論文内容の要旨

論文題目：Analytical Study of the One-Dimensional Heisenberg Model
(1次元ハイゼンベルグ模型の解析的研究)

氏名　加　藤　　豪

多自由度系全体としての振舞を系統的に理解することは、物理系の運動の発展を記述する方程式を発見するのと同等に、重要で困難な問題である。このように、物理的問題の重要な側面の１つである「多自由度系の振舞の理解」に対する方法論が統計力学である。その方法論を用いて現在盛んに研究されている対象として、スピン模型がある。そもそも、スピン模型には以下の様な特徴がある。磁化という物理量がマクロとミクロ両方の世界において、初等的にもはっきりしている。その結果、統計力学本来の目的である「集団としての振舞を系統的にとらえる」という事のみが解決すべき困難として残っている。そのため、統計力学の本質の多くがそこに詰め込まれていると考えられる。これらの特徴が、スピン模型に関する研究が盛んに行われる理由であろう。

しかし、スピン模型に関する統計力学的理解は、対象・方法論が与えられているにもかかわらず、多くの近似によって得られた共通認識としての「常識」が形成されたに過ぎない。これが2,3次元の模型における現状である。つまり、解析的に物理量が与えられて初めて本当の理解が得られたと考える立場に立つならば、2,3次元の模型においては何も理解できていないと言っても過言ではない。

そこで、厳密に解析できる系を深く理解し、現実的な模型に発展させていこう、というのが、統計力学を研究する上での１つの立場であると考える。一方、1次元ハイゼンベルグ模型は可積分模型である。ここでの「可積分」とは、固有値がある意味で解析的に与えられる事を意味するのみであり、全ての物理量が既に解析的に与えられた事を示すものではない。そのため、この模型において解析的に物理量を導出し理解を深めようとした場合に適度な困難が存在している。1次元ハイゼンベルグ模型が盛んに研究されている模型の内の１つであ

るのは、このような事情によるものと考える。

著者は、このような認識の基に、1次元ハイゼンベルグ模型の「分配関数」と「絶対0度における相関関数」の2つの物理量の解析的考察を行った。分配関数を解析する量として選んだ理由は、統計力学の基本的な目標の1つとして相転移に関する情報を解析的に示すという点にあるからである。また、相関関数を解析する理由は、ハイゼンベルグ模型は磁性体の模型であり、自発磁化等の相関関数が理解に重要であると考えるからである。

Part1 分配関数の導出

XXX ハイゼンベルグ模型

$$H = -J\sum_{j=1}^{L}\left(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + S_j^z S_{j+1}^z\right) - h\sum_{j=1}^{L} S_j^z + C$$

の固有値は

$$E + hM = \sum_{m=1}^{M}\frac{2}{x_m^2+1}$$

で表される。ただし $\{x_m\}$ は Bethe 方程式

$$\left[\frac{x_m+i}{x_m-i}\right]^L = \prod_{m'\neq m}\frac{x_m - x_{m'} + 2i}{x_m - x_{m'} - 2i}$$

を満たす。この事実のみを前提として、現在知られている方法と全く独立な方法で分配関数を導出する。

現在までに知られている方法として、熱力学的ベーテ仮説法(TBA)と量子転送行列(QTM)という2つの方法が知られていた。しかし、このそれぞれの方法は次の様な事情により満足のいく方法ではないと考えられる。

まず、TBA に関して議論する。TBA を用いた導出は以下の様に行われる。まず、上述の $\{x_m\}$ の満たす関係式の熱力学極限を取る事で、「電子」と「正孔」に関する運動量密度関数 $\rho_e(k)$, $\rho_h(k)$ に関する積分関係式と解釈しなおす。次に $\rho_e(k)$, $\rho_h(k)$ を用いた非平衡状態のエントロピー

$$\begin{aligned} S &= -k_b \log W \\ &= -k_b \int \log\frac{(\rho_e(x)\,dx)!\,(\rho_h(x)\,dx)!}{(\rho_e(x)\,dx + \rho_h(x)\,dx)!} \end{aligned}$$

を用いた時の自由エネルギーの最小化条件から、平衡状態であるための $\rho_e(x)$, $\rho_h(x)$ の条件式を導出する。この $\rho_e(x)$, $\rho_h(x)$ に関する2つの関係式から2つの密度関数が一意に決定され、平衡状態の自由エネルギーつまり分配関数が与えられる。しかしこの導出方法において幾つかの問題点が指摘できる。まず、$\{x_m\}$ は Bethe 方程式によって強く相関しており、非平衡状態のエントロピーとして「同じ巨視的状態になる場合の数」が上述の方法で数えられていると解釈するのは、あまりに理論的飛躍が大きい。さらに、この自由エネルギーを最小化して平衡状態を与えているが、そもそもそのようにして得られた自由エネルギーと数学的定義としての分配関数 $\mathrm{Tr}e^{-\beta H}$ との関係は熱力学から経験的に要請される関係であって、本来は数学的に証明されなければいけない関係である。つまり、物理的直感や近似を用いず解

析的に厳密に理解しようという可積分模型を研究する本来の目的を満たされておらず、解析的分配関数の導出法として満足のいくものではない。

次にQTMに関して議論する。QTMは次のような方法で導出される。まず、鈴木-Trotter変換により、1次元量子模型を2次元古典模型にマップする。この置き換えにより、Trotter方向の転送行列の最大固有値が熱力学極限における分配関数となる。この時、Trotter方向の転送行列をTrotter数を有限にして、Bethe Ansatzによって対角化する。この時の最大固有値に対応する偽運動量の集合から作られるdressed energy関数の解析的特性を調べる。この結果を外挿する事で、Trotter数無限大の時の最大固有値に対応するdressed energy関数を一意に決定する方程式を導出する。そして、そのdressed energy関数を使って最大固有値を表現する。以上がQTMの概観である。しかし、導出途中において行われる解析的関係のTrotter数無限への外挿に数学的証明は無く、その関係は経験からくる推量でしかない。この点が厳密な解析性を求める上での大きな問題である。つまり、分配関数の解析的導出法として満足のいく方法ではないと考えられる。

この様に、これまでに存在した2つの方法はそれぞれ厳密な解析的導出という意味において十分満足のいく方法であるとは思えない。そこで、本論文において、前出の2つの方法とは全く独立でより解析的に厳密な導出方法を提示した。以下この方法の概観を延べる。この方法は、自由粒子の分配関数の一般的な方法と良く似ているため、以下比較しながら説明する。まず、一個の自由粒子の場合の固有エネルギーは$E(k)$と書ける、ただし、kは$e^{kL}=1$を満たしさらに$E(k)=k^2$を満たす。この時分配関数は熱力学極限において

$$\mathrm{Tr}e^{-\beta H} = \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{dn}{dk} e^{-\beta E(k)}$$

と計算される。ただし、nは$e^{kL}=e^{2\pi i n}$を満たす。ハイゼンベルグ模型においても、同様の計算を上向きスピンがMの部分空間V_Mに制限して行うわけである。具体的には

$$\mathrm{Tr}e^{-\beta(H_M - hM)} = \prod_{m=1}^{M} \int dk_m \left| \frac{\partial I_m}{\partial k_{m'}} \right| e^{-\beta E(\{k_m\})}$$

という熱力学極限における関係を用いる。ただし、H_Mは本来のハイゼンベルグ模型のハミルトニアンがV_Mの空間へ制限された演算子とし、I_mは

$$\left[\frac{x_m + i}{x_m - i}\right]^L = e^{2\pi i I_m} \prod_{m' \neq m} \frac{x_m - x_{m'} + 2i}{x_m - x_{m'} - 2i},$$

によって定義されるものとする。上述の関係を利用して分配関数を求める過程において、解決した困難は以下の2点に集約される。1つは、上述した積分において積分経路は明記していないが、実際この積分経路は積分変数に関して極度に相関をもった複素積分になっており、この評価が非常に難しい点。もう1つは、上述によって与えられるのは、制限された空間における対角和である点、つまり、それぞれの部分空間における対角和すべてを足し上げる必要がある。本論文において、第1の困難はn_mの定義式にうまくパラメーターを入れる事で、変数間の相関が消えるような積分経路の変形を定義する事で解決した。また、第2の困難は、足し上げた結果の関数がある方程式を満たすことを証明することで解決した。

以上の方法によって本論文において得られる結果は、TBAによって得られる結果と同等の表現をしている。

Part2 絶対0度における相関関数の解析。

磁場のないXXZハイゼンベルグ模型

$$H = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left[S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z \right]$$

の相関関数に関して以下のような事実が知られている。まず、隣接するm点相関関数はm重の積分で表される事が知られている。例えば、$-1 < \Delta = \cos \pi\nu < 1$の時は以下のようになる。

$$\begin{aligned} & \left\langle E^{(1)}_{\epsilon'_1 \epsilon_1} \cdots E^{(m)}_{\epsilon'_m \epsilon_m} \right\rangle \\ = \ & \nu^{-m(m-1)/2} \prod_{a \in A_+} \int_{C_+} \frac{-dx_a}{2\pi i} \prod_{a \in A_-} \int_{C_-} \frac{dx_a}{2\pi i} \prod_{1 \le l < l' \le m} \frac{\sinh(x_l - x_{l'})}{\sinh \nu (x_l - x_{l'} - \pi i)} \\ & \prod_{a \in A_+} \frac{\sinh^{\bar{a}-1} \nu x_a \cdot \sinh^{m-\bar{a}} \nu (x_a - \pi i)}{\sinh^m x_a} \prod_{a \in A_-} \frac{\sinh^{\bar{a}-1} \nu x_a \cdot \sinh^{m-\bar{a}} \nu (x_a + \pi i)}{\sinh^m x_a} \end{aligned}$$

ここで、ϵ, ϵ'は$+$又は$-$のどちらかをとり、$E^{(k)}_{\epsilon', \epsilon}$は$k$番目のスピン空間$e_+ \oplus e_-$に作用する$2 \times 2$行列で、$\epsilon'$行$\epsilon$列のみが1で他の3要素は0である。また、$A_\pm, \bar{a}$はそれぞれ、$\epsilon, \epsilon'$によって一意的に決まる整数の集合と整数から整数への写像である。さらに、長距離相関の漸近展開として、以下の2つの量の解析的値が導出されている。1つめは、$\left\langle \prod_{j=1}^m \left(S_j^z + \frac{1}{2} \right) \right\rangle$の長距離における漸近展開の最低次の項。これは$m$が十分大きい場合の上述の積分表式を鞍点法によって評価して求められている。2つめは、$\langle S_1^\alpha S_m^\alpha \rangle$の長距離の漸近展開の最低次と、その次の項。これらは、模型の連続極限から得られる場の理論から導出されている。しかし、これら長距離相関を求める方法は、その求める物理量に依存する所が大きかったり、高次の項が求められなかったりというような問題点がある。そこで、この積分表示を系統的に簡単化する事は重要である。本論文においては、上述のような$\left\langle E^{(1)}_{\epsilon'_1 \epsilon_1} \cdots E^{(m)}_{\epsilon'_m \epsilon_m} \right\rangle$の積分表示の簡単化の一般的処方箋と具体例を示した。ここで、一般的処方箋とは、上述のようなm重積分を変形し$m/2$回積分を実行し1重積分の多項式に変形する手続きを意味する。この処方箋を一般のmで実行する事はまだできておらず、本論文においては、$m = 1 \sim 4$における独立な15個の積分表示された相関をこの処方箋で簡単化した。それぞれの積分は結果的に

$$\begin{aligned} \zeta_\eta(j) &:= \int_{C_-} dx \frac{1}{\sinh x} \frac{\cosh \eta x}{\sinh^j \eta x} \\ \zeta'_\eta(j) &:= \int_{C_-} dx \frac{1}{\sinh x} \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\cosh \eta x}{\sinh^j \eta x} \end{aligned}$$

の多項式となった。ただし、jが奇数の値のみが用いられ、多項式の係数は$\cos \pi\eta$と$\sin \pi\eta$の有理式である。ここで、ηはΔに依存する以下の条件によって決定されるとする。まず、ηは$\cos \pi\eta = \Delta$を満たす。さらに、$-1 < \Delta < 1$の時は$0 < \eta < 1$、$1 < \Delta$の時は$0 < \Im(\eta)$の純虚数である。$\Delta < -1$の場合は相関が自明になり、本論文においては議論されていない。

以上のように本論文においては、XXX模型の分配関数の新しい導出法を示し、XXZ模型の相関関数のまったく新しい簡明な表式を具体的に導出した。これらの全ての方法論及び解析は、著者が独自に確立・実行したものであり、これらの結果は低次元量子スピン系の統計力学に新しい知見を与えている。