拡張した量子ハイゼンベルク模型の鏡映正値性を用いた解析

井元隆史 (北海道大学理学院数学専攻修士 2 年)

1　導入

統計力学は量子力学というミクロな性質から目に見えるようなマクロな現象を導くものである. その中でも特徴的なものが相転移である. この相転移には身近なものでは物質が固体, 液体, 気体の 3 つの相を温度と気圧によって変化するものなど様々なものがある. その中でもよく研究されているのは物質の磁性についてのものである. 相転移が統計力学で厳密に表現できることが初めて証明されたのは 1944 年のオンサーガーの 2 次元古典イジング模型の厳密解を求めたことである. それ以降様々な模型に対して相転移の存在は証明されたが, 今回扱うのは 4 次の項が含まれるような拡張した量子ハイゼンベルク模型についてである (主定理の項を参照). ここでは, 本公演で用いる基本的な統計力学の定義と量子ハイゼンベルク模型, 2 次の項まで含まれるような模型について述べる.

1.1　基本的な準備

まず本公演並びにこのレポートでは, ν 次元正方格子 $\Lambda := \{\alpha \in Z^{\nu} | 0 \leq \alpha_1 \leq L_1 - 1, \cdots, 0 \leq \alpha_{\nu} \leq L_{\nu} - 1\}$ 上で相互作用を最隣接のみのものを扱う. スピン $\tilde{S}^{(j)}_{\alpha}$ を $[\tilde{S}^{(j)}_{\alpha}, \tilde{S}^{(k)}_{\alpha}] = i\epsilon_{jkl}\tilde{S}^{(l)}_{\alpha}$ をみたすような作用素とする. ここで, $S^{(j)}_{\alpha} = \tilde{S}^{(j)}_{\alpha} (j = 1, 3), S^{(2)}_{\alpha} = (-i)\tilde{S}^{(2)}_{\alpha}$ となるような $S^{(j)}_{\alpha}$ を考える. ただし ϵ_{jkl} を完全対称テンソルとする. また, 逆温度, 分配関数, 期待値を次のように定義する.

逆温度

$\beta := \frac{1}{k_B T}$ (k_B : ボルツマン定数, T : 温度)

分配関数

$Z := \mathrm{Tr}\Big[\exp(-\beta H)\Big]$

期待値

$\langle A \rangle_{\Lambda,\beta} := Z^{-1}\mathrm{Tr}\Big[A \exp(-\beta H)\Big]$

1.2　Duhamel 二点相関関数

ここで, 本レポートには登場しないが本公演において使う定義なので Duhamel 二点相関関数を以下のように定義する.

$$(A, B) := Z^{-1} \int_0^1 \mathrm{Tr}\Big[e^{x\beta H} A e^{-(1-x)\beta H} B)\Big] dx \; (A, B : n \times n \text{ 行列}) \tag{1}$$

1.3　熱力学極限

熱力学極限 (無限体積極限) を以下のように定義する.

$$\langle A\rangle_\beta := \lim_{|\Lambda|\to\infty}\langle A\rangle_{\Lambda\,\beta} \tag{2}$$

1.4　長距離秩序

$$\lim_{|x|\to\infty}\langle S_0 S_x\rangle > 0 \tag{3}$$

をみたすとき, 長距離秩序が存在するという. 特に長距離秩序が存在すれば自発磁化の存在が言え相転移が存在することが知られている.

1.5　具体的な模型

定義 1.1. 量子ハイゼンベルク模型のハミルトニアンを

$$H_1 = -\sum_{\alpha\in\Lambda}\sum_{m=1}^{\nu}\sum_{j=1}^{n} J_1 S_\alpha^{(j)} S_{\alpha+\delta_m}^{(j)} \tag{4}$$

と定義する.

このような模型についての相転移の存在は十分温度が低いとき J.Dyson,E.Lieb,B.Simon[1] によって鏡映正値性の方法を用いて証明された. この模型の応用として等方 XY 模型 ($J^{(1)} = J^{(3)} = 1, J^{(2)} = 0$ のハイゼンベルク模型と同じ) がある.

定理 1.2. (J.Dyson,E.Lieb,B.Simon[1]) $\nu \geq 3$ のスピン $\frac{1}{2}$ の XY 模型は最隣接の正方格子は十分温度が低いとき相転移が存在する.

初めに定義した一般的なスピン $\tilde{S}_\alpha^{(i)}$ の反強磁体模型については上の模型を以下のように変換すればよい.

$$S_\alpha^{(i)} \to (-1)^{|\alpha|} S_\alpha^{(i)} \ (\ i = 1, 3) \tag{5}$$

$$S_\alpha^{(2)} \to i S_\alpha^{(2)} \tag{6}$$

以上の反強磁性体模型の相転移の存在も J.Dyson,E.Lieb,B.Simon[1] によって定義 1.1 の模型の証明を拡張して証明された.

定理 1.3. (J.Dyson,E.Lieb,B.Simon[1]) 反強磁性的量子ハイゼンベルク模型に, 十分大きな β に対して, $\nu \geq 3, S = 1, \frac{3}{2}, 2\cdots$ または, $S = \frac{1}{2}$ で ν が十分大きいとき長距離秩序が存在する. したがって, 相転移の存在も存在する.

※強磁性的ハイゼンベルク模型の相転移の存在は未解決問題である.

また, *2* 次の項もある場合については D.Ueltschi によって 2014 年 [2] で触れられている.

定義 1.4. 記号は定義 *1.1* と同じものとする.

$$H_2 = -\sum_{\alpha\in\Lambda}\sum_{m=1}^{\nu}\sum_{j=1}^{n}\left(J_1 S_\alpha^{(j)} S_{\alpha+\delta_m}^{(j)} + J_2 (S_\alpha^{(j)} S_{\alpha+\delta_m})^2\right) \tag{7}$$

本公演ではこれらの定理の証明の手法を用いて 4 次の項までが存在する模型についての考察を解説する.

2　主結果

ここでの記号の定義は導入と同じものとする.

$$H = \sum_{\alpha\in\Lambda}\Big(-J_1\sum_{m=1}^{\nu}\sum_{j=1}^{n}S_{\alpha}^{(j)}S_{\alpha+\delta_m}^{(j)} - J_2\sum_{m=1}^{\nu}\sum_{j=1}^{n}(S_{\alpha}^{(j)}S_{\alpha+\delta_m}^{(j)})^2 - J_4\sum_{m=1}^{\nu}\sum_{j=1}^{n}(S_{\alpha}^{(j)}S_{\alpha+\delta_m}^{(j)})^4\Big) \tag{8}$$

※ここで $J_1, J_2, J_4(>0)$ は相互作用定数とする.

ハミルトニアンが (8) のような形になっている模型に対しても長距離秩序が存在することを鏡映正値性の方法を用いて量子ハイゼンベルク模型の解析 [1] を参考にして考察する.

参考文献

[1] F. J. Dyson, E. H. Lieb, and B. Simon J. Stat. Phys. 18:335 (1978).

[2] D.UeltschiarXiv:1406.2366 (2014).