量子スピン系入門

坂井　徹
兵庫県立大学大学院物質理学研究科
数理解析学分野
量子科学技術研究開発機構SPring-8
量子シミュレーション研究グループ

量子スピン

- 量子スピン演算子: $\vec{S} = (S^x, S^y, S^z)$
- 交換関係(角運動量と同じ)

$$[S^x, S^y] = iS^z, [S^y, S^z] = iS^x, [S^z, S^x] = iS^y$$

- スピンの大きさと量子化軸成分の固有状態

$$\vec{S}^2 \equiv S^{x2} + S^{y2} + S^{z2}, \quad S^z$$

$$\vec{S}^2 |S, M\rangle = S(S+1) |S, M\rangle \qquad S = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots$$

$$S^z |S, M\rangle = M |S, M\rangle \qquad M = -S, -S+1, \cdots, S$$

昇降演算子

$$S^{+} \equiv S^{x} + iS^{y}, \quad S^{-} \equiv S^{x} - iS^{y}$$

交換関係

$$[S^{z}, S^{\pm}] = \pm S^{\pm}$$

$$\Rightarrow \quad S^{z}S^{\pm} = S^{\pm}(S^{z} \pm 1)$$

$$S^{+}\left|S, M\right\rangle = \sqrt{(S-M)(S+M+1)}\left|S, M+1\right\rangle$$

$$S^{-}\left|S, M\right\rangle = \sqrt{(S+M)(S-M+1)}\left|S, M-1\right\rangle$$

行列表示

- S=1/2 (電子スピン) : パウリ行列

  2状態 : $|+\rangle \equiv \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle, |-\rangle \equiv \left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle$

$$S^+|-\rangle = |+\rangle,\ S^-|+\rangle = |-\rangle \Rightarrow S^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, S^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S^x = \frac{1}{2}(S^+ + S^-) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S^y = \frac{1}{2i}(S^+ - S^-) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, S^z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- S=1　3状態 : $|1,-1\rangle, |1,0\rangle, |1,+1\rangle$

$$S^x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, S^y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ゼーマン相互作用

- 電子スピンの磁気モーメント

  $g\mu_B\vec{S}$

  g:ランデのg因子～２

  μ_B:ボーア磁子

- ゼーマン相互作用:

  電子スピンと磁場の相互作用

$$H = -g\mu_B\vec{H}\cdot\vec{S}$$

磁場中のスピン磁気モーメント

- 一般のS、磁場：H||z　2S+1に分裂

- 分配関数

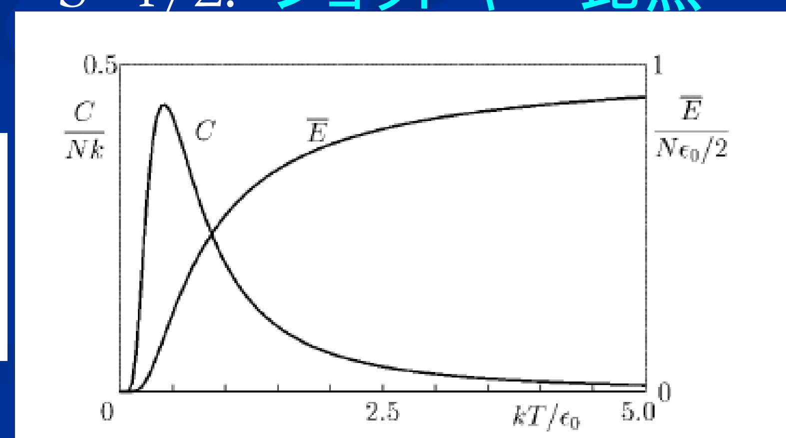
$$Z=\sum_{M=-S}^{+S}e^{\beta g\mu_B HM}=\frac{e^{-\beta g\mu_B HS}-e^{\beta g\mu_B H(S+1)}}{1-e^{\beta g\mu_B H}}=\frac{\sinh[\beta g\mu_B H(S+\frac{1}{2})]}{\sinh[\beta g\mu_B H/2]}$$

$$\beta\equiv\frac{1}{k_BT}$$

- 内部エネルギー：$\langle E\rangle=-\dfrac{\partial}{\partial\beta}\log Z$
- 比熱

$$C=\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T}=\frac{(g\mu_BH)^2}{k_BT^2}\left[\frac{(S+\frac{1}{2})^2}{\sinh^2\beta g\mu_BH(S+\frac{1}{2})}-\frac{(\frac{1}{2})^2}{\sinh^2\left(\frac{\beta g\mu_BH}{2}\right)}\right]$$

S=1/2: ショットキー比熱



$$\varepsilon_0=g\mu_BH$$

- 磁化

$$\langle M \rangle = \frac{\partial}{\partial(\beta g H)} \log Z = -\frac{\langle E \rangle}{gH} = \mu_B S B_S(\beta g \mu_B H S)$$

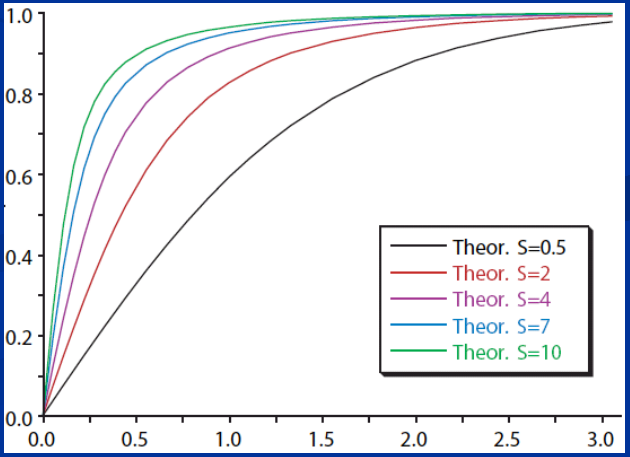
- Brillouin関数

$$B_s(y) = \frac{2S+1}{2S}\coth\left(\frac{2S+1}{2S}y\right) - \frac{1}{2S}\coth\left(\frac{1}{2S}y\right)$$

$$B_{\frac{1}{2}}(y) = \tanh y$$

$$B_\infty(y) = \coth y - \frac{1}{y}$$

$$B_S(y) \approx \frac{S+1}{3S} y \quad (y << 1)$$



- 磁化率(帯磁率)

$$\chi = \left.\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H}\right|_{H=0}$$

高温：

$$B_S(y) \approx \frac{S+1}{3S} y \quad (y << 1)$$

$C =$

- キュリー則

$$\chi = \frac{S(S+1)}{3}\frac{g\mu_B{}^2}{k_B T}$$

$$\chi = \frac{C}{T}$$

キュリー定数：

$$C = \frac{S(S+1) g\mu_B{}^2}{3k_B}$$

交換相互作用
ハイゼンベルグモデル

- 交換相互作用 $\hat{H} = J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$

  $J < 0$: 強磁性

  $J > 0$: 反強磁性

- ２スピン問題：４状態 $\left|S, M\right\rangle_1 \otimes \left|S, M\right\rangle_2$

$$\left|+,+\right\rangle = \left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle_2$$

$$\left|+,-\right\rangle = \left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_2$$

$$\left|-,+\right\rangle = \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle_2$$

$$\left|-,-\right\rangle = \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_2$$

ハミルトニアン

$$\hat{H} = J(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y + S_1^z S_2^z) = J(\frac{1}{2}[S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+] + S_1^z S_2^z)$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{J}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{J}{4} & \frac{J}{2} & 0 \\ 0 & \frac{J}{2} & -\frac{J}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J}{4} \end{pmatrix}$$

エルミート行列

$\Downarrow$

ユニタリー行列で対角化

対角化

固有値・固有ベクトル

$$\lambda_1 = \frac{J}{4} : |1\rangle = |1,1\rangle = |++\rangle$$

$$\lambda_2 = \frac{J}{4} : |2\rangle = |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$$

$$\lambda_3 = \frac{J}{4} : |3\rangle = |1,-1\rangle = |-,-\rangle$$

S=1 トリプレット
対称

$$\lambda_4 = -\frac{3}{4}J : |4\rangle = |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$

S=0 シングレット
反対称

強磁性　　J<0：　↑↑が基底状態
反強磁性 J>0：　↑↓と↓↑を重ね合わせて対称化
エネルギーを下げる　　量子効果

磁場中の2スピン

- ハミルトニアン

$$\hat{H} = J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - h(S_1^z + S_2^z) \qquad h \equiv g\mu_B H$$

- 固有値

$$\lambda_1 = \frac{J}{4} - h, \lambda_2 = \frac{J}{4}, \lambda_3 = \frac{J}{4} + h, \lambda_4 = -\frac{3}{4}J$$

- 分配関数

$$Z = \sum_i e^{-\beta\lambda_i}$$

- 内部エネルギー

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z$$

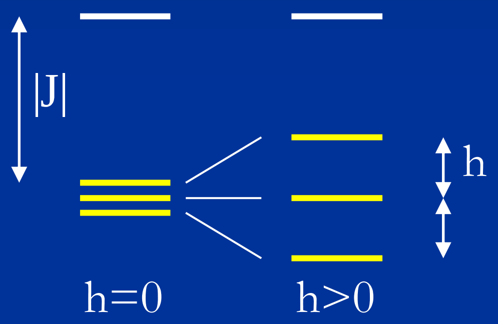
- 比熱

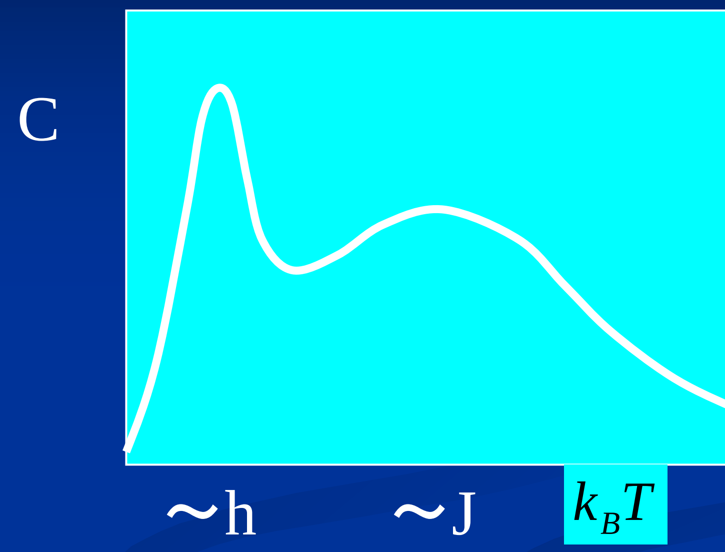
$$C = \frac{\partial\langle E \rangle}{\partial T}$$

比熱

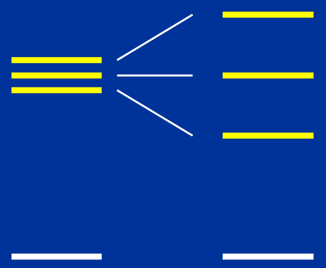
0<h<<J

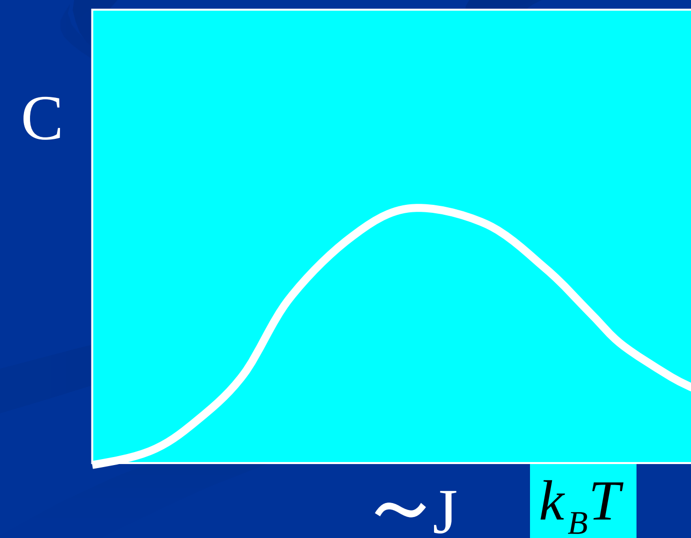
- 強磁性　J<0





- 反強磁性 J>0





長距離秩序　Long-Range Order

- ハイゼンベルグモデル

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

最近接格子点間について和をとる

格子の次元が重要！

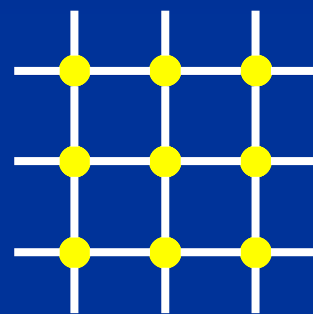
格子

単純格子のみ考える

- 一次元

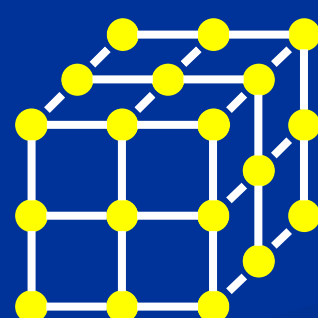
$z=2$

- 二次元
  正方格子



$z=4$

- 三次元
  立方格子



$z=6$

隣接する格子点数
（配位数）

三次元格子

- 高温　$T > T_c$:　無秩序
- 臨界温度　$T = T_c$:　相転移
- 低温　$T < T_c$:　長距離秩序

低次元→秩序化しにくい

簡単に秩序を壊すことができる

一次元: ↑ ↑ ↑ ↓ ↓ ↓

体積に対する磁壁:

一次元: $\frac{1}{V}$　二次元: $\frac{1}{\sqrt{V}}$　三次元: $\frac{1}{\sqrt[3]{V}}$

秩序パラメーター1
自発磁化

- 強磁性体　J<0 :　↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑

  （自発）磁化

$$m = \frac{1}{V}\sum_j \left\langle S_j^z \right\rangle \quad (H^z \to 0)$$

- 反強磁性体 J>0 :　↑ ↓ ↑ ↓ ↑ ↓

  （自発）交番磁化

  staggered magnetization

$$m_{\mathrm{st}} = \frac{1}{V}\sum_j (-1)^j \left\langle S_j^z \right\rangle \quad ((-1)^j H^z \to 0)$$

$T>T_c$:　$m, m_{st} = 0$

$T<T_c$:　$m, m_{st} \neq 0$

秩序パラメーター2
スピン相関関数

スピン相関関数の漸近形

- 高温　T>Tc　$\left\langle S_0^z S_r^z \right\rangle \cong e^{-\frac{r}{\xi}}$　ξ: 相関距離
- 臨界温度　T=Tc　$\left\langle S_0^z S_r^z \right\rangle \cong r^{-\eta} \qquad (\xi \to \infty)$

特徴的な距離なし: スケール不変

- 低温　T<Tc　$\left\langle S_0^z S_r^z \right\rangle \xrightarrow[r \to \infty]{} m^2 \neq 0$

反強磁性の場合は $(-1)^r$ をつける

強磁性体の長距離秩序

T=0 完全に秩序化 $\frac{m}{S}=1$ ↑↑↑↑

T>0 熱ゆらぎ → 相転移 → m=0

ハイゼンベルグモデル:連続対称性continuous symmetry

cf. イジングモデル:離散的対称性discrete symmetry

Heisenberg model

	1D	2D	3D
T >0	×	×	○
T =0	○	○	○

(cf. Ising model)

	1D	2D	3D
T >0	×	○	○
T =0	○	○	○

反強磁性体の基底状態

- ネール状態：↑↓↑↓↑↓
- ネール秩序：$m_{\mathrm{st}} \neq 0$
- ネール温度：T_{N} 相転移の臨界温度
- 「ネール状態は基底状態ではない！」

$$\sum_j \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} \left| \cdots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots \right\rangle = \sum_j [\frac{1}{2}(S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+) + S_j^z S_{j+1}^z] \left| \cdots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots \right\rangle$$
$$= \sum_j \frac{1}{2} \left| \cdots \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow \cdots \right\rangle + \sum_j -\frac{1}{4} \left| \cdots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots \right\rangle$$

- 2スピンの基底状態：シングレット $\frac{1}{\sqrt{2}}(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\right\rangle)$
- 量子効果：重ね合せ→対称化→エネルギー下げる

反強磁性体の長距離秩序

T=0 量子ゆらぎ　$\dfrac{m}{S} < 1$

T>0 熱ゆらぎ　→　相転移　→　m=0

ハイゼンベルグ反強磁性体の長距離秩序の有無

	1D	2D	3D
T >0	×	×	○
T =0	×	○	○

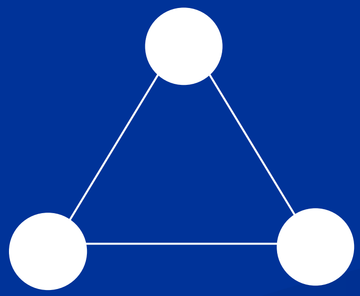
ネール秩序は量子ゆらぎで縮んでいる

一次元反強磁性体は絶対零度でも秩序化しない

Problem 1

- Solve the three spin problem of S=1/2 and obtain all the eigenvalues and the eigenstates of the Hamiltonian:

$$\hat{H} = J \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$



Problem 2

- Solve the two spin problem of S=1 and obtain all the eigenvalues and the eigenstates of the Hamiltonian:

$$\hat{H} = J \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

using the 9 states: |1, 1>, |1, 0>, |1, -1>, ・・・