした格子の上に乗ったときに多彩 な状態が得られる様を紹介してきた.本稿で一貫して 行った処方箋は、強結合(古典)極限のマクロに縮退し た低エネルギー状態から出発して、低エネルギー自由 度のみを取り出して量子揺らぎの効果を摂動で取り入 れ、有効モデルを構築する、というものである.そこで 新たな形をとった自由度が動きまわり、重ね合わさっ て order by disorder による nontrivial な秩序や、ス ピン液体のような量子力学的な無秩序状態を形成す る.見ての通り様々なモデルは互いに密につながって おり、あるモデルで得られる描像が他のモデルで、一見 雲をつかむようだった量子多体状態の性質を浮き彫り にしてくれる.

これらの研究の蓄積は,量子力学や多体問題といっ た基本的な物理を実地で教えてくれるのだがどのよ うなトピックスでもそうであるように, すでに解説に 書かれているような話の多くは既に過去の話である (今からこのような研究を始めようと思ってはいけな い!). それではフラストレート系で残っている大き な問題とは何だろうか?すぐ念頭にあがることの一つ は本稿でも紹介したスピン液体相の同定の方法論,お よび現実的なスピン液体相を発見することである.こ ちらも 2000 年代に入ってから相当研究が進んではい るが、その一角であるトポロジカル秩序相(本稿でで てきた QDM の RVB 相もその一つで, 分数量子ホー ル効果と同じクラスの状態である)を同定する方法が いくつか提案されたものの (例えば [26, 30] など), ま だ議論は沸騰しており その全体像はまだわかってい ない. そもそもトポロジカル秩序というものはいわゆ る秩序パラメタのような熱力学量で同定されるもので はなく(比熱や磁化率などの熱力学量の異常で相転移 が同定されるものではなく) 量子力学ならではの波動 関数系全体にわたる非局所構造によって特徴づけられ たものである. そのつかめるようでつかめなそうなと ころが面白いところではあるのだが, それだけに 多く の努力が今後も求められていることは間違いないだろ う.物性物理の概念は,実験で証明されて初めてそれが 現実の物理として受け入れられる. だからこそ, 実験 的なアプローチが困難なこうした問題に対しても, toy model における解析で終わるのではなく 現実に実験 で観測できるような「物理量」は存在するのか?存在 するならばそれをどうやって探せばよいか?を常に念 頭におきながら理論を展開したいものである.

参考文献

- [1] H. Wannier, Phys. Rev. 79, 357 (1950).
- [2] C. Hotta, Phys. Rev. B 82, 241104R (2010).
- [3] K. Kano and S. Naya, Prog. Theor. Phys. 10, 158 (1953).
- [4] R. J. Baxter, J. Math. Phys. 11, 784 (1970).
- [5] J. T. Chalker, P. C. W. Holdsworth, E. F. Shender Phys. Rev. Lett. 68, 855 (1992).
- [6] J. D. Bernal and R. H. Fowler, J. Chem. Phys. 1, 515 (1933); L. Pauling, J. Am. Chem. Soc. 27, 2680 (1935).
- [7] 例えば T. Fennell, et al., Science 326, 415 (2009).
- [8] R. Moessner, J. T. Chalker, Phys. Rev. B 58, 12049 (1998)
- [9] J. Villain et al., J. Phys. (Paris) 41, 1263 (1980).
- [10] M. E. Zhitomirsky, Phys. Rev. B 78, 094423 (2008).
- [11] G.-W. Chern, R. Moessner, Phys. Rev. Lett. 110, 077201 (2013).
- [12] S. Schnabel, D. P. Landau, Phys. Rev. B 86, 014413 (2012).
- [13] 倉本 義夫,物性研究 87(5) 727(2007).
- [14] J. R. Schrieffer, P. A. Wolff, Phys. Rev. 149, 491 (1966).
- [15] S. Wessel, M. Troyer, Phys. Rev. Lett. 95, 127205 (2005); D. Heidarian, K. Damle, ibid. 95, 127206 (2005); R. G. Melko, A. Paramekanti, A. A. Burkov, A. Vishwanath, D. N. Sheng, L. Balents, ibid. 95, 127207 (2005).
- [16] C. Hotta, N. Furukawa, Phys. Rev. B 74, 193107 (2006).
- [17] 堀田 知佐, 古川 信夫, 固体物理 45, 255 (2010); C. Hotta, Crystals 2, 1155 (2012).
- [18] L. Cano-Cortés, J. Merino, S. Fratini, Phys. Rev. Lett. 105, 036405 (2010) ; A. Ralko, J. Merino, S. Fratini, Phys. Rev. B 91, 165139 (2015).
- [19] D. S. Rokhsar and S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. 61, 2376 (1988).
- [20] R. Moessner, S. L. Sondhi, P. Chandra, Phys. Rev. B 64, 144416 (2001).
- [21] R. Moessner, S. L. Sondhi, Phys. Rev. Lett. 86, 1881 (2001).

- [22] P. W. Anderson, Mater. Res. Bull. 8, 153 (1973); P. Fazekas and P. W. Anderson, Philos. Mag. 30, 423 (1974).
- [23] L. Balents, M. P. A. Fisher, and S. M. Girvin, Phys. Rev. B 65, 224412 (2002).
- [24] X. Plat, F. Alet, S. Capponi, K. Totsuka, Phys. Rev. B 92, 174402 (2015).
- [25] 例えば, D. Poilblanc, M. Mambrini, D. Schwandt, Phys. Rev. B **81**, 180402R (2010).
- [26] H.-C. Jiang, Z. Wang, L. Balents, Nature Phys. 8, 902 (2012).
- [27] S. S. Gong, W. Zhu and D. N. Sheng, Sci. Rep. 4, 6317 (2014).
- [28] F. Pollmann, P. Fulde, K. Shtengel, Phys. Rev. Lett. 100, 136404 (2008).
- [29] F. Pollmann, K. Roychowdhury, C. Hotta, K. Penc, Phys. Rev. B 90, 035118 (2014).
- [30] M. Levin, X-G. Wen, Phys. Rev. Lett. 96, 110405
 (2006); A. Kitaev, J. Preskill, Phys. Rev. Lett. 96, 110404 (2006).