戸田格子の統計力学—Bethe仮説法の熱力学の古典極限とIdeal Gas Phenomenology

常葉学園大　石川正勝，　京大・基研　高山　一

前年度の同じ標題の研究会において，古典可積分ソリトン系の統計力学の一手法であるIdeal Gas Phenomenology（以下IGPと略記）をself consistentな形式に拡張したものは対応する量子系のBethe仮説法による統計力学の方法の古典極限に対応している事を示した。古典ソリトン系の熱力学諸量は分配関数をtransfer integral法などで直接に計算して求めることができるが，それではソリトンとかフォノンなど系の基本的励起モードが熱力学諸量にどのような効き方をしているかについては十分に窺い知ることができない。そこで可積分系の場合にはソリトンとかフォノンの間の相互作用が単にphase shift（フォノン）又はspatial displacement（ソリトン）で表されることに注目して現象論的に自由エネルギーを求めて熱力学諸量について研究しようというのがIGPの考え方である。しかし状態密度についてなどまだ未確立な部分が残されていた。それらの問題を我々は前述の方法で解決することができた[1)]。

今回は具体的に戸田格子を取上げ，IGPの枠組においてソリトンとフォノンの有限温度におけるスペクトルと，Gibbsの自由エネルギーについて調べた結果を報告する。

質量 $m=1/2$, 相互ポテンシャル $V(r)=e^{-(r-r_0)}+(r-r_0)-1$ を持つ戸田格子の化学ポテンシャルは，圧力 $P=0$ の場合

$$\mu_{\mathrm{cl}}=G/N=-1-(1/2\beta)\ln(\pi/\beta\hbar^2)+\ln\beta-(1/\beta)\ln\Gamma(\beta) \tag{1}$$

（$\beta=1/T$）であり，低温及び高温極限では

$\beta\to\infty$

$$\mu_{\mathrm{cl}}=(1/\beta)\ln(\sqrt{2}\,\hbar\beta)+O(\beta^{-2}) \tag{2. a}$$

$\beta\to 0$

$$\mu_{\mathrm{cl}}=(1/\beta)\ln\{(\hbar/\sqrt{\pi})\,\beta^{3/2}\}+\ln\beta+(1-\gamma)+O(\beta) \tag{2. b}$$

$$(\gamma=0.5772\cdots)$$

となる。これは比熱においては，

$$\beta \to \infty \qquad C_p = 1 + 1/6\beta + O(\beta^{-2}) \tag{3. a}$$

$$\beta \to 0 \qquad C_p = 3/2 - \beta + O(\beta^{2}) \tag{3. b}$$

なるcross overを示し，高温極限において系の非線形性が特徴的に見られる。

Bethe 仮説法においては系の Helmholtz の自由エネルギーは

$$f = F/L = \mu d - (1/2\pi\beta) \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \ln\{1 + \exp(-\beta\varepsilon(k))\} \tag{4. a}$$

$$\varepsilon(k) = (1/\beta)\ln(\rho_h(k)/\rho(k))$$
$$= \hbar^2 k^2 - \mu + (1/\beta)\cdot \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k' T(k-k')\ln\{1 + \exp(-\beta\varepsilon(k'))\} \tag{4. b}$$

$$1/2\pi = \rho(k) + \rho_h(k) + \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k' T(k-k')\rho(k') \tag{4. c}$$

$$d = N/L = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\rho(k) \tag{4. d}$$

により求められる。ここで$2\pi T(k)$は phase shift の微分であり，古典極限($\hbar \to 0$)では

$$T(k) = 1/2\pi d - (1/\pi)\ln(2|k|/k_F), \quad (k_F = \sqrt{2}/\hbar) \tag{5}$$

となる。

(4. a－d)はソリトンとフォノンを用いて

$$f = e_0(d) + \sum_{i=1,2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}P_i f_i(P_i)/2\pi \tag{6. a}$$

$$f_i(P_i) = (1/\beta)\ln\{1 - \exp(-\beta E_i(P_i))\} \tag{6. b}$$

$$E_i(P_i(k_i)) = \varepsilon^{(0)}(k_i) + \sum_{j=1,2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}P_j f_j(P_j)\,\Delta_{ji}(P_j, P_i) + \delta\mu_i(k_i) \tag{6. c}$$

なる形に繰込むことができる[1]。ここで$e_0(d)$は基底状態のエネルギーである。$i = 1, 2$はそれぞれフォノンとソリトンに対応しており，$|k_1| < k_F$，$|k_2| > k_F$である。又$\varepsilon^{(0)}(k_i)$は$T = 0$における各励起エネルギーを，P_iはその運動量を，$\delta\mu_i(k_i)$は化学ポテンシャルの有限温度における変化分を表す。$\Delta_{ij}(P_i, P_j)$はP_jモードが励起されている時のP_iモードの状態密度の変化分である。$\hbar \to 0$では$\varepsilon^{(0)}(k_i)$は古典戸田格子のソリトン及びフォノンのエネルギーになることを確めることができる。又Δ_{ij}についても，例えば$\Delta_{22} = -\Delta x/2\pi(\Delta x$

はソリトン・ソリトンの衝突後のソリトンの spatial displacement) となり Theodoracopoulos 等の理論[2]と一致していることを見ることができる。

$d \ll 1$ の場合について，$E_1(k_1)=\hbar\Omega(k_1)$，$E_2(k_2)=E^*(k_2)-(1/\beta)\ln(\sqrt{2}\hbar\beta)$ とおいて (6. a − c) の古典極限をとると，古典系のＩGP の表式

$$\Delta\mu=\mu(P=0,\ T)-\mu(P=0,\ T=0)=\Delta\mu_1+\Delta\mu_2 \qquad (7.\ a)$$

$$\Delta\mu_1=(1/\beta)\ln(\sqrt{2}\hbar\beta)+(1/\pi\beta)\int dk_1(k_F{}^2-k_1{}^2)^{-\frac{1}{2}}\ln\{\Omega(k_1)/\sqrt{2}\} \qquad (7.\ b)$$

$$\Delta\mu_2=-(\sqrt{2}/\pi)\hbar\cdot\int dk_2\ \mathrm{arccosh}\ (|k_2|/k_F)\exp(-\beta E^*(k_2)) \qquad (7.\ c)$$

ここで

$$\Omega(k_1)=\omega(k_1)+(2/\pi)(\beta\omega(k_1))^{-1}\int_{-k_F}^{k_F} dk_1'\ \left(\frac{\sqrt{k_F{}^2-k_1'^2}}{k_1'-k_1}\right)\frac{\partial}{\partial k_1'}\ln\Omega(k_1')$$

$$-(2/\pi\omega(k_1)\cdot\int_{k_F}^{\infty} dk_2\frac{2k_2\sqrt{k_2{}^2-k^2_F}}{k_2{}^2-k_1{}^2}\exp(-\beta E^*(k_2)) \qquad (8.\ a)$$

$$E^*(k_2)=e(k_2)-(\pi\beta)^{-1}\sqrt{k_2{}^2-k_F^2}\int_{-k_F}^{k_F} dk_1\frac{\ln\Omega(k_1)}{(k_2-k_1)\sqrt{k_F{}^2-k_1{}^2}}$$

$$-(1/\pi)\int_{k_F}^{\infty} dk_2'\cdot S(k_2,\ k_2')/k_F\cdot\exp(-\beta E^*(k_2)) \qquad (8.\ b)$$

を得る。ただし $\omega(k_1)\equiv\varepsilon^{(0)}(k_1)/\hbar=2\sqrt{2}\sqrt{1-(k_1/k_F)^2}$，

$$e(k_2)=2\{(|k_2|/k_F)\sqrt{(k_2/k_F)^2-1}-\mathrm{arccosh}(|k_2|/k_F)\},$$

$$S(k,\ k')=\ln\left|\frac{(k+k')(k_F{}^2-kk'+\sqrt{k^2-k_F{}^2}\sqrt{k'^2-k_F{}^2}}{(k-k')(k_F{}^2+kk'+\sqrt{k^2-k_F{}^2}\sqrt{k'^2-k_F{}^2}}\right| \qquad (8.\ c)$$

である。

(8. a − b) を解くことは容易ではないが，(4. b， d) において $\hbar\to 0$ の極限を取り，厳密に解くことができる[3]。その厳密解を用いると

$$\Omega(k_1)=2\pi(1/\sqrt{\beta})\phi(x_1) \qquad (9.\ a)$$

$$E^*(k_2)=-(1/\beta)\cdot\ln\phi(x_2)-(1/2\beta)\ln(2\pi^2/\beta) \qquad (9.\ b)$$

となる。ここで $x_i = \sqrt{\beta}\ k_i$,

$$\phi(x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\beta\mathcal{R}_e\left(\frac{D_{-\beta-1}(-\mathrm{i}\sqrt{2}\,x)}{D_{-\beta}(-\mathrm{i}\sqrt{2}\,x)}\right), \tag{10}$$

$D_\rho(Z)$ はWeber の放物柱関数である。

(9. a, b)を用いて $\varDelta\mu_1$, $\varDelta\mu_2$ の最も主要な項のみを求めてみると

$$\beta\to\infty, \qquad \varDelta\mu_1 = (1/\beta)\ln(\sqrt{2}\hbar\beta) + (\text{高次項}),$$

$$\varDelta\mu_2 = (\text{高次項}),$$

$$\beta\to 0, \qquad \varDelta\mu_1 = (3/2)(1/\beta)\ln\beta + (\text{高次項}),$$

$$\varDelta\mu_2 = (\text{高次項}),$$

となり(2. a, b)と一致する。低温極限においても高温極限においても $\varDelta\mu$ の最も主要な項はフォノンの寄与である。低温極限においてはフォノンは調和近似でよいが，高温極限においてはフォノンは他のフォノン又はソリトンとの相互作用を受けて大巾に変化している。詳細は研究中である。

参 考 文 献

1) H. Takayama and M. Ishikawa, Prog. Theor. Phys. **74** (1985), 479.
2) N. Theodoracopoulos and F. G. Mertens, Phys. Rev. **B28** (1983), 3512.
3) M. Opper, Phys. Lett. **112A** (1985), 201.

強磁性 Heisenberg XXZ 模型の量子ソリトン—Soliton Profile—

筑波大・物理　吉 田 春 彦

古典ソリトン解は量子論的束縛状態の古典極限(粒子数無限大の極限)に対応しているものと考えられる[1)]。本稿では，1次元の強磁性 Heisenberg XXX 模型を例として，この関係を調べることにする。