

Hubbard 模型の物理と数理

田崎晴明²

1 はじめに

グレン・グールドによれば、J. S. バッハは、人間には同時に生起する複数の出来事そのまま知覚し理解する能力があることを認識し、それを音楽の形で実践した最初の人だという。バッハの多声的な鍵盤楽器曲には、主旋律と伴奏という区分はない。異なる二つ、あるいは三つの旋律は互いに完全に対等であり、それらが緻密に計算された方法で絡み合い、全体として一つの完璧な楽曲が構成される。バッハを真の意味で理解するためには、同時に進行する複数の声部を独立に認識しながら、楽曲全体の姿を感じとらなくてはならないという。

私のように音楽的能力の乏しい者にとっては、これは至難の業である。それでも、比較的透明な構造の曲を繰り返し聴いたとき、突然霧が晴れ渡るように同時進行する複数の声部の姿が完全に認識されることがある。それは、我々の中の、知性と感性が未だ分化しない深い所を魅了する素晴らしい体験である。

しかし、そういう例外的な場合を除けば、私に聞こえてくるバッハは、一番覚えやすい「主旋律」と、その背後で漠然と響いている「伴奏」の重ね合わせでしかない。音楽的な認識能力の不足のために、無意識の内にバッハを安易に再解釈しながら聞いているのだろう。

物理学における多体問題は、数多くの構成要素が互に対等に振る舞い、相互作用しながら織りなす複雑にして壮大な構築物である。この構築物の構造を理解し、そこから様々なストーリーを聴き取っていくのが、我々理論物理学者の仕事である。そのために我々が最初に試みるのは、この交響楽の中から「主旋律」を拾い出して理解するという「一体問題による近似」である。これによって、楽曲 = 物理現象の大ざっぱなイメージが得られる。次の段階は、主旋律を陰から支えている「伴奏」を理解しようとする「平均場近似」だろう。「伴奏」が「主旋律」と和声的にしっかりと調和していれば、つまり、「平均場」のふるまいが「一体問題」と無撞着であれば、楽曲 = 物理現象はほぼ完全に理解されたということになる。実際、多くの物理学者が、多体問題の理論の最終目標は優れた平均場近似を作ることだと考えているようだ。

しかし、バッハの鍵盤曲の中に「主旋律」と「伴奏」の区別が存在しないのと同様に、多体系の中にも特別な「一体問題」と「平均場」の区別は存在しない。「一体問題」と「平均場」という区分は、多体問題はあるがままに解析できない人間が作り出した便宜的なものにすぎないのだ。

¹固体物理 vol. 31, No. 3, 1996, pp. 1-16.

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

人間には多体問題の中で同時に生起する複数の出来事を、そのまま知覚し、理解することができるか？あるいは、「一体問題」と「平均場」という便宜的な区分に頼らずに、多体問題をあるがままに解析することは可能か？これが、この解説のテーマである。はじめから壮大な交響曲に挑戦するのは無謀だろう。まずはなるべく透明な構造を持った Hubbard 模型という鍵盤曲を繰り返し聴くことから始めよう。

2 Hubbard 模型

2.1 この解説について

Ashcroft-Mermin の教科書では、Hubbard 模型を固体中の電子を記述するための “a highly oversimplified model” と紹介している。Hubbard 模型は、電子が固体中を量子力学的に運動できるという効果と、電子間に非線形な反発力の相互作用が働いている効果だけをぎりぎり取り入れた、いわば極小モデルである。現実的な固体のモデルと考えるには、おそらく単純過ぎるだろう。

にもかかわらず、Hubbard 模型は理論物理学における非常に優れたモデルのひとつである。Hubbard 模型は単純そうに見えて、実に多彩な物理現象を示すだろうと考えられている。さらに、Hubbard 模型を真面目に研究してみると、これは驚くほど難しい問題であることもわかる。Hubbard 模型を深く理解することができれば、我々は多くの新しい物理的なストーリーや、理論的、数学的な概念を学びとり、「人類全体を少しずつ賢くする」という物理学の最終目標に少しでも貢献できるに違いない。これは、Ising 模型が、現実の強磁性体のモデルとしてははなはだ貧弱であったにも関わらず、優れたモデルであったのと同様に似ている³。

ここでは、Hubbard 模型について厳密に示されているいくつかの事実を選んで解説する。厳密な定理を単に羅列するのではなく、結果の背後にある物理的なストーリーを明確にしようと努めた。テーマを広げすぎないために、絶対零度（基底状態）での磁気的な性質を中心にまとめた。Hubbard 模型について厳密に知られていることの総合的なレビュー⁴を目指したのではなく、参考文献も不完全である。また、固体物理にそれほど馴染みのない読者をも想定して、基礎的な事項もきちんと説明するように心がけた⁵。

³Ising 模型よりも現実の磁性体に近い量子 Heisenberg 模型も、また優れたモデルである。Heisenberg 模型と Hubbard 模型の間あたりに位置する t - J 模型もかなり研究されているが、私見では、これはやや中途半端なモデルである。

⁴ある程度それに近いものを、Lieb [1] が書いている。

⁵私の執筆が遅れに遅れている間に、本誌に多体電子論についての連載 [2] が始まり、その最初の三回はこの解説のかなりの部分と重なっている。しかし、[2] の方は、スタンダードな固体物理や近年流行の近似理論から生まれた様々な概念（あるいは擬似概念）を解説していく中で、Hubbard 模型にも触れるという固体物理の専門家向けの解説になっている。（ロマン派や電子音楽などの存在も踏まえてバッハを聴く立場？）Hubbard 模型だけに絞り込んでまとめた私の解説にも多少の存在意義があると願いたい。

厳密な理論というのは、たとえばダイアグラム計算や数値対角化とは違って、本質的にパッケージ化できないものである。証明したい「物理」について深く深く考え、どのような数学的道具が必要かを物理現象そのものから学びとる。高校生レベルの数学で事足りるときもあれば、新しい数学の道具をゼロから作る必要があるかもしれない。それはどちらでも構わない。とにかく、生き生きとした魅力的な「物理」を完全に理論的にコントロールすることが研究の動機であり、指導原理である。少なくとも私の考える「よい数理解物理」とはそのようなものである。

そういう意味では、最終的な定理だけを眺めるのでは、理論の一番面白いところを見逃すことになる。証明の方針、あるいは、物理的なアイデアを如何に厳密な理論に持っていくかという過程が紹介できれば、もっとわくわくする解説になるはずだ。これは紙面、時間の都合上不可能なので、せめてそういった側面の香りだけでも伝える事を心がけよう。

2.2 Hubbard 模型の定義

まず、Hubbard 模型を一般的に定義する⁶。格子 Λ を有限個の格子点 x, y, \dots の集まりとする。物理的には、各々の格子点は固体中の原子を表している。物事を思いきり簡略化して、一つの原子の回りに一つの電子軌道のみを考え、さらにその軌道は縮退していないと仮定する⁷。他の軌道(バンド)にも電子がいるはずだが、そういった電子たちはさして面白い事はしないので、当面は忘れてしまおうという発想である。

格子点(=原子) $x \in \Lambda$ の回りの電子軌道にスピン $\sigma = \uparrow, \downarrow$ を持った電子を作る演算子を $c_{x,\sigma}^\dagger$ と書く。対応する消滅演算子は $c_{x,\sigma}$ であり、 $n_{x,\sigma} = c_{x,\sigma}^\dagger c_{x,\sigma}$ が数演算子である。これらのフェルミオン演算子は、反交換関係

$$\{c_{x,\sigma}^\dagger, c_{y,\tau}\} = \delta_{x,y} \delta_{\sigma,\tau} \quad (2.1)$$

$$\{c_{x,\sigma}^\dagger, c_{y,\tau}^\dagger\} = \{c_{x,\sigma}, c_{y,\tau}\} = 0 \quad (2.2)$$

を満たす。

系に一つも電子がない状態を Φ_{vac} をと書く。任意の $x \in \Lambda, \sigma = \uparrow, \downarrow$ について $c_{x,\sigma} \Phi_{\text{vac}} = 0$ が成り立つ。Hubbard 模型の状態空間は、 Φ_{vac} に色々な x, σ についての生成演算子 $c_{x,\sigma}^\dagger$ を次々と作用させたもので張られる。反交換関係 (2.2) から $(c_{x,\sigma}^\dagger)^2 = 0$ なので、各々の格子点は、空っぽであるか、 \uparrow あるいは \downarrow 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をとる。よって、全体の状態空間の次元は $4^{|\Lambda|}$ である⁸。

⁶固体物理との関連などについては、[3] の 4 章などを参照するとよい。

⁷このような系を single-band Hubbard model という言葉で表現することが多い。これらのモデルも格子の構造によっては複数の(一電子)バンドを持つので、この用語は不適切である。たとえば、single-state Hubbard model とでも呼ぶべきか？

⁸この解説では、集合 S の要素の個数を $|S|$ と書く。

Hubbard 模型のハミルトニアンは、

$$H = H_{\text{hop}} + H_{\text{int}} \quad (2.3)$$

のように、2つの部分の和として表すのが自然である。電子の hopping を表す H_{hop} の一般形は

$$H_{\text{hop}} = \sum_{x,y \in \Lambda} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} t_{x,y} c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} \quad (2.4)$$

である⁹。系の性質を決めるのは hopping の係数 $t_{x,y} = t_{y,x} = \text{実数}$ で、これは電子が x から y へ(あるいは y から x へ)跳ぶ(トンネルする)遷移振幅を表している。また $x = y$ のときには、(2.4) の和の中身は $t_{x,x} c_{x,\sigma}^\dagger c_{x,\sigma} = t_{x,x} n_{x,\sigma}$ となり、一体のポテンシャルを表している。

電子間のクーロン相互作用を表す H_{int} は

$$H_{\text{int}} = \sum_{x \in \Lambda} U_x n_{x,\uparrow} n_{x,\downarrow} \quad (2.5)$$

である。ここで $U_x > 0$ は定数である。2つの電子が同じ軌道 x 上に来たときに、エネルギーが U_x だけあがることになる。元来のクーロン相互作用は長距離力だが、Hubbard 模型ではこれをぎりぎりまで単純化して、最も強く効きそうな最短距離での反発力にしてしまったのである¹⁰。

2.3 いくつかの物理量

いくつかの基本的な保存量を定義しておこう。系の全電子数の演算子

$$\hat{N}_e = \sum_{x \in \Lambda} (n_{x,\uparrow} + n_{x,\downarrow}) \quad (2.6)$$

はハミルトニアン H と交換する。 \hat{N}_e 以外にも保存量はいくつかあるが、一般には \hat{N}_e の固有値あるいは期待値を一定に保った範囲で系の固有状態や平衡状態を議論する¹¹。この解説では一貫して、 \hat{N}_e の固有値が一定値 N_e をとる Hilbert 空間だけを考えることにする。各格子点には最大二個の電子が入るので、 $0 \leq N_e \leq 2|\Lambda|$ である。電子数 N_e は、Hubbard 模型の最も基本的なモデル・パラメーターである。

⁹(2.4) の和の前にマイナスの符号を付けて、 $t_{x,y} \geq 0$ を仮定するのが「普通の」設定である。しかし hopping の符号がそのように決まるべき一般的な理由はないようである。系が bipartite な場合(定義 5.3 参照)には、全ての $x \in A$ についてゲージ変換 $c_{x,\sigma}^\dagger \rightarrow -c_{x,\sigma}^\dagger$ を行えば全ての $t_{x,y}$ ($x \neq y$) の符号は反転する。

¹⁰モデルを作る際に「忘れる」事にした他のバンドの電子たちが、クーロン力を遮蔽して短距離力に変えるという見方もある[3]。

¹¹たとえば、すぐ後に議論する全スピンも保存量である。しかし、現実の電子系では LS 結合のために全スピンは保存されないで、これらの固有値を一定に制限はしない。

格子点 x におけるスピン演算子 $\hat{S}_x = (\hat{S}_x^{(1)}, \hat{S}_x^{(2)}, \hat{S}_x^{(3)})$ を

$$\hat{S}_x^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \tau = \uparrow, \downarrow} c_{x, \sigma}^\dagger (p^{(\alpha)})_{\sigma, \tau} c_{x, \sigma}, \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (2.7)$$

と定義する。ここで $p^{(\alpha)}$ は Pauli 行列である。系の全スピンを表す演算子は、

$$\hat{S}_{\text{tot}}^{(\alpha)} = \sum_{x \in \Lambda} \hat{S}_x^{(\alpha)}, \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (2.8)$$

である。 $\hat{S}_{\text{tot}}^{(\alpha)}$ は hopping のハミルトニアン (2.4)、相互作用のハミルトニアン (2.5) のそれぞれと交換する。これらのハミルトニアンは、スピン空間の回転について対称なのである。

もちろん $\hat{S}_{\text{tot}}^{(\alpha)}$ どうしは交換しないので、通常の間運動量の取り扱いに従って、 $\hat{S}_{\text{tot}}^{(3)}$ と $(\hat{S}_{\text{tot}})^2 = \sum_{\alpha=1}^3 (\hat{S}_{\text{tot}}^{(\alpha)})^2$ の二つのスピン演算子とハミルトニアン H を同时对角化する表示を取ることにする。スピン演算子 $\hat{S}_{\text{tot}}^{(3)}$ と $(\hat{S}_{\text{tot}})^2$ の固有値を、それぞれ $S_{\text{tot}}^{(3)}$ と $S_{\text{tot}}(S_{\text{tot}} + 1)$ と書く。電子数 N_e が与えられ (固定され) たとき、

$$S_{\text{max}} = \begin{cases} N_e/2 & 0 \leq N_e \leq |\Lambda| \text{ のとき} \\ |\Lambda| - (N_e/2) & |\Lambda| \leq N_e \leq 2|\Lambda| \text{ のとき} \end{cases} \quad (2.9)$$

とすると、全スピンの大きさ S_{tot} の取り得る値は $S_{\text{tot}} = 0, 1, \dots, S_{\text{max}}$ (または $S_{\text{tot}} = 1/2, 3/2, \dots, S_{\text{max}}$) である。

ある決まった N_e に対して、基底状態がどのような S_{tot} を値を取るかは、系の磁気的な性質を議論する上で、最も基本的な問題である。特に、格子 Λ を大きくしていったとき、基底状態の全スピンが格子点の総数 $|\Lambda|$ に比例して大きくなると、系は絶対零度で広い意味での強磁性を示すという。平たく言えば、そのような系は $T = 0$ で「磁石」になるということである。また、基底状態の全スピンが許される範囲での最大値 S_{max} をとるとき、系は絶対零度で完全な強磁性を示すという。

後の解析で便利のように、以下の量を定義しておく。

定義 2.1 電子数 N_e を固定する。許される範囲内の S_{tot} に対して、 $\hat{N}_e \Phi = N_e \Phi$, $(\hat{S}_{\text{tot}})^2 \Phi = S_{\text{tot}}(S_{\text{tot}} + 1) \Phi$ を満たす Φ の取り得る最低のエネルギーを $E_{\text{min}}(S_{\text{tot}})$ とする。

系が完全な強磁性を示すことは、任意の $S_{\text{tot}} < S_{\text{max}}$ なる S_{tot} について $E_{\text{min}}(S_{\text{tot}}) > E_{\text{min}}(S_{\text{max}})$ が成立すること等価である。

3 基本的な結果

Hubbard 模型のハミルトニアンの持つ意味を理解するために、二つの特別な極限で現れる物理を議論する。これによって、Hubbard 模型が優れたモデルであるという 2.1 節での主張が説得力を持つてくると思う。

3.1 相互作用のない系

まず H_{int} (2.5) に現れるクーロン相互作用が、全ての x について $U_x = 0$ であるとしよう。ハミルトニアン $H = H_{\text{hop}}$ (2.4) はフェルミオン演算子の 2 次式なので (少なくとも形式的には) 簡単に対角化することができる。 H_{hop} (2.4) に対応する一電子の Schrödinger 方程式は

$$\sum_{y \in \Lambda} t_{x,y} \varphi_y = \varepsilon \varphi_x \quad (3.10)$$

である。 $\varphi = (\varphi_x)_{x \in \Lambda}$ が一電子の波動関数、 ε が一電子のエネルギーである。添字 $j = 1, 2, \dots, |\Lambda|$ を用いて、(3.10) のエネルギー固有値を ε_j 、対応する規格化された波動関数を $\varphi^{(j)} = (\varphi_x^{(j)})_{x \in \Lambda}$ と書く。エネルギー固有値は縮退も含めて数え、 $\varepsilon_j \leq \varepsilon_{j+1}$ のように取る。

標準的な例を見ておこう。1次元格子 $\Lambda = \{1, 2, \dots, N\}$ に周期的境界条件を課し、格子点 1 を格子点 $N+1$ と同一視する。hopping については、 $t_{x,x+1} = t_{x+1,x} = -t$ とし、それ以外については $t_{x,y} = 0$ とする。対応する Schrödinger 方程式 (3.10) は簡単に解ける。波数 $k = 2\pi n/N$ (ただし $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \{(N/2) - 1\}, N/2$) を用いて、固有関数は $N^{-1/2} \exp[ikx]$ 、対応するエネルギーは $\varepsilon(k) = -2t \cos k$ と表される。ここで n をうまく $j = 1, 2, \dots, N$ に対応させれば、上のような ε_j が得られる。

再び一般論に戻り、固有関数 $\varphi^{(j)} = (\varphi_x^{(j)})_{x \in \Lambda}$ に対応するフェルミオン演算子を

$$a_{j,\sigma} = \sum_{x \in \Lambda} \varphi_x^{(j)} c_{x,\sigma} \quad (3.11)$$

のように定義する。波動関数の組 $(\varphi^{(j)})_{j=1,2,\dots,|\Lambda|}$ が正規直交基底をなすことから (なさないならば、適当に取り替える)、(3.11) の逆変換は $c_{x,\sigma} = \sum_{j=1}^{|\Lambda|} (\varphi_x^{(j)})^* a_{j,\sigma}$ となる。これを (2.4) に代入し、(3.10) を用いれば

$$H_{\text{hop}} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=1}^{|\Lambda|} \varepsilon_j a_{j,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=1}^{|\Lambda|} \varepsilon_j \tilde{n}_{j,\sigma} \quad (3.12)$$

のように H_{hop} が対角化される。ここで、 $\tilde{n}_{j,\sigma} = a_{j,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}$ は j 番目の (一電子) 固有状態に対応する数演算子と解釈できる。

A, B を $\{1, 2, \dots, |\Lambda|\}$ の二つの部分集合で、 $|A| + |B| = N_e$ を満たすものとする。(3.12) を用いれば、

$$\Phi_{A,B} = \left(\prod_{j \in A} a_{j,\uparrow}^\dagger \right) \left(\prod_{j \in B} a_{j,\downarrow}^\dagger \right) \Phi_{\text{vac}} \quad (3.13)$$

が $H = H_{\text{hop}}$ の固有状態で、エネルギー固有値

$$E_{A,B} = \sum_{j \in A} \varepsilon_j + \sum_{j \in B} \varepsilon_j \quad (3.14)$$

を持つことがわかる。エネルギー $E_{A,B}$ を最小にするような部分集合 A, B を選べば、系の基底状態が得られる。特に一電子のエネルギー準位に縮退がなく（つまり $\varepsilon_j < \varepsilon_{j+1}$ ）電子数 N_e が偶数なら、 $H = H_{\text{hop}}$ の基底状態はただ一つしかなく、

$$\Phi_{\text{GS}} = \left(\prod_{j=1}^{N_e/2} a_{j,\uparrow}^\dagger a_{j,\downarrow}^\dagger \right) \Phi_{\text{vac}} \quad (3.15)$$

である。この状態が全スピン $S_{\text{tot}} = 0$ を持つことは簡単に確かめられる。また、基底状態 (3.15) は、一切の長距離秩序を持たない。磁性の観点からは、長距離秩序のない状態は、パラ磁性を示すといわれる¹²。

上の1次元の例では、 $\varepsilon(0) = -2t$, $\varepsilon(\pi) = 2t$ 以外の一電子エネルギー準位は二重に縮退している。この場合には、 N_e の値によっては $H = H_{\text{hop}}$ の基底状態はただ一つとは限らない。しかし、基底状態の縮退の次元は高々4で、基底状態の全スピンは $S_{\text{tot}} = 0, 1/2, 1$ である。系の本質的なふるまいは、縮退のない場合と変わらない。一般に一電子のエネルギー準位がバルクな縮退を持たない限りは、同じ事が結論できる。

1次元の例では、一電子 Schrödinger 方程式 (3.10) の固有状態では、電子は波数 k を持った平面波状態にあった。このような状態を用いてハミルトニアン $H = H_{\text{hop}}$ が (3.12) のように対角化されたということは、この系では電子が「波」としてふるまっていることを意味している。これは、一般の（並進対称な） $U_x = 0$ の Hubbard 模型についてもあてはまる。

3.2 hopping のない系

次に H_{hop} (2.4) で全ての $t_{x,y}$ が 0、つまり $H_{\text{hop}} = 0$ という正反対の状態を考えよう。ハミルトニアンは $H = H_{\text{int}}$ (2.5) であり、これは既に対角化されている。一般の固有状態は

$$\Psi_{X,Y} = \left(\prod_{x \in X} c_{x,\uparrow}^\dagger \right) \left(\prod_{x \in Y} c_{x,\downarrow}^\dagger \right) \Phi_{\text{vac}} \quad (3.16)$$

と書ける。ここで X, Y は Λ の任意の部分集合で、上向きあるいは下向きスピンの電子の占める格子点を表している。この状態の電子数は $N_e = |X| + |Y|$ 、エネルギー固有値は

$$E_{X,Y} = \sum_{x \in X \cap Y} U_x \quad (3.17)$$

である。与えられた N_e に対する基底状態は、 X, Y をうまく選んでエネルギー $E_{X,Y}$ を最小にすることで作られる。特に、 $N_e \leq |\Lambda|$ ならば $X \cap Y = \emptyset$ とすることができるので、基底エネルギー 0 の基底状態が得られる。

¹² 正確に言えば、これはスピンによる磁性のみを考えた場合に正しい。電子の軌道運動をも考慮したときには、このような状態が反磁性を示すこともある。

このような系では、基底状態は秩序を持たず、パラ磁性を示す。また、電子たちは明らかに古典的な「粒子」としてふるまっている。

3.3 Hubbard 模型の難しさ、おもしろさ

Hubbard 模型のハミルトニアンを構成する H_{hop} と H_{int} の性質を別個に見てきた。 H_{hop} も H_{int} も、単独では罪のない解析しやすいハミルトニアンである。またいずれのハミルトニアンも、特定の長距離秩序を好む傾向は持っていない。

しかし、 H_{hop} では電子は「波」として振る舞っているのに対し、 H_{int} では電子は「粒子」として振る舞っている。このように全く異なった性格を持つ H_{hop} と H_{int} を足し合わせたハミルトニアンでは、どのような物理が現れるのか？これは、まさに量子力学における波動・粒子の二重性の核心を突く魅力的な問題である。振り返ってみれば、場の量子論における φ^4 模型や近藤問題をはじめとした多体問題の優れたモデルの多くは、物質の波動性と粒子性 (= 局所的な非線型相互作用) を組み合わせた極小モデルであった。

波動・粒子の二重性は、数学的には、 H_{int} と H_{hop} が交換しないという事実になって現れる。各々のハミルトニアンが対角化されていても、両者の和の性質を調べるのは極めて困難な問題である。もちろん、単に難しいというだけで研究する価値が生まれるわけではない。Hubbard 模型が真におもしろいのは、 H_{hop} も H_{int} も単独では何の秩序も指向しないにも関わらず、それらの和の Hubbard ハミルトニアンは、状況に応じて、反強磁性、強磁性、超伝導などなどの様々な長距離秩序を生み出すと考えられているからである。ごく単純で罪のない二つのハミルトニアンを足し合わせたときに、波動性と粒子性の競合、あるいは、線型性と非線型性の拮抗が生じ、豊かで多彩な物理現象が生み出される。物理学者にとっては、最もわくわくするシナリオではないか！

4 秩序がないことを示すいくつかの定理

Hubbard 模型のような理想化されたモデルを研究する場合には、主要な目標は何らかのおもしろい物理が「おきる」ことを示すことである。何かが「おきない」ことを示す理論は少々面白味に欠ける。それでも、どのような状況で何が「おきない」かをあらかじめ正確に知っておくのは、大切なことである。

古典的な Lieb-Mattis の定理 [4] は、1次元で最隣接格子点への hopping しかなかった Hubbard 模型では、強磁性がおきないことを示している¹³。

定理 4.2 1次元の端のある格子 $\Lambda = \{1, 2, \dots, N\}$ 上の Hubbard 模型を扱

¹³この定理は、[4] の Appendix で証明されている。論文 [4] の本文では、連続空間での相互作用する電子系の問題が扱われている。

う。hopping の係数 $t_{x,y}$ は、 $x = y$ のとき $|t_{x,y}| < \infty$ 、 $|x - y| = 1$ のとき $0 < |t_{x,y}| < \infty$ で、それ以外では $t_{x,y} = 0$ とする。また全ての x について $|U_x| < \infty$ とする。定義 2.1 の $E_{\min}(S_{\text{tot}})$ は、 $S_{\text{tot}} = 0, 1, \dots, S_{\text{max}} - 1$ (あるいは $S_{\text{tot}} = 1/2, 3/2, \dots, S_{\text{max}} - 1$) について不等式

$$E_{\min}(S_{\text{tot}}) < E_{\min}(S_{\text{tot}} + 1) \quad (4.18)$$

を満たす。

この定理の最も重要な帰結は、上のような 1 次元系の Hubbard 模型の基底状態は必ず $S_{\text{tot}} = 0$ (あるいは $S_{\text{tot}} = 1/2$) を持つことである。これだけから系がパラ磁性を示すとは言い切れないが、少なくとも強磁性がないことは断言できる。

定理 4.2 は、周期的境界条件を課した系には適用できない。しかし、十分大きな系では境界条件によって系の性質が本質的に変わってしまうことはないと考えられる。たとえば次近接格子点への hopping が存在すれば、状況は大きく変わってしまう。定理 4.2 の証明が成り立たないだけでなく、6.4 節で見ると新しい物理が現れ得る。

定理 4.2 の証明は、ハミルトニアンを適切な基底で行列表示すると非対角要素が負になることを利用して、線型代数の Perron-Frobenius の定理を使うというものである。Perron-Frobenius の定理 (の特殊な場合) は、「(節のない波動関数が作れるときには) 基底状態は、節のない波動関数に対応する。」という命題として物理でも馴染みである。この論法は、Lieb-Mattis によって量子 Heisenberg 模型にも適用され [5]、今日では標準的な方法になっている。

その他の「何かがおきない」というタイプの厳密な結果としては、有名な Mermin-Wagner の定理をそのまま拡張して、1, 2 次元の Hubbard 模型は有限温度では磁気的な秩序を持たないことを示した Ghosh の結果がある [6]。同じ方法で、超伝導の対凝縮がないことも簡単に証明できる。Koma-Tasaki は、基本的には同じ内容を、相関関数の上限の形で証明した [7]。

[6] の証明は、Mermin-Wagner に倣って Bogoliubov 不等式を用いる標準的なものだが、この手の証明の常として、ひたすら計算していくと求める結果であるという感があり、物理の本質が何処にあるのかはとらえにくい。McBryant-Spencer のアイデアを量子力学のゲージ変換と組み合わせた [7] の証明はおもしろい。量子系が普遍的に持っている (波動関数の位相に関する) $U(1)$ 対称性だけを用いて、低温ではほぼ最適な相関関数についての上限が証明される様には、一種「無から有を生む」趣がある。

5 half-filled の系

電子数 N_e が格子点の総数 $|\Lambda|$ に等しい系は、half-filled であるといわれる。許される最大の電子数が $N_e = 2|\Lambda|$ なので、そのちょうど半分だけ電子

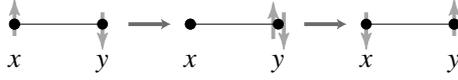


図 1: 電子が二回 hopping を行うと、格子点 x, y のスピンの交換される。これが、half-filled の Hubbard 模型における反強磁性的な傾向の原因である。

が詰まっているという意味である。各々の原子が一つの電子を提供すれば系は half-filled になるので、これは物理的にも自然な状況を表している。数学的にも half-filled の系は色々な意味で扱いやすく、比較的多くの結果が得られている。

5.1 $U \gg t$ での摂動論

まず $H_{\text{hop}} = 0$ の場合の基底状態を考えてみよう。全ての x について $U_x > 0$ と仮定する。3.2 節で見たように、 $N_e \leq |\Lambda|$ ならば状態 $\Psi_{X,Y}$ において $X \cap Y = \emptyset$ と選べば基底エネルギー $E_{X,Y} = 0$ を持つ基底状態が得られる。特に $N_e = |\Lambda|$ なので、 $X \cap Y = \emptyset$ を要請すると必然的に $X \cup Y = \Lambda$ となる。そこで、基底状態 $\Psi_{X,Y}$ (3.16) は、

$$\Psi_{\tilde{\sigma}} = \left(\prod_{x \in \Lambda} c_{x, \sigma(x)}^\dagger \right) \Phi_{\text{vac}} \quad (5.19)$$

と書くこともできる。ここで $\tilde{\sigma} = (\sigma(x))_{x \in \Lambda}$ は、各格子点でのスピン $\sigma(x) = \uparrow, \downarrow$ をずらりと並べたもので、スピン系の用語を借りて、スピン配置と呼んでいいだろう。基底状態 (5.19) はスピン配置の選び方の自由度だけ縮退していると言える。

この状況に、電子の移動を表す H_{hop} の効果を摂動で取り入れてみよう。 H_{hop} の対角成分 $\sum_{x, \sigma} t_{x,x} c_{x, \sigma}^\dagger c_{x, \sigma} = \sum_x t_{x,x} (n_{x, \uparrow} + n_{x, \downarrow})$ は状態 $\Psi_{\tilde{\sigma}}$ のエネルギーを一様によらずだけなので考えなくてよい。 H_{hop} から対角成分を取り去った残りを $\tilde{H}_{\text{hop}} = \sum_{x \neq y, \sigma} t_{x,y} c_{x, \sigma}^\dagger c_{y, \sigma}$ と書く。 $\Psi_{\tilde{\sigma}}$ に \tilde{H}_{hop} を一回作用させると、電子が一つ移動して、電子がいない格子点と電子が二つ入った格子点が、それぞれ一つずつ現れる。これは、非摂動ハミルトニアン H_{int} の基底状態ではないので、摂動は \tilde{H}_{hop} の二次から効き始めることがわかる。

二次の摂動で取り入れられる過程を図 1 に示した。格子点 x にいた電子が振幅 $t_{x,y}$ で格子点 y にうつり、エネルギーが U_y だけ高い中間状態を作る。次に、格子点 y の二つの電子の内的一方が格子点 x にうつり、再び基底状態に戻る。図 1 のように、この過程で格子点 x, y のスピンの「交換」されることがある。格子点 x, y の電子のスピンの向きが同じ向きを向いていれば、排他率のためにこのような電子の移動は許されない。この二次摂動の過程は、 x, y のスピンの向きが逆を向いている（正確には合成角運動量 0 を持つ）状態のエネル

ギーを下げるという反強磁性的な傾向を持つことがわかる。

この事実を、もう少し形式的に導きなおしてみよう。 P_0 を、全ての $\tilde{\sigma}$ についての状態 (5.19) が張る空間への射影演算子とする。一次摂動が効かないことは、 $P_0 \tilde{H}_{\text{hop}} P_0 = 0$ より明らか。二次の摂動が (非摂動の) 基底状態 (5.19) の縮退をどのように解くかを表す有効ハミルトニアンは、定義に基づいて少し計算すると、

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= -P_0 \tilde{H}_{\text{hop}} \frac{1}{H_{\text{int}}} \tilde{H}_{\text{hop}} P_0 \\ &= P_0 \left\{ \sum_{x,y \in \Lambda} J_{x,y} \left(\hat{S}_x \cdot \hat{S}_y - \frac{1}{4} \right) \right\} P_0 \end{aligned} \quad (5.20)$$

となる。ここで、交換相互作用定数は $J_{x,y} = \{(t_{x,y})^2/U_x\} + \{(t_{x,y})^2/U_y\}$ である。(5.20) は、まさしく $S = 1/2$ の反強磁性 Heisenberg ハミルトニアンである。 U_x が $t_{x,y}$ に比べて十分大きいときには、half-filled の Hubbard 模型の低エネルギーでのふるまいは、反強磁性 Heisenberg 模型で記述されることが推測される。

5.2 Lieb の定理

Lieb の定理は、上の単純な摂動論による推測をある意味で裏付けてくれる。まず bipartite (二つに分けられる) という概念を導入する。

定義 5.3 格子 Λ 上に hopping $(t_{x,y})_{x,y \in \Lambda}$ のある系を考える。この系が bipartite であるとは、 Λ が $\Lambda = A \cup B$ のように交わりのない ($A \cap B = \emptyset$) 二つの部分格子 A, B に分割され、さらに $x, y \in A$ または $x, y \in B$ のときには $t_{x,y} = 0$ が成り立つことである。言い換えれば、異なる部分格子の間にしか hopping がないということである。

Lieb の定理 [8] の主張は以下の通り。

定理 5.4 bipartite な Hubbard 模型を考える。 $|\Lambda|$ は偶数とし、0 でない $t_{x,y}$ を通して Λ 全体がつながっているとす。また全ての x について、 $U_x = U > 0$ とする。このとき、系の基底状態は (自明なスピン縮退¹⁴をのぞけば) ただ一つしかない。さらに基底状態の全スピンは $S_{\text{tot}} = ||A| - |B||/2$ である。

定理に示された基底状態での S_{tot} の値は、同じ格子上の反強磁性 Heisenberg 模型の基底状態の S_{tot} と等しい。Lieb の定理の主張は、量子 Heisenberg 反強磁性体での Marshall-Lieb-Mattis の定理 [5] とよく似ている。しかし、ハミルトニアンを行列表示して「節のない波動関数」のアイデア (Perron-Frobenius 定理) を使うという前者の証明法は、1次元 (4節参照) 以外の

¹⁴角運動量の理論でよく知られているように、ハミルトニアンが回転対称なら、全角運動量 J (今の場合は $J = S_{\text{tot}}$) を持つハミルトニアンの固有状態は必ず $2J + 1$ 重に縮退している。

Hubbard 模型には通用しないようだ。これは単に技術的な問題ではなく、一般の Hubbard 模型で許される量子力学的な過程が Heisenberg 模型よりもはるかに豊富で複雑だという物理的な事実の現れである。Lieb の証明は、電子系の状態のスピン空間での対称性を巧みに用いたエレガントなものである。原論文の証明はかなりコンパクトにまとめられているので取り付きにくい、時間をかけて味わう価値は十分にある。また、この定理の有限温度版とも呼べるものが、Kubo-Kishi によって証明されている [9]。

Lieb の定理は、クーロン相互作用 U が 0 より大きければ、その大小に関わらず成立する。 U が小さいいわゆる弱結合の領域と、 U が大きいいわゆる強結合の領域では、Hubbard 模型の性質は本質的に異なっている可能性がある。それにも関わらず、単独の証明法で全ての $U > 0$ についての基底状態の性質が明らかにされるのはとても面白いことである。

しかし、有限系の基底状態の S_{tot} が厳密にわかって、対応する無限系の性質には様々な可能性が残されていることには注意しなくてはならない。たとえば、二つの部分格子がバランスしている $|A| = |B|$ の場合には、基底状態は $S_{\text{tot}} = 0$ を持ち、ただ一つしかない。この事実から、この系が絶対零度で長距離秩序を持たないことが結論できるかということ、全くそうではない。無限系の基底状態¹⁵は、反強磁性や超伝導などの長距離秩序を持っているということも大いに可能なのである。(強磁性の秩序の可能性は否定できる。) その場合には、自発的対称性の破れがあるので、無限系の基底状態はもちろんただ一つではない。有限系の基底状態と、無限系の基底状態の関係はかなり微妙な問題で、論文や解説の中でも不正確な記述のある場合が少なくないので、気をつけるべきだろう。たとえば、[10] に比較的詳しい議論がある。

Lieb の結果 [8] から、励起状態についての情報もある程度得ることができる。たとえば、任意の $S_{\text{tot}} \geq \||A| - |B|\|/2$ について、

$$E_{\min}(S_{\text{tot}}) < E_{\min}(S_{\text{tot}} + 1) \quad (5.21)$$

が成立することが、[8] の定理 1 と [5] の論法の組み合わせで簡単に証明できる¹⁶。

さらに half-filled の Hubbard 模型と反強磁性のスピン系との類似を裏付けるのは、Shen-Qiu-Tian が Lieb の方法を用いて証明した次の定理である [11, 12]。

定理 5.5 定理 5.4 と同じ条件を仮定する。 Φ_{GS} を系の基底状態とすると、不等式

$$\left\langle \Phi_{\text{GS}}, \hat{S}_x \cdot \hat{S}_y \Phi_{\text{GS}} \right\rangle \begin{cases} > 0 & x, y \in A \text{ または } x, y \in B \text{ のとき} \\ < 0 & x \in A, y \in B \text{ または } x \in B, y \in A \text{ のとき} \end{cases} \quad (5.22)$$

¹⁵非常に大きな系の非常に低温での振る舞いを記述するには、無限系の基底状態という概念を用いるのが物理的にも最も自然なのである。

¹⁶この事実について議論してくださった Shun-Qing Shen, Elliott Lieb の両氏に感謝する。

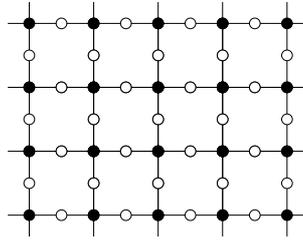


図 2: 二つの部分格子の格子点の数が異なっている格子の例。この上に定義された half-filled の Hubbard 模型は、普遍的にフェリ磁性を示すことが Lieb の定理の一つの帰結として示される。

が成り立つ。ここで $\langle \dots, \dots \rangle$ は量子力学の内積を表す。

このように、異なった部分格子のスピンどうしは負に相関していて、系が反強磁性的な傾向を持つことがわかる。

たとえば、3次元立方格子上の $S = 1/2$ 反強磁性 Heisenberg 模型は(無限体積極限では)十分低温で反強磁性的な長距離秩序を持つことが証明されている [13, 14]。同じことが、 U の十分大きい Hubbard 模型にも言えるのではないかと期待されるが、今のところこれを証明するための方法論やアイデアは全くない。Heisenberg 模型の場合の証明が拡張できないのかという疑問があるだろうが、それは絶望的であると答えてよいと思う。そもそも、反強磁性 Heisenberg 模型での長距離秩序の証明自体が決して物理的に自然なものではない。証明は、構成的場の量子論で考案された(空間的な) reflection positivity という性質に依存しているのだが、この性質が反強磁性 Heisenberg 模型で成立するのは「数学的な偶然」でしかない¹⁷。 U の大きい half-filled の Hubbard 模型と反強磁性 Heisenberg 模型は、よく似た「物理」を共有しているはずだが、同じ「数学的偶然」を共有している必要はない。スピン空間での回転対称性のある系で、長距離秩序の存在を証明するための「物理的に自然な」方法は未だに見いだされていないのである。

5.3 Lieb のフェリ磁性

Lieb の定理 5.4 の重要な帰結の一つとして、ある種の格子上的 half-filled の Hubbard 模型が普遍的にフェリ磁性を示すことがわかる [8]。これは、定理の主張から既に明らかかもしれないが、少し説明する。

たとえば、図 2 のような(いわゆる CuO 型の)格子は、図に黒と白の格子点で表した二つの部分格子に分かれる。格子の黒い点が一辺 L の正方格子をなしているとする、黒い格子点の総数は L^2 、白い格子点の総数は $2L^2$ となる。この格子上に Hubbard 模型を定義し、図中のボンド(点と点を結

¹⁷たとえば、強磁性 Heisenberg 模型については、reflection positivity は成立しないので、有限温度での長距離秩序の存在は未だに証明されていない。

ぶ線分)に0でない任意の hopping $t_{x,y}$ を対応させる、各格子点上にクーロン相互作用 $U > 0$ を置く。

Lieb の定理によれば、この Hubbard 模型の基底状態は全スピン $S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}||A| - |B|| = L^2/2$ を持つ。系全体のスピン磁気モーメントが格子点の総数 $3L^2$ に比例しているので、基底状態はマクロな磁化を持つことになる。すなわち、この系は(広い意味での)強磁性を示す。

もちろん、この場合の強磁性は、全てのスピンのそろった完全な強磁性ではない。不等式 (5.22) が示すように、隣り合った格子点のスピン同士は、むしろ互いに逆を向こうとする反強磁性的な傾向を持っている。しかし二つの部分格子の格子点の数がアンバランスなので、全体としてバルクな磁化が生じるのである。このような磁気秩序は、フェリ磁性と呼ばれている。

一般に二つの部分格子の格子点の数が(バルクに)異なっているような格子については、全く同様にしてフェリ磁性を示す Hubbard 模型を作ることができる。しかも U は0より大きければよいので、物理的にも弱結合の領域から強結合の極限までを幅広くカバーしている。その適用範囲の広さは驚くほどである。

$U = 0$ の系がパラ磁性を示す(磁気的秩序を持たない)という3.1節の結論を思い出すと、 U がいくら小さくてもフェリ磁性があるという上の結果は不思議に思えるかもしれない。ここに、Lieb のフェリ磁性の一つの特殊性がある。たとえば、上の図2の系に対応する一電子の Schrödinger 方程式では、固有値 $\varepsilon = 0$ が L^2 重に縮対していることが簡単に示される。($\varepsilon = 0$ は一電子のエネルギースペクトルのちょうど中央に位置している。)このために $U = 0$ の half-filled ($N_e = |\Lambda| = 3L^2$) の系の基底状態は大幅に縮退していて、全スピンは $S_{\text{tot}} = 0, 1, \dots, L^2/2$ を取る。クーロン相互作用 U の役割は、この縮退を取り除き、フェリ磁性を持った基底状態を作り出すことであるといえる。

half-filled の系では、uniform density theorem[15], いわゆる flux phase problem の解決 [16]、また Peierls 不安定性の安定性 [17] など、興味深い厳密な結果が得られている。half-filled の Hubbard 模型の一般論は、Elliott Lieb の独壇場の感がある。

6 強磁性

系の中のほとんど全ての電子のスピンが同じ向きにそろうという強磁性は、色々な意味で驚くべき現象である。強磁性については、古くから、Heisenberg による交換相互作用の描像や、Hartree-Fock 近似から得られる Stoner criterion などが知られていた [3]。しかし、これらの近似理論が本当に強磁性の起源を説明するがどうかについては、かなり疑問視されていたようであ

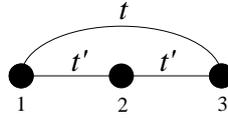


図 3: おもちゃの系の格子と hopping。ここに二つの電子を置いた系を調べることで、Hubbard 模型における強磁性の本質の一端を見ることが出来る。

る¹⁸。Hubbard 模型が真剣に研究されるようになった動機の一つは、強磁性の起源を理解することであった。

前節で見たように、half-filled の系は、基本的には反強磁性的な傾向を持っている。電子数が half-filled からずれたときには、完全な強磁性を含めた新しい物理が現れるかもしれない。現実の物質でも、強磁性が出現する系は half-filled ではないようである。

6.1 二電子の系

強磁性についての考察の出発点として、小さな系を考察しよう。面白いことに、多電子系での完全な強磁性のいくつかの例の本質(の一部)は、この「おもちゃの」系に既に現れている。

電子の相互作用が議論でき、かつ half-filled ではない最小の系は、三つの格子点に二つの電子が住んでいるものである。格子を $\Lambda = \{1, 2, 3\}$ として、そこに $\sigma = \uparrow$ と $\sigma = \downarrow$ の電子を一つずつ置く。hopping としては、 $t_{1,2} = t_{2,3} = t'$ および $t_{1,3} = t$ の二種類を考える。 t' の符号はゲージ変換 $c_{2,\sigma} \rightarrow -c_{2,\sigma}$ で変えられるので、 $t' > 0$ と固定する。格子と hopping を模式的に図 3 に示した。簡単のため、相互作用は一種類で、 $U_1 = U_2 = U_3 = U \geq 0$ とする。 $N_e = 2$ なので $S_{\max} = 1$ 、つまり $S_{\text{tot}} = 1$ の状態が基底状態になれば強磁性が現れたということになる。

相互作用の効果が最も顕著になるように、 $U \rightarrow \infty$ の極限を取り、有限のエネルギーを持つ状態だけを考える。これは、二つの電子が同じ格子点には来ないという拘束条件を置くことに等しい。この条件のもとに許される状態は六個あり、 $\Phi_{x,y} = c_{x,\uparrow}^\dagger c_{y,\downarrow}^\dagger \Phi_{\text{vac}}$ (ただし $x, y = 1, 2, 3$ かつ $x \neq y$) と書ける。これらの状態の間のハミルトニアン行列要素は、図 4 のようになる。六個の点からなる輪の上を、一つの粒子が t, t' の遷移確率で飛んでいるという量子力学の問題と等価になったことがわかる。この系の基底状態のおおよその形は、計算するまでもなく、状態の符号と対称性についての考察だけが

¹⁸Stoner criterion を Hubbard 模型に適用すると、クーロン相互作用が十分大きければ、ほとんどの場合に強磁性が出現するという結果が得られる。これは、強磁性を示す Hubbard 模型はどちらかといえば例外的であるという経験事実と反している。

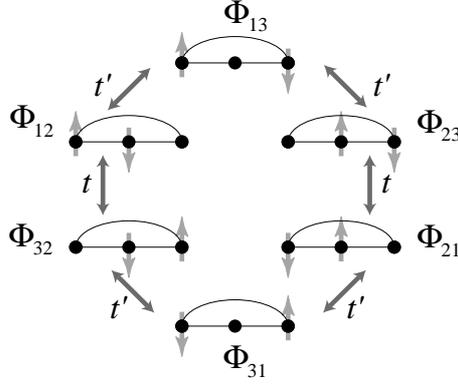


図 4: おもちゃの系で $U = \infty$ としたときの、許される状態と、それら
の間の遷移振幅。この図を見れば、基底状態のおおまかな性質は読み
とることができる。

ら決まってしまう¹⁹。 $t < 0$ のときの基底状態は、

$$\Phi_{\text{GS}}^{(t < 0)} = \Phi_{1,2} + \Phi_{3,2} - \alpha(t, t')\Phi_{3,1} + \Phi_{2,1} + \Phi_{2,3} - \alpha(t, t')\Phi_{1,3} \quad (6.23)$$

$t > 0$ のときの基底状態は、

$$\Phi_{\text{GS}}^{(t > 0)} = \Phi_{1,2} - \Phi_{3,2} + \beta(t, t')\Phi_{3,1} - \Phi_{2,1} + \Phi_{2,3} - \beta(t, t')\Phi_{1,3} \quad (6.24)$$

と書ける。ここで $\alpha(t, t'), \beta(t, t')$ は t, t' の関数で、いずれも正の値を取る。

これらの基底状態の全スピンを調べるには、たとえば格子点 1, 2 に着目して、 $\Phi_{\text{GS}}^{(t < 0)} = \Phi_{1,2} + \Phi_{2,1} + \dots$ 、および $\Phi_{\text{GS}}^{(t > 0)} = \Phi_{1,2} - \Phi_{2,1} + \dots$ に注意すればよい。直ちに $\Phi_{\text{GS}}^{(t < 0)}$ は $S_{\text{tot}} = 0$ を持ち²⁰、 $\Phi_{\text{GS}}^{(t > 0)}$ は $S_{\text{tot}} = 1$ を持つことがわかる。 $t > 0$ のときには二つの電子のスピンの上に強磁性的な相互作用が生まれた！

ここで、強磁性が出現する仕掛けについて考えてみよう。たとえば、上で注目した状態 $\Phi_{1,2}$ と $\Phi_{2,1}$ は、図 4 ではそれぞれ左上と右下にある。左上の $\Phi_{1,2}$ から出発して行列要素の矢印をたどっていくと、電子たちが格子の中を動き回ることによって、二つの電子のスピンが「交換」され、右下の $\Phi_{2,1}$ に辿り着く。 $t > 0$ の場合には、この「交換」の過程に伴う量子力学的位相が、ちょうど強磁性を生むような状態の重ね合わせを作り出してくれたのである。

U が有限の場合を簡単に見ておこう。図 5 に $t = t'/2$ のときの $E_{\text{min}}(0)$, $E_{\text{min}}(1)$ をそれぞれ U の関数として描いた。(定義 2.1 を参照。)確かに U が十分大きいときには $E_{\text{min}}(0) > E_{\text{min}}(1)$ となり、強磁性的な状態が安定に

¹⁹二つの状態が負の遷移振幅で結ばれていたなら、それらは同じ符号で重ね合わせ、正の遷移振幅で結ばれていたなら、反対の符号で重ね合わせればよい。線型代数では Perron-Frobenius の定理の応用だが、物理では「節のない波動関数を作る」という言い方で知られている。

²⁰状態 $\Phi_{1,2} + \Phi_{2,1}$ の全スピンを知るには、これを「スピン系のことば」で、 $\Phi_{1,2} + \Phi_{2,1} = c_{1,\uparrow}^\dagger c_{2,\downarrow}^\dagger \Phi_{\text{vac}} + c_{2,\uparrow}^\dagger c_{1,\downarrow}^\dagger \Phi_{\text{vac}} = c_{1,\uparrow}^\dagger c_{2,\downarrow}^\dagger \Phi_{\text{vac}} - c_{1,\downarrow}^\dagger c_{2,\uparrow}^\dagger \Phi_{\text{vac}} = |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2$ と書き直せばよい。確かに $S_{\text{tot}} = 0$ の状態であることが納得できるだろう。 $\Phi_{\text{GS}}^{(t > 0)}$ についても同様。

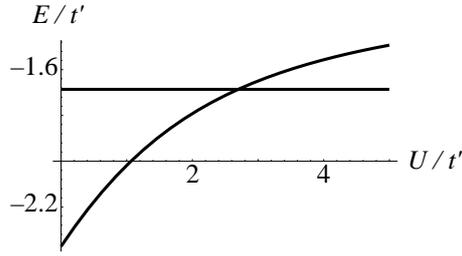


図 5: おもちゃの系で $t = t'/2$ とおいたときの $E_{\min}(0)$ (破線)、 $E_{\min}(1)$ (実線) の U 依存性。 U の大きい領域では、 $E_{\min}(0) > E_{\min}(1)$ となり強磁性が現れている。強磁性の出現は、「非摂動的な」現象である。

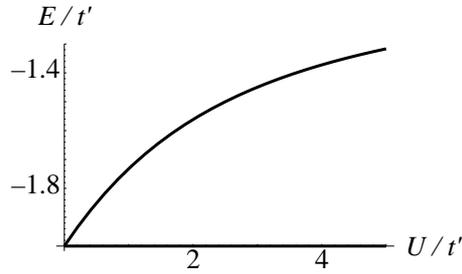


図 6: おもちゃの系で $t = t'$ とおいたときの $E_{\min}(0)$ (破線)、 $E_{\min}(1)$ (実線) の U 依存性。この場合に限り、任意の $U > 0$ について、 $E_{\min}(0) > E_{\min}(1)$ となり強磁性が現れる。これは、6.3 節で議論する flat-band ferromagnetism の最も簡単な場合といえる。

なる。 U が小さいと、大小関係は逆転し、系は強磁性的ではなくなる。このような簡単な系でも、強磁性は十分に U が大きいときだけ出現する「非摂動的な」現象であることがわかる。

$t = t'$ のとき (図 6) だけは、例外である。この場合には $U = 0$ で基底状態がスピンについて縮退しており、 $U > 0$ では強磁性的な状態がただ一つの基底状態になる。

図 5, 6 のグラフからは、強磁性状態のエネルギー $E_{\min}(1)$ が U によらず一定であることが見て取れる。これは、Hubbard 模型では完全な強磁性状態について一般的に言えることである。一般に全スピン $S_{\text{tot}} = S_{\text{max}}$ を持つ状態 Ψ は、 \uparrow のスピンの電子だけの状態 $\tilde{\Psi}$ にスピン空間での回転を施した状態の線型結合として表すことができる。 $\tilde{\Psi}$ に、相互作用ハミルトニアン H_{int} (2.5) を作用させると $n_{x,\downarrow}\tilde{\Psi} = 0$ より直ちに $H_{\text{int}}\tilde{\Psi} = 0$ がわかる。相互作用ハミルトニアン (2.5) はスピン空間の回転について不変なので、これで $H_{\text{int}}\Psi = 0$ が示された。つまり完全な強磁性の状態は、Hubbard 型の相互作用を全く「感じない」といえる。これは、Hubbard 模型での強磁性を議論する際にとても便利な事実である。

6.2 長岡の強磁性

図4の状態間の遷移は、電子が動き回って生じると考える代わりに、電子のいない穴=ホール²¹が動き回って生じると思ってもよい。少なくとも $U = \infty$ については、6.1節の系では、一つのホールが格子の中を動き回って、(ちょうどよい位相を持たせながら)電子の状態を混ぜ合わせることによって強磁性が出現するということができる。

この発想を突き詰めていくと、多電子の系でも同様のメカニズムで完全な強磁性を示す基底状態が現れる例があることがわかる。それを、主張するのが次の長岡の定理である[18]。(ここに述べるのは、[19]で拡張された定理である。)

定理 6.6 任意の有限の格子 Λ を取り、全ての $x \neq y$ について²² $t_{x,y} \geq 0$ 、全ての x について $U_x = \infty$ とする。電子数は $N_e = |\Lambda| - 1$ に固定する。すると、系の基底状態の中には $S_{\text{tot}} = S_{\text{max}} (= N_e/2)$ を持つものがある。さらに、connectivity condition が満たされていれば、基底状態は自明なスピン縮退を除けばただ一つで、全スピン $S_{\text{tot}} = S_{\text{max}} (= N_e/2)$ を持つ。

connectivity condition は、2次元以上のほとんどの格子(正方格子、三角格子、立方格子、などなど)上の系について成立する簡単な条件である。念のために正確に述べれば、「格子上の任意の電子の配置から出発して、0でない $t_{x,y}$ を通してホールを次々と動かし、任意の電子配置を作ることができる」というのが、その条件である。

Thouless も同様の結果を導いているが[20]、長岡の方がより強い結果を広い範囲の系について証明している。長岡の定理の証明[19]は驚くほど簡単で²³、本質的には6.1節のおもちゃの系で強磁性の基底状態を得た方法と変わらない。「節のない波動関数」を作ろうとすると、必然的に強磁性の状態ができるのである。

$U = \infty$ という極限と、ホールがたった一つしかないという制約は、かなり病的である。それでも、電子の運動と、電子間のクーロン反発力だけをもとにして完全な強磁性が出現することが証明された意義は大きい。長い間(そしておそらく今日でも) 遍歴電子の系での強磁性を語るときには、いつでも長岡の定理が精神的な拠り所になっていた。純粋に理論的に見ても、half-filled ($N_e = |\Lambda|$) からたった一つ電子が減っただけで、合成スピンが最大になる完全な強磁性の基底状態が出現するという結論は、衝撃的なまでに面白い。電

²¹これは、文字どおり電子が一つもいなくて、穴のあいた格子点の事を指す。バンド理論でいうホールとは意味が違う。

²²2.2節で述べたように、この $t_{x,y}$ の符号は「普通」とは逆である。bipartite な系(たとえば正方格子、立方格子上の最隣接 hopping の系)では、ゲージ変換で $t_{x,y}$ の符号を変えることができる。

²³私見では、[19]はよい数物理学の論文とはいえない。これは、長岡の原論文[18]の物理的なアイデアとやや複雑な証明を、的確な数学の道具を使って器用に再構成したものに過ぎず、Hubbard 模型の物理についての新しいものの方の見方やアイデアは何も導入していない。

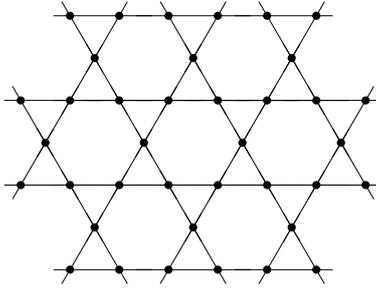


図 7: カゴメ格子上の Hubbard 模型は flat-band ferromagnetism を示す代表的なモデルである。

子が運動できる 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。

十分大きい有限の U を持ち、かつ有限の濃度でホールが入ったような系について（長岡の）強磁性の存在が拡張されれば望ましい。しかし、長岡の定理が得られてから既に 30 年が経とうというのに、未だに長岡の強磁性が特異的でない系に拡張できるかどうかについては、決着がついていない。 $U = \infty$ でホールが一つという制限をゆるめるや否や、数々の新しい物理的なプロセスが現れて、問題をきちんと扱う事はできなくなってしまう。（たとえば「節のない波動関数」は、今のところは、どうがんばっても構成できていない。）今日までの研究は、変分計算や数値実験にとどまり、決定的な結果は一つもないといってよい²⁴。

6.3 Mileke の強磁性と flat-band ferromagnetism

もう一度 6.1 節の例を見直してみよう。図 6 のように、 $t = t' > 0$ という特殊なパラメータについては、任意の $U > 0$ で基底状態は強磁性を示した。この場合の一電子の Schrödinger 方程式の固有エネルギーは $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -t'$ 、 $\varepsilon_3 = 2t'$ であり、一電子の基底状態は二重に縮退している。このために、二電子系でも $U = 0$ のときには $S_{\text{tot}} = 0, 1$ を持つ二つの基底状態が縮退している。 $U > 0$ のときには、この縮退が解けて、強磁性の状態が基底状態として「選ばれる」ことになる。ここで、一電子系の基底状態の縮退の次元（つまり 2）と、電子の総数（ $N_e = 2$ ）がちょうど等しいことに注目しておく。

これと同様の機構で完全な強磁性を示す多電子の系があることが Mielke によって示された [21]。たとえば、図 7 に示したカゴメ格子上に Hubbard 模型を定義し、隣り合う格子点 x, y については $t_{x,y} = t > 0$ 、それ以外については $t_{x,y} = 0$ とする。簡単のため、クーロン相互作用は、全ての $x \in \Lambda$ について $U_x = U \geq 0$ とする。図 7 のカゴメ格子は、おもちゃの系の格子（図 3）をたくさんつなぎ合わせたものとみなせることに注意したい。対応する一電

²⁴この問題については、[2] の第二回を参照。

子の Schrödinger 方程式のエネルギー準位は $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \dots = \varepsilon_M = -2t$ および $\varepsilon_j > -2t$ ($j > M$) を満たし、(一電子の)基底状態は M 重に縮退している。縮退の次元は $M = (|\Lambda|/3) + 1$ であり、格子点の総数に比例している。

ここで、電子の総数を $N_e = M$ のように、縮退の次元と等しく取る。まず $U = 0$ について考える。 A, B を $\{1, 2, \dots, N_e\}$ の部分集合で $|A| + |B| = N_e$ を満たすものとする。一電子の固有状態を次々と生成して作った状態 $\Phi_{A,B}$ (3.13) を考える。カゴメ格子系の系では、 $j = 1, 2, \dots, N_e$ についてはフェルミオン演算子 $a_{j,\sigma}^\dagger$ (3.11) は固有エネルギー 0 の一電子の基底状態を作る。よって任意の A, B について、 $H_{\text{hop}}\Phi_{A,B} = -2tN_e\Phi_{A,B}$ が成立し、 $\Phi_{A,B}$ は $H = H_{\text{hop}}$ の基底状態である。基底状態は大幅に縮退していて、全スピンは $S_{\text{tot}} = 0, 1, \dots, S_{\text{max}} = M/2$ (あるいは $S_{\text{tot}} = 1/2, \dots, S_{\text{max}}$) という値を取る。

ここに、クーロン相互作用 U が入るとどうなるだろうか? $\Phi_{A,B}$ で $A = \{1, 2, \dots, N_e\}$ 、 $B = \emptyset$ とした状態を Φ_\uparrow と書く。もちろん Φ_\uparrow は H_{hop} の基底状態(の一つ)である。6.1 節の最後に議論したように、 \uparrow の電子だけの状態 Φ_\uparrow は Hubbard 型のクーロン相互作用を「感じない」ので、 $H_{\text{int}}\Phi_\uparrow = 0$ が成り立つ。 H_{int} の最低固有値は 0 だから、 Φ_\uparrow は任意の $U > 0$ についても $H = H_{\text{hop}} + H_{\text{int}}$ の正確な基底状態であることがわかる。

ここまでは、簡単である。問題は、 $U > 0$ のときに、 Φ_\uparrow 以外の基底状態があるか否かである。次の Mielke の定理は、まさに 6.1 節で二電子系で見たのと同じように、強磁性状態だけが基底状態として「選ばれる」ことを示している。

定理 6.7 上に記述したカゴメ格子状の Hubbard 模型を考える。 $U > 0$ であれば、基底状態は自明なスピン縮退を除けばただ一つで、全スピン $S_{\text{tot}} = S_{\text{max}} (= M/2)$ を持つ。

さらに、電子濃度 $N_e/|\Lambda|$ が ($1/3$ より小さく) $1/3$ に近いときにも²⁵、基底状態は(ある意味で)強磁性を示すことがわかっている [22]。

こうして、有限の U の Hubbard 模型で完全な強磁性の基底状態を持つ例があることが、はじめて厳密に示された。モデルも極めて単純であり、美しく重要な結果であると言える。また、筆者の知る限りでは、カゴメ格子状の Hubbard 模型での強磁性の可能性が以前に議論されたことはない。Mielke の仕事は数学的に厳密なだけでなく、物理的にも新しい道を開く重要なものである。

Mielke の証明は、グラフ理論の言葉で整理されたきれいな帰納法である。問題は本質的に多体問題なので、証明は決して自明なものではない。ただし、この系には $H = H_{\text{hop}} + H_{\text{int}}$ の基底状態が、同時に H_{hop} と H_{int} それぞれの基底状態になっているという特殊性がある。もちろん H_{hop} と H_{int} が交換

²⁵Mielke の論文で強磁性の出現する電子濃度を議論している部分は誤っているので、[24] の方法を使って議論し直す必要がある。

するわけではないが、少なくとも基底状態を求める際には「 H_{hop} と H_{int} の競合」という多体問題における古くからの難問に直面する必要はない。この系で $U(> 0)$ がどんなに小さくても強磁性が出現するのは、このためである。

Mielke の定理はカゴメ格子だけではなく、一般の line graph と呼ばれる格子上の Hubbard 模型についても成立する。これらの系でも、対応する一電子の基底状態はバルクに縮退している。また Mielke の例以外にも、バルクに縮退した一電子の基底状態を持ち、任意の $U > 0$ で完全な強磁性の存在が厳密に示される一連の Hubbard 模型が見いだされている [23, 24]。Mielke の例と [23, 24] の例での強磁性は、今日では flat-band ferromagnetism と総称されている²⁶。Mielke は flat-band ferromagnetism の一般論を作っている [25]。5.3 節で見た Lieb のフェリ磁性も、一電子のエネルギー準位にバルクな縮退が見られるという点で flat-band ferromagnetism に類似しているのは興味深い。

いうまでもなく、一電子の基底状態がバルクに縮退しているというのは、かなり病的な状況である。 H_{hop} にわずかな摂動を加えてこの縮退を解いたときに (言い換えれば、平坦だったバンドをわずかに曲げたときに)、果たして強磁性は安定に残るだろうか? もちろん一電子基底状態の縮退が解けたときには、任意の $U > 0$ について強磁性が出現することはあり得ない。問題は十分に大きな U をとったとき、基底状態が強磁性を示すか否かである。(6.1 節のおもちゃの系でも、任意の $U > 0$ について強磁性が見られるのは、 $t = t'$ の場合のみだった。)いくつかの状況証拠は、縮退が解けた後も強磁性が安定であることを示唆している²⁷。厳密な結果としては、[23, 24] の系の H_{hop} に任意の弱い摂動が加わった場合には、スピンを一つ反転した範囲内では強磁性が安定であることが示されている [26, 27]。[27] の証明は長大で、決しておすすめできるものではないが、たとえ強磁性からスピンを一つ反転した範囲に限っても、多体問題をあるがままに「聴く」ことが如何に困難かを示す格好の例ではあると思う。この方向でのもう一つの厳密な (そして強力な) 結果については、次の節で述べよう。

6.4 特異的でない Hubbard 模型での強磁性

基底状態が完全な強磁性を示す Hubbard 模型の例を二つ見た。長岡の例は、ホールがちょうど一つだけで必要で、さらに $U = \infty$ という極限的なパラメータを取らなくてはならなかった。また、Mielke のカゴメ格子の例をはじめとした flat-band ferromagnetism では、一電子の基底状態がバルクに縮退しているという、やはり極限的な状況が必要だった。有限の U で、しかも一

²⁶一電子系のバンド構造という観点から見ると、一電子の基底状態のバルクな縮退は、一番エネルギーの低いバンドが完全に平坦 (flat) であることに対応している。flat-band ferromagnetism の色々な性質については、[2] の第三回を参照。

²⁷[2] の第三回を参照。

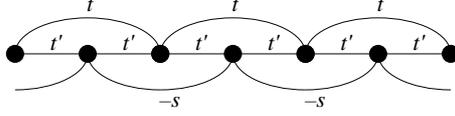


図 8: 強磁性が出現する特異的でない Hubbard 模型の一例 [28]。三つの格子点に着目すれば、図 3 のおもちゃの系とそっくりである。

電子系の基底状態が病的に縮退しないような系で、完全な強磁性の出現が示せないか? ごく最近、そのような例が構成された [28]。

簡単のため、1次元の最も簡単な系についてだけ述べる²⁸。 N 個の格子点 (N は偶数) を持つ 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。hopping $t_{x,y}$ は、全ての $x \in \Lambda$ について $t_{x,x+1} = t_{x+1,x} = t'$ 、偶数の x については $t_{x,x+2} = t_{x+2,x} = t$ 、そして奇数の x については $t_{x,x+2} = t_{x+2,x} = -s$ と選ぶ。これら以外の場合には、 $t_{x,y} = 0$ とする。 $t > 0$, $s > 0$ 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。最近接の格子点への hopping t' の他に、二種類の次近接格子点への hopping $t, -s$ を持った系である。図 8 に hopping を模式的に示した。特に奇数の格子点とその両側の偶数の格子点を合わせた三つの格子点の間の hopping に着目すれば、6.1 節で扱ったおもちゃの系とそっくりである。大雑把には、ここにこの系の強磁性の起源があると言ってよいだろう。たとえば 1次元系でも、次近接の hopping があるので、Lieb-Mattis の定理 4.2 の制約は受けないことを注意しておく。

この系の一電子のエネルギー準位は、波数 $k = 2\pi n/N$ ($n = 0, \pm 1, \dots, \pm \{(N/4) - 1\}, N/4$) を使って、 $\varepsilon_1(k) = -2t - 2s(1 + \cos 2k)$, $\varepsilon_2(k) = 2s + 2t(1 + \cos 2k)$ と表される。二つのバンドがあり、いずれも有限の分散を持っている。

クーロン相互作用は全ての x について $U_x = U > 0$ と取る。そして、電子数は $N_e = N/2$ と固定する²⁹。許される最大のスピンは $S_{\max} = N/4$ である。

flat-band ferromagnetism の場合とは違って、 U が小さいときにはスピンの完全な強磁性は現れない。次の結果が、簡単な変分計算で示される。

定理 6.8 $0 \leq U < 4s$ ならば、

$$E_{\min}(S_{\max} - 1) < E_{\min}(S_{\max}) \quad (6.25)$$

が成り立つ。つまり、この Hubbard 模型の基底状態は $S_{\text{tot}} < S_{\max}$ を持ち、完全な強磁性は示さない。

²⁸高次元のモデルも構成できる。また、論文 [28] では、もう一つ $\lambda > 0$ というパラメータが現れる。ここでは、簡単のため $\lambda = \sqrt{2}$ と固定した。

²⁹充填率という言葉で言えば、これは 1/4-filling に対応する。

この系で完全な強磁性の基底状態が出現するとすれば、それは U が十分に大きい「非摂動的な」領域に限られることがわかる。次の定理 [28] は、まさに「非摂動的な」結果を与えてくれる。

定理 6.9 無次元のパラメーター t/s と U/s が十分に大きければ、上述の Hubbard 模型の基底状態は自明な縮退を除けばただ一つで、全スピン $S_{\text{tot}} = S_{\text{max}} (= N/4)$ を持つ。

たとえば、 $U/s = 50$ なら $t/s \geq 4.5$ で、 $U/s = 100$ なら $t/s \geq 2.6$ で、それぞれ、定理は成立する。強磁性の基底状態は、前節の Φ_{\uparrow} と同様にして構成することができる。

モデルは若干人工的だが、特異性を持たない Hubbard 模型で、 H_{int} と H_{hop} の競合の結果として強磁性が出現することが (はじめて) 示された意義は大きい。さらに、パラメーターを変えた系については、強磁性の基底状態の上のスピン波励起が正常な分散関係を持つことが証明されている [28, 27]。Hubbard 模型という遍歴電子の模型から出発して、「健全な」強磁性の出現が確立されたのである。

この系で $s = 0$ と置くと、一電子の基底状態は $N/2$ 重に縮退する。この場合には、任意の $U > 0$ で強磁性 (flat-band ferromagnetism) が出現する。 $s \neq 0$ についての定理 6.8 は、flat-band ferromagnetism が摂動に対して安定だろうかという前節での問に対する具体的な答えを与えるものだと考えることもできる。

定理 6.8 の証明は意外なほど短いが、巧妙にまとめてあるので、何処に物理的な本質があるのかを捉えるのが難しい。証明の基本的な方針は、まず五つの格子点からなる Hubbard 模型で完全な強磁性が出現することを示し、次にこの有限系での強磁性を巧みに「つなぎ合わせて」全系での強磁性の出現を示そうというものである。一般的に言えば、これは全く気違いじみたアイデアである。量子系、特に分散のある電子系では、電子は広範囲に波として広がってエネルギーを下げようとする強い傾向を持っている。それを有限系に閉じこめようすると、電子たちに「無理」を強いることになる。有限系の基底状態の情報をもとに、大きな系の性質を厳密に知るのには、不可能な話のように響く。この例で不可能が可能になった理由の一つは、モデル自身の特殊性であり、もう一つは電子の「波」としての性質からくる (一電子の) バンド構造と、電子の「粒子性」の双方を取り入れるような電子状態の記述法を採用したことである。これは、「粒子」と「波動」の二重性が本質的な「物理」を生み出している Hubbard 模型の解析のためには、自然な方法であると言える。

この Hubbard 模型の基底状態は、電流を通さない絶縁体に対応していると考えられている。同じモデルで電子数が $N/2$ 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し得るという「金属強磁性」が

見られるだろうと予想されている³⁰。この予想が証明されれば素晴らしいが、これまでに有効なアイデアは出されていない。今は、Hubbard 模型における「金属強磁性」という魅惑的な曲³¹に注意深く耳を傾けながら、新しい理論的な方法についてじっくりと考えるべき時なのだろう。

本稿に貴重なコメントをくださった久保健氏に感謝します。

参考文献

- [1] E. H. Lieb, in Proceedings of 1993 conference in honor of G.F. Dell'Antonio, *Advances in Dynamical Systems and Quantum Physics*, pp. 173-193, World Scientific (1995), Proceedings of 1993 NATO ASW *The Physics and Mathematical Physics of the Hubbard Model*, Plenum (in press), and *Proceedings of the XIth International Congress of Mathematical Physics*, Paris, 1994, D. Iagolnitzer ed., pp. 392-412, International Press (1995).
- [2] 草部浩一、青木秀夫、*固体物理* **30**, 769, 867 (1995), **31** ?? (1996)
- [3] 川畑有郷、電子相関 (丸善、1992)
- [4] E. H. Lieb and D. Mattis, *Phy. Rev.* **125**, 164 (1962).
- [5] E. H. Lieb and D. Mattis, *J. Math. Phys.* **3**, 749 (1962).
- [6] D. Ghosh, *Phy. Rev. Lett.* **27**, 1584 (1971).
- [7] T. Koma and H. Tasaki, *Phy. Rev. Lett.* **68**, 3248 (1992).
- [8] E. H. Lieb, *Phy. Rev. Lett.* **62**, 1201 (1989), errata *Phy. Rev. Lett.* **62**, 1927 (1989).
- [9] K. Kubo and K. Kishi, *Phys. Rev.* **B41**, 4866 (1990).
- [10] T. Koma and H. Tasaki, *J. Stat. Phys.* **76**, 745 (1994).
- [11] S. Q. Shen, Z. M. Qiu, and G. S. Tian, *Phy. Rev. Lett.* **72**, 1280 (1994).
- [12] S. Q. Shen, *Total spin and antiferromagnetic correlation in Kondo model*, preprint (1995).

³⁰Wannier 関数を用いた摂動論により、この Hubbard 模型の低エネルギーの有効理論は、強磁性の t - J model であることが示される。しかも、flat-band model に近い系を考えることで、 $|t/J|$ をいくらでも小さくすることができる。これは、上の予想に対する強い裏付けである。

³¹もちろん、物理全体を見回せば魅力的な曲はまだたくさんある！

- [13] F. Dyson, E. H. Lieb, and B. Simon, *J. Stat. Phys.* **18**, 335 (1978).
- [14] T. Kennedy, E. H. Lieb, and B. S. Shastry, *J. Stat. Phys.* **53**, 1019 (1988).
- [15] E. H. Lieb, M. Loss, and R. McCann, *J. Math. Phys.* **34**, 891 (1993).
- [16] E. H. Lieb, *Phy. Rev. Lett.* **73**, 2158 (1994).
- [17] B. Nachtergaele and E. H. Lieb, *Phys. Rev.* **B51**, 4777 (1995).
- [18] Y. Nagaoka, *Phy. Rev.* **147**, 392 (1966).
- [19] H. Tasaki, *Phy. Rev.* **B40**, 9192 (1989).
- [20] D. J. Thouless, *Proc. Phys. Soc. London* **86**, 893 (1965).
- [21] A. Mielke, *J. Phys.* **A24**, 3311 (1991).
- [22] A. Mielke, *J. Phys.* **A25**, 4335 (1992).
- [23] H. Tasaki, *Phy. Rev. Lett.* **69**, 1608 (1992).
- [24] A. Mielke and H. Tasaki, *Commun. Math Phys.* **158**, 341 (1993).
- [25] A. Mielke, *Phys. Lett.* **A174**, 443 (1993).
- [26] H. Tasaki, *Phy. Rev. Lett.* **73**, 1158 (1994).
- [27] H. Tasaki, *J. Stat. Phys.*, to appear (1996).
- [28] H. Tasaki, *Phy. Rev. Lett.*, **75**, 4678 (1995).