

量子 XXZ 鎖に対する厳密な Bethe 量子数と Bethe 根

東京大学大学院 総合文化研究科 広域科学専攻 相関基礎科学系
井元隆史 (Takashi Imoto)

概要

Spin-1/2 の XXX 鎖及び XXZ 鎖の Hamiltonian の固有ベクトルを構成する方法として Bethe 仮説が知られている [1]。この Bethe 仮説を用いて固有ベクトルを求めるには Bethe 仮説方程式を解くことが必要であり、現在これは近似的にしか解かれていない。今回我々は two-down-spin のセクターに限定した場合を考える。XXX 鎖については Bethe 仮説方程式の対数関数の分岐を指定する Bethe 量子数を用いた Deguchi-Giri の手法 (文献 [2]) が知られており、今回はこの手法を用いて XXZ 鎖の厳密な Bethe 量子数と Bethe 根について議論する。本研究は佐藤純氏、出口哲生氏との共同研究である [3]。

1 はじめに

一般に量子多体系を数学的に厳密に計算することは非常に困難である。数値的にも厳密対角化といった直接的な手法を用いた場合はサイト数を増やすことによって指数関数的に計算量が増えてしまうため、本来の物理的な興味の対象である大きな系の解析を行うことは困難である。

そのなかで、すべての固有値、固有ベクトルを計算できる量子系のモデルとして一次元量子可積分系がある。その代表的な解析手法が Bethe 仮説がある。Bethe 仮説は 1931 年に Bethe よって XXX 鎖に対して導入されたもので、モデルに対する Bethe 仮説方程式と呼ばれる方程式の解を求めることにより、もともとのモデルのエネルギー固有値と固有ベクトルが求まるというものである [1]。ただし、一般に Bethe 仮説方程式を解くことは非常に困難であり、2018 年現在でも真には解けてはいない。一方で 1971 年に高橋が string 仮説と呼ばれる仮定を Bethe 仮説方程式の解に適用することによって自由エネルギーを計算した [4, 5]。ただし、この XXX 鎖および、massless-XXZ 鎖においては string 仮説が破れることが知られている。

Bethe 仮説方程式を数値的に解くための方法として、Bethe 仮説方程式の両辺を対数を取るやり方がある。このとき、対数関数の分岐を指定するものを Bethe 量子数と呼ぶ。再帰的に Bethe 仮説方程式の解を求めるためには各解の形ごとの個数が必要となる。XXX 鎖の two-down-spin sector の Bethe 仮説方程式に対しては出口-Giri によって厳密な Bethe 量子数、各解の形ごとの個数、完全性についての議論がある [2]。

本講演および本稿では Bethe 量子数を用いて massive-XXZ 鎖における、two-down-spin sector の Bethe 仮説方程式の解について議論する。

2 XXZ Heisenberg 鎖と Bethe 仮説方程式

2.1 XXZ Heisenberg 鎖

本稿で扱う XXZ 鎖とその Bethe 仮説方程式について解説する。つぎに、周期境界条件の spin-1/2 の反強磁性 XXZ 鎖の Hamiltonian $H_N^{XXZ} : \otimes_{k=1}^N \mathbb{C}^2 \rightarrow \otimes_{k=1}^N \mathbb{C}^2$ を次のように定義する。

$$H_N^{XXZ} := \frac{1}{4} \sum_{k=1}^N \left(\sigma_k^X \sigma_{k+1}^X + \sigma_k^Y \sigma_{k+1}^Y + \Delta (\sigma_k^Z \sigma_{k+1}^Z - \mathbf{1}_N) \right). \quad (1)$$

ただし、 Δ を異方性パラメータとし、スピン作用素 σ^a ($a = X, Y, Z$) を

$$\sigma^X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

とし、 σ_k^a を

$$\sigma_k^a = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1} \otimes \underbrace{\sigma^a}_{k \text{ 番目}} \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \quad (3)$$

とする。XXZ 鎖の相互作用の異方性の度合いをパラメータ Δ であらわす。 $\Delta = 1$ の等方的な場合が XXX 鎖に相当する。 $|\Delta| < 1$ の場合は系の性質は、XXX 鎖の場合と同様にその基底状態と励起状態の間にギャップない。これを massless あるいは gapless な場合と呼ぶ。一方、 $\Delta > 1$ の場合には基底状態は Ising 的な長距離秩序を示し、励起様態との間に有限ギャップを持っており、これを massive あるいは gaped な場合と呼ぶ。

2.2 Bethe 仮説方程式

本節では、Bethe 仮説方程式と Bethe 仮説方程式の両辺に対数を取った対数形式をそれぞれ紹介する。量子化軸を z 方向に取ったとき、系の磁化は保存量であるため、解空間も磁化の値に応じて sector に分割される。そのなかで下向きスピンの M 個の sector を M-down-spin sector と呼ぶ。M-down-spin sector における Bethe 仮説方程式の解を $\{\lambda_j\}_{j=1, \dots, M}$ とする。

異方性ごとの XXZ 鎖に対応する Bethe 仮説方程式は次のように表記される。

- $\Delta = 1$ の場合: XXX 鎖 down-spin の数を M とすると

$$\left(\frac{\lambda_j + i/2}{\lambda_j - i/2} \right)^N = \prod_{k \neq j, k=1}^M \frac{\lambda_j - \lambda_k + i}{\lambda_j - \lambda_k - i} \quad (j = 1, 2, \dots, M) \quad (4)$$

となる。これを対数形式にすると

$$2 \tan^{-1}(2\lambda_i) = \frac{2\pi}{N} J_i + \frac{1}{N} \sum_{k=1}^M 2 \tan^{-1}(\lambda_i - \lambda_k) \quad (5)$$

となる。 J_i は対数関数の分岐を指定するものであり、Bethe 量子数と呼ばれる。

- $|\Delta| < 1$ の場合: massless(gapless)-XXZ 鎖 down-spin の数を M とし、異方性パラメータを $\Delta = \cos \zeta$ と表し、

$$\left(\frac{\sinh(\lambda_j + i\zeta/2)}{\sinh(\lambda_j - i\zeta/2)} \right)^N = \prod_{k \neq j, k=1}^M \frac{\sinh(\lambda_j - \lambda_k + i\zeta)}{\sinh(\lambda_j - \lambda_k - i\zeta)} \quad (6)$$

となる。これを対数形式にすると

$$2 \tan^{-1} \left(\frac{\tanh \lambda_i}{\tan(\zeta/2)} \right) = \frac{2\pi}{N} J_i + \frac{1}{N} \sum_{k=1}^M 2 \tan^{-1} \left(\frac{\tanh(\lambda_i - \lambda_k)}{\tan \zeta} \right) \quad (7)$$

となる。

- $|\Delta| > 1$ の場合: massive(gaped)-XXZ 鎖 down-spin の数を M とし、異方性パラメータを $\Delta = \cosh \zeta$ と表し、

$$\left(\frac{\sin(\lambda_j + i\zeta/2)}{\sin(\lambda_j - i\zeta/2)} \right)^N = \prod_{k \neq j, k=1}^M \frac{\sin(\lambda_j - \lambda_k + i\zeta)}{\sin(\lambda_j - \lambda_k - i\zeta)} \quad (8)$$

となる。これを対数形式にすると

$$2 \tan^{-1} \left(\frac{\tan \lambda_i}{\tanh(\zeta/2)} \right) = \frac{2\pi}{N} J_i + \frac{1}{N} \sum_{k=1}^M 2 \tan^{-1} \left(\frac{\tan(\lambda_i - \lambda_k)}{\tanh \zeta} \right) \quad (9)$$

となる。

Bethe 仮説方程式の解の性質として、1986 年に Vladimirov によって Bethe 仮説方程式の解の実部が等しいときに虚部の和が 0 になる性質:

$$\{\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_M^*\} = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_M\} \quad (10)$$

が知られている [6]。Two-down-spin sector においては、上記の性質によって Bethe 仮説方程式の解の組は二つとも実数となる実解と、Hermite 共役の組となる複素解の二つのタイプの解が存在する。XXX 鎖の two-down-spin sector ではサイト数を大きくすると string 仮説で予想される複素解が実解に潰れてしまう現象が起こることが Essler-Korepin-Schoutens によって報告されている [7]。この現象は collapse と呼ばれる。サイト数が大きくなると collapse する複素解の個数も増えていく。具体的に two-down-spin sector においてサイト数と collapse する複素解の個数の具体的な関係は出口-Giri によって求められている [2]。

2.3 String 仮説

一般に、Bethe 仮説方程式を解くことはできていないが高橋によって string 仮説と呼ばれる解の形と各解の形の個数を仮定することによって有限温度の熱力学極限の物理量が求められた [4, 5]。ここでは、XXX 鎖の string 仮説が要請する仮定について解説する。

まず、Bethe 仮説方程式の解の形を

$$\lambda_j = x_\alpha + \frac{1}{2}(n+1-2k)i + O(e^{-dN}), \quad k = 1, \dots, n \quad (11)$$

と仮定する。この解を n-string 解と呼ぶ。ただし、 x_α を string センターと呼び、 $O(e^{-dN})$ を string からのずれと呼ぶ。また、 $d > 0$ とする。また、string のずれがない $\lambda_j = x_\alpha + (n+1-2k)i$, $k = 1, \dots, n$ を完全 string 解と呼ぶ。次に Takahashi 量子数という量を次のように定義する。 $N - M_n$ が奇数 (偶数) であるときに Takahashi 量子数 I_α^n を次の条件を満たす整数 (半整数) とする:

$$|I_\alpha^n| \leq \left(N - 1 - \sum_{k=1} [2 \min(n, k) - \delta_{n,k}] M_k \right). \quad (12)$$

ここで、 M_n を一組の Bethe 仮説方程式の解の中の n-string の個数とする。したがって、 $M = \sum_{n=1}^{\infty} n M_n$ となることに注意する。(12) を満たす個数から Bethe 仮説方程式の解の各形ごとの個数を予言する。

これらの string 仮説を仮定することにより自由エネルギーは

$$f = \left(\ln 2 - \frac{1}{4} \right) - T \int s(x) \ln(1 + \eta_1(x)) dx \quad (13)$$

で表される。ただし、 η_n は次の方程式で決定される。

$$\ln \eta_1(x) = \frac{2\pi J}{T} s(x) + s * \ln(1 + \eta_2(x)), \quad (14)$$

$$\ln \eta_n(x) = s * \ln(1 + \eta_{n-1}(x))(1 + \eta_{n+1}(x)), \quad (15)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln \eta_n}{n} = \frac{2h}{T}. \quad (16)$$

ここで、 $s(x)$ と $s * f(x)$ を

$$s(x) = \frac{1}{4} \operatorname{sech}\left(\frac{\pi x}{2}\right), \quad (17)$$

$$s * f(x) = \int s(x-y) f(y) dy \quad (18)$$

と定義する。

ただし、string 仮説は XXX 鎖および massless-XXZ 鎖では string 仮説が破れることが知られている。しかし、厳密には string 仮説が成り立たなくとも string 仮説から求まる物理量は近似的に正しいと信じられている。

3 Massive-XXZ 鎖に対する two-down-spin sector における Bethe 仮説方程式

3.1 Bethe 量子数を用いた解析の手法

本節では本研究の手法の概要について述べる。まず、massive-XXZ 鎖の two-down-spin sector における Bethe 仮説方程式は

$$2 \tan^{-1} \left(\frac{\tan(\lambda_1)}{\tanh \zeta/2} \right) = \frac{2\pi}{N} J_1 + \frac{2}{N} \tan^{-1} \left(\frac{\tan(\lambda_1 - \lambda_2)}{\tanh \zeta} \right) \quad (19)$$

$$2 \tan^{-1} \left(\frac{\tan(\lambda_2)}{\tanh \zeta/2} \right) = \frac{2\pi}{N} J_2 + \frac{2}{N} \tan^{-1} \left(\frac{\tan(\lambda_2 - \lambda_1)}{\tanh \zeta} \right). \quad (20)$$

となる。次に複素解を次のように置く。

$$\lambda_1 = x + \frac{i}{2}\zeta + i\delta, \quad \lambda_2 = x - \frac{i}{2}\zeta - i\zeta \quad (x, \delta \in \mathbb{R}) \quad (21)$$

ただし、 x :string センター、 δ :string のずれとする。ここで、 $\delta > -\zeta/2$ であることに注意する。 w を次のように導入する。

$$w \equiv \frac{\tanh(\zeta/2 + \delta)}{\tanh(\zeta/2)}. \quad (22)$$

この w を用いて counting function を

$$2\pi Z_1(w) \equiv 2 \tan^{-1} \left(\frac{\tan(\lambda_1)}{\tanh(\zeta/2)} \right) - \frac{2}{N} \tan^{-1} \left(\frac{\tan(\lambda_1 - \lambda_2)}{\tanh \zeta} \right) \quad (23)$$

を満たすように定義する。このとき、Bethe 仮説方程式は

$$Z_1(w) = \frac{J_1}{N} \quad (24)$$

と表せる。このとき、counting function $Z_1(w)$ の形が求まると、Bethe 量子数 J_1 を指定したときに Bethe 仮説方程式の解である $w (\geq 0)$ を求めることができる。また、量子数 J_1 がわかれば、もう一方の量子数 J_2 の値も、対数形式の Bethe 仮説方程式 (20) に対する解析を使って求めることができる。本研究ではこの counting function $Z_1(w)$ の性質を調べることによって two-down-spin sector の複素解の個数、サイト数 N を大きくしたときの複素解の振る舞いを中心に解析した。

3.2 今回の結果

今回の解析によって複素解の個数に関しては次のような結果が得られた [3]。Conjecture となっているのは counting function $Z_1(w)$ の一部の単調性が示せていないためであり、この部分に関しては数値的に確認した。

Conjecture 1 N, ζ が

$$\tanh^2(\zeta/2) < \frac{1 - (N-1) \tan^2(\pi(1+2m)/2N)}{(N-1) - \tan^2(\pi(1+2m)/2N)} \quad (25)$$

を満たすとき、 m 組の collapse が起こる。

Conjecture 2 N, ζ が

$$\tanh^2(\zeta/2) > \frac{1 - (N-1) \tan^2(\pi/2N)}{(N-1) - \tan^2(\pi/2N)} \quad (26)$$

を満たすとき、一組の extra two-string 解が存在する。

この extra-two-string 解は XXX 鎖では実現しない解である。

Conjecture 1 と Conjecture 2 の結果を $\tanh^2 \zeta/2$ とサイト数 N に関するグラフで表すと図 1 になる。ただし、異方性パラメータと ζ の関係は $\Delta = \cosh \zeta$ であることに注意する。また、 $N \rightarrow \infty$ と極限を取ったときを考えると (25) の右辺は、

$$\frac{1 - (N-1) \tan^2\left(\pi(1+2m)/2N\right)}{(N-1) - \tan^2\left(\pi(1+2m)/2N\right)} \rightarrow 0 \quad (N \rightarrow \infty) \quad (27)$$

であり、(26) の右辺は、

$$\frac{1 - (N-1) \tan^2\left(\pi/2N\right)}{(N-1) - \tan^2\left(\pi/2N\right)} \rightarrow 0 \quad (N \rightarrow \infty) \quad (28)$$

となる。したがって、 $N \rightarrow \infty$ とした場合には異方性パラメータが $\Delta > 0$ (すなわち $\zeta > 0$) であるときには extra-two-string 解を持つことがわかる。また、 $\zeta \rightarrow 0$ としたときに collapse の現れる個数の条件は XXX 鎖の場合 (文献 [2]) と一致した。

Counting function $Z_1(w)$ の定義域が指数関数的に小さくなることから次のような結果が得られた。

Theorem 3.1 $\tanh^2(\zeta/2) > \frac{1}{N-1}$ であるとき、two-down-spin sector の Bethe 仮説方程式の複素解が次のように string 仮説で予言される完全 string 解 (11) に指数関数的に近づく。

$$\lambda_1 = x + \frac{i}{2}\zeta + O(e^{-dN}), \quad \lambda_2 = x - \frac{i}{2}\zeta + O(e^{-dN}). \quad (29)$$

ただし、 $d > 0$ とする。

4 まとめ

- String 仮説が予言する複素解の個数と実際の解の個数の関係を求めた。
- 複素解の個数が増える、XXX 鎖では存在しない現象を発見した。この新たな複素解を extra-two-string 解と命名して、出現領域をサイト数と異方性によって特定した。
- サイト数 N が大きい場合、 N が大きくしていくにしたがって複素数が指数関数的に完全 string 解に近づくことを解析的に示した。

ただし、この結果の一部分に関しては数値的に確認した部分が含まれている。

参考文献

- [1] H. A. Bethe, 1931 *Z.Phys.*, **71** 205-26.
- [2] T. Deguchi and P. R. Giri, 2016 *J. Phys. A:Math. Theor.*, **49** 174001.
- [3] T. Imoto, J. Sato, T. Deguchi, 2018 arXiv:1807.08885v1: *J. Phys. A:Math. Theor* より出版予定 <https://dx.doi.org/10.1088/1751-8121/aaf29f>

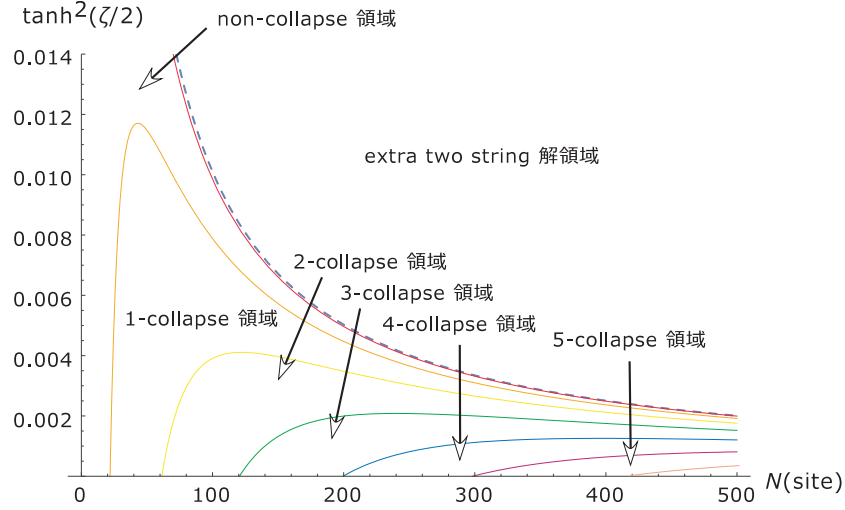


図1 extra-two-string 解の collapse する複素解の組の個数。図中の m -collapse 領域は collapse した複素解の組が m 個であることを表している。縦軸は、XXZ 鎖の相互作用 J の z 軸方向の異方性を表すパラメータ $\Delta = \cosh \zeta$ に関連した、 $\tanh^2\left(\frac{\zeta}{2}\right)$ 、横軸はサイト数 N である。
 $\tanh^2\left(\frac{\zeta}{2}\right) = 0$ が XXX 鎖の場合に相当し、 $\tanh^2\left(\frac{\zeta}{2}\right) = \infty$ が Ising 鎖の場合に相当する。また、 $N \rightarrow \infty$ としたときは異方性パラメータ $\Delta > 1$ (すなわち $\tanh^2\left(\frac{\zeta}{2}\right) > 0$) の領域はすべて、extra-two-string 解を持つ領域になる。破線より上の領域では複素解が string 仮説によって予言される完全 string 解との差が $O(\exp(-dN))$ となる。

- [4] M. Takahashi, 1971 *Prog. Theor. Phys.*, **46** 401.
- [5] M. Takahashi, 1999 *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*, Cambridge: Cambridge University Press.
- [6] A. A. Vladimirov, 1986 *Theor. Math. Phys.*, **66** 102.
- [7] F. H. L. Essler, V. E. Korepin and, K. Schoutens, 1992 *J. Phys. A: Math. Gen.*, **25** 4115.