数理解析研究所講究録
779巻 1992年 51-60

量子スピン系のスペクトルのギャップについて

東京都立大学　松井 卓(Taku Matsui)

§1 以下では 量子スピン系のハミルトニアンのスペクトル 特に、最低固有値とその他のスペクトルとの間のギャップについて得た結果を解説する。

ここでは，d次元格子$\mathbb{Z}^d$上でのスピン系の量子力学を考える。簡単のためスピン$1/2$の系を考える。

Λを$\mathbb{Z}^d$内の1辺の長さLのd次元立方体とする。Λ上の物理的観測可能量は 次の行列のテンソル積でかかれる。

$$\mathfrak{A}_\Lambda = \bigotimes_\Lambda M_2(\mathbb{C}) \qquad (1)$$

$$Q = \bigotimes_{\Lambda \ni j} Q_j \qquad (2)$$

ここで $M_2(\mathbb{C}) = \{ 2\times 2$ 複素行列$\}$　$\mathfrak{A}_\Lambda$は $M_2(\mathbb{C})$

を $|\Lambda| = L^d$ 個テンソルしたもの　$Q_j \in M_2(\mathbb{C})$ で
Q は Λ の点 j $(\in \mathbb{Z}^d)$ に対応する成分は Q_j である $\mathcal{A}_\Lambda$
の元である。パウリのスピン行列を次で定める。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$j = (j_1, j_2 \cdots j_d) \in \Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ に対し

$$\sigma_\alpha^{(j)} = \mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1} \otimes \underset{\hat{j}}{\sigma_\alpha} \otimes \mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1} \quad \in \mathcal{A}_\Lambda \qquad (\alpha = x, y, z)$$

この系のハミルトニアンは、次のようになる。$k \in \mathbb{Z}^d$
に対し $\alpha_k^\Lambda(\cdot)$ を Λ に周期境界条件を課した時の
格子上の translation とする

$$\alpha_k^\Lambda(\sigma_\alpha^{(j)}) = \sigma_\alpha^{(j+k)} \qquad (\alpha = x, y, z) \qquad 13)$$

h を A_Λ のエルミート行列とするとハミルトニアン

$$H_\Lambda = \sum_{k \in \Lambda} \alpha_k^\Lambda(h) \qquad (4)$$

例えばスピン $\frac{1}{2}$ 非等方的ハイゼンベルク模型の

ハミルトニアンは、

$$H_\Lambda = -\sum_{|j-j'|=1} \left\{ \sigma_x^{(j)}\sigma_x^{(j')} + \varepsilon\, \sigma_y^{(j)}\sigma_y^{(j')} + \delta\, \sigma_z^{(j)}\sigma_z^{(j')} \right\} \tag{5}$$

ただし和はΛ内の最近接点の組でとる。

以下では次のようなハミルトニアン(量子イジング模型)も考える。

$$H_\Lambda = -\sum_{j\in\Lambda} \sigma_x^{(j)} - \varepsilon \sum_{|j-j'|=1} \sigma_z^{(j)}\sigma_z^{(j')} \tag{6}$$

統計力学ではこのようなハミルトニアンの $Z^d \to \Lambda$ の極限での固有値の挙動が問題となる。より具体的には (1) 最低固有値の多重度は何か。(2) 最低固有値とその他の固有値との間にギャップはあるか。

最低固有値を与えるベクトル(又はこのベクトルから定まる $\mathfrak{A}_\Lambda$ の線形汎関数)を基底状態と呼ぶ。

上の問題を考える際、次の事を頭に置く必要がある。

今，考えるハミルトニアン H_Λ の固有値を

$$E_\Lambda^{(0)} \leq E_\Lambda^{(1)} \leq E_\Lambda^{(2)} \leq \cdots$$

とする。（$E_\Lambda^{(k)}$ に対応するベクトルは1次元になるようにする。）$E_\Lambda^{(k)}$ の（規格化された）固有ベクトルを $\psi_\Lambda^{(k)}$ と置く。この時，"物理的に意味のある"模型で次のような例がある。

(a)
$$\lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} |E_\Lambda^{(0)} - E_\Lambda^{(1)}| = 0 \tag{7}$$

一方ある $Q \in \mathcal{A} = \bigcup_\Lambda \mathcal{A}_\Lambda$ があり

$$\lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} (\psi_\Lambda^{(0)}, Q\psi_\Lambda^{(0)}) \neq \lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} (\psi_\Lambda^{(1)}, Q\psi_\Lambda^{(1)}) \tag{8}$$

(b)
$$\begin{cases} E_\Lambda^{(2)} - E_\Lambda^{(1)} > m \quad (\Lambda \text{に一様に}) \\ E_\Lambda^{(0)} = E_\Lambda^{(1)} \end{cases} \tag{9}$$

$$\lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} (\psi_\Lambda^{(1)}, Q\psi_\Lambda^{(1)}) = \lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} (\psi_\Lambda^{(0)}, Q\psi_\Lambda^{(0)}) \tag{10}$$

$$(\forall Q \in \mathcal{A})$$

無限自由度の量子力学を考えるということは，(a)の場合基底状態は少なくとも2つあると言える。

(6) の場合 基底状態は一意的であると考える。

このような解釈は物理的には自然だが数学的にははっきりしないので $\Lambda = \mathbb{Z}^d$ で問題の定式化を行う方がよい。これは作用素環の理論を使って実行できる。
(Bratteli & Robinson : Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics (II) を参照)

ここでは，無限系での一般論でなく具体例(5) (6) について述べよう。

定理1. (5)において $|\varepsilon|<1$ で定義された $\eta(\varepsilon)$ で $\lim_{|\varepsilon|\to 1} \eta(\varepsilon) = 0$ が存在し

$|\varepsilon|<1$ $|\delta|<1$ $|\varepsilon-\delta| < \eta(\varepsilon)$ なら

$$|E_\Lambda^{(0)} - E_\Lambda^{(1)}| \leq C_1 |\Lambda| e^{-c_2|\Lambda|} \tag{11}$$

$$E_\Lambda^{(2)} - E_\Lambda^{(1)} > m \tag{12}$$

ここで m. C_1 c_2 には Λ によらない (ε, δ には依存する) 定数

定理2. 量子イジング模型 (8) では、ある $\varepsilon_0 > 0$
($d^{\frac{5}{3}} > \varepsilon_0 > \frac{3}{10d}$) が存在し

$$E_\Lambda^{(1)} - E_\Lambda^{(0)} > m(\varepsilon) > 0 \quad \text{for} \quad |\varepsilon| < \varepsilon_0 \qquad (13)$$

§2　この§2では 定理2についてアイディアを説明する。定理1も似た方法で示せる。(T. Matsui On ground state degeneracy of Z_2 symmetric quantum spin models Publ. R.I.M.S. Vol 27 657–679 (1991) により詳しい解説がある)

今 $X_\Lambda = \prod_\Lambda \{1, -1\}$ (集合$\{1,-1\}$の$|\Lambda|$個の積集合)
$\sigma \in X_\Lambda$ に対し $\sigma^{(j)}$は j成分の値を対応させる関数とする。又 $\mathcal{H}_\Lambda = \bigotimes_\Lambda \mathbb{C}^2$ の C.O.N.S を次のように置く。

$$\left\{ |\sigma\rangle = \bigotimes_{\Lambda \ni j} e_{\sigma^{(j)}} \ , \quad \sigma \in X_\Lambda \right\}$$

ここで $\quad e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad e_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
この時

$$\langle \sigma' | e^{-\beta H_\Lambda} | \sigma \rangle > 0 \qquad (\beta > 0) \qquad (14)$$

つまり 行列 $e^{-\beta H_\Lambda}$ の要素は全て正 で Perron Frobenius の定理が $-\beta H_\Lambda$ に使える

基底状態 Ω_Λ は 正ベクトルで

$$\Omega_\Lambda = \sum_{\sigma \in X_\Lambda} C_\Lambda(\sigma)\, |\sigma\rangle \quad , \quad C_\Lambda(\sigma) > 0 \qquad (15)$$

X_Λ 上の 確率測度 $d\mu_\Lambda(\sigma)$ を

$$d\mu_\Lambda(\sigma) = \frac{1}{Z_\Lambda}\; C_\Lambda(\sigma) \prod_{\Lambda \ni j} d\sigma^{(j)} \qquad (16)$$

ここで Z_Λ は 規格化定数 ($\int d\mu_\Lambda(\sigma) = 1$)

$d\sigma^{(j)}$ は $\int \sigma^{(j)} d\sigma^{(j)} = 0$ で定まる測度(有限和)

ユニタリー $V_\Lambda : \mathcal{H}_\Lambda = \bigotimes_\Lambda \mathbb{C}^2 \longrightarrow L^2(d\mu_\Lambda(\sigma))$ を

$$f = \sum_{\sigma \in X_\Lambda} f(\sigma)\, |\sigma\rangle \quad , \quad V_\Lambda f(\sigma) = \frac{1}{C(\sigma)}\, f(\sigma) \qquad (17)$$

で定める。 この時

$$V_\Lambda \sigma_z^{(j)} V_\Lambda^{-1} = \sigma^{(j)} \text{ の掛け算} \qquad (18)$$

$$V_\Lambda \sigma_x^{(j)} V_\Lambda^{-1} f(\sigma) = \left[\frac{d\mu_\Lambda(\sigma_j)}{d\mu_\Lambda(\sigma)} \right]^{\frac{1}{2}} f(\sigma_j) \qquad (19)$$

ここで σ_j は σ の j 成分の 1 -1 を入れ換えたもので

$$\left[\frac{d\mu_\Lambda(\sigma_j)}{d\mu_\Lambda(\sigma)}\right]^{\frac{1}{2}} = \frac{c_\Lambda(\sigma_j)}{c_\Lambda(\sigma)} \tag{20}$$

は Radon Nikodym derivative (Jacobian) と見る。

$e^{-\beta H_\Lambda}$ の正値性は

$$e^{-\beta L_\Lambda} = V_\Lambda e^{-\beta H_\Lambda} V_\Lambda^{-1} \tag{21}$$

が正関数を正関数にうつすマルコフ半群になるということに対応する。

上の式はトートロジーである。しかしこのように L^2 空間で見ると，$\Lambda \to \mathbb{Z}^d$ の極限は自然に考えられる。実際 $|\beta|$ が小さいとい条件のもとで

$$\lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} d\mu_\Lambda(\sigma), \ \lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} e^{-\beta L_\Lambda}$$

は存在し，それぞれ $\prod_{\mathbb{Z}^d} \{1,-1\}$ 上の測度とマルコフ半群を定めることが示せる。このような状況で，基底状態の一意性は不変測度の一意性（エルゴード性）に，ギャップの存在は収束が指数的に早いということに対応する。このような問題は Holley–Stroock の Stochastic Ising model というマルコフ過程での古典的な結果からある程度わかっている。

量子イジング模型の場合

$$\lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} L_\Lambda f(\sigma) = \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} \sqrt{\frac{d\mu(\sigma_j)}{d\mu(\sigma)}} \left(f(\sigma) - f(\sigma_j) \right) \tag{22}$$

$\left(f(\sigma)\right.$ は $X = \prod_{\mathbb{Z}^d} \{1, -1\}$ 上の"良い regularity"をもつ関数$\left.\right)$

とまたに Stochastic Ising model のマルコフ半群の generator となる。$|\varepsilon| < \varepsilon_0$ では次のような評価が成立する。

$$\log C_\Lambda(\sigma) = \sum_{A \subset \Lambda} J_A \prod_{A \ni j} \sigma^{(j)}$$

と置くと ある $\delta > 0$ があり

$$\sup_{\Lambda \ni j} \sum_{A \ni j} |J_A| \, e^{\delta(|A| + \text{diameter}(A))} \leq C\varepsilon \tag{23}$$

ここで C は Λ によらない定数，$|A|$ は $\mathbb{Z}^d$ の部分集合 A の点の個数 diameter (A) は A の半径 である。

(23) で ε が小さいと $\frac{d\mu(\sigma_j)}{d\mu(\sigma)}$ の変動量が小さくなり定数に近づき エルゴード性が成立することになる。

(Stochastic Ising model については Liggett の本 "Interacting Particle Systems" springer を見よ。)

実は$|\varepsilon|$が大きくなるとエルゴード性が本当に破れることもわかる。

定理1についても基本的にはマルコフ半群の問題へ持ち込む方向で証明できる。(ただし現れる半群は既製の名を持たぬタイプのものであるが性質は Stochastic Ising model に似ている。)

定理1,2のアイディアの部分を述べたが、実際には(23)の証明が一番面倒である。ここではクラスター展開(今の場合は非常に簡単な方)という統計力学特有の手法が使われる。