境界磁場つき開放端XXZ鎖の自己相関関数

佐藤 純 (Jun Sato)
東京工芸大学 工学部工学科 情報コース

概 要

本研究では，可積分な 1 次元量子系である XXZ ハイゼンベルク模型を考える．周期境界条件の場合には，ベーテ仮説の手法を用いた厳密な取り扱いが可能であり，バルクの性質はよく調べられてる．本研究では，両端に境界磁場を印加した，開放端の XXZ 模型を考える．現在重要な研究課題となっている非平衡統計物理学の基礎付けの観点から，端のある系の非平衡ダイナミクスを追跡することは，大きな意義を持つ．開放端の場合，固有状態の構成は境界ヤンバクスター方程式を用いて可能であるが，周期境界の場合と比べてその手続きは遥かに複雑になる．基底状態は境界 1-string という状態で記述されることが分かっているが，string 解は特異的であり，数値的評価は一般に難しい．本研究では，境界 1-string 解を精密に求める方法を確立した．また，ダイナミクスの計算には基底状態だけでなく，励起状態の情報も必要になる．我々は 2-string 解が低励起状態を与えることを見出し，1-string の場合に開発した手法を用いて具体的に数値解を求めた．これらの励起状態の解を用いて，端における自己相関関数を形状因子展開により近似的に求めた．

1 はじめに

平衡統計物理学は平衡状態にある系を解析の対象とし，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，非平衡統計物理学は磐石な体系からは程遠いのが現状である．平衡状態近傍の線形な領域では，揺動散逸定理および線形応答理論によってしっかりとした理論が確立しているが，非線形領域では理論的枠組みの構成は全く成功しておらず，そもそも存在しない可能性も議論されている．また，平衡状態から遠い非線形領域では，境界の影響が消えずに系全体に及ぶことが知られている．したがって，端のある系でその非平衡ダイナミクスを調べることは，非常に大きな意味を持つ．ところが，量子多体問題のダイナミクスを精度良く計算することは困難を極める．

このような観点から，本研究では，厳密な取り扱いが可能な量子可積分系である境界磁場つき開放端 XXZ 鎖に着目し，その非平衡ダイナミクスを解明することを目的とする．

2 境界磁場つき開放端 XXZ 鎖

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

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

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

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

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

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

で定める．ただし，id は 2×2 の単位行列 $\mathrm{id}:=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$ 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

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

隣同士のスピンの交換相互作用は $\mathbf{S}_n\cdots\mathbf{S}_{n+1}$ 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．今回さらに z 方向に境界磁場を加えた以下の模型を考える

$$\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}=\sum_{n=1}^{L-1}(S_n^xS_{n+1}^x+S_n^yS_{n+1}^y+\Delta S_n^zS_{n+1}^z)+h_1S_1^z+h_LS_L^z \tag{2.5}$$

2.2 周期境界のベーテ仮説

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，ベーテ仮説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，周期境界の場合に，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

$$R_{jk}(\lambda_j,\lambda_k):=\begin{pmatrix}a(\lambda_j,\lambda_k) & 0 & 0 & 0\\ 0 & b(\lambda_j,\lambda_k) & c(\lambda_j,\lambda_k) & 0\\ 0 & c(\lambda_j,\lambda_k) & b(\lambda_j,\lambda_k) & 0\\ 0 & 0 & 0 & a(\lambda_j,\lambda_k)\end{pmatrix} \tag{2.6}$$

で定める．ただし，

$$\begin{aligned}a(\lambda_j,\lambda_k)&:=\sinh(\lambda_j-\lambda_k+\eta),\\ b(\lambda_j,\lambda_k)&:=\sinh(\lambda_j-\lambda_k),\\ c(\lambda_j,\lambda_k)&:=\sinh\eta\end{aligned} \tag{2.7}$$

であり，η は

$$\cosh\eta=\Delta \tag{2.8}$$

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

$$R_{12}(\lambda_1,\lambda_2)R_{13}(\lambda_1,\lambda_3)R_{23}(\lambda_2,\lambda_3)=R_{23}(\lambda_2,\lambda_3)R_{13}(\lambda_1,\lambda_3)R_{12}(\lambda_1,\lambda_2) \tag{2.9}$$

を満たす．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 $\tau_{0,12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L)$ を以下で定義する．

$$\tau_{0,12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L)=R_{0L}(\lambda,\xi_L)\cdots R_{02}(\lambda,\xi_2)R_{01}(\lambda,\xi_1) \tag{2.10}$$

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：

$$T_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L):=\mathrm{tr}_0\,\tau_{0,12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) \tag{2.11}$$

$T_{12\cdots L}$ 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

$$R_{00'}(\lambda,\mu)\tau_0(\lambda)\tau_{0'}(\mu)=\tau_{0'}(\mu)\tau_0(\lambda)R_{00'}(\lambda,\mu) \tag{2.12}$$

が得られ，異なるパラメータを持つ転送行列が交換すること

$$\begin{aligned}T_0(\lambda)T_{0'}(\mu)&=\mathrm{tr}_{00'}\left[\tau_0(\lambda)\tau_{0'}(\mu)\right]\\&=\mathrm{tr}_{00'}\left[R_{00'}(\lambda,\mu)^{-1}\tau_{0'}(\mu)\tau_0(\lambda)R_{00'}(\lambda,\mu)\right]\\&=\mathrm{tr}_{00'}\left[\tau_{0'}(\mu)\tau_0(\lambda)R_{00'}(\lambda,\mu)R_{00'}(\lambda,\mu)^{-1}\right]\\&=\mathrm{tr}_{00'}\left[\tau_{0'}(\mu)\tau_0(\lambda)\right]\\&=T_{0'}(\mu)T_0(\lambda)\end{aligned} \tag{2.13}$$

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

$$\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}}=\frac{\varphi(\eta)}{2}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\log T(\lambda)\bigg|_{\lambda=\eta/2} \tag{2.14}$$

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：

$$\tau_{0,12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L)=\begin{pmatrix}A_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) & B_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L)\\ C_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) & D_{12\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L)\end{pmatrix}_0. \tag{2.15}$$

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，$\prod_{\ell=1}^N B(z_\ell)\left|0\right\rangle$ 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

$$\prod_{n=1}^{L}\frac{\sinh(z_j-\xi_n+\eta)}{\sinh(z_j-\xi_n)}=\prod_{\ell\neq j}^{N}\frac{\sinh(z_j-z_\ell+\eta)}{\sinh(z_j-z_\ell-\eta)}\quad\text{for}\quad j=1,2,\cdots,N \tag{2.16}$$

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

$$\begin{aligned}T(\lambda)\left(\prod_{\ell=1}^N B(z_\ell)\right)\left|0\right\rangle&=t(\lambda)\left(\prod_{\ell=1}^N B(z_\ell)\right)\left|0\right\rangle,\\ \left\langle 0\right|\left(\prod_{\ell=1}^N C(z_\ell)\right)T(\lambda)&=t(\lambda)\left\langle 0\right|\left(\prod_{\ell=1}^N C(z_\ell)\right)\end{aligned} \tag{2.17}$$

で与えられる．ただし，固有値を

$$t(\lambda):=a(\lambda)\left(\prod_{\ell=1}^N f(z_\ell,\lambda)\right)+d(\lambda)\left(\prod_{\ell=1}^N f(\lambda,z_\ell)\right), \tag{2.18}$$

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

$$d(\lambda) = d_{1\cdots L}(\lambda|\xi_1,\cdots,\xi_L) = \prod_{n=1}^{L} b(\lambda,\xi_n) \tag{2.20}$$

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．

2.3　解放端 XXZ 模型のベーテ仮説

開放端の場合には，境界 Yang-Baxter 関係式により対角化される．これは非常に煩雑な手続きを必要とするので，ここではベーテ方程式

$$\left(\frac{\sin(\lambda_j+i\zeta/2)}{\sin(\lambda_j-i\zeta/2)}\right)^{2L} = \frac{\sin(\lambda_j+i\zeta/2+i\xi_1)}{\sin(\lambda_j-i\zeta/2-i\xi_1)}\frac{\sin(\lambda_j+i\zeta/2+i\xi_L)}{\sin(\lambda_j-i\zeta/2-i\xi_L)}\prod_{k\neq j}^{N}\frac{\sin(\lambda_j+\lambda_k+i\zeta)\sin(\lambda_j-\lambda_k+i\zeta)}{\sin(\lambda_j+\lambda_k-i\zeta)\sin(\lambda_j-\lambda_k-i\zeta)} \tag{2.21}$$

を紹介するにとどめる．詳しくは [7, 8] を参照されたい．対数を取ると，

$$\begin{aligned}\frac{\pi I_j}{L} &= \theta(\lambda_j,\zeta/2) - \frac{1}{2L}\left\{\theta(\lambda_j,\zeta/2+\xi_1)+\theta(\lambda_j,\zeta/2+\xi_L)\right\} + \frac{1}{2L}\theta(2\lambda_j,\zeta)\\ &\quad - \frac{1}{4L}\sum_{k=1}^{N}\left\{\theta(\lambda_j-\lambda_k,\zeta)+\theta(\lambda_j-\lambda_k^*,\zeta)+\theta(\lambda_j+\lambda_k,\zeta)+\theta(\lambda_j+\lambda_k^*,\zeta)\right\}\end{aligned} \tag{2.22}$$

を得る．I_j はベーテ量子数である．ただし，

$$\theta(\lambda,\zeta) := 2\arctan(\coth\zeta\tan\lambda) + 2\pi\left[\frac{\lambda}{\pi}+\frac{1}{2}\right] \tag{2.23}$$

であり，$[\cdot]$ はガウス記号を表す．また，ξ は磁場を表し，$h_{1,L} = -\sinh\zeta\coth\xi_{1,L}$ である．

この模型の基底状態は，境界 1-string

$$\lambda_N = -i(\zeta/2+\xi_L+\delta) \tag{2.24}$$

で与えられる [9, 10]．δ は string からのずれを表し，今回これを数値的に求めることに成功した．また，励起状態は，2-string

$$\begin{aligned}\lambda_{N-1} &= x + i(\zeta/2+\delta)\\ \lambda_N &= x - i(\zeta/2+\delta)\end{aligned} \tag{2.25}$$

で与えられる．今回見つかったこのタイプの励起状態を使って，形状因子展開

$$\begin{aligned}\langle\lambda|\,\sigma_1^z(0)\sigma_1^z(t)\,|\lambda\rangle &= \sum_{\mu}\langle\lambda|\,\sigma_1^z(0)\,|\mu\rangle\,\langle\mu|\,\sigma_1^z(t)\,|\lambda\rangle\\ &= \sum_{\mu} e^{i(E_\mu-E_\lambda)t}\,|\langle\lambda|\,\sigma_1^z\,|\mu\rangle|^2\end{aligned} \tag{2.26}$$

を用いて，自己相関関数 $\langle\lambda|\,\sigma_1^z(0)\sigma_1^z(t)\,|\lambda\rangle$ を計算した [10]．ただし，形状因子の計算には，行列式公式 [8] を用いた． 下図を見て分かるように，今回我々が得た 2-string によって，Sum rule の約 80%を得ることができた．

3　まとめ

本レポートではまず，周期境界の XXZ 模型のベーテ仮説による厳密解を紹介した．続けて，境界 Yang-Baxter 関係式を用いた開放端 XXZ 模型のベーテ仮説を紹介した．ページ数の関係上，詳細は割愛し，ベーテ仮説方程式だけを論じた．この場合には，境界 string 解が主要な励起状態を与える．string からのずれも含めてベーテ方程

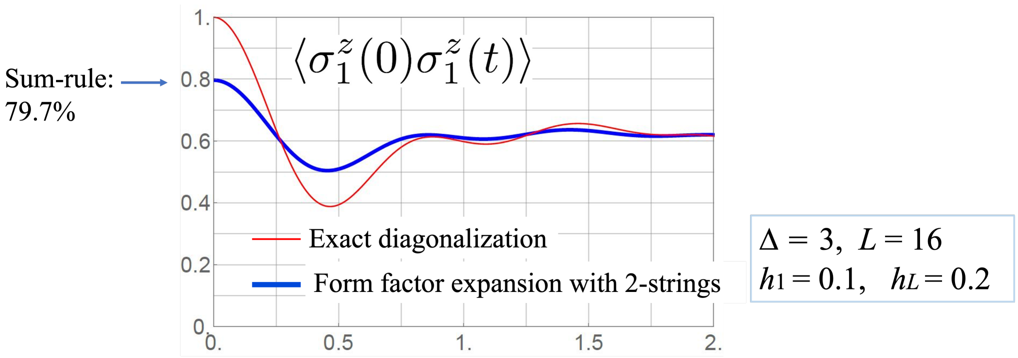

図 1: 自己相関関数

式の根を求めることは strig の特異性により困難であるが，今回数値的に得る方法を確立した．また，これを用いて形状因子展開によって自己相関関数を計算し，80%の寄与を計算できた．

低励起であるにも関わらず解が見つかっていない状態がまだまだたくさんあり，それらを同定して Sum rule を 100% に近づけることは，今後の重要な課題である [11].

謝辞

本稿の内容は，東京大学物性研究所の石黒裕樹氏との共同研究に基づいている．

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

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

[9] A. Kapustin and S. Skorik, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 1629 (1996).

[10] S. Grijalva, J. De Nardis and V. Terras, SciPost Phys. **7**, 023 (2019).

[11] J. Sato and Y. Ishiguro, in preparation.