

スピンはそろろう — 強磁性の起源をめぐる理論

田崎晴明²

磁石（強磁性体）の中で、数多くの電子のスピンが同じ方向を向いてそろるのは何故か？この古典的な問に答えるためには、強い非線型な相互作用を及ぼしあいながら、複雑に絡み合っ量子力学的に運動する多くの電子たちの生み出す物理的なストーリーを読みとていかななくてはならない。そのような理論的な試みの一つの側面を、Hubbard 模型での強磁性の厳密な例を中心に解説する。学部程度の量子力学の知識だけを前提にして、このテーマのおもしろさと最近の結果を伝えたい。

1 何を問題にするか

いつの時代になっても、磁石の間に目に見えない力の働く様子は神秘的でおもしろい。現代では、物質中の多数の電子のスピンが同じ方向を向いてそろったものが磁石（強磁性体）であることが知られているが、電子のスピンがそろう理由は簡単ではない。これから述べるように、強磁性の起源の問題は、電子の間の強い非線型な相互作用、無数の電子が複雑に絡み合う多体量子効果、物質の波動性と粒子性の競合などが本質的な役割を果たす魅力的な難問なのである。

固体の性質のかなりの部分が、電子間の相互作用を無視したモデルによって説明できると言われている。しかし、少なくとも強磁性の問題については、それは正しくない。量子力学で学んだように、電子の間に相互作用がなければ、多電子系の基底状態は一粒子の準位を「下から順に詰めていった」ものである（図 1）。Pauli の排他律のために、各々の準位にはスピン \uparrow と \downarrow の電子が一つずつ入るので、全体の合成スピン（磁化）は 0 になる³。これは、Pauli の常磁性と呼ばれている。

相互作用がなければ強磁性が現れないのだから、強磁性の起源は電子間の相互作用にあるはずだ。ところが、固体中の電子の相互作用のほとんどは、電子のスピンには依存しないクーロン相互作用である。二つの電子のスピンが同じ方向を向いていようが逆を向いていようが、クーロン力の大きさや方向に変わりはない。古典的に考える限りでは、クーロン力から強磁性が生じるはずはない。何らかの量子効果が必要なのである。

というわけで、次のような根本的な疑問が生じる。数多くの電子のある系で、電子の量子力学的な運動と、スピンに依存しない（クーロン）相互作用だけから強磁性が生じるのだろうか？理論的な方向からこの疑問に答える試みを紹介するのが、この解説の目的である⁴。

¹日本物理学会誌 Vol. 51, No. 10, 1996, pp. 741-747.

²<http://www.gakushuin.ac.jp/~881791/>

³ここでは一電子系のエネルギー準位に縮退がないことを仮定しているが、たとえ縮退があっても相互作用のない系では強磁性は現れない。8 節を参照。

⁴フェルミオン演算子を始めた専門的な記号、用語は用いない。専門家向けのより詳しい



図 1: 相互作用のない電子系の基底状態の模式図。一電子のエネルギー準位を「下から詰めて」いくことで、磁化のない状態が得られる。これが、Pauli の常磁性である。

2 電子の「交換」とスピン・スピン相互作用

Heisenberg [3] は、量子力学が完成したすぐ後に、スピン間の相互作用は多体量子効果によるものだということを指摘した。そのメカニズムの本質的な部分を簡単に振り返っておこう。

電子二つの系をとり、それぞれの電子の位置を 3 次元空間での座標 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ で表す。スピンの依存しない一般のポテンシャル $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ で記述される系を考える。 $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ は、外場からの一体力と、電子間の相互作用の両方を含んでいる。ポテンシャルがスピンの依存しないので、定常状態の波動関数の座標部分⁵ $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ は、Schrödinger 方程式

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\} \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (1)$$

から決まる。我々の関心は基底状態にあるので、これからは (1) の基底状態の波動関数を単に $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ と書こう。

方程式 (1) が \mathbf{r}_1 と \mathbf{r}_2 の入れ替えについて不変なので、基底状態の波動関数は、この入れ替えについて対称 $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ か、反対称 $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ かのいずれかである。フェルミオンの(スピン部分も含んだ)波動関数が、二つの粒子の名前の入れ替えについて反対称であることから、 $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ の対称性を仮定すればスピン状態は自動的に定まってしまう(たとえば [4] の 62 節)。その結果は、

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \text{ は対称} &\implies \text{スピンはそろわない} \\ \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \text{ は反対称} &\implies \text{スピンはそろ(強磁性)} \end{aligned} \quad (2)$$

とまとめられる。相互作用がスピンによらなくても、量子多体(二体)効果

内容については、脚注と参考文献を見ていただきたい。特に [1] は Hubbard 模型における厳密な結果の解説で、本解説の後半の内容をより詳しく扱っている。また [2] は、関連する内容を幅広くカバーしたより専門家向けの詳しい解説である。

⁵↑と↓のスピンを持つ電子が一つずつあるとすると、全体の波動関数は、 $\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) = (\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \delta_{\sigma_1, \uparrow} \delta_{\sigma_2, \downarrow} - \varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \delta_{\sigma_2, \uparrow} \delta_{\sigma_1, \downarrow}) / \sqrt{2}$ となる。

からスピン間の相互作用が生まれ、基底状態でのスピンの状態が定まるのである。

3 斥力が働けば強磁性が現れるというよく知られた議論

二電子系で強磁性が現れるか否かを知るためには、基底状態の波動関数 $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ の対称性を知る必要がある。これについては、古くから知られているとても簡単な（そして、ある意味でエレガントな）議論がある。

二つの電子の間に斥力が働いているとする。反対称な波動関数では、必然的に $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = 0$ が成り立ち、二つの電子が同じ場所に来ることはできないので、あまりエネルギーは上がらないだろう。しかし対称な波動関数では、斥力の影響が大きく、エネルギーが上がるはずだ。よって、基底状態の波動関数は反対称だろうと考えられる。

強磁性の条件 (2) と比べれば、斥力の相互作用のある二電子系の基底状態は強磁性を示すという一般的な結論が導かれる。ごく単純な考察から、明確で普遍的な結論が得られるという意味では、魅力的な議論である。

4 連続空間の二電子系は強磁性を示さないという定理

残念ながら、前節の議論をそのまま鵜呑みにするわけにはいかない。2 節の二電子系では、斥力、引力を問わず、一般のポテンシャルについて基底状態の波動関数 $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ は対称であることが厳密にわかっている [5]。

証明の要点を述べよう。Schrödinger 方程式 (1) は、 $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ という座標を持った 6 次元空間での波動方程式とみなすことができる。一般的な Schrödinger 方程式において、基底状態は縮退せず、また基底状態の波動関数は節を持たないことが知られている（たとえば [4] の 20 節）。よって、(1) の基底状態は 6 次元空間で一定の符号（正しくは位相）を持つ波動関数（たとえば $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) > 0$ ）で表される。明らかにこのような波動関数は反対称ではあり得ないから、対称でなくてはならない。

強磁性の条件 (2) を思い出せば、2 節で考えた二電子系では、どのような相互作用を取っても強磁性は現れないことがわかる⁶。強磁性の起源は、一筋縄では説明できないのである！じっくりと腰を据えて、固体中の多電子系の

⁶3 節の議論で見落とされているのは、相互作用がないとき既に基底状態は対称な波動関数を持つことである。極めて粗い一次摂動の議論だけから、これが逆転すると結論するのは、無謀だったと言える。なお、この定理によって Heisenberg の強磁性の説明が完全に破綻してしまうわけではない。多電子系の中から巧みに「選び出した」二つの一電子状態について、Heisenberg 流のアイデアを適用して強磁性を議論することはできるだろう。原子の同じ軌道上の電子の間の Hund 結合も、そのような方向で理解すべきだと言われている。

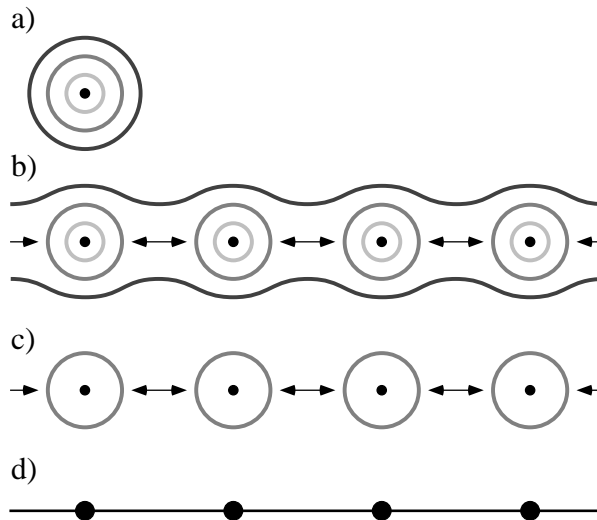


図 2: 強束縛近似の精神を示す極めて大雑把な図。a) 単独の原子。原子核の周りのいくつかの軌道を電子が回っている。b) 原子が結晶を組むと、黒の軌道の電子は結晶全体に広がって運動するようになるが、薄い灰色の軌道の電子は相変わらず原子核の側を回っている。灰色の軌道の電子は、おおむね原子核の周りの軌道を回っているのだが、ある程度の確率で近隣の紫の軌道へとトンネルして跳び移っていく。c) おもしろい物理を示すだろう灰色の軌道だけを取り出す。d) 軌道の縮退を無視すれば、電子が格子点から格子点へと跳び移る格子モデルが得られる。

物理に取り組む必要があるだろう。これからは、強く相互作用し合う多電子系の理想化されたモデルである Hubbard 模型に舞台を移して、強磁性の問題をさらに考えていこう。3 節のエレガントな議論も、異なった状況で復権することになる。(8 節参照。)

5 Hubbard 模型とは何か

Hubbard 模型は、電子が固体中を量子力学的に運動する効果と、電子間の強い相互作用(斥力)だけを取り入れた一種の minimum model である [6, 7]。出発点として、価電子帯の電子についての強束縛の記述(図 2)を採る。格子 Λ を N 個の格子点の集まりとし、便利のため格子点に $i = 1, 2, \dots, N$ と番号を振る。電子は格子点の上だけにいることができる。Pauli の排他律により、各々の格子点には、電子が一つもないか、 \uparrow あるいは \downarrow のスピンの電子が一ついるか、 \uparrow と \downarrow の電子が一つずついるかの四通りの状態が許される(図 3)。全系での電子の総数 N_e は固定されているとする。上に述べたことから、 $0 \leq N_e \leq 2N$ である。

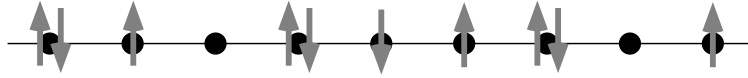


図 3: 強束縛の電子系で許される状態の例。各々の格子点は、空であるか、↑あるいは↓の電子が一ついるか、↑と↓の電子が一つずついるかの四通りの状態を取る。Hubbard 型の相互作用を入れると、同じ格子点に二つの電子が来たときエネルギーが U だけ上がる。図の状態の相互作用エネルギーは $3U$ ということになる。

電子は近くの格子点の間を跳び移る(トンネルする)ことができる。格子点 i と j の間を電子が跳ぶ遷移振幅を $t_{i,j} = t_{j,i}$ (= 実数) と書く⁷。遷移振幅を $t_{i,j}$ は、二つの軌道の重なり具合などの微妙な条件から決まる。そのため、 $t_{i,j}$ の符号や大きさは、簡単な規則からは定まらず、物質によってまちまちであると考えられる。

格子 Λ と遷移振幅 $t_{i,j}$ を与えると、強束縛の電子系が定義される。特に、系に電子が一つしかないときには、定常状態 φ と固有エネルギー ε を決定する Schrödinger 方程式は、

$$\sum_{j=1}^N t_{i,j} \varphi_j = \varepsilon \varphi_i \quad (3)$$

となる。相互作用のない多電子系の定常状態は、これらの一電子の定常状態に電子を「詰める」ことで作られる。

標準的な例を見よう。 Λ を周期的な 1 次元格子に取り、 $|i-j|=1$ のとき $t_{i,j} = -t$ 、それ以外では $t_{i,j} = 0$ とする。Schrödinger 方程式 (3) の固有状態は $\varphi_j = N^{-1/2} e^{ikj}$ というお馴染みの平面波の波動関数になり、固有エネルギーは $\varepsilon(k) = -2t \cos k$ というコサイン型の分散関係で与ええられる。(波数 k は、 $n = 0, \pm 1, \dots, \pm(N-1)/2$ として、 $k = 2\pi n/N$ 。) このように(相互作用のない)強束縛の電子系では、電子たちは「波」としてふるまっている。

ここに、電子間の非線型な相互作用を加える。Hubbard 模型では、二つの電子が同じ格子点の上に来たときにエネルギーが $U(> 0)$ だけ上がるという極端な短距離の相互作用を考える⁸。図 3 の例が示すように、相互作用のエネルギーを求めるときには、電子が二つ入っている格子点を一つ、二つ、三つと数えていくことになる。このときには、電子たちを「粒子」として扱っていると言える。

このように、電子の「波動性」を生み出す跳び移りと、電子の「粒子性」を強調した相互作用という二つの正反対の要素を組み合わせたのが Hubbard 模型である。この一見単純なモデルを舞台に、電子の波動性と粒子性の競合、あ

⁷フェルミオン演算子を用いれば、 $H_{\text{hop}} = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}$ 。全体にマイナスの符号を付けることも多い。

⁸本来のクーロン相互作用は長距離力だが、力が最も強いのは電子が接近したときであること、固体中では他のバンドの電子が長距離力を遮蔽して短距離力に変えることなどを考慮すれば、このような単純化はある程度許されると言われている。

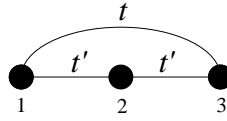


図 4: おもちゃの系の格子と電子の跳び移りの遷移振幅。ここに二つの電子を置いた系を調べることで、Hubbard 模型における強磁性の本質の一端を見ることができる。

るいは線型性と非線型性の拮抗の結果として、どのような物理が生み出されるかというのは、極めておもしろい問題である。今日までの精力的な研究から、Hubbard 模型が、反強磁性、フェリ磁性、金属・絶縁体転移、朝永・Luttinger 液体などの様々な現象を示すことが明らかになってきている [2, 7, 8, 1]。

Hubbard 模型を素朴な平均場 (Hartree-Fock) 近似で解析すると、 $UD_F > 1$ という Stoner の条件が満たされれば基底状態は強磁性を示すという結論が得られる。 D_F は相互作用のない系でのフェルミエネルギーにおける一粒子状態密度である。しかし、平均場近似は強磁性の傾向を大幅に過大評価することがわかっていて、Stoner の条件をそのまま信じることはできない。ゆらぎを取り入れて平均場近似を改良する試みは古くから行われており、定量的な成功を収めている理論もある [7]。

6 強磁性を示すおもちゃ

これからの四つの節で、Hubbard 模型を舞台にして 1 節の最後に太字で掲げた根本的な疑問に答える試みについて述べる。答えたい疑問が原理的なものであること、そして、扱っているモデルが極端に理想化されたものであることを踏まえて、近似を一切用いない数学的に厳密な結果に限って議論を進めていく。また、物理を理解する際の出発点になる基底状態 (絶対零度) に議論を絞る。

Hubbard 模型における強磁性についての感触を得るために、よく知られている小さな系を少し詳しく調べてみよう。格子点の数は $N = 3$ とし、電子数は $N_e = 2$ とする。スピン空間での回転についての対称性を考えれば、スピン \uparrow と \downarrow の電子が一つずつあるとして一般性を失わない。 \uparrow の電子が格子点 i に、 \downarrow の電子が格子点 j にいる状態を $|i, j\rangle$ と書く⁹。図 4 のように、隣り合った格子点の間に遷移振幅 $t_{1,2} = t_{2,1} = t_{2,3} = t_{3,2} = t' > 0$ と、両側の格子点の間に遷移振幅 $t_{1,3} = t_{3,1} = t$ があるとしよう。電子たちは、三つの格子点の上をぐるぐる跳び回ることができる。さらに、二つの電子が同じ格子点に来たときには、相互作用のためエネルギーが U だけ上がる。

相互作用の効果が最も顕著になるはずの $U \rightarrow \infty$ の極限を扱おう。同じ格

⁹フェルミオン演算子と真空 $|0\rangle$ を用いれば、 $|i, j\rangle = c_{i,1}^\dagger c_{j,1}^\dagger |0\rangle$ である。

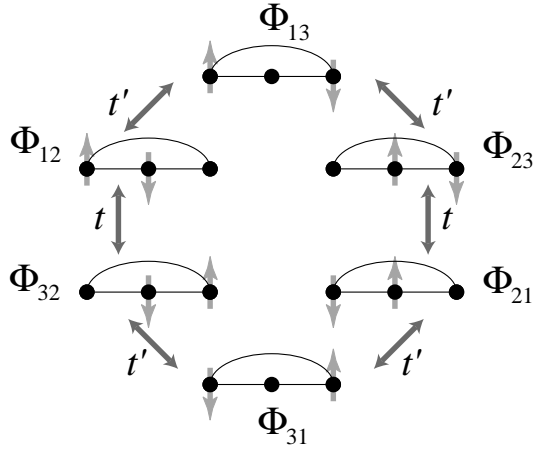


図 5: おもちゃの系で $U \rightarrow \infty$ としたときの、許される状態と、それらの間の遷移振幅。二つの電子が同じ格子点の上に来ないという制約は、非常に強い非線型な相互作用を表している。この図と「節のない波動関数の規則」から、基底状態のスピン状態を完全に決定することができる。

子点に二つの電子が来るとエネルギーが無限大になるので、許される状態は $|i, j\rangle$ で $i \neq j$ とした六通りになる。一般の状態は、これら六つの状態を用いて、

$$|\varphi\rangle = \sum_{\substack{i,j=1,2,3 \\ (i \neq j)}} \varphi_{i,j} |i, j\rangle \quad (4)$$

と展開できる。展開係数 $\varphi_{i,j}$ は 2 節の波動関数 $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ に対応しているので、強磁性の判定条件 (2) はそのまま用いることができる。

許される六つの状態の間のハミルトニアン行列要素は、電子の跳び移りの遷移振幅から決まり、図 5 のようになる。この量子力学系の基底状態は、負の行列要素で結ばれた二つの状態は同じ符号で足し合わせ、正の行列要素で結ばれた二つの状態は異なった符号で足し合わせよという「節のない波動関数の規則¹⁰」を用いて構成することができる [9]。

まず、パラメータ t は負としよう。基底状態 $|\varphi\rangle$ を (4) のように展開し、 $\varphi_{1,2} > 0$ と選ぶ。図 5 の行列要素の符号と、「節のない波動関数の規則」を参照すれば、他の展開係数の符号が、次々と定まってくる。図 5 を反時計回りにまわっていくと、順次、 $\varphi_{3,2} > 0$, $\varphi_{3,1} < 0$, $\varphi_{2,1} > 0$, $\varphi_{2,3} > 0$, $\varphi_{1,3} < 0$ と決定される。2 節と同様に、基底状態の展開係数 $\varphi_{i,j}$ は、 i と j の入れ替えについて、対称であるか反対称であるかのいずれかである。ところが、上で定めた符号から、答えは対称 $\varphi_{i,j} = \varphi_{j,i}$ でしかあり得ない。強磁性の判定

¹⁰このような符号の選択が可能ときには、そうしたときに最低のエネルギーが得られることは、変分法的に考えても納得できるだろう。4 節で触れた「節のない波動関数」の行列力学版と思ってよい。

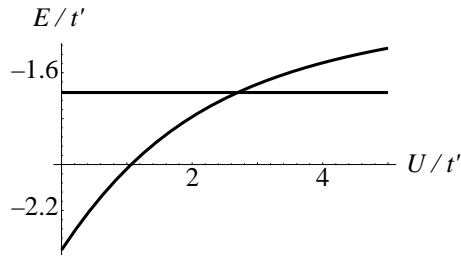


図 6: おもちゃの系で $t = t'/2$ とおいたときの E_{sym} (破線) E_{asym} (実線) の U 依存性。 U の大きい領域では、 $E_{\text{sym}} > E_{\text{asym}}$ となり強磁性が現れている。強磁性の出現は、「非摂動的な」現象である。

条件 (2) を見れば、 $U \rightarrow \infty, t < 0$ の系の基底状態ではスピンはそろわないことがわかる。

次に、パラメータ t は正としよう。上と全く同様に基底状態 $|\varphi\rangle$ を「節のない波動関数」として構成すると、今度は、 $\varphi_{1,2} > 0, \varphi_{3,2} < 0, \varphi_{3,1} > 0, \varphi_{2,1} < 0, \varphi_{2,3} > 0, \varphi_{1,3} < 0$ のように符号が決まる。このような符号を持つためには、展開係数は反対称 $\varphi_{i,j} = -\varphi_{j,i}$ でなくてはならない。条件 (2) を見れば、 $U \rightarrow \infty, t > 0$ の系の基底状態ではスピンがそろっていくことがわかる。おもちゃの系とはいえ、量子力学と (クーロン) 斥力だけから強磁性が生まれた！遷移振幅の符号という古典的な直観では理解できない要素が、強磁性の有無を大きく左右しているという事実に注目しておきたい。

U が有限の場合を簡単に見ておこう。図 6 に、 $t = t'/2 > 0$ と固定したときの、対称な波動関数のとる最低のエネルギー E_{sym} (破線) と、反対称な波動関数のとる最低のエネルギー E_{asym} (実線) を U の関数として描いた。 $U = 0$ のときは Pauli の常磁性 (図 1) のために $E_{\text{sym}} < E_{\text{asym}}$ となり基底状態のスピンはそろわないが、 U が十分大きくなると $E_{\text{sym}} > E_{\text{asym}}$ となり基底状態のスピンはそろっていく。強磁性は、相互作用 (あるいは、非線型性) が十分大きいときのみに生じる「非摂動的な」(あるいは「非線型な」) 現象であるといえる。

4 節で述べた「二電子系では強磁性はない」という定理は、連続空間の系についての主張だったので、ここで考えている格子上の系にはあてはまらない。おもちゃの系の強磁性は、4 節の定理と矛盾はしない。しかし、もう少しじっくり考えると、 $t > 0$ の系が強磁性を示すという事実そのものから、この系を 2 節のような連続空間の二電子系の極限として導くことは不可能だということができる。 $t > 0$ のおもちゃの系は、何らかの意味で、電子が三つ以上ある系の有効理論になっていると考えるべきなのだ¹¹。

おもしろいことに、おもちゃの系で現れた強磁性は、いくつかのやり方で、電子がもっとたくさんある系に「拡張」することができる。もちろん、多電

¹¹たとえば、 s バンド以外の電子を記述する理論だと考えるか、あるいは、電子四つの $t < 0$ の系に電子・正孔変換をほどこした理論だと考える。

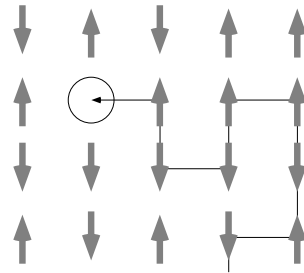


図 7: 長岡の強磁性のイメージ。電子が一つずつびっしりと詰まった格子の上をたった一つの「穴」が飛び回ることによって、多数の電子のスピンの間に強磁性的な相互作用が生まれる。

子系では無数の電子たちの複雑な絡み合いに直面することになるので、議論ははるかに微妙になる。これから、Hubbard 模型における強磁性の三つの厳密な例を、このような観点から整理してみよう。

7 たった一つの「穴」が生み出す長岡の強磁性

図 5 に示したおもちゃの系の状態間の遷移は、電子が格子点の間を飛び移ることで引き起こされる。同じ遷移を、電子の一つもない「穴」が格子の上を飛び回ることによって生じると見てもよい。 $U = \infty$ のおもちゃの系の強磁性は、一つの「穴」が電子の状態を混ぜ合わせることによって出現するということもできる。多電子の系でも、同様のメカニズムで強磁性の基底状態が現れる例がある。有名な長岡の強磁性である [10]。

格子 Λ として、三角格子、正方格子、立方格子を取り、隣り合う格子点の組 i, j については $t_{i,j} = t > 0$ 、それ以外については $t_{i,j} = 0$ とする¹²。各格子点での相互作用エネルギーについては $U \rightarrow \infty$ の極限を取り、電子数 N_e は格子点の数 N よりもちょうど一つだけ少ない値 ($N_e = N - 1$) に固定する。同じ格子点に二つの電子が来ることは許されないのだから、一つの「穴」を除いた全ての格子点に電子が一つずつ入る。系に残されているのは、たった一つの「穴」が格子の上を飛び回る自由度だけである (図 7)。

長岡は、このような Hubbard 模型の基底状態は、(スピン角運動量に関する自明な縮退を除けば) ただ一つしかなく、全ての電子のスピンのそろった強磁性を示すことを証明した。強磁性が出現するメカニズムは、先ほど論じたおもちゃの系の場合ととてもよく似ている。格子の中をたった一つの「穴」が飛び回ることによって、系のスピン状態を「かき回し」強磁性が生まれると言える。証明も、6 節で用いたのと同じ「節のない波動関数の規則」を用いて構成することができる。

格子点の数と電子数が等しい ($N_e = N$) ときには、Hubbard 模型の基底

¹²はるかに一般的な格子と $t_{i,j}$ について、同じ結果が証明されている。

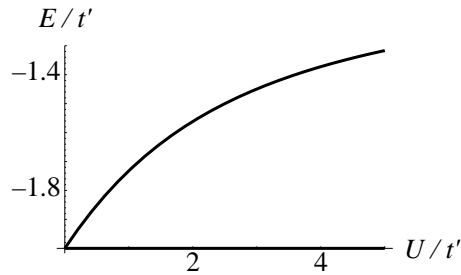


図 8: おもちゃの系で $t = t'$ とおいたときの E_{sym} (破線)、 E_{asym} (実線) の U 依存性。この場合に限り、任意の $U > 0$ について、 $E_{\text{sym}} > E_{\text{asym}}$ となり強磁性が現れる。これは縮退の生み出す強磁性の最も簡単な場合といえる。

状態は反強磁性的な性質を持つことが知られている。そこから電子が一つ減るだけで、正反対の強磁性が出現するという事実はとてもおもしろい。電子が量子力学的に跳び回り、かつ、非線型な相互作用を及ぼし合う Hubbard 模型が、如何に豊富な「物理」を隠し持っているかを教えてくれる素晴らしい例である。

U が有限で「穴」の数が二個以上という状況に長岡の強磁性は拡張できるだろうか？これはとても重要な問題であり、様々な角度から研究されているが、今のところ完全な解決は得られていない [2]。

8 激しい縮退 (あるいは、平らなバンド) から生じる Mielke の強磁性

再び 6 節のおもちゃの系を考える。強磁性は U が大きいときにのみ生じる「非摂動的な」現象だと書いたが、これには一つだけ例外がある。図 8 に、 $t = t' > 0$ と固定したときの E_{sym} (破線) と E_{asym} (実線) を U の関数として描いた。 $U = 0$ のときに E_{sym} と E_{asym} は縮退している¹³、少しでも相互作用 $U > 0$ が入れれば $E_{\text{sym}} > E_{\text{asym}}$ となり、基底状態は強磁性を示す。この現象は、3 節の素朴な議論によって説明できる。スピンのそろった状態では、(4) の展開係数 $\varphi_{i,j}$ は反対称性から $\varphi_{i,i} = 0$ を満たす。言い換えれば、二つの電子は決して同じ格子点には来ない。 U が有限になっても、このような状態は相互作用の影響を「感じない」ので、エネルギー E_{asym} は U には依存しない。(図 6、8 でもそうなっている。) 対称な $\varphi_{i,j}$ を持つ状態は、 U の影響を受けるので、 E_{sym} は U とともに増加するだろう。 $U = 0$ で $E_{\text{sym}} = E_{\text{asym}}$ なのだから、 $U > 0$ では必然的に $E_{\text{sym}} > E_{\text{asym}}$ となるというわけだ。

¹³このときには、対応する一電子の Schrödinger 方程式 (3) の基底状態が (たまたま) 二重に縮退している。これが、 $U = 0$ での縮退の原因である。

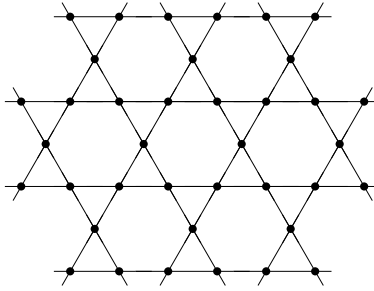


図 9: カゴメ格子。かごの編み目の模様的一种と同じなので、こう命名された。Mielke はカゴメ格子上の Hubbard 模型での強磁性の存在を証明した。これは、「平ら」なバンドが生み出す強磁性の典型的な例である。

多電子の系でも、同じような事情で強磁性を示す例があることが、Mielke によって示された [11]。格子 Λ として N 個の格子点を持つカゴメ格子 (図 9) を取り¹⁴、隣り合う格子点の組 i, j については $t_{i,j} = t > 0$ 、それ以外については $t_{i,j} = 0$ とする。さらに、各格子点で斥力の相互作用 U が働く。

対応する一電子の Schrödinger 方程式 (3) を調べると、一電子の基底状態は $(N/3) + 1$ 重に縮退していることがわかる。一電子系のバンドという言葉を用いれば、エネルギーの最も低いバンドのエネルギーが波数によらず一定値をとる、つまり、バンドは「平ら」だといえる。「平ら」なバンドが現れるのはのは、もちろん尋常なことではない。三角形をたくさん含んだカゴメ格子の特別な性質の反映である。

この系で、電子数を $N_e = (N/3) + 1$ と固定する。縮退の次元と電子数を等しく取ったところが味噌である。まず、相互作用がない場合には、一電子の基底状態の縮退を反映して、多電子系の基底状態も激しく縮退している。系全体での合成スピンの大きさも $S_{\text{tot}} = 1/2, 3/2, \dots, \{(N/3) + 1\}/2$ という許される値の全てを取る¹⁵。全てのスピンのそろった強磁性の状態も、 $U = 0$ の激しく縮退した基底状態たちの一つである。

Mielke は、任意の $U > 0$ について、カゴメ格子上の Hubbard 模型の基底状態は、(スピン角運動量に関する自明な縮退を除けば) ただ一つしかなく、全ての電子のスピンの完全にそろった強磁性を示すことを証明した。「平ら」なバンドを持っていても強磁性を示さない例は無数にあるので、これは決して当たり前の結果ではない。この例によって、有限の U の Hubbard 模型が強磁性を示し得ることが、はじめて厳密に示された。モデルも単純であり、美しく重要な結果であると言える。

Mielke の例以外にも、 $U = 0$ の基底状態が (たまたま) バルクな縮退を持ち、 $U > 0$ で強磁性を示す例が作られている [12]。これらの系も「平ら」

¹⁴Mielke は一般の line graph と呼ばれる格子を扱っている。

¹⁵全ての基底状態について合成スピンを平均すれば \sqrt{N} のオーダーになる。これは一種の常磁性である。

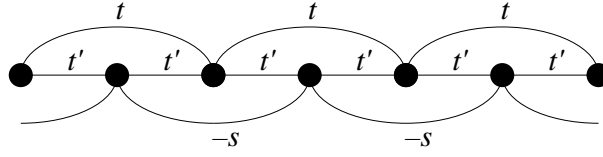


図 10: 強磁性が出現する特異的でない Hubbard 模型の一例。二つのバンドは「平ら」ではなく、相互作用 U も有限でよい。三つの格子点に着目すれば、図 4 のおもちゃの系とそっくりである。高次元に拡張したモデルでも、強磁性の存在は証明されている。

な一電子のバンドを持っているので、ここで見いだされる強磁性は、Mielke の例と合わせて、平坦バンド強磁性と呼ばれている [2]。平坦バンド強磁性では、 $U = 0$ のときに強磁性の状態が縮退した基底状態たちの一つとして「用意されて」いる。少しでも相互作用 U が入れば、3 節のようなメカニズムが働き、強磁性の状態がただ一つの基底状態として「選ばれる」といえる。このようなモデルに摂動を加え、平らだったバンドを曲げてやったときに、強磁性が安定に残るかというのは重要な問題であり、いくつかの方向から詳しく研究されている [13, 14, 15]。

9 おもちゃをつなぎ合わせる — 特異性のない系での強磁性

Hubbard 模型における強磁性の三つ目の例に移ろう (図 10)。1 次元格子 $\Lambda = \{1, 2, \dots, N\}$ に周期的境界条件を課し、格子点 $N+1$ を格子点 1 と同一視する。電子の跳び移りの遷移振幅は、全ての i について $t_{i,i+1} = t_{i+1,i} = t'$ 、偶数の i については $t_{i,i+2} = t_{i+2,i} = t$ 、奇数の i については $t_{i,i+2} = t_{i+2,i} = -s$ 、それ以外では $t_{i,j} = 0$ とする。 $t > 0$ と $s > 0$ は独立なパラメータだが、 t' は $t' = \sqrt{2}(t+s)$ によって決める。さらに、各格子点で斥力の相互作用 U が働く。

図 10 で、奇数の格子点とその両側の偶数の格子点に着目すれば、6 節のおもちゃの系とそっくりである。強磁性的な傾向を持ったおもちゃの系がたくさん集まって、多電子系での強磁性を生み出すのではないかと期待される。

この系に対応する一電子の Schrödinger 方程式 (3) を調べると、一電子のエネルギー準位は $\varepsilon_1(k) = -2t - 2s(1 + \cos 2k)$, $\varepsilon_2(k) = 2s + 2t(1 + \cos 2k)$ と表される。(波数は、 $n = 0, \pm 1, \dots, \pm \{(N/2) - 1\}/2$ として、 $k = 2\pi n/N$ 。) 二つのバンドがあり、いずれも「平ら」ではない。

この系で、電子数を $N_e = N/2$ と固定する。 $U = 0$ では通常の Pauli 常磁性 (図 1) が現れ、基底状態は磁化を持たない。さらに、 $U < 4s$ では、スピンの完全にそろった状態は基底状態ではあり得ないことが示される。強磁性を得るためには、 U が十分大きい「非摂動的な」領域を扱う必要がある。

無次元のパラメーター t/s と U/s が十分に大きいとき¹⁶、上述の Hubbard 模型の基底状態は、(スピン角運動量に関する自明な縮退を除けば) ただ一つしかなく、全ての電子のスピンが完全にそろって強磁性を示すことが証明された [16]。モデルは人工的だが、特異性を持たない Hubbard 模型での強磁性の厳密な例が得られた。特に、「運動エネルギーと相互作用の競合」のある系で、十分大きい有限の相互作用 U における強磁性の出現が示されたことには意味がある。

このモデルで $s = 0$ とすれば、「平ら」なバンドを持つ系が得られる。 t/s が大きいときの強磁性は、前節で触れた平坦バンド強磁性に摂動が加わったものとして理解できる。しかし、この系ではバンドが十分に曲がった領域においても、強磁性の存在が証明されている¹⁷。そのような領域では、平坦バンド強磁性とのアナロジーよりも、「おもちゃの系の強磁性をつなぎ合わせた」という描像の方がしっくりくるだろう。厳密な結果は、モデルのパラメーターが特別な関係を満たすときにだけ示されているが、強磁性ははるかに広いパラメーターの範囲で現れることもわかってきた [15]。

これまで扱ってきた強磁性を示す Hubbard 模型の三つの例では、基底状態は電流を通さない絶縁体を表している。本節のモデルで、電子数が $N/2$ よりも少ない場合には、電子たちが強磁性を示しつつ電気伝導にも寄与する「金属強磁性」が現れると予想されている。最近の結果 [15] から、少なくとも 1 次元のモデルについては基底状態が金属強磁性を示すことが確実になったが、この方向での厳密な結果はない。

10 そして、何がわかったか

三つの厳密な例を通して、数多くの電子のある系で、電子の量子力学的な運動と、スピンに依存しない (クーロン) 相互作用だけから強磁性が生じ得ることが、はっきりとわかった。根本的な疑問に対して明瞭な答えが得られたという意味では、一つの目標は達成されたと言える。各々の例を深く調べることで、スピンによらない相互作用が強磁性を生み出すメカニズムを読みとっていくことができるはずだ¹⁸。それによって、強く相互作用し合う量子力学的な多体系の生み出す物理的なストーリーについての我々の理解が深まることを願いたい。

しかし、このようなアプローチによって、現実の磁石の起源にもすぐに光が当たるとは言えない。厳密な例は、極端に理想化されている上に、少なからず人工的である。さらに、我々に馴染みの深い鉄やニッケルでの強磁性は、

¹⁶たとえば、 $U/s > 27$ かつ $t/s \geq 27$ 。

¹⁷ U/s が十分大きければ、 $t/s = 1.6$ で強磁性の存在が証明されている。このときには、下のバンドは (エネルギーギャップをも含めた) 全エネルギー領域の $1/4$ 以上を占めている。

¹⁸この解説でも、各々の強磁性の例に簡単な描像を添えた。しかし、一つの例から、いくつかの異なった物理的な描像が得られることも少なくない。

厳密な例とは異なったメカニズムで生じている可能性が高い。ペーパークリップが磁石に吸い寄せられる不思議を本当に解き明かすためには、量子多体系の物理をより深く理解し、より多くの（おそらくは、驚くべき）ストーリーを学び取る必要があるのだろう。

参考文献

- [1] 田崎晴明、固体物理 **31**, 173 (1996).
- [2] 草部浩一、青木秀夫、固体物理 **30**, 769, 867 (1995), **31**, 16, 100, 205 (1996).
- [3] W. J. Heisenberg, Z. Phys. **49**, 619 (1928).
- [4] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory) (Pregamon, 1977).
- [5] E. H. Lieb and D. Mattis, Phy. Rev. **125**, 164 (1962) の Introduction を見よ。これらの著者によると、この定理をはじめに示したのは Wigner だという。
- [6] J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **30**, 275 (1963); M. C. Gutzwiller, Phy. Rev. Lett. **10**, 159 (1963); J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. (London) **A276**, 238 (1963). これらの三つの論文で、Hubbard 模型での電子相関がはじめて本格的に研究されたと言われている。モデルそのものは、かなり以前から研究されていた。
- [7] 川畑有郷、電子相関（丸善、1992）、斯波弘行、固体の電子論（丸善、1996）
- [8] 川上則雄、日本物理学会誌 **46**, 565 (1991); 今田正俊、日本物理学会誌 **48**, 437 (1993); 小形正男、日本物理学会誌 **49**, 893 (1994).
- [9] 「節のない波動関数」が構成できるときには、状態の符号を適当に付け替えて、ハミルトニアンが線型代数の Perron-Frobenius の定理の条件を満たすようにすることができる。たとえば、田崎晴明、物性研究 **58**, 121 (1992) の 5.1 節を見よ。
- [10] Y. Nagaoka, Phy. Rev. **147**, 392 (1966); D. J. Thouless, Proc. Phys. Soc. London **86**, 893 (1965); H. Tasaki, Phy. Rev. **B40**, 9192 (1989).
- [11] A. Mielke, J. Phys. **A24**, 3311 (1991); *ibid.* **A25**, 4335 (1992); Phys. Lett. **A174**, 443 (1993).

- [12] H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1608 (1992); A. Mielke and H. Tasaki, *Commun. Math Phys.* **158**, 341 (1993).
- [13] K. Kusakabe and H. Aoki, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 144 (1994).
- [14] H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1158 (1994); *J. Stat. Phys.* **84**, Numbs. 3/4 (1996) in press.
- [15] K. Penc, H. Shiba, F. Mila and T. Tsukagoshi, preprint (cond-mat/9603042); H. Sakamoto and K. Kubo, 投稿準備中。
- [16] H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 4678 (1995). この論文の主定理 (Theorem I) の証明は H. Tasaki (投稿準備中) で改良され、定理の適用範囲も広がった。特に $\lambda > \lambda_c$ という条件は、 $\lambda \neq 0$ に置き換えられた。