量子可積分系におけるダイナミクスの厳密計算

佐藤 純 (Jun Sato)
東京大学 先端科学技術研究センター

概 要

本レポートでは，量子可積分系として知られる XXZ 模型を例にとって，局所物理量の実時間ダイナミクスを厳密に計算する試みについて紹介する．XXZ 模型は，ベーテ仮説法によって系統的に厳密なエネルギー固有状態が構成される．有限温度の性質については，ストリング仮説を用いた熱力学的ベーテ仮説や，虚時間経路積分の方法を用いた量子転送行列法による解析がよく知られている．一方，開放端 XXZ 鎖は，境界ヤンバクスター方程式の解を用いた代数的ベーテ仮説により対角化可能である．最近，実時間の量子転送行列法と，境界ヤンバクスター方程式の手法を合わせ，ある特定の初期状態からの物理量のダイナミクスを厳密に計算する手法が発展している．本レポートでは，これらの研究成果について簡単な解説を試みる．

1 はじめに

実験室内に箱が置かれ，その中に気体が閉じ込めらているとする．気体は最初，温度分布，分子数密度分布が不均一な非平衡状態にあったとしよう．すると，しばらく観察すれば，気体分子同士の衝突などによる相互作用により，数密度は一様となる．また，箱の壁を通して外界と熱的な相互作用することにより，気体の温度分布もまた室温と同じ値に一様となるであろう．すなわち，系は非平衡な初期状態から平衡状態へと緩和する．従来の平衡統計力学はこのような平衡状態にある系を解析の対象とし，数々の成功を収め磐石な基盤の元に確立した理論体系を為している．それに対し，興味ある現象のほとんどは非平衡であるにも関わらず，非平衡統計力学は磐石な体系化からは程遠いのが現状である．

ここでは簡単のため，外界と相互作用しない孤立した系を考える．量子力学の基本原理により時間発展する孤立量子系を考えると，通常の意味での緩和は起こらない．ところが，局所的な物理量に注目すると，注目する部分系にとって周囲の全系が「熱浴」として作用し，その期待値はある値に緩和することが期待される．ミクロな力学法則により時間発展した後に到達する定常状態が，平衡統計力学の枠組みで記述されるのか，という観点から，孤立量子系のダイナミクスが近年活発に研究されている．一方，相互作用する量子多体系において，物理量の時間発展を精度よく計算することは困難を極める．本研究では，厳密計算の可能性を秘めた量子可積分系を取り扱う．

有限自由度のハミルトン力学系の場合，自由度と同じ数の保存量があれば運動方程式は積分可能となり，古典可積分系と呼ばれる．量子系の場合には，可積分の定義は古典系の場合ほど明確ではない．しかし，厳密に系統的に対角化可能で無限個の保存量を有した一連の量子多体系が存在し，それを量子可積分系と呼ぶ．本レポートでは，代表的な量子可積分系である XXZ 模型を例にとって，量子ダイナミクスの厳密計算の研究を紹介する．

2 XXZ 模型とベーテ仮説

2.1 XXZ 模型

複素 2 次元ベクトル空間 $V = \mathbb{C}^2 = \left\{ \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \middle| \alpha, \beta \in \mathbb{C} \right\}$ 上の Hermite 線形作用素であるスピン $S^\alpha : V \to V$ $(\alpha = x, y, z)$ を

$$S^x := \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^y := \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad S^z := \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.1}$$

で定める．行列 X, Y に対する交換子積を $[X, Y] := XY - YX$ で定める．これらの 2×2 行列は角運動量の交換関係

$$[S^x, S^y] = \mathrm{i}S^z, \quad [S^y, S^z] = \mathrm{i}S^x, \quad [S^z, S^x] = \mathrm{i}S^y \tag{2.2}$$

を満たす．V はひとつのスピン空間を表す．これが，1 列に L 個並んだ空間，すなわち V を L 個テンソル積した空間 $V^{\otimes L} := \underbrace{V \otimes \cdots \otimes V}_{L\text{ 個}}$ を考える．この上の作用素として，$S_n^\alpha : V^{\otimes L} \to V^{\otimes L}$ $(\alpha = x, y, z)$ を

$$S_n^\alpha := \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{n-1\text{ 個}} \otimes S^\alpha \otimes \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{L-n\text{ 個}} \tag{2.3}$$

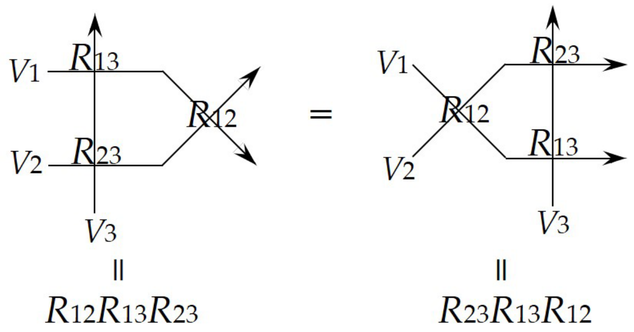


図 1: Yang-Baxter 関係式

で定める．ただし，$\mathbb{1}$ は 2×2 の単位行列 $\mathbb{1} := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ である．すなわち，S_n^α は，n 番目のスピン空間に S^α として作用し，その他の空間には恒等演算子として作用する．

1 次元スピン 1/2 ハイゼンベルク XXZ 模型は，1 次元格子に並んだ L 個のスピン $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \cdots, \mathbf{S}_L$ が最近接で交換相互作用する模型であり，以下のハミルトニアンで与えられる

$$\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}} = \sum_{n=1}^{L} (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + \Delta S_n^z S_{n+1}^z). \tag{2.4}$$

ただし，周期境界 $S_{L+1}^\alpha = S_1^\alpha$ であるとする．隣同士のスピンの交換相互作用は $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}$ と内積の形で書けるが，これを z 成分だけ異方性パラメータ Δ で歪めたような模型になっている．

2.2 ベーテ仮説

ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}$ は $V^{\otimes L}$ 上の作用素であり，$2^L \times 2^L$ という巨大行列であるが，ベーテ仮設と呼ばれる方法により系統的に厳密に対角化される [1, 2, 3]．以下，簡単に流れを記述する．まず，$V_j \otimes V_k$(j 番目と k 番目のスピン) 上の作用素である R 行列を

$$R_{jk}(\lambda_j, \lambda_k) := \begin{pmatrix} a(\lambda_j,\lambda_k) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\lambda_j,\lambda_k) & c(\lambda_j,\lambda_k) & 0 \\ 0 & c(\lambda_j,\lambda_k) & b(\lambda_j,\lambda_k) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a(\lambda_j,\lambda_k) \end{pmatrix} \tag{2.5}$$

で定める．ただし，

$$\begin{aligned} a(\lambda_j,\lambda_k) &:= \sinh(\lambda_j - \lambda_k + \eta), \\ b(\lambda_j,\lambda_k) &:= \sinh(\lambda_j - \lambda_k), \\ c(\lambda_j,\lambda_k) &:= \sinh\eta \end{aligned} \tag{2.6}$$

であり，η は

$$\cosh\eta = \Delta \tag{2.7}$$

で決まる異方性パラメータである．これは，$V_1 \otimes V_2 \otimes V_3$ 上の作用素として，関係式

$$R_{12}(\lambda_1,\lambda_2)R_{13}(\lambda_1,\lambda_3)R_{23}(\lambda_2,\lambda_3) = R_{23}(\lambda_2,\lambda_3)R_{13}(\lambda_1,\lambda_3)R_{12}(\lambda_1,\lambda_2) \tag{2.8}$$

を満たす (図 1 を参照)．これを Yang-Baxter 関係式と言う [4, 5, 6]．そして，モノドロミー行列 $\tau_{0,12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L)$ を図 2 で定義する．具体的に式で書くと，

$$\tau_{0,12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) = R_{0L}(\lambda,\xi_L)\cdots R_{02}(\lambda,\xi_2)R_{01}(\lambda,\xi_1) \tag{2.9}$$

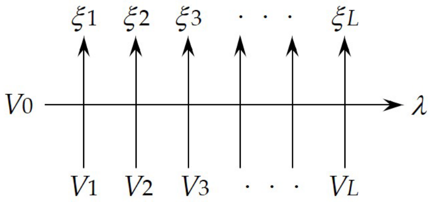
$\tau_{0,12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) =$ 

図 2: モノドロミー行列

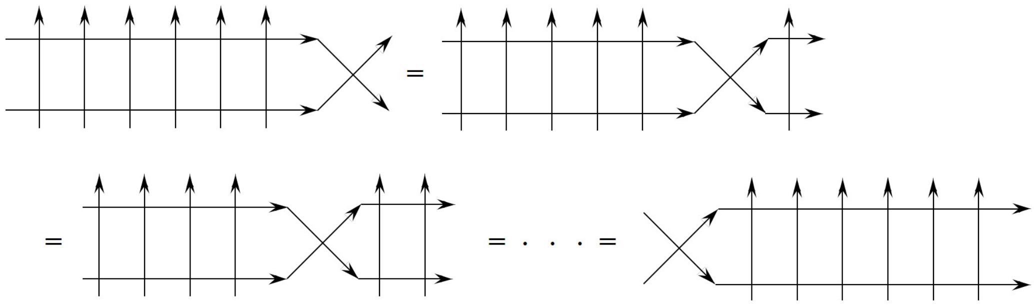


図 3: Yang-Baxter 関係式を次々と適用することによって，両者は等しいことが分かる．

となる．$\tau_{0,12\cdots L}$ の下の添え字 $0, 12\cdots L$ は，$\tau_{0,12\cdots L}$ が空間 $V_0 \otimes V_1 \otimes V_2 \otimes \cdots \otimes V_L$ に作用する演算子であることを表している．次に，転送行列 T を，モノドロミー行列において空間 V_0 でトレースを取ったもので定義する：

$$T_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) := \mathrm{tr}_0 \tau_{0,12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) \tag{2.10}$$

$T_{12\cdots L}$ の下の添え字 $12\cdots L$ は，$T_{12\cdots L}$ が空間 $V_1 \otimes V_2 \otimes \cdots \otimes V_L$ に作用する演算子であることを表している．ここで，空間 V_0 を補助空間，空間 $V_1 \otimes V_2 \otimes \cdots \otimes V_L$ を量子空間という．後者は量子ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}$ が作用する空間であることが名前の由来である．すると，Yang-Baxter 関係式の帰結として，関係式

$$R_{00'}(\lambda,\mu)\tau_0(\lambda)\tau_{0'}(\mu) = \tau_{0'}(\mu)\tau_0(\lambda)R_{00'}(\lambda,\mu) \tag{2.11}$$

が得られ (図 3)，異なるパラメータを持つ転送行列が交換すること

$$\begin{aligned} T_0(\lambda)T_{0'}(\mu) &= \mathrm{tr}_{00'}\left[\tau_0(\lambda)\tau_{0'}(\mu)\right] \\ &= \mathrm{tr}_{00'}\left[R_{00'}(\lambda,\mu)^{-1}\tau_{0'}(\mu)\tau_0(\lambda)R_{00'}(\lambda,\mu)\right] \\ &= \mathrm{tr}_{00'}\left[\tau_{0'}(\mu)\tau_0(\lambda)R_{00'}(\lambda,\mu)R_{00'}(\lambda,\mu)^{-1}\right] \\ &= \mathrm{tr}_{00'}\left[\tau_{0'}(\mu)\tau_0(\lambda)\right] \\ &= T_{0'}(\mu)T_0(\lambda) \end{aligned} \tag{2.12}$$

が分かる．すなわち，我々は任意パラメータ λ を含んだ可換な行列 $T_0(\lambda)$ を得たことになる．これを λ で展開することにより，互いに可換な演算子の列を無限個得ることができる．実はその最初の 2 つが，運動量とハミルトニアンであり，我々はハミルトニアンと互いに可換な演算子，すなわち保存量を無限に得たことになる．ハミルトニアンは転送行列を使って

$$\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}} = \frac{\varphi(\eta)}{2}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\log T(\lambda)\bigg|_{\lambda=\eta/2} \tag{2.13}$$

と書かれる．

さて，モノドロミー行列 $\tau_{0,12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L)$ を補助空間 V_0 で 2×2 の行列で表示して，その 4 つの行列要素を A, B, C, D と書こう：

$$\tau_{0,12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) = \begin{pmatrix} A_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) & B_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) \\ C_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) & D_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) \end{pmatrix}_0 . \tag{2.14}$$

以下，量子空間の添え字はしばしば省略して $A(\lambda) = A_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1, \cdots, \xi_L)$ 等と書く．すると，転送行列 $T_0(\lambda) = A(\lambda) + D(\lambda)$ の固有ベクトルが，$\prod_{\ell=1}^{N} B(z_\ell)|0\rangle$ によって構成されることが示される．より正確に言うと，N 個のパラメータ $z_1, \cdots, z_N$ がベーテ方程式

$$\prod_{n=1}^{L} \frac{\sinh(z_j - \xi_n + \eta)}{\sinh(z_j - \xi_n)} = \prod_{\ell \neq j}^{N} \frac{\sinh(z_j - z_\ell + \eta)}{\sinh(z_j - z_\ell - \eta)} \quad \text{for} \quad j = 1, 2, \cdots, N \tag{2.15}$$

を満たすとき，N 粒子状態 $\prod_{\ell=1}^{N} B(z_\ell)|0\rangle$ および $\langle 0|\prod_{\ell=1}^{N} C(z_\ell)$ は転送行列 $T(\lambda)$ の固有ベクトルとなり，固有方程式は

$$\begin{aligned} T(\lambda)\left(\prod_{\ell=1}^{N} B(z_\ell)\right)|0\rangle &= t(\lambda)\left(\prod_{\ell=1}^{N} B(z_\ell)\right)|0\rangle, \\ \langle 0|\left(\prod_{\ell=1}^{N} C(z_\ell)\right)T(\lambda) &= t(\lambda)\langle 0|\left(\prod_{\ell=1}^{N} C(z_\ell)\right) \end{aligned} \tag{2.16}$$

で与えられる．ただし，固有値を

$$t(\lambda) := a(\lambda)\left(\prod_{\ell=1}^{N} f(z_\ell, \lambda)\right) + d(\lambda)\left(\prod_{\ell=1}^{N} f(\lambda, z_\ell)\right), \tag{2.17}$$

$$a(\lambda) = a_{1\cdots L}(\lambda|\xi_1, \cdots, \xi_L) = \prod_{n=1}^{L} a(\lambda, \xi_n), \tag{2.18}$$

$$d(\lambda) = d_{1\cdots L}(\lambda|\xi_1, \cdots, \xi_L) = \prod_{n=1}^{L} b(\lambda, \xi_n) \tag{2.19}$$

と書いた．このようにして転送行列が，すなわちハミルトニアンが対角化された．

3　量子ダイナミクスの厳密計算

量子ダイナミクスの最も簡単な例として，ここではロシュミットエコー

$$\langle \Psi_0|\exp[-\mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}]|\Psi_0\rangle \tag{3.1}$$

を考えよう [7]．すなわち，ある非平衡な初期状態 $|\Psi_0\rangle$ からスタートし，ユニタリ時間発展作用素 $\exp[-\mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}]$ により時間 t だけ発展した後，もとの状態に戻ってくる (エコー) ような確率振幅である．ここで，時間発展を経路積分表示で

$$\begin{aligned} \exp[-\mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}] &= \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{\mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}}{N}\right)^N \\ &= \lim_{N\to\infty} \frac{[T_0(-\mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}\sinh\eta/4N)T_0(-\eta + \mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}\sinh\eta/4N)]^N}{\sinh(\eta - \mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}\sinh\eta/4N)^{2LN}} \end{aligned} \tag{3.2}$$

と表そう．すると，実時間の量子転送行列法により，ロシュミットエコーは

$$\langle \Psi_0|\exp[-\mathrm{i}\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}t]|\Psi_0\rangle = \lim_{N\to\infty} \mathrm{tr}\mathcal{T}^{L/2}, \quad \mathcal{T} := \frac{\langle \psi_0|T^{\mathrm{QTM}}(0) \otimes T^{\mathrm{QTM}}(0)|\psi_0\rangle}{\sinh(\eta - \mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}\sinh\eta/4N)^{2LN}} \tag{3.3}$$

と書かれる．ただし，初期状態 $|\Psi_0\rangle$ は 2 スピンのテンソル積 $|\Psi_0\rangle = (|\psi_0\rangle)^{\otimes L/2}$ で書けるとし，T^{QTM} は量子転送行列 (Quantum Transfer Matrix)

$$\begin{aligned} T^{\mathrm{QTM}}(u) := &R_{2N,0}(u - \mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}\sinh\eta/4N)R_{2N-1,0}(u + \mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}\sinh\eta/4N - \eta)\cdots \\ &\times R_{2,0}(u - \mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}\sinh\eta/4N)R_{1,0}(u + \mathrm{i}t\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}\sinh\eta/4N - \eta) \end{aligned} \tag{3.4}$$

である．行列 $\mathcal{T}$ の対角化は，境界 Yang-Baxter 方程式 [8, 9]

$$R_{12}(\lambda_1 - \lambda_2)K_1(\lambda_1)R_{12}(\lambda_1 + \lambda_2)K_2(\lambda_2) = K_2(\lambda_2)R_{12}(\lambda_1 + \lambda_2)K_1(\lambda_1)R_{12}(\lambda_1 - \lambda_2) \tag{3.5}$$

と境界転送行列

$$T(u) = \mathrm{tr}_0\{K_1(u)T_1(u)K_2(u)T_2(u)\} \tag{3.6}$$

により行うことができる．ただし，$K_j(u)$ は境界反射行列であり，初期状態 $|\psi_0\rangle$ ごとに選ばれる．以上の方法により，ロシュミットエコーの計算が，境界転送行列の最大固有値の計算に帰着した．考える初期状態ごとにこの計算が実行出来れば，厳密なロシュミットエコーが得られることになる．

4 まとめ

本レポートではまず，XXZ 模型のベーテ仮説による厳密解を紹介した．その後，量子転送行列法と境界 Yang-Baxter 関係式を合わせた手法によるロシュミットエコーの計算方法を簡単に紹介した．ロシュミットエコーに関しては長時間の具体的計算も含めて急速に研究が進展している [7] が，相関関数の時間発展に関しては全くの手付かずであり，今後の重要な研究課題として残されている [10].

参考文献

[1] H.A. Bethe, Z. Phys. **71** (1931) 205.

[2] M. Takahashi, "*Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*", Cambridge University Press, 1999.

[3] V.E. Korepin, N.M. Bogoliubov and A.G. Izergin, "*Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*", Cambridge University Press, 1993.

[4] C.N. Yang, Phys. Rev. **168** (1968) 1920.

[5] R.J. Baxter, Phys. Rev. Lett. **26** (1971) 832.

[6] R.J. Baxter, "*Exactly solved models in statistical mechanics*" (Academic Press, London, 1982)

[7] L. Piroli, B. Pozsgay, E. Vernier, J. Stat. Mech. (2017) 023106.

[8] E.K. Sklyanin J. Phys. A: Math. Gen. **21** (1988) 2375.

[9] N. Kitanine, K.K. Kozlowski, J.M. Maillet, G. Niccoli, N.A. Slavnov and V. Terras J. Stat. Mech. P10009 (2007).

[10] J. Sato, in preparation.