量子系での液相－固相転移への格子模型の応用

東大教養　永 井 克 彦

量子系，特にHeでの液相ー固相変化をひきおこす最大の原因は， hard-core-repulsion であろうと考えられる。その辺に関連した話は，今回の研究会でも戸田先生によって話された。

Hard-core の効果を， dynamical に取り込んでいくことは，非常に難しいから，ここでは，それがすでに kinematical に取り入れられている様な量子格子モデルを用いて基底状態を議論する可能性について考察する。

すでに恒藤－松田によって rigid lattie は調べられていて，粒子系のHamiltonian

$$\mathscr{H} = An + \frac{1}{2}\sum_{i,j} u_{ij}\,(a^{+}_{i}a_{j} + a^{+}_{j}a_{i}) + \frac{1}{2}\sum_{ij} v_{ij}\,n_i n_j \tag{1}$$

は，粒子の演算子に次の様な交換関係を課すことによって， Pauli operator で書き改められることがわかっている。

$$[a_i, a_j^{+}] = 0,\ [a_i a_j] = [a_i^{+} a_j^{+}] = 0 \quad \text{for } i \neq j$$

$$[a_i, a_i^{+}]_{+} = 1,\ [a_i a_i]_{+} = [a_j^{+} a_j^{+}]_{+} = 0$$

そこで得られる Pauli-演算子の Hamiltonian は

$$\mathscr{H} = \gamma N - \gamma' M + \mathscr{H}_{\mathrm{spin}} \tag{2}$$

$$\mathscr{H}_{\mathrm{spin}} = \sum_{i<j} u_{ij}\,(S_i^x S_j^x + S_i^y S_i^y) + v_{ij}\,S_i^z S_j^z \tag{3}$$

と与えられる。この時， v_{ij} は反撥力を仮定して正であり，スピン系としては，非等方的な反強磁性体モデルとなっている。今，$\langle S^x \rangle \neq 0$， でかつ， z－成分が反強磁性的になっている時は，固体的正しくは結晶的なＬＲＯとかつＯＤＬＲＯが共存するものであると松田・恒藤によって指摘された。

このモデルの非常に都合の良い点は，実際の液相－固相転移に関連して，転移が一次で

おこっているという点である。液相ー固相転移と反強磁性体の spin-flop との対応がつく訳であるが，うまくいくにもかかわらず，粒子系で見た時に物理的根拠はあまり明解ではない。

こゝでは，量子格子モデルを expandable モデルに拡張することによって，より realistic な特に固相の圧縮性を再現する様な取り扱いを試みる。例えば，分子場近似によって得られるエネルギーを，V， N－一定の下で格子定数を変分パラメータにとることによって最低エネルギー状態を求める。V，N一定の下で格子定数を動かすことは，一見奇妙ではあるけれども，要するに最初の Hamiltonion(1) を書き下す時にどういう Wannier set を用いるかという問題である。実際の計算は相当面倒になるけれども，固相に関しては，より realistic な結果が得られる。

格子モデルを用いようとする理由は，一つには，hard-core の取り扱いの難しさと，もうひとつには，液体ヘリウムの粒子配置が，ある程度の結晶的配置をしているという実験事実（例えばロトンの運動量 p_0 は密度の ⅓ 乗に比例している）がある為である。

ヘリウムに関しては，超流動固体の問題が非常に面白いが，松原－松田モデル自体が，すでに，ひとつの超流動固体のモデルになっている点が重要である。松原－松田モデルを固体としてとらえる為には，結局は，運動エネルギーの項をどうとらえるか，即ち，どの様な Wannier 表示を用いればよいか，その時，self-consistency をどう取り込むかということが最大の問題になる。