

修士論文

SU(3) 三角格子反強磁性体の 非線形シグマ模型による解析[†]

高橋 樹

京都大学大学院理学研究科 原子核理論研究室

2022年2月24日

[†]本論文は、2022年2月に京都大学に提出した修士論文である。5章～7章、付録E, Fには、投稿準備中の内容が含まれる。(2022年3月26日現在)

概要

2次元空間の格子上に反強磁性的な相互作用をする量子スピン系が配置されたモデルは、SU(2) スピン系を中心に、ここ40年ほどの間に研究されてきた。多くの場合、反強磁性体は量子効果のために、ハミルトニアンに依存した非自明な基底状態を持つ。代表的なものに、Néel状態と、valence bond solid (VBS) 状態が挙げられる。Néel状態では、隣接する格子点で異なる状態が互い違いに実現しており、長距離相関・gapless 励起を有する。他方、VBS状態では、格子点のいくつかがスピン一重項を形成し、短距離相関・gapped 励起となる。ハミルトニアンに含まれるパラメータを変化させると、ゼロ温度で量子揺らぎに起因する量子相転移が起こることが、理論研究や数値計算により確かめられている。特にNéel-VBS相転移は、古典的な相転移の枠組みでは説明できない直接2次相転移が起き得ることが指摘され、その理論はdeconfined criticalityとして注目を集めている。反強磁性体の低エネルギー有効理論は、虚時間経路積分による(2+1)次元の場の理論で定式化される。そこでは、物性論と素粒子論の双方の領域で主要なトピックの一つである、場の理論のトポロジカルな性質と密接な関係がある。また、近年では冷却原子を用いてSU(N) スピン系を実現できることが期待されており、理論的な予測が実験的に確かめられる可能性がある。

本研究では、SU(3) スピンが三角格子の格子点上に配置された「SU(3) 三角格子反強磁性体」について、モノポールを含む有効理論の構築を行った。三角格子上のSU(3) スピン系は、フラストレーションが生じることなく、Néel状態を実現することが可能である。Néel状態からの低エネルギー励起の有効理論が、モノポール項を伴うSU(3)/U(1)² 非線形シグマモデルで記述されることを導出した。SU(2) スピン系で既に指摘されているように、スピン系が格子上で定義されていることの帰結として、モノポール（インスタントン）配位を考慮する必要がある。2次元空間上のスピンの連続的に変化する配位は、整数値のトポロジカルチャージで分類される。非自明なトポロジカルチャージを持つ配位を、スキルミオンと呼ぶ。モノポールは、虚時間発展に伴いスキルミオン数の変化を引き起こす。有効理論に含まれるモノポール項の形は、Berry位相と呼ばれる位相因子から制限を受ける。SU(3) スピン系でスキルミオン配位を構成する方法を考案し、モノポールから生じるBerry位相を具体的に計算することに成功した。その結果、スピン表現に依存して、モノポール項に違いが現れるという、SU(2) 正方格子反強磁性体と類似の規則が得られた。

相転移点の解析では、理論が持つ対称性とその破れが、重要な役割を果たす。Néel-VBS相転移において、Néel相はスピン回転対称性が、VBS相は格子の対称性が、それぞれ自発的に破れた相に対応する。Berry位相を注意深く調べることにより、格子の対称性変換は、モノポール演算子の位相変換として作用することが明らかになった。さらに、モノポールが凝縮したモノポールガスの半古典的解析によって、特定のスピン表現に対して、モノポール演算子からVBS秩序変数を構成できることを示した。これにより、VBS相はスキルミオン数の保存に関係するトポロジカル対称性が破れた相として解釈できる。アノマリーマッチングの議論から、スピン回転対称性とトポロジカル対称性の両方を保つ相は、出現が禁止されることが分かる。以上の結果は、SU(3) 三角格子でもSU(2) 正方格子の場合と同様に、deconfined criticalityによるNéel-VBS相間の直接2次相転移の可能性を示唆するものである。

目次

第 1 章 序	4
第 2 章 先行研究—SU(2) 正方格子反強磁性体	8
2.1 Néel 相	8
2.1.1 SU(2) Heisenberg 模型	8
2.1.2 O(3) 非線形シグマ模型	10
2.1.3 CP ¹ 非線形シグマ模型	12
2.2 モノポール	13
2.2.1 トンネル過程	14
2.2.2 Berry 位相	14
2.2.3 Destructive Interference	15
2.2.4 モノポール演算子と対称性	16
2.3 量子相転移	18
2.3.1 't Hooft アノマリー	18
2.3.2 Néel-VBS 相転移の有効理論	20
2.3.3 Deconfined Criticality	21
2.4 VBS 相	23
2.4.1 波動関数	23
2.4.2 モノポールガス	25
2.4.3 VBS 状態との対応関係	26
2.5 数値計算	28
第 3 章 SU(3)/U(1)² 非線形シグマ模型	33
3.1 SU(N) Heisenberg 模型	33
3.2 スピンコヒーレント経路積分	34
3.3 有効ラグランジアン	35
第 4 章 対称性	38
4.1 格子理論に由来する対称性	38
4.2 連続理論で生じた対称性	39
第 5 章 モノポール	41
5.1 U(3)/U(1) ³ パラメータ	41
5.2 スキルミオンの構成方法	42
5.3 トンネル過程の Berry 位相	44
5.3.1 トンネル過程の具体例	44
5.3.2 Berry 位相の図形的規則	47
5.3.3 Destructive Interference	51
5.3.4 数値計算に基づく解析	52
5.4 モノポール演算子の変換則	52
5.5 モノポール項	57

第 6 章 量子相転移	59
6.1 't Hooft アノマリー	59
6.1.1 モノポールを含まない理論	59
6.1.2 モノポールを含む理論	60
6.2 Néel-VBS 相転移の有効理論	62
第 7 章 VBS 相	65
7.1 VBS 秩序	65
7.2 モノポールガス	67
7.3 VBS 状態との対応関係	71
7.3.1 $p = 1$ の場合	71
7.3.2 一般の p の場合	73
第 8 章 総括	77
謝辞	78
付 録 A SU(2) 正方格子反強磁性体の補足	79
A.1 SU(2)/U(1) 非線形シグマ模型の導出	79
A.2 モノポールが格子中心以外の場合の Berry 位相	83
付 録 B 非線形シグマ模型の導出	85
B.1 スピンコヒーレント状態に関する公式の証明	85
B.2 格子理論の連続極限の計算	86
B.3 追加項が消えることの証明	88
付 録 C 有効ラグランジアンの一意性	90
付 録 D 双対理論の等価性	93
付 録 E スピン演算子による射影演算子の構成	96
付 録 F 六角形中心の Berry 位相の規則	98
参考文献	106

第1章 序

量子力学の成立以来、多種多様な性質を持つ量子多体系が提案され、盛んに研究されてきた。それにつれて、従来の古典的な理論で説明できない現象が次々と予測・発見され、注目を集めるようになった。本研究の主題である量子相転移も、その一つである。通常の相転移は、温度や外場の変化によって、異なる性質を持った平衡状態（相）が実現することを指す。それに対し、ハミルトニアンに含まれるパラメータの変化によって引き起こされる、量子揺らぎに起因する相転移を量子相転移 (quantum phase transition) と呼ぶ。

古典的な相転移の理論では、Landau, Ginzburg による枠組み [1] が成功を収めている。臨界点近傍の自由エネルギーは、理論が持つ対称性を満たす条件の下で、相の状態を特徴付ける秩序変数によって展開される。有効ラグランジアンを最小にする状態が、系の基底状態として実現する。温度等のパラメータを変化させると、有効ラグランジアンの形状が変わり、異なった性質を持つ基底状態が出現する。この方法により、相転移点近傍の臨界現象を、詳細に説明することができる。ところが、この枠組みに当てはまらない量子相転移の例が、以下で述べるように、反強磁性的な量子スピン系で指摘された。

量子スピン系は単純なハミルトニアンで記述されるにもかかわらず、豊富な現象を提示する。SU(2) スピン系の最も基本的なモデルとして、以下のハミルトニアンで与えられる Heisenberg 模型が幅広く用いられている：

$$H = J \sum_{\langle i, i' \rangle} \hat{S}(i) \cdot \hat{S}(i'). \quad (1.1)$$

ここで、 $\hat{S}(i)$ は i 番目の格子点のスピン演算子であり、 $\langle i, i' \rangle$ は相互作用するスピンの組を指定する。 $J < 0$ ならば強磁性的、 $J > 0$ ならば反強磁性的な相互作用を表す。強磁性 Heisenberg 模型においては、古典系と同様に、すべてのスピンの組が一様に揃った状態が、基底状態の一つとして実現する。しかし、反強磁性 Heisenberg 模型の基底状態は、量子効果が大きく働くために非自明である。各スピンは離散的な状態を取り、複数のスピンの状態の重ね合わせが可能となることから、事情を複雑にする。

反強磁性体に対して、場の理論による定式化を最初に行ったのは、Haldane による 1 次元 SU(2) スピン鎖の研究である [2, 3]。最近接相互作用を持つ Heisenberg 模型の低エネルギー有効理論が、虚時間経路積分によって、相対論的な (1+1)d O(3) 非線形シグマ模型で記述されることを示した。重要な指摘は、スピン表現 s に応じて、トポロジカル項の有無が異なる点である。 s が整数の場合は、有効作用にトポロジカル項は現れず、gapped 相が基底状態として実現する。ところが、 s が半整数の場合には、素粒子論で θ 項として知られているトポロジカル項が、有効作用に含まれる。このとき、基底状態は gapless 相となる。このように、スピン鎖の基底状態が、スピン表現 s について周期的に変化するという予想は、Haldane conjecture と呼ばれている。この主張は、同じく s が整数か半整数かによって基底状態に制約を与える、Lieb-Schultz-Mattis-Affleck (LSMA) 定理 [4, 5] の特別な場合に相当する。 $s = 1/2$ の正確な基底状態を求められる Bethe ansatz [6] の結果、そして数多くの数値計算により、Haldane conjecture は正しいと考えられている。

その後、上述の 1 次元スピン鎖の研究は、2 次元正方格子上の SU(2) 反強磁性体へと拡張された。再び Haldane [7] は、最近接相互作用の Heisenberg 模型の低エネルギー有効理論として、(2+1)d O(3) 非線形シグマ模型を導出した。しかしここでも、トポロジカルな性質が系の性質を作用する。2 次元空間方向のスピン配位は、スキルミオン数と呼ばれるトポロジカルチャージで分類される。虚時間発展に伴い、スキルミオン数が変化する過程は、トンネル過程と呼ばれる。本来の格子理論では、連続場の理論では起こることのない、トンネル過程が許されている。そのため、素朴な連続極限から得られる非線形シグマ模型のみでは、格子の適切な有効理論として不十分であり、スキルミオン数の変化を引き起こすモノポールを取り入れる必要がある。トンネル過程の分配関数への寄与を計算すると、有効作用の Wess-Zumino 項から、Berry 位相と呼ばれる非自明な因子が出現する。その結果、異なる Berry 位相を持つトンネル過程どうしの干渉

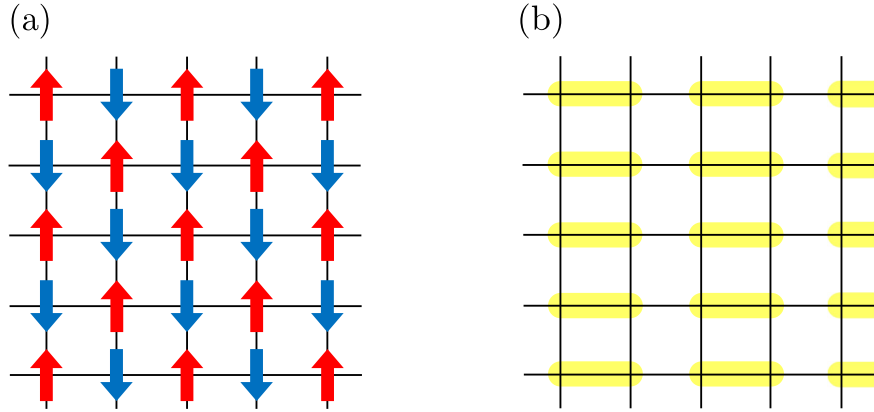


図 1.1: $s = 1/2$ 正方格子反強磁性体の典型的な基底状態. (a) の Néel 状態では, 直交する 2 状態が隣り合わないよう割り当てられる. (b) の VBS 状態では, 隣接する 2 個の格子点がスピン一重項を形成する.

(destructive interference) が起こり, Haldane conjecture と類似の s に対して周期的に変化する性質が導かれる [7, 8].

SU(2) 正方格子反強磁性体の自然な基底状態には, いくつかの相が考えられる. スピンを古典的な O(3) ベクトルとみなすと, Heisenberg ハミルトニアンを最小化する状態は, 図 1.1(a) に示すように, 隣接するスピンの向きが互い違いに並んだ Néel 状態と呼ばれるものである. 無限体積極限において, Néel 相は長距離スピン相関・gapless 励起を持ち, スピン回転対称性が自発的に破れている. 片方の副格子 (sublattice) のスピンを一律に反転 ($\hat{S}(i) \mapsto -\hat{S}(i)$) させれば, 強磁性体の基底状態のようにスピンの向きが一様に並んだ状態となるので, 反強磁性的な磁気秩序を持つと表現される. 交互に符号を反転したスピンの期待値は, staggered 磁化と呼ばれる. 一方, 量子力学では状態の重ね合わせが可能である. 例えば $s = 1/2$ の場合, 隣接する 2 個の格子点がスピン 1 重項を形成した状態もまた, 反強磁性的なハミルトニアンのエネルギー期待値を小さくする. 図 1.1(b) に示すように, 格子点の組が規則正しくスピン 1 重項の結合 (valence bond, VB) を形成して安定化した状態は, valence bond solid (VBS) 状態と呼ばれる [9, 10]. VBS 相は短距離スピン相関・gapped 励起を持ち, 回転・並進等の格子の対称性が自発的に破れている. 磁気秩序を持たず, disorder 相に分類される. あるいは, スピン一重項が多数の格子点の組で共鳴した状態を考えることもできる. これは resonating valence bond (RVB) 状態 [11–13] と呼ばれており, 低温でも大きな量子揺らぎを持つスピン液体の一種である. スピン液体は短距離相関だが, VBS 状態とは異なり格子の対称性を破らない.

Heisenberg 模型の 2 次元系への拡張としては, 六角 (ハニカム) 格子 [14–17], 三角格子 [18–20], カゴメ格子 [21–23] 上の SU(2) スピン系の研究が挙げられる. 六角格子は正方格子と同様に, 2 種類の副格子から成る構造 (bipartite) を持っているため, 原理的には Néel 状態が実現可能である. 一方, 三角・カゴメ格子は 3 副格子構造 (tripartite) であるため, 格子点上の SU(2) スピンにはフラストレーションが生じる. こうした場合には, スピン液体が基底状態として実現する可能性が指摘されている [23–26]. あるいは, 正方格子上の一般の SU(N) スピン系に拡張する研究も見られる [8–10, 27, 28]. この場合のスピン変数は, SU(N) のある完全対称表現と, その共役表現が, 2 種類の副格子にそれぞれ割り当てられる. 特に, large N 極限では解析的な計算が可能となる.

古典的描像はスピン表現 $s \rightarrow \infty$ においてのみ成立するが, 数値計算によると, すべての s に対して最近接相互作用の Heisenberg 模型の基底状態は Néel 相であることが知られている [29–31]. そこで, Heisenberg 模型に何らかの高次の相互作用項を追加する. 追加する相互作用の強さを表すパラメータを変化させると, 基底状態が変化する相転移が起こり得る. これは量子力学的なスピン演算子の非可換性に由来する, 量子相転移である. 量子相転移の簡単な例として, 以下のハミルトニアンで与えられる, $s = 1/2$ ダイマー模型

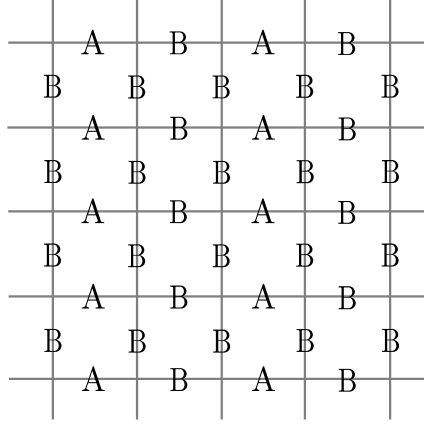


図 1.2: ダイマー模型 (1.2). スピン間の相互作用の強さは, 辺 A 上では J , 辺 B 上では gJ , その他の格子点間では 0 と定められる.

が古くから調べられている [32] :

$$H = J \sum_{\langle i, i' \rangle \in A} \hat{S}(i) \cdot \hat{S}(i') + gJ \sum_{\langle i, i' \rangle \in B} \hat{S}(i) \cdot \hat{S}(i'). \quad (1.2)$$

ただし, $J > 0$, $0 \leq g \leq 1$ として, 最近接格子点 i, i' を結ぶ正方形の辺を, 図 1.2 に従って集合 A, B に分類する. $g = 1$ のときは, 等方的な相互作用の Heisenberg 模型に帰着するので, Néel 状態が基底状態として実現する. $g = 0$ のときは, 図 1.1(b) のように辺 A の上に VB が整列した VBS 状態が, 厳密な基底状態である. したがって, 少なくとも $0 < g < 1$ のどこかに相転移が起きることが推測される. 実際に, $g \approx 0.52$ で 2 次相転移が起こることが, 数値計算により確かめられている [33, 34].

より興味深いのは, 格子の対称性を破らないハミルトニアンが, Néel-VBS 相転移を引き起こす場合である. Néel 相はスピン回転対称性を, VBS 相は格子の対称性を, それぞれ自発的に破る. Landau, Ginzburg による相転移の古典論によると, 異なる種類の秩序変数で記述される対称性が破れた相は, 一般に直接 2 次相転移することはない. 1 次相転移で隔てられるか, 両方の対称性を保つ相・両方とも破れた相を中間に経由するのが自然である. ところが Senthil et al. [35, 36] により, $SU(2)$ 正方格子反強磁性体の Néel-VBS 相転移では, 直接 2 次相転移が可能であることが示された. Deconfined criticality と呼ばれるこの理論は, スピン $s = 1/2$ を持つスピノン場を秩序変数に用いる. スピノン場の励起の自由度は, Néel 相, VBS 相では閉じ込められているが, 臨界点近傍でのみ非閉じ込め (deconfined) となる. Sandvik [37] は J-Q 模型と呼ばれるハミルトニアンを提案し, その量子相転移が deconfined criticality の特徴を有することを, 量子モンテカルロ法 (quantum Monte Carlo method, QMC) による数値計算で確かめた.

上記のような量子相転移に関する繊細な性質を調べるに当たって, 場の理論の技法は, 強力な解析手段を提供する. 相転移の有効理論は, 系の状態を記述する場を変数とした虚時間経路積分で定式化される [38]. 各相は理論が持つ対称性の自発的破れで特徴付けられるため, 相転移を Higgs 模型に類似の有効作用で記述することができる [39]. 量子論特有のアノマリーを調べると, 't Hooft によるアノマリーマッチング [40] の議論から, 低エネルギー領域で実現する系の性質に制約が課される [41, 42]. また, 格子上のスピン系であることの帰結として, モノポール (インスタントン) 配位の寄与が, 有効理論を考える際に重要となる. このように, 高エネルギー物理学と共通の知識を応用することにより, 量子スピン系が持つ非自明な性質を明らかにできる.

本研究は, 反強磁性的な最近接相互作用をする三角格子上の $SU(3)$ スピン系について, 初めてモノポールを含む理論の構築を試みた研究である. 三角格子は 3 種類の副格子から成るので, 図 1.3(a) のようにフラストレーションを生じることなく, $SU(3)$ スピンで Néel 状態を実現できる. あるいは 3 個の格子点のスピン状態を合成することにより, 図 1.3(b) のように VBS 状態を構成することも可能である. どの相が基底状態として実現するかは, 相互作用の具体形に依存する. 本研究では, Néel-VBS 相間の量子相転移につ

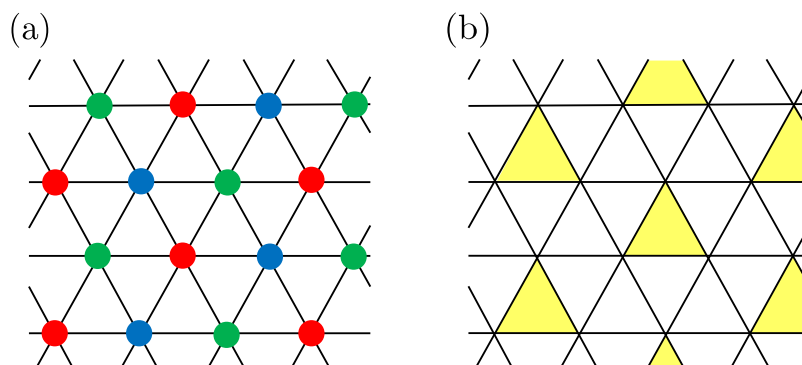


図 1.3: SU(3) 基本表現の三角格子反強磁性体の典型的な基底状態. (a) の Néel 状態では, 異なる色で表した直交する 3 状態が, 隣り合わないように割り当てられる. (b) の VBS 状態では, 黄色で示した隣接する 3 個の格子点がスピン一重項を形成する.

いて議論する. SU(3) 三角格子反強磁性体の解析は, 概して SU(2) 正方格子の先行研究と同じ方向性で進められるが, SU(2) 正方格子の類推からは非自明な結果が随所に現れる. SU(2) スピン系との最大の違いは, トポロジカルチャージの個数だと言える. SU(2) スピン系のトポロジカルチャージは 1 種類なのに対し, SU(3) スピン系では, 独立なトポロジカルチャージが 2 種類存在することが, より複雑で魅力的な現象を引き起こす.

SU(3) 三角格子反強磁性体の Néel 相の議論は, 既に文献 [43,44] に見られる. Bilinear-Biquadratic (BBQ) 模型 [45] の文脈で, SU(3) 基本表現に属するスピン変数が三角格子に配置された模型について, 低エネルギー有効理論が非線形シグマ模型で記述されることが導出された. しかし, これらの文献ではモノポールについて言及されていない. 文献 [46] で, 基本表現の最近接 Heisenberg 模型の基底状態が Néel 秩序を持つことが, 数値計算で調べられている. また文献 [47] では, トポロジカルチャージの絶対値が 2 以下のスキルミオン配位に対して, エネルギー的な安定性を数値計算で評価している.

2次元反強磁性体の物理は, 理論上だけのものに留まらず, 各種実験とも関連している. 元々, SU(2) 正方格子反強磁性体 ($s = 1/2$) は, 高温超伝導体 [48] の近似的な模型として研究が進められた [49]. 上述のダイマー模型の量子相転移は, 既に TiCuCl_3 で観測された [50]. このとき, パラメータ g は圧力変化と対応する. 近年では低温技術の進歩に伴い, 光学格子中の冷却原子によって, SU(N) スピン系を実現することができると期待されている [51–58]. あるいは, 臨界現象の普遍性 (ハミルトニアンの詳細に依らない性質) のため, 相転移を起こす何らかの量子系が, スピン系と等しい臨界理論を持つことがある [59]. SU(N) 反強磁性体が示す量子現象を解明し, トポロジー・相転移に関する理解を深めることには意義があると考えられる.

本論文の構成は, 以下の通りである. 2章では, SU(2) 正方格子反強磁性体に関する先行研究のレビューを行う. 3章以降が, SU(3) 三角格子反強磁性体についての独自の研究である. 3章にて Néel 相の有効理論として非線形シグマ模型の導出を行い, 有効作用の対称性を 4章で考察する. 5章では Berry 位相を具体的に計算し, モノポールの性質を説明する. 6章では理論が持つ 't Hooft アノマリーを調べ, Néel-VBS 直接相転移の可能性を議論する. 7章はモノポールガスによる VBS 相の解析を行い, モノポール凝縮との関連を述べる. 8章で研究を総括する. 付録 A–F には, 計算過程と補足的な情報が含まれる.

3–6章 (5.4節を除く) と付録 B–D の内容は, 自身の投稿論文 [60] に基づく. 本研究は, 基礎物理学研究所の谷崎氏との共同研究によるものである.

第2章 先行研究—SU(2) 正方格子反強磁性体

相互作用する SU(2) スピンが 2 次元格子に配置されたモデルは、ここ 30 年余りの間に詳しく調べられてきた。この章では、本研究に関連する主要な先行研究を振り返る。その内容は、本論文の主題である SU(3) 三角格子反強磁性体の結果と比較することにも役立つ。

2.1 Néel 相

最近接斥力相互作用の Heisenberg モデルは、古典極限において Néel 状態が基底状態として実現する。量子論でも Néel 状態付近の低エネルギー励起は、スピノコヒーレント経路積分によって定式化することができる。この節では、ハミルトニアン連続極限から導かれる有効作用を紹介する。

2.1.1 SU(2) Heisenberg モデル

互いに相互作用する SU(2) スピン変数が、一辺 a の 2 次元正方格子の格子点 $\{i\}$ 上に乗った系を考える。最も基本的かつよく使われるハミルトニアンは、

$$H = 2J \sum_{\langle i, i' \rangle} \hat{\mathbf{S}}(i) \cdot \hat{\mathbf{S}}(i') \quad (2.1)$$

で表される Heisenberg モデルである。ここで、 $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3)$ は

$$[\hat{S}_v, \hat{S}_w] = i \sum_{u=1}^3 \varepsilon_{vwu} \hat{S}_u \quad (2.2)$$

を満たすスピン演算子であり、 $\langle i, i' \rangle$ は最近接格子点の組を意味する。 $J < 0$ ならば強磁性的、 $J > 0$ ならば反強磁性的な相互作用である。以降は $J > 0$ に限定する。

SU(2) スピンの表現は、量子数 $s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ で指定される。SU(2) の Young 図は 1 行 p 列の箱で表されるが、スピン表現 s とは $p = 2s$ で関係している。 \hat{S}_3 を量子化軸に選ぶと、1 個のスピンの状態は

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{S}} |s, m\rangle = s(s+1) |s, m\rangle, \quad \hat{S}_3 |s, m\rangle = m |s, m\rangle \quad (2.3)$$

を満たす状態 $\{|s, m\rangle\}_{m=-s, -s+1, \dots, s-1, s}$ で張られる。以降は、すべての格子点でスピン表現 s が等しい系を考える。系全体の状態は、(2.3) の全格子点についての直積で与えられる。

ここからは、分配関数 $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$ を計算する (β : 逆温度)。スピノコヒーレント状態を用いた定式化には、いくつかの方法がある。ここでは文献 [61] に従い、スピノコヒーレント状態 $|\mathbf{n}\rangle$ を、highest weight 状態 $|s, s\rangle$ のスピン空間の回転で定義する：

$$|\mathbf{n}\rangle = e^{i\theta(\hat{S}_1 \sin \varphi - \hat{S}_2 \cos \varphi)} |s, s\rangle \quad (\theta \in [0, \pi], \varphi \in [0, 2\pi)) \quad (2.4)$$

コヒーレントベクトル \mathbf{n} は、球座標のパラメータ (θ, φ) によって

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) \in \text{O}(3) = \text{S}^2 \quad (2.5)$$

と指定される．定義より，以下の性質が成り立つ（例えば [62] を参照）：

$$\langle \mathbf{n} | \mathbf{n} \rangle = 1 \quad (\text{規格化}), \quad (2.6)$$

$$\int d\Omega_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| = 1 \quad (\text{完全性}), \quad (2.7)$$

$$\langle \mathbf{n}' | \mathbf{n} \rangle = \left(\frac{1 + \mathbf{n}' \cdot \mathbf{n}}{2} \right)^s e^{is\Psi(\hat{\mathbf{z}}, \mathbf{n}, \mathbf{n}')} \quad (\text{重なり積分}), \quad (2.8)$$

$$\langle \mathbf{n} | \hat{S} | \mathbf{n} \rangle = s \mathbf{n} \quad (\text{スピン演算子}). \quad (2.9)$$

ただし，(2.7) の積分測度は

$$\int d\Omega_{\mathbf{n}} = \frac{2s+1}{4\pi} \int \sin\theta d\theta d\varphi \quad (2.10)$$

を用いる．(2.8) の $\Psi(\hat{\mathbf{z}}, \mathbf{n}, \mathbf{n}')$ は，3 点 $(\theta, \varphi) = (0, 0), (\theta, \varphi), (\theta', \varphi')$ が単位球面上に作る三角形の，向き付けられた面積を表す．球面上の面積には $4\pi\mathbb{Z}$ を加える不定性があるが， $s \in \mathbb{Z}/2$ なので，(2.8) に不定性は現れない． Ψ の具体的な表式は，球面上の 3 点を $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$ とすると，

$$e^{i\Psi(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3)/2} = \frac{1 + \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_3 + \mathbf{n}_3 \cdot \mathbf{n}_1 + i\mathbf{n}_1 \cdot (\mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_3)}{\{2(1 + \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2)(1 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_3)(1 + \mathbf{n}_3 \cdot \mathbf{n}_1)\}^{1/2}} \quad (2.11)$$

で与えられる [63]．古典極限 $s \rightarrow \infty$ においては，SU(2) スピン変数を半径 s の方向ベクトルとして扱うことができるが，(2.9) より，その方向ベクトルが (2.5) の \mathbf{n} に他ならない． \mathbf{n} を秩序変数として用いると，単位ベクトル $\mathbf{n} \in O(3) = S^2$ による描像が半古典的に成立するので，スピン状態を直感的に理解できる．以上の内容は，1 格子点に対するスピニコヒーレント状態である．全格子点に対するスピニコヒーレント状態を，直積 $|\mathbf{n}\rangle = \otimes_i |\mathbf{n}(i)\rangle$ で定義する．

次に，分配関数 Z を虚時間経路積分で書き表す [61, 64, 65]． $0 \leq \tau \leq \beta$ を K 個のステップに分割し， k 番目のステップのコヒーレントベクトルを \mathbf{n}_k と表す．SU(3) スピン系で詳しく説明する ((3.15), (3.16) を参照) ので，途中計算を省略する．結果として，

$$Z \simeq \left(\int \prod_{k=1}^K d\Omega_{\mathbf{n}_k} \right) \exp \left[- \sum_{k=1}^K \left\{ -is \sum_i \Psi(\mathbf{n}_k(i), \mathbf{n}_{k-1}(i), \hat{\mathbf{z}}) + \frac{\beta}{K} \langle \mathbf{n}_k | H | \mathbf{n}_k \rangle \right\} \right] \quad (2.12)$$

を得る．Heisenberg 模型のハミルトニアン (2.1) を代入し，(2.9) を用いて，スピン演算子 $\hat{S}(i)$ を場 $s\mathbf{n}(i)$ に置き換える． $K \rightarrow \infty$ の極限をとると， $\tau = \beta k/K$ は連続変数となり，分配関数は

$$Z = \int \mathcal{D}\mathbf{n} \exp(-S[\mathbf{n}]), \quad (2.13)$$

$$S = S_{\text{WZ}} + 2Js^2 \int_0^\beta d\tau \sum_{\langle i, i' \rangle} \mathbf{n}(i, \tau) \cdot \mathbf{n}(i', \tau), \quad (2.14)$$

$$S_{\text{WZ}} = -is \sum_i \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^K \Psi(\mathbf{n}_k(i), \mathbf{n}_{k-1}(i), \hat{\mathbf{z}}) = i2s \sum_i \Omega(i) \quad (2.15)$$

となる．(2.14) の第 2 項は，古典的なハミルトニアンに由来する交換項である．(2.15) は，Wess-Zumino 項と呼ばれるものであり，相互作用の強さ J に依存しない．ここでは，SU(3) スピン系と共通の Ω の定義を採用した．ところで Ψ とは，単位球面上の三角形の面積を意味するものであった．周期境界条件 ($\mathbf{n}_0 = \mathbf{n}_K$) を考慮すると，

$$-2\Omega(i) = \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^K \Psi(\mathbf{n}_k(i), \mathbf{n}_{k+1}(i), \hat{\mathbf{z}}) \quad (2.16)$$

は， $\mathbf{n}(i, \tau)$ が $0 \leq \tau \leq \beta$ の間に単位球面を取り囲む，向き付けられた面積に等しい．ここでも面積には $4\pi\mathbb{Z}$ を加える不定性があるが， $Z \sim \exp(i\mathbb{Z}\Omega)$ という形なので， Z は一意に決まる．球面上の面積は， $\mathbf{n}(i, \tau)$ を図 2.1 に示す多様体上の場 $\tilde{\mathbf{n}}(i, \tau, u)$ に拡張して，

$$u \in [0, 1], \quad \tilde{\mathbf{n}}(i, \tau, 0) = \mathbf{n}(i, \tau), \quad \tilde{\mathbf{n}}(i, \tau, 1) = \hat{\mathbf{z}}, \quad \tilde{\mathbf{n}}(i, 0, u) = \tilde{\mathbf{n}}(i, \beta, u) \quad (2.17)$$

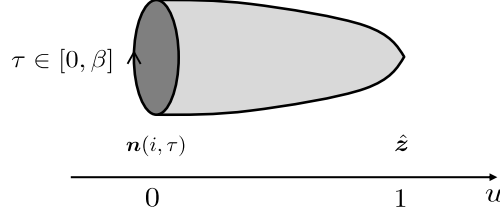


図 2.1: (2.17)における, 拡張された多様体. $u = 0$ 境界上で $\tilde{\mathbf{n}}$ は \mathbf{n} と一致する. $\tau = 0, \beta$ で周期境界条件が課せられている.

を満たす仮想的な引数 u を追加することにより,

$$-2\Omega(i) = \int_0^1 du \int_0^\beta d\tau \tilde{\mathbf{n}}(i, \tau, u) \cdot \{\partial_\tau \tilde{\mathbf{n}}(i, \tau, u) \times \partial_u \tilde{\mathbf{n}}(i, \tau, u)\} \quad (2.18)$$

と積分で表現することもできる. この積分はトポロジカルな量なので, u, \hat{z} の選び方の詳細に依らない.

2.1.2 O(3) 非線形シグマ模型

正方格子は2種類の副格子 $\alpha = 1, 2$ から成る (bipartite). 隣接する格子点に対し, 直交するコヒーレント状態 $|\mathbf{n}(i)\rangle$ を割り当てたものが, Néel 状態である. (2.8) より, $|\mathbf{n}\rangle$ と直交するコヒーレント状態は, $|\mathbf{-n}\rangle$ のみであることが分かる. そのため, 副格子 $\alpha = 1$ にはあるコヒーレント状態 \mathbf{n} を, そして副格子 $\alpha = 2$ には符号を反転させた状態 $\mathbf{-n}$ を割り当てることにより, Néel 状態が構成できる. Néel 状態は古典極限 ($s \rightarrow \infty$) において正確な基底状態であるが, 有限の s に対してはハミルトニアンエネルギー固有状態ではない. s が十分大きいと仮定して, Néel 秩序付近の揺らぎを, 場の理論で定式化する.

Néel 状態からの励起を, 高エネルギー成分と低エネルギー成分に分解して記述する. $\mathbf{n}(i, \tau) \in \text{O}(3)$ を秩序変数とする方法では, 以下のように場を設定する [66]:

$$\mathbf{n}(i, \tau) = \begin{cases} +\sqrt{1 - \frac{a^2}{s^2} |\mathbf{l}(i, \tau)|^2} \mathbf{m}(i, \tau) + \frac{a}{s} \mathbf{l}(i, \tau) & (\alpha = 1) \\ -\sqrt{1 - \frac{a^2}{s^2} |\mathbf{l}(i, \tau)|^2} \mathbf{m}(i, \tau) + \frac{a}{s} \mathbf{l}(i, \tau) & (\alpha = 2) \end{cases}, \quad (2.19)$$

$$|\mathbf{m}(i, \tau)| = 1, \quad \mathbf{m}(i, \tau) \cdot \mathbf{l}(i, \tau) = 0. \quad (2.20)$$

\mathbf{m} は Néel 秩序に近い低エネルギーの励起を, \mathbf{l} は Néel 秩序を壊す高エネルギーの励起を表す. $\mathbf{m}(i)$ は staggered 磁化ベクトルと呼ばれる秩序変数であり, 厳密な Néel 状態では $\mathbf{l} = 0$, $\mathbf{m} = \text{一定}$ となる.

まずは作用の交換項 (2.14) を変形する. 正方格子の最近接相互作用は, x, y 方向の単位格子ベクトルを \hat{x}, \hat{y} とすると,

$$\sum_{\langle i, i' \rangle} \mathbf{n}(i, \tau) \cdot \mathbf{n}(i', \tau) = \sum_i [\mathbf{n}(i, \tau) \cdot \mathbf{n}(i + \hat{x}, \tau) + \mathbf{n}(i, \tau) \cdot \mathbf{n}(i + \hat{y}, \tau)] \quad (2.21)$$

と表せる. \mathbf{n} に (2.19) を代入し, 格子定数 $a \rightarrow 0$ の連続極限をとる. 格子点のラベル i は, 連続座標 $\vec{r} = (x, y)$ に置き換えられる. (2.19) で \mathbf{m} の符号を交互に定義したおかげで, \mathbf{m}, \mathbf{l} は空間方向に微分可能である. a について Taylor 展開を行うことで,

$$\sum_{\langle i, i' \rangle} \mathbf{n}(i, \tau) \cdot \mathbf{n}(i', \tau) \simeq \frac{1}{a^2} \int dx dy \left[\frac{a^2}{2} (|\partial_x \mathbf{m}|^2 + |\partial_y \mathbf{m}|^2) + \frac{4a^2}{s^2} |\mathbf{l}|^2 + \mathcal{O}(a^3) + \text{const.} \right] \quad (2.22)$$

を得る.

Wess-Zumino 項 (2.15), (2.18) を, a の最低次で評価する [67]. (2.19) を代入すると,

$$-2\Omega(i) = \int_0^1 du \int_0^\beta d\tau \left[(-1)^{\alpha-1} \tilde{\mathbf{m}}(i) \cdot \{ \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}}(i) \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}(i) \} + \frac{a}{s} \tilde{\mathbf{l}} \cdot \{ \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}}(i) \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}(i) \} \right. \\ \left. + \frac{a}{s} \tilde{\mathbf{m}}(i) \cdot \{ \partial_\tau \tilde{\mathbf{l}}(i) \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}(i) \} + \frac{a}{s} \tilde{\mathbf{m}}(i) \cdot \{ \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}}(i) \times \partial_u \tilde{\mathbf{l}}(i) \} + \mathcal{O}(a^2) \right] \quad (2.23)$$

となる. ただし, 引数 τ, u を省略した. $\tilde{\mathbf{l}}(i), \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}}(i), \partial_u \tilde{\mathbf{m}}(i)$ がすべて $\tilde{\mathbf{m}}(i)$ に垂直であることから,

$$\tilde{\mathbf{l}}(i) \cdot \{ \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}}(i) \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}(i) \} = 0 \quad (2.24)$$

が成り立つ. するとスカラー三重積の公式を利用して, (2.23) は

$$-2\Omega(i) = \int_0^1 du \int_0^\beta d\tau \left[(-1)^{\alpha-1} \tilde{\mathbf{m}}(i) \cdot \{ \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}}(i) \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}(i) \} + \frac{a}{s} \partial_u \{ \tilde{\mathbf{m}}(i) \cdot (\partial_\tau \tilde{\mathbf{m}}(i) \times \tilde{\mathbf{l}}(i)) \} \right. \\ \left. + \frac{a}{s} \partial_\tau \{ \tilde{\mathbf{m}}(i) \cdot (\tilde{\mathbf{l}}(i) \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}(i)) \} \right] \quad (2.25)$$

と書ける. $\tau = 0, \beta$ で周期境界条件のために, τ の表面積分は消える. 一方で u の表面積分からは, $u = 0$ の寄与がある. (2.17) より, $\tilde{\mathbf{m}}, \tilde{\mathbf{l}}$ は引数に u を含まない従来の場合 \mathbf{m}, \mathbf{l} に戻る. 整理すると,

$$S_{\text{WZ}} = -is \sum_i [-2\Omega(i)] = S_{\text{B}} + is \sum_i \int_0^\beta d\tau \frac{a}{s} \{ \mathbf{l}(i) \cdot (\mathbf{m}(i) \times \partial_\tau \mathbf{m}(i)) \}, \quad (2.26)$$

$$S_{\text{B}} = -is \sum_i (-1)^{\alpha-1} \int_0^1 du \int_0^\beta d\tau \tilde{\mathbf{m}}(i) \cdot \{ \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}}(i) \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}(i) \} = -is \sum_i (-1)^{\alpha-1} \omega(i) \quad (2.27)$$

を得る. (2.26) の右辺第 2 項はその後, 連続極限で $i \mapsto \vec{r}$ に置き換えて, 格子点 i の和を xy 積分に直す. (2.27) は, Berry 位相と呼ばれる. $\omega(i)$ は, $\mathbf{m}(i, \tau)$ が $0 \leq \tau \leq \beta$ の間に単位球面を囲う, 向き付けられた面積に等しい.

Berry 位相の評価を行う. 格子点 i の和をとると, \mathbf{m} は空間方向に滑らかなので, 連続極限で S_{B} の $\mathcal{O}(a^0)$ は打ち消し合う. 副格子 $\alpha = 1$ に属する格子点を $i = 2j$, 格子点 $2j$ から $-\hat{x}$ だけ並進した $\alpha = 2$ の格子点を $i = 2j - 1$ と, ラベルを付ける.

$$S_{\text{B}} = -is \sum_j \int_0^1 du \int_0^\beta d\tau [\tilde{\mathbf{m}} \cdot \{ \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}} \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}} \}(2j) - \tilde{\mathbf{m}} \cdot \{ \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}} \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}} \}(2j - 1)] \quad (2.28)$$

の連続極限をとる. $\tilde{\mathbf{m}}(2j) - \tilde{\mathbf{m}}(2j - 1) = a \partial_x \tilde{\mathbf{m}}(2j) + \mathcal{O}(a^2)$ と展開されるが, $|\tilde{\mathbf{m}}(2j - 1)|^2 = 1 + \mathcal{O}(a^2)$ の条件から, $\tilde{\mathbf{m}}(2j) \cdot \partial_x \tilde{\mathbf{m}}(2j) \simeq 0$ が分かる. $\partial_x \tilde{\mathbf{m}}(i), \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}}(i), \partial_u \tilde{\mathbf{m}}(i)$ がすべて $\tilde{\mathbf{m}}(i)$ に垂直なので,

$$\partial_x \tilde{\mathbf{m}}(2j) \cdot \{ \partial_\tau \tilde{\mathbf{m}}(2j) \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}(2j) \} = 0 \quad (2.29)$$

が成り立つ. したがって,

$$S_{\text{B}} = -is \sum_j \int_0^1 du \int_0^\beta d\tau [a \partial_x \tilde{\mathbf{m}} \cdot (\partial_\tau \tilde{\mathbf{m}} \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}) + \tilde{\mathbf{m}} \cdot (\partial_\tau a \partial_x \tilde{\mathbf{m}} \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}) \\ + \tilde{\mathbf{m}} \cdot (\partial_\tau \tilde{\mathbf{m}} \times \partial_u a \partial_x \tilde{\mathbf{m}}) + \mathcal{O}(a^2)](2j) \\ = -isa \sum_j \int_0^1 du \int_0^\beta d\tau [\partial_u \{ \tilde{\mathbf{m}} \cdot (\partial_\tau \tilde{\mathbf{m}} \times \partial_x \tilde{\mathbf{m}}) \} + \partial_\tau \{ \tilde{\mathbf{m}} \cdot (\partial_x \tilde{\mathbf{m}} \times \partial_u \tilde{\mathbf{m}}) \}](2j) \\ = -isa \sum_j \int_0^\beta d\tau \mathbf{m} \cdot (\partial_x \mathbf{m} \times \partial_\tau \mathbf{m})(2j). \quad (2.30)$$

格子点のラベル j を, x 軸方向と y 軸方向に分解する. x 軸方向に関しては, 連続座標 x の積分で表す. x 座標が同一の格子点に対し, y 軸方向に $k = y/a$ でラベルを付ける. 正方格子では $k = 1, 2, 3, \dots$ と増え

るにつれて、副格子 $\alpha = 1, 2$ が交互に現れる。以上から、

$$\begin{aligned} S_B &\simeq 2\pi si \sum_k (-1)^k \cdot \frac{-1}{8\pi} \int_0^\beta d\tau \int dx \left\{ \mathbf{m} \cdot (\partial_x \mathbf{m} \times \partial_\tau \mathbf{m}) - \mathbf{m} \cdot (\partial_\tau \mathbf{m} \times \partial_x \mathbf{m}) \right\} \\ &= 2\pi si \sum_k (-1)^k \cdot Q^{x\tau}(k) \end{aligned} \quad (2.31)$$

となる。 $Q^{\mu\nu}$ は $x^\mu x^\nu$ 平面の Pontryagin index であり、 $\mathbf{m} \in O(3)$ を用いて

$$Q^{\mu\nu} = \frac{-1}{4\pi} \int dx^\mu dx^\nu \mathbf{m} \cdot (\partial_\mu \mathbf{m} \times \partial_\nu \mathbf{m}) \in \mathbb{Z} \quad (2.32)$$

と与えられる。これは、ホモトピー群 $\pi_2[O(3)] = \mathbb{Z}$ に対応する、2次元理論のトポロジカルチャージである。 $Q^{x\tau}(k)$ は、 k が一定の $x\tau$ 平面上の Pontryagin index を意味する。1次元反強磁性スピン鎖 [2,3] の場合には、 s が半整数の有効理論に、 $Q^{x\tau}$ が θ 項として入ることになる。それに対し、2次元正方格子は、1次元スピン鎖を y 軸方向に符号を交互に変えながら並べたものと見ることができる。(2.31) の k についての和が、スピン鎖の和に対応する。連続極限において、 \mathbf{m} は空間方向に滑らかに変化する。しかし $Q^{x\tau} \in \mathbb{Z}$ は離散的な値しか取れないので、 $Q^{x\tau}(k)$ は k に依存しない。系にフラストレーションが無いという仮定と周期境界条件により、 k は偶数個の和である。よって、 $\sum_k (-1)^k Q^{x\tau} = 0$ となり、連続的な $\mathbf{m}(\vec{r}, \tau)$ の配位を考える限り、 $S_B = 0$ である [7]。このように連続極限で Berry 位相は消えるが、2.2 節では、モノポールによるトンネル過程を考えると、非自明な Berry 位相が生じることを確認する。

(2.22), (2.26) より、ここまでで

$$S = \int_0^\beta d\tau \int dx dy \left[\frac{i}{a} \{ \mathbf{l}(i) \cdot (\mathbf{m}(i) \times \partial_\tau \mathbf{m}(i)) \} + Js^2 (|\partial_x \mathbf{m}|^2 + |\partial_y \mathbf{m}|^2) + 8J|\mathbf{l}|^2 \right] \quad (2.33)$$

を導出した。高エネルギーの励起を表す \mathbf{l} の経路積分を実行する。Gauss 積分を行うと、 \mathbf{m} を秩序変数とする $O(3)$ 非線形シグマ模型：

$$S_{\text{eff}} = \int_0^\beta d\tau \int dx dy \frac{1}{2g_{\text{eff}}} \left\{ \frac{1}{v} |\partial_\tau \mathbf{m}|^2 + v (|\partial_x \mathbf{m}|^2 + |\partial_y \mathbf{m}|^2) \right\}, \quad (2.34)$$

$$g_{\text{eff}} = \frac{2\sqrt{2}a}{s}, \quad v = 4\sqrt{2}Jsa \quad (2.35)$$

が得られる。係数 v は、

$$\tau \mapsto \frac{\tau}{v}, \quad \beta \mapsto v\beta \quad (2.36)$$

という虚時間のスケール変換で取り除くことができる。結果は、 $v = 1$ と置いたものに等しい：

$$S_{\text{eff}} = \int_0^\beta d\tau \int dx dy \frac{1}{2g_{\text{eff}}} \sum_{\mu=\tau, x, y} |\partial_\mu \mathbf{m}|^2. \quad (2.37)$$

2.1.3 CP^1 非線形シグマ模型

秩序変数の表現を変更して、場 \mathbf{m} を変数とした $O(3)$ 非線形シグマ模型 (2.37) を、より便利な形に書き直す。各格子点 i について、 $\mathbf{m}(i) \in O(3)$ は複素2成分ベクトル $\vec{\phi}(i) \in \mathbb{C}^2$ を用いて、

$$\mathbf{m}(i) = \vec{\phi}^\dagger(i) \boldsymbol{\sigma} \vec{\phi}(i) \quad (2.38)$$

と表すことができる。 $\boldsymbol{\sigma}$ は Pauli 行列である。規格化条件 $|\mathbf{m}| = 1$ より、 $|\vec{\phi}| = 1$ を満たす必要がある。また、 $\vec{\phi}(i)$ の位相変換は $\mathbf{m}(i)$ を変えないので、物理的に同じ状態を表す。したがって、 $U(1)$ 位相を同一視した $\vec{\phi}(i) \in CP^1$ は、 $\mathbf{m}(i)$ と一対一対応する (Hopf 写像)。具体的には、球座標による \mathbf{m} の一般形^{*1}：

$$\mathbf{m} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), \quad \theta \in [0, \pi], \quad \varphi \in [0, 2\pi) \quad (2.39)$$

*1ここでの (θ, φ) は、 \mathbf{n} の球座標表示 (2.5) で用いたパラメータとは別物である。

に対して、 $\vec{\phi}$ は

$$\vec{\phi} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

と表される。 $\vec{\phi}$ はSU(2) スピン回転の下で、 $s = 1/2$ 表現の変換則に従うので、 $\vec{\phi}$ は $s = 1/2$ を持ったスピノン場として言及される [10]. ここでのスピンとは、スピン回転の変換性を意味する. 素粒子物理学のスピン統計性とは無関係であり、 $\vec{\phi}$ はボソン場であることに注意する.

(2.38)を代入すると、

$$|\partial_\mu \mathbf{m}|^2 = 4 \left(\left| \partial_\mu \vec{\phi} \right|^2 - \left| \vec{\phi}^* \cdot \partial_\mu \vec{\phi} \right|^2 \right) \quad (2.41)$$

が成り立つ. これにより、O(3) 非線形シグマ模型 (2.37) は

$$S_{\text{eff}} = \int_0^\beta d\tau \int dx dy \frac{2}{g_{\text{eff}}} \sum_{\mu=\tau,x,y} \left(\left| \partial_\mu \vec{\phi} \right|^2 - \left| \vec{\phi}^* \cdot \partial_\mu \vec{\phi} \right|^2 \right) \quad (2.42)$$

となる. g_{eff} は(2.35)と等しい. あるいは、U(1) ゲージ場 a_μ を

$$a_\mu = i \vec{\phi}^* \cdot \partial_\mu \vec{\phi} \quad (2.43)$$

で定義すると、(2.42)は

$$S_{\text{eff}} = \int_0^\beta d\tau \int dx dy \frac{2}{g_{\text{eff}}} \sum_{\mu=\tau,x,y} \left| (\partial_\mu + i a_\mu) \vec{\phi} \right|^2 \quad (2.44)$$

と書き換えられる. これは、ゲージ相互作用するCP¹ 非線形シグマ模型の形をしている [10, 39]. $\vec{\phi}$ の局所位相変換:

$$\vec{\phi} \mapsto e^{i\chi(x)} \vec{\phi}, \quad a_\mu \mapsto a_\mu - \partial_\mu \chi(x) \quad (2.45)$$

に対して、(2.44)は不変である. このU(1)ゲージ対称性の出現は、(2.38)において、 $\vec{\phi}$ の位相が非物理的なゲージ自由度であることに由来する.

$\mathbf{m} \in \text{O}(3)$ 変数ではなく $\vec{\phi} \in \text{CP}^1$ 変数を用いる利点として、SU(N)スピン系の一般化が単純であることや、後述するトンネル過程のBerry位相をより簡単に計算できることが挙げられる. 正方格子などbipartiteな格子上のSU(N)反強磁性体の有効作用は、複素 N 成分単位ベクトル $\vec{\phi} \in \text{CP}^{N-1}$ で記述される非線形シグマ模型となる. また、deconfined criticalityの理論は、 \mathbf{m} ではなくスピノン場 $\vec{\phi}$ をより基本的な自由度として、量子相転移を記述する.

ところで、群としてのS², O(3), CP¹, SU(2)/U(1)はすべて同型である. SU(2)行列 U を用いて励起を記述すると、 U を変数とするSU(2)/U(1)非線形シグマ模型が導出される. これを変数変換で書き直すことにより、ハミルトニアンから直接、CP¹非線形シグマ模型(2.44)を得ることもできる. 元々この方法は、SU(N)反強磁性スピン鎖に対して提案されており [66, 68], 私はそれを正方格子に適用した. 詳細は付録A.1に記す. $N \geq 3$ に対しては、CP ^{$N-1$} とSU(N)/[U(N)] ^{$N-1$} が同型でないことに注意する.

2.2 モノポール

SU(2)正方格子の連続理論(2.37)には、スピン表現 s は非線形シグマ模型の結合定数としてのみ現れる. そのため、 s に比例するトポロジカル項を持つ1次元スピン鎖の場合とは異なり、 s が整数でも半整数でも、理論は本質的に同じ振る舞いを見せる. ところが、格子の正しい有効理論を得るには、モノポールによるトンネル過程を考慮する必要があり、そこからはBerry位相が生じる. モノポールを理論に取り入れると、 $2s \bmod 4$ に周期的に依存して、系の性質が変化することを見る [7].

2.2.1 トンネル過程

SU(2) 正方格子の場合、ホモトピー群 $\pi_2[O(3)] = \mathbb{Z}$ に対応して、O(3) 非線形シグマ模型には、1 種類のトポロジカルチャージが存在する。連続場 $\mathbf{m}(x, y) \in O(3)$ で構成されるチャージは、(2.32) の $Q^{xy} \in \mathbb{Z}$ に他ならない。 τ 一定の断面における \mathbf{m} の配位は、 xy 平面の Pontryagin index Q^{xy} で分類できる^{*2}。非自明なチャージ $Q^{xy} \neq 0$ を持つ配位を、スキルミオンと呼ぶ。

xy 平面の無限遠を 1 点コンパクト化し、 $\mathbf{m} : S^2 \rightarrow S^2 (= O(3))$ とする。 $\mathbf{m}(x, y)$ 一定の配位は、明らかに $Q^{xy} = 0$ である。O(3) スキルミオンの最も単純な例は、hedgehog 配位である。より一般に、原点を中心とした任意のトポロジカルチャージ $Q^{xy} = Q \in \mathbb{Z}$ を持つスキルミオン配位は、 $\mathbf{m}(x, y)$ のパラメータ (2.39) を

$$\theta = f(r), \quad \varphi = Q\eta \quad (2.46)$$

と選ぶことで実現できる。ただし、 xy 平面の極座標を $x + iy = re^{i\eta}$ と表し、 $f(r)$ を $f(0) = \pi$ と $f(\infty) = 0$ を滑らかに繋ぐ任意の関数 ($0 \leq f(r) \leq \pi$) とする。 \mathbf{m} を連続的に変形させたものも、同じスキルミオン数を持つ。

虚時間 (τ) 発展に伴いスキルミオン数 Q^{xy} が変化する過程を、トンネル過程と呼ぶ。 $Q^{xy} \in \mathbb{Z}$ は離散的な整数値しか取らないので、 \mathbf{m} の連続変形で Q^{xy} を変えることはできない。したがって、トンネル過程を連続場で記述しようとする、ある時空点で場 \mathbf{m} が不連続に変化するモノポール (特異点) が出現する。一方で元々の格子理論では、スピン変数は格子点上にのみ置かれているので、格子点の間にモノポールが存在すると仮定することにより、格子点上の滑らかな変化でトンネル過程が可能となる。格子理論の正しい有効理論には、トンネル過程が含まれているべきである [7]。

格子ハミルトニアンの連続極限で導出した非線形シグマ模型 (2.37) は、虚時間発展によって、スキルミオン数 Q^{xy} が変化しない。言い換えると、スキルミオン数の保存則に対応した、 $U(1)_{\text{top}}$ トポロジカル対称性を持っている。モノポール演算子 M を、 Q^{xy} を 1 減らす消滅演算子とすると、 $U(1)_{\text{top}}$ 変換は

$$M \mapsto e^{i\alpha} M \quad (2.47)$$

で与えられる。トンネル過程が起こり得る有効理論を構成するためには、 M を含むモノポール項 \mathcal{L}_M を追加する必要がある。

2.2.2 Berry 位相

モノポールを含む理論では、トンネル過程が起こる。このとき、Wess-Zumino 項から非自明な Berry 位相が現れることが、Haldane [7] により指摘された。トンネル過程の具体例を構成して、Berry 位相を実際に計算することができる [8]。以下では、(2.39) のパラメータ (θ, φ) でトンネル過程の具体例を構成して、Berry 位相を実際に計算する。

(2.27) より、 $\omega(i)$ を $\mathbf{m}(i, \tau)$ が $0 \leq \tau \leq \beta$ の間に単位球面を囲む面積とすると、Berry 位相は $\omega(i)$ の符号を交互にした総和で表される。Berry 位相は、球面上の面積の $4\pi\mathbb{Z}$ 不定性に関するトポロジカルな量であり、トンネル過程の詳細に依らない。そのため、計算しやすいトンネル過程で導出すれば十分である。

Berry 位相の計算には、(2.39) の球座標のパラメータ (θ, φ) を用いると便利である。 $\mathbf{m}(i, \tau)$ が球面上を囲む面積は、

$$\omega(i) = \int_0^\beta d\tau \dot{\varphi}(i, \tau) (1 - \cos \theta(i, \tau)) \quad (2.48)$$

で表される。ここで、 $\dot{\varphi} = d\varphi/d\tau$ を意味する。 $\tau = 0, \beta$ の周期境界条件が課せられていることに注意する。

トンネル過程の具体例として、 $\tau = 0$ で Néel 状態が実現している所から、時空点 (\vec{r}_1, T_1) のモノポールによって、チャージ $Q^{xy} = Q$ を持つスキルミオンに移り変わる。その後、時空点 (\vec{r}_2, T_2) のモノポールに

^{*2}秩序変数を $\vec{\phi}_\alpha$ とした場合のトポロジカルチャージは、(4.11) で与えられる。 $Q_2^{xy} = -Q_1^{xy}$ が常に成り立つので、 $Q^{xy} = Q_1^{xy}$ に統一できる。Néel 秩序では、異なる副格子に対して \mathbf{m} の符号が反対になるが、このことは (2.32) が \mathbf{m} の奇関数であることと整合している。

よってスキルミオンが消滅し、 $\tau = \beta$ で $\tau = 0$ と等しい Néel 状態に戻る、という過程を調べることにする。すなわち $\tau = 0 \rightarrow \beta$ の間に、トポロジカルチャージは

$$Q^{xy}(\tau) : 0 \rightarrow Q \rightarrow 0 \quad (2.49)$$

と変化する。スキルミオン配位として、(2.46) を利用する。(2.49) のトンネル過程は、 (θ, φ) を次のように選ぶことで実現できる；

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad 0 \leq \tau < T_1 : & \quad \begin{cases} \theta(\vec{r}, \tau) = \frac{\tau}{T_1} f(r_1(\vec{r})), \\ \varphi(\vec{r}, \tau) = Q \eta_1(\vec{r}), \end{cases} \\ \text{(ii)} \quad T_1 \leq \tau < T_2 : & \quad \begin{cases} \theta(\vec{r}, \tau) = f(r_{12}(\vec{r}, \tau)), \\ \varphi(\vec{r}, \tau) = Q \eta_{12}(\vec{r}, \tau), \end{cases} \\ \text{(iii)} \quad T_2 \leq \tau < T_3 : & \quad \begin{cases} \theta(\vec{r}, \tau) = \frac{T_3 - \tau}{T_3 - T_2} f(r_2(\vec{r})), \\ \varphi(\vec{r}, \tau) = Q \eta_2(\vec{r}), \end{cases} \\ \text{(iv)} \quad T_3 \leq \tau \leq \beta : & \quad \begin{cases} \theta(\vec{r}, \tau) = 0, \\ \varphi(\vec{r}, \tau) = Q \left[\eta_2(\vec{r}) + \frac{\tau - T_3}{\beta - T_3} (\eta_1(\vec{r}) - \eta_2(\vec{r})) \right]. \end{cases} \end{aligned} \quad (2.50)$$

ただし、 $f(r)$ は $f(0) = \pi$ と $f(\infty) = 0$ を滑らかに繋ぐ任意の関数である。 $r_{1,2,12}$, $\eta_{1,2,12}$ の定義は、(5.27), (5.28) に同じとする。 η_{12} の主値は、図 5.1 のように定義する。今の場合、 $\eta \neq 0$ となるステップ (ii) からのみ寄与がある。(2.48) の τ 積分を評価すると、

$$\omega(i) = 2Q \left(\left[\arctan \frac{y - y_2}{x - x_2} - \arctan \frac{y - y_1}{x - x_1} \right] + (\text{reg.}) \right) \quad (2.51)$$

を得る。 $[\arctan \dots]$ の項からは、 2π だけ値が飛びブランチカットとして、discontinuity line (図 5.2) が現れる。トンネル過程を連続変形すると、正則な項 (reg.) のみが増加する。 ω のうち空間的に滑らかに変化する部分は、(2.27) の格子点の和で打ち消され、 S_B に対して $\mathcal{O}(a)$ しか残らない。 \arctan の項が持つ不連続部分が、打ち消されることなく S_B に寄与する。

2.2.3 Destructive Interference

モノポールを格子の中心に限定した場合、トンネル過程の Berry 位相を計算する簡便な規則が得られる [7]。格子点 i の和 (2.27), (2.48) を、格子の和に書き直す：

$$\begin{aligned} S_B &= is \sum_i (-1)^{\alpha-1} \omega(i) \\ &= \frac{i2s}{4} \sum_{\square} \sum_{l=1}^4 (-1)^l Q \left[\arctan \frac{y - y_2}{x - x_2} - \arctan \frac{y - y_1}{x - x_1} \right]. \end{aligned} \quad (2.52)$$

\square とは、正方格子の最小構成要素である一辺 a の正方形を表し、頂点の 4 格子点 $i \in \square$ に $l = 1, 2, 3, 4$ とラベルを与えた。1 個の格子点は 4 個の正方形 \square に共有されるので、係数に $1/4$ が現れる。この後は 5.3.2 節と同様の議論により、スキルミオンが生成・消滅する格子のみで Berry 位相が決定されることが言える。特に (5.36) と対応して、正方形 \square の中心でスキルミオンが消滅する場合の寄与は

$$\frac{i2s}{4} \sum_{l=1}^4 \Omega(\square, l) = \frac{i2s}{4} \left[\frac{3\pi}{4} Q + \frac{\pi}{4} (-Q) + \left(-\frac{\pi}{4}\right) Q + \left(-\frac{3\pi}{4}\right) (-Q) \right] = \frac{i2s}{4} \pi Q \quad (2.53)$$

となる。生成する正方形と足し上げると、2 倍されて $S_B \in \frac{i\pi}{2} \mathbb{Z}$ となるので、トンネル過程の Berry 位相は 1 の 4 乗根の値をとることが分かる。したがって、トポロジカルチャージ Q のスキルミオンが \vec{r}_1 で生成し、 \vec{r}_2 で消滅するトンネル過程の Berry 位相 S_B は、図 2.2 の因子 $\xi(\vec{r})$ を用いて

$$e^{-S_B} = \left[\frac{\xi(\vec{r}_2)}{\xi(\vec{r}_1)} \right]^{2sQ} \quad (2.54)$$

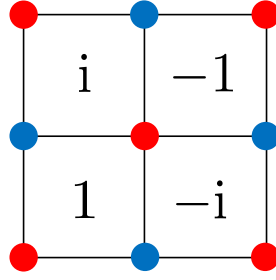


図 2.2: (2.54) で Berry 位相を計算するときの因子 $\xi(\vec{r})$. 隣接する 4 個の正方形で周期的な値となる. モノポールの位置は格子の中心に限る.

と求められる. 以上の図形的規則の導出は, 厳密な証明ではないが, (2.52) を数値的に計算することで, この主張が正しいことを確かめられる (付録 A.2 を参照).

トンネル過程は, 格子定数 a のスケールで周期的に変化する, 非自明な Berry 位相を持つ. すると, スピン表現 s に依存して, トンネル過程どうしの destructive interference が起こる [7]. 引き続き, モノポールの位置を正方形の中心に限定する. 図 2.2 に示した Berry 位相の最小繰り返し単位である 4 個の正方形に, 左下から順に $s = 1, \dots, 4$ とラベルを付け, 各格子の中心点の空間座標を \vec{X}_s^c と表すことにする. チャージ Q のスキルミオンが \vec{r}_1 で生成した後に \vec{r}_2 で消滅するトンネル過程の Berry 位相を, 簡易的に $S_B(\vec{r}_1; \vec{r}_2)$ と書く. 生成地点を左下正方形中心に固定 ($\vec{r}_1 = \vec{X}_1^c$) したときに, $\{X_s^c\}_{s=1, \dots, 4}$ でスキルミオンが消滅したときの因子 $\exp(-S_B)$ の平均値を W と定めると,

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{4} \sum_{s=1}^4 \exp[-S_B(\vec{X}_1^c; \vec{X}_s^c)] \\ &= \frac{1}{4} [1 + (-1)^{2sQ} + i^{2sQ} + (-i)^{2sQ}] \end{aligned} \quad (2.55)$$

となっている. $2sQ \notin 4\mathbb{Z}$ のとき $W = 0$, $2sQ \in 4\mathbb{Z}$ のとき $W = 1$ である. スキルミオンの生成位置を固定し, 消滅位置を 4 通りに移動させた過程からの, 分配関数への状態和を考える. 運動項 S_{eff} の差は $\mathcal{O}(a)$ なので無視すると,

$$\sum_{s=1}^4 \exp[-S_B(\vec{X}_1^c; \vec{X}_s^c) - S_{\text{eff}}] \simeq 4W \cdot \exp(-S_{\text{eff}}) \quad (2.56)$$

となるので, $2sQ$ が 4 の倍数となるトンネル過程のみが, 分配関数 Z に寄与する. $2sQ \bmod 4 = 1, 3$ のときは対角方向の格子, $2sQ \bmod 4 = 2$ のときは隣の格子を終点とするトンネル過程と, destructive interference が起こる. 以上をまとめると,

- s が半整数のとき, Q が 4 の倍数で変化するトンネル過程のみが Z に寄与する,
- s が奇数のとき, Q が 2 の倍数で変化するトンネル過程のみが Z に寄与する,
- s が偶数のとき, Q が任意の整数で変化するトンネル過程がすべて Z に寄与する

ことが分かる [7].

先行研究ではモノポールの位置を格子の中心に限定して議論されているが, モノポールが格子点上を除く任意の位置に存在する場合に拡張することも可能である. 付録 A.2 で述べるように, 私はいずれの場合にも全く同じ結論が導かれることを確認した.

2.2.4 モノポール演算子と対称性

モノポールを表す項 \mathcal{L}_M を, 2.1 節で導いた非線形シグマ模型 $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ に追加することにより, トンネル過程を含んだ格子の有効理論を構成する. $SU(2)$ 正方格子反強磁性体の独立なチャージは 1 個なので, モノ

ポール演算子も1種類だけ導入すればよい。2.2.1節でも触れたように、モノポール演算子 $M(x)$ を、 Q^{xy} を1減らすモノポールを時空点 x^μ に挿入するユニタリ演算子として定義する。ゲージ場 a_μ に双対なコンパクトスカラー場 σ を用いると、モノポール演算子は

$$M(X) = e^{-i\sigma(X)} \quad (2.57)$$

と表示される^{*3}。

スキルミオン数の変化が最小のトンネル過程に対応するモノポール項 \mathcal{L}_M を、 $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ に対する摂動として理論に追加する：

$$\mathcal{L}_{\text{lat}} = \mathcal{L}_{\text{cont}} + \mathcal{L}_M. \quad (2.58)$$

Destructive interference の結果、スピン表現 s に依存してモノポール項が異なる。 s が半整数のとき、スキルミオン数は4の倍数でのみ変化し得るから、最低次の摂動は

$$\mathcal{L}_M = \lambda M^4 + \lambda^* M^{\dagger 4} \quad (2s \bmod 4 = 1, 3) \quad (2.59)$$

となる。同様にして、 s が奇数のとき、スキルミオン数は2の倍数でのみ変化し得るから、

$$\mathcal{L}_M = \lambda M^2 + \lambda^* M^{\dagger 2} \quad (2s \bmod 4 = 2) \quad (2.60)$$

となる。 s が偶数のとき、スキルミオン数は最小単位1で変化できるので、

$$\mathcal{L}_M = \lambda M + \lambda^* M^\dagger \quad (2s \bmod 4 = 0) \quad (2.61)$$

となる。ハミルトニアンがエルミートであることから、 $\mathcal{L}_M^\dagger = \mathcal{L}_M$ が課される。

$U(1)_{\text{top}}$ グローバル変換によって、モノポール演算子は

$$M \rightarrow e^{i\eta} M \quad (2.62)$$

と変換する。モノポールを含まない $SU(2)/U(1)$ 非線形シグマ模型 $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ は変換 (2.62) で不変であり、 $U(1)_{\text{top}}$ トポロジカル対称性を持っている。モノポール項 \mathcal{L}_M の存在によって、トポロジカル対称性が破れる。(2.62) の下での変換性を調べると、 s が半整数のとき、 $e^{i\eta} = \pm 1, \pm i$ に限り (2.59) は不変なので、 $U(1)_{\text{top}}$ の部分群 $(\mathbb{Z}_4)_{\text{top}}$ のトポロジカル対称性を持つ。同様に s が奇数のとき、 $e^{i\eta} = \pm 1$ に限り (2.60) は不変なので、部分群 $(\mathbb{Z}_2)_{\text{top}}$ のトポロジカル対称性を持つ。一方で s が偶数のときは、(2.61) を不変にする $\eta \notin 2\pi\mathbb{Z}$ は存在せず、 $U(1)_{\text{top}}$ トポロジカル対称性は完全に破れる。

以下では格子の対称性変換 ($\vec{r} \mapsto \vec{r}'$) による、モノポール演算子 M の変換則を導出する [36, 69]。トポロジカルチャージ $Q = 1$ のスキルミオンが消滅するトンネル過程に注目し、変換後のモノポール演算子を M' と表す^{*4}。変換前の Berry 位相 $\exp(-S_B)$ は、図 2.2 に示したものをを用いる。

・ $\pi/2$ 回転 (R1)

副格子 $\alpha = 1$ の格子点まわりに $\pi/2$ 回転させる：

$$\mathbf{m}'(x, y, \tau) = \mathbf{m}(-y, x, \tau) \iff \vec{\phi}'(x, y, \tau) = \vec{\phi}(-y, x, \tau). \quad (2.63)$$

この変換でハミルトニアンは不変である。このとき、トポロジカルチャージ Q_α^{xy} は変化しないので、 M' は M に比例する。変換後の格子の中心における因子 $\exp(-S_B)$ は、変換前の因子に $(-i)^{2s}$ を掛けた値になっている。その結果、

$$M'(x') = i^{2s} M(x) \quad (2.64)$$

と変換する。

^{*3} これを確かめるには、付録 D で、 $SU(3)$ スピンの (M_2, σ_2) を、 $SU(2)$ スピンの (M, σ) と読み替える。

^{*4} 詳しい説明は、5.4 節を参照。SU(2) 正方格子と SU(3) 三角格子は、共通の方法で定義してある。

・ x 軸鏡映 (P)

格子点上を通過する x 軸に垂直な任意の直線を対称軸として、 x の符号を反転させる：

$$\mathbf{m}'(x, y, \tau) = \mathbf{m}(-x, y, \tau) \iff \vec{\phi}'(x, y, \tau) = \vec{\phi}(-x, y, \tau). \quad (2.65)$$

この変換でハミルトニアンは不変である。このとき、 $F_{\alpha,xy}$ の符号が変わるので、 $Q_{\alpha}^{xy} \mapsto -Q_{\alpha}^{xy}$ と変換する^{*5}。したがって、 M' は M^{\dagger} に比例する。変換後の格子の中心における因子 $\exp(+S_B)$ は、変換前の因子 $\exp(-S_B)$ の逆数に i^{2s} を掛けた値になっている。その結果、

$$M'(x') = i^{2s} M^{\dagger}(x) \quad (2.66)$$

と変換する。

・ x 軸並進 (T_x)

x 軸の正または負の方向に 1 格子 (長さ a) だけ並進させる^{*6}：

$$\mathbf{m}'(x, y, \tau) = -\mathbf{m}(x, y, \tau) \iff \vec{\phi}'(x, y, \tau) = -i\sigma^2 \vec{\phi}^*(x, y, \tau). \quad (2.67)$$

ただし、 $\sigma = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3)$ は Pauli 行列を表す。この変換でハミルトニアンは不変である。このとき、副格子の添字 $\alpha = 1, 2$ が入れ替わるので、 $Q_{\alpha}^{xy} \mapsto -Q_{\alpha}^{xy}$ と変換する。したがって、 M' は M^{\dagger} に比例する。変換後の格子の中心における因子 $\exp(+S_B)$ は、変換前の因子 $\exp(-S_B)$ の逆数に i^{2s} を掛けた値になっている。その結果、

$$M'(x') = i^{2s} M^{\dagger}(x) \quad (2.68)$$

と変換する。

以上の $\pi/2$ 回転と、 x 軸鏡映または x 軸並進のいずれかが、格子が満たす対称性変換の独立な生成子である^{*7}。他の変換は、これらの 2 種類の変換を組み合わせることで得られる。例えば、 y 軸方向の 1 格子並進 (T_y) は、一連の変換： $R1 \rightarrow T_x \rightarrow R1$ で達成できる。その結果、 T_y の変換則： $M' = (-i)^{2s} M^{\dagger}$ が得られるが、これは (2.68) と同じように定義に従って求めたものと一致しており、矛盾しない。

最低次のモノポール項 (2.59)–(2.61) に関して、これらの変換の下での \mathcal{L}_M の不変性により、係数が $\text{Arg}(\lambda) = 0$ または π と決まる。モノポール項の詳細は、ハミルトニアンの具体形に依存する。

2.3 量子相転移

Heisenberg 模型 (2.1) に Néel 秩序を壊す相互作用を追加すると、Néel 相、VBS 相間の量子相転移が起きる。この節では、量子相転移の性質について述べる。

2.3.1 't Hooft アノマリー

理論が 't Hooft アノマリーを持つとき、低エネルギーの振る舞いが制限される。アノマリーを用いた SU(2) 正方格子反強磁性体の解析は、[41, 42, 69] により実行された。ここでは、有効ラグランジアンを持つグローバル対称性のうち、スピン回転対称性とトポロジカル対称性に注目し、両者の間に 't Hooft アノマリーが存在するかを、以下で確認する。系は絶対零度として、基底状態のみを考える。

まずは、モノポールを含まない CP¹ 非線形シグマ模型：

$$\mathcal{L}_{\text{cont}} = \frac{2}{g_{\text{eff}}} \left| (d + ia)\vec{\phi} \right|^2 \quad (2.69)$$

^{*5} $Q = \frac{1}{2\pi i} \int dx dy F_{xy}$ の $\int dx dy$ は、 dx の符号反転と積分範囲の入れ替えが相殺するので、鏡映不変である。

^{*6}SU(2) 行列による定式化の場合、(2.67) は $\vec{\phi}'_1 = \vec{\phi}_2$, $\vec{\phi}'_2 = \vec{\phi}_1$ と等価である。

^{*7}SU(2) 正方格子の Berry 位相に対しては、 x 軸鏡映と x 軸並進は等価に作用するが、SU(3) 三角格子の場合に両者は異なるので、比較のため掲載した。

の部分を考える．これは，ハミルトニアン^の素朴な連続極限で導出された有効作用 (2.44) を，微分形式で書き直したものである．グローバル対称性として， $\text{PSU}(2) = \text{SU}(2)/\mathbb{Z}_2 = \text{SO}(3)$ スピン回転対称性と， $U(1)_{\text{top}}$ トポロジカル対称性を持っている．

始めに， $\text{PSU}(2)$ 対称性をゲージ化する [70]．そのために， $U(2)$ 1-form ゲージ場 A と， $U(1)$ 2-form ゲージ場 B を，背景ゲージ場として導入する． A と B は

$$2B = d(\text{tr}(A)) \quad (2.70)$$

の関係を満たす．背景ゲージ場 A を場 $\vec{\phi}$ と minimal coupling させることにより， $\text{PSU}(2)$ 対称性がゲージ化された理論が

$$\mathcal{L}_1 = \frac{2}{g_{\text{eff}}} \left| (d + ia + iA)\vec{\phi} \right|^2 \quad (2.71)$$

と与えられる．(2.70), (2.71) は，次の $U(1)_\xi$ 1-form ゲージ変換で不変である：

$$a \mapsto a - \xi, \quad B \mapsto B + d\xi, \quad A \mapsto A + \xi I_2. \quad (2.72)$$

ξ は B の非物理的自由度由来した， $U(1)$ 1-form ゲージ場である． $U(1)_\xi$ ゲージ不変な field strength は，

$$F = da + B \quad (2.73)$$

で与えられる．

続いて，(2.71) が持つトポロジカル $U(1)_{\text{top}}$ グローバル対称性をゲージ化する．そのために，新たな背景ゲージ場である， $U(1)$ 1-form ゲージ場 A^{top} を導入する．トポロジカルカレントを，背景ゲージ場 A^{top} と結合させることにより， $\text{PSU}(2)$ 対称性と $U(1)_{\text{top}}$ 対称性をゲージ化した理論が

$$\mathcal{L}_2 = \mathcal{L}_1 + A^{\text{top}} \wedge \frac{i}{2\pi} da \quad (2.74)$$

と与えられる．

$\exp(-\int \mathcal{L}_2)$ は，次の $U(1)_\eta$ 0-form ゲージ変換で不変である：

$$A^{\text{top}} \mapsto A^{\text{top}} - d\eta. \quad (2.75)$$

しかし $U(1)_B$ ゲージ変換 (2.72) の下で， \mathcal{L}_2 は

$$\mathcal{L}_2 \mapsto \mathcal{L}_1 + A^{\text{top}} \wedge \frac{i}{2\pi} (da - d\xi) \quad (2.76)$$

と変換する．このことは， $\text{PSU}(3)$ 対称性と $U(1)_{\text{top}}$ 対称性を同時にゲージ化するとゲージアノマリーが生じることを示唆する．もし相殺項を加えて $\mathcal{L}_3 = \mathcal{L}_2 + A^{\text{top}} \wedge \frac{i}{2\pi} B$ とすれば， \mathcal{L}_3 は $U(1)_B$ ゲージ変換 (2.72) で不変にすることができる．しかし B のフラックスは 2π 量子化されていないので，今度は $\exp(-\int \mathcal{L}_3)$ が $U(1)_{\text{top}}$ ゲージ変換 (2.75) で不変ではない．このように，ゲージアノマリーは相殺項で取り除くことはできない． $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ は $\text{PSU}(2) \times U(1)_{\text{top}}$ mixed 't Hooft アノマリーを持つ．

次に，モノポール項 \mathcal{L}_M を加えた理論の 't Hooft アノマリーを調べる．2.2.2 節で述べたように，モノポールを含むラグランジアン $\mathcal{L}_{\text{lat}} = \mathcal{L}_{\text{cont}} + \mathcal{L}_M$ で記述される格子の有効理論は， $U(1)_{\text{top}}$ 対称性を破る．Berry 位相の destructive interference の結果， \mathcal{L}_M の形には，スピン表現 $2s \bmod 4$ に依存した違いが現れる． s が半整数のときは，部分群 $(\mathbb{Z}_4)_{\text{top}} \subset U(1)_{\text{top}}$ の対称性が残る． s が奇数のとき，部分群 $(\mathbb{Z}_2)_{\text{top}} \subset U(1)_{\text{top}}$ の対称性が残る． s が偶数のとき， $U(1)_{\text{top}}$ は完全に破れる．

s が半整数のとき， $\text{PSU}(2)$ スピン回転対称性と $(\mathbb{Z}_4)_{\text{top}}$ トポロジカル対称性の間に 't Hooft アノマリーを持つことを，以下で確認する．初めに， \mathcal{L}_{lat} が持つ $\text{PSU}(2)$ グローバル対称性がゲージ化された理論は，(2.71) と同様にして，

$$\mathcal{L}'_1 = \frac{2}{g_{\text{eff}}} \left| (d + ia + iA)\vec{\phi} \right|^2 + \mathcal{L}_M \quad (2.77)$$

である．次に， $(\mathbb{Z}_4)_{\text{top}}$ がゲージ化された理論は，

$$\mathcal{L}'_2 = \mathcal{L}'_1 + A^{\text{top}} \wedge \frac{i}{2\pi} da, \quad (2.78)$$

$$4A^{\text{top}} = dG \quad (2.79)$$

と与えられる．ここで， $U(1)$ 0-form 背景ゲージ場 G を導入した． $\exp(-\int \mathcal{L}'_2)$ は， $(\mathbb{Z}_4)_{\text{top}}$ 0-form ゲージ変換 (2.75) の下で不変である．しかしながら， \mathcal{L}'_2 は $U(1)_B$ ゲージ変換 (2.72) で不変にはならない．ここでも， $PSU(2)$ ゲージ対称性と $(\mathbb{Z}_4)_{\text{top}}$ ゲージ対称性を両立させる相殺項は存在しない．したがって， \mathcal{L}_{lat} は $PSU(2) \times (\mathbb{Z}_4)_{\text{top}}$ mixed 't Hooft アノマリーを持つ． s が半整数のとき，低エネルギーの振る舞いはアノマリーマッチングにより，以下のいずれかを最低1つ含んでいなければならない：

- $PSU(2)$ スピン回転対称性の自発的対称性の破れ，
- $(\mathbb{Z}_4)_{\text{top}}$ トポロジカル対称性の自発的対称性の破れ，
- 共形的，
- トポロジカル秩序．

trivially gapped 相とは，基底状態が縮退しておらず，スピン回転対称性とトポロジカル対称性の両方を保ち，励起がエネルギーギャップを持つ相を指す． s が半整数なら 't Hooft アノマリーが存在するために，trivially gapped 相は実現できない． s が奇数のときも同様にして， $PSU(2) \times (\mathbb{Z}_2)_{\text{top}}$ mixed 't Hooft アノマリーが存在し，trivially gapped 相が禁止される．

s が偶数のときには，有効理論はトポロジカル対称性を始めから持たない．したがって， \mathcal{L}_{lat} に 't Hooft アノマリーが存在しないので，上記のアノマリーマッチングの制約を受けず，trivially gapped 相が許される．

Néel 相は，スピン秩序変数 $\langle \vec{\phi} \rangle \neq 0$ (もしくは $\langle \mathbf{m} \rangle \neq 0$ でも等価) で特徴付けられるので， $PSU(2)$ スピン回転対称性が自発的に破れた相と解釈される．一方で，トポロジカル対称性が自発的に破れた相とは，モノポールが凝縮した相であり， $\langle M \rangle \neq 0$ で特徴付けられる．この相は，隣接する格子点がスピン一重項を作った VBS 相に対応する．モノポールを含む理論において， $(\mathbb{Z}_4)_{\text{top}}$ ， $(\mathbb{Z}_2)_{\text{top}}$ は離散的対称性であり，基底状態は対称性変換で移り変わる状態どうしが，それぞれ4重，2重に縮退している．2.4 節で述べるように，双対理論を考えると，モノポール凝縮との関係がより明白になる．

本論文では詳しく言及しないが，残りの可能性についても説明する．共形的な理論では，すべての対称性を保ち，励起は gapless となる．理論は繰り込み群の固定点であり，物理的には Néel-VBS 2次相転移点と対応する．トポロジカル秩序とは，いわゆるスピン液体と対応する．近年は様々なセットアップの下で，スピン液体の理論研究や数値計算が進められている [26, 71]．

アノマリーを持たない部分群への自発的対称性の破れによって，アノマリーマッチング条件を満足するシナリオを仮定すると，Néel-VBS 相の直接相転移を，自然に説明することができる． s が半整数と奇数のとき，Néel 相と VBS 相の中間に trivially gapped 相が実現することは禁止されているので，直接相転移か，Néel 秩序と VBS 秩序が混在した相を経由する可能性がある．しかし Néel 秩序が実現しているとき，スキルミオンの生成にはエネルギーが必要であるため，モノポールの低エネルギーの寄与は抑制されている．したがって，後者の可能性は起こらないだろうと考えられている． s が偶数のときに trivially gapped 相の出現が許されることは，格子の対称性を破らない VBS 状態を構成できることを反映している (図 2.6(c) を参照)．

2.3.2 Néel-VBS 相転移の有効理論

2.2 節までは，状態が Néel 秩序に近いことを仮定し， $PSU(2)$ スピン回転対称性が破れた Néel 状態からの低エネルギー励起を，場の理論で定式化した．しかしここでは， $PSU(2)$ 対称性の自発的破れと回復をパラメータで連続的に動かせるモデルで，Néel-VBS 相間の直接相転移を説明する．

Landau, Ginzburg による古典的な相転移の理論では、有効ラグランジアンは各相を特徴付ける秩序変数を用いて、対称性を満たす項を書き下すことで得られる。これに従うと、Néel 秩序を表す staggered 磁化ベクトル \mathbf{m} と、適当な VBS 秩序変数を用意して有効ラグランジアンを構成すればよいと思われる。しかし、秩序変数としてスピノン場 $\vec{\phi}$ を採用すると、Néel 相・VBS 相ともに矛盾がなく、より自然な理論を得られることが明らかにされた [35, 36].

スピノン場の規格化条件 ($|\vec{\phi}| = 1$) を外して、系が持つ対称性 (ゲージ対称性, スピン回転対称性, 格子の回転・鏡映・並進対称性) を満たす理論を $\vec{\phi}$ で構成することにより, 2 次相転移を記述する有効模型は

$$\mathcal{L} = \left| (d + ia)\vec{\phi} \right|^2 + \frac{1}{2e^2} |da|^2 + m^2 |\vec{\phi}|^2 + g_1 |\vec{\phi}|^4 + \mathcal{L}_M \quad (2.80)$$

で与えられる [41, 42]. $\int \mathcal{L}$ が相転移点近傍の自由エネルギーを表す. モノポールを含まない (2.80) は abelian Higgs 模型と呼ばれており, スピノン場 $\vec{\phi}$ にゲージ場 a_μ が結合している. エネルギーに下限が存在するために, 係数 $g_1 > 0$ とする.

$m^2 < 0$ のとき, エネルギーを最小にするのは $|\vec{\phi}| = \sqrt{|m|^2/2g_1}$ の円周上なので, 基底状態は $\langle \vec{\phi} \rangle \neq 0$ となる. これは, スピン回転対称性が自発的に破れた Néel 相を表す. $|\vec{\phi}| = 1$ となるように規格化を調節すれば, 低エネルギー励起を記述する理論は, CP^1 非線形シグマ模型 (2.44) が再現される. 基底状態近傍の $\vec{\phi}$ の励起を考えると, $|\vec{\phi}|$ を一定に保つ 2 自由度の成分が, massless 南部-Goldstone (NG) モードに該当する. この結果は, 有効ラグランジアン (2.33) に $\mathbf{m} \in S^2$ の質量項が存在しておらず, 独立な 2 個の massless モードで表されていることと合致している. Higgs 機構により, $\vec{\phi}$ の残り 1 成分とゲージ場 a_μ は massive であるため, これらは低エネルギーの現象に寄与しない. また, スキルミオンの生成には質量に相当するエネルギーが必要なので, モノポール項 \mathcal{L}_M の効果も Néel 相では抑制されている ((6.22) を参照).

$m^2 > 0$ のときを考えると, 基底状態は $\vec{\phi} = 0$ であり, スピン回転対称性が回復する. スピノン場 $\vec{\phi}$ は massive, ゲージ場 a_μ は massless である. $|m| \gg e^2$ であれば (2.80) の第 2 項が主要となり, 基底状態からの励起はモノポールを伴う pure Yang-Mills 理論で記述される:

$$\mathcal{L} \simeq \frac{1}{2e^2} |da|^2 + \mathcal{L}_M. \quad (2.81)$$

スピン回転対称性が回復した相では, モノポールの効果を見捨てることはできない. 2.4 節で述べるモノポールガスの解析によると, (2.81) で記述される理論が, VBS 相に対応していると解釈できる.

2.3.3 Deconfined Criticality

反強磁性 Heisenberg 模型 (2.1) は, すべてのスピン表現 s に対して, Néel 相が基底状態として現れることが知られている [29–31]. Néel 秩序を壊す短距離相互作用を, ハミルトニアンに追加することを考える. $g_{\text{eff}} \rightarrow 0$ の極限では, Heisenberg 模型に帰着するので, Néel 相が実現する. $g_{\text{eff}} \rightarrow \infty$ の極限で VBS 相が実現するように選ぶと, 中間的な値の $g_{\text{eff}} = g_c$ にて, Néel 相と VBS 相の量子相転移*8 が起こる. 反強磁性体の Néel-VBS 相間の量子相転移は, 古典的な相転移で説明できない相転移が可能であることが指摘された. Senthil et al. [35, 36] によって提案された量子相転移の理論は deconfined criticality と呼ばれており, 数値計算による検証が盛んに行われてきた. 数値計算の進展は 2.5 節に後述することとして, この節では, deconfined criticality の理論面の概要を記す.

Néel 相ではスピン回転対称性が破れており, $\langle \vec{\phi} \rangle \neq 0$ (あるいは $\langle \mathbf{m} \rangle \neq 0$) で特徴付けられる. 一方で VBS 相では, 格子が持つ対称性, 特に $\pi/2$ 回転対称性が破れており, 特定の方向について $\langle \hat{S}(i) \cdot \hat{S}(j) \rangle \neq 0$ を満たす. この例のように, 異なる秩序変数で記述される対称性を別々に破るとき, Landau, Ginzburg による古典的な相転移の理論は, 2 相間が 1 次相転移で隔てられることを予測する. 連続的な 2 次 (以上の) 相転移であれば, 2 種類の対称性が両方とも回復した相か, 両方とも破れた相を途中で挟む相図が自然であり, 理論のパラメータを fine tuning しない限り直接 2 次相転移することはない. しかしながら, Néel 相の

*8 本論文では, 絶対零度の系に議論を限定する. 理論に含まれるパラメータを変えることで起きる量子論的な相転移を, 温度を変化させる古典的な相転移と区別して, 量子相転移と呼ぶ. 有限温度における反強磁性体の研究も, 多数報告されている [67].

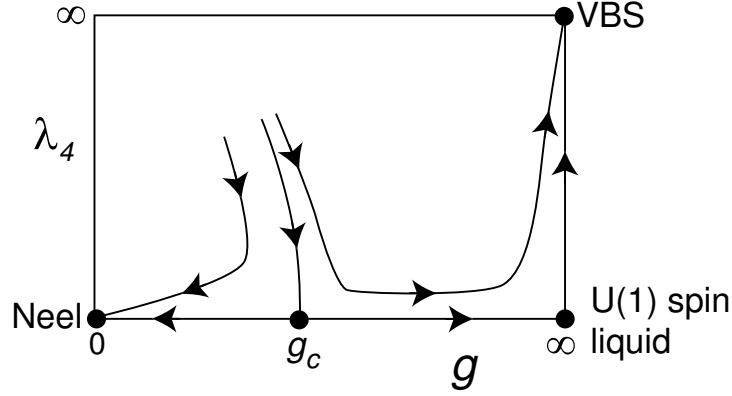


図 2.3: Néel-VBS 相転移を説明する繰り込み群変換のフロー図. $g = g_c$ 固定点で, モノポール項 λ_4 が dangerously irrelevant であることを表している. 文献 [73] より引用.

秩序変数が作るモノポールの凝縮が VBS 秩序を引き起こすことから, Néel 相と VBS 相は直接 2 次相転移が可能ではないかと考えられるようになった [72].

Deconfined criticality の核心は, $g_{\text{eff}} = g_c$ の臨界点において, モノポール項が dangerously irrelevant という事である. すなわち, 臨界点で λ は 0 に繰り込まれるが, $\lambda \neq 0$ の揺らぎに対して不安定という性質を持つ. モノポール項を含む CP^1 非線形シグマ模型の, 提案された繰り込み群変換のフロー図を, 図 2.3 に示す. 図の横軸 g は (2.69) の係数 g_{eff} に, 縦軸 λ_4 は (2.59) の係数 λ に対応する. Néel 相においては, 低エネルギー過程におけるモノポールの寄与は抑制されている. Néel 相から g を大きくすると, λ_4 が irrelevant であるため, $(g, \lambda_4) = (g_c, 0)$ の固定点に流れる繰り込み群フローを横切るところで, 2 次相転移が実現する. そこではモノポールが存在しないので, $s = 1/2$ スピンが自由になる (deconfine). したがって, この臨界点は正確には, Néel 秩序と U(1) スピン液体の相転移点を表している. ところが臨界点から g を僅かに大きくすると, $\lambda_4 \neq 0$ の理論は $\lambda_4 = \infty$ の VBS 固定点へと流れる. その結果, Néel-VBS 相の直接 2 次相転移が可能となる. VBS 相では $s = 1/2$ スピンはモノポールによって $s = 1$ の励起に閉じ込められており, $s = 1/2$ 励起は観測されない.

$g = g_c$ 固定点で λ_4 が irrelevant であることは, 厳密に証明されていない. CP^{N-1} 非線形シグマ模型 ($s = 1/2$) について, $N = 1, \infty$ で λ_4 が irrelevant であること, そして容易面異方性を持つスピンの CP^1 非線形シグマ模型 ($s = 1/2$) について λ_4 が irrelevant であることから, 等方的な CP^1 非線形シグマ模型 (2.44) も λ_4 が irrelevant であると推測された [35, 36]. 現在では, 後の数値計算 [37] の結果から, deconfined criticality は正しいと考えられている.

モノポールの摂動が臨界点で irrelevant であることは, destructive interference の帰結である. チャージ $|Q| = n$ のモノポール項 λ_n のスケーリング次元は, n が大きくなるほど増加し, irrelevant の強さが増す. $s \bmod 4 = 1, 3$ のとき, 臨界理論に含むことが許される最低次のモノポール項 λ_4 は, 上述の理由で irrelevant だとされている. $s \bmod 4 = 0$ のとき, λ_1 は relevant と考えられているため, 相転移はモノポールを伴う Landau, Ginzburg 型の臨界理論で記述される. このとき, Néel 相と VBS 相は 1 次相転移で隔てられる. $s \bmod 4 = 2$ のとき, λ_2 がもし irrelevant であれば deconfined criticality が成立するが, 確かな証拠は見つかっていない [36].

Deconfined criticality が成立するとき, 相転移点近傍の VBS 相側では, 異なる強さで発散する 2 種類の長さスケールが存在する [36, 74]. 1 つは ξ であり, $g = g_c$ 固定点から U(1) スピン液体固定点に移り変わるスケールを表す. もう 1 つは ξ_{VBS} であり, U(1) スピン液体固定点から VBS 固定点に移り変わるスケールを表す. $\xi \ll \xi_{\text{VBS}}$ の関係にあつて, $g \rightarrow g_c + 0$ に近づくにつれて両方とも発散する. 理論の長さスケール R が $\xi_{\text{VBS}} < R$ のときには \mathbb{Z}_4 対称の VBS 状態が実現し, $\xi < R < \xi_{\text{VBS}}$ のときは VBS 秩序変数の局所的な値は U(1) 対称の連続値を持つ [36, 74].

ξ_{VBS} と ξ の物理的な解釈を説明する. 弱く乱れた VBS 状態は, 図 2.4 のように, 異なる VBS 秩序を持つ

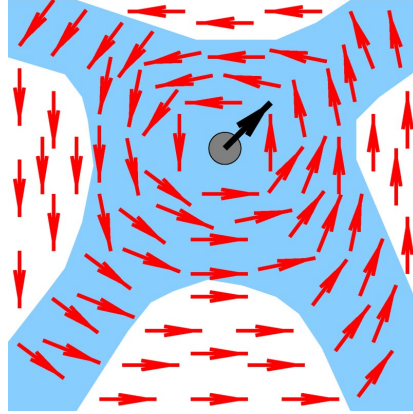


図 2.4: $s = 1/2$ VBS 相における \mathbb{Z}_4 渦. 矢印は VBS 秩序の向きを表し, 青い領域が異なる VBS 基底状態を隔てるドメインウォールである. 中心付近の灰色の領域には, VBS 秩序を持たない $s = 1/2$ スピンが存在する. ξ_{VBS} と ξ はそれぞれ, 青色と灰色の領域の幅を特徴付ける. 文献 [74] より引用.

領域が部分的に出現する. 異なる VBS 状態は, ドメインウォールと呼ばれる領域で隔てられている. ξ_{VBS} はドメインウォールの厚さを表す. 4 種類の VBS 状態の境界が集まる \mathbb{Z}_4 渦の中心には, スピン一重項を形成しておらず, VBS 秩序を持たない $s = 1/2$ スピンが存在する領域がある. ξ は $s = 1/2$ スピンが存在する渦中心の大きさを表す. g が十分大きい VBS 相においては, 渦の形成にはエネルギーが必要であるため, $s = 1/2$ スピンが現れる励起の寄与が抑制されている. g を g_c に近づけると, ドメインウォールが広がるのに遅れて, $s = 1/2$ スピンが全平面を覆い尽くす. スピノン場 $\vec{\phi}$ は VBS 側で, 臨界点近傍にのみ現れる $s = 1/2$ スピン励起を記述すると解釈される [74].

2.4 VBS 相

この節では, Néel 状態と並んで自然な基底状態の候補である, VBS 状態の性質について述べる. モノポール演算子と格子の対称性との関係を明らかにし, VBS 相をモノポールが凝縮した相に対応付けられることを説明する.

2.4.1 波動関数

反強磁性的なハミルトニアンで記述されるスピン系に対しては, Néel 状態のほかに, valence bond solid (VBS) 状態と呼ばれるスピン配位もまた, 比較的小さいエネルギー期待値を持つ. $s = 1/2$ スピン系の VBS 秩序では, 隣接する格子点が空間的に固定されたスピン一重項を形成することは, 1 章で既に述べた. この節では, 正方格子上の $SU(2)$ スピン系について, VBS 状態の波動関数を定式化する.

$s = 1/2$ の場合, 2 個の格子点 (i, j) のスピンを反対称化することにより, valence bond (VB) と呼ばれるスピン一重項が作られる. 系が N 個の格子点から成るとき, すべての格子点を 1 回ずつ使用して $N/2$ 個のペア $(i_1, j_1), \dots, (i_{N/2}, j_{N/2})$ を組み, それぞれが VB を作った状態が, VBS 状態である:

$$|\text{VBS}\rangle = \bigotimes_{n=1}^{N/2} |(i_n, j_n)\rangle = \bigotimes_{n=1}^{N/2} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_{i_n} |\downarrow\rangle_{j_n} - |\downarrow\rangle_{i_n} |\uparrow\rangle_{j_n} \right). \quad (2.82)$$

どのようにペアを組むとエネルギーが小さくなるかは, ハミルトニアンの具体形に依存する. (2.82) で表される VBS 状態は, 正方格子が持つ回転・鏡映・並進対称性のうち, 少なくともいずれかが破れる. ハミルトニアンが格子の対称性を持つとき, 対称性変換で互いに移り変わる VBS 状態は縮退している. VB を最近接格子点に限ると, 最も縮退数が小さいスピン配位は, 図 2.5(a) の columnar VBS (cVBS) 状態と,

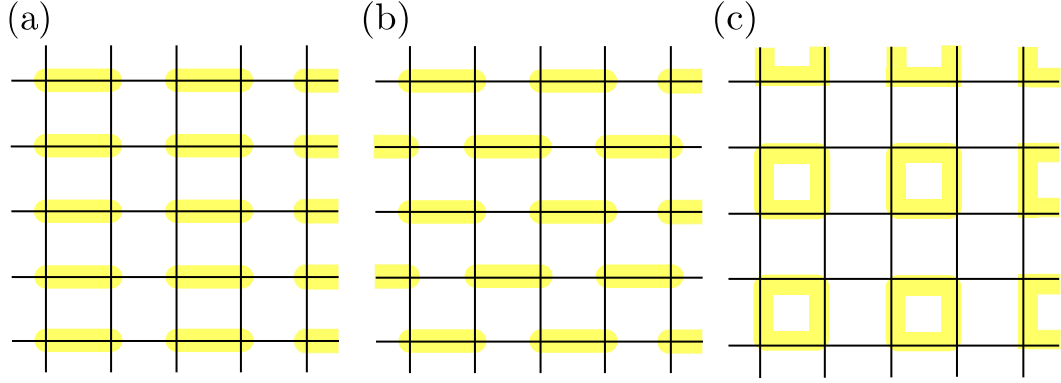


図 2.5: $s = 1/2$ スピン系で構成される, (a) cVBS 状態, (b) sVBS 状態, (c) pVBS 状態. 格子の対称性が破れた結果, それぞれ 4 重縮退している.

図 2.5(b) の staggered VBS (sVBS) 状態である [75, 76]. 黄色の影は, 2 個の格子点がスピン一重項 (VB) を形成していることを意味する. いずれも 4 重縮退で, 互いに $\pi/2$ 回転で移り変わる. cVBS, sVBS 状態に対して, スピン相関 $\hat{S}(i) \cdot \hat{S}(j)$ の期待値を計算すると, 格子点 i, j が同一の VB 上にあるとき $-3/4$, 異なる VB 上にあるとき $-1/8$ と計算される.

あるいは, VB の線形結合を考えることにより, 図 2.5(c) のような plaquette VBS (pVBS) 状態と呼ばれる状態を構成できる [77]. プラケットの頂点を反時計回りに i, j, k, l とすると, 波動関数は

$$|\text{VBS}\rangle = \bigotimes_{n=1}^{N/4} \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|(i_n, j_n)\rangle \otimes |(k_n, l_n)\rangle + |(j_n, k_n)\rangle \otimes |(l_n, i_n)\rangle \right) \quad (2.83)$$

で表される. スピン相関の期待値は, 格子点 i, j が同一のプラケット内で最近接するとき $-1/2$, 同一のプラケット内の対角線方向のとき 0, 異なるプラケット上にあるとき $-1/8$ である. 図 2.5(c) はスピン一重項の有無ではなく, スピン相関の違いを意味すると解釈される. pVBS 状態も 4 重縮退している.

$s = 1$ の場合, 最近接相互作用で自然な, 2 重縮退の VBS 状態を構成することができる. 図 2.6(a) の cVBS 状態は, y 軸方向に $s = 1$ スピン鎖の VBS 状態が並んだものである [8]. $s = 1$ スピン鎖の VBS 状態は, 以下の方法で作ることができる [78]. 格子点 i に置かれた 1 個の $s = 1$ スピンを, 2 個の $s = 1/2$ スピン (iL, iR) に置き換えて, 隣接した $s = 1/2$ スピンどうしがスピン一重項 (VB) を形成する:

$$|\text{preVBS}\rangle = \bigotimes_i \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_{iR} |\downarrow\rangle_{(i+1)L} - |\downarrow\rangle_{iR} |\uparrow\rangle_{(i+1)L} \right). \quad (2.84)$$

つまり, 1 個の $s = 1$ スピンは, 2 個の結合手を保有している. その後, 2 個の $s = 1/2$ スピン (iL, iR) を $s = 1$ 表現に合成することにより, $s = 1$ スピン系の配位が得られる. i 番目の格子点の合成は, $s = 1$ 空間への射影演算子 $\widehat{\text{sym}}_i$ を用いる:

$$\widehat{\text{sym}}_i = \hat{S}(iL) \cdot \hat{S}(iR) + \frac{3}{4}. \quad (2.85)$$

任意の状態 $|\psi\rangle_{iL} |\phi\rangle_{iR}$ に $\widehat{\text{sym}}_i$ が作用すると, $|\psi\rangle$ と $|\phi\rangle$ の対称化が行われる. (2.84) を対称化することにより, $s = 1$ スピン鎖の VBS 状態は

$$|\text{VBS}\rangle = \left(\prod_i \widehat{\text{sym}}_i \right) |\text{preVBS}\rangle \quad (2.86)$$

で与えられる. また, $s = 1/2$ と同じく, 図 2.6(b) の pVBS 状態を考えることもできる. いずれの VBS 状態も, 回転対称性が破れた 2 重縮退をしている.

$s = 3/2$ の場合も $s = 1$ と同様に, 1 つの格子点を 3 個の $s = 1/2$ スピンの完全対称な合成とみなすことで, VBS 状態が得られる. $s = 1/2$ の図 2.5 を, $s = 1/2$ と符号を反転させたスピン相関と読み替えれば, $s = 3/2$ の VBS 状態を表す. したがって, 格子の対称性の性質は, $s = 1/2$ の VBS 状態と本質的に等しい.

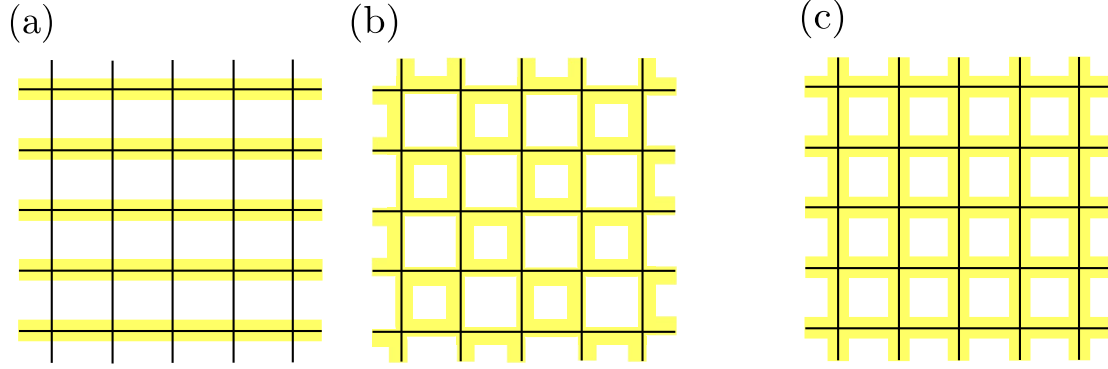


図 2.6: $s = 1$ スピン系の (a) cVBS 状態, (b) pVBS 状態と, $s = 2$ スピン系の (c) VBS 状態. (a), (b) の状態は, それぞれ 2 重縮退している. (c) の状態は格子の対称性を破っておらず, 縮退していない.

$s = 2$ の場合, 4 個の $s = 1/2$ スピンの合成を行う. 正方格子の 1 点は 4 本の辺に共有されるので, 図 2.6(c) のように, 格子の対称性を保つ VBS 状態を構成することが可能である.

最後に, $s > 2$ の場合を述べる. 格子の対称性を持ったハミルトニアンを考える限り, 対称性を保つ図 2.6(c) の配位は, $s = 2$ VBS 状態の中で最もエネルギーが低い. $s > 2$ スピン系の VBS 基底状態は, いくつかの $s = 2$ VBS 状態と, 端数の $s = 0, 1/2, 1, 3/2$ スピンの完全対称表現への合成として記述される. したがって, VBS 状態の対称性に関する性質は, $2s \bmod 4$ で周期的に変化する [8].

2.4.2 モノポールガス

2.3.1 節で予告した通り, モノポールが凝縮した相が反強磁性体の VBS 相に対応することを示す. 以下では, Polyakov [79] によるモノポールガスの近似を適用することで, モノポールが凝縮した相の性質を調べる. 有効ポテンシャルの半古典的な解析からは, VBS 基底状態の縮退数を導くことができる [9, 10, 80, 81].

付録 D の議論を適用すると, U(1) ゲージ場 a に双対なコンパクトスカラー場 σ を変数とする, 等価な理論が得られる. (2.81) は,

$$\mathcal{L}^{\text{dual}} = \frac{e^2}{8\pi^2} |d\sigma|^2 \quad (2.87)$$

と書き換えられる. これにより, モノポールの効果を含まない分配関数は

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\sigma e^{-\int \mathcal{L}^{\text{dual}}} = \int \mathcal{D}\sigma \exp \left[-\frac{e^2}{8\pi^2} \int |d\sigma|^2 \right] \quad (2.88)$$

となる.

前節で指摘した通り, ゲージ場 a のスキルミオン数を $+1$ (-1) だけ増加 (減少) させるには, モノポール演算子 M^\dagger (M) の双対 $e^{+i\sigma}$ ($e^{-i\sigma}$) を挿入すればよい. あらゆる時空点にチャージ ± 1 のモノポールが存在する経路を足し上げることで, モノポールの分配関数を構成する.*⁹希薄なモノポールガスの近似を仮定し, モノポールどうしの相互作用を無視すると,

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n, \bar{n}=0}^{\infty} \frac{1}{n! \bar{n}!} \int \mathcal{D}\sigma e^{-\int \mathcal{L}^{\text{dual}}} \left(\int d^3 X e^{-S_0(X) - S_B(X)} e^{-i\sigma(X)} \right)^n \left(\int d^3 \bar{X} e^{-S_0(\bar{X}) + S_B(\bar{X})} e^{+i\sigma(\bar{X})} \right)^{\bar{n}} \\ &= \int \mathcal{D}\sigma \exp \left[-\int d^3 x \left\{ \frac{e^2}{8\pi^2} (\partial_\mu \sigma(x))^2 - e^{-S_0(x)} \left(e^{-S_B(x)} e^{-i\sigma(x)} + e^{+S_B(x)} e^{+i\sigma(x)} \right) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (2.89)$$

ここで, $e^{-S_0(x)}$ (≥ 0) はモノポールをゲージ場に追加するために必要となる, 運動項の余分な寄与を表す. 運動項は時間 (τ) 反転不変なので, チャージが等しいスキルミオンの生成と消滅に対して, 共通の

*⁹ $\tau = 0, \beta$ の周期境界条件のために, モノポール演算子 M の個数 n と, M^\dagger の個数 \bar{n} は等しい. (2.89) の σ について時空成分の Fourier 展開を行い, 運動量 $k_\mu = 0$ 成分を考えると, $n = \bar{n}$ の項のみが分配関数 Z に寄与することが分かる.

値を持つ. $\exp(-S_B(x))$ は, $Q = 1$ のスキルミオンが時空点 x^μ で消滅するときの Berry 位相であり, 図 2.2 の因子 $\xi(x)^{2s}$ と対応する. スキルミオン生成時の因子は, Berry 位相の計算規則 (2.54) により, $[\exp(-S_B(x))]^* = \exp(+S_B(x))$ と表してある.

モノポールが格子の中心にのみ存在すると仮定すると, 任意の s に対して, 干渉で打ち消されないトンネル過程は $\exp(\pm S_B) = 1$ が成立している. また, 格子の対称性により, $S_0(x)$ はモノポールの座標 x^μ に依らない共通の値となる. このとき (2.89) のモノポールの部分は, (2.57) により,

$$-e^{-S_0} (e^{-i\sigma(x)} + e^{+i\sigma(x)}) \longleftrightarrow \lambda M(x) + \lambda^* M^\dagger(x) \quad (2.90)$$

と対応している. 右辺は, (2.61) に示した, $2s \bmod 4 = 0$ のときのモノポール項 \mathcal{L}_M と等しい. Heisenberg 模型のハミルトニアンから導かれるモノポール凝縮相は, 格子の対称性変換で不変なモノポール項のうち, $\text{Arg}(\lambda) = \pi$ の理論に相当する. 分配関数の状態和には, 高次のチャージを持つモノポールの寄与も含まれているので, 本来のモノポール項の表式は

$$\mathcal{L}_M = \sum_{n=1}^{\infty} [\lambda_n M^n(x) + \lambda_n^* M^{\dagger n}(x)] \quad (2s \bmod 4 = 0) \quad (2.91)$$

で与えられる [36]. λ_n はモノポールのフガシティーと呼ばれる. $|e^{-S_0}|$ の最低次を残す近似の下で, $n = 1$ で打ち切ったものが (2.61) であり, これが「最低次の摂動」の意味である. 最低次のみ近似が許されるかどうかは, ハミルトニアンの具体形に依存する. $2s \bmod 4 \neq 0$ の場合には, 2.2.2 節で述べた destructive interference のために, 2 または 4 の倍数のチャージを持ったモノポールの状態和に変更する.

(2.89) の $\{ \}$ 内を最小にする配位が, 基底状態 (真空) として実現される. 運動項の最小値は, $\sigma(x)$ が時空点 x^μ に依らない一定値のときに 0 を取る. 残りのモノポールを表す部分は, 場 $\sigma(x)$ の微分を含まないポテンシャル項である. 以降はより一般に, 対称性から許される $\text{Arg}(\lambda) = 0, \pi$ の両方の可能性を考えることにする [77]. 基底状態を求めることは, 以下のポテンシャルエネルギー V を最小にする真空期待値 $\sigma = \langle \sigma(x) \rangle$ を求める問題に帰着する:

$$V(\sigma) = \lambda e^{-ic\sigma} + \lambda^* e^{+ic\sigma} \propto \cos(c\sigma - \text{Arg}(\lambda)). \quad (2.92)$$

ただし, $2s \bmod 4 = 0, 1, 2, 3$ のとき, $c = 4, 2, 4, 1$ を代入する. $\sigma(x)$ は 2π 周期で同一視されたコンパクトスカラー場なので, $0 \leq \sigma < 2\pi$ で表示する. V が最小となるのは, $\text{Arg}(\lambda) = 0$ のとき

$$\sigma = \begin{cases} \frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4} & (2s \bmod 4 = 1, 3) \\ \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2} & (2s \bmod 4 = 2) \\ \pi & (2s \bmod 4 = 0) \end{cases}, \quad (2.93)$$

そして $\text{Arg}(\lambda) = \pi$ のとき

$$\sigma = \begin{cases} 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2} & (2s \bmod 4 = 1, 3) \\ 0, \pi & (2s \bmod 4 = 2) \\ 0 & (2s \bmod 4 = 0) \end{cases} \quad (2.94)$$

だと分かる. 最小値を取る σ の数は, 基底状態の縮退数に等しい. いずれの場合にも, 上から順に 4 重, 2 重, 1 重縮退していることが示唆される. この結果は, 図 2.5, 2.6 に示した, 自然な VBS 状態の縮退数と一致している.

2.4.3 VBS 状態との対応関係

$2s \bmod 4 \neq 0$ の VBS 状態は, 格子の対称性が破れている. 格子の対称性変換の下で, モノポール演算子が非自明に変換することは, モノポールが格子の対称性の破れと関係していることを示唆する. モノポール演算子の変換則を考えることにより, 格子の対称性の破れを, 自然な形で説明できる [36, 41, 42, 69]. $s = 1/2$

の場合に、スピン一重項の射影演算子で構成される VBS 秩序変数は、臨界理論でモノポール演算子と同一視されることを見る。スキルミオンの生成消滅演算子であるモノポール演算子 $M^{(\dagger)}$ と、格子の対称性の破れを記述する VBS 秩序変数 ψ は、臨界理論において互いに比例する [36, 69].

$s = 1/2$ のとき、図 2.5 のように、VBS 相は格子の対称性のいくつかを破る。各格子点がスピン一重項を形成する向きを記述する物理量を導入することで、縮退した VBS 状態が区別される。ここでは [82] に基づき、格子点 $\vec{r} = (x, y)$ 上の VBS 秩序変数 ψ を、

$$\psi(\vec{r}) = (-1)^{\frac{x}{a}} e^{i0} P(\vec{r}, \vec{r} + \hat{x}) + (-1)^{\frac{y}{a}} e^{i\frac{\pi}{2}} P(\vec{r}, \vec{r} + \hat{y}) + (-1)^{\frac{x}{a}} e^{i\pi} P(\vec{r}, \vec{r} - \hat{x}) + (-1)^{\frac{y}{a}} e^{i\frac{3\pi}{2}} P(\vec{r}, \vec{r} - \hat{y}) \quad (2.95)$$

と定義する。ただし、 $P(\vec{r}, \vec{r}')$ は、格子点 \vec{r}, \vec{r}' の合成スピンを一重項に射影する演算子であり、

$$P(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4} - \hat{\mathbf{S}}(\vec{r}) \cdot \hat{\mathbf{S}}(\vec{r}') \quad (2.96)$$

で与えられる。 \hat{x}, \hat{y} は x, y 軸方向の単位格子ベクトル (大きさ a) である。定義 (2.95) の直感的な理解は、 $\arg \psi(\vec{r})$ は格子点 $\vec{r} \in (2\mathbb{Z}a, 2\mathbb{Z}a)$ から見て、どの角度に一重項が形成しているかを意味する。符号を交互に反転して $\psi(\vec{r})$ を定義したことにより、図 2.5(a), (c) に示した VBS 状態の例は、一様な期待値 $\langle \psi(\vec{r}) \rangle$ で特徴付けられる。逆に、Néel 状態のように格子の対称性が破れていない状態に対しては、 $\langle \psi(\vec{r}) \rangle = 0$ となる。

$\langle \psi(\vec{r}) \rangle$ が一様となる、規則正しい VBS 状態を仮定する。演算子としての $\psi(\vec{r})$ は、格子の対称性変換で (2.95) の係数 $e^{i0}, e^{i\frac{\pi}{2}}, e^{i\pi}, e^{i\frac{3\pi}{2}}$ が、互いに入れ替わる^{*10}。その結果、 $\psi(\vec{r})$ は

$$\begin{aligned} \text{R1} : \quad \psi'(\vec{r}) &= i\psi(\vec{r}), \\ \text{P or T}_x : \quad \psi'(\vec{r}) &= -\psi^\dagger(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.97)$$

と変換する。これをモノポール演算子の変換則 (2.64), (2.66), (2.68) と比較すると、 ψ と M の従う変換則が矛盾しないためには

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\frac{\pi}{4}} M(\vec{r}) \quad (2.98)$$

と決まる^{*11}。すなわち、モノポールの凝縮^{*12} ($\langle M \rangle \neq 0$) は、スピンの異方的な期待値 $\langle \psi \rangle \neq 0$ と等価である。

モノポールガスで求めたポテンシャル $V(\sigma)$ の最小点を、VBS 状態に関連付けることで、VBS 状態の縮退を説明できる。一様な $\psi(\vec{r})$ を持つ VBS 状態を想定し、その偏角を

$$\arg \langle \psi(\vec{r}) \rangle = \rho \quad (2.99)$$

と定義する。(2.57), (2.98) より、VBS 状態の期待値 $\sigma = \langle \sigma(\vec{r}) \rangle$ を含む関係式：

$$\rho = -\sigma + \frac{\pi}{4} \pmod{2\pi} \quad (2.100)$$

が成立する。 σ, ρ は 2π 周期で同一視される。ポテンシャル最小点 σ の集合 (2.93), (2.94) を (2.100) に代入すると、 ρ はそれぞれ、表 2.1 の値になる。格子の対称性変換によって、縮退した VBS 状態どうしが移り変わる。変換則 (2.97) は、

$$\begin{aligned} \text{R1} : \quad \rho' &= \rho + \frac{\pi}{2}, \\ \text{P or T}_x : \quad \rho' &= -\rho + \pi \end{aligned} \pmod{2\pi} \quad (2.101)$$

と等価である。表 2.1 のポテンシャル最小点について、各状態の ρ の変換先を求めたものを、図 2.7 に示す。

図 2.7(a), (b) の変換則はそれぞれ、cVBS (図 2.5(a)) と pVBS (図 2.5(c)) が満たす変換則と一致しており、(2.98) の関係式が正当化される。元々モノポール演算子 M は、Néel 相における staggered 磁化ベクトル \mathbf{m} のトンネル過程を引き起こす演算子として導入された。その変換則は、トンネル過程の Berry 位相か

^{*10}モノポール演算子 M の変換と同じく、状態ではなく演算子を変換させる。

^{*11} ψ の表し方は 1 通りではない。例えば、(2.98) に (-1) や $M^{\pm 4}$ を掛けても、同じ変換則を与える。しかし、得られる VBS 状態の物理的帰結は、(2.98) と選んだものと本質的に変わらない。

^{*12}モノポールが凝縮した相では、真空期待値が空間座標に依らないことから、変換前後の M の引数を \vec{r} に揃えた。

(a) $\text{Arg}(\lambda) = 0$ のとき					(b) $\text{Arg}(\lambda) = \pi$ のとき				
σ	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{3\pi}{4}$	$\frac{5\pi}{4}$	$\frac{7\pi}{4}$	σ	0	$\frac{\pi}{2}$	π	$\frac{3\pi}{2}$
ρ	0	$\frac{3\pi}{2}$	π	$\frac{\pi}{2}$	ρ	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{7\pi}{4}$	$\frac{5\pi}{4}$	$\frac{3\pi}{4}$

表 2.1: ポテンシャル最小点 (σ) から求めた, VBS 秩序変数 (ρ) の期待値. スピン表現は $s = 1/2$ とする.

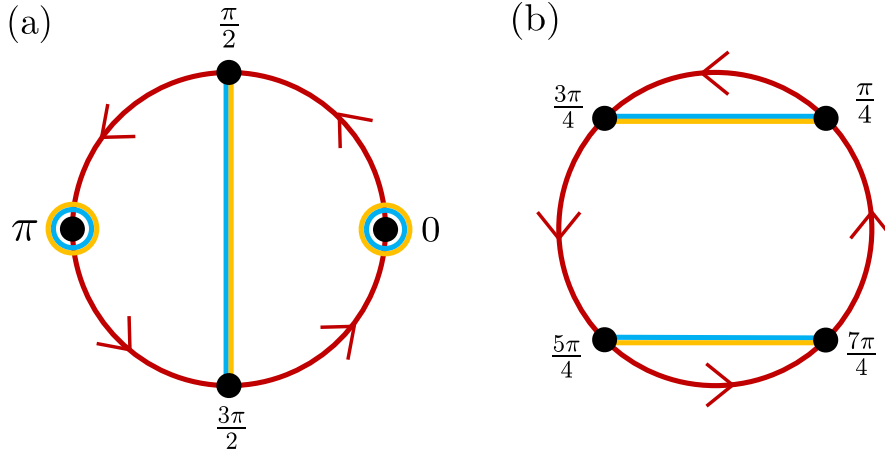


図 2.7: $s = 1/2$ (a) cVBS, (b) pVBS 状態が従う変換則. 赤色は R1 変換, 橙色は P 変換, 水色は T_x 変換を表す. 黒点と数値は, 表 2.1 に示した ρ を意味する.

ら決定したものである. 一方で VBS 秩序変数 ψ は, VB の位置を指定する, VBS 相に特有の物理量である. それにもかかわらず, 臨界理論においては, 両者は等価な演算子として機能する. この結果から, モノポールの凝縮が VBS 秩序を形成するという描像が明確になる.

$s > 1/2$ の VBS 状態は, $s = 1/2$ の場合とは異なり, スピン一重項の単純な直積ではない. そのため, VBS 秩序変数 $\psi(\vec{r})$ を, スピン演算子を用いてどのように定義すべきかが, はっきりしていない. $\psi(\vec{r})$ をうまく定義すれば, (2.98) のように, VBS 状態の変換性をモノポール演算子に結び付けることは可能だと思われるが, そのような文献は見当たらない.

2.5 数値計算

この節では, Néel-VBS 量子相転移に関連する数値計算のレビューを行う.

スピン系の数値計算には, stochastic series expansion アルゴリズムによる量子モンテカルロ法 (QMC) がよく用いられてきた. N 個の格子点からなる有限系で, ハミルトニアンから計算される重み付けに従って, スピン配位を確率的に生成する. 以下では, 絶対零度の計算手法の概要を説明する. 有限温度の場合にも, 類似のアルゴリズムが確立されている [83–85].

格子点上のスピン演算子で記述されたハミルトニアン H (固有値 E) を, $|E\rangle = -E$ が基底状態で最大となるように定義しておく. あらゆる状態は, 状態空間の完全系 $\{|\alpha\rangle\}$ を用いて線形に展開することができる. 任意の状態 $|\Psi\rangle$ に $(-H)^n$ が作用すると,

$$(-H)^n |\Psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle \rightarrow c_0 |E_0\rangle^n |0\rangle + \dots \quad (n \rightarrow \infty) \quad (2.102)$$

のように、基底状態 $|0\rangle$ (基底エネルギー E_0) が主要項として現れる (c_α は $|\Psi\rangle$ に依存する重ね合わせの係数). すなわち, $(-H)^n$ ($n \rightarrow \infty$) は, 基底状態への射影作用素として機能する [86].

実際の $s = 1/2$ 正方格子反強磁性体の計算では, 完全系 $\{|\alpha\rangle\}$ として, スピン $\hat{S}_3(i)$ の固有状態 ($|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$) の直積のほかに, valence bond (VB) 基底 [87] がしばしば用いられる. 異なる副格子に属する 2 個の格子点 (i, j) がスピン一重項を作った状態を,

$$|(i, j)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow_i \downarrow_j\rangle - |\downarrow_i \uparrow_j\rangle \right), \quad \left\{ \begin{array}{c} i \\ j \end{array} \right\} \in \text{sublattice} \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 2 \end{array} \right\} \quad (2.103)$$

とする. VB 基底には,

$$|(i_1, j_1)(i_2, j_2) \cdots (i_{L^2/2}, j_{L^2/2})\rangle = |(i_1, j_1)\rangle \otimes |(i_2, j_2)\rangle \otimes \cdots \otimes |(i_{N/2}, j_{N/2})\rangle \in \{|\alpha\rangle\} \quad (2.104)$$

という形の可能なすべての組み合わせが含まれる. このとき, 同じ副格子に属する点がスピン一重項を形成した状態は

$$|(1, 3)(2, 4)\rangle = |(1, 2)(3, 4)\rangle - |(1, 4)(3, 2)\rangle \quad (2.105)$$

と表すことができるので, i, j は異なる副格子に限定してよい. VB 基底を用いると, 格子全体でスピンの $\langle \hat{S} \rangle = 0$ の任意の状態を展開できる. 非直交かつ over-complete な基底であるため, 状態の展開係数は一意には決まらないが, 効率良く計算が実行できる.

例として, 反強磁性的な $s = 1/2$ Heisenberg 模型:

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} H(i, j) = - \sum_{\langle i, j \rangle} \left[\frac{1}{4} - \hat{S}(i) \cdot \hat{S}(j) \right] \quad (2.106)$$

を考える. $H(i, j)$ は格子点 i, j がスピン一重項のとき固有値 1, スピン三重項のとき固有値 0 になる射影演算子である. VB 基底に対しては,

$$H(1, 2) \cdot |(1, 2)(3, 4) \cdots\rangle = |(1, 2)(3, 4) \cdots\rangle, \quad (2.107)$$

$$H(2, 3) \cdot |(1, 2)(3, 4) \cdots\rangle = \frac{1}{2} |(3, 2)(1, 4) \cdots\rangle \quad (2.108)$$

のように作用するので, 引き続き VB 基底で記述することができる. $H(i, j)$ から現れる係数が必ず 0 以上であることが, 符号問題を生じないために重要である. 3 点相互作用以上の場合には, $H(i, j, k, \dots)$ と拡張できる.

有限の n で (2.102) を評価する. $(-H)^n$ は, (2.106) の $H(i, j)$ の n 個の積で与えられる:

$$(-H)^n = \left[\sum_{\langle i, j \rangle} H(i, j) \right]^n = \sum_{P_n} \prod_{p=1}^n H(a_p, b_p). \quad (2.109)$$

ここで, $P_n = [(i_1, j_1), (i_2, j_2), \dots, (i_n, j_n)]$ は, $H(i, j)$ の引数となる格子点のラベルを順に並べたリストであり, 可能なすべての組み合わせについて総和をとる. $H(i, j)$ どうしは一般に交換しないことに注意する. 適当な試行状態 $|\alpha(0)\rangle$ から出発して, $(-H)$ を n 回作用させると,

$$\begin{aligned} (-H)^n |\alpha(0)\rangle &= \sum_{P_n} \prod_{p=1}^n H(i_p, j_p) |\alpha(0)\rangle \\ &= \sum_{P_n} W(P_n) |\alpha(P_n)\rangle \end{aligned} \quad (2.110)$$

を得る. ただし, $|\alpha(P_n)\rangle$ は規格化後の状態である. 係数 W は, P_n が与えられると決まる. Heisenberg 模型の例では, (2.107), (2.108) より, $\frac{1}{2}$ のべき乗の値を持つ^{*13}. この例のように, $W \geq 0$ が保証されてい

^{*13}ハミルトニアンにはすべての格子点が等価に含まれるので, $W(P_n) = 0$ となる P_n は存在しない.

るとき、 W を重みと解釈することができる。QMC を適用できるためには、 $W \geq 0$ を満たす符号問題を持たないハミルトニアンを構成する必要がある。

重み $W(P_n)$ に従い P_n を importance sampling することによって、近似的な基底状態を確率的に生成する。また、物理量 A の期待値を求める場合には、

$$\langle A \rangle = \frac{\langle 0|A|0 \rangle}{\langle 0|0 \rangle} = \frac{\sum_{P_n, Q_n} W(P_n)W(Q_n)\langle \alpha(Q_n)|\alpha(P_n) \rangle \cdot \frac{\langle \alpha(Q_n)|A|\alpha(P_n) \rangle}{\langle \alpha(Q_n)|\alpha(P_n) \rangle}}{\sum_{P_n, Q_n} W(P_n)W(Q_n)\langle \alpha(Q_n)|\alpha(P_n) \rangle} \quad (2.111)$$

なので、重みとして $W(P_n)W(Q_n)\langle \alpha(Q_n)|\alpha(P_n) \rangle$ を用いた importance sampling によってリスト $[P_n, Q_n]$ を生成し、 $\langle \alpha(Q_n)|A|\alpha(P_n) \rangle / \langle \alpha(Q_n)|\alpha(P_n) \rangle$ を評価する [87]。 $s = 1/2$ 正方格子反強磁性体のスピン配位を表す物理量としては、staggered 磁化 \mathbf{m} 、ダイマー秩序変数 D_x, D_y などが挙げられる：

$$\mathbf{m} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}} (-1)^{x+y} \hat{\mathbf{S}}(\vec{r}), \quad (2.112)$$

$$D_x = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}} (-1)^x \hat{\mathbf{S}}(\vec{r}) \cdot \hat{\mathbf{S}}(\vec{r} + \hat{x}), \quad D_y = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}} (-1)^y \hat{\mathbf{S}}(\vec{r}) \cdot \hat{\mathbf{S}}(\vec{r} + \hat{y}). \quad (2.113)$$

ここからは、正方格子反強磁性体の数値計算による先行研究を、いくつか紹介する。最近接相互作用の SU(2) Heisenberg 模型に対しては、すべてのスピン表現 s で Néel 状態が基底状態として実現することが、初期の数値計算の研究 [29-31] から知られている。より一般化して、Young 図が 1 行 p 列のスピン表現に属する SU(N) スピン系が、これまでに考えられてきた。ただし $N \geq 3$ の場合、副格子 2 の格子点には、副格子 1 の格子点に配置されるスピン表現の共役表現を割り当てるものとする。基本表現 ($p = 1$) の SU(N) スピン系は、 $N = 2, 3, 4$ のとき Néel 状態が、 $N \geq 5$ のとき columnar VBS 状態が、基底状態として実現する [88]。 $N \in \mathbb{N}$ を $N \in \mathbb{R}$ に解析接続して計算するアルゴリズムによると、境界は $N \approx 4.57$ となっている [89]。 $p \rightarrow \infty$ は古典極限を意味するので、 p を大きくするほど Néel 秩序に近づく。したがって、 $N = 2, 3, 4$ ではすべての p に対して Néel 相が実現する。QMC の数値計算によると、 p を固定して N を増やしたとき、 $p = 2$ に対しては $N \sim 9.5$ 、 $p = 3$ に対しては $N \sim 14$ 、 $p = 5$ に対しては $N \sim 20$ で Néel 秩序が消失し、スピン液体のような格子の対称性を保つ無秩序相に転移する [90]。 large N 極限の解析 [8, 27] と比較すると、 $N \sim 5.3p$ で Néel 秩序が消失するという点では大体一致しているが、スピン液体ではなく VBS 相を予測する。

Deconfined criticality は、Heisenberg 模型に 4 点相互作用を追加した J-Q 模型で初めて確認された [37]。 $s = 1/2$ 正方格子に対して、J-Q 模型は

$$H = J \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{\mathbf{S}}(i) \cdot \hat{\mathbf{S}}(j) - Q \sum_{\langle i, j, k, l \rangle} \hat{C}(i, j) \hat{C}(k, l) \quad (J, Q > 0), \quad (2.114)$$

$$\hat{C}(i, j) = \frac{1}{4} - \hat{\mathbf{S}}(i) \cdot \hat{\mathbf{S}}(j) \quad (2.115)$$

で定義されており、符号問題を生じない。 $\langle i, i' \rangle$ は最近接格子点の和をとる。 Q に比例する項は、図 2.8(a) に示した一辺 a の正方形の頂点 i, j, k, l が相互作用する。 $\langle i, j, k, l \rangle$ の和には、正方形のあらゆる並進・回転が含まれる。したがって、このハミルトニアンは格子の対称性を破らない。

$Q = 0$ のとき、Heisenberg 模型に帰着するので、Néel 相が実現する。 $J = 0$ のときの基底状態はハミルトニアンからは非自明だが、数値計算によると、格子の対称性が自発的に破れた VBS 相が実現する。 $g = J/Q$ を変化させたときに、中間で何らかの量子相転移が起こる。相転移点は、スピン相関長 ξ などの秩序変数が従う、有限サイズスケールングから求める。系の 1 辺に並ぶ格子点の数を L ($N = L^2$) とすると、臨界点近傍の最低次で

$$\xi(g, L) = L \cdot f\left((g - g_c)L^{\frac{1}{\nu}}\right) \quad (2.116)$$

の関係がある (f : 正則関数、 ν : 臨界指数)。 g, L を様々に変化させて QMC を実行し、 $\xi(g, L)$ 等の秩序変数の振る舞いが (2.116) に従う点として、臨界結合定数 g_c と各種の臨界指数が得られる。J-Q 模型の場合、

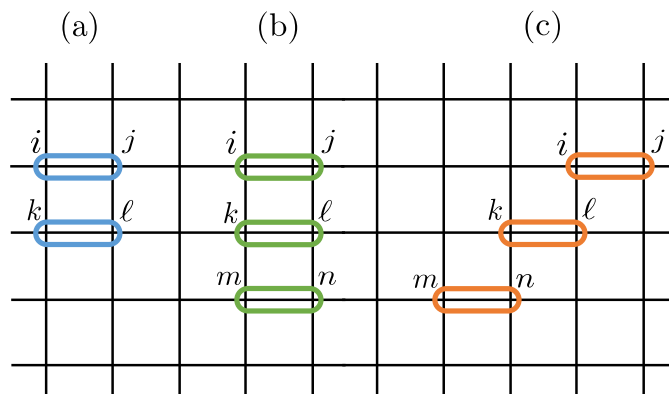


図 2.8: (a) J-Q 模型, (b) J-Q₃ 模型, (c) staggered J-Q₃ 模型の相互作用. この図で示した向きに限らず, あらゆる回転・並進を行って得られる格子点の組が, ハミルトニアン (2.114), (2.117) に含まれる. 文献 [37, 91, 92] を基に作成.

$g_c \approx 0.04$ が報告された. Néel 相と VBS 相の両側で相関長の臨界指数 ν が等しいこと, そしてスピン相関関数の臨界指数 η が, 古典的な相転移の 3d O(3) ユニバーサリティークラスよりも大きな値を持つことから, deconfined criticality による直接 2 次相転移の可能性が高いと結論付けられた [37].

その後, J-Q 模型を 6 点相互作用に拡張した J-Q₃ 模型が提案された [91]:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}(i) \cdot \hat{S}(j) - Q_3 \sum_{\langle i,j,k,l,m,n \rangle} \hat{C}(i,j) \hat{C}(k,l) \hat{C}(m,n) \quad (J, Q_3 > 0). \quad (2.117)$$

6 点相互作用は, 図 2.8(b) の長方形で指定される. この J-Q₃ 模型もまた, 符号問題を生じないので, QMC が使用できる. $g = J/Q_3$ とすると, $g_c \approx 0.667$ で Néel-VBS 相転移が起こる. J-Q₃ 模型は J-Q 模型と比べて, より強い VBS 秩序が実現する. QMC から得られる VBS 相の基底状態に対して, ダイマー秩序変数 (2.113) の確率分布 $P(D_x, D_y)$ をプロットすると, 結果は図 2.9 のようになる. 図 2.9(b) から, VBS 相では xy 平面の $0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$ の角度にダイマーが現れる columnar VBS (4 重縮退) が実現していることが読み取れる. さらに, g を VBS 相側から臨界点に近づけるにつれて, 図 2.9(a) のように, 確率分布のピークが円状に移り変わる. これは, deconfined criticality で予測された, 臨界点近傍の U(1) トポロジカル対称性の出現として解釈される. 臨界点を超えて g を大きくすると, Néel 秩序を表す $D_x = D_y = 0$ に 1 つのピークができる. U(1) 対称性の出現は, 正方格子上的 SU(3) J-Q 模型, SU(4) J-Q 模型でも同様に確認された [91]^{*14}. SU(2) J-Q 模型の場合は, VBS 秩序が弱いために, どのような $g < g_c$ を選んでも円状の確率分布 $P(D_x, D_y)$ しか得られない [37]. しかし, 臨界指数 ν, η が J-Q 模型と J-Q₃ 模型で一致することから, 両者は deconfined criticality で説明される共通のユニバーサリティークラスに属すると考えられている [91].

staggered J-Q₃ 模型は, (2.117) の J-Q₃ 模型と同じハミルトニアンで定義されるが, 今度は 6 点相互作用を, 図 2.8(c) のように辺をずらして設定する. すると, $J = 0$ のとき, 図 2.5(b) の staggered VBS 相が実現する. $g_c \approx 0.838$ で Néel-VBS 相転移が起こるが, 秩序変数の振る舞いから, 1 次相転移で隔てられている [92, 93]. staggered VBS 秩序秩序に対しても, ダイマー秩序変数 (D_x, D_y) を (2.113) と同様に定義し直して, VBS 相側で確率分布 $P(D_x, D_y)$ を求められる. すると, 以前の J-Q₃ 模型とは対照的に, U(1) トポロジカル対称性を意味する円状のピークを経由せずに, Néel 秩序と VBS 秩序が移り変わる. すなわち, staggered J-Q₃ 模型は, deconfined criticality に当てはまらない. このように, ダイマー秩序変数の確率分布からも相転移の種類を見分けることができ, U(1) トポロジカル対称性の出現は deconfined criticality の実在を裏付ける.

^{*14}SU(N) ($N \geq 5$) J-Q 模型については, $Q = 0$ のときに得られる Heisenberg 模型の基底状態が, Néel 相ではなく VBS 相なので, 量子相転移が起きない [88].

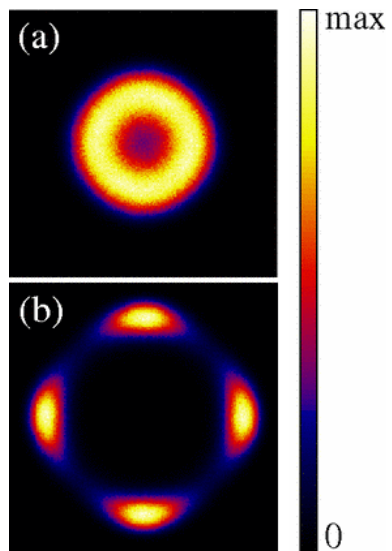


図 2.9: SU(2) J-Q₃ 模型における, ダイマー秩序変数の確率分布 $P(D_x, D_y)$. (a) $g = 0.575$, (b) $g = 0.176$ のとき. とともに格子点数は $L^2 = 32^2$ 個としている. 文献 [91] より引用.

第3章 SU(3)/U(1)² 非線形シグマ模型

3.1 節では, SU(2) スピンに対する Heisenberg 模型 (2.1) を, 一般の SU(N) スピンに拡張し, ハミルトニアンを定義する. 3.2 節では, スピンコヒーレント状態表示により, 分配関数を経路積分で与える. 3.3 節で, Néel 状態からの低エネルギー励起を定式化し, 連続場の有効ラグランジアンとして非線形シグマ模型が導かれることを見る. トポロジカル保存量で構成される追加項は, 連続極限で現れない. 本章の内容は, 投稿論文 [60] に基づく.

3.1 SU(N) Heisenberg 模型

SU(N) の任意の表現に属するスピン変数が, 各格子点上に乗った量子スピン系を考える. スピン同士が最近接斥力相互作用をするとき, ハミルトニアンは

$$H = J \sum_{\langle i, i' \rangle} \sum_{v, w=1}^N \hat{S}_{vw}(i) \hat{S}_{vw}(i') \quad (J > 0) \quad (3.1)$$

で与えられる [27]. ただし i は格子点を表し, 最近接格子点の組 $\langle i, i' \rangle$ について和をとる. SU(N) スピン演算子 \hat{S}_{vw} は, 交換関係

$$[\hat{S}_{vv'}, \hat{S}_{ww'}] = \delta_{vv'} \hat{S}_{v'w} - \delta_{v'w} \hat{S}_{vv'} \quad (3.2)$$

を満たす代数として定義される.

以降では, 完全対称なスピン表現に限定する. 各表現は 1 行 p 列の Young 図で指定されるので, 自然数 $p \in \mathbb{N}$ で特徴付けられる. 完全対称なスピン表現では, Schwinger ボソン [27, 94] による表示を利用できる. ボソンの交換関係

$$[\hat{a}_v(i), \hat{a}_w^\dagger(i')] = \delta_{vw} \delta_{ii'}, \quad [\hat{a}_v(i), \hat{a}_w(i')] = [\hat{a}_v^\dagger(i), \hat{a}_w^\dagger(i')] = 0 \quad (3.3)$$

を満たす生成消滅演算子を用いて

$$\hat{S}_{vw}(i) = \hat{a}_v^\dagger(i) \hat{a}_w(i) \quad (3.4)$$

と置くと, これはスピン代数の交換関係 (3.2) を満たす. さらにスピン表現 p では, すべての格子点 i について

$$\sum_v \hat{a}_v^\dagger(i) \hat{a}_v(i) = p \quad (3.5)$$

が課される.

$N = 2$ のとき, Pauli 行列 σ を用いて, 3 成分のスピン演算子を

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \hat{a}_v^\dagger(\sigma)_{vw} \hat{a}_w \quad (3.6)$$

で定めると, よく知られた関係式

$$[\hat{S}_v(i), \hat{S}_w(i')] = i \varepsilon_{vwu} \hat{S}_u(i) \delta_{ii'}, \quad \hat{S}(i) \cdot \hat{S}(i) = \frac{p}{2} \left(\frac{p}{2} + 1 \right) \quad (3.7)$$

を満たす. スピンの大きさ s は, $p = 2s$ で関係付けられる. ハミルトニアン (3.1) は, 定数項を別にして (2.1) と一致する. したがって, (3.1) は SU(2) Heisenberg 模型の拡張となっている.

3.2 スピンコヒーレント経路積分

SU(N) スピンコヒーレント状態を

$$|\vec{\Phi}(i)\rangle = \frac{1}{\sqrt{p!}} \left[\sum_{\alpha=1}^N \Phi_{\alpha}(i) \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}(i) \right]^p |0\rangle \quad (3.8)$$

で定義する. ここで, $\vec{\Phi}(i) \in \mathbb{C}P^{N-1}$ は $|\vec{\Phi}|^2 = 1$ を満たす N 成分複素ベクトルであり, SU(N) スピン回転の下で基本表現として変換する. 定義より, 以下の性質が近似なしで成立する (引数 i を省く):

$$\langle \vec{\Phi} | \vec{\Phi} \rangle = 1 \quad (\text{規格化}), \quad (3.9)$$

$$\int d\Omega_{\Phi} |\vec{\Phi}\rangle \langle \vec{\Phi}| = 1 \quad (\text{完全性}), \quad (3.10)$$

$$\langle \vec{\Phi}' | \vec{\Phi} \rangle = [\vec{\Phi}'^* \cdot \vec{\Phi}]^p \quad (\text{重なり積分}), \quad (3.11)$$

$$\langle \vec{\Phi} | \hat{S}_{\alpha\alpha'} | \vec{\Phi} \rangle = p \Phi_{\alpha}^* \Phi_{\alpha'} \quad (\text{スピン演算子}). \quad (3.12)$$

(3.9)–(3.12) の証明は, 付録 B.1 を参照. (3.10) について, $d\Omega_{\Phi}$ は SU(N) 不変測度である. $N = 3$ の場合, $\vec{\Phi}(i) \in \mathbb{C}P^2$ を

$$\vec{\Phi} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ e^{i\alpha_2} \sin \theta \sin \varphi \\ e^{i\alpha_3} \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

とパラメータ表示するとき, 積分測度の具体形は

$$d\Omega_{\Phi} = \frac{(p+2)(p+1)}{\pi^2} \sin^3 \theta \cos \theta \sin \varphi \cos \varphi d\theta d\varphi d\alpha_2 d\alpha_3 \quad (3.14)$$

で与えられる [66].

次に, 分配関数 $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$ を, 虚時間経路積分で定式化する. 全格子点に対するスピンコヒーレント状態を, 直積 $|\vec{\Phi}\rangle = \otimes_i |\vec{\Phi}(i)\rangle$ で定義する. 完全系をなす基底 $\{|n\rangle\}$ で Tr を展開すると,

$$\begin{aligned} Z &= \sum_n \langle n | e^{-\beta H(a^{\dagger}, a)} | n \rangle \\ &= \sum_n \langle n | \left(\int d\Omega_{\Phi'} |\vec{\Phi}'\rangle \langle \vec{\Phi}'| \right) e^{-\beta H(a^{\dagger}, a)} \left(\int d\Omega_{\Phi} |\vec{\Phi}\rangle \langle \vec{\Phi}| \right) | n \rangle \\ &= \int d\Omega_{\Phi'} \int d\Omega_{\Phi} \langle \vec{\Phi}' | \left(\sum_n |n\rangle \langle n| \right) |\vec{\Phi}'\rangle \langle \vec{\Phi}'| e^{-\beta H(a^{\dagger}, a)} |\vec{\Phi}\rangle \\ &= \int d\Omega_{\Phi} \langle \vec{\Phi} | \left(\int d\Omega_{\Phi'} |\vec{\Phi}'\rangle \langle \vec{\Phi}'| \right) e^{-\beta H(a^{\dagger}, a)} |\vec{\Phi}\rangle \\ &= \int d\Omega_{\Phi} \langle \vec{\Phi} | e^{-\beta H(a^{\dagger}, a)} |\vec{\Phi}\rangle \end{aligned} \quad (3.15)$$

が得られる. 逆温度 β を, K 個のステップに分割する ($K \rightarrow \infty$). k 番目のステップにおける“時刻”を $\tau = k \frac{\beta}{K}$ で導入し, その時刻でのコヒーレントベクトルを $\vec{\Phi}_k$ と書く. すると分配関数 (3.15) は, 実時間経路積分で $t = -i\tau$ の置き換えを行い, $\tau = 0, \beta$ で周期境界条件 ($\vec{\Phi}_0 = \vec{\Phi}_K = \vec{\Phi}$) を課したものと同じ形をし

ている. すなわち,

$$\begin{aligned}
Z &= \int d\Omega_{\Phi} \langle \vec{\Phi} | e^{-\frac{\beta}{K} H(a^\dagger, a)} \left(\int d\Omega_{\Phi_{K-1}} |\vec{\Phi}_{K-1}\rangle \langle \vec{\Phi}_{K-1}| \right) e^{-\frac{\beta}{K} H(a^\dagger, a)} \dots \\
&\quad \dots |\vec{\Phi}_2\rangle \langle \vec{\Phi}_2| e^{-\frac{\beta}{K} H(a^\dagger, a)} \left(\int d\Omega_{\Phi_1} |\vec{\Phi}_1\rangle \langle \vec{\Phi}_1| \right) e^{-\frac{\beta}{K} H(a^\dagger, a)} |\vec{\Phi}\rangle \\
&= \int \prod_{k=1}^K \left[d\Omega_{\Phi_k} \langle \vec{\Phi}_k | e^{-\frac{\beta}{K} H(a^\dagger, a)} | \vec{\Phi}_{k-1} \rangle \right] \\
&\simeq \int \prod_{k=1}^K \left[d\Omega_{\Phi_k} \langle \vec{\Phi}_k | \left(1 - \frac{\beta}{K} H(a^\dagger, a) \right) | \vec{\Phi}_{k-1} \rangle \right] \\
&= \int \prod_{k=1}^K \left[d\Omega_{\Phi_k} \left(\vec{\Phi}_k^* \cdot \vec{\Phi}_{k-1} \right)^p \left(1 - \frac{\beta}{K} H(\sqrt{p} \vec{\Phi}_k^*, \sqrt{p} \vec{\Phi}_{k-1}) \right) \right] \\
&\simeq \int \prod_{k=1}^K \left[d\Omega_{\Phi_k} \left(1 + p \vec{\Phi}_k^* \cdot (\vec{\Phi}_{k-1} - \vec{\Phi}_k) \right) e^{-\frac{\beta}{K} H(\sqrt{p} \vec{\Phi}_k^*, \sqrt{p} \vec{\Phi}_k)} \right] \\
&\simeq \left(\int \prod_{k=1}^K d\Omega_{\Phi_k} \right) \exp \left[-\frac{\beta}{K} \sum_{k=1}^K \left\{ p \vec{\Phi}_k^* \cdot \frac{\vec{\Phi}_k - \vec{\Phi}_{k-1}}{\beta/K} + H(\sqrt{p} \vec{\Phi}_k^*, \sqrt{p} \vec{\Phi}_k) \right\} \right]. \tag{3.16}
\end{aligned}$$

ハミルトニアンとして (3.1) を代入し, $K \rightarrow \infty$ の極限をとると, 分配関数は

$$Z = \int \mathcal{D}\Phi \exp(-S[\Phi]), \tag{3.17}$$

$$S = S_{\text{WZ}} + S_{\text{exch}} = \int_0^\beta d\tau \left\{ p \sum_i \left(\vec{\Phi}^*(i, \tau) \cdot \partial_\tau \vec{\Phi}(i, \tau) \right) + Jp^2 \sum_{\langle i, i' \rangle} \left| \vec{\Phi}^*(i, \tau) \cdot \vec{\Phi}(i', \tau) \right|^2 \right\} \tag{3.18}$$

となる.

(3.18) の第 1 項は, Wess-Zumino 項と呼ばれるものであり, 相互作用の強さ J に依存しない. 第 2 項は, 古典的なハミルトニアンに由来する交換項である.

3.3 有効ラグランジアン

以降では三角格子上の $SU(3)$ スピン系に限定する. 古典的なエネルギー S_{exch} を最小にする配位は, 隣接する格子点 $\langle i, i' \rangle$ について $\vec{\Phi}^*(i) \cdot \vec{\Phi}(i') = 0$ を満たす. $\vec{\Phi}(i) \in \mathbb{C}P^2$ は, 互いに直交するベクトルを同時に 3 個まで選ぶことができる. 一方で図 3.1 に示すように, 三角格子は最近接する格子点が異なる色になるように 3 色で塗り分けることができる. つまり 3 種の副格子から構成されている (tripartite). したがって, すべての点で $\vec{\Phi}^*(i) \cdot \vec{\Phi}(i') = 0$ を満たす配位が, フラストレーションを生じることなく実現可能である. これを Néel 状態という. 例えば, 副格子 $\alpha = 1, 2, 3$ に属する格子点に

$$\vec{\Phi}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\Phi}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\Phi}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3.19}$$

を割り振ればよい.

Néel 状態は古典極限 ($p \rightarrow \infty$) において正確な基底状態であるが, 有限の p に対してはハミルトニアンのエネルギー固有状態ではない. p が小さくなるほど, 量子効果が無視できなくなる. 量子効果が顕著に表れた状態として, valence bond solid (VBS) 相やスピン液体が, 基底状態の候補に挙げられる. VBS 相については 6, 7 章で詳しく議論する. 3-5 章では, p が十分大きいと仮定して, Néel 状態からの揺らぎを場の理論で定式化する.

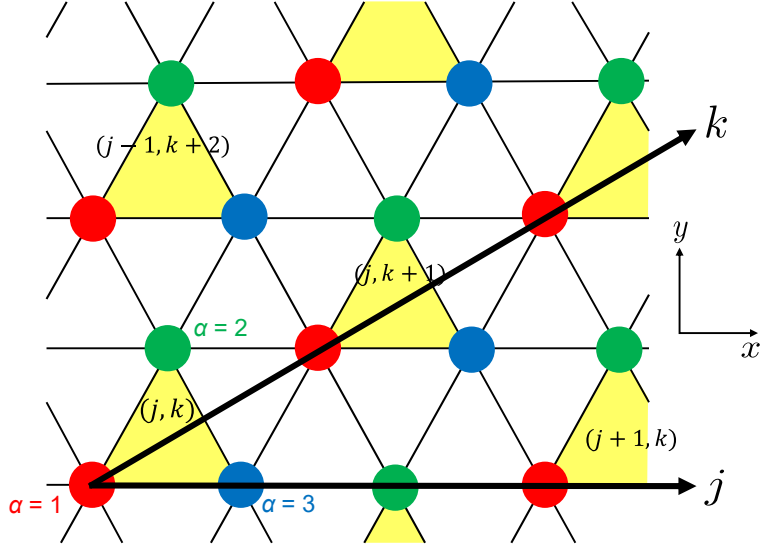


図 3.1: 三角格子の座標の取り方. 赤, 緑, 青色で示した格子点はそれぞれ, 副格子 $\alpha = 1, 2, 3$ に属する. 黄色の三角形の頂点をなす 3 点が unit cell を組み, その位置を $(j, k) \in \mathbb{Z}^2$ で指定する. スピン変数 $\Phi(i)$ は, $\Phi_\alpha(j, k)$ と記述される. 各副格子に 3 個の直交する状態 $\vec{\Phi}_\alpha$ を割り当てることで, Néel 状態が実現される. 文献 [60] より引用.

図 3.1 に黄色の三角形で示した, 互いに隣接し, 異なる副格子に属する 3 個の格子点で unit cell に組み. 各 unit cell に, 整数 j, k を用いて (j, k) とラベルを付ける. その結果, 1 個の格子点 i が 3 つのラベル (j, k, α) で指定される:

$$\vec{\Phi}(i, \tau) = \vec{\Phi}_\alpha(j, k, \tau). \quad (3.20)$$

SU(3) スピン鎖に対する先行研究 [66] に従い, Néel 状態からの揺らぎを行列の形で記述する. Néel 状態からの励起を, unit cell 内を非直交にする高エネルギー成分 (fast mode) と, unit cell 内を直交に保ったまま, スピンが空間的に変化する低エネルギー成分 (slow mode) に分割する. エルミート行列 L によって前者の効果を, ユニタリ行列 $U \in U(3)$ によって後者の効果を取り入れる:

$$\begin{pmatrix} \vec{\Phi}_1(j, k)^\top \\ \vec{\Phi}_2(j, k)^\top \\ \vec{\Phi}_3(j, k)^\top \end{pmatrix} = L(j, k) \cdot U(j, k), \quad (3.21)$$

$$L(j, k) = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \frac{a^2}{p^2}(|L_{12}|^2 + |L_{13}|^2)} & \frac{a}{p}L_{12} & \frac{a}{p}L_{13} \\ \frac{a}{p}L_{12}^* & \sqrt{1 - \frac{a^2}{p^2}(|L_{12}|^2 + |L_{23}|^2)} & \frac{a}{p}L_{23} \\ \frac{a}{p}L_{13}^* & \frac{a}{p}L_{23}^* & \sqrt{1 - \frac{a^2}{p^2}(|L_{13}|^2 + |L_{23}|^2)} \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

L のエルミート性は, $|\vec{\Phi}_\alpha(j, k)|^2 = 1$ を保証する. U は正規直交条件:

$$\vec{\phi}_\alpha^*(j, k) \cdot \vec{\phi}_\beta(j, k) = \delta_{\alpha\beta} \quad (3.23)$$

を満たす $\vec{\phi}_\alpha(j, k)$ を用いて,

$$U(j, k) = \begin{pmatrix} \vec{\phi}_1(j, k)^\top \\ \vec{\phi}_2(j, k)^\top \\ \vec{\phi}_3(j, k)^\top \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

と表される. しかし $\vec{\Phi}_\alpha(j, k)$ の位相は非物理的であるため, 物理的に意味があるのは $U \in U(3)/[U(1)]^3 = SU(3)/U(1)^2$ である. そこで, 余分な $U(1)$ 自由度を 1 つ使って

$$\det U(j, k) = 1 \quad \left(\iff \vec{\phi}_1 \cdot (\vec{\phi}_2 \times \vec{\phi}_3) = 1 \right) \quad (3.25)$$

を課することができる. これにより, 以下では U を (余分な $U(1)$ 自由度を 2 つ含んだ) $SU(3)$ 行列として扱う.

ここで, (3.21) の物理的な自由度の数を調べておく. $\vec{\Phi}_\alpha \in \mathbb{C}P^2$ は位相を無視した複素 3 成分単位ベクトルであるから, 左辺は $4 \times 3 = 12$ 個の自由度を持つ. 一方で L は $L_{12}, L_{13}, L_{23} \in \mathbb{C}$ による $2 \times 3 = 6$ 自由度, $U \in U(3)/[U(1)]^3$ は $9 - 3 = 6$ 自由度なので, 右辺も $6 + 6 = 12$ 自由度を持っている. 両辺で自由度の数が一致していることは, 妥当である.

(3.21) で $L(j, k) = I_3$ (3×3 単位行列) と一様な ϕ_α (j, k に依存しない) を代入したものは, Néel 状態を表す. Néel 状態は期待値 $\langle \phi_\alpha \rangle \neq 0$ を持ち, ハミルトニアン (3.1) が持つ $SU(3)$ スピン回転対称性を, 非物理的な $[U(1)]^2$ 位相変換対称性にまで自発的に破る. 連続的対称性の破れからは, 6 個の massless 南部-Goldstone (NG) ボソンが現れる. 今の場合, Néel 状態からの低エネルギー励起を表す $U(j, k) = (\vec{\phi}_1 \vec{\phi}_2 \vec{\phi}_3)^T$ が持つ 6 つの自由度が, スピン回転対称性の破れに伴う 6 個の NG ボソンと対応する. 実際に, 有効ラグランジアン (B.12) に U の質量項が無いことから, massless であることが確かめられる.

(3.21) を (3.18) に代入し, 連続極限 (格子定数 $a \rightarrow 0$) を取り, 高エネルギー励起を表す L を経路積分を行う. 計算過程の詳細は, 付録 B.2 に記す. その結果, 有効作用として, 以下の $SU(3)/U(1)^2$ 非線形シグマモデルを得る:

$$S_{\text{eff}} = \int d^3x \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\mu=x,y,\tau} \left(|\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha|^2 - |\vec{\phi}_\alpha^* \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha|^2 \right). \quad (3.26)$$

ただし, 虚時間のスケール変換 $\tau \mapsto v\tau$ によって, 励起が進む速さを $v = \frac{3}{\sqrt{2}} Jap \mapsto 1$ に合わせた. 有効結合定数は, $g_{\text{eff}} = \frac{3\sqrt{3}}{2p} a$ である. この際, 素朴な連続極限からは,

$$S_{\text{add}} = \frac{2\pi i}{3a} p \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \int dy Q_1^{x\tau}(y) - \int dx Q_2^{y\tau}(x) - \frac{1}{\sqrt{3}} \int dy Q_3^{x\tau}(y) \right] \quad (3.27)$$

という追加項が現れる. $Q_\alpha^{\mu\nu}$ とは, (4.11) で定義するトポロジカルチャージである. 系がフラストレーションを生じることなく Néel 状態を実現できるという仮定を利用すると, (3.27) が消えることを付録 B.3 節で示す.

さらに, $U(1)$ ゲージ場

$$a_\alpha = i \vec{\phi}_\alpha^* \cdot d\vec{\phi}_\alpha, \quad \sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha = 0 \quad (3.28)$$

を補助場として導入することにより, $U(1)^2$ ゲージ理論に書き直すことができる. (3.26) を変形すると,

$$S_{\text{eff}} = \int_{M_3} \mathcal{L}_{\text{cont}} = \int_{M_3} \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_{\alpha=1}^3 \left| (d + ia_\alpha) \vec{\phi}_\alpha \right|^2 \quad (3.29)$$

と表せる. ただし, 微分形式 χ に対して, $|\chi|^2 = \chi \wedge \star \chi$ を意味する. このとき a_α を $\vec{\phi}_\alpha$ に依らない動的な $U(1)$ ゲージ場とみなすと, (3.29) における a_α に関する運動方程式として, (3.28) が再び得られる.

格子ハミルトニアンの連続極限からは現れないものの, ホモトピー群 $\pi_3[SU(3)/U(1)^2] = \mathbb{Z}$ に基づく, ゲージ不変なトポロジカル項が, ラグランジアンに含まれる余地が残っている. これは $\mathbb{C}P^1 = SU(2)/U(1)$ における Hopf 項を, $SU(3)/U(1)^2$ に拡張したものである. 具体的な表式は, $a_{\alpha\beta} = \vec{\phi}_\alpha^* \cdot d\vec{\phi}_\beta$ として

$$\mathcal{L}_{\text{Hopf}} = \frac{i}{2\pi} \left[a_1 \wedge da_1 + a_2 \wedge da_2 + a_3 \wedge da_3 - \frac{1}{2} (a_{12} \wedge a_{23} \wedge a_{31} + a_{21} \wedge a_{13} \wedge a_{32}) \right] \quad (3.30)$$

で与えられる. しかしながら, 理論のユニタリ性・局所性により, この種のトポロジカル項は 0 となり, 有効ラグランジアンに出現しないことが証明されている [95].

第4章 対称性

前章で導出した $SU(3)/U(1)^2$ 非線形シグマ模型は、様々な対称性を持つ。4.1 節では格子理論から引き継がれた対称性について、4.2 節では連続理論で新たに生じた対称性について議論する。本章の内容は、投稿論文 [60] に基づく。

4.1 格子理論に由来する対称性

始めに、スピンに関する対称性を考える。(3.8), (3.21), (3.24) から明らかなように、 $\vec{\phi}_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, 3$) の位相変換は状態ベクトル $|\vec{\Phi}\rangle$ の位相変換であるため、非物理的である。今は1自由度を(3.25)に固定しているため、残りの $U(1)^2$ ゲージ自由度が存在する。また、ハミルトニアン(3.1)は、 $SU(3)$ スピン回転

$$\hat{S}_{\alpha\beta}(i) \mapsto \sum_{\alpha',\beta'} V_{\alpha\alpha'} \hat{S}_{\alpha'\beta'}(i) (V^\dagger)_{\beta'\beta}, \quad V \in SU(3) \quad (4.1)$$

に対して不変である。しかし V が中心 $\mathbb{Z}_3 \subset SU(3)$ に属するとき、すなわち $V = I_3, \omega I_3, \omega^2 I_3$ ($\omega = \exp(2\pi i/3)$: 1 の3乗根, I_3 : 3×3 単位行列) のときは、 $\hat{S}_{\alpha\beta}(i) \mapsto \hat{S}_{\alpha\beta}(i)$ という恒等変換を与える。したがって、 $V = I_3, \omega I_3, \omega^2 I_3$ を同一視した商群 $PSU(3) = SU(3)/\mathbb{Z}_3$ が、正しい対称性変換を記述する。

次に、三角格子が持つ対称性を考える。三角格子は文様群 (wallpaper group) $p6m$ に分類される。格子の並進に加えて、図 4.1 に示す回転・鏡映対称性を持つ。変換の前後では、副格子のラベル α が入れ替わること注意到する。

以上に述べた格子理論が持つ対称性は、連続極限においても引き継がれているべきである。実際に、 $SU(3)/U(1)^2$ 非線形シグマ模型の有効作用(3.26)は、以下の変換に対して不変であることが、直接確かめられる：

1. $U(1)^2$ ゲージ変換

$$\vec{\phi}'_\alpha(x, y, \tau) = e^{i\vartheta_\alpha(x, y, \tau)} \vec{\phi}_\alpha(x, y, \tau), \quad \sum_{\alpha=1}^3 \vartheta_\alpha = 0 \pmod{2\pi}. \quad (4.2)$$

2. $PSU(3)$ スピン回転

$$\vec{\phi}'_\alpha(x, y, \tau) = V \vec{\phi}_\alpha(x, y, \tau), \quad V \in SU(3). \quad (4.3)$$

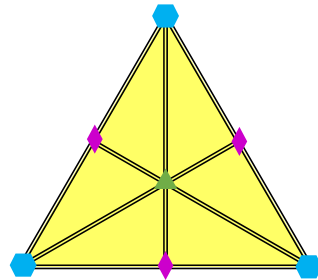


図 4.1: 文様群 $p6m$ の最小繰り返し単位。菱形、三角形、六角形はそれぞれ、 $\pi, 2\pi/3, 2\pi/6$ 回転の中心を表す。二重線は鏡映軸を表す。文献 [60] より引用。

3. $(\mathbb{Z}_3)_{\text{cyc}}$ 置換

$$[\vec{\phi}'_1, \vec{\phi}'_2, \vec{\phi}'_3](x, y, \tau) = [\vec{\phi}_2, \vec{\phi}_3, \vec{\phi}_1](x, y, \tau). \quad (4.4)$$

4. x 軸鏡映 ($\alpha = 1$ 頂点を通る x 軸に垂直な直線を軸とする)

$$[\vec{\phi}'_1, \vec{\phi}'_2, \vec{\phi}'_3](x, y, \tau) = [-\vec{\phi}_1, -\vec{\phi}_3, -\vec{\phi}_2](-x, y, \tau). \quad (4.5)$$

5. $2\pi/6$ 空間回転 ($\alpha = 1$ 頂点を中心とする)

$$[\vec{\phi}'_1, \vec{\phi}'_2, \vec{\phi}'_3](x, y, \tau) = [-\vec{\phi}_1, -\vec{\phi}_3, -\vec{\phi}_2](x', y', \tau), \quad (4.6)$$

$$\text{with } x' = (x - \sqrt{3}y)/2, y' = (\sqrt{3}x + y)/2.$$

6. 時間反転

実時間ラグランジアン \mathcal{L}_R :

$$\mathcal{L}_R = -\mathcal{L}_E \left(\frac{\partial\phi}{\partial\tau} \mapsto \frac{\partial\phi}{i\partial t}, \tau \mapsto it \right) \quad (4.7)$$

に対して, $t \mapsto -t$ の置き換えと, 係数の複素共役を行う。

ここでは, 格子定数 a の高次を無視した. ゲージ変換は局所対称性, それ以外はグローバル対称性である. 上述の対称性変換について, いくつか補足する. $U(1)^2$ ゲージ対称性は, (3.29) の表式から明確に分かる. QED と同様に, 変換 (4.2) に伴い, (3.28) で定義した $U(1)$ ゲージ場 $a_{\alpha,\mu}$ は

$$a_{\alpha,\mu} \mapsto a'_{\alpha,\mu} = a_{\alpha,\mu} - \partial_\mu \vartheta_\alpha \quad (4.8)$$

と変換する. $PSU(3)$ 対称性においては, (4.3) の $V = \omega I_3$ (もしくは $V = \omega^2 I_3$) による変換は, (4.2) で $\vartheta(x, y, \tau) = 2\pi/3$ ($4\pi/3$) としたものと一致している. したがって, $V \in SU(3)$ の中心 \mathbb{Z}_3 による変換は, ゲージ変換の一部に含まれているので取り除かなければならず, $PSU(3) = SU(3)/\mathbb{Z}_3$ が重複のないグローバル対称性である. $(\mathbb{Z}_3)_{\text{cyc}}$ 置換対称性は, 1 格子分の並進と等価である. x 軸正の方向に a だけ並進することの連続極限が, 変換 (4.4) をもたらす. 変換 (4.4)–(4.6) は, 連続極限で p6m 全体の対称性を表現するために必要な最小限の対称性である. 図 4.1 に示した様々な変換は, これらを組み合わせることで実現できる. 時間反転対称性は, ハミルトニアン (3.1) が時間反転で不変であることに由来する.

4.2 連続理論で生じた対称性

この節では, 格子理論には存在しないが, 連続極限をとった後の非線形シグマ模型 (3.26) が持つ対称性について述べる.

第 1 に, Euclid 時空における $SO(3)$ Lorentz 対称性が存在する. 元々の格子理論を不変にする最小の回転角は $2\pi/6$ であったが, 連続極限により格子点が連続的な座標に置き換わったために, 空間回転対称性が $SO(2)$ に拡大した. さらに τ のスケール変換により, (x, y, τ) の 3 次元時空内の任意の回転で不変な理論になった.

第 2 に, 副格子のラベル $\alpha = 1, 2, 3$ の入れ替えについて, 置換群 $S_3 = (\mathbb{Z}_3)_{\text{cyc}} \times \mathbb{Z}_2$ で表される対称性が存在する. 前者の $(\mathbb{Z}_3)_{\text{cyc}}$ は 1 格子並進に, 後者の \mathbb{Z}_2 は $2\pi/6$ 回転に由来する. これらが連続極限によって, 座標変換とは独立な内部対称性として実現したものである. $s \in S_3$ によって, 場 $\vec{\phi}$ は

$$\vec{\phi}'_\alpha(x, y, \tau) = \text{sgn}(s) \cdot \vec{\phi}_{s(\alpha)}(x, y, \tau) \quad (4.9)$$

と変換する. 符号 $\text{sgn}(s)$ は s が偶置換ならば $+1$, 奇置換ならば -1 をとるが, これは (3.25) の条件 $\det U = 1$ を保つために必要である.

第3に, $[U(1)]_{\text{top}}^2$ トポロジカル対称性が存在する. (5.76) で後述するように, その対称性変換は, モノポールを挿入する演算子の位相変換として表現される. Noether カレント $j_\alpha = j_{\alpha,\mu} dx^\mu$ は

$$j_\alpha = \star \frac{1}{2\pi} da_\alpha \quad \left(\iff j_{\alpha,\mu} = \frac{1}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} F_{\alpha,\nu\rho} \right) \quad (4.10)$$

で与えられ, Bianchi 恒等式として保存則 $\partial^\mu j_{\alpha,\mu} = 0$ を満たす. j_α を $x^\mu x^\nu$ 平面で積分して得られる保存チャージは,

$$\begin{aligned} Q_\alpha^{\mu\nu} &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2_{\mu\nu}} da_\alpha \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int dx^\mu dx^\nu \left(\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\alpha^* - \partial_\nu \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha^* \right) \end{aligned} \quad (4.11)$$

と表される. これが整数値であることは, 任意の閉多様体 M_2 に対して

$$\int_{M_2} \star j_\alpha = \frac{1}{2\pi} \int_{M_2} da_\alpha \in \mathbb{Z} \quad (4.12)$$

であることから分かる. また, a_α の定義 (3.28) から $\sum_\alpha j_\alpha = 0$ が成り立つので,

$$\sum_{\alpha=1}^3 Q_\alpha^{xy} = 0 \quad (4.13)$$

を満たす. よって, 独立なチャージは $Q_1^{xy}, Q_2^{xy}, Q_3^{xy}$ のうち2つである. これはホモトピー群による推測 $\pi_2[\text{SU}(3)/\text{U}(1)^2] = \mathbb{Z}^2$ と一致する.

Q_α^{xy} は2次元理論のトポロジカルチャージ (Pontryagin index) に他ならない. 3次元理論では, 時間 (τ) 発展に伴い Q_α^{xy} が変化するトンネル過程が起こる. Q_α^{xy} は離散的な量であるため, 配位 $\vec{\phi}(x, y, \tau)$ の連続的な変形では, Q_α^{xy} は変化しない. したがって連続理論では, 時空内に出現した特異点, すなわちモノポール (インスタントン) がトンネル過程を引き起こす. トンネル過程 $Q_\alpha^{xy} \rightarrow Q_\alpha^{xy} + \Delta Q_\alpha^{xy}$ に対応して, 3次元時空内の1点にチャージ ΔQ_α^{xy} のモノポールが存在し, それを取り囲む任意の閉曲面 S^2 上で

$$\int_{S^2} da_\alpha = \Delta Q_\alpha^{xy} \quad (4.14)$$

となる. 電磁気学の Dirac モノポールと同様に, S^2 全体でグローバルな a_α を選ぶことができないために, 0 でない積分値を与える.

これに対して, 格子理論では $\vec{\Phi}(i, \tau)$ は格子点上にのみ存在する. そのため, モノポールが格子点の間を生成・消滅・移動するとみなすことにより, $\vec{\Phi}(i, \tau)$ の連続的な変化で, トンネル過程を実現することができる. 連続場で表された非線形シグマ模型 (3.26) は, トンネル過程を記述できない. よって, 格子理論を連続場で正しく表現するには, モノポールを用いてトンネル過程の効果を追加する必要がある. 次章では, モノポールの性質を調べる.

第5章 モノポール

Haldane [7] は SU(2) 正方格子について、スキルミオン数が増えるトンネル過程は非自明な Berry 位相を持つことを指摘した。以下では、SU(2) 正方格子の staggered 磁化ベクトルを SU(3) 三角格子に拡張し、モノポールがもたらす Berry 位相を調べる。

5.1, 5.2 節で SU(3) スピン系でスキルミオンを構成する方法を説明し、5.3 節でトンネル過程の Berry 位相を実際に計算する。5.4 節では、格子の対称性変換をモノポールの Berry 位相と関係付ける。5.5 節では、有効理論に含むことができるモノポール項を検討する。本章の内容は 5.4 節を除き、投稿論文 [60] に基づく。

5.1 U(3)/U(1)³ パラメータ

スキルミオン配位を構成するための準備として、U(3)/U(1)³ 行列の便利なパラメトリゼーションを提案する。文献 [96] による $U_{\text{ref}} = (\vec{u}_1 \vec{u}_2 \vec{u}_3) \in \text{SU}(3)$ の一般形を出発点にする：

$$\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} e^{i\varphi_1} \cos \theta_1 \cos \theta_2 \\ e^{i\varphi_3} \sin \theta_1 \\ e^{i\varphi_4} \cos \theta_1 \sin \theta_2 \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

$$\vec{u}_2 = \begin{pmatrix} e^{i(-\varphi_4-\varphi_5)} \sin \theta_2 \sin \theta_3 - e^{i(\varphi_1+\varphi_2-\varphi_3)} \sin \theta_1 \cos \theta_2 \cos \theta_3 \\ e^{i\varphi_2} \cos \theta_1 \cos \theta_3 \\ -e^{i(-\varphi_1-\varphi_5)} \cos \theta_2 \sin \theta_3 - e^{i(\varphi_2-\varphi_3+\varphi_4)} \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos \theta_3 \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

$$\vec{u}_3 = \begin{pmatrix} -e^{i(\varphi_1-\varphi_3+\varphi_5)} \sin \theta_1 \cos \theta_2 \sin \theta_3 - e^{i(-\varphi_2-\varphi_4)} \sin \theta_2 \cos \theta_3 \\ e^{i\varphi_5} \cos \theta_1 \sin \theta_3 \\ e^{i(-\varphi_1-\varphi_2)} \cos \theta_2 \cos \theta_3 - e^{i(-\varphi_3+\varphi_4+\varphi_5)} \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3 \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

$$\theta_1, \theta_2, \theta_3 \in [0, \frac{\pi}{2}], \quad \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4, \varphi_5 \in [0, 2\pi). \quad (5.4)$$

扱いやすいように、 U_{ref} を $U \in \text{SU}(3)$ に変換しておく*1：

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot U_{\text{ref}} \cdot \begin{pmatrix} e^{i\vartheta_1} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\vartheta_2} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i(-\vartheta_1-\vartheta_2)} \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

$$\vartheta_1 = -\varphi_4, \quad \vartheta_2 = -\varphi_2 + \varphi_3 - \varphi_4 + \pi. \quad (5.6)$$

変換後、古い 8 個のパラメータ $\{\theta_1, \theta_2, \theta_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4, \varphi_5\}$ を、新しい 6 個のパラメータ $\{\theta, \varphi, \alpha_2, \alpha_3, \gamma, \delta\}$ に置き換える：

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{\pi}{2} - \theta_1, \quad \varphi = \frac{\pi}{2} - \theta_2, \quad \gamma = \theta_3, \\ \alpha_2 &= \varphi_1 - \varphi_4, \quad \alpha_3 = \varphi_3 - \varphi_4, \quad \delta = -\varphi_1 - \varphi_2 + \varphi_3 - \varphi_4 - \varphi_5. \end{aligned} \quad (5.7)$$

*1(5.5) 右辺の置換行列は、後の便宜上導入した。これも SU(3) の元であるから、一般性を失わない。

U の各列の $U(1)$ 位相を落とすことで、自由度を $SU(3)$ から $SU(3)/U(1)^2 = U(3)/U(1)^3$ に減らす。以上の手順で、 $U = (\vec{\Phi}_1 \vec{\Phi}_2 \vec{\Phi}_3) \in U(3)/U(1)^3$ の一般形が得られる：

$$\vec{\Phi}_1 = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ e^{i\alpha_2} \sin \theta \sin \varphi \\ e^{i\alpha_3} \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (5.8)$$

$$\vec{\Phi}_2 = \cos \gamma \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \varphi \\ e^{i\alpha_2} \cos \theta \sin \varphi \\ -e^{i\alpha_3} \sin \theta \end{pmatrix} + e^{i\delta} \sin \gamma \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ -e^{i\alpha_2} \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.9)$$

$$\vec{\Phi}_3 = \sin \gamma \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \varphi \\ e^{i\alpha_2} \cos \theta \sin \varphi \\ -e^{i\alpha_3} \sin \theta \end{pmatrix} - e^{i\delta} \cos \gamma \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ -e^{i\alpha_2} \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.10)$$

$$\theta, \varphi, \gamma \in [0, \frac{\pi}{2}], \quad \alpha_2, \alpha_3, \delta \in [0, 2\pi). \quad (5.11)$$

(5.11) の定義域は、古いパラメータ (5.4) から引き継がれたものである。 $\vec{\Phi}_\alpha$ は正規直交する ($\vec{\Phi}_\alpha^* \cdot \vec{\Phi}_{\alpha'} = \delta_{\alpha\alpha'}$)。パラメータの数が 6 個であることは、 $SU(3)/U(1)^2$ の物理的自由度の数と一致している。

3.3 節で、Néel 状態付近の低エネルギー有効理論は、場 $U(j, k) = (\vec{\phi}_1 \vec{\phi}_2 \vec{\phi}_3)^T \in SU(3)/U(1)^2$ で記述されることを見た。 $U(j, k)$ が (j, k) に依らないと仮定し、 $\vec{\phi}_\alpha$ に (5.8)–(5.10) の定ベクトル $\vec{\Phi}_\alpha$ を割り当てると、これは厳密な Néel 状態の一般形を与える。パラメータの値を変えることで、任意の Néel 状態を表現することができる。特に、パラメトリゼーション (5.8)–(5.10) には、物理的意味が明確という利点がある。これらは正規直交基底 $\{\vec{e}_A, \vec{e}_B, \vec{e}_C\}$ を用いて、 $\vec{\Phi}_1 = \vec{e}_A$ 、 $\vec{\Phi}_2 = \cos \gamma \vec{e}_B + e^{i\delta} \sin \gamma \vec{e}_C$ 、 $\vec{\Phi}_3 = \sin \gamma \vec{e}_B - e^{i\delta} \cos \gamma \vec{e}_C$ という形で表されている。すると、 $\{\theta, \varphi, \alpha_2, \alpha_3\}$ の組が副格子 1 の状態として A を決定し、残りの基底 B, C を作る。一方で $\{\gamma, \delta\}$ の組は、副格子 2, 3 に割り当てられる状態の、B, C 成分の混ざり方を規定すると解釈できる。

これらのパラメータは、 $SU(2)$ 反強磁性体における staggered 磁化ベクトル $\mathbf{m} \in SU(2)/U(1) = S^2$ ((2.39) を参照) の、 $SU(3)$ 反強磁性体への一般化を与える。

5.2 スキルミオンの構成方法

十分低エネルギーの配位では、 $\vec{\Phi}_\alpha$ は空間方向に対し、各 α ごとに滑らかに変化する。連続極限 $a \rightarrow 0$ において $\vec{\Phi}_\alpha(x, y, \tau)$ は微分可能であるから、対応する $U(1)$ ゲージ場を

$$A_\alpha = i\vec{\Phi}_\alpha^* \cdot d\vec{\Phi}_\alpha \quad (5.12)$$

と定義する。このとき xy 平面内のトポロジカルチャージ Q_α^{xy} は

$$Q_\alpha^{xy} = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2_{xy}} dA_\alpha \quad (5.13)$$

で与えられる。連続極限では $Q_\alpha^{xy} \in \mathbb{Z}$ であるから、場の連続的な変形で Q_α^{xy} は変化しない。(3.21) で形式的に $L = I_3$ ($\Leftrightarrow L_{12} = L_{13} = L_{23} = 0$) とおくと、 Q_α^{xy} は (4.11) に帰着する*2。

非自明なトポロジカルチャージ $Q_\alpha^{xy} \neq 0$ を持つ τ -一定面の配位を、スキルミオン (skyrmion) と呼び、 $Q_\alpha^{xy} \in \mathbb{Z}$ をスキルミオン数と呼ぶ。トンネル過程の具体例を得るためには、まずスキルミオン配位を構成する必要がある。

前節で述べた通り、(5.8)–(5.10) においてパラメータ $\{\theta, \varphi, \alpha_2, \alpha_3, \gamma, \delta\}$ を格子点 (j, k, α) に依らない定数としたものは、厳密な Néel 状態を表す。このとき $\vec{\Phi}_\alpha(j, k)$ が定数なので、(5.13) により、Néel 状態は明ら

*2 $\vec{\phi}$ ではなく、高エネルギー励起 L を積分する前の $\vec{\Phi}$ を用いる。スキルミオン自体は連続的な場で定義される概念である。トンネル過程を考えない限り、 $\vec{\Phi}_\alpha(j, k)$ は格子点の間を滑らかに補うことによって連続極限をとることができて、 xy 平面内のすべての場所で特異点は存在しない。

θ	φ	γ	α_2	α_3	δ	$(Q_1^{xy}, Q_2^{xy}, Q_3^{xy})$
$f(r)$	0	0	const.	$m\eta$	const.	$(-m, m, 0)$
$f(r)$	$\pi/2$	0	$l\eta$	const.	const.	$(l, -l, 0)$
$\pi/2$	$f(r)$	0	$l\eta$	const.	const.	$(l, 0, -l)$
0	0	$f(r)$	const.	const.	$n\eta$	$(0, n, -n)$
$f(r)$	$f(r)$	0	$l\eta$	$m\eta$	const.	$(l - m, m, -l)$
$f(r)$	$\pi/2$	$f(r)$	$l\eta$	$m\eta$	$n\eta$	$(l - m, n - l, m - n)$
$f(r)$	$f(r)$	$f(r)$	$l\eta$	$m\eta$	$n\eta$	$(l - m, n, -l + m - n)$

表 5.1: スキルミオン配位の例. 整数の組 (l, m, n) がトポロジカルチャージ Q_α^{xy} を決定する.

かに $Q_\alpha^{xy} = 0$ である. そこで, $\{\theta, \varphi, \alpha_2, \alpha_3, \gamma, \delta\}$ を格子点 $i \leftrightarrow (j, k, \alpha)$ に依存して滑らかに変化させる. 隣接する格子点 i, i' に対して $\theta(i') = \theta(i) + \mathcal{O}(a)$ (残りのパラメータについても同様) とすれば, a の 0 次では Néel 秩序 $U = (\vec{\Phi}_1 \vec{\Phi}_2 \vec{\Phi}_3) \in U(3)/U(1)^3$ が成立している. 一方で, a の 1 次では隣接する格子点の状態は直交せず, 元々の 1 格子点を持つスピン自由度 $\vec{\Phi}_\alpha(i) \in \mathbb{CP}^2$ に帰着する. このようにして, Néel 秩序に対する小さな変動を取り入れられる. 連続極限をとることで, パラメータは (x, y) に対する連続関数となる.

(5.8)–(5.10) から $U(3)/U(1)^3$ スキルミオンを構成する手順を述べる. 定義域 (5.11) に着目し, 6 個のパラメータのうち $\{2\theta, 2\varphi, 2\gamma\}$ を S^2 の極角, $\{\alpha_2, \alpha_3, \delta\}$ を S^2 の方位角と関連付ける. xy 平面の極座標を $x + iy = re^{i\eta}$ と表す^{*3}. $f(r)$ を, $f(0) = \frac{\pi}{2}$ と $f(\infty) = 0$ を滑らかに繋ぐ任意の関数 ($0 \leq f(r) \leq \frac{\pi}{2}$) とする.

- $\{\theta, \varphi, \gamma\}$ のいくつかを $f(r)$ または $\frac{\pi}{2} - f(r)$ を割り当てる,
- $\{\alpha_2, \alpha_3, \delta\}$ のいくつかを η の整数倍を割り当てる

ことにより, 原点を中心としたスキルミオン配位が得られる. ただし, 特異点が現れないようにするために, 次の条件を満たすように割り当てなければならない:

- $e^{iZ\eta}$ に比例する $\vec{\Phi}_\alpha$ の成分はすべて, $r \rightarrow 0, \infty$ において 0 か絶対値 1 になる.

上記の構成方法は, あらゆる $U(3)/U(1)^3$ スキルミオン全体を覆い尽くすものではないが, 多種多様なスキルミオンを作り出すことができる. いくつかの例を, 表 5.1 に示す. 例として, 表の 1 番上のスキルミオンは, 具体的に次の形をしている:

$$\vec{\Phi}_1 = \begin{pmatrix} \sin f(r) \\ 0 \\ e^{im\eta} \cos f(r) \end{pmatrix}, \quad \vec{\Phi}_2 = \begin{pmatrix} \cos f(r) \\ 0 \\ -e^{im\eta} \sin f(r) \end{pmatrix}, \quad \vec{\Phi}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

特異性が現れないことを確認しておく. $r = 0$ において

$$\vec{\Phi}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\Phi}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -e^{im\eta} \end{pmatrix}, \quad \vec{\Phi}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

であり, 一見すると $\vec{\Phi}_2$ の値を $r = 0$ で決められないように思われるが, この特異性は $U(1)$ ゲージ変換 $\vec{\Phi}_2(r = 0) = e^{-im\eta} \vec{\Phi}_2(r = 0) = (0, 0, 1)^T$ で消すことができる. $r \rightarrow \infty$ についても同様にして, 特異性が現れないことを確かめられる. ところで, この配位は $\vec{\Phi}_3$ が定ベクトルなので, 三角格子の副格子 $\alpha = 3$ を無視した六角格子 (これは bipartite) 上に, $SU(2)$ スピンの hedgehog 配位が実現していると解釈できる. 実際に, 等価な staggered 磁化ベクトルは $\mathbf{m} = (\sin(2f) \cos(m\eta), \sin(2f) \sin(m\eta), \cos(2f)) \in S^2$ で表され

^{*3}無限遠 $r \rightarrow \infty$ は, 1 点コンパクト化する.

る。このように、表 5.1 の一部には、SU(2) スピンの hedgehog 配位の、SU(3) への埋め込みになっているものがある。

トポロジカルチャージは、(5.13) から直接計算できる。(5.8)–(5.10) のパラメータを用いて \mathcal{A}_α を表すと、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathcal{A}_1 \\ \mathcal{A}_2 \\ \mathcal{A}_3 \end{pmatrix} = & - \left[d\delta \begin{pmatrix} 0 \\ + \\ - \end{pmatrix} \sin^2 \gamma + d\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ + \\ - \end{pmatrix} 2 \sin \delta \sin \gamma \cos \gamma \cos \theta \right. \\ & + d\alpha_2 \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ - \\ + \end{pmatrix} \sin^2 \gamma \cos^2 \theta \sin^2 \varphi + \begin{pmatrix} + \\ - \\ 0 \end{pmatrix} \sin^2 \theta \sin^2 \varphi \right. \\ & \quad \left. + \begin{pmatrix} 0 \\ - \\ + \end{pmatrix} \cos^2 \gamma \cos^2 \varphi + \begin{pmatrix} 0 \\ - \\ + \end{pmatrix} 2 \cos \delta \sin \gamma \cos \gamma \cos \theta \sin \varphi \cos \varphi \right\} \\ & \left. + d\alpha_3 \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ - \\ + \end{pmatrix} \sin^2 \gamma \sin^2 \theta + \begin{pmatrix} - \\ + \\ 0 \end{pmatrix} \sin^2 \theta \right\} \right]. \end{aligned} \quad (5.16)$$

これらを (5.13) に代入すれば、

$$Q_1^{xy} = \frac{1}{2\pi} \int dx dy \left[(\partial_x \alpha_2) \cdot \partial_y (\sin^2 \theta \sin^2 \varphi) - (\partial_x \alpha_3) \cdot \partial_y (\sin^2 \theta) - (x \leftrightarrow y) \right], \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} Q_2^{xy} = & \frac{1}{2\pi} \int dx dy \left[2(\partial_x \varphi) \cdot \partial_y (\sin \delta \sin \gamma \cos \gamma \cos \theta) + (\partial_x \delta) \cdot \partial_y (\sin^2 \gamma) + (\partial_x \alpha_3) \cdot \partial_y (\cos^2 \gamma \sin^2 \theta) \right. \\ & \left. + (\partial_x \alpha_2) \cdot \partial_y (-2 \cos \delta \sin \gamma \cos \gamma \sin \varphi \cos \varphi + \cos^2 \gamma \cos^2 \theta \sin^2 \varphi + \sin^2 \gamma \cos^2 \varphi) - (x \leftrightarrow y) \right], \end{aligned} \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned} Q_3^{xy} = & \frac{1}{2\pi} \int dx dy \left[-2(\partial_x \varphi) \cdot \partial_y (\sin \delta \sin \gamma \cos \gamma \cos \theta) + (\partial_x \delta) \cdot \partial_y (\cos^2 \gamma) + (\partial_x \alpha_3) \cdot \partial_y (\sin^2 \gamma \sin^2 \theta) \right. \\ & \left. + (\partial_x \alpha_2) \cdot \partial_y (2 \cos \delta \sin \gamma \cos \gamma \sin \varphi \cos \varphi + \sin^2 \gamma \cos^2 \theta \sin^2 \varphi + \cos^2 \gamma \cos^2 \varphi) - (x \leftrightarrow y) \right] \end{aligned} \quad (5.19)$$

を得る。これらの表式より、各パラメータが (j, k) に依存するが α に依存しない場合、すなわち unit cell 内を直交に保ちながら x, y 方向に状態が変化する場合にも、 $\sum_\alpha Q_\alpha^{xy} = 0$ であることが分かる。表 5.1 には、構成したスキルミオンのトポロジカルチャージも示してある。その際必要な (5.17)–(5.19) の積分は、解析的に実行できる。

5.3 トンネル過程の Berry 位相

4.2 節で指摘したように、連続場の理論でスキルミオン数が変化するトンネル過程を記述するためには、モノポールを理論に追加する必要がある。モノポールを含む理論では、格子の連続極限として得られた有効作用 (3.26) には存在しなかった非自明な項が、Berry 位相 S_B から現れることがある。SU(2) 正方格子に対する研究 [7, 8] に倣い、格子点上でトンネル過程の例を構成し、このときの Berry 位相を具体的に計算する。

5.3.1 トンネル過程の具体例

スキルミオンは、(5.8)–(5.10) のパラメトリゼーションで表すことができる。トンネル過程を記述するには、パラメータ $\{\theta, \varphi, \alpha_2, \alpha_3, \gamma, \delta\}$ を、空間方向に加えて虚時間方向にも変化させればよい。Berry 位相は

U(1) ゲージ場 (5.16) を用いて

$$S_B = ip \sum_{j,k} \sum_{\alpha=1}^3 \Omega(j, k, \alpha), \quad (5.20)$$

$$\Omega(j, k, \alpha) = \int_0^\beta (-\mathcal{A}_{\alpha,\tau}(j, k)) d\tau \quad (5.21)$$

と表される. 以下では空間座標 $\vec{r} = (x, y)$ と, 対応する格子点のラベル (j, k, α) を適切に読み替えることにする. $\vec{\Phi}_\alpha$ のゲージ変換は, (5.21) において τ の全微分項を生じることとなり, その結果 S_B を $2\pi i\mathbb{Z}$ だけ変えることになるので, $\exp(-S_B)$ に影響しない.

SU(3) スピンの場合も SU(2) スピンと同様に, Berry 位相はトポロジカル量であり, トンネル過程の詳細に依存しないと推測される. トンネル過程の具体例として, $\tau = 0$ で Néel 状態が実現している所から, 時空点 (\vec{r}_1, T_1) のモノポールによって, チャージ (Q_1, Q_2, Q_3) を持つスキルミオンに移り変わる. その後, 時空点 (\vec{r}_2, T_2) のモノポールによってスキルミオンが消滅し, $\tau = \beta$ で $\tau = 0$ と等しい Néel 状態に戻る, という過程を調べることにする. すなわち $\tau = 0 \rightarrow \beta$ の間に, トポロジカルチャージは

$$\begin{pmatrix} Q_1^{xy}(\tau) \\ Q_2^{xy}(\tau) \\ Q_3^{xy}(\tau) \end{pmatrix} : \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

と変化する. 連続極限では Q_α^{xy} は整数値しかとることができないので, 時刻 $\tau = T_1, T_2$ で値が不連続に変化する. しかし格子点上だけの離散和としてチャージを求めた場合には, トンネル過程の間に緩やかに変化する. また, 一般にモノポールが存在する時空点ではスピン状態を定義できないので, モノポールは格子点以外の場所に存在するものと定める.

ここでは表 5.1 の下から 2 番目に示したスキルミオンを使用して, 計算を行う. $(Q_1, Q_2, Q_3) = (\ell - m, n - \ell, m - n)$ と対応する. $\ell, m, n \in \mathbb{Z}$ を調整することによって, 任意の Q_α^{xy} を持つスキルミオンを作ることができる. $\sum_\alpha Q_\alpha^{xy} = 0$ なので, このうち 2 つが独立なチャージである. 5.2 節に基づき,

$$\theta = \gamma = F(\vec{r}, \tau), \quad \varphi = \frac{\pi}{2}, \quad (\alpha_2, \alpha_3, \delta) = (\ell \eta(\vec{r}, \tau), m \eta(\vec{r}, \tau), n \eta(\vec{r}, \tau)) \quad (5.23)$$

とパラメータを用意する. スピンコヒーレント状態 (5.8)–(5.10) の具体形は

$$\vec{\Phi}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\ell\eta} \sin F \\ e^{im\eta} \cos F \end{pmatrix}, \quad \vec{\Phi}_2 = \begin{pmatrix} e^{in\eta} \sin F \\ e^{i\ell\eta} \cos^2 F \\ -e^{im\eta} \sin F \cos F \end{pmatrix}, \quad \vec{\Phi}_3 = \begin{pmatrix} -e^{in\eta} \cos F \\ e^{i\ell\eta} \sin F \cos F \\ -e^{im\eta} \sin^2 F \end{pmatrix} \quad (5.24)$$

であり, 対応する U(1) ゲージ場 (5.16) は

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A}_1 \\ \mathcal{A}_2 \\ \mathcal{A}_3 \end{pmatrix} = -d\eta \left[\sin^2 F \begin{pmatrix} \ell - m \\ -\ell + n + m \\ -n \end{pmatrix} + \sin^4 F \begin{pmatrix} 0 \\ -m \\ m \end{pmatrix} + \sin^2 F \cos^2 F \begin{pmatrix} 0 \\ -\ell \\ \ell \end{pmatrix} \right] \quad (5.25)$$

となる.

(5.22) のトンネル過程は, 関数 F, η を次のように選ぶことで実現できる:

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad 0 \leq \tau < T_1 : & \quad \begin{cases} F(\vec{r}, \tau) = \frac{\tau}{T_1} f(r_1(\vec{r})), \\ \eta(\vec{r}, \tau) = \eta_1(\vec{r}), \end{cases} \\ \text{(ii)} \quad T_1 \leq \tau < T_2 : & \quad \begin{cases} F(\vec{r}, \tau) = f(r_{12}(\vec{r}, \tau)), \\ \eta(\vec{r}, \tau) = \eta_{12}(\vec{r}, \tau), \end{cases} \\ \text{(iii)} \quad T_2 \leq \tau < T_3 : & \quad \begin{cases} F(\vec{r}, \tau) = \frac{T_3 - \tau}{T_3 - T_2} f(r_2(\vec{r})), \\ \eta(\vec{r}, \tau) = \eta_2(\vec{r}), \end{cases} \\ \text{(iv)} \quad T_3 \leq \tau \leq \beta : & \quad \begin{cases} F(\vec{r}, \tau) = 0, \\ \eta(\vec{r}, \tau) = \eta_2(\vec{r}) + \frac{\tau - T_3}{\beta - T_3} (\eta_1(\vec{r}) - \eta_2(\vec{r})). \end{cases} \end{aligned} \quad (5.26)$$

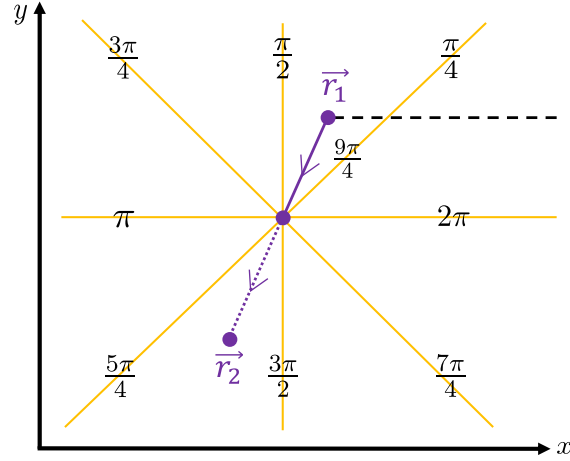


図 5.1: $\eta_{12}(\vec{r}, \tau)$ の主値の定義. 時刻 T_1 で位置 \vec{r}_1 に生成したスキルミオンが, 位置 \vec{r}_2 まで移動した後に, 時刻 T_2 で消滅する. 図では, $T_1 < \tau < T_2$ のある時刻 τ における $\eta_{12}(\vec{r}, \tau)$ の値を示してある. 黒色点線と紫色実線に 2π 不連続が存在する. 前者は T_1 の時点で存在するブランチカットを表し, この線の取り方は最終結果に影響しない. 一方で後者は各地点で η_{12} が滑らかに変化することから生じるものであり, discontinuity line として Berry 位相に寄与する. 文献 [60] より引用.

ただし, $f(r)$ は $f(0) = \pi/2$ と $f(\infty) = 0$ を滑らかに繋ぐ任意の関数である. $r_{1,2,12}, \eta_{1,2,12}$ は

$$r_1 e^{im} = (x - x_1) + i(y - y_1), \quad r_2 e^{im_2} = (x - x_2) + i(y - y_2), \quad (5.27)$$

$$r_{12} e^{im_{12}} = \left(x - x_1 - \frac{\tau - T_1}{T_2 - T_1} (x_2 - x_1) \right) + i \left(y - y_1 - \frac{\tau - T_1}{T_2 - T_1} (y_2 - y_1) \right) \quad (5.28)$$

と定義する. η_{12} の主値は, 時間発展に対して常に連続的に変化するように定める. 具体的な値を, 図 5.1 に示す. この要求のために, τ 一定の断面にて η_{12} に 2π 不連続線が存在することになる (図 5.1 の紫色実線). これが後述の discontinuity line の概念を生む. ステップ (iv) は, $\tau = 0, \beta$ で周期境界条件を満たすために必要である^{*4}.

以上のトンネル過程の具体例について, Berry 位相を計算する. 今の場合, $\dot{\eta} = d\eta/d\tau \neq 0$ となるステップ (ii) からのみ寄与がある. (5.25) より,

$$\Omega(j, k, \alpha) = \int_{T_1}^{T_2} d\tau \dot{\eta}_{12} \left[\sin^2 f(r_{12}) \begin{pmatrix} \ell - m \\ -2\ell + n + m \\ \ell - n \end{pmatrix} + \sin^4 f(r_{12}) \begin{pmatrix} 0 \\ \ell - m \\ m - \ell \end{pmatrix} \right] \quad (5.29)$$

Berry 位相を求めるには, $r_{12} \simeq 0$ の特異的な部分だけに注目して, 積分を評価すれば十分である. $\sin^2 f(r_{12}) \simeq \sin^2 f(0) = 1$ と近似して,

$$\begin{aligned} \Omega(j, k, \alpha) &= \begin{pmatrix} \ell - m \\ n - \ell \\ m - n \end{pmatrix} \int_{T_1}^{T_2} d\tau \dot{\eta}_{12}(\vec{r}, \tau) + (\text{reg.}) \\ &= \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_3 \end{pmatrix} \left[\arctan \frac{y - y_2}{x - x_2} - \arctan \frac{y - y_1}{x - x_1} \right] + (\text{reg.}) \end{aligned} \quad (5.30)$$

^{*4}ここで選んだ具体例 (5.23) では, $F = 0$ のとき $\mathcal{A}_\alpha = 0$ となるので, ステップ (iv) は Berry 位相に寄与しない. しかしながら, 一般にはステップ (iv) を無視すると正しい結果が得られない. 例えば, $(\theta, \varphi, \gamma, \alpha_2, \alpha_3, \delta) = (\frac{\pi}{2}, 0, 0, \eta, 0, 0)$ と $(\frac{\pi}{2}, f, 0, \eta, 0, 0)$ の間のトンネル過程を考えると, ステップ (iv) から有限の寄与がある.

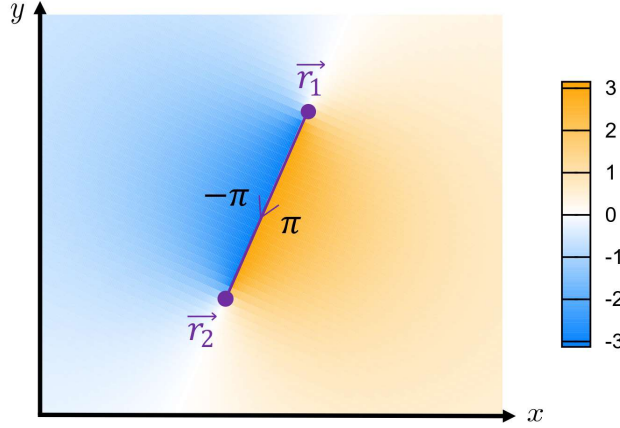


図 5.2: $\left[\arctan \frac{y-y_2}{x-x_2} - \arctan \frac{y-y_1}{x-x_1} \right]$ の値. 紫色の線分で示した \vec{r}_1 と \vec{r}_2 を結ぶ線分が, discontinuity line である. スキルミオン中心が移動する向きに対して, discontinuity line の左側の値は右側の値よりも 2π 大きい. 文献 [60] より引用.

を得る^{*5}. (reg.) とは, 分枝を持たない正則な項を意味する. 関数 $f(r)$ を変化させると, \arctan の部分は変わらず, 正則部分のみが変化する. (5.30) の正則部分は, (x, y) に依らない共通の係数が $\alpha = 1, 2, 3$ で和をとると 0 になるので, $a \rightarrow 0$ の連続極限で S_B に寄与しない^{*6}.

Discontinuity line は, スキルミオン中心の軌跡を xy 面に射影したものとして定義される [7]. 今の例では, $\vec{r}_1 = (x_1, y_1)$ と $\vec{r}_2 = (x_2, y_2)$ を結ぶ線分が相当する. 両端のモノポール以外の特異性はゲージ変換で除く事ができるので, $T_1 < \tau < T_2$ において状態 $\vec{\Phi}_\alpha$ は, スキルミオン中心でも適切に定義できる. しかし $[\arctan \dots]$ の項は, $\eta_{12}(\vec{r}, \tau)$ が滑らかに時間変化するように主値を定義したことに伴い, 図 5.2 に示すように 2π だけ値が飛ぶブランチカットが現れる. これが discontinuity line である. (5.21) の全格子点にわたる和を実行することで, Berry 位相が求められる. $[\arctan \dots]$ の不連続部分が, 打ち消されることなく S_B に寄与する.

5.3.2 Berry 位相の図形的規則

以下では, $SU(2)$ 正方格子に対して提案された, discontinuity line を用いた Berry 位相の計算規則 [7] を, $SU(3)$ 三角格子に対して導出する. モノポールを格子の中心に限定した場合, トンネル過程の Berry 位相を計算する簡便な規則が得られる. 規則から求めた値は, 数値計算の結果と一致する. 導出の一部は厳密な証明ではないものの, Berry 位相を直感的に解釈することに役立つ.

準備として, 格子点の和 (5.20), (5.30) を格子の和に書き直す:

$$\begin{aligned} S_B &= \frac{ip}{6} \sum_{\Delta} \left(\Omega(\Delta, 1) + \Omega(\Delta, 2) + \Omega(\Delta, 3) \right) \\ &= \frac{ip}{6} \sum_{\Delta} \sum_{(x,y,\alpha) \in \Delta} Q_\alpha \left[\arctan \frac{y-y_2}{x-x_2} - \arctan \frac{y-y_1}{x-x_1} \right]. \end{aligned} \quad (5.31)$$

ここで Δ とは, 三角格子の最小構成要素である一辺 a の正三角形を表し, 頂点の格子点 $(j, k, \alpha) \in \Delta$ を $\Omega(\Delta, \alpha) = \Omega(j, k, \alpha)$ と対応させる. 1 個の格子点は 6 個の三角形 Δ に共有されるので, 係数に $1/6$ が現れ

^{*5}もしくは $f(r) = \frac{1}{2} \arccos \left(\frac{2(r/r_0)^2 - 1}{2(r/r_0)^2 + 1} \right)$ と選ぶと, $\sin^2 f(r) = \frac{1}{2(r/r_0)^2 + 1}$ となり, 積分を解析的に実行できる. r_0 はスキルミンの大きさを指定する定数である. 結果はやはり (5.30) の形となる.

^{*6}一般に, 正則部分の係数は Q_α でまとめられるとは限らない. それでも $\alpha = 1, 2, 3$ で和をとると消えることが, (5.16) から保証されている.

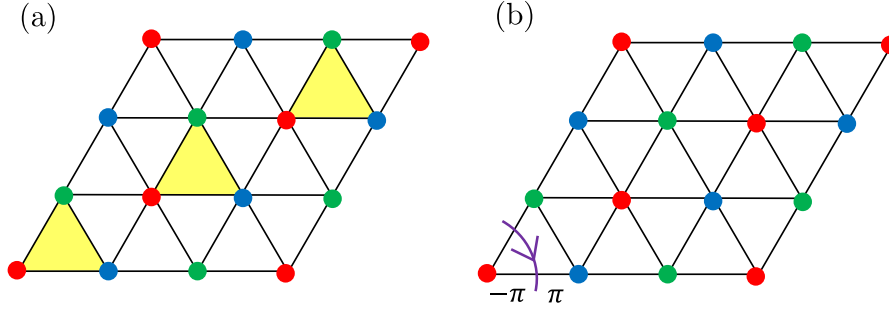


図 5.3: Berry 位相の図形的規則の説明図. 隣接する 18 個の三角形を組にして計算すると, Ω の滑らかに変化する部分が打ち消される.

る. 格子とモノポールとの位置関係で場合分けする.

(I) 格子が \vec{r}_1, \vec{r}_2 から十分離れており, discontinuity line と交わらないとき

格子 Δ として, 図 5.3(a) にて黄色の影で示したの向きの 1 個の三角形に注目する. Δ とその周辺で, $g(\vec{r}) = \left[\arctan \frac{y-y_2}{x-x_2} - \arctan \frac{y-y_1}{x-x_1} \right]$ は微分可能な関数である. 格子中心の座標を \vec{r}_Δ とおいて Taylor 展開すると, 1 個の Δ からの寄与は^{*7}

$$\begin{aligned} \Delta S_B &= \frac{ip}{6} \left[Q_1 \cdot g \left(\vec{r}_\Delta - \frac{1}{2}\hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{6}\hat{y} \right) + Q_2 \cdot g \left(\vec{r}_\Delta + \frac{\sqrt{3}}{3}\hat{y} \right) + Q_3 \cdot g \left(\vec{r}_\Delta + \frac{1}{2}\hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{6}\hat{y} \right) \right] \\ &= \frac{ip}{6} \left[(Q_1 + Q_2 + Q_3)g + \frac{a}{2}(-Q_1 + Q_3)\partial_x g + \frac{\sqrt{3}a}{6}(-Q_1 + 2Q_2 - Q_3)\partial_y g + \mathcal{O}(a^2) \right] (\vec{r}_\Delta) \end{aligned} \quad (5.32)$$

となり, $\sum_\alpha Q_\alpha = 0$ なので初項は消えるが, $\mathcal{O}(a^1)$ が残る. そこで図 5.3(a) のように, 隣接する 18 個の格子の和をひとまとめにして展開すると,

$$\frac{ip}{6} \sum_{(x,y,\alpha) \in 18\Delta} Q_\alpha \cdot g(\vec{r}) = \mathcal{O}(a^3) \quad (5.33)$$

が示される. 全格子の和は $\sum_\Delta \sim \mathcal{O}(a^{-2})$ であるから, 連続極限 $a \rightarrow 0$ で (I) の格子は Berry 位相に寄与しない.

(5.30) における正則部分 (reg.) も, 微分可能かつ α に依存する係数が和をとると 0 なので, 同様の理由で Berry 位相に寄与しない. モノポールの近傍で, \arctan の項は隣接する頂点間の差が $\mathcal{O}(a^0)$ となるので, 上記の議論を適用できない. 一方で正則部分はモノポールの近傍でも差が $\mathcal{O}(a^1)$ のままなので, すべての格子で無視してよい.

(II) 格子が \vec{r}_1, \vec{r}_2 から十分離れており, discontinuity line と交わるとき

(I) の結果を利用するために, 引き続き 18 個の格子を組にして考える. \arctan の滑らかな変化は (I) の議論により寄与しないので, discontinuity line の存在による 2π 不連続のみを考慮すればよい. Discontinuity line の左側に位置する頂点における $g(\vec{r})$ の値は, $a \rightarrow 0$ の極限で, 右側に比べてちょうど 2π だけ大きい. 格子 Δ の全体が discontinuity line の左側に位置しているとき, その 1 格子からの新たな寄与は

$$\Delta S_B - \Delta S_B^{(I)} = \frac{ip}{6} (Q_1 + Q_2 + Q_3) \cdot 2\pi = 0 \quad (5.34)$$

であり, Berry 位相は生じない. 非自明な寄与は, discontinuity line が貫通する格子 Δ から生じる. 例えば図 5.3(b) の例では, 頂点 $\alpha = 1$ だけが頂点 $\alpha = 2, 3$ よりも 2π 小さくなるので, (I) と比較した新たな寄

^{*7}ここで \hat{x}, \hat{y} は, x, y 軸方向の大きさ a のベクトルとする.

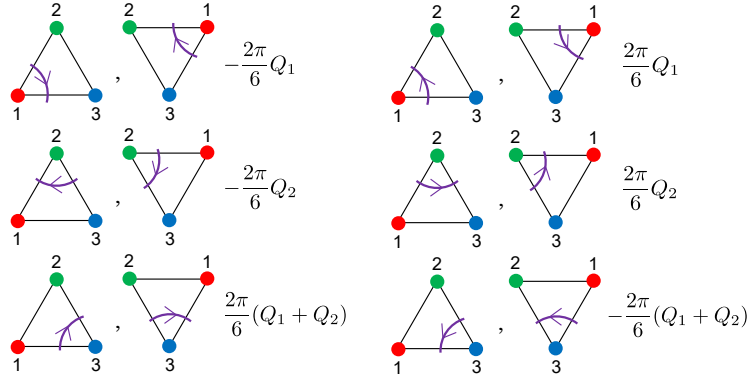


図 5.4: discontinuity line が格子を貫通する場合の、1 格子からの Berry 位相 S_B/ip への寄与. $g(\vec{r}) = \left[\arctan \frac{y-y_2}{x-x_2} - \arctan \frac{y-y_1}{x-x_1} \right]$ の値は、discontinuity line の左側に位置する頂点では、右側の頂点よりも 2π 大きい. $Q_1 + Q_2 + Q_3 = 0$ を用いて Q_3 を消去してある. 文献 [60] より引用.

与は

$$\Delta S_B - \Delta S_B^{(I)} = \frac{ip}{6} \cdot (-Q_1) \cdot 2\pi = -ip \frac{2\pi}{6} Q_1 \quad (5.35)$$

と求められる. 他の格子についても同様に計算し, discontinuity line が貫通する格子 1 個あたりの Berry 位相への寄与を, 図 5.4 に示す. ここでは, discontinuity line やモノポールは必ずしも格子の中心に位置していなくてもよい.

(III) 格子の中心にモノポールが位置するとき

本来モノポールは格子点上を除く任意の座標に存在することが許されているが, (III) では「モノポールは格子の中心に存在する」という仮定を加える. 例として, 図 5.5 左上の向きに格子 Δ の中心でスキルミオンが消滅する場合に, Δ からの Berry 位相への寄与を計算する. スキルミオンの生成位置は $\vec{r}_1 \rightarrow \infty$ として無視する. 各頂点での \arctan の値を正確に求めることができ,

$$\frac{1}{6} \sum_{\alpha=1}^3 \Omega(\Delta, \alpha) = \frac{1}{6} \left(\frac{2\pi}{3} Q_1 + 0 \cdot Q_2 + \left(-\frac{2\pi}{3} \right) Q_3 \right) = \frac{2\pi}{9} Q_1 + \frac{2\pi}{18} Q_2 \quad (5.36)$$

となる. 他の種類の三角形についても同様にして, 図 5.5 の規則を得る. スキルミオンが生成する場合は, 消滅する場合の寄与の符号を反転させたものになる.

(IV) モノポールの周辺の格子

モノポールの周辺では, 隣接する格子点で $g(\vec{r})$ の差が $\mathcal{O}(a^0)$ となるので, (I), (II) の議論が適用できない. Discontinuity line が通過するかに関係なく, モノポールの周辺の格子は Berry 位相に有限の寄与を持っている. 各格子からの寄与は (5.31) で与えられるが, この寄与を解析的に議論することは難しい.

それにもかかわらず, 図 5.4 と図 5.5 と比較すると, 格子を貫通する場合と, 同一格子内で消滅と生成の両方が起こる場合で, 寄与が等しいことが分かる. 例えば, 図 5.4 左上の格子の寄与 (5.35) は

$$-\frac{2\pi}{6} Q_1 = + \left(-\frac{2\pi}{18} Q_1 + \frac{2\pi}{18} Q_2 \right) - \left(\frac{2\pi}{9} Q_1 + \frac{2\pi}{18} Q_2 \right) \quad (5.37)$$

と分解できる. 右辺第 1 項は図 5.5 左下の図形に, 右辺第 2 項は図 5.5 左上の図形の逆過程に, それぞれ対応している. このことから, モノポールの周辺の格子についても, モノポールから十分離れている格子と全く同じ規則で Berry 位相を求めることができると予想される. 5.3.4 節で示すように, (5.30) の数値計算によると, この予想は実際に正しい. 結局 (IV) の場合も, discontinuity line が貫通する格子だけに注目し, (II) と同じように図 5.4 の規則を適用すればよい. モノポール周辺の格子が持つ $g(\vec{r})$ に由来する寄与

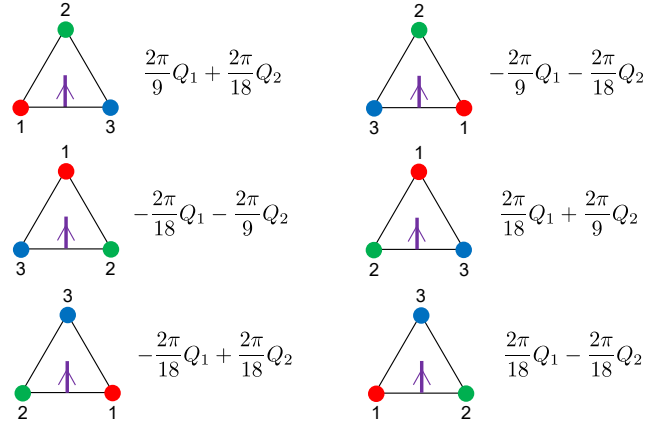


図 5.5: Discontinuity line の終点が格子の中心に位置する場合の, 1 格子 Δ からの Berry 位相 S_B/ip への寄与. Discontinuity line や三角形の向きが異なる場合にも, 上記の図形を回転させて適用できる. Discontinuity line の始点が格子の中心に位置する場合は, すべての符号を反転させる. 文献 [60] より引用.

$$\begin{aligned}
 \alpha = 1 \quad \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \quad \Delta S_B &= ip \left(-\frac{2\pi}{9}Q_1 + \frac{2\pi}{9}Q_2 \right) \\
 2 \quad \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \quad \Delta S_B &= ip \left(+\frac{2\pi}{9}Q_1 - \frac{2\pi}{9}Q_2 \right) \\
 1 \quad \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \quad \Delta S_B &= ip \left(-\frac{4\pi}{9}Q_1 - \frac{2\pi}{9}Q_2 \right) \\
 3 \quad \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \quad \Delta S_B &= ip \left(+\frac{4\pi}{9}Q_1 + \frac{2\pi}{9}Q_2 \right) \\
 2 \quad \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \quad \Delta S_B &= ip \left(-\frac{2\pi}{9}Q_1 - \frac{4\pi}{9}Q_2 \right) \\
 3 \quad \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \quad \Delta S_B &= ip \left(+\frac{2\pi}{9}Q_1 + \frac{4\pi}{9}Q_2 \right)
 \end{aligned}$$

図 5.6: Berry 位相を求める図形的な規則. Discontinuity line が辺を通過するごとに, 対応する因子 ΔS_B を足し上げることで, トンネル過程 (5.22) の Berry 位相 S_B が得られる. 文献 [60] より引用.

は, 全格子についての和で打ち消される.

以上でモノポールを格子の中心に限定したときの, Berry 位相を計算する図形的規則が出揃ったが, これらはより簡潔な規則にまとめられる. まず, 前述の通り図 5.4 の寄与は, 貫通する discontinuity line を中央で分割することで, 図 5.5 の寄与 2 つ分の和として表すことができる. その前提の下で, 図 5.5 の共通の辺に discontinuity line が出入りする図形を組み合わせることにより, discontinuity line が 1 辺を通過するときの寄与として矛盾なく表すことができる. 得られた規則を図 5.6 に示す. Discontinuity line が辺を通過するごとに, 対応する因子 ΔS_B を加算することで, Berry 位相が求められる:

$$S_B = \sum_{\text{edges}} \Delta S_B. \quad (5.38)$$

特に図 5.6 からは, discontinuity line の連続変形で, $\exp(-S_B)$ は変化しないことが読み取れる. これは discontinuity line の始点と終点, つまりモノポールの位置のみでトンネル過程の Berry 位相が決まることを意味している. 図 5.6 に基づき, 始点を固定して終点の位置をずらしたときの Berry 位相 S_B の変化を調べると, 図 5.7 が得られる. ここでは, 空間座標の関数 $\xi(\vec{r})$ を, 始点 \vec{r}_1 を左下の三角形中心に固定し, 終

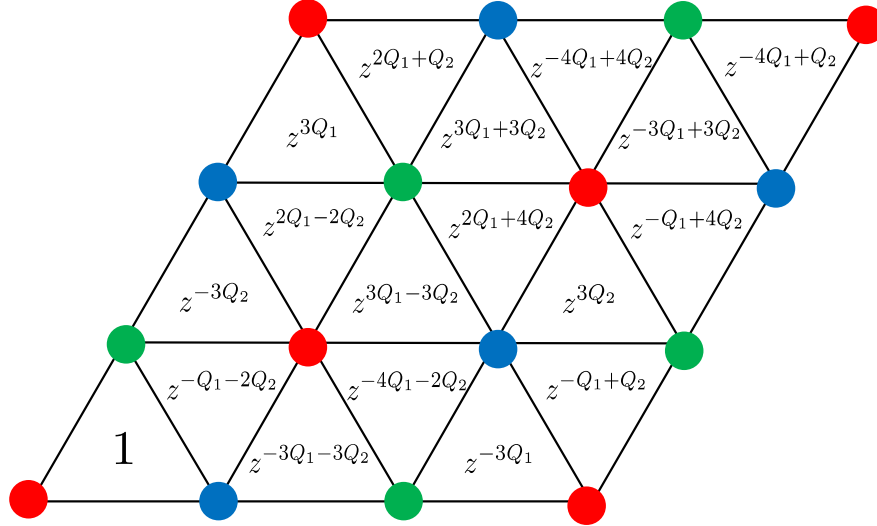


図 5.7: (5.39) で Berry 位相を計算するときの因子 $\xi(\vec{r})$. 隣接する 18 個の三角形で周期的な値となる. モノポールの位置は格子の中心に限る. $z = \exp(2\pi i/9)$ は 1 の 9 乗根である. 文献 [60] より引用.

点 $\vec{r}_2 = \vec{r}$ を変化させたときの, $p = 1$ における $\exp(-S_B)$ の値として定義してある. $\exp(-S_B)$ は 1 の 9 乗根 $z = \exp(2\pi i/9)$ のべき乗の値をとること, 隣接する 18 個の格子について周期的であることが分かる. 逆に終点を固定して始点をずらす場合には, この因子の逆数が $\exp(-S_B)$ として現れる. また, 一般の $p \in \mathbb{N}$ に対しては, S_B が p 倍になるので, $p = 1$ の因子 $\xi(\vec{r})$ を p 乗すればよい. よって, Berry 位相は図 5.7 の因子 $\xi(\vec{r})$ を用いて

$$e^{-S_B} = \left[\frac{\xi(\vec{r}_2)}{\xi(\vec{r}_1)} \right]^p \quad (5.39)$$

と求められる. 図 5.6, 5.7 の規則は, モノポールが格子の中心に存在する場合にのみ成立することに注意する. このようにして, SU(2) 正方格子に対して導かれた結果 [7] (図 2.2 を参照) が, SU(3) 三角格子では図 5.7 に拡張される.

5.3.3 Destructive Interference

ここまでで, トンネル過程からは非自明な Berry 位相が生じること, そして Berry 位相はモノポールの位置から決まるトポロジカルな量であることを見た. Berry 位相は格子定数 a のスケールで周期的に変化するので, スキルミオンが隣接する格子で生成または消滅するようなトンネル過程を考えると, それらは分配関数に対して, 運動項 S_{eff} はほぼ等しいが, 全く異なる Berry 位相 S_B を持つ. すると, 分配関数の状態和 (Tr) を実行すると, 互いの寄与が相殺して分配関数への寄与が消えることが起こる. この現象は, destructive interference と呼ばれる [7].

以下では $p = 1$ として, 引き続きモノポールの位置を三角形の中心に限定する. 図 5.7 には, スキルミオンが左下三角形で生成すると固定し, 消滅地点を変化させたときの $\exp(-S_B)$ の値が書かれている. Berry 位相の最小繰り返し単位である 18 個の三角形に, 左下から順に $s = 1, \dots, 18$ とラベルを付け, 各格子の中心点の空間座標を \vec{X}_s^c と表すことにする. チャージ (Q_1, Q_2) のスキルミオンが \vec{r}_1 で生成した後に \vec{r}_2 で消滅するトンネル過程の Berry 位相を, 簡易的に $S_B(\vec{r}_1; \vec{r}_2)$ と書く. 生成地点を左下三角形中心に固定 ($\vec{r}_1 = \vec{X}_1^c$) したときに, $\{X_s^c\}_{s=1, \dots, 18}$ でスキルミオンが消滅したときの因子 $\exp(-S_B)$ の平均値を W_c と定めると,

$$\begin{aligned} W_c &= \frac{1}{18} \sum_{s=1}^{18} \exp[-S_B(\vec{X}_1^c; \vec{X}_s^c)] \\ &= \frac{1}{18} (1 + z^{3Q_1} + z^{-3Q_1})(1 + z^{3Q_2} + z^{-3Q_2})(1 + z^{-Q_1-2Q_2}) \end{aligned} \quad (5.40)$$

となっている。ただし、 $z = \exp(2\pi i/9)$ は 1 の 9 乗根である。 $1 + z^3 + z^{-3} = 0$ なので、 $Q_1, Q_2 \in 3\mathbb{Z}$ でない限り、 W_c は 0 になる。 スキルミオンの生成位置を固定し、 消滅位置を 18 通りに移動させた過程からの、 分配関数への状態和を考える。 運動項 S_{eff} の差は $\mathcal{O}(a)$ なので無視すると、

$$\sum_{s=1}^{18} \exp \left[-S_B(\vec{X}_1^c; \vec{X}_s^c) - S_{\text{eff}} \right] \simeq 18W_c \cdot \exp(-S_{\text{eff}}) \quad (5.41)$$

となるので、 Q_α が 3 の倍数で変化するトンネル過程のみが、 分配関数 Z に寄与する。

$p > 1$ の場合に一般化するには、 (Q_1, Q_2) を (pQ_1, pQ_2) に読み替える。 分配関数 Z に寄与を持つための条件は、 $pQ_1, pQ_2 \in 3\mathbb{Z}$ と表される。 つまり、

- $p \bmod 3 \neq 0$ のとき、 Q_α が 3 の倍数で変化するトンネル過程のみが Z に寄与する、
- $p \bmod 3 = 0$ のとき、 Q_α が任意の整数で変化するトンネル過程がすべて Z に寄与する

ことが分かる。

5.3.4 数値計算に基づく解析

5.3.2, 5.3.3 節では、 モノポールの位置を格子の中心に限定して、 Berry 位相を計算し、 経路の干渉を議論した。 しかし、 分配関数の状態和は本来、 格子点上を除くあらゆる位置でスキルミオンが生成・消滅する過程を足し上げなければならない。 任意のトンネル過程に対する Berry 位相は、 (5.30) の $[\arctan \dots]$ から求められる。 (5.30) を数値的に評価することで、 5.3.2 節の直感的な説明を補い、 5.3.3 節で述べた destructive interference を拡張する。

Berry 位相 $\exp(-S_B) = \exp(-ip \sum_i \Omega(i))$ は絶対値 1 なので、 偏角で表すと便利である。 いくつかの p, Q_1, Q_2 について、 数値計算から得られた Berry 位相の因子 $\text{Arg}[\exp(-S_B)]$ を、 図 5.8 に示す。 ここでも図 5.7 と同様に、 スキルミオンの生成位置を左下三角形の中心に固定し、 スキルミオンの消滅位置を様々に変化させた。 いずれも格子の中心における $\exp(-S_B)$ は、 図 5.7 から求めた $\xi(\vec{r})^p$ の値と一致している。 また、 Berry 位相は空間的に連続的に変化し、 図示した隣接する 18 個の格子について周期的であることが分かる。 この結果は、 5.3.2 節に述べた図形的規則を裏付けるものである。

モノポールが格子の中心以外に存在する場合に、 destructive interference を調べる。 図 5.7 の 18 個の三角形は互いに、 並進・回転・鏡映によって、 頂点の副格子のラベル α を含めて一致させることができる。 ある 1 個の三角形内部の 1 点を選ぶとき、 残りの 17 個の三角形内部にも、 そのような変換で一致する等価な点が存在する。 この等価な点 18 個を組にして $\{\vec{X}_s\}_{s=1, \dots, 18}$ と表すことにする。 $p \bmod 3 \neq 0$ のとき、 数値計算で得られた $\exp(-S_B)$ を等価な点で足し上げると、 任意の位置に対して

$$\sum_{s=1}^{18} \exp \left[-S_B(\vec{X}_1^c; \vec{X}_s) \right] = 0 \quad (5.42)$$

が成立している。 S_{eff} は並進・回転・鏡映変換で不変なので、 等価な点どうしでは運動項 S_{eff} の差は無視できる。 (5.41) と同様の理由で、 モノポールが格子の中心以外に存在する場合でも、 Q_α が 3 の倍数で変化するトンネル過程のみが、 分配関数 Z に寄与する。 $p \bmod 3 = 0$ のとき、 等価な点 18 個についての経路の和が $\sum_{s,s'} \exp(-S_B) \neq 0$ となるので、 Q_α が任意の整数で変化するトンネル過程が、 分配関数 Z に寄与する。 よって、 格子の中心以外のモノポールでも、 5.3.3 節で格子の中心に限定して導いた destructive interference と全く同じ結論が成立する。

5.4 モノポール演算子の変換則

モノポールを含まない連続理論については、 文様群 $p6m$ (図 4.1 を参照) で特徴付けられる様々な格子の対称性変換によって、 有効ラグランジアン $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ が不変であることを、 4 章で述べた。 ところが、 モノポー

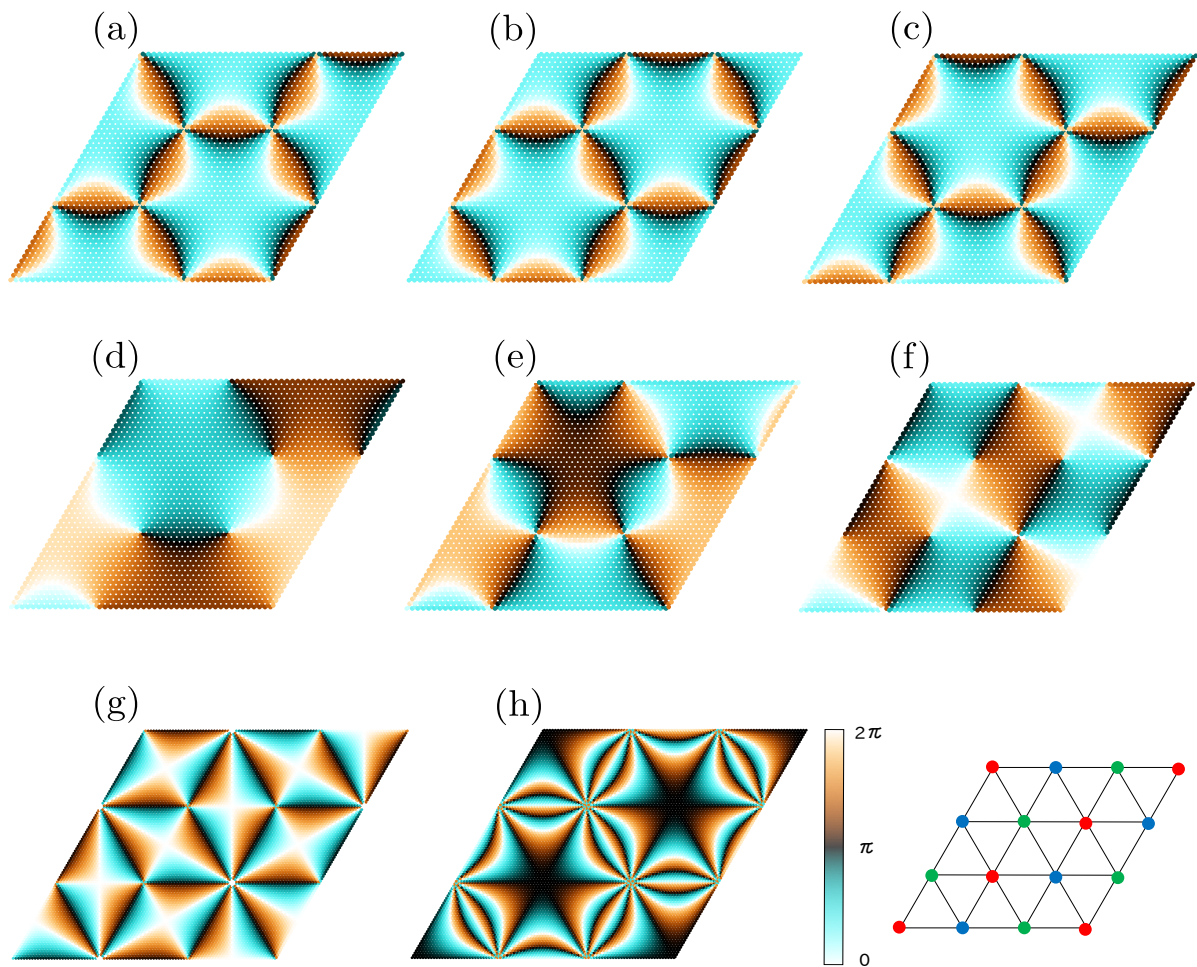


図 5.8: 左下三角形中心で $(p; Q_1, Q_2)$ のスキルミオンが生成し, 任意の場所で消滅する過程の Berry 位相の偏角 $\text{Arg}[\exp(-S_B)]$. 右下図に示した隣接する 18 個の三角形で周期的な値をとる. 各図は (a): $(3; 1, -1)$, (b): $(3; 0, 1)$, (c): $(3; -1, 0)$, (d): $(1; 1, 0)$, (e): $(2; 1, 0)$, (f): $(1; 1, 1)$, (g): $(3; 1, 1)$, (h): $(9; 0, 1)$ を示す. (d)–(f) は destructive interference で消える.

ルが引き起こすトンネル過程からは、座標に依存した Berry 位相が現れるので、モノポールの対称性は非自明である。以下では、格子の対称性変換の下での、モノポール演算子 M_α の変換則を導出する。p6m の独立な生成子である $2\pi/6$ 回転 (4.6), x 軸鏡映 (4.5), x 軸並進 (4.4) に対する変換則を求めれば十分である。他の対称性変換は、これらの 3 種類の変換の合成で実現できる。

モノポール演算子 $M_\alpha(x)$ を、 Q_α^{xy} を 1 減らし、 $Q_{\alpha+1}^{xy}$ を 1 増やすモノポールを時空点 x^μ に挿入するユニタリ演算子として定義する。 M_α どうしは可換とする。条件 $Q_1^{xy} + Q_2^{xy} + Q_3^{xy} = 0$ のために、

$$M_1 M_2 M_3 = 1 \quad (5.43)$$

が同一時空点で課される。

変換則を求める手順を、以下に述べる。簡単のため、モノポールの位置を格子の中心に限定して議論する。位置 \vec{r} でトポロジカルチャージ $(Q_1^{xy}, Q_2^{xy}, Q_3^{xy}) = (Q_1, Q_2, -Q_1 - Q_2)$ のスキルミオンが消滅する演算子を、 $M(\vec{r}; Q) = \{M_1(\vec{r})M_2(\vec{r})\}^{Q_1} M_2(\vec{r})^{Q_2}$ とする。変換前の Berry 位相 $\exp(-S_B)$ の因子を、ここでは引数を明記して $\xi^p(\vec{r}; Q)$ で表す。 ξ の具体的な値は、図 5.7 に示されている。格子の対称性変換 \mathcal{T} を行くと、座標点が移動するとともに、副格子の入れ替えのためにトポロジカルチャージが変換される：

$$\vec{r} \mapsto \vec{r}' = \mathcal{T}\vec{r}, \quad Q_\alpha^{xy} \mapsto Q_\alpha'^{xy} = \mathcal{T}Q_\alpha^{xy}. \quad (5.44)$$

モノポールの消滅を含んだ一つの過程に対し、分配関数への寄与を、変換前後のモノポール演算子で記述すると、

$$\xi^p(\vec{r}'; Q') M'(\vec{r}'; Q') = \xi^p(\vec{r}; Q) M(\vec{r}; Q) \quad (5.45)$$

となる。これを個々のモノポール演算子 M_α の変換則で書き直せば、

$$\{M'_1(\vec{r}')M'_2(\vec{r}')\}^{Q'_1} M'_2(\vec{r}')^{Q'_2} = h(\vec{r}; Q) \cdot \{M_1(\vec{r})M_2(\vec{r})\}^{Q_1} M_2(\vec{r})^{Q_2}, \quad (5.46)$$

$$h(\vec{r}; Q) = [\xi(\vec{r}; Q)/\xi(\vec{r}'; Q')]^p \quad (5.47)$$

を得る。(5.46) で矛盾なく M_α の変換則に帰着できるためには、 h が Q_1, Q_2 のべき乗で表されていないが、以下で見るようにこれは可能である。さらに、 h がモノポールの座標に依らないことが明らかとなる。(5.47) により $|h| = 1$ であるため、格子の対称性変換は、モノポール演算子の位相変換を伴う。3 種類の独立な変換それぞれについて、因子 $h(\vec{r}; Q)$ を具体的に調べることで、 M_α の変換則が導出される。

・ $2\pi/6$ 回転 (R1)

副格子 $\alpha = 1$ の格子点まわりに、 $2\pi/6$ 回転させる。回転行列を

$$R = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.48)$$

で表すと、ゲージ場は

$$\begin{pmatrix} a_{\alpha,\tau} \\ a_{\alpha,x} \\ a_{\alpha,y} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} a_{\alpha',\tau} \\ R \begin{pmatrix} a_{\alpha',x} \\ a_{\alpha',y} \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} F_{\alpha,\tau x} \\ F_{\alpha,\tau y} \\ F_{\alpha,xy} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} R \begin{pmatrix} F_{\alpha',\tau x} \\ F_{\alpha',\tau y} \end{pmatrix} \\ F_{\alpha',xy} \end{pmatrix} \quad (5.49)$$

となり、副格子の添字は

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \mapsto \alpha' = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (5.50)$$

と変換する。その結果、スキルミオンのトポロジカルチャージ (4.11) は

$$\begin{pmatrix} Q_1'^{xy} \\ Q_2'^{xy} \\ Q_3'^{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_1^{xy} \\ Q_3^{xy} \\ Q_2^{xy} \end{pmatrix} \quad (5.51)$$

と変換する. (5.47) で定義した因子 h を図 5.7 から求める. 図 5.7 には $\alpha = 1$ に属する等価でない格子点が 3 個含まれているが, どの点を中心に回転させるかによって, h が異なる*8. 以降では特に断らない限り, 図 5.7 で一番左下の格子点を中心に選ぶことにすると, すべての格子の中心点 \vec{r}^c に対して

$$h(\vec{r}^c; Q) = z^{(2Q_1+Q_2)p} \quad (5.52)$$

が成立している. ただし, $z = \exp(2\pi i/9)$ は 1 の 9 乗根である. (5.46) は

$$\{M'_1 M'_2\}^{Q_1} M'_2^{-Q_1-Q_2} = z^{(2Q_1+Q_2)p} \cdot \{M_1 M_2\}^{Q_1} M_2^{Q_2} \quad (5.53)$$

となるから, 両辺を比較して

$$\text{R1} : \begin{pmatrix} M'_1 \\ M'_2 \\ M'_3 \end{pmatrix} (\vec{r}') = \begin{pmatrix} z^{2p} M_3^\dagger \\ z^{-p} M_2^\dagger \\ z^{-p} M_1^\dagger \end{pmatrix} (\vec{r}) \quad (5.54)$$

と変換する. ただし, (5.43) より $M_3 = M_1^\dagger M_2^\dagger$ を用いた. R1 変換が \mathbb{Z}_6 対称群を構成すること, すなわち $(\text{R1})^6 = I$ (恒等変換) であることが, (5.54) により具体的に確かめられる.

変換後のモノポール演算子にエルミート共役が付くことは, 以下のように解釈できる. 例えばモノポール演算子 M_1 に注目すると, 変換前はチャージ $(Q_1^{xy}, Q_2^{xy}, Q_3^{xy}) = (1, -1, 0)$ のスキルミオンを消滅させるが, (5.51) の変換後はチャージ $(1, 0, -1)$ のスキルミオン消滅を表すので, M'_1 は $M_3^\dagger = M_3^{-1}$ と対応することが分かる. M_2, M_3 についても, 同様のことが言える.

後で参照するために, 副格子 $\alpha = 1, 2, 3$ の 1 点に関する $2\pi/3$ 回転の変換則を求めると,

$$(\text{R1})^2 : \begin{pmatrix} M'_1 \\ M'_2 \\ M'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega^p M_1 \\ M_2 \\ \omega^{2p} M_3 \end{pmatrix}, (\text{R2})^2 : \begin{pmatrix} M'_1 \\ M'_2 \\ M'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega^{2p} M_1 \\ \omega^p M_2 \\ M_3 \end{pmatrix}, (\text{R3})^2 : \begin{pmatrix} M'_1 \\ M'_2 \\ M'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_1 \\ \omega^{2p} M_2 \\ \omega^p M_3 \end{pmatrix} \quad (5.55)$$

が得られる. ただし, $\omega = \exp(2\pi i/3)$ は 1 の 3 乗根である. $2\pi/3$ 回転で副格子は入れ替わらないので, M_α の添字も不変となる.

・ x 軸鏡映 (P1)

副格子 $\alpha = 1$ の格子点上を通過する x 軸に垂直な任意の直線を対称軸として, x の符号を反転させる. このとき, ゲージ場は

$$\begin{pmatrix} a_{\alpha,\tau} \\ a_{\alpha,x} \\ a_{\alpha,y} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} a_{\alpha',\tau} \\ -a_{\alpha',x} \\ a_{\alpha',y} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} F_{\alpha,\tau x} \\ F_{\alpha,\tau y} \\ F_{\alpha,xy} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} -F_{\alpha',\tau x} \\ F_{\alpha',\tau y} \\ -F_{\alpha',xy} \end{pmatrix} \quad (5.56)$$

となり, 副格子の添字は

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \mapsto \alpha' = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (5.57)$$

と変換する. その結果, スキルミオンのトポロジカルチャージ (4.11) は

$$\begin{pmatrix} Q_1^{xy} \\ Q_2^{xy} \\ Q_3^{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -Q_1^{xy} \\ -Q_3^{xy} \\ -Q_2^{xy} \end{pmatrix} \quad (5.58)$$

と変換する. (5.47) で定義した因子 h を図 5.7 から求めると, すべての格子の中心点 \vec{r}^c に対して

$$h(\vec{r}^c; Q) = \omega^{2Q_1 p} \quad (5.59)$$

*8 $2\pi/6$ 回転でのみ, どの格子点を中心にするかという配慮が必要となる. $2\pi/3$ 回転・鏡映は, 同一副格子のどの点を変換の基準に選んでも, 同じ結果が得られる.

が成立している. ただし, $\omega = \exp(2\pi i/3)$ は 1 の 3 乗根である. (5.46) は

$$\{M'_1 M'_2\}^{-Q_1} M'_2{}^{Q_1+Q_2} = \omega^{2Q_1 P} \cdot \{M_1 M_2\}^{Q_1} M_2^{Q_2} \quad (5.60)$$

となるから, 両辺を比較して

$$P1 : \begin{pmatrix} M'_1 \\ M'_2 \\ M'_3 \end{pmatrix} (\vec{r}') = \begin{pmatrix} \omega^p M_3 \\ M_2 \\ \omega^{2p} M_1 \end{pmatrix} (\vec{r}) \quad (5.61)$$

と変換する. P1 変換は \mathbb{Z}_2 対称群を構成する.

・ x 軸並進 (T_x)

x 軸正の方向に 1 格子 (長さ a) だけ並進させる. このとき, ゲージ場は

$$\begin{pmatrix} a_{\alpha,\tau} \\ a_{\alpha,x} \\ a_{\alpha,y} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} a_{\alpha',\tau} \\ a_{\alpha',x} \\ a_{\alpha',y} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} F_{\alpha,\tau x} \\ F_{\alpha,\tau y} \\ F_{\alpha,xy} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} F_{\alpha',\tau x} \\ F_{\alpha',\tau y} \\ F_{\alpha',xy} \end{pmatrix} \quad (5.62)$$

となり, 副格子の添字は

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \mapsto \alpha' = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.63)$$

と変換する^{*9}. その結果, スキルミオンのトポロジカルチャージ (4.11) は

$$\begin{pmatrix} Q_1^{jxy} \\ Q_2^{jxy} \\ Q_3^{jxy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_2^{xy} \\ Q_3^{xy} \\ Q_1^{xy} \end{pmatrix} \quad (5.64)$$

と変換する. (5.47) で定義した因子 h を図 5.7 から求めると, すべての格子の中心点 \vec{r}^c に対して

$$h(\vec{r}^c; Q) = \omega^{2Q_1 P} \quad (5.65)$$

が成立している. ただし, $\omega = \exp(2\pi i/3)$ は 1 の 3 乗根である. (5.46) は

$$\{M'_1 M'_2\}^{Q_2} M_2^{-Q_1-Q_2} = \omega^{2Q_1 P} \cdot \{M_1 M_2\}^{Q_1} M_2^{Q_2} \quad (5.66)$$

となるから, 両辺を比較して

$$T_x : \begin{pmatrix} M'_1 \\ M'_2 \\ M'_3 \end{pmatrix} (\vec{r}') = \begin{pmatrix} M_2 \\ \omega^p M_3 \\ \omega^{2p} M_1 \end{pmatrix} (\vec{r}) \quad (5.67)$$

と変換する. T_x 変換は \mathbb{Z}_3 対称群を構成する.

以上の $2\pi/6$ 回転, x 軸鏡映, x 軸並進が, 格子が満たす対称性変換の独立な生成子である. いずれの変換も, モノポール演算子 M_α のグローバルな位相変換 (とエルミート共役) として作用する. 格子に由来するその他の対称性変換は, これらの 3 種類の変換を組み合わせることによって得られる. 重要な 2 つの例について, モノポール演算子がどのように変換するか, 以下で確認する.

1 つ目の例は, $\vec{r} \mapsto \vec{r} + (\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y})/2$ の平行移動について述べる. この変換を, D_+ 変換と呼ぶことにする. D_+ 変換は, 一辺 a の菱形の対角線方向の平行移動であり, 副格子を変えない. 上と同様にして定義通

^{*9}図 5.7 を見ると, 位置 \vec{r} の格子点の副格子が α のとき, 位置 $\vec{r} + \hat{x}$ の格子点は副格子 $\alpha - 1$ に属している. 状態ではなく演算子を変換する立場においては, x 並進後の物理量 $O'_{(\alpha-1),j}(\vec{r} + \hat{x})$ は, 変換前の $O_\alpha(\vec{r})$ と等価なので, 本文のように $\alpha' = \alpha + 1$ と変換する. 仮に $\alpha' = \alpha - 1$ を用いて計算を続けると, (5.65) の h が \vec{r}^c に依存したものとなる.

りに導出するか、あるいは格子上で等価な一連の変換 $R1 \rightarrow (T_x)^{-1} \rightarrow (R1)^{-1} \rightarrow (T_x)^{-1}$ を計算することによって、モノポール演算子の変換則が

$$D_+ : \begin{pmatrix} M'_1 \\ M'_2 \\ M'_3 \end{pmatrix} (\vec{r}') = \begin{pmatrix} \omega^p M_1 \\ \omega^p M_2 \\ \omega^p M_3 \end{pmatrix} (\vec{r}) \quad (5.68)$$

と求められる。 $p \bmod 3 \neq 0$ のとき、 D_+ 変換は、逆変換 $D_- = (D_+)^2$ と恒等変換を合わせて、 \mathbb{Z}_3 対称群を構成している。 D_{\pm} 変換は、 $R1, P1, T_x$ と独立な変換でないことに改めて注意する。 $p \bmod 3 = 0$ のとき、 D_{\pm} 変換は自明な恒等変換である。

2つ目の例は、他の $\alpha = 1$ 格子点を中心とする $2\pi/6$ 回転について述べる。 (5.54) の $R1$ 変換は、図 5.7 で一番左下の $\alpha = 1$ 格子点を中心を選んだ。今度は、図 5.7 で下から2段目の $\alpha = 1$ 格子点を中心とする $2\pi/6$ 回転を、 $R1_{(2)}$ と表記する。モノポール演算子の変換則を、(5.54) と同じように定義に従って求めると、

$$R1_{(2)} : \begin{pmatrix} M'_1 \\ M'_2 \\ M'_3 \end{pmatrix} (\vec{r}') = \begin{pmatrix} z^{-p} M_3^\dagger \\ z^{-4p} M_2^\dagger \\ z^{-4p} M_1^\dagger \end{pmatrix} (\vec{r}) \quad (5.69)$$

を得る。一方で、格子上の $R1_{(2)}$ 変換は、一連の変換 $D_- \rightarrow R1 \rightarrow D_+$ で達成できる。(5.54), (5.68) で求めた変換則を順に適用して得られる変換は、(5.69) と一致しており、矛盾しない。

最後に、モノポールの位置 \vec{r} を、格子点上を除く一般の場所に拡張した場合の結果を紹介する。5.3.4 節では、任意の場所に対する Berry 位相の因子 $\xi(\vec{r})$ を数値計算で求めた。 $R1, P1, T_x$ 変換のそれぞれについて、(5.47) の $h(\vec{r}; Q)$ を計算することができる。その結果、モノポールを格子の中心 ($\vec{r} = \vec{r}^c$) に限定して求めた上記の変換則と、全く同じ変換則が成立することが明らかとなった。したがって、格子の対称性変換は、モノポール演算子 $M_\alpha(x)$ の x に依らないグローバル変換である。

5.5 モノポール項

本来の格子理論にはトンネル過程が含まれているが、素朴な連続極限から導出される非線形シグマ模型 $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ では記述することができない。そこで、トンネル過程を引き起こすモノポール項 \mathcal{L}_M を加えることにより、トンネル過程が起こる格子の有効理論を、連続場 $\vec{\phi}_\alpha$ で作ることができる：

$$\mathcal{L}_{\text{lat}} = \mathcal{L}_{\text{cont}} + \mathcal{L}_M. \quad (5.70)$$

モノポールの挿入は、5.4 節で導入したモノポール演算子 M_α で記述される。場 $\vec{\phi}_\alpha$ あるいは a_α を用いてモノポール演算子を局所的に書き表すことはできないが、付録 D で説明するように、ゲージ場 a_α に対する双対理論では、表 D.1 の通りに簡潔に表すことができる。

5.3.3 節で述べた destructive interference の結果、スピン表現 p に依存してモノポール項が異なる。 $p \bmod 3 \neq 0$ のとき、スキルミオン数は3の倍数でのみ変化し得るから、

$$\mathcal{L}_M = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^3 \lambda_{3n,\alpha} (M_\alpha)^{3n} + \text{h.c.} \quad (p \bmod 3 \neq 0) \quad (5.71)$$

という形をしている。これに対し、 $p \bmod 3 = 0$ のときは、スキルミオン数は最小単位1で変化できるので、

$$\mathcal{L}_M = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^3 \lambda_{n,\alpha} (M_\alpha)^n + \text{h.c.} \quad (p \bmod 3 = 0) \quad (5.72)$$

と書ける。 $\lambda_{n,\alpha}$ は適当な係数とする。ハミルトニアンがエルミートであることから、 $\mathcal{L}_M^\dagger = \mathcal{L}_M$ が課される。

$p \bmod 9$	1	2	3	4	5	6	7	8	0
次数 n	3	3	1	3	3	1	3	3	1
$\text{Arg}(\lambda)$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$0, \pi$

表 5.2: 格子の対称性変換で不変となる, 最低次のモノポール項. (5.74), (5.75) の係数 λ は, スピン表現 p について周期 9 で変化する. 次数 n とは, destructive interference で消えないモノポールが, n の倍数のチャージを持つことを意味する.

モノポール項の一般形は (5.71), (5.72) で与えられるが, Néel-VBS 相転移について議論するには, 低エネルギーの振舞いに注目すれば十分である. トンネル過程はスキルミオン数が一定の過程に比べて, より大きな S_{cont} を持つため, 低エネルギーの寄与に限定するとき, トンネル過程は抑制される. したがって, スキルミオン数の変化が最小のトンネル過程に対応する項だけを, $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ に対する摂動として理論に追加する:

$$\mathcal{L}_M = \sum_{\alpha=1}^3 \lambda_{n,\alpha} (M_\alpha)^n + \text{h.c.}, \quad n = \begin{cases} 3 & (p \bmod 3 \neq 0) \\ 1 & (p \bmod 3 = 0) \end{cases}. \quad (5.73)$$

格子ハミルトニアンで記述される本来のスピンは, 三角格子の p6m 対称性を持っているので, \mathcal{L}_{lat} もまた, 格子の対称性を保つべきである. この要請から, 係数 λ に制限が加わる. (5.73) に対して, 5.4 節で求めた M_α の変換を実行する. 並進 (T_x) 不変性より, 直ちに $\lambda_{n,1} = \lambda_{n,2} = \lambda_{n,3}$ が分かる. 最低次のモノポール項は

$$\mathcal{L}_M = \lambda (M_1^3 + M_2^3 + M_3^3) + \text{h.c.} \quad (p \bmod 3 \neq 0) \quad (5.74)$$

$$\mathcal{L}_M = \lambda (M_1 + M_2 + M_3) + \text{h.c.} \quad (p \bmod 3 = 0) \quad (5.75)$$

であり, さらに残りの回転 (R1)・鏡映 (P1) 不変性を課すと, λ の偏角が表 5.2 のように決まる.

ここからは, 4.2 節で言及したトポロジカル対称性について述べる. 表 D.1 より, $[\text{U}(1)]_{\text{top}}^2$ グローバル変換によって, モノポール演算子は

$$\begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} e^{-i\eta_1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\eta_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\eta_2} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\eta_2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{pmatrix} \quad (5.76)$$

と変換する. η_1, η_2 の変換は可換である. 4.2 節で指摘したように, モノポールを含まない非線形シグマ模型 $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ は, $[\text{U}(1)]_{\text{top}}^2$ トポロジカル対称性を持っており, 変換 (5.76) で不変である. トンネル過程を引き起こすモノポールが不在であることは, トポロジカルチャージであるスキルミオン数の保存を意味する. ところが, モノポールを含む有効理論 \mathcal{L}_{lat} は, $[\text{U}(1)]_{\text{top}}^2$ トポロジカル対称性が破れる. $[\text{U}(1)]_{\text{top}}^2$ 変換 (5.76) の下での変換性を調べると, $p \bmod 3 \neq 0$ の場合, (5.74) より, \mathcal{L}_M は

$$e^{i\eta_{1,2}} = 1, \omega, \omega^2 \quad (5.77)$$

に限り不変である (ω は 1 の 3 乗根). したがって, \mathcal{L}_{lat} は $[\text{U}(1)]_{\text{top}}^2$ の部分群 $(\mathbb{Z}_3)_{\text{top}}^2$ のトポロジカル対称性を持っている. 一方で $p \bmod 3 = 0$ の場合, (5.75) より, あらゆる $\eta_{1,2} \notin 2\pi\mathbb{Z}$ に対して \mathcal{L}_M は不変ではない. よって, $[\text{U}(1)]_{\text{top}}^2$ トポロジカル対称性は完全に破れている.

第6章 量子相転移

2次元格子上の反強磁性体は、従来の古典的な相転移の枠組みでは説明できない、Néel-VBS相の直接2次相転移が起こりうるという点で注目を集めている [35]. しかしながら、このような量子系の厳密な基底状態を解析的に求めることは難しい. そこで代わりに、対称性に着目した場の理論の技法を適用すると、相に関する情報を得ることができる.

6.1節では、SU(3)三角格子反強磁性体の低エネルギー有効理論が持つ't Hooft アノマリーを調べる. ここでは5.5節で述べたモノポール項の違いが、系の性質を本質的に決定付ける. スピン表現 p について周期的な、SU(2) スピン鎖に対する Haldane 予想 [2,3], あるいは LSMA 定理 [4,5] と類似の結論が導かれる. 6.2節では、スピン回転対称性の破れとその回復を、Higgs 機構で有効理論に取り入れる. 臨界点近傍でモノポールが果たす役割を説明し、deconfined criticality の可能性を議論する. 本章の内容は、投稿論文 [60] に基づく.

6.1 't Hooft アノマリー

格子理論の素朴な連続極限から導いた SU(3)/U(1)² 非線形シグマ模型は、4章で述べたように、PSU(3) スピン回転対称性と、トポロジカル U(1)² 対称性を持つ. しかし、正しい格子理論の有効理論を得るためには、トンネル効果を記述するモノポールを追加する必要がある. その結果、トポロジカル対称性が [U(1)²]_{top} の部分群に破れることを5.5節で見た. 以下では、有効理論が持つこれらの対称性に関して 't Hooft アノマリーを調べ、アノマリーマッチングの帰結を述べる.

6.1.1 モノポールを含まない理論

モノポールを含まない SU(3)/U(1)² 非線形シグマ模型 (3.29) について、't Hooft アノマリーを調べる. 4章で挙げたグローバル対称性のうち、特に Néel 秩序に関する PSU(3) スピン回転対称性と、VBS 秩序に関するトポロジカル [U(1)²]_{top} 対称性に注目する. 系は絶対零度として、基底状態のみを考える. Tanizaki, Sulejmanpasic [97] に従い、両者をゲージ化したときにゲージアノマリーを生じるかによって、't Hooft アノマリーかどうか判定する.

まずは (3.29) が持つ PSU(3) グローバル対称性をゲージ化する [70]. そのために、U(3) 1-form ゲージ場 A と、U(1) 2-form ゲージ場 B を、背景ゲージ場として導入する *1. A と B は

$$3B = d(\text{tr}(A)) \quad (6.1)$$

の関係を満たす. 背景ゲージ場 A を場 $\vec{\phi}_\alpha$ と minimal coupling させることにより、PSU(3) 対称性がゲージ化された理論が

$$\mathcal{L}_1 = \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_{\alpha=1}^3 \left| (d + ia_\alpha + iA)\vec{\phi}_\alpha \right|^2 \quad (6.2)$$

と与えられる.

(6.1), (6.2) は、次の U(1) _{ξ} 1-form ゲージ変換で不変である :

$$a_\alpha \mapsto a_\alpha - \xi, \quad B \mapsto B + d\xi, \quad A \mapsto A + \xi I_3. \quad (6.3)$$

*1 6章では、背景ゲージ場を大文字で、動的なゲージ場を小文字で表す. 動的なゲージ場は、分配関数で経路積分を実行する.

ξ は B の非物理的自由度に由来した, $U(1)$ 1-form ゲージ場である. 条件 (3.28) は $U(1)_\xi$ ゲージ不変でないので,

$$\sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha + \text{tr}(A) = 0 \quad (6.4)$$

と変更する. $U(1)_\xi$ ゲージ不変な field strength は,

$$F_\alpha = da_\alpha + B \quad (6.5)$$

と与えられる.

続いて, (6.2) が持つトポロジカル $[U(1)]_{\text{top}}^2$ グローバル対称性をゲージ化する. そのために, 2種類の独立な背景ゲージ場である, $U(1)$ 1-form ゲージ場 $A_1^{\text{top}}, A_2^{\text{top}}$ を導入する. Noether カレント (4.10) を, 背景ゲージ場 $A_1^{\text{top}}, A_2^{\text{top}}$ と結合させることにより, $PSU(3)$ 対称性と $[U(1)]_{\text{top}}^2$ 対称性をゲージ化した理論が

$$\mathcal{L}_2 = \mathcal{L}_1 + A_1^{\text{top}} \wedge \frac{i}{2\pi} da_1 + A_2^{\text{top}} \wedge \frac{i}{2\pi} da_2 \quad (6.6)$$

と与えられる. 群 $[U(1)]_{\text{top}}^2$ を, 互いに可換な $[U(1)_{\text{top}}^V] \times [U(1)_{\text{top}}^A]$ に分解する. 2種類の $U(1)$ 1-form ゲージ場 $A_1^{\text{top}}, A_2^{\text{top}}$ を

$$V = \frac{1}{2}(A_1^{\text{top}} + A_2^{\text{top}}), \quad W = \frac{1}{2}(A_1^{\text{top}} - A_2^{\text{top}}) \quad (6.7)$$

に書き換えると, (6.6) は

$$\mathcal{L}_2 = \mathcal{L}_1 + V \wedge \frac{i}{2\pi}(da_1 + da_2) + W \wedge \frac{i}{2\pi}(da_1 - da_2) \quad (6.8)$$

となる. 背景ゲージ場 V, W はそれぞれ, $\star \frac{1}{2\pi}(da_1 + da_2), \star \frac{1}{2\pi}(da_1 - da_2)$ をカレントとする, $U(1)_{\text{top}}^V, U(1)_{\text{top}}^A$ トポロジカル対称性と結合している. 対応するモノポール演算子の位相変換は, (5.76) に $\vartheta_V = \frac{1}{2}(\eta_1 + \eta_2), \vartheta_A = \frac{1}{2}(\eta_1 - \eta_2)$ を代入することで,

$$\begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\vartheta_V} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\vartheta_V} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-2i\vartheta_A} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\vartheta_A} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\vartheta_A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

と与えられる.

$\exp(-\int \mathcal{L}_2)$ は, 次の $U(1)_\eta \times U(1)_\kappa$ 0-form ゲージ変換で不変である:

$$V \mapsto V - d\eta, \quad W \mapsto W - d\kappa. \quad (6.10)$$

しかし $U(1)_B$ ゲージ変換 (6.3) の下で, \mathcal{L}_2 は

$$\mathcal{L}_2 \mapsto \mathcal{L}_1 + V \wedge \frac{i}{2\pi}(da_1 + da_2 - 2d\xi) + W \wedge \frac{i}{2\pi}(da_1 - da_2 + 0) \quad (6.11)$$

と変換する. このことは, $PSU(3)$ 対称性と $U(1)_{\text{top}}^A$ 対称性を同時にゲージ化することは矛盾なくできるが, $PSU(3)$ 対称性と $U(1)_{\text{top}}^V$ 対称性を同時にゲージ化するとゲージアノマリーが生じることを示唆する. もし相殺項を加えて $\mathcal{L}_3 = \mathcal{L}_2 + V \wedge \frac{i}{\pi} B$ とすれば, \mathcal{L}_3 は $U(1)_B$ ゲージ変換 (6.3) で不変にすることができる. しかし B のフラックスは 2π 量子化されていないので, 今度は $\exp(-\int \mathcal{L}_3)$ が $U(1)_{\text{top}}^V$ ゲージ変換 (6.10) で不変ではない. このように, ゲージアノマリーは相殺項で取り除くことはできない. $\mathcal{L}_{\text{cont}}$ は $PSU(3) \times U(1)_{\text{top}}^V$ mixed 't Hooft アノマリーを持つ.

6.1.2 モノポールを含む理論

5.5 節で述べたように, モノポールを含むラグランジアン $\mathcal{L}_{\text{lat}} = \mathcal{L}_{\text{cont}} + \mathcal{L}_M$ で記述される格子の有効理論は, トポロジカル $U(1)^2$ 対称性を破る. Berry 位相の destructive interference の結果, \mathcal{L}_M の形には, ス

ピン表現 p に依存した違いが現れる. $p \bmod 3 \neq 0$ のときは, 部分群 $(\mathbb{Z}_3)_{\text{top}}^2 \subset [\text{U}(1)]_{\text{top}}^2$ の対称性が残る. 一方 $p \bmod 3 = 0$ のときは, $[\text{U}(1)]_{\text{top}}^2$ は完全に破れる.

$p \bmod 3 \neq 0$ のとき, PSU(3) スピン回転対称性と $(\mathbb{Z}_3)_{\text{top}}^2$ トポロジカル対称性の間に 't Hooft アノマリーを持つことを, 以下で確認する. 初めに, \mathcal{L}_{lat} が持つ PSU(3) グローバル対称性がゲージ化された理論は, 6.1.1 節と同様にして,

$$\mathcal{L}'_1 = \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_{\alpha=1}^3 \left| (d + ia_{\alpha} + iA)\vec{\phi}_{\alpha} \right|^2 + \mathcal{L}_M \quad (6.12)$$

である. 次に, $(\mathbb{Z}_3)_{\text{top}}^2 = (\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}} \times (\mathbb{Z}_3^A)_{\text{top}}$ がゲージ化された理論は,

$$\mathcal{L}'_2 = \mathcal{L}'_1 + V \wedge \frac{i}{2\pi} (da_1 + da_2) + W \wedge \frac{i}{2\pi} (da_1 - da_2), \quad (6.13)$$

$$3V = dG, \quad 3W = dH \quad (6.14)$$

と与えられる. ここで, U(1) 0-form 背景ゲージ場 G, H を導入した. $\exp(-\int \mathcal{L}'_2)$ は, $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}} \times (\mathbb{Z}_3^A)_{\text{top}}$ 0-form ゲージ変換 (6.10) の下で不変である. しかしながら, $V = 0$ でない限り, \mathcal{L}'_2 は $\text{U}(1)_B$ ゲージ変換 (6.3) で不変にはならない. ここでも, PSU(3) ゲージ対称性と $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ ゲージ対称性を両立させる相殺項は存在しない. したがって, \mathcal{L}_{lat} は $\text{PSU}(3) \times (\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ mixed 't Hooft アノマリーを持ち, $\text{PSU}(3) \times (\mathbb{Z}_3^A)_{\text{top}}$ 対称性にはアノマリーが存在しない.

このように $p \bmod 3 \neq 0$ のときには 't Hooft アノマリーが存在するので, 低エネルギーの振る舞いはアノマリーマッチングにより, 以下のいずれかを最低 1 つ含んでいなければならない [40, 42]:

- PSU(3) スピン回転対称性の自発的対称性の破れ,
- $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ トポロジカル対称性の自発的対称性の破れ,
- 共形的,
- トポロジカル秩序.

基底状態が縮退しておらず, スピン回転対称性とトポロジカル対称性の両方を保ち, 励起がエネルギーギャップを持つような trivially gapped 相は禁止されている.

PSU(3) スピン回転対称性が自発的に破れた相は, Néel 相として解釈される. 3.3 節でも述べたように, Néel 秩序は一定値の秩序パラメータ $\vec{\phi}_{\alpha}$ で特徴付けられる. スピノン場の真空期待値は $\langle \vec{\phi}_{\alpha} \rangle \neq 0$ であり, 異なる真空へは PSU(3) グローバル変換 (4.3) で移り変わる.

$(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ トポロジカル対称性が自発的に破れた相は, $\langle M_{\alpha} \rangle \neq 0$ で特徴付けられる. 縮退する別の基底状態へは, $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ グローバル変換 (6.9) で移り変わる. モノポール演算子の特定の位相変換は, 格子の対称性変換と対応することを, 5.4 節で確認した. (6.9) に $\vartheta_V = 0, \frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$ を代入すると, $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ 変換は

$$\begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{pmatrix} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} M_1 \\ \omega^2 M_2 \\ \omega M_3 \end{pmatrix} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} M_1 \\ \omega M_2 \\ \omega^2 M_3 \end{pmatrix} \quad (6.15)$$

を意味する. (5.55) を比較すると, $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ 変換とは, $(R3)^{\pm 2}$ 変換, すなわち $\pm 2\pi/3$ 回転を表している^{*2}. $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ 対称性が破れた相は $2\pi/3$ 回転対称性が自発的に破れた相であり, VBS 相と対応するのではないかと推測される. 対応関係の推測がもっともらしいことを, 7 章では, モノポールガスの解析に基づき説明する.

共形的な理論とは, 繰り込み群変換の固定点における理論であり, 物理的には PSU(3) 対称性に関する 2 次相転移点に対応する. トポロジカル秩序はスピン液体相と対応する. 本論文では詳しく触れない.

^{*2}ここでは, どの副格子まわりの回転であるかは重要でない. (6.13) で背景ゲージ場との結合の仕方を変更すれば, $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ 変換を, $(R1)^2$ もしくは $(R2)^2$ 変換に対応させることができる. 図 1.3(b) のような VBS 状態は, $\alpha = 1, 2, 3$ まわりの回転対称性が, すべて破れている.

ところで, $p \bmod 3 \neq 0$ のときに存在する $(\mathbb{Z}_3^A)_{\text{top}}$ トポロジカル対称性は, 't Hooft アノマリーを持たないため, 自発的に破れていなくてもよい. $(\mathbb{Z}_3^A)_{\text{top}}$ が意味するモノポール演算子の位相変換は, (6.9) に $\vartheta_A = 0, \frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$ を代入することで,

$$\begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{pmatrix} \longleftrightarrow \omega \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{pmatrix} \longleftrightarrow \omega^2 \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{pmatrix} \quad (6.16)$$

だと分かる. これは (5.68) に示した, 三角格子の対角線方向の平行移動を行う D_{\pm} 変換に他ならない. 図 1.3 に示した Néel 状態・VBS 状態の例はともに, D_{\pm} 対称性を保つ状態の例である. $(\mathbb{Z}_3^A)_{\text{top}}$ 対称性を破らずに Néel 相と VBS 相が実現できることは, アノマリーマッチングと矛盾していない.

Néel 相においては, 3.3 節で述べたように, PSU(3) 対称性の自発的破れに対応した NG モードとして, $\vec{\phi}_{\alpha}$ には gapless 励起モードが存在する. 格子上の場合 $\vec{\phi}_{\alpha}$ の滑らかな虚時間発展でトンネル過程が起こり得るが, スキルミオン数が変化しない過程に比べて高エネルギーの過程であるため, 低エネルギーの寄与は抑制されている (6.2 節ではより詳細な評価を行う). したがって, スピノン場 $\vec{\phi}_{\alpha}$ が凝縮している限り, モノポール演算子 M_{α} も同時に凝縮することは起こりにくいと考えられる.

上述の理由で PSU(3) \times $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ 対称性が同時に破れることはないとする, PSU(3) 対称性の回復と同時に $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ 対称性が破れるか, 中間に PSU(3) \times $(\mathbb{Z}_3^V)_{\text{top}}$ 対称性を両方保つ相を経由するかのいずれかとなる. 前者の可能性が Néel-VBS 相の直接相転移であり, アノマリーマッチング条件は 2 種類の対称性の自発的対称性の破れにより満たされる *3. 後者の可能性について, 中間に trivially gapped 相が実現することは, アノマリーマッチングから禁止されている. よって, アノマリーを持たない部分群への自発的対称性の破れでアノマリーマッチング条件を満足するシナリオを仮定すると, Néel-VBS 相の直接相転移を, 自然に説明することができる. なお, アノマリーの議論は Néel-VBS 相の直接相転移以外の可能性を排除するものではない. トポロジカル秩序を持ったスピン液体相を経由するような相転移も許されている.

$p \bmod 3 = 0$ のときは, \mathcal{L}_{lat} に 't Hooft アノマリーが存在しないので, 上記のアノマリーマッチングの制約を受けず, trivially gapped 相が許される. この結果は, 7.1 節で後述するように, 格子の $2\pi/3$ 回転対称性を破らない VBS 状態を構成できることを反映していると言える (図 7.1(b)(c) を参照). $p \bmod 3 \neq 0$ のときと同様に, スピノン場 $\vec{\phi}_{\alpha}$ の凝縮は Néel 相, モノポール演算子 M_{α} の凝縮は VBS 相として解釈される. Néel-VBS 相の直接相転移が可能であると同時に, 中間に別の相を経由する相転移も許されている.

6.2 Néel-VBS 相転移の有効理論

Landau, Ginzburg による古典的な相転移の理論 [1] では, 有効ラグランジアンは各相を特徴付ける秩序変数で記述される. しかし, SU(2) 正方格子反強磁性体の Néel-VBS 相転移は, スピノン場 $\vec{\phi}$ を秩序変数とする abelian Higgs 模型 [41, 42] で説明されることを, 2.3 節で述べた. SU(3) 三角格子反強磁性体でも類似の模型を適用し, Néel-VBS 相の直接相転移がどのように説明されるかを述べる.

PSU(3) スピン回転対称性に注目し, スピノン場 $\vec{\phi}_{\alpha}$ を秩序変数とする相転移の模型を構成する. 正規直交条件 (3.23) を外して, $\vec{\phi}_{\alpha} \in \mathbb{C}^3$ とみなすことにより, SU(3)/U(1)² 非線形シグマ模型 (3.29) を, 線形シグマ模型に書き直す:

$$\mathcal{L} = \sum_{\alpha} \left[|(\mathrm{d} + \mathrm{i}a_{\alpha})\vec{\phi}_{\alpha}|^2 + \frac{1}{2e^2} |\mathrm{d}a_{\alpha}|^2 \right] + V(\vec{\phi}_{1,2,3}) + \mathcal{L}_{\text{M}}. \quad (6.17)$$

ここでは, U(1) ゲージ場 a_{α} は $\vec{\phi}_{\alpha}$ とは独立な場として扱う. e はゲージ場とスピノン場の結合定数である.

*3 正確には, Néel 相と VBS 相の相転移点上で, 共形的な状態が実現してもよい.

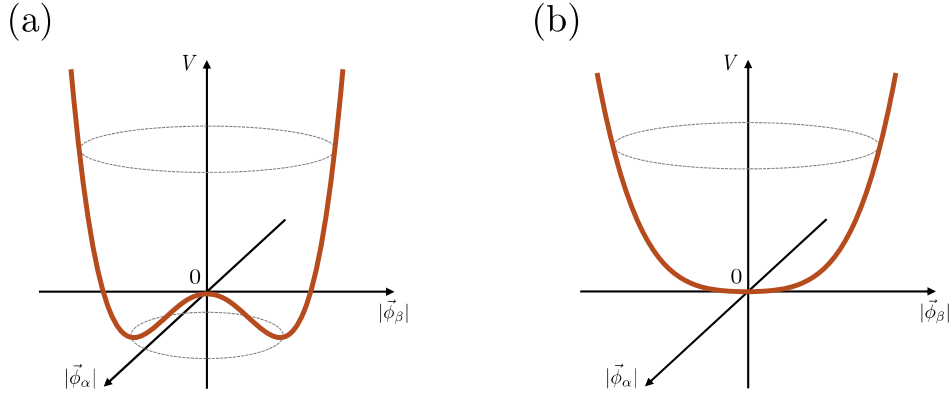


図 6.1: Higgs 機構のポテンシャル V の概形. (a) $m^2 < 0$ のときには, PSU(3) 対称性が自発的に破れた $\langle \vec{\phi}_\alpha \rangle \neq 0$ の状態が, 基底状態として実現する. (b) $m^2 > 0$ のときには, PSU(3) 対称性を保つ $\langle \vec{\phi}_\alpha \rangle = 0$ の状態が, 基底状態として実現する.

4 章で述べた対称性をすべて満たすポテンシャル項 $V(\vec{\phi}_{1,2,3})$ を, 次のように選ぶ:

$$V(\vec{\phi}_{1,2,3}) = m^2 \sum_{\alpha} |\vec{\phi}_\alpha|^2 + g_1 \sum_{\alpha} |\vec{\phi}_\alpha|^4 + g_2 \sum_{\alpha \neq \beta} |\vec{\phi}_\alpha|^2 |\vec{\phi}_\beta|^2 + g_3 \sum_{\alpha \neq \beta} |\vec{\phi}_\alpha^* \cdot \vec{\phi}_\beta|^2 + g_4 \operatorname{Re}(\vec{\phi}_1 \cdot (\vec{\phi}_2 \times \vec{\phi}_3)) + g_5 [\operatorname{Im}(\vec{\phi}_1 \cdot (\vec{\phi}_2 \times \vec{\phi}_3))]^2. \quad (6.18)$$

このモデルは, パラメータ m^2 を変化させることにより, PSU(3) 対称性を保つ理論と自発的に破れる理論の両方を記述することができる. $V(\vec{\phi}_{1,2,3})$ の概形を, 図 6.1 に模式的に示す. $m^2 < 0$ のとき, PSU(3) 対称な $\vec{\phi}_\alpha = 0$ は不安定な極大点である. 安定な極小点は, 図 6.1(a) の円周上に連続的に分布する. パラメータ $g_{1,2,3,4,5}$ を適切に選ぶと, PSU(3) 対称性が自発的に破れた Néel 相が, 基底状態として出現する. 逆に $m^2 > 0$ とすると, 今度は図 6.1(b) のように, PSU(3) 対称点 $\vec{\phi}_\alpha = 0$ がポテンシャルの安定な極小点となる. このときの有効理論が, VBS 秩序を含む常磁性相に対応すると期待される.

3.3 節で見たように, Néel 状態からの低エネルギー励起は, SU(3)/U(1)² 非線形シグマ模型 (3.29) で記述される. PSU(3) 対称性が破れた点で, それが再現されるためには, $m^2 < 0, g_1 > 0, g_2 = 0, g_3 > 0, g_4 < 0, g_5 > 0$ と選ばばよい. m^2, g_1, g_2 の項は, 適切な場の規格化の後に $|\vec{\phi}_\alpha| = 1$ を保証する. g_3 は, 直交性 $\vec{\phi}_\alpha^* \cdot \vec{\phi}_\beta = 0$ ($\alpha \neq \beta$) を課す. g_4 と g_5 は, 行列式 $\vec{\phi}_1 \cdot (\vec{\phi}_2 \times \vec{\phi}_3) > 0$ を課す. 無限に縮退した V の極小点のうち, $\langle \vec{\phi}_\alpha \rangle \neq 0$ の 1 点が真空として実現する. ここでは, $U = (\vec{\phi}_1 \vec{\phi}_2 \vec{\phi}_3)^T$ が SU(3) 行列となる. 連続的対称性である PSU(3) 対称性の破れに伴い, 6 個の massless NG モードが存在することが分かるが, これが場 $U \in \text{SU}(3)/\text{U}(1)^2$ が表す励起である. 真空点からの低エネルギー励起を記述する有効理論は, 格子ハミルトニアンから導いた SU(3)/U(1)² 非線形シグマ模型 (3.29) と一致する. Higgs 機構により, U(1) ゲージ場 a_α は massive となる. 経路積分して消去すると, ゲージ場は (3.28) を満たす補助場として, 有効理論に含まれることとなる.

また, Néel 相でスキルミオンを生成するためには, スキルミオンの質量に相当するエネルギーが必要であるため, モノポール項 \mathcal{L} の寄与も抑制されている. スキルミオンの質量 \mathcal{M} は, 有効ラグランジアン (3.29) の $\vec{\phi}_\alpha$ にスキルミオン配位を表す $\vec{\Phi}_\alpha$ を代入し, xy 平面で積分することで評価できる:

$$\mathcal{M} = \sum_{\alpha=1}^3 \int dx dy \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_{\mu=x,y} \left| (\partial_\mu + iA_{\alpha,\mu}) \vec{\Phi}_\alpha \right|^2 \equiv \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_{\alpha=1}^3 \int_{\mathbb{R}^2_{xy}} \left| D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha \right|^2. \quad (6.19)$$

$A_{\alpha,\mu}$ とは, $\vec{\Phi}_\alpha$ で定義された U(1) ゲージ場 (5.12) である. $\vec{\Phi}_\alpha \in \mathbb{C}P^2$ に対して, Bogomol'nyi-Prasad-Sommerfield (BPS) 下限 [98, 99] を適用する. 今の場合, 2次元 Euclid 理論で成立する公式:

$$(\star\omega) \wedge \chi = -\omega \wedge (\star\chi), \quad \star(\star\omega) = \omega \quad (\omega, \chi: 1\text{-form}) \quad (6.20)$$

を用いると,

$$\begin{aligned}
|D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha|^2 &= (D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha)^\dagger \wedge \star D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha \\
&= \frac{1}{2} (D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha \pm i \star D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha)^\dagger \wedge \star (D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha \pm i \star D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha) \pm i (D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha)^\dagger \wedge D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha \\
&= |D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha \pm i \star D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha|^2 \pm i ((d + iA_\alpha) \vec{\Phi}_\alpha)^\dagger \wedge (d + iA_\alpha) \vec{\Phi}_\alpha \\
&= |D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha \pm i \star D_\alpha \vec{\Phi}_\alpha|^2 \pm dA_\alpha
\end{aligned} \tag{6.21}$$

を確かめることができる [100]. 3行目から4行目は, $d(\vec{\Phi}_\alpha^\dagger \vec{\Phi}_\alpha) = 0$ と (5.12) を用いた. したがって, (5.13) により

$$\mathcal{M} \geq \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_{\alpha=1}^3 \left| \int_{\mathbb{R}^2_{xy}} dA_\alpha \right| = \frac{2\pi}{g_{\text{eff}}} \sum_{\alpha=1}^3 |Q_\alpha^{xy}| \tag{6.22}$$

と求められる^{*4}. 強い Néel 秩序が実現しているとき ($p \rightarrow \infty$), (B.16) より $g_{\text{eff}} \simeq 0$ なので, 低エネルギー領域を考える限り, モノポールによるトンネル過程は無視してよい.

今度は PSU(3) 対称性が回復した相を検討する. $m^2 > 0$ のとき, スピノン場 $\vec{\phi}$ は massive, ゲージ場 a_α は massless である. $|m| \gg e^2$ の領域では, $\vec{\phi}_\alpha$ を経路積分して消去する. これは $\vec{\phi}_\alpha = 0$ を代入する操作と等価である. すると (6.17) の第2項が主要となり, 有効ラグランジアンは, モノポール項を伴う pure Yang-Mills 理論で記述される:

$$\mathcal{L} = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{1}{2e^2} |da_\alpha|^2 + \mathcal{L}_M = \frac{1}{2e^2} (|da_1|^2 + |da_2|^2 + |da_1 + da_2|^2) + \mathcal{L}_M. \tag{6.23}$$

第3項は, ゲージ場 $a_3 = -(a_1 + a_2)$ の Yang-Mills 項である. (6.23) の理論がどの相として解釈できるかは, この表式からは自明でない. (5.71), (5.72) のようなモノポール項 \mathcal{L}_M が存在するとき, (6.23) が VBS 相を表すと考えられる. この主張は, 7章で行うモノポールガスの解析に基づく. VBS 相はスピン回転対称性を保つ一方で, 格子の対称性が自発的に破れている. 付録 D で説明する abelian duality を用いると, (6.23) から出発して, VBS 状態が持つ対称性に関する性質を導くことができる.

以上から, (6.17) の有効理論は, Néel-VBS 相間の直接相転移を自然な形で表現する. 直接相転移の次数は, PSU(3) 対称性に関する2次相転移の臨界点 (繰り込み群の固定点) において, モノポール項 \mathcal{L}_M が relevant か irrelevant かに依存する. これについての定量的な結果は得られていない. $s = 1/2$ SU(2) 正方格子の場合と同じく dangerously irrelevant であることが示されれば, 図 2.3 がここでも成立し, deconfined criticality による直接2次相転移が実現すると思われる (2.3.3 節を参照). relevant であれば, 有限のモノポール項を持つ理論は PSU(3) 対称性の固定点が観測されないため, 直接1次相転移と考えられる. p が3の倍数か否かによって, モノポール項 \mathcal{L}_M が異なる点は, SU(2) 正方格子と共通している. M の次数が大きくなるほどスケール次元が増加し, irrelevant の強さが増すので, $p \bmod 3 \neq 0$ ならば2次相転移, $p \bmod 3 = 0$ ならば1次相転移と, スピン表現の依存性が現れる可能性がある.

^{*4}この不等式は, 下限値の質量を持ったスキルミオンが実在することを保証するものではない. (6.22) の等号が成立するためには, $\vec{\Phi}_{1,2,3}$ のすべてに対して, α の和をとる前の等号成立条件を満たしていなければならない. Q_α^{xy} のうち1つが0であるスキルミオンは, (5.14) のように CP¹ スキルミオンの埋め込みとして実現できるので, \mathcal{M} が下限値をとるスキルミオンを構成できる. しかし, 任意の $Q_\alpha^{xy} \neq 0$ の場合に等号を成立させる方法は分かっていない.

第7章 VBS相

7章は相転移点近傍の振る舞いではなく、強いVBS秩序を持った状態の性質を調べる。SU(2) 正方格子反強磁性体のVBS相を、モノポールが凝縮した相として記述する研究は、文献 [8-10] に始まる。モノポールの対称性に注目すると、VBS状態が持つ対称性に関する性質を、ある程度予言することができる。

SU(3) 三角格子反強磁性体について、モノポールの凝縮 ($\langle M_\alpha \rangle \neq 0$) が格子の対称性の自発的破れを意味しており、VBS相と対応することを6章で指摘した。以下では、モノポールガスの半古典的な解析を格子の対称性変換と組み合わせることにより、モノポールとVBS秩序の関係を明らかにする。7.1節では、三角格子上で実現されるVBS状態の秩序変数を定式化する。7.2節では、abelian dualityを用いてモノポールガスの分配関数を作り、有効ポテンシャルを求める。7.3節では、モノポール演算子の変換則から、VBS状態の縮退数の説明を試みる。

7.1 VBS秩序

SU(2) スピン系では、2個の格子点のスピンを反対称化することにより、スピン1重項を作ることができる。完全対称なSU(3) スピン系の場合、2個ではなく3個の格子点のスピンを完全反対称化して初めて、スピン1重項を作ることができる。

まずは、SU(3) 基本表現 ($p=1$) を考える。1個のスピンに対する状態空間の正規直交基底を、 $|R\rangle, |G\rangle, |B\rangle$ で表す。系が N 個の格子点から成るとき、すべての格子点を1回ずつ使用して $N/3$ 個の格子点3個組 $(i_1, j_1, k_1), \dots, (i_{N/3}, j_{N/3}, k_{N/3})$ を作り、それぞれがスピン1重項を形成した状態が、SU(3) スピン系のVBS状態である：

$$\begin{aligned} |\text{VBS}\rangle &= \bigotimes_{n=1}^{N/3} |(i_n, j_n, k_n)\rangle \\ &= \bigotimes_{n=1}^{N/3} \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|R\rangle_{i_n} |G\rangle_{j_n} |B\rangle_{k_n} + |G\rangle_{i_n} |B\rangle_{j_n} |R\rangle_{k_n} + |B\rangle_{i_n} |R\rangle_{j_n} |G\rangle_{k_n} \right. \\ &\quad \left. - |R\rangle_{i_n} |B\rangle_{j_n} |G\rangle_{k_n} - |G\rangle_{i_n} |R\rangle_{j_n} |B\rangle_{k_n} - |B\rangle_{i_n} |G\rangle_{j_n} |R\rangle_{k_n} \right). \end{aligned} \quad (7.1)$$

どの格子点が一重項を組むとエネルギーが小さくなるかは、ハミルトニアンに依存する。(7.1) で表されるVBS状態は、三角格子が持つ回転・鏡映・並進対称性のうち、少なくともいずれかが破れる。ハミルトニアンが格子の対称性を持つとき、対称性変換で互いに移り変わるVBS状態は縮退している。一辺 a の三角形頂点がスピン1重項を作る場合に限ると、最も縮退数が小さいのは図 7.1(a) に示す配位である。黄色の影は、その頂点の格子点がスピン一重項を形成していることを意味する。図 7.2 に示すように、この配位は6重縮退しており、互いに $2\pi/6$ 回転 (5.54) で移り変わる。同様に鏡映 (5.61) ・並進 (5.67) 対称性も破れているが、 D_\pm 変換 (5.68)、すなわち格子の対角線方向の平行移動に対しては不変である。

SU(2) $s=1/2$ スピン系の $\psi(\vec{r})$ (2.95) と類似の、縮退した各状態を特徴付けるVBS秩序変数を導入する。3種類のVBS秩序変数 ψ_α ($\alpha=1, 2, 3$) を、

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\vec{r}_\alpha) &= e^{i\frac{\pi}{6}} \hat{P} \left(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\alpha + \frac{\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}}{2}, \vec{r}_\alpha + \hat{x} \right) + e^{i\frac{3\pi}{6}} \hat{P} \left(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\alpha + \frac{-\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}}{2}, \vec{r}_\alpha + \frac{\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}}{2} \right) \\ &\quad + e^{i\frac{5\pi}{6}} \hat{P} \left(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\alpha - \hat{x}, \vec{r}_\alpha + \frac{-\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}}{2} \right) + e^{i\frac{7\pi}{6}} \hat{P} \left(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\alpha + \frac{-\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}}{2}, \vec{r}_\alpha - \hat{x} \right) \\ &\quad + e^{i\frac{9\pi}{6}} \hat{P} \left(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\alpha + \frac{\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}}{2}, \vec{r}_\alpha + \frac{-\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}}{2} \right) + e^{i\frac{11\pi}{6}} \hat{P} \left(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\alpha + \hat{x}, \vec{r}_\alpha + \frac{\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}}{2} \right) \end{aligned} \quad (7.2)$$

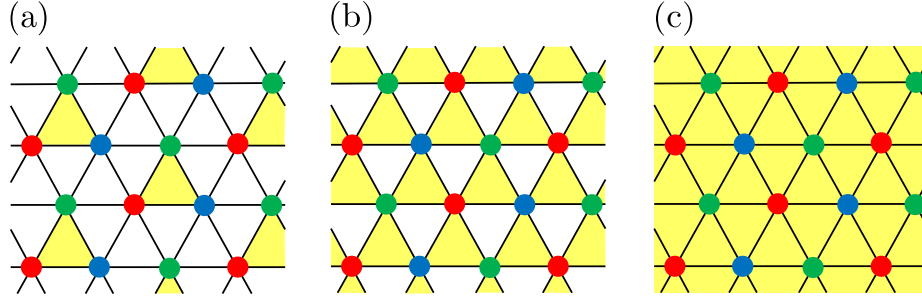


図 7.1: (a) $p = 1$, (b) $p = 3$, (c) $p = 6$ のときに自然な VBS 状態の一例. 順に 6, 2, 1 重縮退している. (c) の状態は, 格子の対称性を保つ. 赤・緑・青色の格子点はそれぞれ, 副格子 $\alpha = 1, 2, 3$ に属することを意味する.

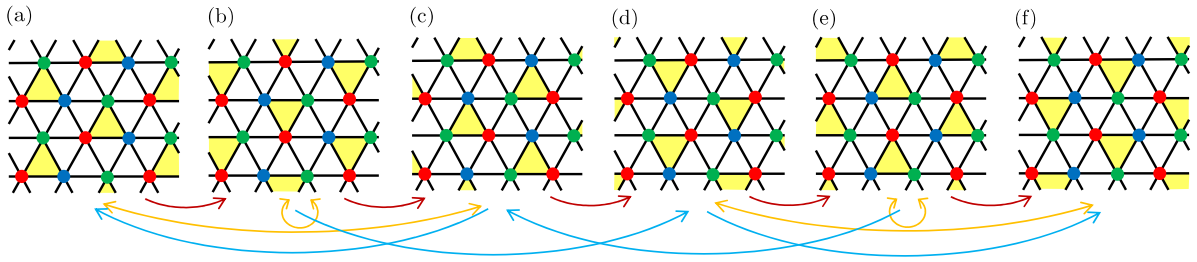


図 7.2: $p = 1$ の 6 重縮退した VBS 状態が従う変換則. 赤色は R1 変換, 橙色は P1 変換, 水色は T_x 変換を表す.

と定義することを提案する. ただし, \vec{r}_α は副格子 α に属する格子点のみを指す. \hat{x}, \hat{y} は, x, y 軸方向の大きさ a のベクトルとする. $\hat{P}(\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}'')$ は, 3 個の格子点 $\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}''$ の合成スピンを, 一重項に射影する演算子である. $\hat{P}(\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}'')$ がスピン演算子 \hat{S}_{uv} を用いて記述できることを, 付録 E に示す.

SU(2) 正方格子の場合と同様に, 図 7.1(a) の VBS 状態は演算子 ψ_α の固有状態ではない. それでも付録 E で説明するように, (7.2) で定義した ψ_α は, 縮退した VBS 状態を区別する秩序変数として機能する. 図 7.2 の 6 重縮退した VBS 状態は, \vec{r}_α に依らない一様な期待値 $\langle \psi_\alpha \rangle$ を持っている. 各状態は, 表 7.1 に示した異なる $\text{Arg}\langle \psi_\alpha \rangle$ で特徴付けられる. つまり直感的には, $\text{Arg}\langle \psi_\alpha \rangle$ は格子点 \vec{r}_α から見て, 一重項を形成している正三角形が, どの角度に存在するかを表している. その意味で上記の ψ_α は, SU(2) 正方格子に対する VBS 秩序変数 ψ (2.95) の自然な拡張となっている. また, Néel 状態のように格子の対称性が破れていない状態に対しては, $\langle \psi_\alpha(\vec{r}_\alpha) \rangle = 0$ となる.

$p > 1$ についても, 2.4.1 節で説明した valence bond (VB) の概念を適用することで, VBS 状態を構成で

VBS 状態	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)
$\text{Arg}\langle \psi_1 \rangle$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{3\pi}{6}$	$\frac{5\pi}{6}$	$\frac{7\pi}{6}$	$\frac{9\pi}{6}$	$\frac{11\pi}{6}$
$\text{Arg}\langle \psi_2 \rangle$	$\frac{9\pi}{6}$	$\frac{7\pi}{6}$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{11\pi}{6}$	$\frac{5\pi}{6}$	$\frac{3\pi}{6}$
$\text{Arg}\langle \psi_3 \rangle$	$\frac{5\pi}{6}$	$\frac{11\pi}{6}$	$\frac{9\pi}{6}$	$\frac{3\pi}{6}$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{7\pi}{6}$

表 7.1: (7.2) から求めた, VBS 秩序変数の期待値 $\langle \psi_\alpha \rangle$. 記号 (a)–(f) は, 図 7.2 の各 VBS 状態と対応する.

きる。Young 図が 1 行 p 列の表現は、 p 個の基本表現の完全対称な合成により得られる。1 つの格子点上に p 個の基本表現のスピンの配置が置かれているとみなして、隣接した基本表現のスピンの 3 個が一重項 (VB) を形成する。1 個の格子点が保有する p 個の結合手を過不足なく使い、3 個の格子点で作られる VB を三角格子に配置する (これは (2.84) の |preVBS) 状態に対応する)。その後、各格子点の合成スピンを完全対称な空間に射影したものが、 $p > 1$ スピン系の VBS 状態である。最近接斥力相互作用のハミルトニアンに対して、上記の方法で構成した VBS 状態は、比較的小さなエネルギー期待値を持つ。しかし、どのようなハミルトニアンに VBS 状態が基底状態として実現するかは、未だ不明である。

ここでは例として、 $p = 3, 6$ の VBS 状態を、図 7.1(b), (c) に示す。その他の表現の VBS 状態に関しては、7.3.2 節で後述する。図の黄色の影は、VB の配置を意味する。縮退した VBS 状態は、格子点どうしのスピン相関によって区別される。図 7.1(b) の配位だと、 $2\pi/6$ 回転対称性が破れた 2 重縮退をしている。 $p > 1$ の VBS 波動関数が複雑であるため、(7.2) のような VBS 秩序変数 ψ の定義には至っていない。多くの VBS 状態は、三角格子の対称性 (回転・鏡映・並進) を自発的に破る。しかし $p = 6$ のときには、図 7.1(c) のように VB をすべての格子に配置することによって、格子の対称性を保つ VBS 状態を構成することが可能である。 $p > 6$ の場合には、いくつかの $p = 6$ VB 配位と、端数の $0 \leq p \leq 5$ スピンによる VB 配位の、完全対称表現への合成として記述される。したがって、VBS 状態の対称性に関する性質は、 $p \bmod 6$ で周期的に変化すると思われる。

7.2 モノポールガス

Abelian duality を用いると、 $U(1)$ ゲージ場 $a_{1,2}$ を変数とするゲージ理論を、 $U(1)$ コンパクトスカラー場 $\sigma_{1,2}$ を変数とする等価な理論に書き換えることができる [79]。3 次元 Euclid 理論の abelian duality の詳細は、付録 D に記述する。PSU(3) 対称点の理論 (6.23) に適用すると、Yang-Mills 理論の双対として

$$\mathcal{L}^{\text{dual}} = \frac{e^2}{24\pi^2} \left(|d\sigma_1|^2 + |d\sigma_2|^2 + |d\sigma_1 - d\sigma_2|^2 \right) \quad (7.3)$$

を得る。モノポールの効果を含まない分配関数は、

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\sigma_\alpha e^{-\int \mathcal{L}^{\text{dual}}} = \int \mathcal{D}\sigma_\alpha \exp \left[-\frac{e^2}{24\pi^2} \int \left(|d\sigma_1|^2 + |d\sigma_2|^2 + |d\sigma_1 - d\sigma_2|^2 \right) \right] \quad (7.4)$$

で与えられる。

Néel 相でモノポールの効果は抑制されていたが、VBS 相ではモノポール項を無視することはできないので、モノポールを含む理論の分配関数を構成する必要がある。モノポール演算子 $M_\alpha^{(\dagger)}$ の挿入によって、ゲージ場 a_α のスキルミオンが消滅 (生成) する。表 D.1 より、双対理論におけるモノポール演算子は、

$$\begin{pmatrix} M_1(x) \\ M_2(x) \\ M_3(x) \end{pmatrix} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} e^{-i\sigma_1(x)+i\sigma_2(x)} \\ e^{-i\sigma_2(x)} \\ e^{i\sigma_1(x)} \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

で表される。簡単のため、destructive interference が起こらないスピン表現 $p \bmod 3 = 0$ で説明する。あらゆる時空点にモノポールが存在する経路を足し上げることで、モノポールの分配関数が得られる。一般にモノポールのチャージが大きくなるほど生成に必要なエネルギーが増加するので、チャージ $|Q_\alpha| \leq 1$ を持つモノポールのみを、最低次の摂動として追加する。これは、モノポール項 \mathcal{L}_M として (5.75) を用いることと対応している。希薄なモノポールガスの近似を仮定し、モノポールどうしの相互作用を無視すると、

分配関数は次の形となる：

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{n_\alpha, \bar{n}_\alpha=0}^{\infty} \frac{1}{n_1! \bar{n}_1! n_2! \bar{n}_2! n_3! \bar{n}_3!} \int \mathcal{D}\sigma_\alpha e^{-\int \mathcal{L}^{\text{dual}}} \\
&\cdot \left(\int d^3x_1 e^{-S_0(x_1) - S_{B,1}(x_1)} e^{-i\sigma_1(x_1) + i\sigma_2(\bar{x}_1)} \right)^{n_1} \left(\int d^3\bar{x}_1 e^{-S_0(\bar{x}_1) + S_{B,1}(\bar{x}_1)} e^{+i\sigma_1(\bar{x}_1) - i\sigma_2(\bar{x}_1)} \right)^{\bar{n}_1} \\
&\cdot \left(\int d^3x_2 e^{-S_0(x_2) - S_{B,2}(x_2)} e^{-i\sigma_2(x_2)} \right)^{n_2} \left(\int d^3\bar{x}_2 e^{-S_0(\bar{x}_2) + S_{B,2}(\bar{x}_2)} e^{+i\sigma_2(\bar{x}_2)} \right)^{\bar{n}_2} \\
&\cdot \left(\int d^3x_3 e^{-S_0(x_3) - S_{B,3}(x_3)} e^{+i\sigma_1(x_3)} \right)^{n_3} \left(\int d^3\bar{x}_3 e^{-S_0(\bar{x}_3) + S_{B,3}(\bar{x}_3)} e^{-i\sigma_1(\bar{x}_3)} \right)^{\bar{n}_3} \\
&= \int \mathcal{D}\sigma_\alpha \exp \left[- \int d^3x \left\{ \frac{e^2}{24\pi^2} \left((\partial_\mu \sigma_1(x))^2 + (\partial_\mu \sigma_2(x))^2 + (\partial_\mu \sigma_1(x) - \partial_\mu \sigma_2(x))^2 \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - e^{-S_0(x)} \left(e^{-S_{B,1}(x)} e^{-i\sigma_1(x) + i\sigma_2(x)} + e^{-S_{B,2}(x)} e^{-i\sigma_2(x)} + e^{-S_{B,3}(x)} e^{+i\sigma_1(x)} + \text{h.c.} \right) \right\} \right]. \quad (7.6)
\end{aligned}$$

ここで、 n_α (\bar{n}_α) は、モノポール演算子 M_α (M_α^\dagger) を挿入する回数を意味する。 $e^{-S_0(x)}$ (≥ 0) はモノポールをゲージ場に追加するために必要となる、運動項の余分な寄与を表す。非線形シグマ模型は $\alpha = 1, 2, 3$ の入れ替えで対称なので、 S_0 は α に依存しない。運動項は時間 (τ) 反転不変なので、同一種類のスキルミオンの生成と消滅に対して、共通の値を持つ。 $\exp(-S_{B,\alpha}(x))$ は、 M_α によってスキルミオンが時空点 x^μ で消滅するときの Berry 位相の寄与を表し、絶対値 1 の複素位相である。もしモノポールが格子の中心にあれば、図 5.7 の ξ^p に M_α と対応するスキルミオンのチャージ $(Q_1, Q_2) = (-\Delta Q_1^{xy}, -\Delta Q_2^{xy})$ を代入したものが、 $\exp(-S_{B,\alpha}(x))$ である。スキルミオン生成時の因子は、Berry 位相の計算規則 (5.39) により、 $[\exp(-S_B(x))]^* = \exp(+S_B(x))$ を用いた。

Berry 位相の因子 $\exp(-S_{B,\alpha}(x))$ は、格子定数 a のスケールで激しく振動する。そのため、(7.6) においてモノポールの時空点を意味する $x^\mu = (\vec{r}, \tau)$ に関する積分を、慎重に評価する必要がある。

まずは、モノポールが格子の中心にのみ存在すると仮定する。Berry 位相の最小繰り返し単位である図 5.7 の 18 個の三角形に、 $s = 1, \dots, 18$ とラベルを付け、各格子の中心点の空間座標を \vec{X}_s^c と表すことにする。スキルミオンが $M_\alpha^\dagger(\vec{r}_1, \tau_1)$ で生成した後に $M_\alpha(\vec{r}_2, \tau_2)$ で消滅するトンネル過程の Berry 位相を、 $S_{B,\alpha}(\vec{r}_1; \vec{r}_2)$ と書く^{*1}。生成地点を左下三角形中心に固定 ($\vec{r}_1 = \vec{X}_1^c$) したときに、 M_α と対応するスキルミオン消滅過程の因子 $\exp(-S_{B,\alpha})$ の $\{X_s^c\}_{s=1, \dots, 18}$ に関する平均値を、

$$W_{c,\alpha} = \frac{1}{18} \sum_{s=1}^{18} \exp[-S_{B,\alpha}(\vec{X}_1^c; \vec{X}_s^c)] \quad (7.7)$$

と定める。要するに W_c は、図 5.7 (で適切な Q_1, Q_2 を代入したもの) の平均値に等しい。ここで、隣接する 18 個の三角形を、連続極限で 1 点 $X^\mu = (\vec{X}, \tau)$ に写像する粗視化を行う。連続極限をとる前はどの三角形だったかを、ラベル s で記述する。すなわち、格子中心の時空点は、 $x^\mu \mapsto (X^\mu; s)$ で一意に指定される。(7.6) の x^μ 積分は、

$$\int d^3x \rightarrow \int d\tau \otimes \int d\vec{X} \otimes \sum_{s=1}^{18} = \int d^3X \otimes \sum_{s=1}^{18} \quad (7.8)$$

と分解できる。被積分関数 $S_0, S_{B,\alpha}, \sigma_\alpha$ の引数を、 (X^μ, s) に置き換える。連続極限 ($a \rightarrow 0$) において、 $\mathcal{O}(a)$ のスケールで緩やかに変化する S_0, σ_α の引数 x^μ を、代表点 X^μ で近似することが許される。それに対して $S_{B,\alpha}$ は、Berry 位相は 18 個の三角形で繰り返すので X^μ には依存せず、 s のみを引数に取る。した

^{*1}(5.39) より、 $\exp[-S_{B,\alpha}(\vec{r}_1; \vec{r}_2)] = \exp[-S_{B,\alpha}(\vec{r}_2) + S_{B,\alpha}(\vec{r}_1)]$ が成立する。

がって、(7.6) のポテンシャル項は

$$\begin{aligned} \int d^3x V(x) &= \int d^3x \left[-e^{-S_0(x)} \left\{ e^{-S_{B,1}(x)} e^{-i\sigma_1(x)+i\sigma_2(x)} + e^{-S_{B,2}(x)} e^{-i\sigma_2(x)} + e^{-S_{B,3}(x)} e^{+i\sigma_1(x)} + \text{h.c.} \right\} \right] \\ &\simeq \int d^3X \sum_{s=1}^{18} \left[-e^{-S_0(X)} \left\{ e^{-S_{B,1}(s)} e^{-i\sigma_1(X)+i\sigma_2(X)} + e^{-S_{B,2}(s)} e^{-i\sigma_2(X)} \right. \right. \\ &\qquad \qquad \qquad \left. \left. + e^{-S_{B,3}(s)} e^{+i\sigma_1(X)} + \text{h.c.} \right\} \right] \\ &= \int d^3X \left[-18e^{-S_0(X)} \left\{ W_{c,1} e^{-i\sigma_1(X)+i\sigma_2(X)} + W_{c,2} e^{-i\sigma_2(X)} + W_{c,3} e^{+i\sigma_1(X)} + \text{h.c.} \right\} \right] \quad (7.9) \end{aligned}$$

となる.

次に, モノポールが格子点上を除く一般の場所に存在する場合を考える. 格子の中心に当たる 18 個の空間座標の離散和を, 18 個の三角形内部の積分に変更する. 生成地点を左下三角形中心に固定したときに, M_α に対応するスキルミオン消滅過程の因子 $\exp(-S_{B,\alpha})$ の平均値を,

$$W_{\text{int},\alpha} = \frac{4}{18\sqrt{3}a^2} \int_{18\Delta} d\vec{r} \exp \left[-S_{B,\alpha}(\vec{X}_1^c; \vec{r}) \right] \quad (7.10)$$

と定める. ここで 18Δ とは, Berry 位相の繰り返し単位である, 隣接する 18 個の三角形内部の (格子点を除く) 領域を意味する. 要するに W_{int} は, 図 5.8 に例を示した $\exp(-S_B)$ について, 領域内の平均値をとったものに等しい. (7.6) の x^μ 積分は,

$$\int d^3x \longrightarrow \int d\tau \otimes \int d\vec{X} \otimes \frac{4}{18\sqrt{3}a^2} \int_{18\Delta} d\vec{r} = \int d^3X \otimes \frac{4}{18\sqrt{3}a^2} \int_{18\Delta} d\vec{r} \quad (7.11)$$

と分解できる. 格子の中心の場合と同様の議論により, (7.9) の代わりに,

$$\int d^3x V(x) \simeq \int d^3X \left[-\frac{4e^{-S_0(X)}}{18\sqrt{3}a^2} \left\{ W_{\text{int},1} e^{-i\sigma_1(X)+i\sigma_2(X)} + W_{\text{int},2} e^{-i\sigma_2(X)} + W_{\text{int},3} e^{+i\sigma_1(X)} + \text{h.c.} \right\} \right] \quad (7.12)$$

を得る.

(7.9), (7.12) より, $p \bmod 3 = 0$ のときのポテンシャル項は,

$$V(X) \propto - \left\{ W_{\bullet,1} e^{-i\sigma_1(X)+i\sigma_2(X)} + W_{\bullet,2} e^{-i\sigma_2(X)} + W_{\bullet,3} e^{+i\sigma_1(X)} + \text{h.c.} \right\} \quad (7.13)$$

となる. 比例記号 \propto は, 正の係数を省いたことを意味する. 因子 $W_{\bullet,\alpha}$ は, モノポールを格子の中心に限る場合は $W_{c,\alpha}$ を, 中心以外も含める場合は $W_{\text{int},\alpha}$ を選ぶ. 実際に $W_{\bullet,\alpha}$ は, $\alpha = 1, 2, 3$ に依存しないことが分かったので, (7.13) において $|W_{\bullet,\alpha}|$ は比例係数として無視できる. よって, 以降は $W_{\bullet,\alpha}$ の添字 α を略す. また, destructive interference が起こる $p \bmod 3 \neq 0$ のときには, 3 の倍数のチャージを持つモノポールだけが分配関数に寄与するので, $M_\alpha^{(\dagger)}$ を $(M_\alpha^{(\dagger)})^3$ に置き換える必要がある. (7.13) を整理すると, 希薄なモノポールガスの双対理論におけるポテンシャル項は,

$$V(X) \propto - \left[\cos(-n\sigma_1(X) + n\sigma_2(X) + \delta) + \cos(-n\sigma_2(X) + \delta) + \cos(n\sigma_1(X) + \delta) \right], \quad (7.14)$$

$$\delta = \text{Arg}(W_\bullet) \quad (7.15)$$

と表される. ただし, $p \bmod 3 \neq 0$ のときは $n = 3$ を代入し, W_\bullet は M_α^3 に対応するトンネル過程の $\exp(-S_B)$ の平均値を意味する. $p \bmod 3 = 0$ のときは $n = 1$ を代入し, W_\bullet は M_α に対応するトンネル過程の $\exp(-S_B)$ の平均値を意味する.

W_c は図 5.7 を用いて, (5.40) と同様に計算できる:

$$W_c = \frac{1}{18} (1 + z^{3pQ_1} + z^{-3pQ_1})(1 + z^{3pQ_2} + z^{-3pQ_2})(1 + z^{-pQ_1 - 2pQ_2}). \quad (7.16)$$

$p \bmod 18$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\text{Arg}(W_c)$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	0
$\text{Arg}(W_{\text{int}})$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	π
$\text{Arg}(-\lambda)$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$0, \pi$

$p \bmod 18$	10	11	12	13	14	15	16	17	0
$\text{Arg}(W_c)$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	0
$\text{Arg}(W_{\text{int}})$	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{3}$	0
$\text{Arg}(-\lambda)$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$	$0, \pi$

表 7.2: Berry 位相の平均値 $W_{c,\alpha}$, $W_{\text{int},\alpha}$ の偏角と, 格子の対称性を満たすモノポール項の係数 λ の偏角. ここでは最低次のモノポールのみを考える.

この表式は, 5.3.2 節で述べた Berry 位相の図形的規則の帰結である. 例えば, $p = 1$ の M_1 に対応する因子は $(p; Q_1, Q_2) = (1; 3, -3)$ を, $p = 3$ の M_2 に対応する因子は $(p; Q_1, Q_2) = (3; 0, 1)$ を, (7.16) に代入する. 得られた W_c の偏角を, 表 7.2 の 2 行目に示す.

W_{int} に関しては, (7.10) の積分を数値計算で実行し, その結果から

$$\arg(W_{\text{int}}) = \begin{cases} \frac{p\pi}{3} & (p \bmod 3 \neq 0) \\ \frac{p\pi}{9} & (p \bmod 3 = 0) \end{cases} \quad (7.17)$$

が成立すると推測した. この妥当性は, 付録 F に記す図形的規則の議論によって補強される. (7.17) で求めた $\text{Arg}(W_{\text{int}})$ を, 表 7.2 の 3 行目に示す. $\text{Arg}(W_{c,\alpha})$ と $\text{Arg}(W_{\text{int},\alpha})$ が常に一致する SU(2) 正方格子とは対照的に, SU(3) 三角格子においては, 両者は必ずしも一致しない. どちらを選ぶかによって, ポテンシャル項 $V(X)$ の形状が変わる. どちらを採用するのが適切であるかの議論は, 7.3.2 節まで延期する.

(7.6) の式変形からは, (5.74), (5.75) のモノポール項 \mathcal{L}_M と

$$-e^{-S_0} W_\bullet \longleftrightarrow \lambda \implies \text{Arg}(W_\bullet) \longleftrightarrow \text{Arg}(-\lambda) = \text{Arg}(\lambda) + \pi \quad (7.18)$$

で対応していることが読み取れる. λ は, destructive interference で消えない最低次のモノポール演算子の係数である. W_\bullet は Berry 位相に由来した虚数成分を持つため, λ は一般に複素数となる. (7.9) または (7.12) を Taylor 展開すると

$$V(X) \propto -e^{-S_0} W_\bullet \cdot 2 \left[3 - (-\sigma_1 + \sigma_2)^2 - (-\sigma_2)^2 - (\sigma_1)^2 + \mathcal{O}(\sigma_\alpha^4) \right] \quad (7.19)$$

となるので, $|\lambda|$ はモノポールの“質量”を意味するパラメータと解釈できる. モノポール項は本来, (5.73) のように, M_α の高次の項を追加することができるが, ここでは $|e^{-S_0}|$ の最低次を残す近似を行って, 有効ポテンシャル (7.14) を導出した. 最低次のみ近似が許されるかどうかは, ハミルトニアン の具体形に依存する. 5.5 節では, \mathcal{L}_M が格子の対称性変換の下で不変という条件から, λ の偏角が制限されることを指摘した. 表 5.2 から求められる $\text{Arg}(-\lambda)$ の値を, 表 7.2 の 4 行目に示す. W_c と W_{int} はどちらも, 格子の対称性を満たしていることが分かる.

希薄なモノポールガスの近似からは有効ポテンシャル (7.14), (7.15) が導出されたが, 以下では制限を緩めて, 格子の対称性を満たす λ を持った有効理論を考えることにする. (7.14) のパラメータ δ は,

$$\delta = \text{Arg}(-\lambda) \quad (7.20)$$

に修正される. $\text{Arg}(-\lambda)$ は, 表 7.2 に示した 2 通りの値を考慮する. 上述の通り, この仮定は希薄なモノポールガスの理論を内包する. より一般には, $|e^{-S_0}|$ が小さいとする近似が成立せずに, 有効理論に高次のモノポールを含めなければならない可能性もある. しかしこの場合には, 各次数の係数 λ_n の絶対値もポテ

δ	$p \bmod 3 \neq 0$	$p \bmod 3 = 0$
0	$\left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z}\right)$	$(0, 0)$
$\frac{\pi}{3}$	$\left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z}\right), \left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{4\pi}{9}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{2\pi}{9}\right)$	$(0, 0), \left(\frac{4\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}\right)$
$\frac{2\pi}{3}$	$\left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{4\pi}{9}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{2\pi}{9}\right)$	$\left(\frac{4\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}\right)$
π	$\left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{4\pi}{9}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{2\pi}{9}\right), \left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{2\pi}{9}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{4\pi}{9}\right)$	$\left(\frac{4\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}\right), \left(\frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}\right)$
$\frac{4\pi}{3}$	$\left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{2\pi}{9}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{4\pi}{9}\right)$	$\left(\frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}\right)$
$\frac{5\pi}{3}$	$\left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z}\right), \left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{2\pi}{9}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{4\pi}{9}\right)$	$(0, 0), \left(\frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}\right)$

表 7.3: ポテンシャル V (7.14) を最小にする (σ_1, σ_2) の値. σ_α はコンパクトスカラー場なので, 2π 周期で同一視する. $p \bmod 3 \neq 0$ のとき 9 個または 18 個, $p \bmod 3 = 0$ のとき 1 個または 2 個の最小点が存在する.

ンシャルの形状を決める要因となり, かなりの任意性が発生するので, 本論文では最低次のモノポールに限定する.

(7.6) の $\{ \}$ 内を最小にする配位が, 基底状態 (真空) として実現される. 運動項の最小値は, $\sigma_\alpha(x)$ が時空点 x^μ に依らない一定値のときに 0 を取る. 基底状態を求めることは, 有効ポテンシャル (7.14), (7.20) を最小にする真空期待値 $\sigma_\alpha = \langle \sigma_\alpha(x) \rangle$ を求める問題に帰着する. δ に応じたポテンシャル V の最小点を, 表 7.3 に示す. コンパクトスカラー場 σ_α が 2π 周期で同一視されることに注意すると, $p \bmod 3 = 0$ のとき, δ が $\pi/3$ の奇数倍ならば 1 個, 偶数倍ならば 2 個の最小点を持つ. $p \bmod 3 \neq 0$ のときは, その 9 倍の個数の最小点が存在している. SU(2) 正方格子のモノポールガスによる解析 (2.4 節) からは, ポテンシャル最小点のそれぞれが, 縮退した異なる VBS 基底状態に対応することが予想される. その一方で, 縮退数が最大 18 個と不自然に多いことに気付く. 次節以降では, SU(3) 三角格子に対して定義した VBS 秩序変数を通して, ポテンシャル V の最小点と VBS 状態の対応付けを行い, 縮退数の解釈を与える.

7.3 VBS 状態との対応関係

格子の対称性を保ち, VBS 状態を基底状態に持つハミルトニアンを考える. モノポールの位相変換には, 格子の対称性と密接な関係があることを, 5.4 節で指摘した. 7.1 節に述べた VBS 状態が持つ対称性を, モノポールガスの近似で説明できるか調べる. VBS 秩序変数とモノポール演算子が同じ対称性を持つことが示されれば, 臨界理論で両者は等価な演算子として機能すると言える [36].

7.3.1 $p = 1$ の場合

(7.2) で定義した VBS 秩序変数 ψ_α について, 対称性を調べることから始める. VBS 相は三角格子の対称性を自発的に破っており, 図 7.2 に示した各状態は, 格子の対称性変換で移り変わる. 状態ではなく演算子を変換する立場を採用すると, 演算子としての $\psi_\alpha(\vec{r}_\alpha)$ は, 格子の対称性変換 \mathcal{T} によって

$$\psi'_\alpha(\vec{r}_\alpha) = e^{i\frac{\pi}{6}} \hat{P} \left(\mathcal{T}^{-1} \vec{r}_\alpha, \mathcal{T}^{-1} \left(\vec{r}_\alpha + \frac{\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}}{2} \right), \mathcal{T}^{-1} (\vec{r}_\alpha + \hat{x}) \right) + e^{i\frac{3\pi}{6}} \dots \quad (7.21)$$

に変換する. 5.4 節で説明したように, 変換の独立な生成子である $2\pi/6$ 回転 (R1), x 軸鏡映 (P1), x 軸並進 (T_x) の 3 つに注目すれば十分である. $\langle \psi_\alpha(\vec{r}_\alpha) \rangle$ が一様となる規則正しい VBS 状態に対して作用する

ことを仮定すると、右辺の空間座標を等価な点に平行移動して、頂点に \vec{r}_α が含まれる三角形に引数を揃えることが許される。その結果、 $\psi(\vec{r}_\alpha)$ は

$$\text{R1} : \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \\ \psi'_3 \end{pmatrix} = e^{i\frac{\pi}{3}} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (7.22)$$

$$\text{P1} : \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \\ \psi'_3 \end{pmatrix} = e^{i\pi} \begin{pmatrix} \psi_1^\dagger \\ \psi_3^\dagger \\ \psi_2^\dagger \end{pmatrix}, \quad (7.23)$$

$$\text{T}_x : \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \\ \psi'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_1 \end{pmatrix} \quad (7.24)$$

と変換する（引数はすべて \vec{r}_α ）。実際に、表 7.1 の値を代入すると、期待値が (7.22)–(7.24) に従って変換することが確かめられる。

一方で、モノポール演算子 M_α の変換則は、(5.54), (5.61), (5.67) と求められている。モノポールが凝縮した相 ($\langle M_\alpha(\vec{r}) \rangle \neq 0$) においては、真空期待値は空間座標に依らないため、これらの式で両辺の M_α の引数を \vec{r} に置き換えることが許される。以上の仮定の下で、変換前後の M_α と ψ_α の引数が、すべて \vec{r} に揃えられる^{*2}。

上記の ψ_α と同じ変換則を持つ演算子を、モノポール演算子で構成したい。だが今の場合、SU(2) 正方格子の (2.98) のように、 $\psi_\alpha \sim M_\alpha^{(\dagger)}$ の単純な関係は成立していない。図 7.2 の VBS 状態は、三角格子の対角線方向の平行移動： $\vec{r} \mapsto \vec{r} + (\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y})/2$ で不変である。よって、 ψ_α を M_α で記述する際も、 D_\pm 変換 (5.68) で不変な組み合わせにしなければならない。演算子全体が D_\pm 不変であること、そして R1 変換で閉じる ((R1)⁶ で元に戻る) ことを課すと、 ψ_α は

$$e^{ix} M_1^y M_2^z \quad \text{where } y, z \in \mathbb{Z}, \quad (y+z) \bmod 3 = 0 \quad (7.25)$$

の線形結合でなければならない^{*3}。正しい ψ_α の変換則が得られるモノポール演算子の組み合わせは、唯一つに決まるわけではないが、例えば

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_1 M_2^{-1} + e^{i\frac{\pi}{3}} M_1 M_2^2 \\ e^{i\frac{4\pi}{3}} M_1 M_2^2 + e^{i\frac{5\pi}{3}} M_1^{-2} M_2^{-1} \\ e^{i\frac{2\pi}{3}} M_1^{-2} M_2^{-1} + e^{i\pi} M_1 M_2^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_1 M_2^\dagger + e^{i\frac{\pi}{3}} M_2 M_3^\dagger \\ e^{i\frac{4\pi}{3}} M_2 M_3^\dagger + e^{i\frac{5\pi}{3}} M_3 M_1^\dagger \\ e^{i\frac{2\pi}{3}} M_3 M_1^\dagger + e^{i\pi} M_1 M_2^\dagger \end{pmatrix} \quad (7.26)$$

と選ぶと、 ψ_α の変換則 (7.22)–(7.24) と、 M_α の変換則 (5.54), (5.61), (5.67) が矛盾しない。特に、 D_\pm 変換 (5.68) に対しては、 $\psi_\alpha(\vec{r}_\alpha) \mapsto \psi_\alpha(\vec{r}_\alpha)$ と不変であることが実際に確かめられる。

(7.26) の関係が成立するならば、モノポールの凝縮 ($\langle M_\alpha \rangle \neq 0$) は、 $\langle \psi_\alpha \rangle \neq 0$ を持つ VBS 状態と等価である。この描像が適切であるかを見るために、モノポールガスで求めたポテンシャル $V(\sigma)$ の最小点を、図 7.2 の VBS 状態に関連付ける。

希薄なモノポールガスの近似を適用して得られるポテンシャルは、 $p = 1$ の場合、 $\text{Arg}(W_c) = \text{Arg}(W_{\text{int}}) = \pi/3$ で偶然一致している (表 7.2 を参照) ので、中心値か積分値かを気にしなくてよい。モノポールの期待値 $(\sigma_1, \sigma_2) = (\langle \sigma_1(\vec{r}) \rangle, \langle \sigma_2(\vec{r}) \rangle)$ は、表 7.3 の値に凝縮している。(7.15) より $\delta = \pi/3$ を代入すると、ポテンシャルの最小点は

$$(\sigma_1, \sigma_2) \in \left\{ \left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} \right), \left(\frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{4\pi}{9}, \frac{2\pi}{3}\mathbb{Z} + \frac{2\pi}{9} \right) \right\} \quad (7.27)$$

に 18 重縮退している。(7.5) を用いると、 M_α を $\sigma_{1,2}$ で表せる。最小点 (7.27) を代入して (7.26) の右辺の真空期待値を計算する。例えば $(\sigma_1, \sigma_2) = (\frac{4\pi}{9}, \frac{2\pi}{9})$ の場合、

$$\langle \psi_1 \rangle = \left[e^{-i\frac{2\pi}{9}} (e^{-i\frac{2\pi}{9}})^{-1} + e^{i\frac{\pi}{3}} e^{-i\frac{2\pi}{9}} (e^{i\frac{4\pi}{9}})^{-1} \right] = [1 + e^{-i\frac{\pi}{3}}] = \sqrt{3} e^{i\frac{11\pi}{6}} \quad (7.28)$$

^{*2}引き続き 7.3.2 節でも、この仮定を用いる。

^{*3}(5.43) より $M_3 = M_1^\dagger M_2^\dagger$ なので、ここでは M_1 と M_2 を独立な演算子として扱う。

	$(0, 0)$	$(\frac{16\pi}{9}, \frac{2\pi}{9})$	$(\frac{12\pi}{9}, 0)$	$(\frac{10\pi}{9}, \frac{2\pi}{9})$	$(\frac{6\pi}{9}, 0)$	$(\frac{4\pi}{9}, \frac{2\pi}{9})$
(σ_1, σ_2)	$(\frac{6\pi}{9}, \frac{12\pi}{9})$	$(\frac{4\pi}{9}, \frac{14\pi}{9})$	$(0, \frac{12\pi}{9})$	$(\frac{16\pi}{9}, \frac{14\pi}{9})$	$(\frac{12\pi}{9}, \frac{12\pi}{9})$	$(\frac{10\pi}{9}, \frac{14\pi}{9})$
	$(\frac{12\pi}{9}, \frac{6\pi}{9})$	$(\frac{10\pi}{9}, \frac{8\pi}{9})$	$(\frac{6\pi}{9}, \frac{6\pi}{9})$	$(\frac{4\pi}{9}, \frac{8\pi}{9})$	$(0, \frac{6\pi}{9})$	$(\frac{16\pi}{9}, \frac{8\pi}{9})$
$\text{Arg}\langle\psi_1\rangle$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{3\pi}{6}$	$\frac{5\pi}{6}$	$\frac{7\pi}{6}$	$\frac{9\pi}{6}$	$\frac{11\pi}{6}$
$\text{Arg}\langle\psi_2\rangle$	$\frac{9\pi}{6}$	$\frac{7\pi}{6}$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{11\pi}{6}$	$\frac{5\pi}{6}$	$\frac{3\pi}{6}$
$\text{Arg}\langle\psi_3\rangle$	$\frac{5\pi}{6}$	$\frac{11\pi}{6}$	$\frac{9\pi}{6}$	$\frac{3\pi}{6}$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{7\pi}{6}$

表 7.4: $p \bmod 6 = 1$ の場合に, ポテンシャル最小点の (σ_1, σ_2) から (7.26) に従って求めた, VBS 秩序変数 $\langle\psi_\alpha\rangle$ の期待値. 絶対値はすべて $|\langle\psi_\alpha\rangle| = \sqrt{3}$ となる. 同一の $\langle\psi_\alpha\rangle$ を与える (σ_1, σ_2) どうしは, D_\pm 変換 (7.29) で移り変わる.

のように計算される. その結果, 表 7.4 に示す 6 通りの期待値 ($\langle\psi_1\rangle, \langle\psi_2\rangle, \langle\psi_3\rangle$) が得られる. これらの偏角は, (7.2) によってスピン配位から求めた値 (表 7.1) と一致している. (7.26) の両辺の変換則が等しいので, 回転・鏡映・並進の下で, 表 7.4 の $\langle\psi_\alpha\rangle$ もまた, 図 7.2 に従って移り変わる. 同一の $\langle\psi_\alpha\rangle$ を与えるポテンシャル最小点は 3 つ存在し, それらは D_\pm 変換 (5.68), すなわち

$$\begin{pmatrix} \sigma'_1 \\ \sigma'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \pm \frac{2\pi}{3}p \\ \sigma_2 \mp \frac{2\pi}{3}p \end{pmatrix} \pmod{2\pi} \quad (7.29)$$

で繋がっている. これは図 7.2 の VBS 状態が D_\pm 不変であることの帰結である.

以上から, モノポールガスで求めた有効ポテンシャルの 18 個の最小点は, D_\pm 変換で移り変わる 3 点を同一視することにより, 6 重縮退の VBS 状態と対応していると言える. 逆に, モノポール演算子 M_α の変換則は, トンネル過程で生じる Berry 位相から求められたものである. 三角格子のどこにスピン一重項が形成されているか, という VBS 状態の情報を使っていないにもかかわらず, (7.26) のように VBS 秩序変数 ψ_α と結びつけられることは, 偶然の一致とは考え難い. モノポールの凝縮が Néel 秩序を壊し, VBS 秩序を引き起こすという直接相転移の機構が, スピン表現 $p = 1$ の $SU(3)$ 三角格子にも当てはまることの根拠になると思われる.


ところで, 対称性の議論からは, 最低次のモノポール項として係数 $\text{Arg}(-\lambda) = 4\pi/3$ の理論も許されている. モノポールガスの有効ポテンシャルには, 表 7.3 で $\delta = 4\pi/3$ の欄に示されている通り, 9 個の最小点が存在する. D_\pm 不変性を仮定すると, 上記の議論と同じ理由から, 3 重縮退している何らかの VBS 状態と対応することが期待される. しかし, (7.26) で定義した VBS 秩序変数の真空期待値を (7.28) と同様に計算すると, すべての最小点で $\langle\psi_\alpha\rangle = 0$ となってしまう. 適切な VBS 秩序変数を選び直せば, 縮退した VBS 状態と対応付けられるかもしれないが, 詳細は分かっていない.

7.3.2 一般の p の場合

7.1 節でも述べたように, スピン表現 $p > 1$ に対しても VBS 状態を構成することができる. しかし, 適当な VBS 秩序変数が見つかっておらず, (7.26) のようなモノポール演算子と結びつける関係式を作ることができていない. そのため, ここでは縮退数に基づく大まかな議論に留まる.

(I) W_c と W_{int} のどちらを用いるべきか

有効ポテンシャル (7.13) に現れる, Berry 位相に由来した位相因子が W_\bullet であった. モノポールが存在する位置を, 三角格子の中心に限れば W_c , 格子の内部全体とすれば W_{int} が導かれる. $SU(2)$ 正方格子反強磁性体では, 両者は常に一致する.



$$\langle \psi_\alpha \rangle = \begin{cases} 1 & (p \bmod 18 = 3) \\ \omega^2 & (p \bmod 18 = 9) \\ \omega & (p \bmod 18 = 15) \end{cases} \quad \langle \psi_\alpha \rangle = \begin{cases} \omega^2 & (p \bmod 18 = 3) \\ \omega & (p \bmod 18 = 9) \\ 1 & (p \bmod 18 = 15) \end{cases}$$

図 7.3: $p = 3$ の 2 重縮退した VBS 状態が従う変換則. 赤色は R1 変換, 橙色は P1 変換, 水色は T_x 変換を表す. 黒点と数値は, ポテンシャル最小点と (7.30) から求めた $\langle \psi_\alpha \rangle$ を意味する. $\alpha = 1, 2, 3$ で共通の結果が得られた.

希薄なモノポールガスで導出した有効ポテンシャル (7.14), (7.15) の最小点が, VBS 状態にそれぞれ対応するならば, W_{int} を用いるのが妥当と考えられる. その理由は, VBS 相の性質が $p \bmod 6$ で周期的に変化することである. 三角格子上の VBS 状態の構成法からは, $p \bmod 6$ が等しければ, 縮退数も一致している (7.1 節の最終段落を参照). 表 7.2, 7.3 からポテンシャル最小点の数を読み取ると, W_{int} に対しては, $p \bmod 6 = 3$ のとき 2 個, $p \bmod 6 = 0$ のとき 1 個と固定されている. 一方で W_c に対しては, $p = 3, 6$ のとき 1 個, $p = 9$ のとき 2 個となっており, p の周期が 6 ではなく 9 で変化している. よって, W_{int} が予想される縮退数の周期と合致する. さらに, $p \bmod 3 \neq 0$ に対しては $\arg(W_{\text{int}}) = p\pi/3$ が成立しており, p の周期がちょうど 6 であることも, W_{int} を用いるのが自然な理由である.

モノポール項の係数 λ は, 対称性から 2 通りの偏角が許されているので, 希薄なモノポールガスの近似を外れた理論で VBS 相を記述することも認められている. この場合は, W_c を用いても物理的状態と矛盾していない. ただ, 希薄なモノポールガスの近似から一貫性のある結論を導こうとすると, W_{int} を使うべきである, と主張する.

(II) $p \bmod 6 = 3, 0$ のとき

$p \bmod 6 = 3, 0$ のとき, 図 7.1(b), (c) にそれぞれ示した VBS 状態が構成できる. 図 7.1(b) の状態は, $\frac{2\pi}{6}$ 回転対称性が自発的に破れており, 2 重縮退している. 図 7.1(c) の状態は, 格子の対称性を保っており, 縮退がない.

W_{int} を使用した希薄なモノポールガスの近似からは, 表 7.2, 7.3 より, $p \bmod 6 = 3$ のとき 2 個, $p \bmod 6 = 0$ のとき 1 個のポテンシャル最小点が存在する. どちらも図 7.1(b), (c) の縮退数と一致しているので, 1 個のポテンシャル最小点が 1 個の VBS 状態に対応することが予想される. ここで, $p = 1$ のときには D_\pm 対称性のために, ポテンシャル最小点と VBS 状態が 3 対 1 で対応していたが, $p \bmod 3 = 0$ のときに D_\pm 変換 (5.68) はモノポール演算子 M_α を変換しないので, 1 対 1 対応であると解釈できる.

$p \bmod 6 = 3$ のとき, 縮退した VBS 状態を区別する何らかの VBS 秩序変数 ψ_α が存在して,

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = M_\alpha(\vec{r}) \quad (7.30)$$

が成立していると仮定する. 有効ポテンシャルの最小点 (σ_1, σ_2) は, 表 7.3 の $\delta = \text{Arg}(W_{\text{int}}) = p\pi/9$ に示されている. それらを (7.30) に代入し, モノポール演算子の R1 変換 (5.54), P1 変換 (5.61), T_x 変換 (5.67) で $\langle \psi_\alpha \rangle$ がどのように変換するかを調べると, 任意の $p \bmod 6 = 3$ に対して, 図 7.3 の変換則に従うことが明らかになった. P1, T_x 変換では不変であり, R1 変換によって入れ替わる性質は, 図 7.1(b) の VBS 状態の性質と一致している. よって, ψ_α をスピン演算子 \hat{S}_{vw} を用いて適切に定義することができれば, (7.30) でモノポール演算子と関係付けられる可能性がある.

希薄なモノポールガスの近似に該当しない $\text{Arg}(\lambda)$ を用いた場合, $p \bmod 6 = 3, 0$ のとき, ポテンシャル最小点は 1 個, 2 個となって逆転する. これらが物理的な VBS 状態と対応しているかは, 現在のところ不明である.

	$(0, 0)$	$(\frac{14\pi}{9}, \frac{4\pi}{9})$	$(\frac{6\pi}{9}, 0)$	$(\frac{2\pi}{9}, \frac{4\pi}{9})$	$(\frac{12\pi}{9}, 0)$	$(\frac{8\pi}{9}, \frac{4\pi}{9})$
(σ_1, σ_2)	$(\frac{6\pi}{9}, \frac{12\pi}{9})$	$(\frac{2\pi}{9}, \frac{16\pi}{9})$	$(\frac{12\pi}{9}, \frac{12\pi}{9})$	$(\frac{8\pi}{9}, \frac{16\pi}{9})$	$(0, \frac{12\pi}{9})$	$(\frac{14\pi}{9}, \frac{16\pi}{9})$
	$(\frac{12\pi}{9}, \frac{6\pi}{9})$	$(\frac{8\pi}{9}, \frac{10\pi}{9})$	$(0, \frac{6\pi}{9})$	$(\frac{14\pi}{9}, \frac{10\pi}{9})$	$(\frac{6\pi}{9}, \frac{6\pi}{9})$	$(\frac{2\pi}{9}, \frac{10\pi}{9})$
$\text{Arg}\langle\psi_1\rangle$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{3\pi}{6}$	$\frac{5\pi}{6}$	$\frac{7\pi}{6}$	$\frac{9\pi}{6}$	$\frac{11\pi}{6}$
$\text{Arg}\langle\psi_2\rangle$	$\frac{9\pi}{6}$	$\frac{7\pi}{6}$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{11\pi}{6}$	$\frac{5\pi}{6}$	$\frac{3\pi}{6}$
$\text{Arg}\langle\psi_3\rangle$	$\frac{5\pi}{6}$	$\frac{11\pi}{6}$	$\frac{9\pi}{6}$	$\frac{3\pi}{6}$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{7\pi}{6}$

表 7.5: $p \bmod 6 = 5$ の場合に, ポテンシャル最小点の (σ_1, σ_2) から (7.26) に従って求めた, VBS 秩序変数 $\langle\psi_\alpha\rangle$ の期待値. 絶対値はすべて $|\langle\psi_\alpha\rangle| = \sqrt{3}$ であった. 同一の $\langle\psi_\alpha\rangle$ を与える (σ_1, σ_2) oughしは, D_\pm 変換 (7.29) で移り変わる.

(III) $p \bmod 6 = 1, 5$ のとき

$p = 1$ の 6 重縮退した VBS 状態は, 図 7.2 で表される. VBS 秩序変数を通して, 有効ポテンシャルの最小点を縮退した VBS 状態と対応させられることを, 7.3.1 節で見た. $p \bmod 6 = 1$ の VBS 状態は, 格子の対称性を破らない $p = 6$ VB 配位と, $p = 1$ VB 配位の合成とみなすことより, $p = 1$ と同じ対称性を持っていると言える. さらに, VB の有無を反転させて考えることにより, $p \bmod 6 = 1, 5$ の VBS 相の縮退数や対称性はそれぞれ, 本質的に等しい.

VBS 秩序変数 ψ_α のスピン演算子を用いた定義は, $p = 1$ の場合にしか得られていない. それでも, 縮退した VBS 状態を区別する何らかの VBS 秩序変数 ψ_α が存在して, $p \bmod 6 = 1$ に対しては (7.26) と同じ関係式が, そして $p \bmod 6 = 5$ に対しては

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_1^\dagger M_2 + e^{i\frac{\pi}{3}} M_2^\dagger M_3 \\ e^{i\frac{4\pi}{3}} M_2^\dagger M_3 + e^{i\frac{5\pi}{3}} M_3^\dagger M_1 \\ e^{i\frac{2\pi}{3}} M_3^\dagger M_1 + e^{i\pi} M_1^\dagger M_2 \end{pmatrix} \quad (7.31)$$

が成立していると仮定する. (7.31) は, (7.26) のモノポール演算子をすべてエルミート共役に置き換えたものである. $\text{Arg}(W_{\text{int}}), \text{Arg}(W_c)$ のいずれを用いたとしても, 有効ポテンシャルの形状は $p \bmod 6 = 1$ のとき $\delta = \pi/3$, $p \bmod 6 = 5$ のとき $\delta = 5\pi/3$ と決まる. 最小点 (σ_1, σ_2) は表 7.3 に与えられている. それらを (7.30) に代入すると, (7.26), (7.31) の期待値が, $p \bmod 6 = 1$ のときは表 7.4, $p \bmod 6 = 5$ のときは表 7.5 の通りに得られる. どちらの場合でも, $\langle\psi_\alpha\rangle$ は 6 種類の共通した値をとることが分かる. さらに, モノポール演算子の R1 変換 (5.54), P1 変換 (5.61), T_x 変換 (5.67) で $\langle\psi_\alpha\rangle$ がどのように変換するかを調べる. その結果, (7.26), (7.31) とともに, 図 7.2 に示した $p = 1$ と同じ VBS 状態の変換則が導かれる. よって, 任意の $p \bmod 6 = 1, 5$ に対しても, ψ_α をスピン演算子 \hat{S}_{vw} を用いて適切に定義することができれば, (7.26), (7.31) でモノポール演算子と関係付けられる可能性がある.

希薄なモノポールガスの近似に該当しない $\text{Arg}(\lambda)$ を用いた場合の, VBS 状態との対応関係は, 未だ判明していない.

(IV) $p \bmod 6 = 2, 4$ のとき

$p = 2$ のとき, 図 7.4 に示すように, それぞれ 6 重・9 重縮退の自然な VBS 状態を構成することができる. 黄色の影は, VB の配置を表す. $p \bmod 6 = 2$ の VBS 状態は, 複数個の $p = 6$ VB 配位との合成とみなすことにより, $p = 2$ と同じ対称性を持っている. $p \bmod 6 = 4$ については, 図 7.4 で VB の有無を反転させることで得られるので, やはり $p = 2$ VBS 状態と共通の性質を有する.

$\delta = W_{\text{int}}$ を採用した場合, 表 7.2, 7.3 より, モノポールガスの有効ポテンシャルには 9 個の最小点が存在する. 図 7.4 の VBS 状態は D_\pm 対称性を保つので, 7.3.1 節と同様の理由で, 3 重縮退の VBS 状態と対応し

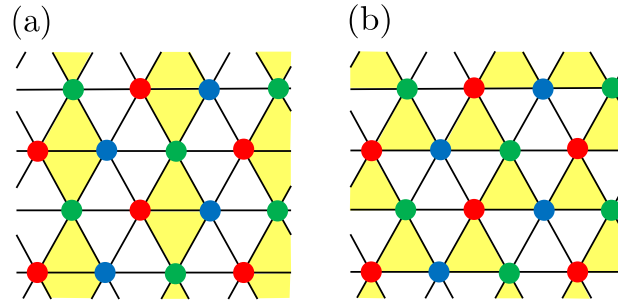


図 7.4: $p = 2$ のときに自然な VBS 状態. 格子の対称性を自発的に破っており, (a) は 9 重縮退, (b) は 6 重縮退している.

ていることが予想される. しかし, 図 7.4 とは縮退数が合わない. 対称性から許されるもう一方の $\text{Arg}(\lambda)$ を使用すると, 18 個の最小点, つまり 6 重縮退が導かれる. これが図 7.4(b) の 6 重縮退の VBS 状態と対応している可能性はあるが, 適切な VBS 秩序変数が見つかっていないため, 確証は得られていない. このように最低次のモノポール項のみを残す近似からは, 有効ポテンシャルの最小点は 9 個か 18 個に限られる. モノポール項 (5.73) として, $(M_\alpha^{(\dagger)})^3$ に加えて $(M_\alpha^{(\dagger)})^6$ の項も含めると, 係数比 λ_6/λ_3 を調節することによって, 27 個の最小点を持つ有効ポテンシャルを作ることが可能ではある. この場合に 9 重縮退の VBS 状態が予想されるものの, 図 7.4(a) と対称性が一致しているかどうか, そしてモノポール項を M_α の 6 次まで打ち切ることが適切かどうかは, 未解明である.

第8章 総括

本研究では、SU(2) 正方格子反強磁性体の先行研究を拡張し、SU(3) 三角格子反強磁性体について、Néel-VBS 相間の量子相転移を中心に議論した。系は絶対零度として、Young 図が 1 行 p 列で表される完全対称なスピン表現に限定する。

格子の連続極限をとることにより、スピン回転対称性を自発的に破る Néel 相の低エネルギー有効理論が、モノポール項を伴う SU(3)/U(1)² 非線形シグマ模型で与えられることを導出した (3.3 節, 5.5 節)。非線形シグマ模型は、対称性の要求だけからも得られる (付録 C)。SU(3) スピン系のスピン配位には、2 種類の独立なトポロジカルチャージが存在する。SU(2) スピン系の staggered 磁化ベクトルを SU(3)/U(1)² 変数に拡張し、任意のトポロジカルチャージを持ったスキルミオンを構成する方法を考案した (5.2 節)。これにより、トンネル過程から生じる Berry 位相を具体的に計算することに成功した。モノポールを格子の中心に限定すると、Berry 位相の値に図形的規則による直感的な解釈ができる (5.3 節)。

格子の対称性変換の下でのモノポール演算子 M_α の変換則を求めることにより、格子の対称性をモノポール演算子の位相変換と関連付けた (5.4 節)。これにより、VBS 相をトポロジカル対称性が自発的に破れた相として、より明確に解釈できる。モノポールが凝縮した理論として、abelian duality を利用したモノポールガスの解析を適用し、 $p = 1$ のときに希薄なモノポールガスの有効ポテンシャルを、6 重縮退の VBS 状態と対応付けた。 $p > 1$ の VBS 波動関数が複雑であるため、 $p = 1$ の場合にしか VBS 秩序変数 ψ_α のスピン演算子を用いた定義は得られていない。それでも $p \bmod 6 = 0, 1, 3, 5$ に対して、 ψ_α と M_α が満たすべき変換則に関連性があることを指摘した (7 章)。

Néel-VBS 相転移を記述する有効理論は、スピノン場 $\vec{\phi}_\alpha$ のゲージ理論で表される。Destructive interference のために、モノポール項にスピン表現 p に依存した違いが現れる (5.3 節)。 $p \bmod 3 \neq 0$ のとき、3 の倍数のチャージを持つモノポールのみが、理論に含むことを許される。その結果、PSU(3) スピン回転対称性と、格子の $2\pi/3$ 回転を意味する \mathbb{Z}_3^V トポロジカル対称性との間に、mixed 't Hooft アノマリーが存在する。アノマリーマッチング条件から、両方の対称性を保つ trivially gapped 相の出現が禁止される (6.1 節)。スピン回転対称性が自発的に破れた Néel 相では、スピノン場が gapless 励起を担い、モノポールの効果は抑制されている。トポロジカル対称性が自発的に破れた VBS 相では、スピノン場は gapped 励起となり、モノポールを含んだ massless ゲージ場が主要となる。以上の考察からは、Néel-VBS 相間の直接相転移が支持される (6.2 節)。SU(2) 正方格子反強磁性体と同様に、deconfined criticality による直接 2 次相転移が起きる可能性も考えられる。しかしながら、1 次相転移やトポロジカル秩序相といった、他の可能性を除外するものではない。 $p \bmod 3 = 0$ のときには、任意のチャージを持つモノポールを理論に含むことができる。この場合、有効理論に 't Hooft アノマリーは存在せず、trivially gapped 相の出現が許される。

三角格子の場合で deconfined criticality が成立することを示すには、モノポール項が dangerously irrelevant であることを示す必要があるが、厳密な証明は難しいと思われる。そこで、SU(2) スピン系で既に行われているような、量子モンテカルロ法による数値計算による検証が有効である。符号問題が生じないような Néel 秩序を壊す相互作用を、SU(3) Heisenberg 模型に追加し、相互作用の強さを変えることで量子相転移を調べられると期待する。

研究の発展の方向性としては、量子モンテカルロ法による deconfined criticality の検証のほかに、スピン液体、ドメインウォール等のトポロジカルな性質について研究すると、興味深い結果が得られるかもしれない。

謝辞

指導教員である，京都大学基礎物理学研究所 谷崎佑弥 助教には，興味深い研究テーマを紹介して頂いたほか，計算結果の解釈から論文の作成に至るまで，数多くの助言を頂きました．厚く御礼申し上げます．議論に参加して頂きました，京都大学理学研究科 原子核理論研究室の皆様にも，感謝致します．

付録 A SU(2) 正方格子反強磁性体の補足

SU(2) 正方格子反強磁性体に関して、先行研究には無い独自に得られた結果を報告する。付録 A.1 では、SU(2) 行列を用いて格子ハミルトニアンから有効ラグランジアンを導出する。付録 A.2 では、モノポールの位置を格子の中心以外に一般化し、トンネル過程の Berry 位相を考察する。これらの内容は、SU(3) 三角格子に拡張する準備段階として位置付けられる。

A.1 SU(2)/U(1) 非線形シグマ模型の導出

SU(2) 正方格子反強磁性体について、Néel 状態からの励起の記述は、一通りではない。2.1 節で説明したように、歴史的には、O(3) staggered 磁化ベクトルが秩序変数に用いられてきた [3, 7]。ここでは、SU(N) スピン系への一般化が容易な、SU(2) 行列を秩序変数に用いる方法を紹介する。SU(N) スピン鎖 [66, 68] の文脈で、近年導入されたものを、SU(2) 正方格子に対して適用したものである。いずれの方法を選んでも、等価な結果が得られる。

SU(2) Heisenberg 模型 (2.1) は、SU(N) Heisenberg 模型 (3.1) において、 $N = 2$ を代入することで得られる。完全な説明は 3.1 節に与えてあるので、詳細を省く。ハミルトニアン (2.1) を Schwinger ボソン (3.4) で表し、スピニコヒーレント状態 (3.8) を用いて、分配関数 Z を虚時間経路積分で表す。結果として、(3.18) が得られる。ただし、今は $N = 2$ なので、Schwinger ボソンは a_1, a_2 の 2 種類、スピニコヒーレントベクトルは $\vec{\Phi} \in \mathbb{CP}^1$ である。スピン表現は、 $p = 2s$ を代入する。

この際に、SU(2) スピニコヒーレント状態として (3.8) を用いたが、2.1.1 節で用いたスピニコヒーレント状態の定義 (2.4) と矛盾していないかが問題となる。両者の定義が実は同値であることを、以下で確認する [62]。

(2.4) を変形して、(3.8) と一致していることを示す *1。スピン回転のユニタリ演算子を

$$\hat{U} = e^{i\theta(\hat{S}_1 \sin \varphi - \hat{S}_2 \cos \varphi)} \quad (\text{A.1})$$

で定義すると、各格子点ごとのスピニコヒーレント状態 (2.4) は、Schwinger ボソン (3.6) を用いて

$$|\mathbf{n}\rangle = \hat{U}|s, s\rangle = \hat{U} \frac{1}{\sqrt{p!}} (\hat{a}_1^\dagger)^p |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{p!}} (\hat{U} \hat{a}_1^\dagger \hat{U}^\dagger)^p |0\rangle, \quad (\text{A.2})$$

$$\hat{U} = \exp \left[-\frac{\theta}{2} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 e^{-i\varphi} - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 e^{i\varphi}) \right] \quad (\text{A.3})$$

と表される。Schwinger ボソンの交換関係 (3.3) と公式：

$$e^{t\hat{A}} \hat{B} e^{-t\hat{A}} = \hat{B} + t[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{t^2}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{t^3}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (\text{A.4})$$

を適用すると、

$$\hat{U} \hat{a}_1^\dagger \hat{U}^\dagger = \hat{a}_1^\dagger \cos \frac{\theta}{2} + \hat{a}_2^\dagger e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \quad (\text{A.5})$$

を近似なしで示すことができる。よって、

$$|\mathbf{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{p!}} (\Phi_1 \hat{a}_1^\dagger + \Phi_2 \hat{a}_2^\dagger)^p |0\rangle, \quad (\text{A.6})$$

*1 1 個のスピンに関する性質なので、しばらく引数 i を省略する。

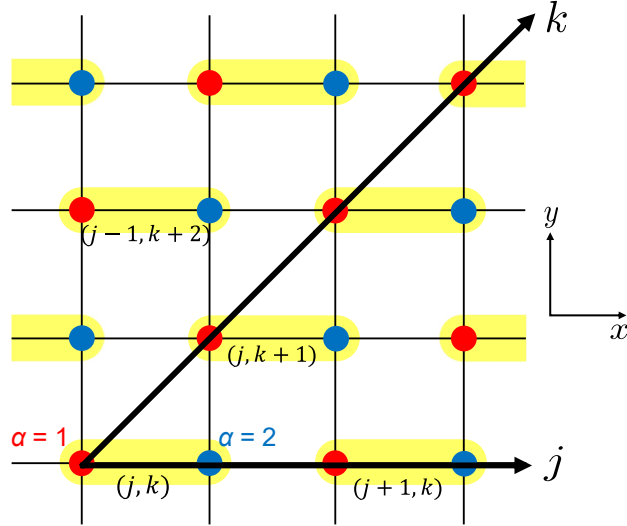


図 A.1: 正方格子の座標の取り方. 赤, 青色で示した格子点はそれぞれ, 副格子 $\alpha = 1, 2$ に属する. 黄色で囲んだ辺の両端 2 点が unit cell を組み, その位置を $(j, k) \in \mathbb{Z}^2$ で指定する. スピン変数 $\vec{\Phi}(i)$ は, $\vec{\Phi}_\alpha(j, k)$ と記述される. 各副格子に 2 つの直交する状態 $\vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2$ を割り当てることで, Néel 状態が実現される.

$$\vec{\Phi} = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

となり, (3.8) と同じ形に書ける. このとき, (2.5) で定義した $\mathbf{n} \in \mathbb{S}^2$ のパラメータ (θ, φ) とは,

$$\mathbf{n} = \vec{\Phi}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \vec{\Phi} \quad (\text{A.8})$$

の関係がある^{*2}. すなわち, 非物理的な U(1) 位相を同一視した, 2 成分複素ベクトル $\vec{\Phi} \in \mathbb{C}\mathbb{P}^1$ は, \mathbf{n} と一対一対応する. このように, 両者のスピニコヒーレント状態の定義は同値であり, 矛盾していない.

作用 (3.18) に話を戻す. 古典的なエネルギー S_{exch} を最小にする配位は, 隣接する格子点 $\langle i, i' \rangle$ について $\vec{\Phi}^*(i) \cdot \vec{\Phi}(i') = 0$ を満たす. 正方格子は図 A.1 のように, 2 種類の副格子 $\alpha = 1, 2$ から成る (bipartite). 隣接する格子点に対し, 直交するコヒーレント状態 $\vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2$ を割り当てることにより, Néel 状態を作ることができる. 3.3 節と同様に, s が十分大きいと仮定して, Néel 状態付近の揺らぎを, 場の理論で定式化する.

図 A.1 に黄色で囲んだ辺の両端の格子点で unit cell を構成すると, 1 個の格子点は, unit cell のラベル (j, k) と副格子のラベル $\alpha = 1, 2$ で指定される. 励起の高エネルギー成分をエルミート行列 L , 低エネルギー成分をユニタリ行列 $U \in \text{U}(2)$ によって取り入れると, Néel 状態からの励起は

$$\begin{pmatrix} \vec{\Phi}(j, k, 1)^\text{T} \\ \vec{\Phi}(j, k, 2)^\text{T} \end{pmatrix} = L(j, k) \cdot U(j, k), \quad (\text{A.9})$$

$$L(j, k) = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{s^2} |L_{12}(j, k)|^2} & \frac{\alpha}{s} L_{12}(j, k) \\ \frac{\alpha}{s} L_{12}^*(j, k) & \sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{s^2} |L_{12}(j, k)|^2} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.10})$$

$$U(j, k) = \begin{pmatrix} \vec{\phi}_1(j, k)^\text{T} \\ \vec{\phi}_2(j, k)^\text{T} \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

と記述される. $\vec{\phi}_\alpha(j, k)$ は, 正規直交条件 (3.23) を満たす. $\vec{\Phi}_\alpha(j, k)$ の位相は非物理的であるため, 物理的に意味があるのは $U \in \text{U}(2)/\text{U}(1)^2 = \text{SU}(2)/\text{U}(1)$ である. 以降は $\det U(j, k) = 1$ を課すことにして, U を (余分な U(1) 自由度を 1 つ含んだ) SU(2) 行列として扱う.

^{*2}2.1.3 節とは異なり, staggered 磁化ベクトル \mathbf{m} ではなく, スピニコヒーレントベクトル \mathbf{n} そのものを変換する.

正方格子の最近接相互作用を具体的に書くと, (3.18) は

$$\begin{aligned}
S = \int_0^\beta d\tau & \left[p \sum_{j,k,\alpha} \vec{\Phi}^*(j,k,\alpha) \cdot \partial_\tau \vec{\Phi}(j,k,\alpha) \right. \\
& + Jp^2 \sum_{j,k} \left\{ \left| \vec{\Phi}^*(j,k,1) \cdot \vec{\Phi}(j,k,2) \right|^2 + \left| \vec{\Phi}^*(j,k,2) \cdot \vec{\Phi}(j+1,k,1) \right|^2 \right. \\
& \left. \left. + \left| \vec{\Phi}^*(j,k,1) \cdot \vec{\Phi}(j-1,k+1,2) \right|^2 + \left| \vec{\Phi}^*(j,k,2) \cdot \vec{\Phi}(j,k+1,1) \right|^2 \right\} \right] \quad (\text{A.12})
\end{aligned}$$

となる. (A.9) を代入して $\vec{\Phi}_\alpha$ を U, L に書き換えると, (A.12) の各項は (B.9) と同様に, 場 U, L と定数行列 Λ_α の形に書ける. ただし,

$$\Lambda_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

を用いる. 次に, 格子定数 $a \rightarrow 0$ の連続極限をとる:

$$(j,k,\alpha) \mapsto (x,y) \simeq (2aj + ak, ak), \quad \sum_{j,k} \mapsto \frac{1}{2a^2} \int dx dy. \quad (\text{A.14})$$

S を a について Taylor 展開を行うと, 以下のようになる:

$$\begin{aligned}
S = \int_0^\beta d\tau \int dx dy & \left[32J |L_{12}|^2 + \frac{2}{a} \{ (\partial_\tau U U^\dagger)_{21} L_{12} + (\partial_\tau U U^\dagger)_{12} L_{12}^* \} - 8Jp (\partial_x U U^\dagger)_{21} L_{12} \right. \\
& \left. + 8Jp (\partial_x U U^\dagger)_{12} L_{12}^* - 3Jp^2 (\partial_x U U^\dagger)_{12} (\partial_x U U^\dagger)_{21} - Jp^2 (\partial_y U U^\dagger)_{12} (\partial_y U U^\dagger)_{21} \right]. \quad (\text{A.15})
\end{aligned}$$

(A.15) からは, 場 L_{12} には質量項 $|L_{12}|^2$ が存在するので, 行列 L は高エネルギー成分の gapped 励起を表すことが読み取れる. 最後に, 経路積分を実行して L_{12} を消去する. Gauss 積分の公式 (B.14) を用いると, U のみを変数に持つ有効理論が得られる:

$$\begin{aligned}
S_{\text{eff}} = \int_0^\beta d\tau \int dx dy & \left[\frac{1}{g_{\text{eff}}} \left\{ \frac{1}{v} \left| (\partial_\tau U U^\dagger)_{12} \right|^2 + v \left(\left| (\partial_x U U^\dagger)_{12} \right|^2 + \left| (\partial_y U U^\dagger)_{12} \right|^2 \right) \right\} \right. \\
& \left. + \frac{s}{a} \left\{ (\partial_x U U^\dagger)_{12} (\partial_\tau U U^\dagger)_{12}^* - (\partial_\tau U U^\dagger)_{12} (\partial_x U U^\dagger)_{12}^* \right\} \right]. \quad (\text{A.16})
\end{aligned}$$

ここで, (2.35) と同様に, 結合定数 g_{eff} と励起の速さ v を

$$g_{\text{eff}} = \frac{2\sqrt{2}a}{s}, \quad v = 4\sqrt{2}Jsa \quad (\text{A.17})$$

とおいた. 虚時間 τ のスケール変換 (B.17) で v を取り除くことができ, 結果的に (A.16) で $v = 1$ を代入したものとなる. すると, (A.16) の 1 行目は

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S_{\text{eff}}}, \quad (\text{A.18})$$

$$S_{\text{eff}} = \int_0^\beta d\tau \int dx dy \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_{\mu=\tau,x,y} \sum_{\alpha=1}^2 \left(\left| \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \right|^2 - \left| \vec{\phi}_\alpha^* \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \right|^2 \right) \quad (\text{A.19})$$

となる. これは, Lorentz 対称性を持った $SU(2)/U(1)$ 非線形シグマ模型である. $U(1)$ ゲージ場 $a_{\alpha,\mu}$ を,

$$a_{\alpha,\mu} = i\vec{\phi}_\alpha^* \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \quad (\text{A.20})$$

により導入する. $\vec{\phi}_\alpha$ の定義 (A.11) から, $\sum_\alpha a_{\alpha,\mu} = 0$ が分かる. さらに (B.18) と類似の式変形により, 変数を U から $\vec{\phi}$ に書き直すと, (A.19) は

$$S_{\text{eff}} = \int_0^\beta d\tau \int dx dy \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_{\mu=\tau,x,y} \sum_{\alpha=1}^2 \left| (\partial_\mu + ia_{\alpha,\mu}) \vec{\phi}_\alpha \right|^2 \quad (\text{A.21})$$

となり, $U(1)$ ゲージ理論の形で表すこともできる.

$SU(2)$ 行列 (A.11) の $\vec{\phi}_1$ と $\vec{\phi}_2$ は, $\vec{\phi}_2 = -i\sigma^2 \vec{\phi}_1^*$ で関係付けられており, 独立な自由度でない. (A.21) の $\alpha = 1, 2$ の各項は一致しており, $\vec{\phi} = \vec{\phi}_1$ に揃えると, CP^1 非線形シグマ模型 (2.44) が得られる. (A.19) と, \mathbf{m} を秩序変数とする $O(3)$ 非線形シグマ模型 (2.37) は, どちらも等価である. 両者は,

$$\mathbf{m}(j, k) = \vec{\phi}_1^\dagger(j, k) \boldsymbol{\sigma} \vec{\phi}_1(j, k) + \mathcal{O}(a^2) \quad (\text{A.22})$$

で関係している [66]. 3 章の $SU(3)/U(1)^2$ 行列の場合とは異なり, $SU(2)/U(1)$ 行列では $\vec{\phi}_1(j, k)$ が与えられれば, $\vec{\phi}_2(j, k)$ は (非物理的な $U(1)$ 位相を除いて) 一意に決まるので, (A.22) のように $\mathbf{m}(j, k)$ は $\vec{\phi}_1(j, k)$ だけで表される.

$SU(3)$ 三角格子の場合と同様に, 単純な連続極限からは, 非線形シグマ模型 (A.19) のほかに, (A.16) の 2 行目の追加項 S_{add} が現れる. (4.11) で定義される Pontryagin index $Q_\alpha^{\mu\nu}$ を用いると, S_{add} は

$$\begin{aligned} S_{\text{add}} &= \frac{S}{a} \int d^3x \left\{ (\partial_x U U^\dagger)_{12} (\partial_\tau U U^\dagger)_{12}^* - (\partial_\tau U U^\dagger)_{12} (\partial_x U U^\dagger)_{12}^* \right\} \\ &= \frac{p\pi i}{a} \int dy Q_1^{x\tau}(y) \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

と表される. $Q_1^{x\tau} \in \mathbb{Z}$ は, $x\tau$ 平面で定義された 2 次元理論のトポロジカルチャージである. $Q_1^{x\tau}$ が離散的な値をとる性質を利用すると, B.3 と同様の議論により, S_{add} が分配関数に寄与を持たないことが言える. 以下でこれを確認する.

図 A.1 の j, k 軸と同じ向きに, x', y' 軸を定義する:

$$(x', y') = (x - y, \sqrt{2}y). \quad (\text{A.24})$$

これにより, (A.23) は

$$\begin{aligned} S_{\text{add}} &= \frac{\pi i p}{a} \int_0^\beta d\tau \int dx dy \frac{1}{2\pi i} \left(\partial_x \vec{\phi}_1 \cdot \partial_\tau \vec{\phi}_1^* - \partial_\tau \vec{\phi}_1 \cdot \partial_x \vec{\phi}_1^* \right) \\ &= \frac{\pi i p}{a} \int_0^\beta d\tau \int \frac{1}{\sqrt{2}} dx' dy' \frac{1}{2\pi i} \left(\partial_{x'} \vec{\phi}_1 \cdot \partial_\tau \vec{\phi}_1^* - \partial_\tau \vec{\phi}_1 \cdot \partial_{x'} \vec{\phi}_1^* \right) \\ &= \frac{\pi i p}{\sqrt{2}a} \int dy' Q_1^{x'\tau}(y') \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

と書ける. $Q_1^{x'\tau}$ は $x'\tau$ 平面上のトポロジカルチャージであるから, 整数値である. ここで, 積分を格子点の和に戻す:

$$\frac{1}{\sqrt{2}a} \int dy' \mapsto \sum_k. \quad (\text{A.26})$$

連続極限 $a \rightarrow 0$ において, $\vec{\phi}_\alpha$ は連続的に変化できるが, $Q_1^{x'\tau}$ は整数値しかとることができないので, $Q_1^{x'\tau}$ は $x'y'$ 平面上で一定である. 十分大きなトーラス T^2 に乗った正方格子の系を考え, 周期境界条件を課す. フラストレーションを生じることなく Néel 状態が実現するという仮定から, j, k 軸方向の格子点の数は, どちらも 2 の倍数でなければならない. したがって, パラメータ k は 1 から $2M$ ($M \in \mathbb{N}$) の値をとる. 以上から,

$$\begin{aligned} S_{\text{add}} &= \pi i p \sum_{k=1}^{2M} Q_1^{x'\tau} \\ &= \pi i p \cdot Q_1^{x'\tau} \cdot 2M \in 2\pi i \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

$\exp(-S_{\text{add}}) = 1$ なので, 追加項は無視してよい. よって, 連続場によるモノポールを含まない有効理論は, トポロジカルな追加項を持たない $SU(2)/U(1)$ 非線形シグマ模型 (A.21) で記述される.

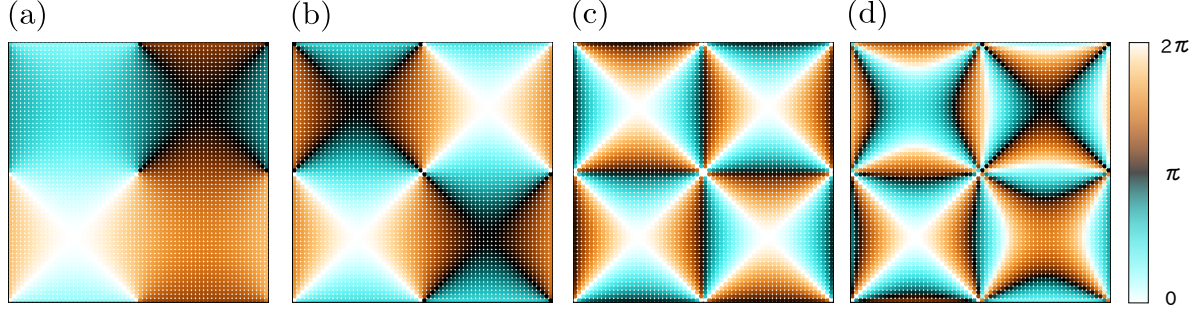


図 A.2: 左下正方形中心でスキルミオンが生成し、任意の場所で消滅する過程の Berry 位相の偏角 $\text{Arg}[\exp(-S_B)]$. 左から順に $2sQ = 1, 2, 4, 5$ を示す. グラフの領域は, 図 2.2 と同じ. 隣接する 4 個の正方形で周期的な値をとる.

トンネル過程がもたらす Berry 位相の計算も, $\vec{\Phi}_1$ を角度変数 (θ, φ) で表すことで実行できる. 5.3.1 節の記法に従うと, Berry 位相は

$$S_B = i2s \sum_{j,k} \sum_{\alpha=1}^2 \Omega(j, k, \alpha) = i2s \sum_{j,k} \sum_{\alpha=1}^2 \int_0^\beta (-\mathcal{A}_{\alpha,\tau}(j, k)) d\tau, \quad (\text{A.28})$$

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A}_1 \\ \mathcal{A}_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix} d\varphi (1 - \cos \theta) \quad (\text{A.29})$$

と表される. トンネル過程の具体例で計算すると,

$$S_B = i2s \sum_{j,k} \sum_{\alpha=1}^2 (-1)^{\alpha-1} Q \left(\left[\arctan \frac{y-y_2}{x-x_2} - \arctan \frac{y-y_1}{x-x_1} \right] + (\text{reg.}) \right) \quad (\text{A.30})$$

となり, これは (2.51) と一致している.

A.2 モノポールが格子中心以外の場合の Berry 位相

2.2.2 節で述べたように, 先行研究ではモノポールの位置を格子の中心に限定して議論されているが, (2.52) を数値計算することで, モノポールが格子点上を除く任意の位置に存在する場合にも拡張することができる. $2sQ = 1, 2, 4, 5$ の場合に, Berry 位相 $\exp(-S_B)$ を数値計算した結果を, 図 A.2 に示す. 正方形の中心における $\exp(-S_B)$ は, 図 2.2 から求めた $\xi(\vec{r})^{2sQ}$ と一致している.

まずは, モノポールが格子の中心以外に存在する場合に, destructive interference を調べる. Berry 位相の最小繰り返し単位は, 図 A.2 の一辺 a の正方形 4 個である. 図 A.3 に示すように, この領域内には, $\pi/2$ 回転と鏡映で互いに移り変わる等価な点が 8 個存在する^{*3}. この等価な点 8 個を組にして $\{\vec{X}_s\}_{s=1, \dots, 8}$ と表すことにする. S_{eff} は並進・回転・鏡映変換で不変なので, 等価な点どうしでは運動項 S_{eff} は共通である. 数値計算で得られた $\exp(-S_B)$ を, スキルミオン消滅の位置を変化させて, 等価な点で足し上げる:

$$\sum_{s=1}^8 \exp[-S_B(\vec{X}_1^c; \vec{X}_s)]. \quad (\text{A.31})$$

その結果, $2sQ \bmod 4 \neq 0$ のとき, (A.31) は 0 となるので, トンネル過程は分配関数 Z に寄与しない. 一方で $2sQ \bmod 4 = 0$ を満たすときは, Z への有限の寄与が出現する. よって, 格子の中心以外のモノポールでも, 2.2.3 節で述べた中心と同じ destructive interference の有無が成立している.

^{*3}モノポールは格子点以外の任意の位置に存在する. 鏡映軸上の点については, 同一点を重複して数えることにする.

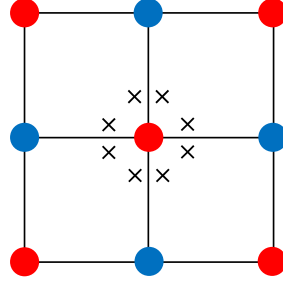


図 A.3: 正方格子の対称性変換で互いに移り変わる, 等価な点の組. Berry 位相の最小繰り返し単位である, 隣接する 4 個の正方形の内部には, 等価な点が一般には 8 個存在する.

次に, 格子の対称性変換に対するモノポール演算子の変換則について述べる. 2.2.4 節と同様に変換前後の Berry 位相を比較して, 位相変換の因子を決定する. その結果, 任意の位置のモノポール演算子に対して, 格子の中心で導いた (2.64), (2.66), (2.68) と全く同じ変換則が得られる.

最後に, モノポールガスのポテンシャル項に現れる複素位相を議論する. Destructive interference が起きないトンネル過程に対して, スキルミオンの生成地点を左下三角形中心に固定 ($\vec{r}_1 = \vec{X}_1^c$) し, 消滅地点 \vec{r}_2 をあらゆる位置に変化させたときの, 因子 $\exp[-S_B(\vec{X}_1^c, \vec{r}_2)]$ の平均値を求めればよい. \vec{r}_2 を格子の中心に限定した場合は, (2.55) より, 平均値は $W_c = 1$ である. 格子の中心に限定しない場合には, (7.10) と同様に, Berry 位相の最小繰り返し単位である 4 個の正方形 (4□) の内部で \vec{r}_2 を積分する. すると, $2sQ \bmod 4 = 0$ であれば, 平均値は

$$W_{\text{int}} = \frac{1}{4a^2} \int_{4\Box} d\vec{r}_2 \exp[-S_B(\vec{X}_1^c, \vec{r}_2)] > 0 \quad (\text{A.32})$$

であることが分かった. よって, SU(2) 正方格子に対しては, モノポールを格子の中心に限定してもしなくても, 同じ結論が得られる.

付録B 非線形シグマ模型の導出

3章で省略した計算の詳細を記す. 付録 B.1 では, $SU(N)$ スピンコヒーレント状態の公式 (3.9)–(3.12) の証明を行う. 付録 B.2 では, 格子ハミルトニアン連続極限をとり, 有効ラグランジアンを導出する. 付録 B.3 では, 素朴な連続極限から現れるトポロジカル的な追加項が消えることを示す. これらの内容は, 投稿論文 [60] に基づく.

B.1 スピンコヒーレント状態に関する公式の証明

3章では, (3.8) で定義したスピンコヒーレント状態 $|\vec{\Phi}\rangle$ について成り立つ性質 (3.9)–(3.12) を用いて, 非線形シグマ模型を導出した. この節では, (3.9)–(3.12) の証明を述べる. これらの証明は本質的に, Schwinger ボソンの交換関係 (3.3) に基づく.

重なり積分 (3.11) を最初に示す:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{\Phi}' | \vec{\Phi} \rangle &= \frac{1}{p!} \langle 0 | \left(\sum_v \Phi_v'^* \hat{a}_v \right)^p \left(\sum_w \Phi_w \hat{a}_w^\dagger \right)^p | 0 \rangle \\
&= \frac{1}{p!} \langle 0 | \sum_{k_1 + \dots + k_N = p} \left(\frac{p!}{k_1! \dots k_N!} \right)^2 (\Phi_1'^* \hat{a}_1)^{k_1} (\Phi_1 \hat{a}_1^\dagger)^{k_1} \dots (\Phi_N'^* \hat{a}_N)^{k_N} (\Phi_N \hat{a}_N^\dagger)^{k_N} | 0 \rangle \\
&= \sum_{k_1 + \dots + k_N = p} \frac{p!}{k_1! \dots k_N!} (\Phi_1'^* \Phi_1)^{k_1} \dots (\Phi_N'^* \Phi_N)^{k_N} \\
&= (\vec{\Phi}'^* \cdot \vec{\Phi})^p.
\end{aligned} \tag{B.1}$$

1 行目から 2 行目へは, 真空期待値の中では \hat{a}_v と \hat{a}_v^\dagger が同数の項しか残らないことを用いた. 2 行目から 3 行目へは, $(\hat{a}_v)^k (\hat{a}_v^\dagger)^k | 0 \rangle = k! | 0 \rangle$ を用いた. (B.1) の導出では $|\vec{\Phi}| = 1$ を利用していないので, これは任意の $\vec{\Phi}, \vec{\Phi}' \in \mathbb{C}^N$ に対して成立する. そこで, $\vec{\Phi}' = \vec{\Phi}$ を代入して $|\vec{\Phi}| = 1$ を適用すれば, 規格化 (3.9) が示される.

続いて, スピン演算子の公式 (3.12) を示す. (3.4) より, スピン演算子 \hat{S}_{vw} は Schwinger ボソンを用いて

$$\hat{S}_{vw} = \hat{a}_v^\dagger \hat{a}_w = -\delta_{vw} + \hat{a}_w \hat{a}_v^\dagger \tag{B.2}$$

と表されるので,

$$\begin{aligned}
\langle \vec{\Phi} | \hat{S}_{vw} | \vec{\Phi} \rangle &= -\delta_{vw} + \langle \vec{\Phi} | \hat{a}_w \hat{a}_v^\dagger | \vec{\Phi} \rangle \\
&= -\delta_{vw} + \frac{1}{p!} \sum_{u, u'} \langle 0 | (\Phi_u^* \hat{a}_u)^p \hat{a}_w \hat{a}_v^\dagger (\Phi_{u'} \hat{a}_{u'}^\dagger)^p | 0 \rangle \\
&= -\delta_{vw} + \frac{1}{p!(p+1)^2} \sum_{u, u'} \frac{\partial}{\partial \Phi_w^*} \frac{\partial}{\partial \Phi_v} \langle 0 | (\Phi_u^* \hat{a}_u)^{p+1} (\Phi_{u'} \hat{a}_{u'}^\dagger)^{p+1} | 0 \rangle \Big|_{|\vec{\Phi}|=1}.
\end{aligned} \tag{B.3}$$

最終行では, $\vec{\Phi}$ を一般の $\vec{\Phi} \in \mathbb{C}^N$ とみなし, 制約 $|\vec{\Phi}| = 1$ を微分操作の後で課す. (3.11) により,

$$\begin{aligned}
\langle \vec{\Phi} | \hat{S}_{vw} | \vec{\Phi} \rangle &= -\delta_{vw} + \frac{1}{(p+1)} \frac{\partial}{\partial \Phi_w^*} \frac{\partial}{\partial \Phi_v} (\vec{\Phi}^* \cdot \vec{\Phi})^{p+1} \Big|_{|\vec{\Phi}|=1} \\
&= p \Phi_v^* \Phi_w
\end{aligned} \tag{B.4}$$

となり, (3.12) が示される.

最後に, 完全性 (3.10) を示す. $SU(N)$ 不変測度を $d\Omega_\Phi$ として,

$$\hat{I} = \int d\Omega_\Phi |\vec{\Phi}\rangle \langle \vec{\Phi}| \quad (\text{B.5})$$

を導入する. 演算子 \hat{I} は, スピン表現 p の状態空間からそれ自身への線形写像を記述する. $U \in SU(N)$ に対して, \hat{U} を $\hat{U} \cdot |\vec{\Phi}\rangle = |U\vec{\Phi}\rangle$ と作用するユニタリ演算子として定義する. このとき

$$\hat{U} \hat{I} \hat{U}^\dagger = \int d\Omega_\Phi |U\vec{\Phi}\rangle \langle U\vec{\Phi}| = \hat{I} \quad (\text{B.6})$$

となるから, \hat{I} は任意の \hat{U} と交換する. よって, Schur の補題により, \hat{I} は恒等演算子に比例する. 適当な $d\Omega_\Phi$ の規格化を行うことで, (3.10) が得られる.

B.2 格子理論の連続極限の計算

格子理論のハミルトニアンの連続極限をとることにより, 有効ラグランジアン (3.26) を導出する.

経路積分で表した有効作用 (3.26) を出発点とする. (3.20) と同様に格子点のラベル i を (j, k, α) に読み替えて, 最近接相互作用を陽に書くと, (3.26) は

$$\begin{aligned} S = \int_0^\beta d\tau \left[p \sum_{j,k,\alpha} \vec{\Phi}_\alpha^*(j, k) \cdot \partial_\tau \vec{\Phi}_\alpha(j, k) + Jp^2 \sum_{j,k} \left\{ \left| \vec{\Phi}_1^*(j, k) \cdot \vec{\Phi}_2(j, k) \right|^2 \right. \right. \\ + \left| \vec{\Phi}_2^*(j, k) \cdot \vec{\Phi}_3(j, k) \right|^2 + \left| \vec{\Phi}_3^*(j, k) \cdot \vec{\Phi}_1(j, k) \right|^2 \\ + \left| \vec{\Phi}_1^*(j, k) \cdot \vec{\Phi}_2(j+1, k-2) \right|^2 + \left| \vec{\Phi}_3^*(j, k) \cdot \vec{\Phi}_2(j+1, k-2) \right|^2 \\ + \left| \vec{\Phi}_1^*(j, k) \cdot \vec{\Phi}_3(j-1, k+1) \right|^2 + \left| \vec{\Phi}_2^*(j, k) \cdot \vec{\Phi}_3(j-1, k+1) \right|^2 \\ \left. \left. + \left| \vec{\Phi}_2^*(j, k) \cdot \vec{\Phi}_1(j, k+1) \right|^2 + \left| \vec{\Phi}_3^*(j, k) \cdot \vec{\Phi}_1(j, k+1) \right|^2 \right\} \right] \quad (\text{B.7}) \end{aligned}$$

となる. 定数行列の Λ_α ($\alpha = 1, 2, 3$) を

$$\Lambda_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.8})$$

で導入すると, (B.7) の各項が

$$\left| \vec{\Phi}_\alpha^*(j, k) \cdot \vec{\Phi}_\beta(j', k') \right|^2 = \text{tr} [\Lambda_\beta (LU)(j', k') \cdot (U^\dagger L^\dagger)(j, k) \Lambda_\alpha (LU)(j, k) \cdot (U^\dagger L^\dagger)(j', k')] \quad (\text{B.9})$$

と書き直される. ここで, $L(j, k)$ と $U(j, k)$ は (3.21) で定義されている.

次に, 格子定数 $a \rightarrow 0$ の連続極限をとる. 格子点のラベルは, 連続的な空間座標 (x, y) に置き換えられる:

$$(j, k, \alpha) \mapsto (x, y) \simeq \left(3aj + \frac{3}{2}ak, \frac{\sqrt{3}}{2}ak \right), \quad \sum_{j,k} \mapsto \frac{2}{3\sqrt{3}a^2} \int dx dy. \quad (\text{B.10})$$

(B.7) の各項を, a について $\mathcal{O}(a^2)$ までの Taylor 展開を行う. 例えば

$$\begin{aligned} U(j-1, k+1) &= U \left(x - \frac{3a}{2}, y + \frac{\sqrt{3}a}{2} \right) \\ &\simeq \left[U - \frac{3a}{2} \partial_x U + \frac{\sqrt{3}a}{2} \partial_y U + \frac{1}{2} \left(\frac{3a}{2} \right)^2 \partial_x^2 U - \frac{3\sqrt{3}a^2}{4} \partial_x \partial_y U + \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{3}a}{2} \right)^2 \partial_y^2 U \right] (x, y). \quad (\text{B.11}) \end{aligned}$$

一方で, $L_{12}(j \pm 1, k \pm 1, \alpha)$ のような部分は既に a の高次なので, 展開の初項 $L_{12}(j, k) = L_{12}(x, y)$ のみが近似で残る. すべての項を展開すると, (B.7) は以下となる:

$$\begin{aligned}
S = & \int_0^\beta d\tau \int dx dy \frac{2}{3\sqrt{3}} \left[12J (|L_{12}|^2 + |L_{13}|^2 + |L_{23}|^2) \right. \\
& + \frac{2}{a} \{ L_{12}(\partial_\tau UU^\dagger)_{21} + L_{13}(\partial_\tau UU^\dagger)_{31} + L_{23}(\partial_\tau UU^\dagger)_{32} \\
& \quad + L_{12}^*(\partial_\tau UU^\dagger)_{12} + L_{13}^*(\partial_\tau UU^\dagger)_{13} + L_{23}^*(\partial_\tau UU^\dagger)_{23} \} \\
& + Jp \left\{ -L_{12} \left(3(\partial_x UU^\dagger)_{21} + 3\sqrt{3}(\partial_y UU^\dagger)_{21} \right) + L_{12}^* \left(3(\partial_x UU^\dagger)_{12} + 3\sqrt{3}(\partial_y UU^\dagger)_{12} \right) \right. \\
& \quad - L_{13} \cdot 6(\partial_x UU^\dagger)_{31} + L_{13}^* \cdot 6(\partial_x UU^\dagger)_{13} \\
& \quad \left. - L_{23} \left(3(\partial_x UU^\dagger)_{32} - 3\sqrt{3}(\partial_y UU^\dagger)_{32} \right) + L_{23}^* \left(3(\partial_x UU^\dagger)_{23} - 3\sqrt{3}(\partial_y UU^\dagger)_{23} \right) \right\} \\
& + \frac{9Jp^2}{4} \{ |(\partial_x UU^\dagger)_{12}|^2 + 2|(\partial_x UU^\dagger)_{13}|^2 + |(\partial_x UU^\dagger)_{23}|^2 \} \\
& + \frac{3\sqrt{3}Jp^2}{4} \{ (\partial_x UU^\dagger)_{32}(\partial_y UU^\dagger)_{23} + (\partial_x UU^\dagger)_{23}(\partial_y UU^\dagger)_{32} \\
& \quad - (\partial_x UU^\dagger)_{12}(\partial_y UU^\dagger)_{21} - (\partial_x UU^\dagger)_{21}(\partial_y UU^\dagger)_{12} \} \\
& \left. + \frac{15Jp^2}{4} \left\{ |(\partial_y UU^\dagger)_{12}|^2 + \frac{2}{5}|(\partial_y UU^\dagger)_{13}|^2 + |(\partial_y UU^\dagger)_{23}|^2 \right\} \right]. \tag{B.12}
\end{aligned}$$

ここでは, 3×3 行列 $\partial_\mu UU^\dagger$ の (α, β) 成分を $(\partial_\mu UU^\dagger)_{\alpha\beta}$ と表記した. また, ユニタリ行列の性質 $UU^\dagger = I_3$ から従う,

$$\partial_\mu UU^\dagger + U \partial_\mu U^\dagger = 0 \tag{B.13}$$

を用いて式変形を行った.

経路積分の観点から, 有効作用 (B.12) を場の汎関数と捉えると, (B.12) の初項は場 $L_{12}, L_{23}, L_{31} \in \mathbb{C}$ の質量項である. それに対し, 場 $U \in \text{SU}(3)$ の質量項は存在しない. このことから, L_{12}, L_{23}, L_{31} がエネルギーギャップを持つ高エネルギー励起を表す一方で, U はエネルギーギャップのない低エネルギーの摂動を担うことが, 具体的に明らかである. 低エネルギー有効理論を得るために, L_{12}, L_{23}, L_{31} を先に経路積分する. Gauss 積分の公式

$$\int dz dz^* e^{-(z^* w z - u^* z - v z^*)} \propto e^{u^* v / w} \tag{B.14}$$

を用いて積分すると, U のみを変数に持つ有効理論が, 以下のように得られる:

$$S_{\text{eff}} = \int_0^\beta d\tau \int dx dy \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \frac{1}{v} \left| (\partial_\tau UU^\dagger)_{\alpha, \alpha+1} \right|^2 + v \left(\left| (\partial_x UU^\dagger)_{\alpha, \alpha+1} \right|^2 + \left| (\partial_y UU^\dagger)_{\alpha, \alpha+1} \right|^2 \right) \right\} + S_{\text{add}}. \tag{B.15}$$

ここで, 結合定数 g_{eff} と励起の速さ v を

$$g_{\text{eff}} = \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{2}p} a, \quad v = \frac{3}{\sqrt{2}} Jap \tag{B.16}$$

とおいた. $p = 1$ を代入したものは, 文献 [43] の結果と一致している.

$$\tau \mapsto \frac{\tau}{v}, \quad \beta \mapsto v\beta \tag{B.17}$$

という虚時間のスケール変換で, (B.15) から v を取り除くことができる. 結果は (B.15) で $v = 1$ とおいた

ものとなり, (B.15) の第 1 項は形式的に Lorentz 対称性を持つ. さらにこの部分は

$$\begin{aligned}
2 \sum_{\alpha=1}^3 \left| (\partial_{\mu} U U^{\dagger})_{\alpha, \alpha+1} \right|^2 &= -2 \sum_{\alpha=1}^3 \text{tr} [\Lambda_{\alpha+1} U \partial_{\mu} U^{\dagger} \Lambda_{\alpha} U \partial_{\mu} U^{\dagger}] \\
&= - \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\alpha' (\neq \alpha)} \text{tr} [\Lambda_{\alpha} U \partial_{\mu} U^{\dagger} \Lambda_{\alpha'} U \partial_{\mu} U^{\dagger}] \\
&= - \sum_{\alpha=1}^3 \text{tr} [\Lambda_{\alpha} U \partial_{\mu} U^{\dagger} (I_3 - \Lambda_{\alpha}) U \partial_{\mu} U^{\dagger}] \\
&= \sum_{\alpha=1}^3 \left(\left| \partial_{\mu} \vec{\phi}_{\alpha} \right|^2 - \left| \vec{\phi}_{\alpha}^* \cdot \partial_{\mu} \vec{\phi}_{\alpha} \right|^2 \right) \tag{B.18}
\end{aligned}$$

と書き換えることができ, (3.26) と一致する.

(B.15) の第 2 項は, 以下で与えられる追加項である:

$$\begin{aligned}
S_{\text{add}} &= \int d^3x \frac{p}{3\sqrt{3}a} \left(\left\{ (\partial_x U U^{\dagger})_{12} (\partial_{\tau} U U^{\dagger})_{12}^* - (\partial_{\tau} U U^{\dagger})_{12} (\partial_x U U^{\dagger})_{12}^* \right\} \right. \\
&\quad + \sqrt{3} \left\{ (\partial_y U U^{\dagger})_{12} (\partial_{\tau} U U^{\dagger})_{12}^* - (\partial_{\tau} U U^{\dagger})_{12} (\partial_y U U^{\dagger})_{12}^* \right\} \\
&\quad + 2 \left\{ (\partial_x U U^{\dagger})_{13} (\partial_{\tau} U U^{\dagger})_{13}^* - (\partial_{\tau} U U^{\dagger})_{13} (\partial_x U U^{\dagger})_{13}^* \right\} \\
&\quad + \left\{ (\partial_x U U^{\dagger})_{23} (\partial_{\tau} U U^{\dagger})_{23}^* - (\partial_{\tau} U U^{\dagger})_{23} (\partial_x U U^{\dagger})_{23}^* \right\} \\
&\quad \left. - \sqrt{3} \left\{ (\partial_y U U^{\dagger})_{23} (\partial_{\tau} U U^{\dagger})_{23}^* - (\partial_{\tau} U U^{\dagger})_{23} (\partial_y U U^{\dagger})_{23}^* \right\} \right). \tag{B.19}
\end{aligned}$$

S_{add} は, トポロジカル量を用いて表すことができる. (4.11) で定義されたトポロジカルチャージ $Q_{\alpha}^{\mu\nu}$ は, 次のように分解される:

$$Q_{\alpha}^{\mu\nu} = \sum_{\alpha' (\neq \alpha)} q_{\alpha\alpha'}^{\mu\nu}, \tag{B.20}$$

$$q_{\alpha\alpha'}^{\mu\nu} = \frac{-1}{2\pi i} \int dx^{\mu} dx^{\nu} \left\{ \text{tr} [\Lambda_{\alpha} \partial_{\mu} U U^{\dagger} \Lambda_{\alpha'} \partial_{\nu} U U^{\dagger}] - \text{tr} [\Lambda_{\alpha'} \partial_{\nu} U U^{\dagger} \Lambda_{\alpha} \partial_{\mu} U U^{\dagger}] \right\}. \tag{B.21}$$

ここでは添字 μ, ν の和は取らない. 定義 (B.21) より, $q_{\alpha\alpha'}^{\mu\nu}$ は α, α' について反対称と分かる. これを用いると (B.19) は

$$\begin{aligned}
S_{\text{add}} &= 2\pi i \frac{p}{3\sqrt{3}a} \left[\int dy q_{12}^{x\tau} + \sqrt{3} \int dx q_{12}^{y\tau} + 2 \int dy q_{13}^{x\tau} + \int dy q_{23}^{x\tau} - \sqrt{3} \int dx q_{23}^{y\tau} \right] \\
&= 2\pi i \frac{p}{3\sqrt{3}a} \left[\int dy \left(q_{12}^{x\tau} + q_{13}^{x\tau} \right) - \sqrt{3} \int dx \left(q_{21}^{x\tau} + q_{23}^{x\tau} \right) - \int dy \left(q_{31}^{x\tau} + q_{32}^{x\tau} \right) \right] \\
&= \frac{2\pi i p}{3a} \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \int dy Q_1^{x\tau}(y) - \int dx Q_2^{y\tau}(x) - \frac{1}{\sqrt{3}} \int dy Q_3^{x\tau}(y) \right] \tag{B.22}
\end{aligned}$$

となり, (3.27) と一致する.

B.3 追加項が消えることの証明

付録 B.2 で, 素朴な連続極限からは, 非線形シグマ模型のほかに, (3.27) の追加項 S_{add} が現れることを見た. ここでは S_{add} が, トポロジカルな性質と, フラストレーションを持たないという仮定のために, 分配関数に寄与しないことを示す.

まず, 図 3.1 に示した j, k 軸に沿って, 連続変数 x', y' を

$$(x', y') = (x - \sqrt{3}y, 2y) \tag{B.23}$$

と定義する. すると追加項 (3.27) は, 積分変数の変換により,

$$\begin{aligned}
S_{\text{add}} &= \frac{2\pi i p}{3a} \int_0^\beta d\tau \int dx dy \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \partial_x \vec{\phi}_1 \cdot \partial_\tau \vec{\phi}_1^* - \partial_\tau \vec{\phi}_1 \cdot \partial_x \vec{\phi}_1^* \right\} \right. \\
&\quad \left. - \left\{ \partial_y \vec{\phi}_2 \cdot \partial_\tau \vec{\phi}_2^* - \partial_\tau \vec{\phi}_2 \cdot \partial_y \vec{\phi}_2^* \right\} - \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \partial_x \vec{\phi}_3 \cdot \partial_\tau \vec{\phi}_3^* - \partial_\tau \vec{\phi}_3 \cdot \partial_x \vec{\phi}_3^* \right\} \right] \\
&= \frac{2\pi i p}{3a} \int_0^\beta d\tau \int \frac{1}{2} dx' dy' \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \partial_{x'} \vec{\phi}_1 \cdot \partial_\tau \vec{\phi}_1^* - \partial_\tau \vec{\phi}_1 \cdot \partial_{x'} \vec{\phi}_1^* \right\} \right. \\
&\quad \left. - \left\{ \partial_{y'} \vec{\phi}_2 \cdot \partial_\tau \vec{\phi}_2^* - \partial_\tau \vec{\phi}_2 \cdot \partial_{y'} \vec{\phi}_2^* \right\} - \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ (-\sqrt{3}\partial_{x'} + 2\partial_{y'}) \vec{\phi}_3 \cdot \partial_\tau \vec{\phi}_3^* - \partial_\tau \vec{\phi}_3 \cdot (-\sqrt{3}\partial_{x'} + 2\partial_{y'}) \vec{\phi}_3^* \right\} \right] \\
&= \frac{2\pi i p}{3a} \left[\frac{1}{2\sqrt{3}} \int dy' Q_1^{x'\tau}(y') - \frac{1}{2\sqrt{3}} \int dy' Q_3^{x'\tau}(y') + \frac{\sqrt{3}}{2} \int dy' Q_2^{x'\tau}(y') - \int dx' Q_2^{y'\tau}(x') \right] \\
&= -\frac{2\pi i p}{3a} \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \int dy' Q_1^{x'\tau}(y') + \frac{2}{\sqrt{3}} \int dy' Q_3^{x'\tau}(y') + \int dx' Q_2^{y'\tau}(x') \right] \tag{B.24}
\end{aligned}$$

となる. $Q_\alpha^{x'\tau}$, $Q_\alpha^{y'\tau}$ はそれぞれ, $x'\tau$ 平面, $y'\tau$ 平面上のトポロジカルチャージであるから, どちらも整数値である.

次に, 積分を格子点の和に戻す:

$$\frac{1}{\sqrt{3}a} \int dy' \mapsto \sum_k, \quad \frac{1}{3a} \int dx' \mapsto \sum_j. \tag{B.25}$$

連続極限 $a \rightarrow 0$ において, $\vec{\phi}_\alpha$ は連続的に変化できるが, $Q_\alpha^{\mu'\tau}$ ($\mu' = x'$ or y') は整数値しかとることができないので, $Q_\alpha^{\mu'\tau}$ は $x'y'$ 平面上で一定である.

十分大きなトーラス T^2 に乗った三角格子の系を考え, 周期境界条件を課す. フラストレーションを生じることなく Néel 状態が実現するという仮定から, j, k 軸方向の格子点の数は, どちらも 3 の倍数でなければならない. したがって, パラメータ j, k に直すと, k は 1 から $3M$ ($M \in \mathbb{N}$) の値をとり, j は 1 から任意の自然数 M' までの値をとる. 以上から,

$$\begin{aligned}
S_{\text{add}} &= -2\pi i p \left[\frac{1}{3} \sum_{k=1}^{3M} Q_1^{x'\tau} + \frac{2}{3} \sum_{k=1}^{3M} Q_3^{x'\tau} + \sum_{j=1}^{M'} Q_2^{y'\tau} \right] \\
&= -2\pi i p \left[\frac{1}{3} \cdot Q_1^{x'\tau} \cdot 3M + \frac{2}{3} \cdot Q_3^{x'\tau} \cdot 3M + Q_2^{y'\tau} \cdot M' \right] \\
&= -2\pi i p \left[(Q_1^{x'\tau} + 2Q_3^{x'\tau}) \cdot M + Q_2^{y'\tau} \cdot M' \right] \in 2\pi i \mathbb{Z}. \tag{B.26}
\end{aligned}$$

よって, $\exp(-S_{\text{add}}) = 1$ なので, 追加項は無視してよい.

付録C 有効ラグランジアンの一意性

3.3 節では、格子理論の連続極限をとることにより、SU(3) 三角格子反強磁性体の有効理論として、SU(3)/U(1)² 非線形シグマ模型 (3.26) を導いた。実は理論が持つべき対称性を要求すると、有効ラグランジアンに含まれる可能な項が大きく制限される。

付録 C では、4.1 節に挙げた U(1)² ゲージ対称性・PSU(3) スピン回転対称性・p6m 格子対称性・時間反転対称性を満たすように、ラグランジアンを場 $U(x, y, \tau) = (\vec{\phi}_1 \vec{\phi}_2 \vec{\phi}_3)^T \in \text{SU}(3)$ で構成する。微分が 2 次以下の非トポロジカルな項を仮定すると、非線形シグマ模型が唯一の許される項であることを証明する。この内容は、投稿論文 [60] に基づく。ここでは和記号 \sum が無い限り、添字は和を取らない。時空の添字は $\mu, \nu, \rho \in \{x, y, \tau\}$ 、副格子の添字は $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \{1, 2, 3\}$ の値をとる。

始めに、微分が 1 次の項の可能性を検討する^{*1}。PSU(3) 不変性のために、 $\vec{\phi}_\alpha^* \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\beta$ という形でなければならない。 $\alpha \neq \beta$ の場合は、U(1)² ゲージ対称性を満たさないので除外する。一方で $\alpha = \beta$ の場合、 $\vec{\phi}_\alpha^* \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha$ の変化分は全微分項なので、U(1)² ゲージ対称性を満たしている。(Z₃)_{cyc} 不変にするためには、 α の和をとる必要がある。しかし $U \in \text{SU}(3)$ であることから、これは自動的に 0 となる：

$$\sum_{\alpha} \vec{\phi}_\alpha^* \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha = \text{tr} [U^\dagger \partial_\mu U] = 0. \quad (\text{C.1})$$

ここで、 $U^\dagger \partial_\mu U$ は Lie 代数 $\mathfrak{su}(3)$ の元なので、トレースが 0 であることを用いた。以上から、微分が 1 次の項はラグランジアンに含まれない。以降は、微分が 2 次の項を考える。

PSU(3) 対称性を課す。PSU(3) 変換 (4.3) の不変量を得るには、ベクトル $\vec{\phi}_\alpha$ からスカラーを構成すればよい。その方法には、次の 2 通りがある。第 1 に、 $\vec{\phi}_\alpha$ とその共役 $\vec{\phi}_\beta^*$ で内積をとる：

$$\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\beta^*, \quad (\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\beta^*)(\partial_\nu \vec{\phi}_\gamma \cdot \vec{\phi}_\delta^*). \quad (\text{C.2})$$

第 2 に、SU(3) 行列 U の行列式が 1 であることを利用して、スカラー三重積を作る：

$$\vec{\phi}_\alpha \cdot (\partial_\mu \vec{\phi}_\beta \times \partial_\nu \vec{\phi}_\gamma). \quad (\text{C.3})$$

PSU(3) 不変な微分 0 次の項は、 $\vec{\phi}_\alpha$ の正規直交性 (3.23) のため、定数 0 か 1 となるので意味が無い。同じ理由で、(C.2), (C.3) に微分が 0 次の量を掛けても、新たな項は生まれない。

U(1)² ゲージ対称性 (4.2) を考慮すると、(C.3) は (C.2) に帰着する。U(1)² ゲージ変換の位相 $e^{i\vartheta_\alpha}$ が変換後に残らないためには、 $e^{i\vartheta_1} e^{i\vartheta_2} e^{i\vartheta_3} = 1$ を利用するよりほかない。すると可能な項は、 $\vec{\phi}_1 \cdot (\partial_\mu \vec{\phi}_2 \times \partial_\nu \vec{\phi}_3)$ のように、 α, β, γ が 1, 2, 3 の置換でなければならないと分かる。 $U \in \text{SU}(3)$ より、 $\vec{\phi}_3 = \vec{\phi}_1^* \times \vec{\phi}_2^*$ と表示できる。 $\vec{\phi}_1 \cdot (\partial_\mu \vec{\phi}_2 \times \partial_\nu \vec{\phi}_3) = \vec{\phi}_1 \cdot (\partial_\mu \vec{\phi}_2 \times \partial_\nu (\vec{\phi}_1^* \times \vec{\phi}_2^*))$ を展開すると、各項は (C.2) に含まれる。よって、(C.2) だけを調べれば十分である。

(C.2) に対して、U(1)² ゲージ対称性を課す。この場合、 $\vec{\phi}_\alpha$ から生じる位相 $e^{i\vartheta_\alpha}$ は、 $\vec{\phi}_\alpha^*$ から生じる位相 $e^{-i\vartheta_\alpha}$ と打ち消す必要がある。そのために、(C.2) の添字は、以下の形のいずれかと決まる：

$$(\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\alpha^*), \quad (\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\alpha^*)(\partial_\nu \vec{\phi}_\beta \cdot \vec{\phi}_\beta^*), \quad (\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\beta^*)(\partial_\nu \vec{\phi}_\beta \cdot \vec{\phi}_\alpha^*). \quad (\text{C.4})$$

ここまではグローバルな U(1)² 位相変換を考えてきたが、パラメータ ϑ_α が時空点に依存する局所的な U(1)² ゲージ対称性を課すと、可能な項がさらに絞られる。(C.4) に対して、U(1)² ゲージ変換を具体

^{*1}空間微分 $\partial_{x,y}$ を 1 つだけ含む項は、 x 軸または y 軸鏡映で符号が変わるので、容易に排除できる。しかし ∂_τ を 1 つだけ含む項は、時間反転対称性から除くことができない。なぜなら、 $\vec{\phi}_\alpha^* \cdot \partial_\tau \vec{\phi}_\alpha$ は $i \vec{\phi}_\alpha^* \cdot \partial_t \vec{\phi}_\alpha$ を Wick 回転したものだが、 t の符号の反転とともに係数 $i \mapsto -i$ と変わるので、これは時間反転不変だからである。そのため、本文中の証明を採用した。

的に行くと、以下ようになる：

$$\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\alpha^* = \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\alpha^* + i(\partial_\mu \vartheta_\alpha) \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\alpha^* + i(\partial_\nu \vartheta_\alpha) \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha^* + (\partial_\mu \vartheta_\alpha)(\partial_\nu \vartheta_\alpha), \quad (\text{C.5})$$

$$\begin{aligned} (\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\alpha^*)(\partial_\nu \vec{\phi}_\beta \cdot \vec{\phi}_\beta^*) &= (\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\alpha^*)(\partial_\nu \vec{\phi}_\beta \cdot \vec{\phi}_\beta^*) - i(\partial_\mu \vartheta_\alpha) \vec{\phi}_\beta \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\beta^* \\ &\quad - i(\partial_\nu \vartheta_\beta) \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha^* - (\partial_\mu \vartheta_\alpha)(\partial_\nu \vartheta_\beta) \quad (\alpha = \beta \text{ or } \alpha \neq \beta), \quad (\text{C.6}) \end{aligned}$$

$$(\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\beta^*)(\partial_\nu \vec{\phi}_\beta \cdot \vec{\phi}_\alpha^*) = (\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\beta^*)(\partial_\nu \vec{\phi}_\beta \cdot \vec{\phi}_\alpha^*) \quad (\alpha \neq \beta). \quad (\text{C.7})$$

(C.7) は明らかに $U(1)^2$ ゲージ不変である。残りの (C.5), (C.6) は、それ自体ゲージ不変ではないが、これらを組み合わせるとゲージ不変量を作ることができる。その方法には、次の3通りがある。

(i) (C.6) で $\alpha = \beta$ とおくと、(C.5) と共通の項が逆符号で現れることに着目する。両者を足し合わせた

$$(\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\alpha^*) + (\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\alpha^*)(\partial_\nu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\alpha^*) \quad (\text{C.8})$$

はゲージ不変である。

(ii) (C.5) 右辺の余分な項は、 μ, ν について対称であるから、反対称化した

$$(\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\alpha^*) - (\partial_\nu \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha^*) \quad (\mu \neq \nu) \quad (\text{C.9})$$

はゲージ不変である。ちなみに、(C.6) で $\alpha = \beta$ としても余分な項は μ, ν について対称だが、同じように反対称化を行うと、式全体が0になり不適切である。

(iii) ゲージ変換のパラメータの性質 $\sum_\alpha \vartheta_\alpha = 0$ を利用して、 $(\sum_\beta \vartheta_\beta) \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\alpha^* = 0$ という組み合わせを作る。そのためには、(C.6) で α, β の和をとることとなるが、恒等式 (C.1) によって

$$\left(\sum_\alpha \vec{\phi}_\alpha^* \cdot \partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \right) \left(\sum_\beta \vec{\phi}_\beta^* \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\beta \right) = 0 \quad (\text{C.10})$$

と消える。新しいゲージ不変な項は得られない。

結局、(C.7)–(C.9) の3種類の $U(1)^2$ ゲージ不変量が存在する。ここで、(C.7) の添字 μ, ν を対称化したものは、(B.18) と同様の式変形によって (C.8) と一致することに注意する。そのため、(C.7) の添字を反対称化したものだけが、(C.8) とは独立な項を与える。

ここまでの、 $U(1)^2$ ゲージ不変性と $PSU(3)$ スピン回転対称性を課すことにより、可能な項を3種類に制限した。 $SU(3)$ 反強磁性スピン鎖の有効理論 [66] と比較すると、各項の物理的意味が明確になる。(C.8) は、 $U(1)$ ゲージ場と結合した $SU(3)/U(1)^2$ 非線形シグマ模型の運動項に対応する。(C.9) は2次元理論のトポロジカルチャージ $Q_\alpha^{\mu\nu}$ の密度であり、作用の θ 項に対応する。そして、(C.7) の反対称化は、 λ 項として言及される振項に対応する。

格子が持つ対称性を制限に加える。1格子並進の連続極限である $(\mathbb{Z}_3)_{\text{cyc}}$ 置換対称性 (4.4) をトポロジカルな性質を使わずに満たすためには、副格子の添字 $\alpha = 1, 2, 3$ が平等にラグランジアンに含まれている必要がある。(C.7) と (C.8) から得られる条件を満たす項は、それぞれ

$$\sum_\alpha \sum_{\nu, \rho} \varepsilon_{\mu\nu\rho} (\partial_\nu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_{\alpha+1}^*) (\partial_\rho \vec{\phi}_{\alpha+1} \cdot \vec{\phi}_\alpha^*), \quad (\text{C.11})$$

$$\sum_\alpha \left[(\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \partial_\nu \vec{\phi}_\alpha^*) + (\partial_\mu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\alpha^*)(\partial_\nu \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{\phi}_\alpha^*) \right] \quad (\text{C.12})$$

である。一方で、(C.9) の α の和をとると、(C.1) の結果である $\text{tr}[dU \wedge dU^\dagger] = d\{\text{tr}[U dU^\dagger]\} = 0$ により消える。

次に、空間回転対称性 (4.6) を課す。 $2\pi/6$ 回転は $\alpha = 2 \leftrightarrow 3$ の入れ替えを伴う $(\mathbb{Z}_6)_{\text{rot}}$ 変換だが、その部分群である $2\pi/3$ 回転では、添字 α が不変に保たれる。少なくとも $2\pi/3$ 回転で不変であるためには、 xy 平

面内の SO(2) 回転のスカラー量でなければならない。条件を満たす項は、(C.8) からは

$$\sum_{\alpha} \left[(\partial_{\tau} \vec{\phi}_{\alpha} \cdot \partial_{\tau} \vec{\phi}_{\alpha}^{*}) + (\partial_{\tau} \vec{\phi}_{\alpha} \cdot \vec{\phi}_{\alpha}^{*})(\partial_{\tau} \vec{\phi}_{\alpha} \cdot \vec{\phi}_{\alpha}^{*}) \right], \quad (\text{C.13})$$

$$\sum_{\alpha} \sum_{\mu=x,y} \left[(\partial_{\mu} \vec{\phi}_{\alpha} \cdot \partial_{\mu} \vec{\phi}_{\alpha}^{*}) + (\partial_{\mu} \vec{\phi}_{\alpha} \cdot \vec{\phi}_{\alpha}^{*})(\partial_{\mu} \vec{\phi}_{\alpha} \cdot \vec{\phi}_{\alpha}^{*}) \right], \quad (\text{C.14})$$

そして (C.7) からは

$$\sum_{\alpha} \varepsilon_{\tau\nu\rho} (\partial_{\nu} \vec{\phi}_{\alpha} \cdot \vec{\phi}_{\alpha+1}^{*})(\partial_{\rho} \vec{\phi}_{\alpha+1} \cdot \vec{\phi}_{\alpha}^{*}) \quad (\text{C.15})$$

に限られる。(C.13)–(C.15) は、 α の変換を伴う $(\mathbb{Z}_6)_{\text{rot}}$ 全体で不変になっている。しかしながら、(C.15) は ∂_x を 1 個しか含んでいないため、 x 軸鏡映 (4.5) によって符号が反転するので除外される。それに対し、(C.13), (C.14) は x 軸鏡映と時間反転対称性を満たす。虚時間 τ のスケール変換を行うと、(3.26) が対称性から許される唯一の項であると言える。(証明終)

終わりに、証明では非トポロジカルな項に限定したことについて補足する。トポロジカル不変量を含む項が存在する場合には、離散的な値を持つという性質の結果、対称性変換の下で不変となることがある。例えば Pontryagin index に対応する (C.9) を用いて、作用を $\frac{2\pi i}{3}(Q_2^{\mu\nu} - Q_3^{\mu\nu})$ と構成すると、 α について和を取っていないにもかかわらず $(\mathbb{Z}_3)_{\text{cyc}}$ 不変である。なぜなら、 $Q_1 + Q_2 + Q_3 = 0$ より、この項は $\frac{2\pi i}{3}(Q_2^{\mu\nu} - Q_3^{\mu\nu}) \mapsto \frac{2\pi i}{3}(Q_3^{\mu\nu} - Q_1^{\mu\nu}) = \frac{2\pi i}{3}(Q_2^{\mu\nu} - Q_3^{\mu\nu}) + 2\pi i Q_3^{\mu\nu}$ と変換するからである。上記の議論では、こうした可能性を排除することができない。

付録 D 双対理論の等価性

Abelian duality を用いると, U(1) ゲージ理論が, 周期的なスカラー場の理論の双対として記述される. 双対理論では U(1) ゲージ場のモノポール演算子が簡潔に書き表せるので, モノポールが凝縮した理論を半古典的に解析することが可能となる. Abelian duality は元々, Polyakov [79] によって, コンパクト QED の解析として導入された. SU(2) 正方格子反強磁性体との関連を述べた先行研究には, [41, 42, 80, 81] がある. 付録 D では 3 次元 Euclid 時空に限定して, (7.3) の導出を行い, 7 章のモノポールガスによる解析について補足する. この内容は, 投稿論文 [60] に基づく.

以下では, 2 種類の U(1) 1-form ゲージ場 a_1, a_2 を含む理論:

$$Z = \int \mathcal{D}a \exp \left[- \int \mathcal{L}_{\text{kin}} \right], \quad (\text{D.1})$$

$$\mathcal{L}_{\text{kin}} = \frac{1}{2e^2} \left(|da_1|^2 + |da_2|^2 + |da_1 + da_2|^2 \right) \quad (\text{D.2})$$

の双対理論を導出する. このラグランジアンは, (6.23) の再掲である.

σ_1, σ_2 を 2π 周期で同一視されたコンパクトスカラー場とする. 補助場として 2-form 場 b_1, b_2 を導入し, 次のラグランジアン

$$Z = \int \mathcal{D}a \mathcal{D}b \mathcal{D}\sigma \exp \left[- \int \mathcal{L}'_{\text{kin}} \right], \quad (\text{D.3})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}'_{\text{kin}} &= \frac{1}{2e^2} \left(|da_1 - b_1|^2 + |da_2 - b_2|^2 + |(da_1 - b_1) + (da_2 - b_2)|^2 \right) \\ &\quad + \frac{i}{2\pi} (b_1 \wedge d\sigma_1 + b_2 \wedge d\sigma_2) \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

が (D.2) と等価な理論であることを示す. (D.3) で σ_α の経路積分を実行すると, σ_α についての運動方程式として

$$db_\alpha = 0 \quad (\text{D.5})$$

を得る. したがって, 局所的には b_α を, ある 1-form 場 c_α を用いて

$$b_\alpha = dc_\alpha \quad (\text{D.6})$$

と表すことができる. ところで, (D.4) 第 2 行を, 3 次元多様体 $M_3 = M_2 \times S^1$ 上で積分すると

$$\begin{aligned} \frac{i}{2\pi} \sum_{\alpha=1}^2 \int_{M_3} b_\alpha \wedge d\sigma_\alpha &= \frac{i}{2\pi} \sum_{\alpha=1}^2 \int_{M_2} b_\alpha \cdot \int_{S^1} d\sigma_\alpha \\ &= i \sum_{\alpha=1}^2 \int_{M_2} dc_\alpha \cdot \mathcal{N}_\alpha \quad (\mathcal{N}_\alpha \in \mathbb{Z}) \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

となるが, 仮定より σ_α と $\sigma_\alpha + 2\pi$ を同一視するので, \mathcal{N}_α が残ってはいけない. そのためには,

$$\int_{M_2} dc_\alpha \in 2\pi\mathbb{Z} \quad (\text{D.8})$$

であればよい. これにより, c_α を U(1) ゲージ場, b_α をその field strength とみなすことができる. (D.4) 第 2 行は, $\exp \left(- \int \frac{i}{2\pi} b_\alpha \wedge d\sigma_\alpha \right) = \exp(2\pi i \mathbb{Z}) = 1$ となり, 分配関数 Z に寄与しないことが分かる. (D.4) の 1 行目に (D.6) を代入すると,

$$\mathcal{L}'_{\text{kin}} = \frac{1}{2e^2} \left(|d(a_1 - c_1)|^2 + |d(a_2 - c_2)|^2 + |d(a_1 - c_1) + d(a_2 - c_2)|^2 \right) \quad (\text{D.9})$$

$\mathcal{L}'_{\text{kin}}$ (D.4) は 1-form ゲージ変換 $a_\alpha \mapsto a_\alpha + \lambda_\alpha$, $b_\alpha \mapsto b_\alpha + d\lambda_\alpha$ の不変性を持つ. ゲージ変換で a_α と一致する U(1) ゲージ場を $a'_\alpha = a_\alpha - c_\alpha$ とおくと, (D.9) は

$$\mathcal{L}'_{\text{kin}} = \frac{1}{2e^2} \left(|da'_1|^2 + |da'_2|^2 + |da'_1 + da'_2|^2 \right) \quad (\text{D.10})$$

となる. a'_α を改めて a_α と読み替えれば, 元のラグランジアン (D.2) に帰着する.

(D.2) と双対な, $\sigma_{1,2}$ を変数に持つ理論を得るために, 今度は (D.3) で a_α と b_α の経路積分を実行する. b_1, b_2 についての運動方程式は, それぞれ

$$2b_1 + b_2 = 2da_1 + da_2 - \star \left(i \frac{e^2}{2\pi} d\sigma_1 \right), \quad (\text{D.11})$$

$$b_1 + 2b_2 = da_1 + 2da_2 - \star \left(i \frac{e^2}{2\pi} d\sigma_2 \right) \quad (\text{D.12})$$

となる. 整理すると,

$$b_1 = da_1 - \star i \frac{e^2}{2\pi} \left(\frac{2}{3} d\sigma_1 - \frac{1}{3} d\sigma_2 \right), \quad (\text{D.13})$$

$$b_2 = da_2 - \star i \frac{e^2}{2\pi} \left(\frac{2}{3} d\sigma_2 - \frac{1}{3} d\sigma_1 \right). \quad (\text{D.14})$$

これらを (D.4) に代入して展開すると, 双対理論として

$$Z = \int \mathcal{D}\sigma \exp \left[- \int \mathcal{L}'_{\text{kin}}{}^{\text{dual}} \right], \quad (\text{D.15})$$

$$\mathcal{L}'_{\text{kin}}{}^{\text{dual}} = \frac{e^2}{24\pi^2} \left(|d\sigma_1|^2 + |d\sigma_2|^2 + |d\sigma_1 - d\sigma_2|^2 \right) \quad (\text{D.16})$$

を得る. ただし, 導出途中に $\frac{i}{2\pi} da_\alpha \wedge d\sigma_\alpha$ が余分に現れるが, この項は無視できる. M_3 上で積分すると, $\int_{M_2} da_\alpha \in 2\pi\mathbb{Z}$ より, (D.7) と同様の理由で $2\pi i\mathbb{Z}$ に値をとるからである. (D.16) は, 本文中の (7.3) と一致している.

σ_α は 2π 周期的なコンパクトスカラー場であるから, 双対理論 (D.15) で物理的に意味のある局所演算子は, $e^{\pm i\sigma_\alpha}$ の形で表される. この種の演算子は, ゲージ場 a_α で記述された U(1) ゲージ理論における, モノポール演算子の双対となっている. 例として, 演算子 $\exp(-i\sigma_1(X))$ (X^μ : ある固定した時空点) を挿入することによる効果を調べる. これは, 双対理論で運動項 (D.16) のほかに, 次のモノポール項

$$\mathcal{L}'_{\text{M}}{}^{\text{dual}} = i\sigma_1(x)\delta^{(3)}(x-X)d\tau \wedge dx \wedge dy \quad (\text{D.17})$$

を追加することと等しい. (D.4) で与えられる $\mathcal{L}'_{\text{kin}}$ に $\mathcal{L}'_{\text{M}}{}^{\text{dual}}$ を加えたラグランジアンについて, σ_1 についての運動方程式を求めると, (D.5) は

$$\frac{1}{2\pi} db_1(x) = \delta^{(3)}(x-X)d\tau \wedge dx \wedge dy \quad (\text{D.18})$$

に修正される. $x^\mu \neq X^\mu$ では (D.18) の右辺は 0 なので, 以前と同じく $b_1 = dc_1$ が成立するが, 時空点 $x^\mu = X^\mu$ において b_1 は特異点を持っている. 3次元時空内の X^μ を取り囲む小球 D^3 内で (D.18) を積分すると, Stokes の定理より,

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\partial D^3} b_1 = \frac{1}{2\pi} \int_{D^3} db_1 = \int_{D^3} \delta^{(3)}(x-X)d\tau \wedge dx \wedge dy = 1. \quad (\text{D.19})$$

よって, U(1) ゲージ場 c_1 は, $x^\mu = X^\mu$ にチャージ 1 の Dirac モノポールを持っている. $\mathcal{L}'_{\text{M}}{}^{\text{dual}}$ も含めた理論

$$Z = \int \mathcal{D}a \mathcal{D}b \mathcal{D}\sigma \exp \left[- \int (\mathcal{L}'_{\text{kin}} + \mathcal{L}'_{\text{M}}{}^{\text{dual}}) \right] \quad (\text{D.20})$$

M_α	$e^{-\int \mathcal{L}_M^{\text{dual}}$	$\mathcal{L}_M^{\text{dual}}$
$M_1(X)$	$e^{-i\sigma_1(X)+i\sigma_2(X)}$	$i(\sigma_1 - \sigma_2)(x)\delta^{(3)}(x - X)d\tau \wedge dx \wedge dy$
$M_2(X)$	$e^{-i\sigma_2(X)}$	$i\sigma_2(x)\delta^{(3)}(x - X)d\tau \wedge dx \wedge dy$
$M_3(X)$	$e^{i\sigma_1(X)}$	$-i\sigma_1(x)\delta^{(3)}(x - X)d\tau \wedge dx \wedge dy$

表 D.1: 双対理論におけるモノポール演算子の対応. U(1) ゲージ理論のモノポール演算子 M_α は, Q_α^{xy} を 1 減らし, $Q_{\alpha+1}^{xy}$ を 1 増やす演算子として定義されている.

に対して, 場 a_α, b_α の経路積分を実行する. $x^\mu \neq X^\mu$ では (D.5) 以降の議論を繰り返すことにより, (D.10) が導かれる. ゲージ場 a_1, a_2, c_2 は, 以前と同様に特異点を持たない. しかし c_1 は, 特異点 X^μ を取り囲む球面 ∂D^3 上で, X^μ にモノポールがあるときの境界条件を満たしている. すなわち, $a'_1 = a_1 - c_1$ には, $x^\mu = X^\mu$ にチャージ -1 のモノポールが存在している. $a_3 = -(a_1 + a_2)$ を思い出すと, $\mathcal{L}_{\text{kin}}^{\text{dual}} + \mathcal{L}_M^{\text{dual}}$ に双対な U(1) ゲージ理論のゲージ場 (a'_1, a'_2, a'_3) には, $x^\mu = X^\mu$ にチャージ $(-1, 0, 1)$ のモノポールが存在していると分かる. 時間 (τ) 発展に伴うスキルミオン数 Q_α^{xy} の変化を見ると, $\Delta Q^{xy} = (-1, 0, 1)$ と対応している. つまり, 双対理論における $\exp(-i\sigma_1(X))$ は, ゲージ理論における 5.3.3 節で定義したモノポール演算子 $M_3^{-1}(X)$ の挿入と等価である.

σ_2 についても同様に, $\exp(-i\sigma_2(X))$ はスキルミオン数の変化 $\Delta Q^{xy} = (0, -1, 1)$ に対応し, モノポール $M_2(X)$ の挿入と等価である. σ_1 と σ_2 を組み合わせることで, $\Delta Q^{xy} = (-1, 1, 0)$ の変化をもたらす演算子 M_1 は, $\exp(-i\sigma_1(X) + i\sigma_2(X))$ で与えられる. 以上の結果を, 表 D.1 にまとめる. ここでは Berry 位相が含まれていないので, Berry 位相が生じる場合は, トンネル過程に対応する因子を別途掛ける必要がある.

付録 E スピン演算子による射影演算子の構成

付録 E の前半では、3 個の $p = 1$ スピンを一重項に射影する演算子 $\hat{P}(\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}'')$ を、スピン演算子で記述する方法を示す。後半では、7.1 節で定義した VBS 秩序変数 ψ_α の考察から、期待値 $\text{Arg}\langle\psi_\alpha\rangle$ が表 7.1 に示した値であることを証明する。

任意の Lie 群 $\text{SU}(3)$ の表現は、図 E.1 のように 1 行目に $(p+q)$ 個、2 行目に q 個の箱が並んだ Young 図で既約分解される。生成子の基底 $\hat{T}_b \in \mathfrak{su}(3)$ ($b = 1, \dots, 8$) を用いて

$$\hat{C} = \sum_{b=1}^8 (\hat{T}_b)^2 \quad (\text{E.1})$$

を定義すると、 \hat{C} はすべての生成子と可換な Casimir 演算子である。Freudenthal の公式によると、 (p, q) で指定される表現に \hat{C} が作用すると、

$$\hat{C} = \frac{1}{3}(p^2 + q^2 + 3p + 3q + pq) \quad (\text{E.2})$$

が固有値として出る。Schwinger ボソン \hat{a}_v と Gell-Mann 行列 $(\lambda_b)_{vw}$ を用いれば、生成子は

$$\hat{T}_b = \frac{1}{2} \sum_{v,w=1}^3 \hat{a}_v^\dagger (\lambda_b)_{vw} \hat{a}_w \quad (\text{E.3})$$

と書ける。格子点 $\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}''$ にそれぞれ、Young 図が 1 行 p 列の $\text{SU}(3)$ スピンが置かれているとする。各スピンに対する生成子を $\hat{t}, \hat{t}', \hat{t}''$ 、Schwinger ボソンを $\hat{a}_v, \hat{a}'_v, \hat{a}''_v$ で表す。すると、3 個の合成スピンに対する Casimir 演算子は、(E.3) より

$$\begin{aligned} \hat{C} &= \sum_{b=1}^8 (\hat{t}_b + \hat{t}'_b + \hat{t}''_b)^2 \\ &= \sum_{v,w=1}^3 \left(\hat{a}_v^\dagger \hat{a}'_w \hat{a}_w \hat{a}_v + \hat{a}_v^\dagger \hat{a}''_w \hat{a}_w \hat{a}_v + \hat{a}'_v \hat{a}''_w \hat{a}_w \hat{a}'_v \right) + 3p \\ &= \sum_{v,w=1}^3 \left(\hat{S}_{vw} \hat{S}'_{vw} + \hat{S}_{vw} \hat{S}''_{vw} + \hat{S}'_{vw} \hat{S}''_{vw} \right) + 3p \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

で与えられる。 $\hat{S}_{vw}, \hat{S}'_{vw}, \hat{S}''_{vw}$ は、各格子点に対するスピン演算子 (3.2) である。再び格子点上の $\text{SU}(3)$ スピンが基本表現 ($p = 1$) とすると、3 個のスピンの合成で作られる表現は、図 E.2 に示す 3 通りが可能である。これらの表現に対する Casimir 演算子の固有値は、(E.2) より、左から順に $\hat{C} = 6, 3, 0$ である。したがって、スピン 1 重項に作用すると 1、その他の表現に作用すると 0 を固有値に持つ演算子は、

$$\hat{P}(\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}'') = \frac{1}{18} (\hat{C} - 6) (\hat{C} - 3) \quad (\text{E.5})$$

で構成される。(E.5) は、3 個の基本表現 ($p = 1$) のスピン合成に対してのみ正しい。 \hat{C} は (E.4) で $p = 1$ を代入して得られる、スピン演算子の多項式である。

VBS 秩序変数 $\psi_\alpha(\vec{r}_\alpha)$ は、上記の射影演算子 $\hat{P}(\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}'')$ を用いて、(7.2) で定義された。以下では、 α と \vec{r}_α を 1 つ固定して考える。図 7.2 に示した VBS 状態に対して、 ψ_α の各項に含まれる $\hat{P}(\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}'')$ は、スピ

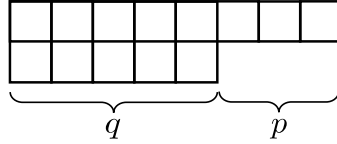


図 E.1: 一般的な SU(3) 表現の Young 図. 箱の数 p, q を図のように定める.

$$\begin{array}{ccccccc}
 \mathbf{3} & \mathbf{3} & \mathbf{3} & & \mathbf{10} & & \mathbf{8} & & \mathbf{8} & & \mathbf{1} \\
 \square & \otimes & \square & \otimes & \square & = & \square & \oplus & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \end{array} & \oplus & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \end{array} & \oplus & \mathbf{1}
 \end{array}$$

図 E.2: 3 個の SU(3) 基本表現の合成. 太数字は表現の次元を表す.

ン一重項との位置関係に応じて, 図 E.3 の 3 パターンの方法で作用する. $p = 1$ の VBS 波動関数は, (7.1) のようにスピン 1 重項の直積で与えられるため, \hat{P} の引数である 3 格子点が含まれるスピン一重項だけを取り出して, 期待値を計算することが許される.

状態 $|A\rangle$ に $\hat{P}(1, 2, 3)$ が作用すると, 射影演算子の定義より, $\hat{P}|A\rangle = |A\rangle$ の固有状態である. したがって, 期待値は 1 である. 残りの $|B\rangle, |C\rangle$ については, $\hat{P}(1, 2, 3)$ の固有状態ではない. (E.4) の Schwinger ボソンを用いて $\langle B|\hat{P}|B\rangle, \langle C|\hat{P}|C\rangle$ を求めることも可能だが, ここでは期待値そのものは重要ではない^{*1}. \vec{r}_α から見て角度 θ の方向に, スピン一重項が存在していたとする ($\theta = \frac{\pi}{6}, \frac{3\pi}{6}, \dots, \frac{11\pi}{6}$). この VBS 状態で挟んだ ψ_α の期待値は, 定義 (7.2) より

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_\alpha \rangle &= e^{i\theta} \langle A|\hat{P}|A\rangle + \left\{ e^{i(\theta+\frac{\pi}{3})} + e^{i(\theta+\frac{3\pi}{3})} + e^{i(\theta+\frac{5\pi}{3})} \right\} \langle B|\hat{P}|B\rangle + \left\{ e^{i(\theta+\frac{2\pi}{3})} + e^{i(\theta+\frac{4\pi}{3})} \right\} \langle C|\hat{P}|C\rangle \\
 &= e^{i\theta} \langle A|\hat{P}|A\rangle + e^{i(\theta+\frac{\pi}{3})} \left\{ 1 + e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}} \right\} \langle B|\hat{P}|B\rangle + e^{i\theta} \left\{ \left(1 + e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}} \right) - 1 \right\} \langle C|\hat{P}|C\rangle \\
 &= e^{i\theta} \left(\langle A|\hat{P}|A\rangle - \langle C|\hat{P}|C\rangle \right)
 \end{aligned} \tag{E.6}$$

と書ける. 射影演算子 \hat{P} の定義 (E.5) からは, 任意の状態に対して \hat{P} の期待値は 0 以上 1 以下であり, 期待値が 1 となるのは, 3 個のスピンが一重項を形成した状態に限られることが分かる. 今は $\langle A|\hat{P}|A\rangle = 1$ であるため,

$$\langle A|\hat{P}|A\rangle > \langle C|\hat{P}|C\rangle \tag{E.7}$$

が保証されている. よって $\text{Arg}(\psi_\alpha) = \theta$ となるので, 表 7.1 の通り, スピン一重項が存在する角度に等しい.

VBS 秩序変数の定義の仕方は, 唯一つではない. (7.2) において, 必ずしも \hat{P} がスピン一重項への射影演算子でなくとも, (E.7) を満たしていれば, 以上の議論が成立する.

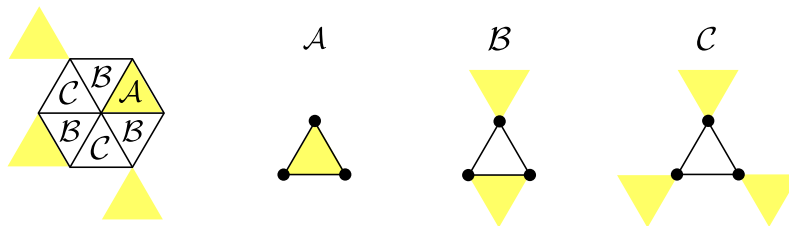


図 E.3: $p = 1$ VBS 状態に対する射影演算子の作用. 黄色の影は, スピン一重項の位置を表す. 隣接する 3 個の格子点に注目すると, スピン状態は $|A\rangle, |B\rangle, |C\rangle$ の 3 通りに分類される.

^{*1}実際に計算すると, $\langle B|\hat{P}|B\rangle = 1/9$, $\langle C|\hat{P}|C\rangle = 1/27$ を得る.

付録 F 六角形中心の Berry 位相の規則

付録 F では、格子点上にモノポールが存在する特殊なトンネル過程に対して、5.3.2 節と類似の Berry 位相の図形的規則を導出する。その結果から、Berry 位相の平均値の偏角 $\text{Arg}(W_{\text{int}})$ を求める公式 (7.17) に直感的な説明を与える。

モノポールが格子点上に存在すると、一般にはその格子点のスピンの $\vec{\Phi}(i)$ が不連続になるため、本文中ではモノポールが格子点上に存在しないと仮定した。しかしながら、 $\alpha = \exists \alpha'$ に対して $\Delta Q_{\alpha'} = 0$ を満たすトンネル過程においては、副格子 α' の格子点上にモノポールが存在していても、上記の特異性が現れないことがある。例えば、(5.14) で記述される $(Q_1^{xy}, Q_2^{xy}, Q_3^{xy}) = (-m, m, 0)$ のスキルミオンは、副格子 $\alpha = 3$ の格子点に定ベクトルが割り当てられている。このスキルミオン配位と Néel 状態間のトンネル過程を、 $\vec{\Phi}(\alpha = 3)$ が常に一定となるように構成すれば、モノポールの位置を $\alpha = 3$ 格子点上に選んでも差し支えない。こうしたトンネル過程は、 $\alpha = 1, 2$ に属する格子点で作られる六角格子上の SU(2) スピン配位を、三角格子上の SU(3) スピンに埋め込んだものと捉えることもできる。

トンネル過程の Berry 位相は、(5.20), (5.30) により求められる。Discontinuity line が横断する格子からの寄与は、一般のトンネル過程に対して導いた、5.3.2 節の規則 (I), (II), (IV) をそのまま用いることができる。Discontinuity line の両端、すなわちモノポールを含む格子からの寄与が、修正を必要とする。

$\alpha = 3$ 格子点上に存在するモノポール M_1^Q によって、 $(Q_1^{xy}, Q_2^{xy}, Q_3^{xy}) = (Q, -Q, 0)$ のスキルミオンが消滅した場合を考える。モノポールと接する 6 個の三角形で形成された、一辺 a の六角形に注目する。(5.36) と同じ理由により、図 F.1 左上の六角形と対応する Berry 位相の寄与は

$$\Delta S_B = ip \frac{2}{6} \left(\frac{5\pi}{6} Q + \frac{\pi}{2} (-Q) + \frac{\pi}{6} Q + \left(-\frac{\pi}{6}\right) (-Q) + \left(-\frac{\pi}{2}\right) Q + \left(-\frac{5\pi}{6}\right) (-Q) \right) = ip \frac{\pi}{3} Q \quad (\text{F.1})$$

と求められる。六角形の各頂点は一辺 a の正三角形 6 個に共有されるが、そのうち 2 個が注目する六角形に含まれているので、先頭に $2/6$ が掛かっている。他の六角形についても同様に計算すると、図 F.1 の因子となる。

トンネル過程全体の Berry 位相は、各格子からの寄与を足し上げることで求められる。Discontinuity line の始点と終点が、ともに同一種類の六角格子の中心にある場合は、図 F.1 を繰り返し使用すると計算できる。その結果は、図 F.2 に示す因子 $\xi(\vec{r})$ を用いて

$$e^{-S_B} = \left[\frac{\xi(\vec{r}_2)}{\xi(\vec{r}_1)} \right]^{pQ} \quad (\text{F.2})$$

にまとめられる。 S_B は discontinuity line の経路に依存せず、両端のモノポールの位置のみで決まる。 $pQ \bmod 3 \neq 0$ のとき、 $1 + \omega + \omega^2 = 0$ なので destructive interference が起きる。得られた結果は、文献 [16] に示されている SU(2) 六角格子反強磁性体の図形的規則と、本質的に一致している。

より興味深いのは、始点が三角格子の中心、終点が六角格子の中心という場合である。図 5.7 と揃えて、スキルミオン生成地点 (始点) を図 F.3 の左下三角形中心に固定する。始点からモノポールを含む六角形に隣接する正三角形中心までは図 5.6 を適用し、そこから図 5.5 を 1 回使い六角形の辺まで移動した後、図 F.1 によって終点のモノポールへ到達できる。図 F.3 のように、終点の $\alpha = 3$ 格子点をどこに選ぶか、そして discontinuity line をどのように結ぶかという任意性があるが、トンネル過程全体の $\exp(-S_B)$ は、これらに依存せず

$$e^{-S_B} = \exp\left(i \frac{\pi}{9} p Q\right) \quad (\text{F.3})$$

で与えられる。図 F.2 に示した、他のモノポール演算子 M_α^Q に対応する過程に対しても計算すると、Berry 位相はすべて (F.3) となった。

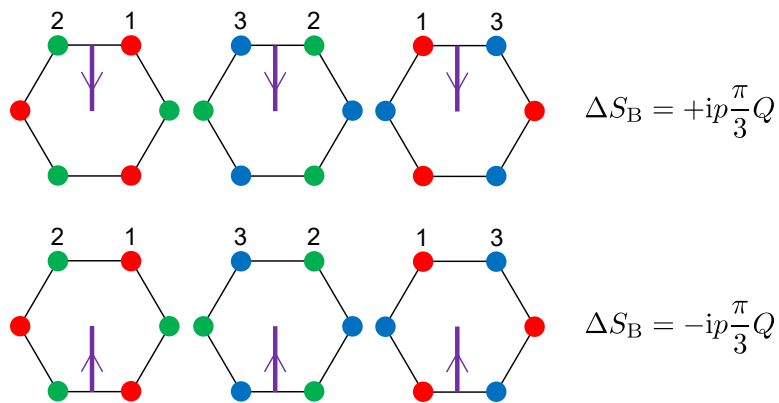


図 F.1: 六角形中心の副格子 α の格子点上で、トポロジカルチャージが $(Q_\alpha^{xy}, Q_{\alpha+1}^{xy}, Q_{\alpha+2}^{xy}) = (0, Q, -Q)$ のスキルミオンが消滅する場合の、六角形からの Berry 位相 S_B への寄与. Discontinuity line や六角形の向きが異なる場合にも、上記の図形を回転させて適用できる. スキルミオンが生成する場合は、すべての符号を反転させる.

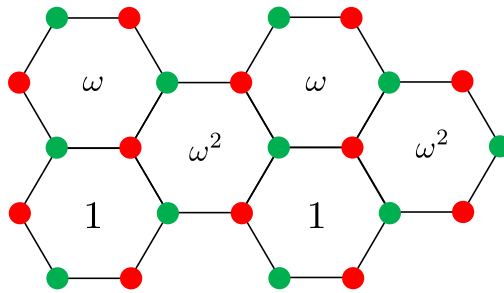


図 F.2: $Q_3^{xy} = 0$ のスキルミオンが、 $\alpha = 3$ 格子点上で生成・消滅する場合に、(F.2) で Berry 位相を計算するときの因子 $\xi(\vec{r})$. 隣接する 3 個の六角形で周期的な値となる. $\omega = \exp(2\pi i/3)$ は 1 の 3 乗根である. $\alpha = 1, 2, 3$ を巡回させたものも、同じ規則が成立する.

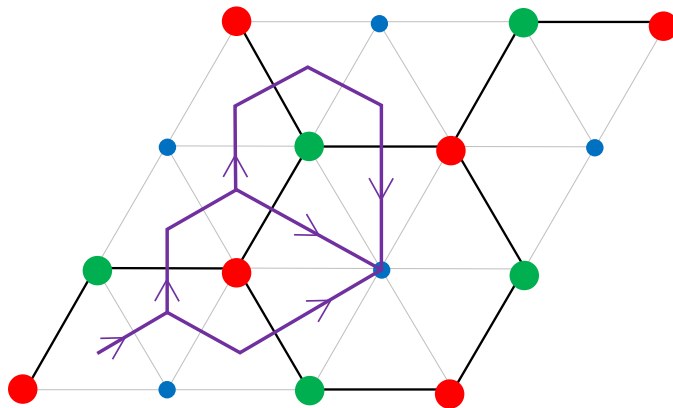


図 F.3: $Q_3^{xy} = 0$ のスキルミオンが、左下三角形の中心で生成し、右下六角形の中心で消滅する、様々なトンネル過程の discontinuity line. Berry 位相は途中経路に依らず、すべて (F.3) が得られる.

上記の導出について補足する．寄与を足し上げる段階で，スキルミオンのチャージを $(Q_1^{xy}, Q_2^{xy}) = (Q_1, Q_2)$ とおき， Q_1, Q_2 が独立なまま計算すると，Berry 位相は discontinuity line の経路に依存して異なる表式が出る．一見矛盾しているように思われるが， $Q_2 = -Q_1$ 等を代入することで， Q_α のうち 1 つが 0 という条件を取り入れると，一貫した S_B が得られる．また，上述の図形的規則は，正方格子・三角格子と同様に厳密な証明ではないが，(5.30) の数値計算によって正確なものであると推定される．

以上を踏まえて， $\text{Arg}(W_{\text{int}})$ が公式 (7.17) で与えられることを説明する． W_{int} とは (7.10) で定義された，18 個の隣接する三角形内部の $\exp(-S_B)$ の平均値である．モノポールガスの解析では，destructive interference が起きないトンネル過程のみを考えればよい． $p = 1$ の M_α^3 に対応するトンネル過程について，数値計算から求めた $\exp(-S_B)$ は，図 5.8(a)–(c) に示されている．ここでもスキルミオン生成地点は，左下三角形中心に固定されている．これらの例のように， $\Delta Q_{\alpha'} = 0$ のトンネル過程の Berry 位相は，副格子 α' を除いた六角格子が最小繰り返し単位であるから， W_{int} は六角形内部の $\exp(-S_B)$ の平均値と等しい．

(7.10) の積分を数値的に実行した結果， $p \leq 9$ の最低次のモノポール項に対して，一辺 a の六角形内部における $\exp(-S_B)$ の平均値 W_{int} の偏角が，六角形中心で求めた $\exp(-S_B)$ の偏角と一致することが確かめられた^{*1}．この主張は SU(2) 正方格子だと (A.2 節)，一辺 a の正方形内部における $\exp(-S_B)$ の平均値の偏角が，正方形中心で求めた $\exp(-S_B)$ の偏角と一致することと対をなしており，自然な拡張だと考えられる．任意の p に対しても， W_{int} の偏角は六角形中心の $\exp(-S_B)$ の偏角と等しいと推測する．六角格子の中心における $\exp(-S_B)$ は，図形的規則に基づいて (F.3) と導出された． $p \bmod 3 \neq 0$ のときは $Q = 3$ を， $p \bmod 3 = 0$ のときは $Q = 1$ を代入したものが，(7.17) である．

つまり，Berry 位相を求める図形的規則と， W_{int} の偏角が Berry 位相の最小繰り返し単位である六角形中心の $\exp(-S_B)$ の偏角と等しいことを認めれば，(7.17) は厳密な結果だと言える．

^{*1} p を大きくするほど $\exp(-S_B)$ の空間的な変化が激しくなるので，信頼できる数値を得るには六角形を細かく分割する必要がある．積分の計算コストが増加する．その理由により，数値計算を $p = 9$ で打ち切った．1 点 \vec{r} における Berry 位相を (5.30) から求める数値計算は， p が大きくても計算コストがほぼ変わらない．

参考文献

- [1] V. L. Ginzburg and L. D. Landau. On the Theory of superconductivity. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, Vol. 20, p. 1064, 1950.
- [2] F. D. M. Haldane. Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnetic identification with the O(3) nonlinear sigma model. *Phys. Lett. A*, Vol. 93, p. 464, 1983.
- [3] F. D. M. Haldane. Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 50, p. 1153, 1983.
- [4] E. H. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Annals Phys.*, Vol. 16, p. 407, 1961.
- [5] I. Affleck and E. H. Lieb. A Proof of Part of Haldane's Conjecture on Spin Chains. *Lett. Math. Phys.*, Vol. 12, p. 57, 1986.
- [6] H. Bethe. On the Theory of Metals, I. Eigenvalues and Eigenfunctions of a Linear Chain of Atoms. *Z. Phys.*, Vol. 71, p. 205, 1931.
- [7] F. D. M. Haldane. O(3) Nonlinear sigma Model and the Topological Distinction between Integer- and Half-Integer-Spin Antiferromagnets in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 61, p. 1029, 1988.
- [8] N. Read and S. Sachdev. Some Features of the Phase Diagram of the Square Lattice SU(N) Antiferromagnet. *Nucl. Phys. B*, Vol. 316, p. 609, 1989.
- [9] N. Read and S. Sachdev. Valence-Bond and Spin-Peierls Ground States of Low-Dimensional Quantum Antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 62, p. 1694, 1989.
- [10] N. Read and S. Sachdev. Spin-Peierls, valence-bond solid, and Néel ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, Vol. 42, p. 4568, 1990.
- [11] P. W. Anderson. The Resonating valence bond state in La₂CuO₄ and superconductivity. *Science*, Vol. 235, p. 1196, 1987.
- [12] X. G. Wen. Mean-field theory of spin-liquid states with finite energy gap and topological orders. *Phys. Rev. B*, Vol. 44, p. 2664, 1991.
- [13] A. Kitaev. Anyons in an exactly solved model and beyond. *Annals Phys.*, Vol. 321, p. 2, 2006.
- [14] A. Mattsson, P. Fröjdh, and T. Einarsson. Frustrated honeycomb Heisenberg antiferromagnet: A Schwinger-boson approach. *Phys. Rev. B*, Vol. 49, p. 3997, 1994.
- [15] H. H. Zhao, C. Xu, Q. N. Chen, Z. C. Wei, M. P. Qin, G. M. Zhang, and T. Xiang. Plaquette order and deconfined quantum critical point in the spin-1 bilinear-biquadratic heisenberg model on the honeycomb lattice. *Phys. Rev. B*, Vol. 85, p. 134416, 2012.

- [16] C. M. Jian and M. Zaletel. Existence of featureless paramagnets on the square and the honeycomb lattices in 2+1 dimensions. *Phys. Rev. B*, Vol. 93, p. 035114, 2016.
- [17] A. Vishwanath, L. Balents, and T. Senthil. Quantum Criticality and Deconfinement in Phase Transitions Between Valence Bond Solids. *Phys. Rev. B*, Vol. 69, p. 224416, 2004.
- [18] H. Kawamura. Universality of phase transitions of frustrated antiferromagnets. *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 10, p. 4707, 1998.
- [19] Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Maesato, and G. Saito. Spin Liquid State in an Organic Mott Insulator with a Triangular Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 91, p. 107001, 2003.
- [20] A. V. Chubukov, S. Sachdev, and T. Senthil. Quantum phase transitions in frustrated quantum antiferromagnets. *Nucl. Phys. B*, Vol. 426, p. 601, 1994.
- [21] M. P. Shores, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, and D. G. Nocera. A Structurally Perfect $S = 1/2$ Kagomé Antiferromagnet. *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 127, p. 13462, 2005.
- [22] R. R. P. Singh and D. A. Huse. Ground state of the spin-1/2 kagome-lattice Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, Vol. 76, p. 180407, 2007.
- [23] S. Yan, D. A. Huse, and S. R. White. Spin-Liquid Ground State of the $S = 1/2$ Kagome Heisenberg Antiferromagnet. *Science*, Vol. 332, p. 1173, 2011.
- [24] S. Sachdev. Kagome' - and triangular-lattice Heisenberg antiferromagnets: Ordering from quantum fluctuations and quantum-disordered ground states with unconfined bosonic spinons. *Phys. Rev. B*, Vol. 45, p. 12377, 1992.
- [25] Y. Huh, M. Punk, and S. Sachdev. Vison states and confinement transitions of Z_2 spin liquids on the kagome lattice. *Phys. Rev. B*, Vol. 84, p. 094419, 2011.
- [26] Y. Zhou, K. Kanoda, and T. K. Ng. Quantum Spin Liquid States. *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 89, p. 025003, 2017.
- [27] D. P. Arovas and A. Auerbach. Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models. *Phys. Rev. B*, Vol. 38, p. 316, 1988.
- [28] N. Read and S. Sachdev. Large- N expansion for frustrated quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 66, p. 1773, 1991.
- [29] E. Jordao Neves and J. Fernando Perez. Long Range Order in the Ground State of Two-Dimensional Antiferromagnets. *Phys. Lett. A*, Vol. 114, p. 331, 1986.
- [30] J. D. Reger and A. P. Young. Monte Carlo simulations of the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice. *Phys. Rev. B*, Vol. 37, p. 5978, 1988.
- [31] D. A. Huse and V. Elser. Simple Variational Wave Functions for Two-Dimensional Heisenberg Spin-1/2 Antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 60, p. 2531, 1988.
- [32] M. P. Gelfand, R. R. P. Singh, and D. A. Huse. Zero-temperature ordering in two-dimensional frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, Vol. 40, p. 10801, 1989.
- [33] M. Matsumoto, C. Yasuda, S. Todo, and H. Takayama. Ground-state phase diagram of quantum Heisenberg antiferromagnets on the anisotropic dimerized square lattice. *Phys. Rev. B*, Vol. 65, p. 014407, 2001.

- [34] S. Wenzel and W. Janke. Comprehensive quantum Monte Carlo study of the quantum critical points in planar dimerized/quadrumerized Heisenberg models. *Phys. Rev. B*, Vol. 79, p. 014410, 2009.
- [35] T. Senthil, A. Vishwanath, L. Balents, S. Sachdev, and M. P. A. Fisher. Deconfined Quantum Critical Points. *Science*, Vol. 303, p. 1490, 2004.
- [36] T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath, and M. P. A. Fisher. Quantum criticality beyond the Landau-Ginzburg-Wilson paradigm. *Phys. Rev. B*, Vol. 70, p. 144407, 2004.
- [37] A. W. Sandvik. Evidence for Deconfined Quantum Criticality in a Two-Dimensional Heisenberg Model with Four-Spin Interactions. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 98, p. 227202, 2007.
- [38] E. H. Fradkin. *Field Theories of Condensed Matter Physics*, Cambridge Univ. Press, 2nd edition, 2013.
- [39] S. Sachdev and R. Jalabert. Effective lattice models for two-dimensional quantum antiferromagnets. *Modern Physics Letters B*, Vol. 4, p. 1043, 1990.
- [40] G. 't Hooft. Naturalness, chiral symmetry, and spontaneous chiral symmetry breaking. *NATO Sci. Ser. B*, Vol. 59, p. 135, 1980.
- [41] Z. Komargodski, A. Sharon, R. Thorngren, and X. Zhou. Comments on Abelian Higgs Models and Persistent Order. *SciPost Phys.*, Vol. 6, p. 003, 2019.
- [42] Z. Komargodski, T. Sulejmanpasic, and M. Ünsal. Walls, anomalies, and deconfinement in quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, Vol. 97, p. 054418, 2018.
- [43] A. Smerald and N. Shannon. Theory of spin excitations in a quantum spin-nematic state. *Phys. Rev. B*, Vol. 88, p. 184430, 2013.
- [44] D. Pimenov and M. Punk. Deconfined quantum criticality in SU(3) antiferromagnets on the triangular lattice. *Phys. Rev. B*, Vol. 95, p. 184427, 2017.
- [45] H. Tsunetsugu and M. Arikawa. Spin Nematic Phase in $S = 1$ Triangular Antiferromagnets. *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 75, p. 083701, 2006.
- [46] B. Bauer, P. Corboz, A. M. Läuchli, L. Messio, K. Penc, M. Troyer, and F. Mila. Three-sublattice order in the SU(3) Heisenberg model on the square and triangular lattice. *Phys. Rev. B*, Vol. 85, p. 125116, 2012.
- [47] H. T. Ueda, Y. Akagi, and N. Shannon. Quantum solitons with emergent interactions in a model of cold atoms on the triangular lattice. *Phys. Rev. A*, Vol. 93, p. 021606, 2016.
- [48] J. G. Bednorz and K. A. Müller. Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Z. Phys. B*, Vol. 64, p. 189, 1986.
- [49] S. Chakravarty, D. R. Nelson, and B. I. Halperin. Low temperature behavior of two-dimensional quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 60, p. 1057, 1988.
- [50] C. Rüegg, B. Normand, M. Matsumoto, A. Furrer, D. F. McMorrow, K. W. Krämer, H. U. Güdel, S. N. Gvasaliya, H. Mutka, and M. Boehm. Quantum Magnets under Pressure: Controlling Elementary Excitations in TlCuCl_3 . *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 100, p. 205701, 2008.
- [51] C. Honerkamp and W. Hofstetter. Ultracold Fermions and the SU(N) Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 92, p. 170403, 2004.

- [52] A. Koetsier, R. A. Duine, I. Bloch, and H. T. C. Stoof. Achieving the Néel state in an optical lattice. *Phys. Rev. A*, Vol. 77, p. 023623, 2008.
- [53] A. V. Gorshkov, M. Hermele, V. Gurarie, C. Xu, P. S. Julienne, J. Ye, P. Zoller, E. Demler, M. D. Lukin, and A. M. Rey. Two-orbital $SU(N)$ magnetism with ultracold alkaline-earth atoms. *Nature Physics*, Vol. 6, p. 289, 2010.
- [54] X. Zhang, M. Bishof, S. L. Bromley, C. V. Kraus, M. S. Safronova, P. Zoller, A. M. Rey, and J. Ye. Spectroscopic observation of $SU(N)$ -symmetric interactions in Sr orbital magnetism. *Science*, Vol. 345, p. 1467, 2014.
- [55] M. Cazalilla and A. Rey. Ultracold Fermi Gases with Emergent $SU(N)$ Symmetry. *Rept. Prog. Phys.*, Vol. 77, p. 124401, 2014.
- [56] S. Capponi, P. Lecheminant, and K. Totsuka. Phases of one-dimensional $SU(N)$ cold atomic Fermi gases—From molecular Luttinger liquids to topological phases. *Annals of Physics*, Vol. 367, p. 50, 2016.
- [57] H. Ozawa, S. Taie, Y. Takasu, and Y. Takahashi. Antiferromagnetic Spin Correlation of $SU(N)$ Fermi Gas in an Optical Superlattice. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 121, p. 225303, 2018.
- [58] P. Fromholz, S. Capponi, P. Lecheminant, D. J. Papoular, and K. Totsuka. Haldane phases with ultracold fermionic atoms in double-well optical lattices. *Phys. Rev. B*, Vol. 99, p. 054414, 2019.
- [59] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, Theodor W. Hänsch, and Immanuel Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, Vol. 415, p. 39, 2002.
- [60] I. Takahashi and Y. Tanizaki. Sigma-model analysis of $SU(3)$ antiferromagnetic spins on the triangular lattice. *Phys. Rev. B*, Vol. 104, p. 235152, 2021.
- [61] J. R. Klauder. Path integrals and stationary-phase approximations. *Phys. Rev. D*, Vol. 19, p. 2349, 1979.
- [62] 高橋和孝, 西森秀稔. 相転移・臨界現象とくりこみ群. 丸善出版, 2017.
- [63] B. Berg and M. Luscher. Definition and statistical distributions of a topological number in the lattice $O(3)$ σ -model. *Nucl. Phys. B*, Vol. 190, p. 412, 1981.
- [64] P. B. Wiegmann. Superconductivity in strongly correlated electronic systems and confinement versus deconfinement phenomenon. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 60, p. 821, 1988.
- [65] E. H. Fradkin and M. Stone. Topological terms in one- and two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, Vol. 38, p. 7215, 1988.
- [66] M. Lajkó, K. Wamer, F. Mila, and I. Affleck. Generalization of the Haldane conjecture to $SU(3)$ chains. *Nucl. Phys. B*, Vol. 924, p. 508, 2017. [Erratum: *Nucl. Phys. B* 949, 114781 (2019)].
- [67] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge Univ. Press, 2nd edition, 2011.
- [68] K. Wamer, M. Lajkó, F. Mila, and I. Affleck. Generalization of the Haldane conjecture to $SU(n)$ chains. *Nucl. Phys. B*, Vol. 952, p. 114932, 2020.
- [69] M. A. Metlitski and R. Thorngren. Intrinsic and emergent anomalies at deconfined critical points. *Phys. Rev. B*, Vol. 98, p. 085140, 2018.

- [70] A. Kapustin and N. Seiberg. Coupling a QFT to a TQFT and Duality. *JHEP*, Vol. 04, p. 001, 2014.
- [71] X. G. Wen. *Quantum Field Theory of Many-Body Systems: From the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons*. Oxford Univ. Press, 2007.
- [72] A. V. Chubukov, S. Sachdev, and J. Ye. Theory of two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets with a nearly critical ground state. *Phys. Rev. B*, Vol. 49, p. 11919, 1994.
- [73] T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath, and M. P. A. Fisher. Deconfined criticality critically defined. *J. Phys. Soc. Jpn*, Vol. 74, p. 1, 2005.
- [74] M. Levin and T. Senthil. Deconfined quantum criticality and Néel order via dimer disorder. *Phys. Rev. B*, Vol. 70, p. 220403, 2004.
- [75] W. Zheng and S. Sachdev. Sine-gordon theory of the non-Néel phase of two-dimensional quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, Vol. 40, p. 2704, 1989.
- [76] S. Sachdev and R. N. Bhatt. Bond-operator representation of quantum spins: Mean-field theory of frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, Vol. 41, p. 9323, 1990.
- [77] S. Sachdev and N. Read. Spin-Peierls States of Quantum Antiferromagnets on the CaV_4O_9 Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 77, p. 4800, 1996.
- [78] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki. Valence Bond Ground States in Isotropic Quantum Antiferromagnets. *Commun. Math. Phys.*, Vol. 115, p. 477, 1988.
- [79] A. M. Polyakov. Quark Confinement and Topology of Gauge Groups. *Nucl. Phys. B*, Vol. 120, p. 429, 1977.
- [80] M. Ünsal. Theta dependence, sign problems and topological interference. *Phys. Rev. D*, Vol. 86, p. 105012, 2012.
- [81] T. Sulejmanpasic, H. Shao, A. Sandvik, and M. Unsal. Confinement in the bulk, deconfinement on the wall: infrared equivalence between compactified QCD and quantum magnets. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 119, p. 091601, 2017.
- [82] A. Banerjee, K. Damle, and A. Paramekanti. Néel to staggered dimer order transition in a generalized honeycomb lattice Heisenberg model. *Phys. Rev. B*, Vol. 83, p. 134419, 2011.
- [83] A. W. Sandvik and J. Kurkijärvi. Quantum Monte Carlo simulation method for spin systems. *Phys. Rev. B*, Vol. 43, p. 5950, 1991.
- [84] O. F. Syljuasen and A. W. Sandvik. Quantum Monte Carlo with directed loops. *Phys. Rev. E*, Vol. 66, p. 046701, 2002.
- [85] R. K. Kaul, R. G. Melko, and A. W. Sandvik. Bridging lattice-scale physics and continuum field theory with quantum Monte Carlo simulations. *Ann. Rev. Condensed Matter Phys.*, Vol. 4, p. 179, 2013.
- [86] S. Liang. Existence of Néel order at $T = 0$ in the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a square lattice. *Phys. Rev. B*, Vol. 42, p. 6555, 1990.
- [87] A. W. Sandvik. Ground state projection of quantum spin systems in the valence-bond basis. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 95, p. 207203, 2005.

- [88] K. Harada, N. Kawashima, and M. Troyer. Néel and Spin-Peierls Ground States of Two-Dimensional $SU(N)$ Quantum Antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 90, p. 117203, 2003.
- [89] K. S. D. Beach, F. Alet, M. Mambrini, and S. Capponi. $SU(N)$ Heisenberg model on the square lattice: A continuous- N quantum Monte Carlo study. *Phys. Rev. B*, Vol. 80, p. 184401, 2009.
- [90] N. Kawashima and Y. Tanabe. Ground states of the $SU(N)$ Heisenberg model. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 98, p. 057202, 2007.
- [91] J. Lou, A. W. Sandvik, and N. Kawashima. Antiferromagnetic to valence-bond-solid transitions in two-dimensional $SU(N)$ Heisenberg models with multispin interactions. *Phys. Rev. B*, Vol. 80, p. 180414, 2009.
- [92] A. Sen and A. W. Sandvik. Example of a first-order Néel to valence-bond-solid transition in two dimensions. *Phys. Rev. B*, Vol. 82, p. 174428, 2010.
- [93] B. Zhao, J. Takahashi, and A. W. Sandvik. Tunable deconfined quantum criticality and interplay of different valence-bond solid phases. *Chin. Phys. B*, Vol. 29, p. 057506, 2020.
- [94] J. Schwinger. On Angular Momentum. In L. C. Biedenharn and H. van Dam, editors, *Quantum Theory of Angular Momentum*, p. 229. Academic Press, 1965.
- [95] R. Kobayashi, Y. Lee, K. Shiozaki, and Y. Tanizaki. Topological terms of (2+1)d flag-manifold sigma models. *JHEP*, Vol. 08, p. 075, 2021.
- [96] J. B. Bronzan. Parametrization of $SU(3)$. *Phys. Rev. D*, Vol. 38, p. 1994, 1988.
- [97] Y. Tanizaki and T. Sulejmanpasic. Anomaly and global inconsistency matching: θ -angles, $SU(3)/U(1)^2$ nonlinear sigma model, $SU(3)$ chains, and generalizations. *Phys. Rev. B*, Vol. 98, p. 115126, 2018.
- [98] E. B. Bogomol'nyi. The stability of classical solutions. *Sov. J. Nucl. Phys.*, Vol. 24, p. 449, 1976.
- [99] M. K. Prasad and C. M. Sommerfield. Exact Classical Solution for the 't Hooft Monopole and the Julia-Zee Dyon. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 35, p. 760, 1975.
- [100] M. Hongo, T. Misumi, and Y. Tanizaki. Phase structure of the twisted $SU(3)/U(1)^2$ flag sigma model on $\mathbb{R} \times S^1$. *JHEP*, Vol. 02, p. 070, 2019.