

量子スピン系の物理

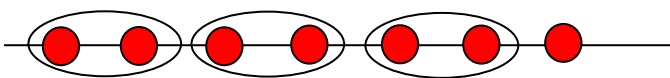
反強磁性相互作用を持つ量子スピン系

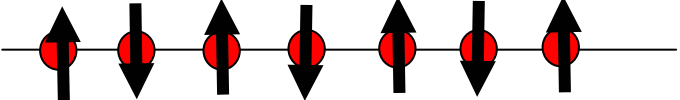
シングレット状態 vs. 反強磁性秩序(ネール状態)

スピン対のエネルギー

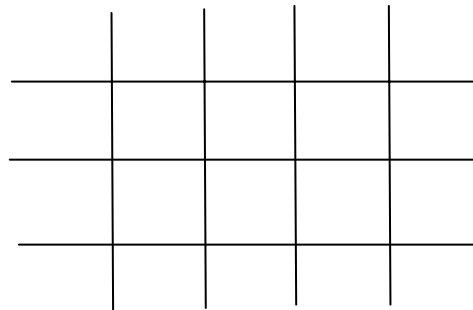
$H = J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)$ シングレット $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ $E = -\frac{3}{4}J$

ネール状態 $|\uparrow\downarrow\rangle$ $E = -\frac{1}{4}J$

$H = J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$  $E = -\frac{3}{4}J \times \frac{1}{2}$ サイト当たり

 $E = -\frac{1}{4}J \times \frac{z}{2}$

z : 最近接サイトの数



高次元ではネール
状態が安定

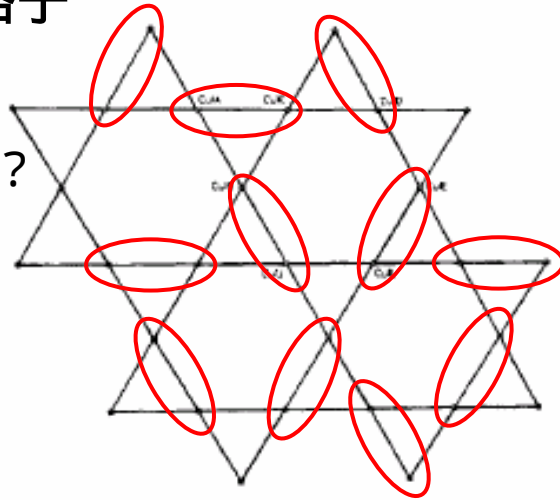
- $z = 2$: 1次元
- $z = 4$: 2次元
- $z = 6$: 3次元

フラストレーションがあると高次元でもシングレットが安定化される

カゴメ格子

RVB基底状態？

Resonating
Valence
Bond

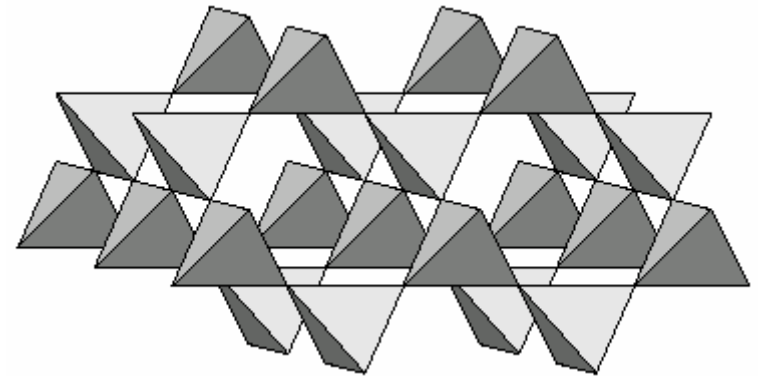


正3角形

$$J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_3 \cdot \vec{S}_1) = \frac{J}{2} \vec{S}_T^2 + \text{const.}$$

$$\vec{S}_T = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3$$

パイロクロア (Pyrochlore) 格子



正4面体

$$J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_4 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_4 + \vec{S}_3 \cdot \vec{S}_4) = \frac{J}{2} \vec{S}_T^2 + \text{const.}$$

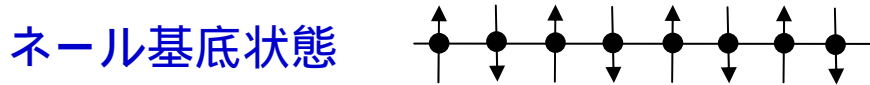
古典的な最低エネルギー状態がマクロな縮退を持つ

I. 1次元スピン系

スピン1/2 イジング系 $H = J_z \sum_{i,j} S_i^z \cdot S_j^z + J_\perp \sum_{i,j} (S_i^x \cdot S_j^x + S_i^y \cdot S_j^y)$

$$= J_z \sum_{i,j} S_i^z \cdot S_j^z + \frac{J_\perp}{2} \sum_{i,j} (S_i^+ \cdot S_j^- + S_i^- \cdot S_j^+)$$

$J_z \gg J_\perp > 0$



励起状態: ドメイン壁 Ψ_n

$$H\Psi_n = \left(E_G + \frac{J_z}{2} \right) \Psi_n + \frac{J_\perp}{2} (\Psi_{n+2} + \Psi_{n-2})$$

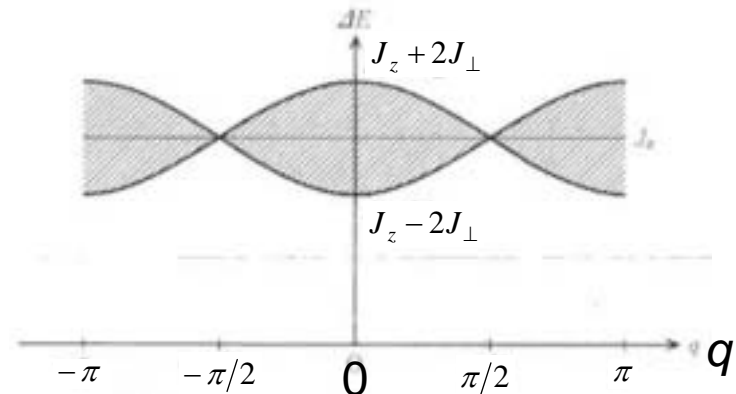
固有状態: $\Psi(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \Psi_n$ $H\Psi(k) = \left(E_G + \frac{J_z}{2} + J_\perp \cos 2k \right) \Psi(k)$

実験(中性子散乱 etc.)で観測される磁気励起 --- 2個のドメイン壁 $\Delta S_z = 1$

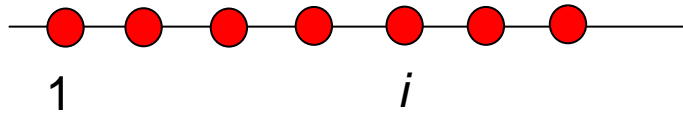
$$\begin{aligned} \varepsilon(k_1, k_2) &= J_z + J_\perp (\cos 2k_1 + \cos 2k_2) \\ &= J_z + 2J_\perp \cos q \cos(k_1 - k_2) \end{aligned}$$

$$q = k_1 + k_2$$

連続励起スペクトル



ハイゼンベルグ系、XY系



$$H = \frac{J_{\perp}}{2} \sum_{i,j} (S_i^+ \cdot S_j^- + S_i^- \cdot S_j^+) + J_z \sum_{i,j} S_i^z \cdot S_j^z$$

スピンをフェルミオン演算子で表す。

$$\text{if } \begin{cases} S_i^+ = f_i^* \\ S_i^- = f_i \end{cases} \text{ then } \begin{cases} S_i^z = n_i - \frac{1}{2} \\ n_i = f_i^* f_i \end{cases} \quad \{f_i^*, f_i\} = \{S_i^+, S_i^-\} = 1 \quad \text{but} \quad \{f_i^*, f_j\} = \{S_i^+, S_j^-\} \neq 0 \quad \text{for } i \neq j$$

Jordan-Wigner変換

$$\begin{cases} f_i^* = S_i^+ K(i) \\ f_i = S_i^- K(i) \end{cases} \quad K(i) = \exp \left[i\pi \sum_{j=1}^{i-1} \left(S_j^z + \frac{1}{2} \right) \right] = \exp \left[i\pi \sum_{j=1}^{i-1} f_j^* f_j \right] = (-1)^{N_{\uparrow}} \quad N_{\uparrow} : i \text{ サイトの左側にある上向きスピンの数}$$

$$\text{if } i < j, \quad K(j) S_i^{\pm} K(j) = -S_i^{\pm} \quad f_i f_j = S_i^- K(i) S_j^- K(j) = S_i^- S_j^- K(i) K(j) = S_j^- S_i^- K(j) K(i) = -S_j^- K(j) S_i^- K(i) = -f_j f_i$$

$$\begin{cases} S_i^+ = f_i^* K(i) = K(i) f_i^* \\ S_i^- = f_i K(i) = K(i) f_i \end{cases} \quad S_i^z = f_i^* f_i - \frac{1}{2} \quad \begin{aligned} S_i^+ S_{i+1}^- &= f_i^+ K(i) K(i+1) f_{i+1}^- \\ &= f_i^+ \exp \left[i\pi f_i^+ f_i \right] f_{i+1}^- = f_i^+ f_{i+1}^- \end{aligned}$$

$$H = \frac{J_{\perp}}{2} \sum_{i=1}^N (f_i^+ f_{i+1} + f_{i+1}^+ f_i) + J_z \sum_{i=1}^N \left(f_i^+ f_i - \frac{1}{2} \right) \left(f_{i+1}^+ f_{i+1} - \frac{1}{2} \right)$$

運動エネルギー

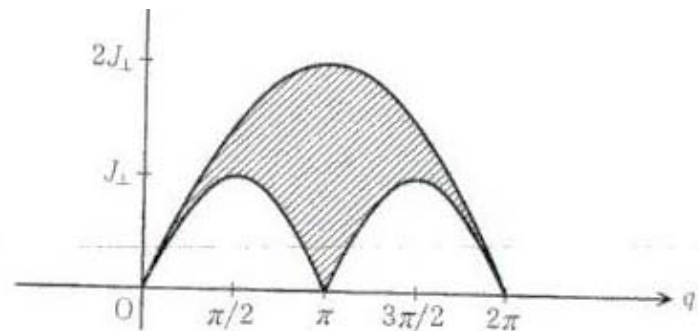
最近接斥力相互作用

XYスピン系 ($J_z=0$) は1次元の自由なフェルミオンに等価

$$f_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n f_n \exp(-ikn) \quad H_{XY} = J_{\perp} \sum_k \cos k f_k^* f_k$$

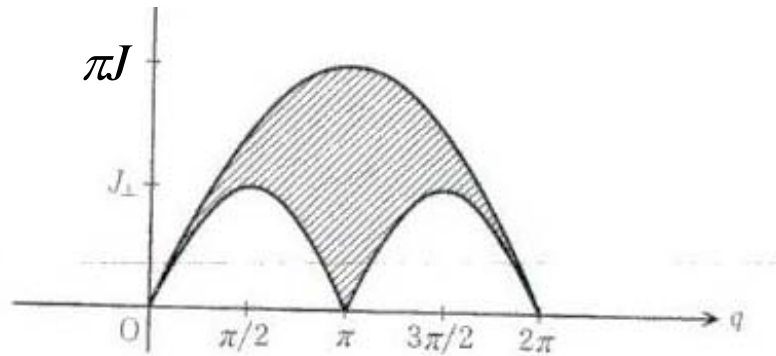
f_i : i サイトにドメイン壁を作る。(スピノン励起)

実際に観測される磁気励起は2スピノン励起: 連続スペクトルを持つ。



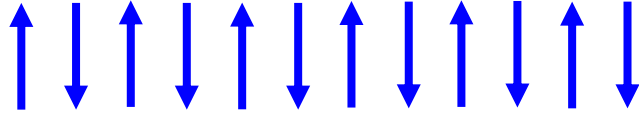
ハイゼンベルグ系 (最近接相互作用) --- ベーテ仮説に基づく厳密解
 1重項基底状態 ($S_{\text{tot}}=0$), 長距離秩序は存在しないが、相関距離は発散

$$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+j} \rangle \propto \frac{1}{j} \quad \text{有限温度では} \quad \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+j} \rangle \propto \exp\left(-\frac{j}{\xi}\right), \quad \xi \propto \frac{1}{T}$$



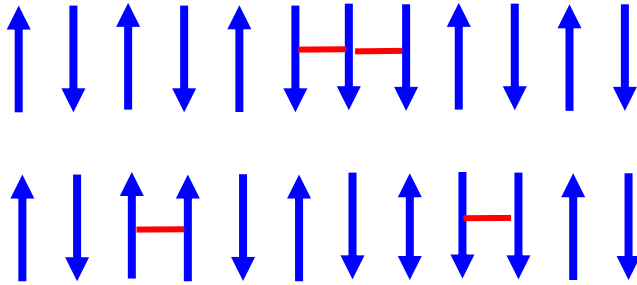
2スピノン励起

励起スペクトルにエネルギー・ギャップは存在しない。

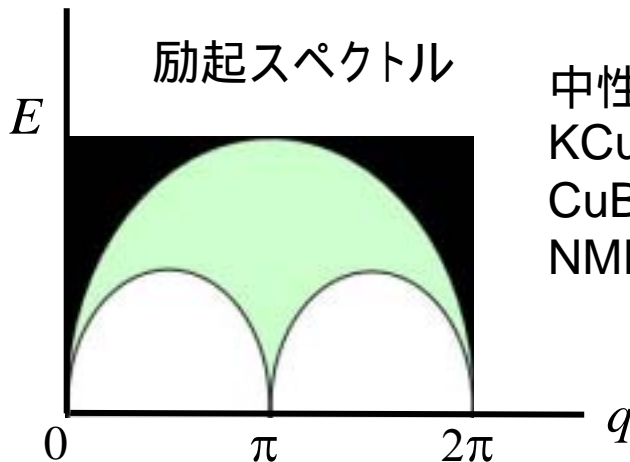


Sが大きい場合はスピนว波が良い素励起描像

$$S_i^+ \cdot S_{i+1}^-$$



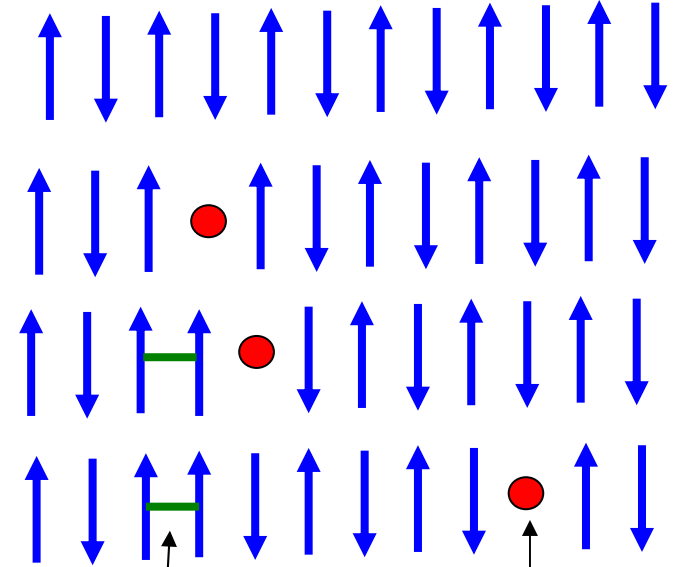
2つの独立なドメイン壁(ソリトン)
2スピノン励起



励起スペクトル

中性子散乱
KCuF₃
CuBenzoate
NMR: Sr₂CuO₃

キャリアがある場合のスピン・電荷分離



スピノン励起

ホール(電荷)

Sr₂CuO₃: 光電子分光

交替的Jahn-Teller効果 \longleftrightarrow 反強軌道秩序

KCuF₃

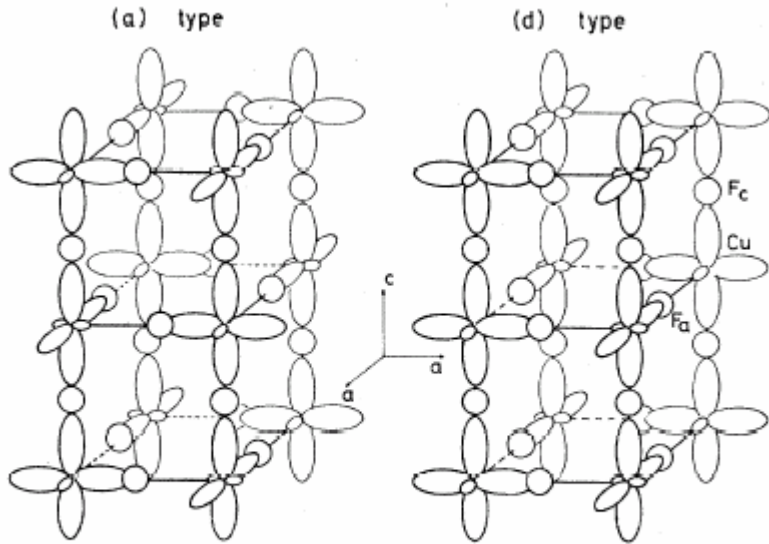
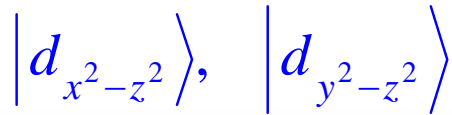
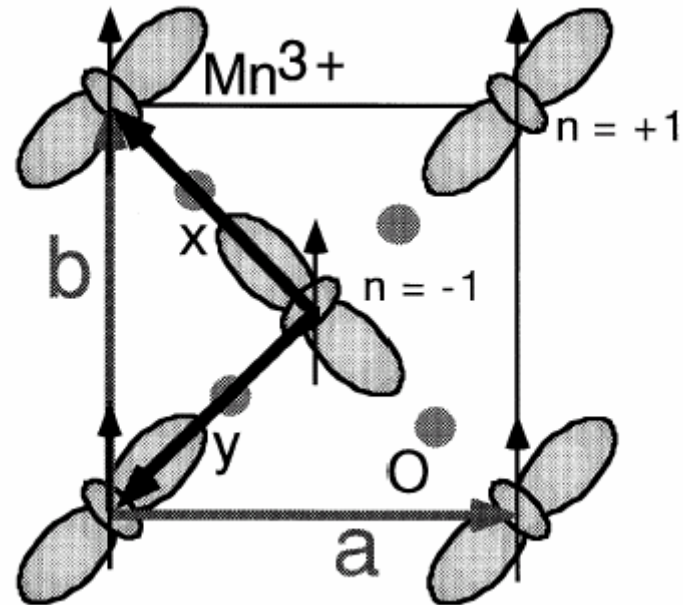
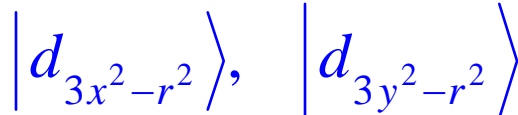


FIG. 1. Schematics of type (a) and (d) structures observed in KCuF₃.

LaMnO₃

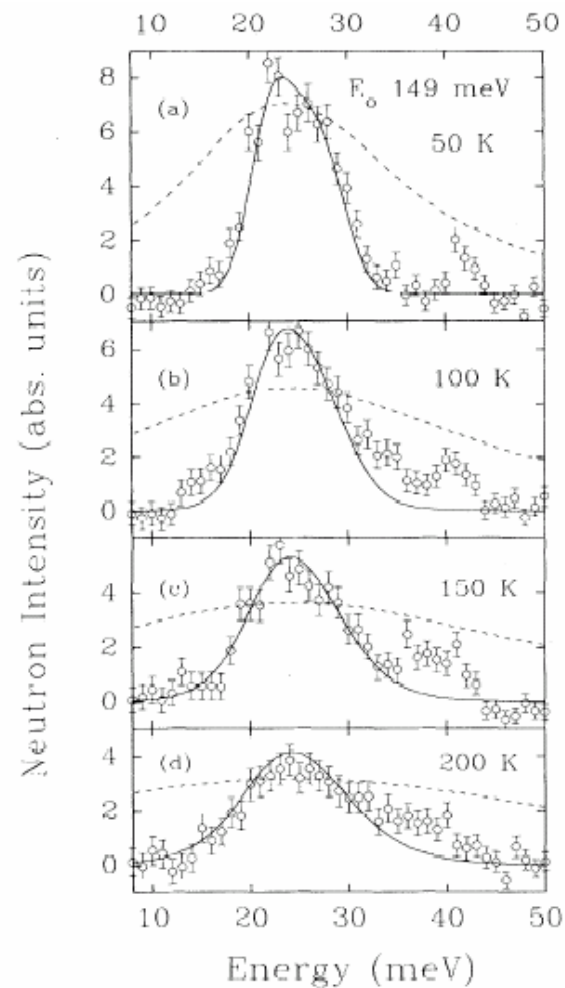
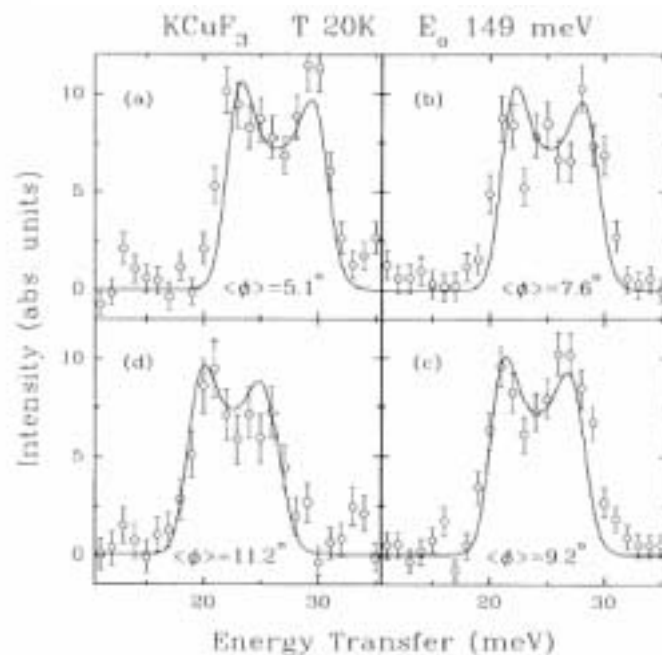
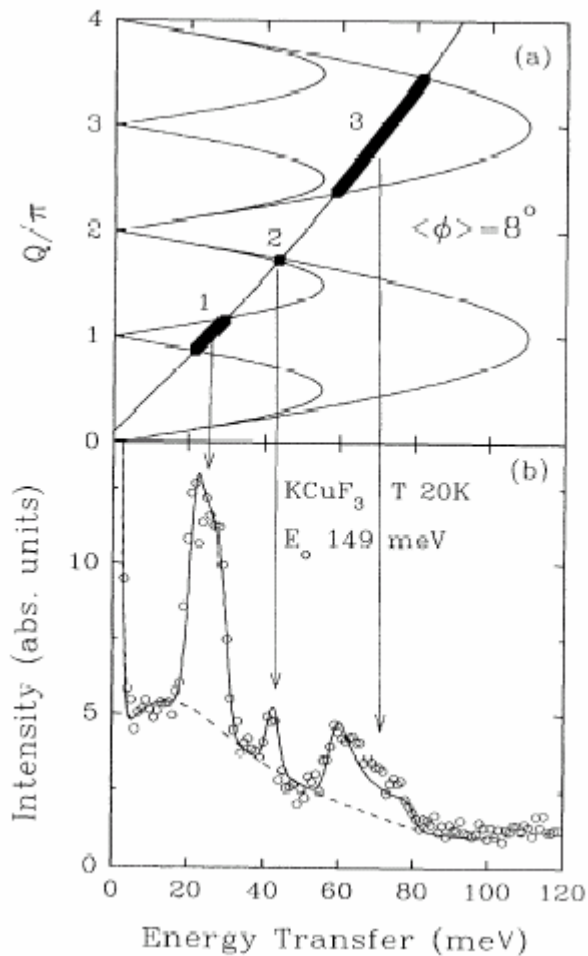


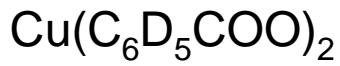
共鳴X線散乱による軌道秩序の観測: Murakami et al., Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 582.

格子弾性エネルギー
結晶場エネルギー (電子系)
電子間クーロン相互作用
スピン間交換相互作用

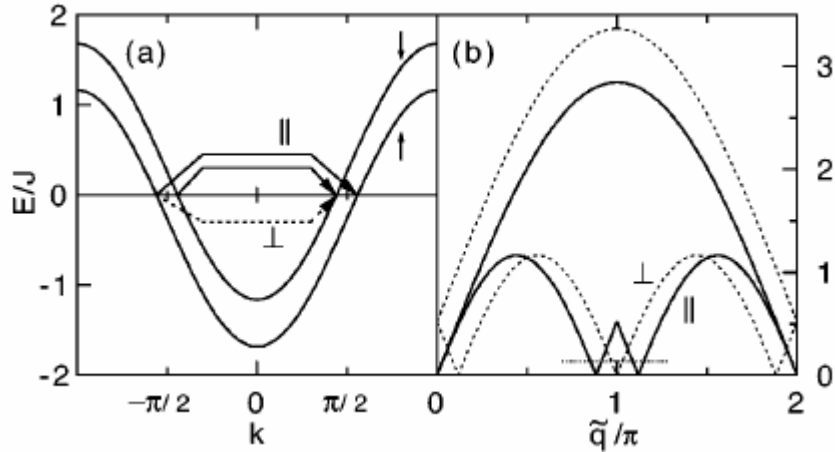
KCuF₃の中性子散乱実験

Tennant et al., PRL **70** (1993) 4003.

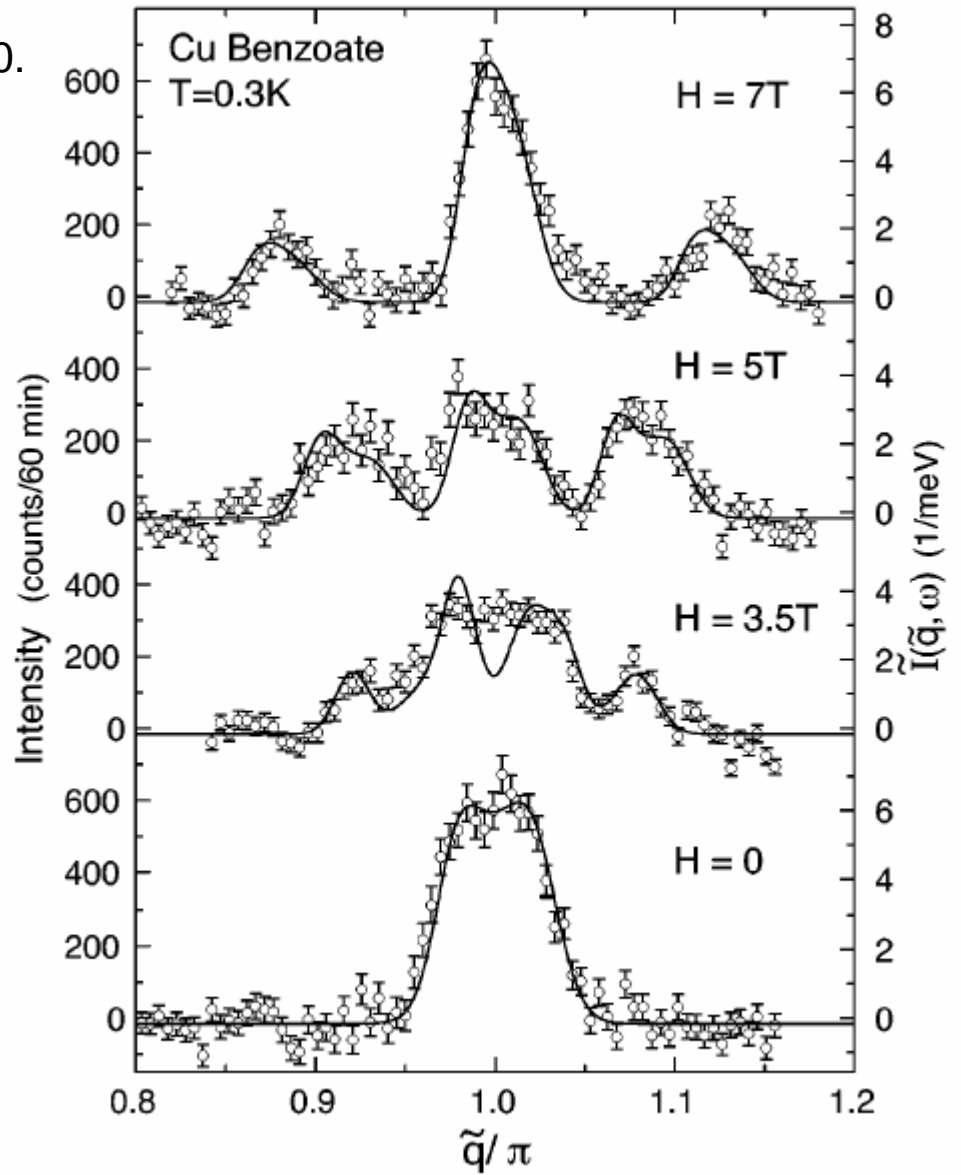




Dender et al., Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 1750.



磁場中では非整合波数の
スピン相関



S=1/2ハイゼンベルグ鎖の磁化率の温度依存性

Eggert, Affleck, Takahashi,
Phys. Rev. Lett. 73 (1994) 332.

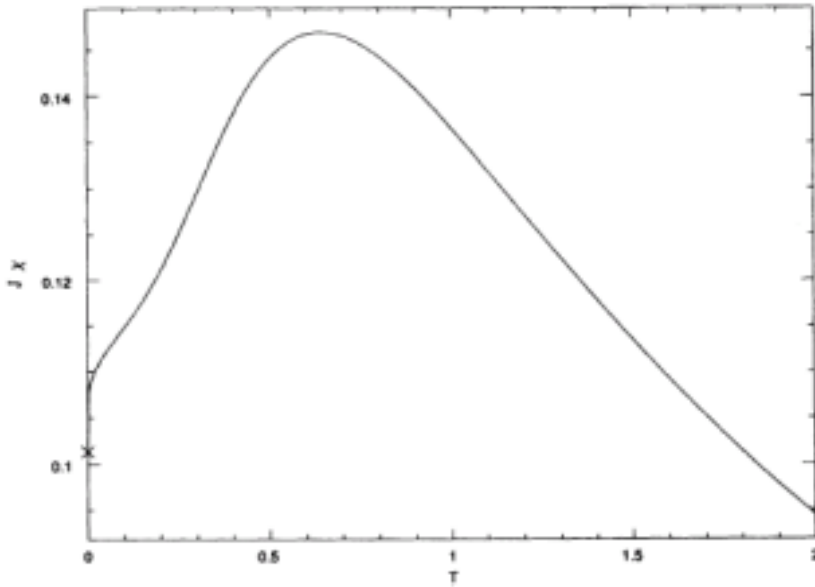


FIG. 1. $\chi(T)$ from the Bethe ansatz. $\chi(0)$ is taken from Ref. [2].

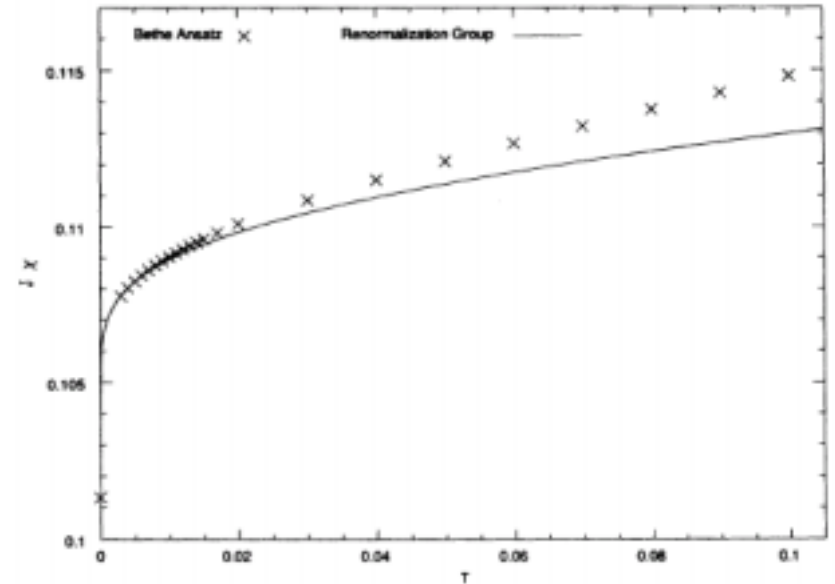


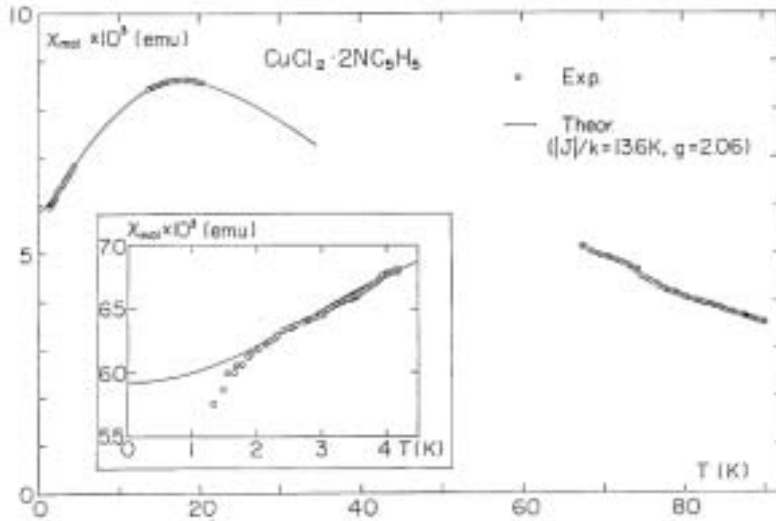
FIG. 2. Field theory [Eq. (14)] versus Bethe ansatz formulas for $\chi(T)$ at low temperature.

磁化率は温度ゼロで有限値。
量子臨界状態

$$J\pi^2\chi(T) \approx 1 + \frac{1}{2\ln(T_0/T)}$$

磁化率の温度微分がT=0で対数発散。

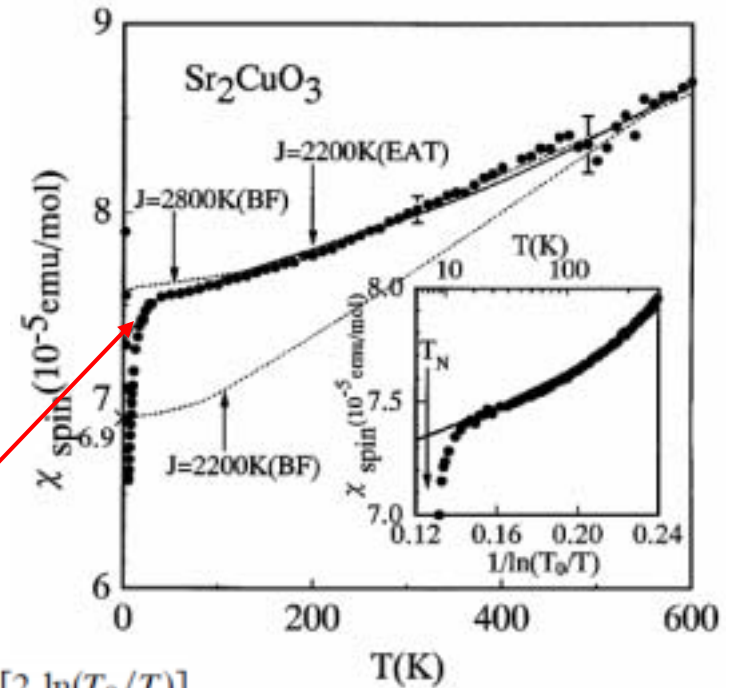
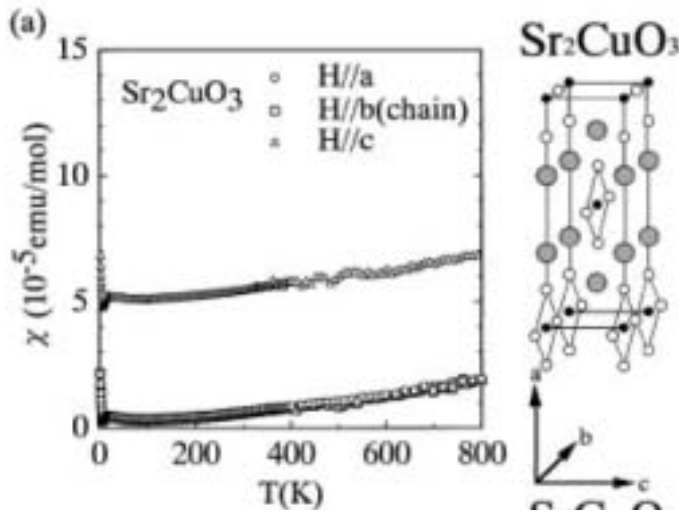
S=1/2ハイゼンベルグ鎖の実例



Takeda, Matsukawa, Haseda
 J. Phys. Soc. Jpn. 30 (1971), 1330

$$H = -2J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$$

Sr_2CuO_3
 Motoyama et al., Phys. Rev. Lett. 76 (1996) 3212.



$$J\pi^2\chi(T) = 1 + 1/[2 \ln(T_0/T)]$$