

長距離相互作用と異方性を持つ 1次元量子系の基底状態と励起スペクトル

東北大学大学院理学研究科
物理学専攻

齋賀 康宏

Abstract

長距離相互作用のある1次元スピンモデルおよび t - J モデルに異方性を導入して、磁化のある基底状態が解析的に解けるモデルを提出する。導入された異方性パラメーターがある条件を満たすとき、2つのモデルの基底固有関数はともにJastrow型波動関数になる。一方、この条件からはずれたときでも、Jastrow型波動関数は非常によく試行関数になっていることが、重なり積分の計算からわかる。さらに、それらのモデルにおける励起スペクトルを、厳密対角化の手法を用いて調べる。

目次

1 序論	1138
2 モデルとその厳密解	1142
2.1 異方的Haldane-Shastryモデル	1142
2.2 長距離相互作用のある異方的 t - J モデル	1148
2.2.1 エネルギー固有値と固有関数	1148
2.2.2 ハミルトニアン of 物理的解釈	1155
3 厳密対角化の手法	1156
3.1 厳密対角化の特徴	1156
3.2 部分空間での対角化	1157
3.3 対角化の方法 (アルゴリズム)	1157
3.4 対角化の手順	1158

4	計算結果とその解釈	1158
4.1	基底エネルギー	1158
4.1.1	異方的H-Sモデル	1158
4.1.2	異方的 t - J モデル	1159
4.2	重なり積分	1159
4.2.1	異方的H-Sモデル	1159
4.2.2	異方的 t - J モデル	1161
4.3	励起スペクトル	1162
4.3.1	異方的H-Sモデル	1162
4.3.2	異方的 t - J モデル	1163
5	まとめと今後の課題	1163
6	謝辞	1164
7	Appendix	1165
7.1	Sutherlandモデル	1165
7.2	多成分Sutherlandモデル	1167
7.3	$1/\sin^2(\pi r/N)$ の離散型フーリエ変換	1172

1 序論

固体物理の分野では、実験技術の発展に伴い、様々な物質で興味深い現象が報告されている。それらの現象の中には、電子ガスやバンド理論のような単純な粒子描像では説明できないものがある。代表的なものが、銅酸化物系の高温超伝導、2次元電子系における分数量子ホール効果、ランタノイド系化合物およびアクチノイド系化合物における重い電子現象であろう。高温超伝導は、銅酸化物系として $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ が発見されて以来、より高い臨界温度の実現を目指して、Y系、Bi系、Tl系の化合物が作られてきている。これらの化合物は、 CuO_2 面を基礎とする層状構造を持っており、電気伝導に関しては2次元に近いと考えられている。分数量子ホール効果は、GaAs/AlGaAsのヘテロ構造の2次元電子系で1982年に発見されている。また、重い電子系の化合物としては、 CeCu_2Si_2 や UPt_3 などが挙げられ、それらの構造は3次元と考えるべきだろう。これら3つの現象に共通するのは、その原因が強い電子間相互作用によるものであるということである。

さて、このような現象を首尾よく説明するにはどうしたらいいだろうか。問題は、相互作用を含む系をいかに扱うかである。実際の系は2次元や3次元であるが、これを正確に扱うのは難しい。そこで、まず1次元系で厳密な物理量を計算して着実な知見を得てから、その結果を高次元系に応用するというアプローチが考えられる。得られた結果の中に、強相関係の本質的な性質が含まれていると期待するわけである。ただしそのとき、結果が1次元に特有なものかどうかを吟味する必要がある。

幸い、磁性体の中には、ある温度領域で1つの軸における交換相互作用が強くなる物質が存在する。この場合、1次元の鎖のモデルがよい描像になる。CuCl₂·2N(C₅D₅) (CPC) ($S = 1/2$) [1, 2], KCuF₃ ($S = 1/2$) [3, 4, 5, 6], Ni(C₂H₈N₂)₂NO₂(ClO₄) (NENP) ($S = 1$) [7]などはその代表例である。最近、低次元物質に関する実験も盛んにおこなわれている。実験と比較できるという点から見ても、1次元系そのものを研究する意味があると考えられる。

1次元系の中には、解析的な手法で厳密に解けるモデルがある。厳密に解けるモデルを探しだし、そのモデルを徹底的に解明する；そうすれば、そのモデルからずれた場合でも、どのような物理的性質を示すかある程度予想することができる——というのが厳密解の精神である。厳密解は、近似で求められたいろいろの結果をチェックするポイントの役割をも果たす。

1次元系に対して厳密な議論をするとき、従来よく用いられたのがベータ仮説法と呼ばれる方法である。この方法では、まず多体系の固有関数としてベータ波動関数といわれる特別な形を仮定し（仮説）、これが自己無撞着に厳密解になっていることを示す。ベータ仮説法で解かれているモデルの中には、物理的に興味深い現象に結びついたものが存在する。例を挙げれば、スピン系では $S = 1/2$ のハイゼンベルクモデル（強磁性 [8], 反強磁性 [9, 10]) やXXZモデル [11, 12, 13, 14], 高温超伝導で出てくるハバードモデル [15] や超対称 t - J モデル [16, 17, 18, 19], さらに近藤効果の問題で耳にするアンダーソンモデル [20, 21] や近藤モデル [22, 23], などがある。ベータ仮説法で直接厳密に求められるのは、エネルギースペクトルならびに分配関数（すなわち熱力学量）である。相関関数などの計算はこの方法だけではできない。共形場の理論を組み合わせて用いることによって、相関関数の臨界的な振舞いが厳密に議論できる。このように、ベータ仮説法を用いた厳密解というのは、道具立てが入り組んでいる。

これに対して、粒子間の距離の2乗に逆比例する長距離型の相互作用を仮定すると厳密に解けるモデルがある。この場合の固有関数は、2体波動関数の積として表され、Jastrow型波動関数と呼ばれている。長距離相互作用を用いたモデルとしては、まず、Sutherlandが1971年に導入した1次元の連続体モデル（Sutherlandモデル）がある [24, 25]。Haldane [26] とShastry [27] は、これに刺激され、1次元格子にのせた $S = 1/2$ のスピン系のモデル（Haldane-Shastryモデル）を導入した。さらに、このスピン鎖にホールをドーピングすると、金属状態に対する t - J モデルが得られる。倉本と横山 [28] は、 t - J モデルに超対称の条件（ホールのホッピングも長距離型）をつけて、厳密に解けるモデルを見つけた。以後、多成分のスピンモデルや多成分 t - J モデルも解かれている [29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37]。また、長距離型のハバードモデルについても知られている [38, 39]。最近、加藤と倉本 [40] は、内部対称性のあるSutherlandモデル（多成分Sutherlandモデル）について、連続体だけでなく格子系も扱えるような問題を考えている。本研究に特に関わりの深い4つのモデルについて、現在のところ、物理量がどこまで厳密に計算されているかを表1-1に示す。

このように、ベータ仮説法で解かれた多くのモデルで、長距離型に対応するモデルが存在することがわかっている。ただし、長距離型のアンダーソンモデルと近藤モデルの解については未だに知られていない。 $1/r^2$ 型の長距離相互作用を持つモデルの最大の利点は、より多くの物理量が厳密に求められることである。このことは、 $1/r^2$ 型モデルでは「自由」粒子描像が成り立つことに起因しており、実験と比較できる物理量まで計算できるという観点からみても大きな強

みである。ただしここで比較できるのは、ある現象についての低エネルギー領域での、物質によらない不変的な性質であることに注意する。

「自由」粒子描像の性質を生かして、等方的な Haldane-Shastry モデルや長距離相互作用のある超対称 t - J モデルでは、励起エネルギーまで解析的に求めることができる（ただし、縮退度はわからない） [41, 42]。また、厳密対角化を用いて励起スペクトルを求める研究が、等方的な Haldane-Shastry モデル [26] や長距離型の超対称 t - J モデル [42] でおこなわれている。さらに、Ha と Haldane は、1 粒子グリーン関数、密度密度相関関数、およびスピンスピン相関関数についてスペクトル関数がゼロでない部分 (Support) を調べている [43]。これらの研究を通して、 $1/\sin^2$ 型のスピンモデルや超対称 t - J モデルにおける素励起は、スピノン、ホロンというセミオンの統計を持つ粒子で記述されることがわかってきている。これらのモデルは、対応する最隣接型のモデル（ベータ仮説法で解けるモデル）と比較して論じられる。Haldane-Shastry モデルに対応するのが反強磁性ハイゼンベルクモデル ($S = 1/2$) であり、その励起スペクトルは有名な des Cloizeaux-Pearson モード [10] である。このモードは中性子散乱の実験でも観測されている [1, 2, 3, 4, 5, 6]。また、最隣接型の超対称 t - J モデルの励起スペクトルについても調べられている [18, 19]。長距離型と最隣接型の励起スペクトルを比較すると、よく似ていることがわかる。つまり、 $1/\sin^2$ 型モデルは一見特殊な相互作用を持つが、励起スペクトルなどの物理量は現実になんか近くなっている。

上に挙げた長距離型モデルの中で、格子上でのクーロン斥力が無限大のものだけに着目してみると、スピン系では等方的、フェルミオン系では超対称性のある場合、という条件のもとで厳密解が求められている。ところが、現実の物理系では、多かれ少なかれ異方性があることは否定できない。この異方性を忠実にモデルに取り込んで厳密解を見つけることはできないが、厳密解が求められる範囲で異方性を導入して、物理量にどんな変化が現れるかを調べることに意味がある。本研究では、1 次元格子上の量子可解モデル ($1/\sin^2$ 型の等方的スピンモデルおよび超対称 t - J モデル) に異方性を導入した場合、可解モデルの概念がどこまで拡張できるかを調べ、さらに異方性を入れたことによる新しい概念を提出することを目的とする。

異方性を入れたこの 2 つのモデルは、すべての状態が解析的に求められるわけではなく、強磁性状態およびいくつかのそれ以外の状態がわかるだけである。この点が、今までの可解モデルとは異なっている。本研究で扱う異方的モデルは、通常の Yang-Baxter 方程式を満たさない部分可解モデル (保存量が全自由度の数より少ない) であることに言及しておく。

異方性を入れた今までの研究としては、Haldane の研究 [26] がある。Haldane は、1 次元格子上のスピンモデルを導入したとき、イジング異方性も含めて考えていた。彼は、ハミルトニアンを Jastrow 型波動関数に実際に作用させるという方法で、磁化のある基底状態のエネルギー固有値と固有関数を求めた。この場合、すべての異方性パラメーターについて、そのエネルギー固有値と固有関数が解析的にわかるわけではない。つまり、固有関数が Jastrow 型からはずれたときは解析的に求められない。これは、スピニングが格子上にあることから、波動関数に強い制限がつくことによるものである。本研究では、まず、スピンモデルを Sutherland モデル [24] にマップするという方法を用いて、結果の再現を確認する。本研究で用いた方法は、Haldane が等方的スピンモデルで励起状態を求める際に用いた方法である [41]。

次に、異方性のあるスピン系にホールをドープした場合を考える。しかし、イジング異方性のあるスピン系に単純にホールをドープしただけでは、磁化のある基底状態のエネルギー固有値と固有関数を解析的に求めることができない。そこで、異なる4つの異方性を導入する。この工夫により、多成分Sutherlandモデル [40]（ここでは、 \downarrow スピンとホールの2成分）にマップでき、有限磁化のもとでの基底状態のエネルギー固有値と固有関数を解析的に求めることができる。多成分Sutherlandモデルにマップする際、異なる4つの異方性は1つのパラメーターで表されることになる。スピンモデルと同じように、波動関数に制限がつくため、解析的に求められるのは異方性パラメーターの離散的な値についてだけである。

異方性のあるスピン系とフェルミオン系で厳密解を求める方針をチャートにすると、図1-1のようになる。

以上のようにして、異方性のあるスピンモデルと t - J モデルに関して、異方性パラメーターのごく限られた範囲で基底エネルギーを解析的に求めることができる。しかし、現実的に意味がある異方性の大きさは、解析解を持つ場合とは限らない。すべての異方性パラメーターに対して基底エネルギーを知りたいなら、数値計算に頼るしかない。本研究ではこの計算に厳密対角化を用いた。その結果、磁化がゼロでない状態では、解析的には成り立たないはずのパラメーターでも基底エネルギーが対角化の結果と非常に近い値をとることが判明した。この傾向は、スピンモデルと t - J モデルで共通している。また、この計算によって、解析的に求めたエネルギーの表式が正しいことを確認することができた。

一方、Jastrow型波動関数は、解析解を持たない異方性パラメーターのところで、どのくらいよい近似になっているかに興味を持たれる。これを調べるために、厳密対角化から求めた固有ベクトルとJastrow型波動関数を用いた状態ベクトルとの重なり積分を計算する。まず、解析解が存在するパラメーターのところでは、重なり積分が最も1に近いことを確認した。それ以外のパラメーターに対しても、スピンモデルではサイト数最大12で、 t - J モデルではサイト数8で調べた範囲では、重なり積分が0.91以上の値を持つことがわかった。これは、解析解が求められない異方性パラメーターに対して、Jastrow型波動関数が非常によい試行関数になっていることを示している。

さて、スピンモデルや t - J モデルに異方性を導入すると、励起スペクトルはどのように変化するだろうか。本研究では、長距離型の場合について、最低励起を表す曲線だけを示す。その結果、スピンモデルでは、等方的Haldane-Shastryモデルの励起スペクトルから、長距離型イジングモデルの励起スペクトルへ移行する様子が観測された。 t - J モデルからは、励起スペクトルの山が分裂していくという現象がみられるものがある。

本論文の構成を以下に示す。第2章においては、まず、異方的Haldane-Shastryモデルでの磁化のある基底状態のエネルギー固有値と固有関数を、Sutherlandモデルにマップする方法を用いて、解析的に求める。さらに、長距離相互作用のある異方的 t - J モデルにこの方法を拡張して、エネルギー固有値と固有関数を計算する。異方的 t - J モデルのハミルトニアン解釈についても触れる。第3章においては、厳密対角化について、少し一般的な説明をおこなう。第4章においては、厳密解と厳密対角化の手段を用いて計算した、基底エネルギー、重なり積分、および励起スペクトルについての計算結果を示し、異方性を入れたことによる新たな知見について述べる。

2 モデルとその厳密解

2.1 異方的Haldane-Shastryモデル

異方性のあるHaldane-Shastry(H-S)モデルをSutherlandモデルにマップすることによって、磁化のある基底状態のエネルギー固有値と固有関数を求める。Haldaneが求めた結果 [26] を再現し、次の節でホールをドープした場合を考える際のステップとなることを目的とする。Sutherlandモデルへのマッピングは、Haldaneが等方的なH-Sモデルの励起状態を求めるときに用いた方法である [41]。

異方的H-Sモデルのハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \sum_{n < n'}^N J(n-n')(S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y + \Delta S_n^z S_{n'}^z), \quad (2.1)$$

$$J(n-n') = d(n-n')^{-2}, \quad (2.2)$$

$$d(n-n') = \frac{N}{\pi} \left| \sin \frac{\pi(n-n')}{N} \right|. \quad (2.3)$$

ここで、 N はサイト数 ($N = \text{even}$ とする)、 Δ はイジング異方性を表すパラメーターである。格子定数は1とし、系には周期的境界条件が課せられている。(2.1)式を次のように書く。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}' + \mathcal{H}_{\text{rest}}, \quad (2.4)$$

$$\mathcal{H}' = \sum_{n < n'}^N J(n-n') \left[S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y + \Delta \left(S_n^z - \frac{1}{2} \right) \left(S_{n'}^z - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (2.5)$$

$$\mathcal{H}_{\text{rest}} = \sum_{n < n'}^N J(n-n') \Delta \left[\frac{1}{2} (S_n^z + S_{n'}^z) - \frac{1}{4} \right], \quad (2.6)$$

一般に、状態ベクトルは

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{\{n_1, \dots, n_M\}} \psi(\{n_1, \dots, n_M\}) S_{n_1}^- \cdots S_{n_M}^- |F\rangle \\ &\equiv \sum_{\{n\}} \psi(\{n\}) |\{n\}\rangle \end{aligned} \quad (2.7)$$

と書ける。ここで、 M は \downarrow スピンの数、 $\{n\} = \{n_1, \dots, n_M\}$ は \downarrow スピンのサイトの番号、 $\psi(\{n\})$ は確率振幅 (波動関数)、 $|F\rangle$ はすべてのサイトが \uparrow スピンの状態 (強磁性状態) である。 $|F\rangle$ を基準とすれば、 \downarrow スピンを粒子として扱うことができる。

さて、固有値問題

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.8)$$

を考えるのだが、まず、 $\mathcal{H}_{\text{rest}}|\psi\rangle = E_{\text{rest}}|\psi\rangle$ を片付けておく。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{rest}} &= \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{N} \right)^2 \Delta \sum_{n \neq n'}^N \frac{1}{\sin^2[\pi(n-n')/N]} \left[(S_n^z + S_{n'}^z) - \frac{1}{2} \right] \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{N} \right)^2 \Delta \sum_{n=1}^N \sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^2(\pi r/N)} \left(2S_n^z - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (2.9)$$

であるから, これを $|\psi\rangle$ に作用させれば,

$$\begin{aligned} E_{\text{rest}} &= \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \Delta \sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^2(\pi r/N)} \left[2 \left(\frac{1}{2}(N-M) - \frac{1}{2}M \right) - \frac{1}{2}N \right] \\ &= \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \Delta (N^2 - 1)(N - 4M). \end{aligned} \quad (2.10)$$

ここで, 公式

$$\sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^2(\pi r/N)} = \frac{1}{3} (N^2 - 1) \quad (2.11)$$

を用いた.

次に,

$$\mathcal{H}'|\psi\rangle = E'|\psi\rangle \quad (2.12)$$

を考える. (2.5) 式をもう少し書き直すと,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \sum_{n \neq n'}^N \frac{1}{\sin^2[\pi(n-n')/N]} \left[\frac{1}{2} (S_n^+ S_{n'}^- + S_n^- S_{n'}^+) + \Delta \left(S_n^z - \frac{1}{2} \right) \left(S_{n'}^z - \frac{1}{2} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \sum_{n \neq n'}^N \frac{1}{\sin^2[\pi(n-n')/N]} \left[S_n^+ S_{n'}^- + \Delta \left(S_n^z - \frac{1}{2} \right) \left(S_{n'}^z - \frac{1}{2} \right) \right] \\ &\equiv \mathcal{H}'_{\text{off-diag}} + \mathcal{H}'_{\text{diag}}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

(2.12) 式に左から $\langle \{n}\rangle$ を掛けると, 左辺は,

$$\langle \{n}\rangle | \mathcal{H}' | \psi \rangle = \langle \{n}\rangle | \mathcal{H}'_{\text{off-diag}} | \psi \rangle + \langle \{n}\rangle | \mathcal{H}'_{\text{diag}} | \psi \rangle, \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} \langle \{n}\rangle | \mathcal{H}'_{\text{off-diag}} | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \langle \{n}\rangle | \sum_{n=1}^N \sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^2(\pi r/N)} S_n^+ S_{n+r}^- \cdot \sum_{\{n'\}} \psi(\{n'\}) | \{n'\} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^2(\pi r/N)} \psi(n_1, \dots, n_i + r, \dots, n_M), \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\langle \{n}\rangle | \mathcal{H}'_{\text{diag}} | \psi \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \Delta \cdot 2 \sum_{i < j}^M \frac{1}{\sin^2[\pi(n_i - n_j)/N]} \psi(\{n\}). \quad (2.16)$$

ただし, 波動関数 $\psi(\dots, n_i, \dots, n_j, \dots)$ には, $n_i = n_j (i \neq j)$ のときゼロのなるという hard-core constraint が課されていることに注意する. 結局, 固有値問題 (2.12) は, 次の固有値方程式に帰着される.

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \left[\sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^2(\pi r/N)} \psi(n_1, \dots, n_i + r, \dots, n_M) + 2\Delta \sum_{i < j}^M \frac{1}{\sin^2[\pi(n_i - n_j)/N]} \psi(\{n\}) \right] = E' \psi(\{n\}). \quad (2.17)$$

さて, 波動関数 $\psi(\{n\})$ は, 次のように平面波展開した形に書ける.

$$\psi(\{n\}) = \prod_{i=1}^M \exp(i\pi n_i) \sum_{\{k_1, \dots, k_M\}} \exp\left(i \frac{2\pi}{N} \sum_{i=1}^M k_i n_i\right) \psi_F(\{k_1, \dots, k_M\})$$

$$\begin{aligned}
 &= \prod_{i=1}^M z_i^{N/2} \sum_{\{k\}} z_1^{k_1} \cdots z_M^{k_M} \psi_F(\{k\}) \\
 &\equiv \prod_{i=1}^M z_i^{N/2} \cdot \tilde{\psi}.
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

ここで、 ψ_F の F は Fourier 展開の意味である。また、 $z_i \equiv \exp(i2\pi n_i/N)$ とした。個々の粒子 (↓ スピン) の波数 $k_i (i=1 \sim M)$ のとりうる範囲は、過完全ではあるが、 $-\infty < k_i < \infty$ としておく。分散を考えやすくするために、 $\prod_{i=1}^M z_i^{N/2}$ の因子によって、 $\tilde{\psi}$ の波数の範囲を $\psi(\{n\})$ のそれから $N/2$ だけずらしている。なお、この段階では、 $\tilde{\psi}$ の全運動量 ($\sum_i k_i$) に特に制限はない。

(2.18) を用いると、(2.17) の [] の第 1 項は、

$$\begin{aligned}
 &\sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^2(\pi r/N)} \psi(z_1, \dots, z_i \exp\left(i\frac{2\pi}{N}r\right), \dots, z_M) \\
 &= \prod_{j=1}^M z_j^{N/2} \sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^2(\pi r/N)} \tilde{\psi}(z_1, \dots, z_i \exp\left(i\frac{2\pi}{N}r\right), \dots, z_M) \cdot \exp(i\pi r) \\
 &= \prod_{j=1}^M z_j^{N/2} \sum_{i=1}^M \sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{\sin^2(\pi r/N)} \left\{ \sum_{\{k_1, \dots, k_i, \dots, k_M\}} z_1^{k_1} \cdots z_i^{k_i} \cdots z_M^{k_M} \psi_F(\{k\}) \cdot \exp\left[i\frac{2\pi}{N}r\left(k_i + \frac{N}{2}\right)\right] \right\} \\
 &= \prod_{j=1}^M z_j^{N/2} \sum_{i=1}^M \sum_{\{k_1, \dots, k_i, \dots, k_M\}} \left(\sum_{r=1}^{N-1} \frac{\exp\left[(i2\pi r/N) \cdot (k_i + N/2)\right]}{\sin^2(\pi r/N)} \right) z_1^{k_1} \cdots z_i^{k_i} \cdots z_M^{k_M} \psi_F(\{k\}) \\
 &= \prod_{j=1}^M z_j^{N/2} \sum_{i=1}^M \sum_{\{k_1, \dots, k_i, \dots, k_M\}} \left(2k_i^2 - \frac{N^2 + 2}{6} \right) z_1^{k_1} \cdots z_i^{k_i} \cdots z_M^{k_M} \psi_F(\{k\}) \\
 &= \prod_{j=1}^M z_j^{N/2} \sum_{i=1}^M \left(2 \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} \right)^2 - \frac{N^2 + 2}{6} \right) \tilde{\psi}.
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

第 4 式から第 5 式への変形は、 $0 \leq k \leq N$ のとき、

$$\sum_{r=1}^{N-1} \frac{\exp(i2\pi kr/N)}{\sin^2(\pi r/N)} = 2 \left(k - \frac{N}{2} \right)^2 - \frac{N^2 + 2}{6} \tag{2.20}$$

が成り立つことを用いた (Appendix 7.3 を参照)。したがって、ここでは、 $-N/2 \leq k_i \leq N/2$ の範囲でだけ成り立つ (この範囲が、後に解析的に解けるイジング異方性 Δ の範囲を決定することになる)。このことは、逆格子ベクトル分だけ粒子の散乱運動量が大きいウムクラップ散乱を一般に考慮していないことを意味する。さらに、

$$\frac{1}{\sin^2[\pi(n_i - n_j)/N]} = -\frac{4z_i z_j}{(z_i - z_j)^2} \tag{2.21}$$

を用いると、(2.17) から

$$\left[\sum_{i=1}^M \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} \right)^2 - 4\Delta \sum_{i < j}^M \frac{z_i z_j}{(z_i - z_j)^2} \right] \tilde{\psi} = \left[\left(\frac{N}{\pi} \right)^2 E' + \frac{N^2 + 2}{12} M \right] \tilde{\psi}. \tag{2.22}$$

$\Delta = \frac{1}{2}m(m-1)$ のとき、(2.22) の左辺の [] は、Sutherland モデル [24] のハミルトニアンになっている (Appendix 7.1 を参照)。なお、 $m=2$ のとき、 $\Delta=1$ で、(2.1) は等方的 H-S モデルになる。

特に, $\tilde{\psi} = \psi_0$ (全運動量0) のとき, Sutherland モデルの基底状態のエネルギー固有値と固有関数が利用できる.

$$E_0 = \frac{1}{12} m^2 M(M^2 - 1), \quad (2.23)$$

$$\psi_0 = \prod_{i < j}^M \left(\sin \frac{\pi(n_i - n_j)}{N} \right)^m. \quad (2.24)$$

(連続体モデルのとき, m は正の任意の数)

ところが, 異方的H-Sモデルは格子モデルであり, $|F\rangle$ (すべてのサイトが \uparrow スピンの状態) を真空状態とみると, 粒子 (\downarrow スピン) はハードコアボゾンとして扱える. したがって, 異方的H-Sモデルの固有関数としては, 次の2つのことが要請される.

(a) 複素座標 $z_i (\equiv \exp(i2\pi n_i/N))$ で展開したとき, 平面波 z_i^k (格子の条件から $-N/2 \leq k < N/2$, かつ周期的境界条件から k は整数) で尽くされること.

(b) 固有関数の統計性がボゾンの統計であること.

さらに, 異方的H-SモデルがSutherlandモデルにマップできるための条件として

(c) $\tilde{\psi}$ の複素座標 z_i のベキが $[-N/2, N/2]$ の範囲にあること.

まず, (b) の要請から, 固有関数は次の形になる.

$$\psi_0 = \prod_{i < j}^M \left| \sin \frac{\pi(n_i - n_j)}{N} \right|^m. \quad (2.25)$$

(b) の要請を満たすだけなら, m は正の任意の数でよい. m の値によって, 3つの場合に分けて考える.

(i) m が正の偶数のとき,

$$\sin \frac{\pi(n_i - n_j)}{N} = -\frac{1}{2} i z_i^{-1/2} z_j^{-1/2} (z_i - z_j) \quad (2.26)$$

であるから, (2.25) は

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \prod_{i < j}^M \left(\sin \frac{\pi(n_i - n_j)}{N} \right)^m \\ &= \left(-\frac{1}{2} i \right)^m \prod_{i=1}^M z_i^{-(M-1)m/2} \prod_{i < j}^M (z_i - z_j)^m. \end{aligned} \quad (2.27)$$

したがって, (a) の要請は満たされている. さらに, ψ_0 に関して

$$\begin{aligned} z_i \text{の最高ベキ} & \quad \frac{1}{2} m(M-1), \\ z_i \text{の最低ベキ} & \quad -\frac{1}{2} m(M-1) \\ \text{(つまり, } & \quad |k_i| \leq \frac{1}{2} m(M-1)) \end{aligned}$$

であるから, (c) を満たすためには

$$m(M-1) \leq N. \quad (2.28)$$

(ii) m が正の奇数のとき,

$$\left| \sin \frac{\pi(n_i - n_j)}{N} \right| = -\frac{1}{2} i z_i^{-1/2} z_j^{-1/2} (z_i - z_j) \operatorname{sgn}(n_i - n_j) \quad (2.29)$$

であるから, (2.25) は

$$\psi_0 = \left(-\frac{1}{2}i\right)^m \prod_{i=1}^M z_i^{-(M-1)m/2} \prod_{i<j}^M (z_i - z_j)^m \prod_{i<j}^M \operatorname{sgn}(n_i - n_j). \quad (2.30)$$

$\prod_{i<j}^M \operatorname{sgn}(n_i - n_j)$ が残るということは, ψ_0 が平面波 z_i^k ($-N/2 \leq k < N/2$) だけで表し切れていないということである。(例えば, $z_i \leftrightarrow z_j$ としたとき, 同時に符号も変えなければ ψ_0 のボゾンの統計は満たされない。) つまり, (2.30) は (a) の要請を満たさない。

(iii) m が正の非整数のとき, (2.25) は明らかに (a) を満たさない。(その一例として, z_i の最高べき $m(M-1)/2$ が非整数となる。)

以上のことから, Sutherlandモデルの基底状態の固有関数のうち, 異方的H-Sモデルの磁化のある基底状態の固有関数として採用できるのは, 次のものに限られる。

$$\psi_0 = \prod_{i<j}^M \left(\sin \frac{\pi(n_i - n_j)}{N} \right)^m. \quad (2.31)$$

(m は正の偶数で, かつ $m(M-1) \leq N$)

結論をまとめると, $\psi(\{n\})$ の全運動量が $(2\pi/N) \times (NM/2) = \pi M$ ((2.18) で波数を $N/2$ だけずらした分) のとき,

$$\begin{aligned} E &= E' + E_{\text{rest}} \\ &= \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \left(E_0 - \frac{N^2 + 2}{12} M \right) + E_{\text{rest}} \\ &= \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \left\{ \frac{1}{12} m^2 M(M^2 - 1) - \frac{1}{4} MN^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{6}(N^2 - 1) \left[\frac{1}{4} N\Delta + M(1 - \Delta) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\psi(\{n\}) = \prod_{i=1}^M \exp(i\pi n_i) \prod_{i<j}^M \left(\sin \frac{\pi(n_i - n_j)}{N} \right)^m. \quad (2.33)$$

ただし, (2.32), (2.33) は $N = \text{even}$, $m = \text{even}$, さらに (2.28) を満たす場合に限られる。 m に課された条件から, 解析的に解けるイジング異方性 Δ の値が決まる。

もう少し一般化して, すべての粒子が一樣な運動量 J (particle current) を持つ場合,

$$\tilde{\psi} = \prod_{i=1}^M z_i^{J-N/2} \cdot \psi_0 \quad (2.34)$$

(ψ_0 の全運動量は 0)

を考える。このとき,

$$\sum_{i=1}^M \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} \right)^2 \tilde{\psi} = \left(J - \frac{N}{2} \right)^2 M \tilde{\psi} + \prod_{i=1}^M z_i^{J-N/2} \sum_{i=1}^M \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} \right)^2 \psi_0 \quad (2.35)$$

となるから, (2.22) から

$$E' = \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \left[\frac{1}{12} m^2 M(M^2 - 1) - \frac{N^2 + 2}{12} M + \left(J - \frac{N}{2}\right)^2 M \right]. \quad (2.36)$$

また, 前と同様に, (a) と (b) の要請から, m は正の偶数に限られる. さらに, ψ_0 の複素座標 z_i のベキ k_i は $|k_i| \leq \frac{1}{2}m(M-1)$ の範囲にあるから, (c) の要請を満たすためには, ($\tilde{\psi}$ の複素座標 z_i のベキは $k_i + J - N/2$)

$$\left| J - \frac{N}{2} \right| \leq \frac{N}{2} - \frac{1}{2}m(M-1). \quad (2.37)$$

以上から, $\psi(\{n\})$ の全運動量が $(2\pi/N) \times JM$ のとき

$$E = \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \left\{ \frac{1}{12} m^2 M(M^2 - 1) - MJ(N - J) + \frac{1}{6}(N^2 - 1) \left[\frac{1}{4} N \Delta + M(1 - \Delta) \right] \right\}, \quad (2.38)$$

$$\psi(\{n\}) = \prod_{i=1}^M \exp\left(i \frac{2\pi}{N} n_i J\right) \prod_{i < j}^M \left(\sin \frac{\pi(n_i - n_j)}{N} \right)^m. \quad (2.39)$$

ただし, (2.38), (2.39) は $N = \text{even}$, $m = \text{even}$ さらに (2.37) を満たす場合に限られる. この結果は, Haldane の結果 [26] と完全に一致している.

(2.38) を J について最小化すると,

$$\begin{aligned} \left(\frac{N}{\pi}\right)^2 \frac{\partial E}{\partial J} &= -M(N - J) + MJ = 0 \\ &\rightarrow J = \frac{N}{2}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

$m = 2, J = N/2$ のとき, (等方的) H-S モデルの真の基底状態は, $E(m = 2, J = N/2)$ を $M(\leq N/2)$ について最小化すれば得られる.

$$E(m = 2, J = N/2) = \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \left[\frac{1}{3} M(M^2 - 1) - \frac{1}{4} M N^2 + \frac{1}{24} N(N^2 - 1) \right] \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{N}{\pi}\right)^2 \frac{\partial E(m = 2, J = N/2)}{\partial M} &= M^2 - \frac{1}{3} - \frac{1}{4} N^2 = 0 \\ &\rightarrow M = \sqrt{\frac{1}{4} N^2 + \frac{1}{3}}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

(2.42) に最も近い整数 M は $N/2$ である. このとき,

$$\begin{aligned} E(m = 2, M = N/2, J = N/2) &= \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \left[-\frac{1}{24} N(N^2 + 5) \right] \\ &= -\frac{\pi^2}{24} N \left(1 + \frac{5}{N^2} \right). \end{aligned} \quad (2.43)$$

一方(2.28) から, $N \geq 6$ かつ $m \geq 4$ では, $M = N/2 (S_{\text{tot}}^z = 0)$ のとき, 最低状態は Jastrow 型の波動関数にならない. つまり, 等方的でないモデルで $N \geq 6$ のときは, 真の基底状態を解析的に求めることはできない.

2.2 長距離相互作用のある異方的 t - J モデル

2.2.1 エネルギー固有値と固有関数

長距離相互作用と異方性を持つ t - J モデル (以下, 異方的 t - J モデルと略す) について, 磁化のある基底状態のエネルギー固有値と固有関数を求める. 本モデルのハミルトニアンを変形して, 多成分 Sutherland モデル (ここでは, 内部自由度のないフェルミオンとボゾンの 2 成分) にマップするという方法を用いる.

考えるハミルトニアンを

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \mathcal{P} \sum_{i \neq j} \left\{ -t_{ij} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + \Delta_1 c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) \right. \\ & + J_{ij} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta_2 S_i^z S_j^z \\ & \left. + (\Delta_3 - 1) (S_i^z n_j + n_i S_j^z) - \frac{1}{4} \Delta_4 n_i n_j \right\} \mathcal{P}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$t_{ij} = J_{ij} = t D(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^{-2}, \quad (2.45)$$

$$D(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \frac{N}{\pi} \left| \sin \frac{\pi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{N} \right| \quad (2.46)$$

とする. 格子定数 1, サイト数 N (= even とする) の系に周期的境界条件が課せられており, 跳び移り積分と交換相互作用について長距離型を仮定した. 解析的に解けるようなモデルを構築し, 典型的な描像の振舞いをみるために, 異なる 4 つの異方性を導入した. $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = \Delta_4 = 1$ のとき, 超対称 t - J モデル [28] になる. \mathcal{P} は, 1 サイトに電子が 2 個占めるのを排除する射影演算子である. (2.44) 式を次のように書く.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}' + \mathcal{H}_{\text{rest}}, \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' = & \mathcal{P} \sum_{i \neq j} \left[-t_{ij} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + \Delta_1 c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) + \frac{1}{2} J_{ij} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right. \\ & + J_{ij} (\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2) \left(S_i^z - \frac{1}{2} \right) \left(S_j^z - \frac{1}{2} \right) \\ & - 2J_{ij} (\Delta_3 - 1) n_i n_j \left(S_i^z - \frac{1}{2} \right) \left(S_j^z - \frac{1}{2} \right) \\ & \left. - \frac{1}{4} J_{ij} (\Delta_4 - 2\Delta_3 + 2) (n_i - 1) (n_j - 1) \right] \mathcal{P}, \end{aligned} \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{rest}} = & \mathcal{P} \sum_{i \neq j} \left[J_{ij} (\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2) \frac{1}{2} (S_i^z + S_j^z) - \frac{1}{4} J_{ij} (\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2) \right. \\ & \left. - \frac{1}{4} J_{ij} (\Delta_4 - 2\Delta_3 + 2) (n_i + n_j) + \frac{1}{4} J_{ij} (\Delta_4 - 2\Delta_3 + 2) \right] \mathcal{P}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

ヒルベルト空間での状態を, すべてのサイトが \uparrow スピンの状態 $|F\rangle$ から \downarrow スピンとホールを励起することで表現する. \downarrow スピンの数を M , ホールの数を Q とすると, 系のトータルスピンの z 成分は, $S_{\text{tot}}^z = (N - Q)/2 - M$ となる. 状態ベクトルは

$$|\psi\rangle = \sum_{\{x\}, \{y\}} \psi(\{x\}; \{y\}) \prod_{i=1}^M S_{x_i}^- \prod_{j=1}^Q h_{y_j}^\dagger |F\rangle$$

$$\equiv \sum_{\{x\}, \{y\}} \psi(\{x\}; \{y\}) |\{x\}; \{y\}\rangle \quad (2.50)$$

と書ける. ここで, 波動関数 ψ は, \downarrow スピンの座標 $\{x\} = \{x_1, \dots, x_M\}$ の交換に対して対称, ホールの座標 $\{y\} = \{y_1, \dots, y_Q\}$ の交換に対して反対称である. $\{x\}$ と $\{y\}$ が決まれば, \uparrow スピンの座標は自動的に決まり, $\{u\} = \{u_1, \dots, u_{N-M-Q}\}$ と書く. また, $S_{x_i}^-$ はサイト x_i でスピンを下げる演算子, h_{y_j} はサイト y_j にホールを作る演算子である.

異方的H-Sモデルのときと同じように, 固有値問題

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.51)$$

を考える. まず, $\mathcal{H}_{\text{rest}}|\psi\rangle = E_{\text{rest}}|\psi\rangle$ より,

$$E_{\text{rest}} = \frac{\pi^2 t}{N^2} \frac{1}{3} (N^2 - 1) \left[\frac{1}{4} (\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2)(N - 4M - 2Q) - \frac{1}{4} (\Delta_4 - 2\Delta_3 + 2)(N - 2Q) \right]. \quad (2.52)$$

次に,

$$\mathcal{H}'|\psi\rangle = E'|\psi\rangle \quad (2.53)$$

を考える. $|F\rangle$ を真空状態とするヒルベルト空間で(2.48)を書き直すと,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= - \sum_{i \in \{y\}} \sum_{j \in \{u\}} t_{ij} h_i h_j^\dagger - \Delta_1 \sum_{i \in \{y\}} \sum_{j \in \{x\}} t_{ij} S_i^- h_i h_j^\dagger S_j^+ \\ &+ \sum_{i \in \{x\}} \sum_{j \in \{u\}} J_{ij} S_i^+ S_j^- + (\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2) \sum_{i \notin \{u\}} \sum_{j \notin \{u\}, j \neq i} J_{ij} \left(S_i^z - \frac{1}{2} \right) \left(S_j^z - \frac{1}{2} \right) \\ &- 2(\Delta_3 - 1) \sum_{i \in \{x\}} \sum_{j \in \{x\}, j \neq i} J_{ij} n_i n_j \left(S_i^z - \frac{1}{2} \right) \left(S_j^z - \frac{1}{2} \right) \\ &- \frac{1}{4} (\Delta_4 - 2\Delta_3 + 2) \sum_{i \in \{y\}} \sum_{j \in \{y\}, j \neq i} J_{ij} (n_i - 1)(n_j - 1) \\ &\equiv \mathcal{H}'_1 + \mathcal{H}'_2 + \mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4 + \mathcal{H}'_5 + \mathcal{H}'_6, \end{aligned} \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned} &\langle \{x\}; \{y\} | (\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_3) | \psi \rangle \\ &= \sum_{q=1}^Q \sum_{r=1}^{N-1} t_r \psi(\{x\}; y_1, \dots, y_q + r, \dots, y_Q) \\ &+ \sum_{m=1}^M \sum_{r=1}^{N-1} J_r \psi(x_1, \dots, x_m + r, \dots, x_M; \{y\}), \end{aligned} \quad (2.55)$$

$$\begin{aligned} &\langle \{x\}; \{y\} | (\mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_4 + \mathcal{H}_5 + \mathcal{H}_6) | \psi \rangle \\ &= \Delta_1 \sum_{i \in \{x\}} \sum_{j \in \{y\}} t_{ij} P_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) \\ &+ (\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2) \left(2 \sum_{(i < j) \in \{x\}} J_{ij} + 2 \sum_{(i < j) \in \{y\}} \frac{1}{4} J_{ij} + \sum_{i \in \{x\}} \sum_{j \in \{y\}} J_{ij} \right) \psi(\{x\}; \{y\}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -2(\Delta_3 - 1) \cdot 2 \sum_{(i < j) \in \{x\}} J_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) \\
 & -\frac{1}{4}(\Delta_4 - 2\Delta_3 + 2) \cdot 2 \sum_{(i < j) \in \{y\}} J_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) \\
 = & \Delta_1 \sum_{(i < j) \in \{\{x\} \oplus \{y\}\}} J_{ij} P_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) \\
 & -\Delta_1 \sum_{(i < j) \in \{x\}} J_{ij} P_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) - \Delta_1 \sum_{(i < j) \in \{y\}} J_{ij} P_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) \\
 & +2(\Delta_2 - 2\Delta_3 - 2) \sum_{(i < j) \in \{x\}} J_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) \\
 & +\frac{1}{2}(\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2) \sum_{(i < j) \in \{y\}} J_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) \\
 & +(\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2) \sum_{i \in \{x\}} \sum_{j \in \{y\}} J_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) - 4(\Delta_3 - 1) \sum_{(i < j) \in \{x\}} J_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) \\
 & -\frac{1}{2}(\Delta_4 - 2\Delta_3 + 2) \sum_{(i < j) \in \{y\}} J_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) \\
 = & \left[\Delta_1 \sum_{(i < j) \in \{\{x\} \oplus \{y\}\}} J_{ij} P_{ij} \right. \\
 & + (2\Delta_2 - \Delta_1) \sum_{(i < j) \in \{x\}} J_{ij} + \frac{1}{2}(2\Delta_1 + \Delta_2 + 4\Delta_3 - \Delta_4 - 4) \sum_{(i < j) \in \{y\}} J_{ij} \\
 & \left. + (\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2) \sum_{i \in \{x\}} \sum_{j \in \{y\}} J_{ij} \right] \psi(\{x\}; \{y\}). \tag{2.56}
 \end{aligned}$$

波動関数 $\psi(\{x\}; \{y\})$ は, $x_i = x_j (i \neq j)$ または $y_i = y_j (i \neq j)$ または $x_i = y_j$ のときゼロになる (hard-core constraint) .

(2.56) が $\sum_{(i < j) \in \{\{x\} \oplus \{y\}\}} \lambda(\lambda + P_{ij}) J_{ij} \psi(\{x\}; \{y\})$ になるためには,

$$\begin{cases} \Delta_1 = \lambda, \\ \text{かつ} \\ 2\Delta_2 - \Delta_1 = \frac{1}{2}(2\Delta_1 + \Delta_2 + 4\Delta_3 - \Delta_4 - 4) = \Delta_2 + 2\Delta_3 - 2 = \lambda^2. \end{cases}$$

よって

$$\Delta_1 = \lambda, \quad \Delta_2 = \frac{1}{2}\lambda(\lambda + 1), \quad \Delta_3 - 1 = \frac{1}{4}\lambda(\lambda - 1), \quad \Delta_4 = \frac{1}{2}\lambda(3 - \lambda). \tag{2.57}$$

したがって, ハミルトニアンが

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & \mathcal{P} \sum_{i \neq j} \left\{ -t_{ij} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + \lambda c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) \right. \\
 & + J_{ij} \left[S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \frac{1}{2}\lambda(\lambda + 1) S_i^z S_j^z \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{4}\lambda(\lambda - 1) (S_i^z n_j + n_i S_j^z) - \frac{1}{8}\lambda(3 - \lambda) n_i n_j \right] \right\} \mathcal{P} \tag{2.58}
 \end{aligned}$$

のとき, $\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ は次の固有値方程式に帰着される.

$$\sum_{q=1}^Q \sum_{r=1}^{N-1} t_r \psi(\{x\}; y_1, \dots, y_q + r, \dots, y_Q) + \sum_{m=1}^M \sum_{r=1}^{N-1} J_r \psi(x_1, \dots, x_m + r, \dots, x_M; \{y\})$$

$$+ \sum_{(i < j) \in \{x\} \oplus \{y\}} \lambda(\lambda + P_{ij}) J_{ij} \psi(\{x\}; \{y\}) = (E - E_{\text{rest}}) \psi(\{x\}; \{y\}). \quad (2.59)$$

ただし,

$$E_{\text{rest}} = \frac{\pi^2 t}{N^2} \frac{1}{6} (N^2 - 1) [\lambda(\lambda - 1)(N - 2Q) - 2\lambda^2 M]. \quad (2.60)$$

(2.59) で, $\{v\} = \{x\} \oplus \{y\}$ とすると, $\psi(v_1, \dots, v_{M+Q})$ に対して,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{M+Q} \sum_{r=1}^{N-1} J_r \psi(v_1, \dots, v_i + r, \dots, v_{M+Q}) + \sum_{i < j} \lambda(\lambda + P_{ij}) J_{ij} \psi(\{v\}) \\ = (E - E_{\text{rest}}) \psi(\{v\}). \end{aligned} \quad (2.61)$$

波動関数 $\psi(\{v\})$ は, 次のように平面波展開した形に書ける.

$$\begin{aligned} \psi(\{v\}) &= \prod_{i=1}^{M+Q} \exp(i\pi v_i) \sum_{\{k_1, \dots, k_M\}} \exp\left(i \frac{2\pi}{N} \sum_{i=1}^{M+Q} k_i v_i\right) \psi_F(\{k_1, \dots, k_M\}) \\ &= \prod_{i=1}^{M+Q} z_i^{N/2} \sum_{\{k\}} z_1^{k_1} \cdots z_{M+Q}^{k_{M+Q}} \psi_F(\{k\}) \\ &= \prod_{i=1}^{M+Q} z_i^{N/2} \cdot \tilde{\psi}. \end{aligned} \quad (2.62)$$

ここで, ψ_F の F は Fourier 展開の意味で, また, $z_i \equiv \exp(i2\pi v_i/N)$ とした. 2種類の粒子 (\downarrow スピンとホール) の波数 $k_i (i = 1 \sim M+Q)$ のとりうる範囲は $-\infty < k_i < \infty$ としておく. (2.62) を用いると, 異方的 H-S モデルのときと同様にして ((2.19) で M を $M+Q$ に置き換えたのと同じ), (2.61) は

$$\begin{aligned} 2 \left[\sum_{i=1}^{M+Q} \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} \right)^2 - 2 \sum_{i < j} \frac{z_i z_j \lambda(\lambda + P_{ij})}{(z_i - z_j)^2} \right] \tilde{\psi} \\ = \left[\frac{N^2}{\pi^2 t} E - \frac{N^2}{\pi^2 t} E_{\text{rest}} + \frac{N^2 + 2}{6} (M + Q) \right] \tilde{\psi}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

ここで, (2.63) のようにできるのは, $-N/2 \leq k_i \leq N/2$ にときに限られる. したがって, ウムクラップ散乱を一般に考慮していないことになる. (2.63) の左辺の [] は, フェルミオン・ボゾン混合型の多成分 Sutherland モデル [40] のハミルトニアンになっている (Appendix 7.2 を参照). そのエネルギー固有値 \tilde{E} は, 一般に励起状態も含めて次のように書ける.

$$\tilde{E} = E_0 + \epsilon, \quad (2.64)$$

$$E_0 = \frac{1}{12} \lambda^2 (M + Q) [(M + Q)^2 - 1], \quad (2.65)$$

$$\epsilon = \sum_{k=-\infty}^{\infty} k^2 \nu(k) + \frac{\lambda}{2} \sum_{k, k'} |k - k'| \nu(k) \nu(k'). \quad (2.66)$$

また, 励起状態として \downarrow スピンとホールの一様な運動量 J_s, J_h だけを考慮した場合 (運動量の様々な分布による励起を除く), 固有関数 $\tilde{\psi}$ は,

$$\tilde{\psi} = \prod_{i=1}^M \exp\left[i \frac{2\pi}{N} x_i \left(J_s - \frac{N}{2}\right)\right] \prod_{j=1}^Q \exp\left[i \frac{2\pi}{N} y_j \left(J_h - \frac{N}{2}\right)\right] \cdot \psi_{0,-1} \phi_g$$

$$\equiv \psi_{0,-1}\phi, \quad (2.67)$$

$$\begin{aligned} \psi_{0,-1} &= \prod_{i<j}^M \left| \sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{N} \right|^\lambda \operatorname{sgn}(x_i - x_j) \prod_{i<j}^Q \left| \sin \frac{\pi(y_i - y_j)}{N} \right|^\lambda \operatorname{sgn}(y_i - y_j) \\ &\quad \times \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^Q \left| \sin \frac{\pi(x_i - y_j)}{N} \right|^\lambda \operatorname{sgn}(x_i - y_j), \end{aligned} \quad (2.68)$$

$$\phi_g = \prod_{i<j}^M \sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{N}. \quad (2.69)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_g &\equiv \psi_{0,-1}\phi_g \\ &= \prod_{i<j}^M \left| \sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{N} \right|^{\lambda+1} \prod_{i<j}^Q \left| \sin \frac{\pi(y_i - y_j)}{N} \right|^\lambda \operatorname{sgn}(y_i - y_j) \\ &\quad \times \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^Q \left| \sin \frac{\pi(x_i - y_j)}{N} \right|^\lambda \operatorname{sgn}(x_i - y_j). \end{aligned} \quad (2.70)$$

(連続体モデルのとき, λ は正の任意の数)

ところが, 異方的 t - J モデルは格子モデルであり, $|F\rangle$ を真空状態とみると, \downarrow スピンはハードコアボゾン, ホールはフェルミオンとして扱える. 異方的 t - J モデルの固有関数としては, 8 ページの (a) および次の (b') が要請される.

(b') 固有関数の統計性が, \downarrow スピンに関してはボゾン, ホールに関してはフェルミオンの統計であること.

さらに, 異方的 t - J モデルが多成分 Sutherland モデルにマップできるための条件として, 8 ページの (c) と同じことが要請される.

(b') の要請は, (2.70) の時点ですでに満たされている. また, (a) を満たすためには, 異方的 H-S モデルと同様な議論から $\lambda = \text{odd}$ であることが必要になる. (sgn 関数を残さないのは, $\lambda = \text{odd}$ のときだけである.) このとき,

$$\tilde{\psi}_g^L = \prod_{i<j}^M \left(\sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{N} \right)^{\lambda+1} \prod_{i<j}^Q \left(\sin \frac{\pi(y_i - y_j)}{N} \right)^\lambda \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^Q \left(\sin \frac{\pi(x_i - y_j)}{N} \right)^\lambda. \quad (2.71)$$

これを複素座標 $\xi_i \equiv \exp(i2\pi x_i/N)$, $\omega_j \equiv \exp(i2\pi y_j/N)$ を用いて書くと,

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_g^L &\propto \prod_{i<j}^M (2 - \xi_i \xi_j^{-1} - \xi_i^{-1} \xi_j)^{(\lambda+1)/2} \prod_{i=1}^Q \omega_i^{-(Q-1)\lambda/2} \prod_{i<j}^Q (\omega_i - \omega_j)^\lambda \\ &\quad \times \prod_{i=1}^M \xi_i^{-Q\lambda/2} \prod_{j=1}^Q \omega_j^{-M\lambda/2} \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^Q (\xi_i - \omega_j)^\lambda. \end{aligned} \quad (2.72)$$

さて, $\psi_{0,-1}$ では \downarrow スピン, ホールともにフェルミオンとして扱われ, ϕ では \downarrow スピンはフェルミオン, ホールはボゾンとして扱われる. ϕ に対応するエネルギーが ϵ であるが, ここでは \downarrow スピン (フェルミオン) とホール (ボゾン) の基底状態の運動量分布は図 2-1 のようになる. こ

のとき, (2.66) の式にしたがって, $\epsilon \equiv \epsilon(J_s, J_h)$ を計算すると,

$$\begin{aligned}
 \epsilon(J_s, J_h) &= \sum_{l=-\frac{M}{2}+\frac{1}{2}}^{\frac{M}{2}-\frac{1}{2}} \left(l + J_s - \frac{N}{2} \right)^2 + \left(J_h - \frac{N}{2} \right)^2 Q \\
 &\quad + \lambda \left[\sum_{m=1}^{M-1} \sum_{l=1}^{M-m} l + Q \left(\sum_{l=0}^{\frac{M}{2}-\frac{1}{2}+J_s-J_h} l + \sum_{l=0}^{\frac{M}{2}-\frac{1}{2}+J_h-J_s} l \right) \right] \\
 &= \frac{1}{12} M(M^2 - 1) + \left(J_s - \frac{N}{2} \right)^2 M + \left(J_h - \frac{N}{2} \right)^2 Q \\
 &\quad + \frac{1}{12} \lambda(2M + 3Q)(M^2 - 1) + \lambda Q(J_s - J_h)^2. \tag{2.73}
 \end{aligned}$$

次に, 解析的に解けるために J_s, J_h に課される制限を考える. \downarrow スピンの方の運動量を $k_i^{(s)}$, ホールの方のそれを $k_i^{(h)}$ とすれば, $\tilde{\psi}_g^L$ に関して,

$$\begin{aligned}
 \xi_i \text{の最高ベキ} &\quad \frac{1}{2}(\lambda + 1)(M - 1) - \frac{1}{2}\lambda Q + \lambda Q, \\
 \xi_i \text{の最低ベキ} &\quad -\frac{1}{2}(\lambda + 1)(M - 1) - \frac{1}{2}\lambda Q \\
 &\quad \rightarrow |k_i^{(s)}| \leq \frac{1}{2}\lambda(M + Q - 1) + \frac{1}{2}(M - 1), \\
 \omega_i \text{の最高ベキ} &\quad -\frac{1}{2}\lambda(Q - 1) + \lambda(Q - 1) - \frac{1}{2}\lambda M + \lambda M, \\
 \omega_i \text{の最低ベキ} &\quad -\frac{1}{2}\lambda(Q - 1) - \frac{1}{2}\lambda M \\
 &\quad \rightarrow |k_i^{(h)}| \leq \frac{1}{2}\lambda(M + Q - 1)
 \end{aligned}$$

であるから, $\tilde{\psi}$ の複素座標のベキに関して, $-N/2 \leq k_i^{(s)} + J_s - N/2 \leq N/2$, $-N/2 \leq k_i^{(h)} + J_h - N/2 \leq N/2$ が成り立つためには ((c) の要請),

$$\left| J_s - \frac{N}{2} \right| \leq \frac{N}{2} - \frac{1}{2}\lambda(M + Q - 1) - \frac{1}{2}(M - 1), \tag{2.74}$$

$$\left| J_h - \frac{N}{2} \right| \leq \frac{N}{2} - \frac{1}{2}\lambda(M + Q - 1), \tag{2.75}$$

$$|J_s - J_h| \leq \frac{1}{2}(M + 1). \tag{2.76}$$

(2.74), (2.75) から考えると, 本来 $|J_s - J_h| \leq (M - 1)/2$ であるが, $|J_s - J_h| = (M + 1)/2$ のときも (2.73) が成り立つので, (2.76) のようにした.

以上のことから, 系の全運動量が $P_{\text{tot}} = (2\pi/N)(J_s M + J_h Q)$ のとき,

$$\begin{aligned}
 \frac{N^2}{\pi^2 t} E &= 2[E_0 + \epsilon(J_s, J_h)] - \frac{N^2 + 2}{6}(M + Q) + \frac{N^2}{\pi^2 t} E_{\text{rest}} \\
 &= \frac{1}{6}(\lambda + 1)^2 M(M^2 - 1) - 2MJ_s(N - J_s) \\
 &\quad + \frac{1}{3}(N^2 - 1) \left[\frac{\lambda(\lambda - 1)}{2} N + (1 - \lambda^2) M \right] \\
 &\quad + \frac{1}{6}(\lambda + 1)^2 Q(Q^2 - 1) - 2QJ_h(N - J_h)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +2\lambda Q(J_s - J_h)^2 - \frac{1}{3}(\lambda^2 - \lambda - 1)(N^2 - 1)Q \\
 & + \frac{1}{2}Q \left\{ \lambda(M + Q)[(\lambda + 1)M - \lambda Q] \right. \\
 & \left. + (\lambda - 1) \left[\lambda M Q + \left(\lambda + \frac{1}{3} \right) Q^2 - \frac{1}{3} \right] \right\}, \tag{2.77}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \psi(\{x\}; \{y\}) &= \prod_{i=1}^M \exp\left(i \frac{2\pi}{N} x_i J_s\right) \prod_{j=1}^Q \exp\left(i \frac{2\pi}{N} y_j J_h\right) \\
 & \times \prod_{i < j}^M \left(\sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{N} \right)^{\lambda+1} \prod_{i < j}^Q \left(\sin \frac{\pi(y_i - y_j)}{N} \right)^{\lambda} \\
 & \times \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^Q \left(\sin \frac{\pi(x_i - y_j)}{N} \right)^{\lambda}. \tag{2.78}
 \end{aligned}$$

ただし, (2.77), (2.78) は, $N = \text{even}, \lambda = \text{odd}$ さらに (2.74), (2.75), (2.76) を満たす場合に限られる. この結果は, $\lambda = 1$ のとき Wang らの結果 [42], $\lambda = 1, J_s = J_h = N/2, S_{\text{tot}}^z = 0 (Q = N - 2M)$ のとき倉本と横山の結果 [28], $\lambda = 1, Q = 0$ のとき等方的な H-S モデルの結果 [26, 27] にそれぞれ reduce される. しかし, ハミルトニアン (2.44) の Δ_3 と Δ_4 の項のため, エネルギーの表式 (2.77) で $Q = 0, \lambda + 1 \rightarrow m$ (m は異方的 H-S モデルで出てきた異方性パラメーター) としても, 異方的 H-S モデルの結果 (2.38) に reduce されない (異方的 t - J モデルの方は跳び移り積分をエネルギーの単位に, 異方的 H-S モデルでは交換相互作用をエネルギーの単位にしているため, 実際には (2.38) を 2 倍したものと比べる必要がある).

ここまで, $M > 0, Q > 0$ として計算してきた. $M > 0, Q = 0$ のときは, (2.77) において $Q = 0$ とすればよい. 固有関数は,

$$\psi(\{x\}; \{y\}) = \prod_{i=1}^M \exp\left(i \frac{2\pi}{N} x_i J_s\right) \prod_{i < j}^M \left(\sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{N} \right)^{\lambda+1} \tag{2.79}$$

である ($\lambda = \text{odd}$). しかし, $M = 0, Q > 0$ のときは, (2.77) で $M = 0$ としたのでは間違いで, エネルギーは次の表式になる (これは, 運動量分布が図 2-1 ではなくなり, (2.73) の計算が成り立たなくなるからである. ホールがボーズ凝縮しているだけの分布について, (2.66) にしたがって計算し直せばよい).

$$\begin{aligned}
 \frac{N^2}{\pi^2 t} E &= \frac{1}{6} \lambda^2 Q(Q^2 - 1) - 2Q J_h (N - J_h) + \frac{1}{3} (N^2 - 1) Q \\
 & + \frac{1}{6} \lambda (\lambda - 1) (N^2 - 1) (N - 2Q). \tag{2.80}
 \end{aligned}$$

固有関数は,

$$\psi(\{x\}; \{y\}) = \prod_{j=1}^Q \exp\left(i \frac{2\pi}{N} y_j J_h\right) \prod_{i < j}^Q \left(\sin \frac{\pi(y_i - y_j)}{N} \right)^{\lambda} \tag{2.81}$$

である ($\lambda = \text{odd}$).

さて, 異方的 H-S モデルの場合, N, M が与えられれば, 最低エネルギーは $J = N/2$ のときで, 縮退はなかった. ところが, 異方的 t - J モデルの場合は, N, M, Q が与えられても, 最低エネルギーに縮退があるときがある. これについて, 以下, 考察する.

$N = \text{even}, \lambda = \text{odd}$ のとき, (2.78) を複素座標 ξ_i, ω_j で表示すると,

$$\psi = \prod_{i=1}^M \xi_i^{N/2} \prod_{j=1}^Q \omega_j^{N/2} \cdot \psi_{0,-1} \phi, \quad (2.82)$$

$$\begin{aligned} \psi_{0,-1} &= \prod_{i=1}^M \xi_i^{-(M+Q-1)\lambda/2} \prod_{j=1}^Q \omega_j^{-(M+Q-1)\lambda/2} \\ &\times \prod_{i<j}^M (\xi_i - \xi_j)^\lambda \prod_{i<j}^Q (\omega_i - \omega_j)^\lambda \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^Q (\xi_i - \omega_j)^\lambda, \end{aligned} \quad (2.83)$$

$$\phi = \prod_{i=1}^M \xi_i^{J_s - N/2} \prod_{j=1}^Q \omega_j^{J_h - N/2} \prod_{i=1}^M \xi_i^{-(M-1)/2} \prod_{i<j}^M (\xi_i - \xi_j). \quad (2.84)$$

周期的境界条件より, 個々 (\downarrow スピン, ホール) の運動量は $(2\pi/N) \times (\text{整数})$ である. ψ が上のように複素座標の表示だけで完全に表せる場合, そのべきは整数である必要がある. この必要性から, M, Q が与えられたとき, J_s, J_h が整数をとるべきか, 半整数をとるべきかがまず決まる. これが決まると, $\psi_{0,-1}$ のべきを考慮することによって, ϕ のフェルミオン (\downarrow スピンの方) とボゾン (ホールの方) の運動量 $\times (N/(2\pi))$ が整数値をとるか半整数値をとるかが決まる. ($\psi_{0,-1}$ が整数値をとれば ϕ も整数値をとり, $\psi_{0,-1}$ が半整数値をとれば ϕ も半整数値をとる.)

$\psi_{0,-1}$ は, M, Q が決まれば一意に決まるから, \downarrow スピン, ホールが同等のフェルミオンとして扱われ, $M+Q$ 個のフェルミオンが縮退なく分布する. 一方, ϕ は, 基底状態では図2-1のような分布をする. (M, Q が決まっても, J_s, J_h の自由度が残っている.)

以上のことから, M, Q の値によって, 異方的 t - J モデルの最低エネルギーが縮退するかどうかは, 表2-1のようにまとめられる. $(\alpha) \sim (\theta)$ は, いずれも $P_{\text{tot}} = (2\pi/N)(J_s M + J_h Q) = (2\pi/N) \times (\text{整数})$ を満たしている.

2.2.2 ハミルトニアン of 物理的解釈

(2.44) のようなハミルトニアンがあつて, $\Delta_1 \sim \Delta_4$ を独立なパラメーターとして変化させることができるなら, $\Delta_1 \sim \Delta_4$ はそれぞれ次のような意味を持つ; Δ_1 は \uparrow スピンと \downarrow スピンの跳び移り積分の比, Δ_2 はイジング異方性, $\Delta_3 - 1$ は磁場の効果, Δ_4 は電子間相互作用の異方性である. そして, 物理的に意味のある領域だけを考えようとするなら, 例えば, $\Delta_1 = \Delta_3 = \Delta_4 = 1$ に固定し, Δ_2 をイジング異方性として変化させたりすればよい.

ところが, このようにしてしまうと, 数値的に物理量を計算することはできても, 解析的には不可能である (つまり, 固有関数が Jastrow 型にならない). 解析的に解ける領域は, (2.57) のように1つのパラメーター λ で表したときだけである. このとき, λ を変化させていくと, \uparrow スピンと \downarrow スピンの跳び移り積分が異なってしまう, あまり物理的でない. そこで, \uparrow スピン, \downarrow スピンを 2-chain の番号 1, 2 に置き換え, chain1 はすべてのサイトが $-$ 電荷を持つスピinless フェルミオン1個で埋まった状態 $|\text{SLFFS}\rangle$ (spinless fermion full state) を基準にして, その状態からのホール ($+$ 電荷を持つスピinless フェルミオン) を粒子として考え, chain2 では真空状態 $|0\rangle$ を基準にして, $-$ 電荷を持つスピinless フェルミオンを粒子として考える. このようにすることによって, ひとつの解釈が与えられる.

ハミルトニアンの中の各演算子の置き換えを次に示す.

$$\begin{aligned}
 c_{i\uparrow}^\dagger &\rightarrow c_{1i}^\dagger, \\
 c_{i\downarrow}^\dagger &\rightarrow c_{2i}^\dagger, \\
 S_i^+ = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} &\rightarrow c_{1i}^\dagger c_{2i}, \\
 S_i^- = c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} &\rightarrow c_{2i}^\dagger c_{1i}, \\
 S_i^z &\rightarrow \frac{1}{2}(n_{1i} - n_{2i}), \\
 n_i &\rightarrow n_{1i} + n_{2i}.
 \end{aligned}$$

ただし, $c_{1i}^\dagger, c_{1i}, c_{2i}^\dagger, c_{2i}$ は chain1 (chain2) でのサイト i における生成, 消滅演算子, n_{1i}, n_{2i} は chain1 (chain2) でのサイト i における個数演算子である. このとき, ハミルトニアンは (2.58) から,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = \mathcal{P} \sum_{i \neq j} &\left\{ -t_{ij} (c_{1i}^\dagger c_{1j} + \lambda c_{2i}^\dagger c_{2j}) \right. \\
 &+ J_{ij} \left[\frac{1}{2} (c_{1i}^\dagger c_{2i} c_{2j}^\dagger c_{1j} + c_{2i}^\dagger c_{1i} c_{1j}^\dagger c_{2j}) \right. \\
 &\left. \left. + \frac{1}{2} \lambda (\lambda - 1) n_{1i} n_{1j} - \frac{\lambda}{2} (n_{1i} n_{2j} + n_{2i} n_{1j}) \right] \right\} \mathcal{P}. \quad (2.85)
 \end{aligned}$$

第1項はchain1内での跳び移り, 第2項はchain2内での跳び移り, 第3, 4項はchain1内およびchain2内での同時跳び移り, 第5項はchain1内での+電荷を持つスピンレスフェルミオン同士の斥力ポテンシャル, 第6, 7項はchain1内の+電荷を持つスピンレスフェルミオンとchain2内の-電荷を持つそれとの引力ポテンシャルである. chain2内での-電荷を持つスピンレスフェルミオン同士の斥力ポテンシャル ($n_{2i} n_{2j}$ の項) はちょうどゼロになる (物理的には, chain2での斥力ポテンシャルが非常に小さいと考えればよい). また, 2重占有を排除する条件に対応するものとして, chain1とchain2の同じサイト番号のところには同時に粒子は来ないという条件がつく. これは, chain1の粒子とchain2の粒子との間には, 最隣接サイトまでは引力が働くが, 同じサイトでは無限大の斥力が働く——と解釈できる.

現実にはこのような物理系があるかどうかはわからないが, 仮想的には以上のようにreasonableなモデルである. 各種の異方性を, chainのバンド幅の違いとポテンシャルの強さにすり替えた形になっている.

3 厳密対角化の手法

この章では, 第4章の計算の手段として用いた厳密対角化について述べる.

3.1 厳密対角化の特徴

厳密対角化は, ハミルトニアン行列を数値的に対角化する方法である. 厳密対角化の特徴は, 何とんでも, 出てきた結果が厳密である, という点にある. 近似ではなく, 厳密な量を知りたいときは, 厳密対角化を用いるのがよい. ただし, あまり大きな系を扱えないという難点がある.

エネルギー固有値は、比較的小さな系でも系の特徴が出ることもある。また、基底エネルギー、エネルギーギャップ、静的相関関数などが熱力学極限でどんな値になるのかを知りたいときに、いくつかのサイトでそれらの量を計算し、横軸を $1/N$ や $1/N^2$ にとってプロットし、 $N \rightarrow \infty$ を外挿するという手段がよく用いられる。励起スペクトルや静的相関関数を調べるときは、横軸としてとる運動量や2点間距離が $1/N$ の分解能を持つ。そのため、サイト数はなるべく大きくした方が間隔をより狭くプロットすることができ、系の特徴をよりよく知ることができる。(逆にいえば、サイト数が小さいと、系の特徴がみえない。)

3.2 部分空間での対角化

上で、大きな系を扱えない、といったのは、次のような理由からである。例えば、スピン系では、 N サイトのとき、 2^N 個の状態が存在する。(1 サイトにつき、 \uparrow と \downarrow の2つの状態が存在する。) $N = 20$ のとき、 $2^{20} = 1048576$ で、ハミルトニアン行列の大きさは 1048576×1048576 次元となって、計算機のメモリの面から苦しくなる。ホールを入れてフェルミオン系にすると、1 サイトにつき3つの状態になるので、事情はもっと苦しくなる。従って、厳密対角化では、普通、よい量子数をできるだけ使って、行列の縮約を行う。(ここでいうよい量子数とは、ハミルトニアンと可換な量のこと、対称性に起因している。例えば、 $Z(2)$ 対称性がある場合、ハミルトニアンと可換な量は全スピン z 成分 S_{tot}^z のことであり、並進対称性がある場合は、全運動量 P_{tot} がよい量子数になる。) こうすれば、次元が小さくなるので、より大きなサイト数を扱うことができ、しかも計算時間を短縮できる。ところが、行列を縮約すると、ゼロ要素が減り、これを対角化するのにかえって計算時間がかかるということもある。こうなると、行列の縮約のために作るプログラムが何のためか分からなくなるので、兼ね合いを考えてやる必要がある。

3.3 対角化の方法 (アルゴリズム)

次に対角化の方法について述べる。

まず、行列の固有値を計算する方法であるが、現在の標準的な解法は、行列をいったん3重対角化した後に3重対角行列を対角化するというものである。3重対角化の方法として、有名なものにハウスホルダー法 [44] やランチョス法 [44] がある。ハウスホルダー法は解が安定に求められ、すべての固有値が分かるという利点があるものの、ランチョス法と比べ演算回数が多いのが難点である。大規模疎行列 (次元が大きく、ゼロ要素が多い行列) の固有値のうち、小さいあるいは大きいいくつかの固有値だけを求めるには、ランチョス法が適している。本研究では、行列の次元の大きさや固有値をいくつ知りたいかによって、2つの方法を使い分けている。3重対角行列は、バイセクション法 [44] やQR法 [44] によって対角化し、固有値を求めることができる。

また、固有ベクトルを求める際には、逆反復法 [44] を用いる。本研究では、収束を高めるために、原点移動付き逆反復法をも併用した。逆反復法で必要となる大規模行列 (ハミルトニアン行列) の逆行列の計算には、共役傾斜法 (CG法) [44] を用いた。この方法を用いると、行列の次元に比べごく少数回の行列の積だけで逆行列を求めることができる (数万 \times 数万の行列に対して数十回程度)

3.4 対角化の手順

さて、本研究の場合、どのような手順を踏んで数値的に対角化したかを述べる。\$S = 1/2\$ の量子スピン系に関しては、適用範囲の広いパッケージが存在する [45]。異方的H-Sモデルは、このパッケージを利用することができる。しかし、異方的\$t\$-\$J\$モデルはフェルミオン系なので、新たなプログラムを開発する必要があった。このプログラムは異方的H-Sモデルにも使うことができるので、これを用いた。

まず、ハミルトニアンは、異方的H-Sモデルでは(2.1)式、異方的\$t\$-\$J\$モデルでは(2.44)式である。基底の表現としては、異方的H-Sモデルでは

$$\prod_{i=1}^M S_{x_i}^- |F\rangle, \quad (3.1)$$

異方的\$t\$-\$J\$モデルでは

$$\prod_{i=1}^M S_{x_i}^- \prod_{j=1}^Q h_{y_j}^\dagger |F\rangle \quad (3.2)$$

を採用する。本研究では、↓スピンの数 \$M\$ 個、ホールの数 \$Q\$ 個を固定し、なおかつ \$x_1 < x_2 < \dots < x_M, y_1 < y_2 < \dots < y_Q\$ (つまり、サイトオーダー) として、数値的に対角化した。基底の数は \${}_N C_M \cdot {}_{N-M} C_Q\$ 個となる。

次に行列要素を生成する。ここで一番注意しなければならないのは、ハミルトニアン(2.44)のホッピングの項による非対角要素の計算である。この項が、ある基底に作用してその状態が変わったとき、あらかじめ用意した基底(サイトオーダー)になっていなければ、サイトオーダーに戻す必要がある。その際、フェルミオンであるための符号の問題が絡んでくる。

行列要素ができれば、あとは3.3節で述べたアルゴリズムを使って行列を対角化し、固有値と固有ベクトルを求める。最後に、固有値、固有ベクトルの精度のチェックをおこなう。

4 計算結果とその解釈

4.1 基底エネルギー

4.1.1 異方的H-Sモデル

解析的な計算からは、条件(2.28)を満たす \$\Delta\$ でしか厳密な基底エネルギーを求めることができない。真の基底エネルギー (\$S_{tot}^z = 0\$) に関しては、厳密に求められるのは \$\Delta = 1\$ のときだけである(ただし、\$N \ge 6\$ に対して)。そのほかの \$\Delta\$ に対する基底エネルギーを求めること、もしくは厳密解が求められる \$\Delta\$ に対してエネルギーの表式(2.32)が正しいことを確認することを目的として、ハミルトニアン(2.1)の厳密対角化をおこなった。

結果を図4-1と図4-2に示す。

まず、図4-1は、\$S_{tot}^z = 0\$ の場合について、イジング異方性に対する基底エネルギーの変化を調べたものである。イジング極限 (\$\Delta \to \infty\$) で基底エネルギーがどの値に近づいていくかをみるために、縦軸は \$E/\Delta\$ にとってある。図4-1(a)をみると、イジング異方性が大きくなると、解析的な結果と数値計算の結果はだんだんかけ離れていくように見える。しかし、図4-1(b)のよう

にもっと先の Δ まで計算すると, $\Delta = 28$ を境にして, 今度は解析的な結果が数値計算の結果に近づいていくことがわかる. $\Delta \rightarrow \infty$ では, 厳密に一致することが確かめられた (表4-1 参照).

図4-2は, $S_{\text{tot}}^z \neq 0$ の場合について示したものである. この場合, 縦軸は磁化のある基底状態のエネルギーをイジング異方性で割ったものになる. ○印をつけたところは, 条件(2.28)を満たす Δ である. もちろん, ここで最も精度よく (12~15桁) 解析解と数値計算が一致するのであるが, それ以外の Δ に対しても, 図をみた限りではほとんど一致しているように見える. 数値では2~5桁一致している. 本来, 解析解の表式は, 条件を満たさない Δ に対しては意味を持たないはずなので, この事情は不思議である.

(2.32)の表式から, イジング極限を計算すると (E/Δ の式に $\Delta = \frac{1}{2}m(m-1)$ を代入し, $m \rightarrow \infty$ に持っていく),

$$E/\Delta \xrightarrow{m \rightarrow \infty} \left(\frac{\pi}{N}\right)^2 \left[\frac{1}{6}M(M^2-1) + \frac{1}{24}N(N^2-1) - \frac{1}{6}M(N^2-1) \right]. \quad (4.1)$$

この式を用いて基底エネルギーを計算した結果とイジングモデルの数値計算から得られた結果を比較したのが表4-1である. $N=10, M=5$ と $N=10, M=2$ の場合で, 両者が一致している.

なお, $\Delta=0$ は $1/\sin^2$ 型のXYモデルに対応するが, その固有関数はJastrow型にはならず, エネルギーの表式(2.32)を適用することはできない.

4.1.2 異方的t-Jモデル

異方的t-Jモデルにおいて, 異方性パラメーター λ に対する基底エネルギーの変化を調べたのが図4-3である. 異方的H-Sモデルと同じように, S_{tot}^z が大きいほど, λ が大きくなっても, 解析解が対角化の結果と非常に近い値になっているという事情がみられる. $S_{\text{tot}}^z = 0$ の場合 (図4-3(a)) に, λ が大きくなっても, 解析解と数値計算は決して近づいていかないという点は, 異方的H-Sモデルと異なっている.

4.2 重なり積分

4.2.1 異方的H-Sモデル

サイト数 N と \downarrow スピンの数 M が与えられたとき, 条件(2.28)を満たす Δ に対しては, Jastrow型波動関数が異方的H-Sモデルの厳密な基底固有関数になっていることが, 解析的な計算からわかった. 条件を満たさない Δ に対して, Jastrow型波動関数がどの程度よい近似になっているかを調べるために, 次のような数値計算をおこなった.

まず, 6~12サイトに対して, \downarrow スピンの数 M ($\leq N/2$) をある値に, 全運動量を πM に固定した部分空間で, イジング異方性 Δ を変化させ, ハウスホルダー法により最低エネルギー固有値およびその固有ベクトル $|A\rangle$ を計算した. 全運動量を πM に固定したのは, 解析的に解ける Δ のときは, 最低エネルギーの状態が持つ全運動量が πM であったので, その値を解析的に解けない Δ のときにも拡張して使ったものである. その拡張が正しいことは, 任意の Δ に対

して、全運動量を πM に固定した部分空間で対角化したとき、(全運動量を固定しない空間で対角化してわかる) 最低エネルギーが含まれていることを調べることによって確認した。一方、対角化で用いた基底からスピンの配置を割り出し、 \downarrow スピンの座標を Jastrow 型波動関数に代入することによって、状態ベクトル $|\psi\rangle$ を作るができる。この状態ベクトルと固有ベクトルの内積 $\langle A|\psi\rangle$ が重なり積分である。このようにして、 Δ を変化させたときの重なり積分を計算した。厳密解が求められる Δ に対して重なり積分は最も精度よく 1 に近づくはずなので、この事実はプログラムの正しさをチェックする 1 つの手段になる。私の計算では、15 桁もの精度が得られた。

図 4.4 は、スピン分極密度 $\bar{m} \equiv (N - 2M)/N = 0$ 、全スピン z 成分 $S_{\text{tot}}^z \equiv N/2 - M = 0$ の場合について、サイト数をいろいろ変えて図示したものである。まず言えることは、イジング異方性の全領域で重なり積分が非常に 1 に近い値 (サイト数 12 まで調べた範囲では 0.95 以上) を持つことである。これは、可解条件が満たされないイジング異方性に対しても、Jastrow 型波動関数がよい近似になっていることを意味する。それから図 4.4 の (a)~(d) に共通する性質として、 Δ の増加に伴って、重なり積分が一度大きく下がり、その後上昇してもう一度小さく下がって、あとは 1 に近づいていくということがある。しかも、重なり積分の極大、極小をとる Δ の値が、サイト数によらずほぼ同じである。つまり、この性質はサイト数がさらに大きくなっても変わらないのではないかと推察される。

図 4.5 は、 $S_{\text{tot}}^z \neq 0$ の場合について図示したものである。同じサイト数に対して $S_{\text{tot}}^z = 0$ の場合と比較してみると、 $S_{\text{tot}}^z \neq 0$ の場合の重なり積分の方がより 1 に近づいていることがわかる。この場合、イジング異方性に対する重なり積分の振舞いは、大きく分けて次の 2 つに分類される。

- (i) 極小が 1 つのもの
- (ii) 極小が 2 つのもの

ただしこの場合、 \bar{m} と S_{tot}^z の両方を一定に保ったままサイト数を大きくしていくことはできないので、 $S_{\text{tot}}^z \neq 0$ での重なり積分の振舞いについての性質を、有限系の厳密対角化によって推測することはできない。

図 4.4, 4.5 から、 S_{tot}^z がゼロかそうでないかにかかわらず、イジング極限 $\Delta \rightarrow \infty$ では重なり積分が 1 に近づいていくことがわかる。これは、解析的に次のように説明できる (厳密な証明ではない)。

異方的 H-S モデルでイジング極限を考えると、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{Ising}} = \sum_{n < n'} J(n - n') S_n^z S_{n'}^z. \quad (4.2)$$

このときの固有ベクトルと Jastrow 型波動関数を用いた状態ベクトルとの重なり積分について、以下、議論する。

Jastrow 型波動関数 (2.33) において、 m が十分大きい場合を考える。鞍点法を用いて (exp の肩の部分を展開する)、

$$\begin{aligned} \left(\sin \frac{\pi(n_i - n_j)}{N} \right)^m &= \exp \left[m \log \left(\sin \frac{\pi(n_i - n_j)}{N} \right) \right] \\ &\sim \exp \left[-\frac{1}{2} m \left\{ \frac{\pi}{N} (n_i - n_j) - \frac{\pi}{2} \right\}^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.3)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \log(\sin x) &= \frac{\cos x}{\sin x} \Big|_{x=\frac{\pi}{2}} \left(x - \frac{\pi}{2}\right) - \frac{1}{2} \frac{1}{\sin^2 x} \Big|_{x=\frac{\pi}{2}} \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^2 + \dots \\ &= -\frac{1}{2} \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^2 + \dots \end{aligned} \quad (4.4)$$

を用いた。(4.3)は、 $n_i - n_j \sim N/2$ のとき最も大きい値を持つことを示している。つまり、(2.33)は、 \downarrow スピンがなるべく離れた状態にいる方がそうでない状態に比べて大きな値を持つ。($m \rightarrow \infty$ では、 \downarrow スピンがなるべく離れた状態のときだけ値を持つはずである。)

一方、反強磁性の一般的な性質として、すべてのサイトが \uparrow スピンの状態 $|F\rangle$ を真空状態としたとき、 \downarrow スピンはなるべく離れるように分布するという傾向がある。なぜなら、隣り合ったサイトが $\uparrow\downarrow$ あるいは $\downarrow\uparrow$ になる数が多い方がエネルギー的に得だからである。上で見たように、Jastrow型波動関数は、この性質を取り込んだものになっている。

したがって、基底を同じ配置を持つもので分類し、最低エネルギーを持つ全運動量(πM)の重みを掛けて線形結合したものを新しい基底として、対角化した固有ベクトルと状態ベクトルとの重なり積分を計算すれば、 m (あるいは Δ)が十分大きいところでは1に近づくことがわかる。

4.2.2 異方的 t - J モデル

異方的 t - J モデルにおいても、 \downarrow スピンの数 M 、ホールの数 Q をある値に、さらに全運動量を基底状態のそれに固定した部分空間で、異方性パラメーターを変化させ、重なり積分を計算した。ただし、基底状態に縮退がないような場合($M = \text{odd}$, $Q = \text{even}$)を選んでおこなった。

8サイトについて計算した結果が図4-6である。サイト数8で調べた範囲では、重なり積分は0.91以上の値を持つ。異方的H-Sモデルと同じように、 $S_{\text{tot}}^z = 0$ よりも $S_{\text{tot}}^z \neq 0$ のときの方が重なり積分がよいという事情がみられる。また、 $S_{\text{tot}}^z = 2$ の場合(図4-6(b))で、 λ を大きくしていくと、重なり積分が1に近づいていくというのも、異方的H-Sモデルとよく似ている。

$S_{\text{tot}}^z = 0(N = 8, M = 3, Q = 2)$ のとき、 λ が大きくても重なり積分は0.91以上でかなりいいのに、基底エネルギーの図4-3(a)をみると、 λ が大きいところでは解析解と対角化の結果が大きくかけ離れている。これは、解析解が(多成分)Sutherlandモデルにマップすることによって求めたもので、 $\langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ (期待値)を計算しているわけではないからである。このことは、基底エネルギーにおける解析解と数値計算の一致の具合と、基底状態の重なり積分のよさが、直接関係するものではないことを示していると思われる。可解条件が満たされない異方性パラメーターのところでは物理的本質に近いのは、エネルギーの解析解の表式ではなく、Jastrow型波動関数の方であるということである。

なお、厳密解が求められる λ での固有関数は(2.78)であるが、それより一歩前の段階の(2.70)を使った式

$$\psi(\{x\}; \{y\}) = \prod_{i=1}^M \exp\left(i \frac{2\pi}{N} x_i J_s\right) \prod_{j=1}^Q \exp\left(i \frac{2\pi}{N} y_j J_h\right)$$

$$\begin{aligned} & \times \prod_{i < j}^M \left| \sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{N} \right|^{\lambda+1} \prod_{i < j}^Q \left| \sin \frac{\pi(y_i - y_j)}{N} \right|^{\lambda} \operatorname{sgn}(y_i - y_j) \\ & \times \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^Q \left| \sin \frac{\pi(x_i - y_j)}{N} \right|^{\lambda} \operatorname{sgn}(x_i - y_j) \end{aligned} \quad (4.5)$$

を試行関数として用いた方が, (2.78) を用いるよりも, 厳密解が求められない λ での重なり積分がよくなる. 図46の結果は, 試行関数として(4.5)を用いたものである.

4.3 励起スペクトル

4.3.1 異方的H-Sモデル

有限系の励起スペクトルが, 異方性を大きくしていくと, どのように変化するかをみるために, 厳密対角化を用いた数値計算をおこなった. 異方性を導入することによって, 新しい素励起の概念がみつかるか, それとも, 今までのスピノン, ホロンという素励起の概念で説明できるかという問題意識が根底にある.

励起スペクトルを図示するには, まず全運動量で基底を分類し, 全運動量を0から 2π までそれぞれ固定した部分空間で対角化して, エネルギー固有値を求める必要がある. 本来, 励起スペクトルは, すべての励起エネルギーについてプロットしたものをいうが, 本研究では, 最低励起を表す曲線だけを示した.

図47は, $N = 12$ について励起スペクトルを示したものである. 横軸は全運動量, 縦軸はエネルギー固有値から基底エネルギーを引いたもの (ΔE) である. イジング異方性 Δ が大きくなるにつれて, 励起スペクトルの2つの山がだんだん高くなっていくのがわかる.

$\Delta = 30$ の図48(a)をみると, 横軸の全運動量が $0, \pi, 2\pi$ 以外のところでは ΔE がほぼ一定の値をとる (山が平坦になる) ことがわかる. これは次のように解釈できる—— $\Delta = 30$ はイジングモデルに近いと考えてよい (重なり積分からみても). したがって, ハミルトニアン $S^+S^- + S^-S^+$ の項の影響が非常に小さく, \uparrow スピンと \downarrow スピンが交換することはほとんどない. これは, \uparrow スピンと \downarrow スピンの有効質量が重く, 曲率半径が大きいので, バンド幅が狭くなることを意味する. $\Delta = \infty$ (イジングモデル) の場合 (図48(b)), このことが完全に成り立つ.

サイト数 N を固定したとき, Δ を大きくしていくと, $\text{gap} = E(\text{第1励起状態}) - E(\text{基底状態})$ が小さくなっていくことが図47からわかる. また, 完全にイジングモデルにすると, 有限系では基底状態が2重縮退している (図48(b)).

一方, Δ をある値に固定したとき, 励起スペクトルから gap (第1励起エネルギーと基底エネルギーとの差) を計算し, そのサイズ依存性を調べたものが図49である. Δ の大きさによって, サイズ依存性に特徴的な違いがあることがわかる. まず, $\Delta = 1$ の場合, gap のサイズ依存性は直線上にのっており, $N \rightarrow \infty$ では gap はゼロになる. $\Delta = 1$ ではエネルギースペクトルが解析的に計算され, 熱力学極限で gap がゼロになることはわかっている [41]. $\Delta = 2$ の場合は, gap のサイズ依存性は直線上にきれいにのっていない. もちろん, サイト数を増やしていても gap が負になることはないので, 図49に引いた直線は正しくない. この図からだけでは, 熱力学極

限でgapがゼロになるか有限になるかは判断できない。さらに $\Delta = 30$ の場合をみると、図4-10(a)から、 N の増加に伴ってgapが指数関数的に落ちていくことがわかる。縦軸のスケールを $\ln(\text{gap})/N$ に変更してプロットしたのが図4-10(b)である。このプロットから、最小2乗法を用いて1次の多項式で近似すると、次のような直線になる。

$$\frac{1}{N} \ln(\text{gap}) = -1.2203 + 3.0012 \frac{1}{N}. \quad (4.6)$$

したがって、この場合のgapのサイズ依存性は

$$\text{gap} = 20.110 \times \exp(-1.2203N) \quad (4.7)$$

となる。結局、 $\Delta > 1$ では、サイズを大きくしていくとgapが小さくなっていくことがわかる。しかし、熱力学極限でgapが(わずかでも)残るか完全にゼロになるかの問題は、厳密対角化による計算だけで結論することはできない。

4.3.2 異方的t-Jモデル

異方的t-Jモデルの場合は、異方性パラメーターだけでなく、電子密度によっても励起スペクトルが変化する。その様子を図4-11~4-14に示す。

図4-11~4-14は、10サイトにおいて、 $S_{\text{tot}}^z = 0$ という条件を保ちつつ、電子密度 $\bar{n} \equiv (N-Q)/N$ を変えていき、その上で異方性パラメーター λ を変化させたときの最低励起について示したものである。したがって、 $\lambda > 1$ では、縦軸 ΔE が真の第一励起エネルギーから真の基底エネルギーを引いたものとは限らないことに注意する。つまり、 $\lambda > 1$ では、 $S_{\text{tot}}^z = 0$ の状態が最低エネルギーあるいは最低励起とは限らないのである。

この結果において最も興味深いのは、 $\bar{n} = 0.8$ と $\bar{n} = 0.4$ の場合で、 λ の増加に伴って励起スペクトルの山が分裂していく点である。 $\bar{n} = 0.6$ の場合では、 $\lambda = 10$ まで調べてみたが、この事情はみられなかった。 $\bar{n} = 0.8$ と $\bar{n} = 0.4$ の場合では、 $\lambda = 1$ では基底状態が2重縮退しているが、 λ を大きくしていくと縮退のない基底状態へ移行していく点にも注目すべきである。

次の2つのことが問題点として挙げられる。

1. これらの励起スペクトルは、分数統計を持つSutherlandモデルの励起スペクトルと対応がつかか。

2. λ を大きくするにつれて山が分裂したり基底状態が移行したりするのは、何によるものか。これらの問いにまだ答えることはできない。

5 まとめと今後の課題

本研究では、異方性をキーワードにして、スピン系とフェルミオン系で厳密に解けるモデルを構築し、可解となる条件を求めた。また、それらのモデルにおける基底エネルギー、重なり積分、および励起スペクトルを、厳密対角化の手法を用いて調べた。その結果、得られた結論は次のようにまとめられる。

- 解析解からわかった基底エネルギーの表式は、磁化のある場合には、可解条件からはずれた異方性の部分でも厳密なエネルギーの値に近いことが判明した。
- Jastrow 型波動関数は、等方的あるいは超対称性のある場合、厳密な基底固有関数であることがわかっていたが、異方性があっても、非常によい試行関数になっていることが確かめられた。
- 異方的 H-S モデルの励起スペクトルに対して、等方的な場合からイジング型へ移行する変化を数値的に観測した。その過程において、第 1 励起状態と基底状態との差 (gap) が小さくなっていき、基底状態の 2 重縮退へ向かう様子を確認した。
- 異方的 t - J モデルの励起スペクトルに対して、異方性パラメーターを大きくしていくと、励起スペクトルの山が分裂する場面があることを見つけた。

今後の課題としては、得られた結果に対して明確な解釈を与えることがまず挙げられる。異方性が入っても Jastrow 型波動関数が非常によい試行関数になっている理由、あるいは異方性による励起スペクトルの変化に対する解釈は、特に重要であると考えている。

もう一步進んだ研究としては、スペクトル関数 $S(q, \omega)$ を連分数展開の方法を使って数値的に計算し、運動量 q と周波数 ω に対する振舞い (3 次元プロット) を調べるということがある。これは、絶対零度の dynamics を調べる研究である。連分数展開の方法は、どんなモデルに対しても使えるという利点を持っている。

より数学的な話題としては、異方的 H-S モデルおよび異方的 t - J モデルは、なぜ厳密に解ける部分があるのかという問題がある。今のところ、厳密に解ける異方性の部分は固有関数が Jastrow 型になるときであり、ほかの部分に対しては厳密には解けないのか、それとも Jastrow 型以外の波動関数が厳密解になっているのかはわからない (しかし、Jastrow 型がよい近似になっていることだけは確かである)。この問題を考えることは、新たな可解モデルを探す際にも役立つであろうと思っている。

6 謝辞

本研究は、東北大理学部の倉本義夫教授の指導のもとにおこなわれたものです。倉本教授には、高い見地からの的確な指導をしていただきました。ここに深く感謝の意を表明します。加藤雄介助手には、本研究全般にわたって多大な助言をいただきました。深く感謝いたします。数値計算の方法や物理の有益な話を聞かせて下さった横山寿敏助手、ランチョス法について詳しく教えていただいた西野友年助手には心より感謝いたします。また、研究の過程において様々な相談に応じて下さった鴫崎晋也氏と渡辺真仁氏にも厚くお礼を申し上げます。最後に、毎日の研究生生活を見守り、励まして下さった物性理論研究室の皆様にも深くお礼を申し上げ、謝辞とさせていただきます。

7 Appendix

7.1 Sutherland モデル

Sutherland モデルにおける基底状態のエネルギー固有値と固有関数（厳密解）を求める [24].

Sutherland モデルとは、相互作用が粒子間の距離の2乗に逆比例した、1次元多粒子系の連続体モデルのことである。ただし、系には周期的境界条件が課せられている。（長さ L の1次元リングに粒子が閉じ込められていると考えればよい。）このとき、2体ポテンシャル $V(r)$ は、 $1/r^2$ 型相互作用をリングに沿って何回も足し上げたもの、

$$V(r) = g \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(r+nL)^2} = \frac{g\pi^2}{L^2} \frac{1}{\sin^2(\pi r/L)} \quad (7.1)$$

になる。したがって、ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{g\pi}{L^2} \sum_{i<j}^N \frac{1}{\sin^2[\pi(x_i-x_j)/L]} \quad (7.2)$$

さて、試行関数として、次の Jastrow 型波動関数（2体波動関数の積）を採用する。

$$\Psi = \prod_{i<j}^N [\psi(x_i-x_j)]^\lambda. \quad (7.3)$$

計算を見やすくするために、 ψ の対数微分 ϕ を定義しておく。

$$\phi = (\log \psi)' = \frac{\psi'}{\psi}. \quad (7.4)$$

' は関数の引数についての微分を表す。

(7.3) に、ハミルトニアンの運動エネルギーの部分を作作用させる。計算する際に出てくる微分について、まず書いておく。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} [\psi(x_i-x_j)]^\lambda &= \lambda [\psi(x_i-x_j)]^{\lambda-1} \frac{\partial \psi(x_i-x_j)}{\partial (x_i-x_j)} \\ &= \lambda \phi(x_i-x_j) [\psi(x_i-x_j)]^\lambda, \end{aligned} \quad (7.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\psi(x_i-x_j)]^\lambda = -\lambda \phi(x_i-x_j) [\psi(x_i-x_j)]^\lambda, \quad (7.6)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} [\psi(x_i-x_j)]^\lambda = \lambda [\phi'(x_i-x_j) + \lambda \phi^2(x_i-x_j)] [\psi(x_i-x_j)]^\lambda, \quad (7.7)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} [\psi(x_i-x_j)]^\lambda = \lambda [\phi'(x_i-x_j) + \lambda \phi^2(x_i-x_j)] [\psi(x_i-x_j)]^\lambda. \quad (7.8)$$

したがって、

$$\begin{aligned} -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_i^2} &= \left(-2\lambda \sum_{i<j}^N [\phi'(x_i-x_j) + \lambda \phi^2(x_i-x_j)] \right. \\ &\quad + 2\lambda^2 \sum_{i<j<k}^N [\phi(x_i-x_j)\phi(x_j-x_k) \\ &\quad \left. + \phi(x_j-x_k)\phi(x_k-x_i) + \phi(x_k-x_i)\phi(x_i-x_j)] \right) \Psi. \end{aligned} \quad (7.9)$$

ポイントは、運動エネルギー演算子が Jastrow 型波動関数に作用すると、2 体項と 3 体項が出てくることである。

ハミルトニアン of 相互作用の部分が 2 体項から成っていることを考慮すると、試行関数 (7.3) が固有関数になるための条件が出てくる。3 体項を

$$T \equiv \phi(x_i - x_j)\phi(x_j - x_k) + \phi(x_j - x_k)\phi(x_k - x_i) + \phi(x_k - x_i)\phi(x_i - x_j) \quad (7.10)$$

と書くと、3 体項が消える (2 体項になる) ためには、

$$T = f(x_i - x_j) + f(x_j - x_k) + f(x_k - x_j) \quad (7.11)$$

というふうに 2 体の和の形に書けることが必要である。(定数になってもよい。) さらに、 T の 2 体項と運動エネルギーの 2 体項とを合わせたものが、ちょうど 2 体ポテンシャルとキャンセルすればよい。

Sutherland モデルの場合、

$$\psi(x_i - x_j) = \sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \quad (7.12)$$

とすることによって、上の条件がうまく満たされることがわかる。すなわち、

$$\phi(x_i - x_j) = \frac{\pi}{L} \cot \frac{\pi(x_i - x_j)}{L}, \quad (7.13)$$

$$\phi'(x_i - x_j) = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \frac{1}{\sin^2[\pi(x_i - x_j)/L]} \quad (7.14)$$

であるから、これらを (7.9) に代入すれば、

$$\begin{aligned} -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_i^2} = & \left(-2\lambda \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \sum_{i < j}^N \left[\frac{1}{\sin^2[\pi(x_i - x_j)/L]} + \lambda \cot^2 \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \right] \right. \\ & + 2\lambda^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \sum_{i < j < k}^N \left[\cot \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \cot \frac{\pi(x_j - x_k)}{L} \right. \\ & + \cot \frac{\pi(x_j - x_k)}{L} \cot \frac{\pi(x_k - x_i)}{L} \\ & \left. \left. + \cot \frac{\pi(x_k - x_i)}{L} \cot \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \right] \right) \Psi. \end{aligned} \quad (7.15)$$

ここで、

$$\cot^2 x = \frac{1}{\sin^2 x} - 1, \quad (7.16)$$

$$\cot x \cot y + \cot y \cot z + \cot z \cot x = 1 \quad (\text{for } x + y + z = 0) \quad (7.17)$$

を用いると、

$$\begin{aligned} -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_i^2} = & \left(-\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \sum_{i < j}^N \frac{2\lambda(\lambda - 1)}{\sin^2[\pi(x_i - x_j)/L]} + 2\lambda^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \frac{N(N - 1)}{2} \right. \\ & \left. + 2\lambda^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \frac{N(N - 1)(N - 2)}{3!} \right) \Psi \\ = & \left(\frac{1}{3} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \lambda^2 N(N^2 - 1) - \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \sum_{i < j}^N \frac{2\lambda(\lambda - 1)}{\sin^2[\pi(x_i - x_j)/L]} \right) \Psi. \end{aligned} \quad (7.18)$$

したがって,

$$2\lambda(\lambda - 1) = g \quad (7.19)$$

であれば, 2体ポテンシャルはキャンセルされ, エネルギー固有値 E と固有関数 Ψ は,

$$E = \frac{1}{3} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \lambda^2 N(N^2 - 1), \quad (7.20)$$

$$\Psi = \prod_{i < j}^N \left(\sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \right)^\lambda \quad (7.21)$$

となる. この計算からだけでは, (7.20), (7.21) が基底状態かどうかはわからないが, 別の方法で基底状態であることも示される.

7.2 多成分Sutherlandモデル

多成分Sutherlandモデルにおける(励起状態まで含めた)エネルギー固有値と固有関数(厳密解)を求める[40]. 具体的には, (2.66), (2.68), (2.69)を導出することを目的とする.

計算のポイントは, 多成分Sutherlandモデルの波動関数を, 対称性を考えない基底状態とそれ以外との積の形にかいたとき, それ以外の部分の固有値方程式が上三角行列の形に帰着されることである. 上三角行列になるということは, 対角要素そのものが固有値に対応することになる. 固有値の表式を求めた後で, 波動関数の対称性を考慮してやればよい.

Sutherlandモデルでは, 内部自由度のない粒子を扱ったが, 多成分Sutherlandモデルでは, 任意の内部自由度を持つ粒子を扱う. 長さ L の1次元リングに全部で N 個の粒子が閉じ込められていると考える. ハミルトニアンとしては,

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \sum_{i < j}^N \frac{2\lambda(\lambda - \zeta M_{ij})}{\sin^2[\pi(x_i - x_j)/L]}. \quad (7.22)$$

ここで, M_{ij} は粒子 i, j の空間座標を交換する演算子で, 格子モデルとしても扱えるようにするために導入したものである[37]. λ は無次元の結合パラメーターで, 正とする. ζ は1または-1をとる. ハミルトニアンは粒子の内部対称性によらないから, 波動関数 $\Psi(\{x\})$ の軌道部分だけを考える. しばらく粒子を区別できるものとみなす. (つまり, 波動関数に permutation の性質を課さない.)

波動関数を $\Psi = \Psi_{0,\zeta} \Phi$ と書く. ここで, $\Psi_{0,\zeta}$ は “absolute ground state” で, 固有関数の対称性に制限を課さない場合の基底状態を意味する. $\zeta M_{ij} \Psi_{0,\zeta} = \Psi_{0,\zeta}$ を満たす波動関数が粒子間の反発を最小にする. したがって, $\Psi_{0,\zeta}$ に対しては, (1成分) Sutherlandモデルの結果が使える. 波動関数は

$$\Psi_{0,\zeta} = \prod_{i < j}^N \left| \sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \right|^\lambda [\text{sgn}(x_i - x_j)]^{(1-\zeta)/2} \quad (7.23)$$

で, エネルギー固有値は

$$E_0 = \frac{1}{3} \left(\frac{\lambda\pi}{L} \right)^2 N(N^2 - 1) \quad (7.24)$$

である.

さて, (7.22) を $\Psi = \Psi_{0,\zeta}\Phi$ に作用させると,

$$\mathcal{H}\Psi = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} (\Psi_{0,\zeta}\Phi) + \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \sum_{i<j}^N \frac{2\lambda(\lambda - \zeta M_{ij})}{\sin^2[\pi(x_i - x_j)/L]} (\Psi_{0,\zeta}\Phi). \quad (7.25)$$

ここで,

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} (\Psi_{0,\zeta}\Phi) = \frac{\partial^2 \Psi_{0,\zeta}}{\partial x_i^2} \Phi + 2 \frac{\partial \Psi_{0,\zeta}}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \Psi_{0,\zeta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^2}, \quad (7.26)$$

$$\zeta M_{ij} (\Psi_{0,\zeta}\Phi) = (\zeta M_{ij} \Psi_{0,\zeta}) (\Phi) = \Psi_{0,\zeta} (M_{ij} \Phi) \quad (7.27)$$

であるから,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\Psi &= \left[-\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 \Psi_{0,\zeta}}{\partial x_i^2} + \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \sum_{i<j}^N \frac{2\lambda(\lambda - 1)}{\sin^2[\pi(x_i - x_j)/L]} \Psi_{0,\zeta} \right] \Phi \\ &\quad - \sum_{i=1}^N \left(2 \frac{\partial \Psi_{0,\zeta}}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} + \Psi_{0,\zeta} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) \Phi \\ &\quad + \Psi_{0,\zeta} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \sum_{i<j}^N \frac{2\lambda(1 - M_{ij})}{\sin^2[\pi(x_i - x_j)/L]} \Phi. \end{aligned} \quad (7.28)$$

[] は, (1成分) Sutherland モデルのハミルトニアンが $\Psi_{0,\zeta}$ に作用した形になっているので, $E_0 \Psi_{0,\zeta}$ に置き換わる. また, (7.5), (7.6) から,

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial \Psi_{0,\zeta}}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} = \Psi_{0,\zeta} \lambda \frac{\pi}{L} \sum_{i<j}^N \cot \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \right). \quad (7.29)$$

したがって, (7.28) は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\Psi &= E_0 \Psi + \Psi_{0,\zeta} \left[-\lambda \frac{2\pi}{L} \sum_{i<j}^N \cot \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \right) - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \sum_{i<j}^N \frac{2\lambda(1 - M_{ij})}{\sin^2[\pi(x_i - x_j)/L]} \right] \Phi. \end{aligned} \quad (7.30)$$

ここで, 変数 x_i を $z_i \equiv \exp(i2\pi x_i/L)$ に変える.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = i \frac{2\pi}{L} z_i \frac{\partial}{\partial z_i}, \quad (7.31)$$

$$-\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} \right)^2, \quad (7.32)$$

$$\cot \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} = i \frac{z_i - z_j}{z_i + z_j}, \quad (7.33)$$

$$\frac{1}{\sin^2[\pi(x_i - x_j)/L]} = -\frac{4z_i z_j}{(z_i - z_j)^2} \quad (7.34)$$

であるから, (7.30) は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\Psi &= E_0 \Psi + \Psi_{0,\zeta} \left[\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \left[\sum_{i=1}^N \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} \right)^2 + \lambda \sum_{i<j}^N \frac{z_i + z_j}{z_i - z_j} \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} - z_j \frac{\partial}{\partial z_j} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sum_{i<j}^N \frac{2\lambda(1 - M_{ij}) z_i z_j}{(z_i - z_j)^2} \right] \right] \Phi = E\Psi. \end{aligned} \quad (7.35)$$

(7.35)の[]を \mathcal{H}' とおくと、 \mathcal{H}' の第2項について

$$\frac{z_i + z_j}{z_i - z_j} \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} - z_j \frac{\partial}{\partial z_j} \right) = \frac{2z_i z_j}{z_i - z_j} \left(\frac{\partial}{\partial z_i} - \frac{\partial}{\partial z_j} \right) + z_i \frac{\partial}{\partial z_i} + z_j \frac{\partial}{\partial z_j} \quad (7.36)$$

となるから、 Φ についての固有値方程式は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'\Phi &= \left[\sum_{i=1}^N \left(z_i \frac{\partial}{\partial z_i} \right)^2 + \lambda(N-1) \sum_{i=1}^N z_i \frac{\partial}{\partial z_i} + 2\lambda \sum_{i<j}^N h_{ij} \right] \Phi \\ &= \epsilon \Phi. \end{aligned} \quad (7.37)$$

ただし、

$$h_{ij} = \frac{z_i z_j}{z_i - z_j} \left[\left(\frac{\partial}{\partial z_i} - \frac{\partial}{\partial z_j} \right) - \frac{1}{z_i - z_j} (1 - M_{ij}) \right]. \quad (7.38)$$

ϵ は、もともとのエネルギー固有値 E と次のような関係になっている。

$$\epsilon = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 (E - E_0). \quad (7.39)$$

系は並進対称性を持っているので、全運動量 K を持つ固有関数を考える。平面波の完全基底系を次のように用意する。

$$\phi_{\kappa, P} = \prod_i z_{p(i)}^{\kappa_i}, \quad \sum_{i=1}^N \kappa_i = K. \quad (7.40)$$

ここで、 $P = (p(1), p(2), \dots, p(N))$ は N 次のorder permutation, $\kappa = (\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_N)$ は整数の組である。一般性を失うことなく、 $\kappa_1 \geq \kappa_2 \geq \dots \geq \kappa_N$ とすることができる。 $\phi_{\kappa, P}$ に \mathcal{H}' を作用させると、

$$\mathcal{H}'\phi_{\kappa, P} = \sum_{i=1}^N [\kappa_i^2 + \lambda(N-1)\kappa_i] \phi_{\kappa, P} + 2\lambda \sum_{i<j} h_{p(i)p(j)} \phi_{\kappa, P}. \quad (7.41)$$

$h_{p(i)p(j)} \phi_{\kappa, P}$ について考える。

$$h_{p(i)p(j)} \phi_{\kappa, P} = \left(\phi_{\kappa, P} z_{p(i)}^{-\kappa_i} z_{p(j)}^{-\kappa_j} \right) \left(h_{p(i)p(j)} z_{p(i)}^{\kappa_i} z_{p(j)}^{\kappa_j} \right). \quad (7.42)$$

$\phi_{\kappa, P}$ の因子のうち、 $h_{p(i)p(j)}$ が作用する部分が(7.42)の右辺の2番目の()であり、 $h_{p(i)p(j)}$ が作用しない部分が(7.42)の右辺の1番目の()である。

しばらく $h_{p(i)p(j)} \rightarrow h_{ij}$, $z_{p(i)} \rightarrow z_i$, $z_{p(j)} \rightarrow z_j$ と表記することにして、(7.42)の右辺の2番目の()に着目する。

$$\begin{aligned} h_{ij} z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j} &= \frac{z_i z_j}{z_i - z_j} \left[\left(\frac{\partial}{\partial z_i} - \frac{\partial}{\partial z_j} \right) z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j} - \frac{1}{z_i - z_j} (z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j} - z_j^{\kappa_i} z_i^{\kappa_j}) \right] \\ &= \frac{z_i z_j}{z_i - z_j} \left[\kappa_i z_i^{\kappa_i-1} z_j^{\kappa_j} - \kappa_j z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j-1} - \frac{1}{z_i - z_j} (z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j} - z_j^{\kappa_i} z_i^{\kappa_j}) \right] \\ &= \frac{1}{z_i - z_j} \left[\kappa_i z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} - \kappa_j z_i^{\kappa_i+1} z_j^{\kappa_j} - \frac{z_i z_j}{z_i - z_j} (z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j} - z_j^{\kappa_i} z_i^{\kappa_j}) \right] \\ &= -\kappa_j z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j} + \frac{1}{z_i - z_j} \left[(\kappa_i - \kappa_j) z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} - \frac{z_i z_j}{z_i - z_j} (z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j} - z_j^{\kappa_i} z_i^{\kappa_j}) \right]. \end{aligned} \quad (7.43)$$

(7.43) の [] を $Q(z_i, z_j)$ とかくと,

$$Q(z_i, z_j) = (\kappa_i - \kappa_j) z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} - \frac{(z_i z_j)^{\kappa_i+1}}{z_i - z_j} (z_i^{\kappa_i - \kappa_j} - z_j^{\kappa_i - \kappa_j}). \quad (7.44)$$

恒等式

$$x^k - y^k = (x - y) \underbrace{(x^{k-1} + x^{k-2}y + \cdots + xy^{k-2} + y^{k-1})}_{k \text{項}}, \quad (k \geq 2) \quad (7.45)$$

を用いると, $\kappa_i - \kappa_j \geq 2$ のとき

$$\begin{aligned} Q(z_i, z_j) &= (\kappa_i - \kappa_j) z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} \\ &\quad - (z_i z_j)^{\kappa_i+1} \left(z_i^{\kappa_i - \kappa_j - 1} + z_i^{\kappa_i - \kappa_j - 2} z_j + \cdots + z_i z_j^{\kappa_i - \kappa_j - 2} + z_j^{\kappa_i - \kappa_j - 1} \right) \\ &= (\kappa_i - \kappa_j) z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} \\ &\quad - \underbrace{\left(z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} + z_i^{\kappa_i-1} z_j^{\kappa_j+2} + \cdots + z_i^{\kappa_i+2} z_j^{\kappa_i-1} + z_i^{\kappa_i+1} z_j^{\kappa_i} \right)}_{(\kappa_i - \kappa_j) \text{項}}. \end{aligned} \quad (7.46)$$

このとき, $Q(z_i, z_j)$ は z_i, z_j の $(\kappa_i + \kappa_j + 1)$ 次の同次多項式であり, かつ $Q(z_i, z_j) = 0$ であるから,

$$Q(z_i, z_j) = (z_i - z_j) \tilde{Q}(z_i, z_j) \quad (7.47)$$

とかける. すなわち, (7.46) から

$$\begin{aligned} Q(z_i, z_j) &= \left(z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} - z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} \right) + \left(z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} - z_i^{\kappa_i-1} z_j^{\kappa_j+2} \right) + \\ &\quad \cdots + \left(z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} - z_i^{\kappa_j+2} z_j^{\kappa_i-1} \right) + \left(z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} - z_i^{\kappa_j+1} z_j^{\kappa_i} \right) \\ &= z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} \left[\left(1 - \frac{z_j}{z_i} \right) + \left(1 - \frac{z_j^2}{z_i^2} \right) + \cdots + \left(1 - \frac{z_j^{\kappa_i - \kappa_j - 2}}{z_i^{\kappa_i - \kappa_j - 2}} \right) + \left(1 - \frac{z_j^{\kappa_i - \kappa_j - 1}}{z_i^{\kappa_i - \kappa_j - 1}} \right) \right] \\ &= z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j+1} (z_i - z_j) \left[\frac{1}{z_i} + \frac{z_i + z_j}{z_i^2} + \cdots + \frac{z_i^{\kappa_i - \kappa_j - 3} + z_i^{\kappa_i - \kappa_j - 4} z_j + \cdots + z_j^{\kappa_i - \kappa_j - 3}}{z_i^{\kappa_i - \kappa_j - 2}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{z_i^{\kappa_i - \kappa_j - 2} + z_i^{\kappa_i - \kappa_j - 3} z_j + \cdots + z_j^{\kappa_i - \kappa_j - 2}}{z_i^{\kappa_i - \kappa_j - 1}} \right] \\ &= (z_i - z_j) z_i^{\kappa_i-1} z_j^{\kappa_j+1} \sum_{l=1}^{\kappa_i - \kappa_j - 1} (\kappa_i - \kappa_j - l) \left(\frac{z_j}{z_i} \right)^{l-1} \\ &= (z_i - z_j) z_i^{\kappa_i} z_j^{\kappa_j} \sum_{l=1}^{\kappa_i - \kappa_j - 1} (\kappa_i - \kappa_j - l) \left(\frac{z_j}{z_i} \right)^l. \end{aligned} \quad (7.48)$$

なお, $\kappa_i - \kappa_j \geq 2$ 以外 (つまり $\kappa_i - \kappa_j = 1$ と $\kappa_i - \kappa_j = 0$) のときは, 計算してみると $Q(z_i, z_j) = 0$ になる.

h_{ij}, z_i, z_j を $h_{p(i)p(j)}, z_{p(i)}, z_{p(j)}$ に戻すと, 結局, (7.42) は次のようになる.

$$h_{p(i)p(j)} \phi_{\kappa, P} = -\kappa_j \phi_{\kappa, P} + R(\{z_{p(i)}\}). \quad (7.49)$$

ただし,

$$R = \begin{cases} \sum_{l=1}^{\kappa_i - \kappa_j - 1} (\kappa_i - \kappa_j - l) \left(\frac{z_{p(j)}}{z_{p(i)}} \right)^l \phi_{\kappa, P}, & \text{if } \kappa_j \geq \kappa_i + 2, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (7.50)$$

次に, \mathcal{H}' を行列表示するために, 基底の順序づけを定義する. まず, κ について, $\kappa = (\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_N)$, $\kappa' = (\kappa'_1, \kappa'_2, \dots, \kappa'_N)$ の2つの運動量の組があるとき, 初めて0でない差 $\kappa_i - \kappa'_i$ が正なら, $\kappa' < \kappa$ とかく. $N = 5$ の場合を例にとると, $(1, 1, 1, 1, 1) < (2, 1, 1, 1, 0) < (2, 2, 1, 0, 0)$ である. 同様に, permutation P について, $P = (p(1), p(2), \dots, p(N))$, $P' = (p'(1), p'(2), \dots, p'(N))$ の2つの組があるとき, 初めて0でない差 $p(i) - p'(i)$ が正なら, $P' < P$ とかく. 例えば, $(1, 2, 3, 4, 5) < (1, 3, 2, 4, 5) < (4, 1, 2, 3, 5)$ である. 実際には, 基底の各関数は κ と P によって特徴づけられる. $[\kappa' < \kappa]$, あるいは $[\kappa' = \kappa \text{ かつ } P' < P]$ のとき, $(\kappa', P') < (\kappa, P)$ とかく. (7.50) から, $(\kappa', P') > (\kappa, P)$ のとき, $\langle \kappa', P' | \mathcal{H}' | \kappa, P \rangle$ はゼロになる. したがって, 順序づけされた基底で \mathcal{H}' をかくと, 行列は上三角行列になる. \mathcal{H}' の対角要素から, すべてのエネルギー固有値が得られる.

$$\begin{aligned} \epsilon_{\kappa, P} &= \epsilon_{\kappa} = \sum_{i=1}^N [\kappa_i^2 + \lambda(N-1)\kappa_i] - 2\lambda \sum_{i < j} \kappa_j \\ &= \sum_{i=1}^N [\kappa_i^2 + \lambda(N+1-2i)\kappa_i]. \end{aligned} \quad (7.51)$$

この式からわかるように, 各エネルギー固有値は運動量分布 κ だけに依存し, permutation P に依存しない. 運動量分布関数 $\nu(k) = \sum_i \delta(\kappa_i, k)$ を導入すると, (7.51) は

$$\epsilon_{\kappa} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} k^2 \nu(k) + \frac{\lambda}{2} \sum_{k, k'} |k - k'| \nu(k) \nu(k'). \quad (7.52)$$

これで(2.66)が導出された. また, すべての固有関数は次に形でかける.

$$\Phi_{\kappa, P} = \phi_{\kappa, P} + \sum_{\kappa' (< \kappa)} \sum_{P'} a_{\kappa', P'} \phi_{\kappa', P'} \quad (7.53)$$

さて, エネルギー固有値と固有関数の一般的な表式(7.52), (7.53)は, 次のような場合に適用することができる.

- (a) $SU(\nu)$ フェルミオン, $\zeta = 1$
- (b) $SU(\nu)$ フェルミオン, $\zeta = -1$
- (c) $SU(\nu, \mu)$ モデル, $\zeta = 1$
- (d) $SU(\nu, \mu)$ モデル, $\zeta = -1$

それぞれの場合について, 固有関数の対称性を考慮して運動量分布関数 $\nu(k)$ を決め, エネルギー固有値と固有関数を求めればよい (この段階で, 波動関数の permutation の性質を考慮することになる). ここでは, 異方的 t - J モデルをマップするときに出てくる (d) の場合について考える.

SU(ν, μ) モデルというのは, SU(μ) フェルミオンと SU(ν) ボゾンから成る多粒子を扱うものである. $\zeta = -1$ のとき, absolute ground state は

$$\begin{aligned} \Psi_{0,-1} &= \prod_{i < j}^{N^B} \left| \sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \right|^\lambda \operatorname{sgn}(x_i - x_j) \prod_{i < j}^{N^F} \left| \sin \frac{\pi(y_i - y_j)}{L} \right|^\lambda \operatorname{sgn}(y_i - y_j) \\ &\quad \times \prod_i^{N^B} \prod_j^{N^F} \left| \sin \frac{\pi(x_i - y_j)}{L} \right|^\lambda \operatorname{sgn}(x_i - y_j) \end{aligned} \quad (7.54)$$

ここで, $N^B(N^F)$ はボゾン (フェルミオン) の数, $x_i(y_i)$ は i 番目のボゾン (フェルミオン) の座標である. N^B と N^F との和が全粒子数 N になる.

特に, 内部自由度のないボゾンとフェルミオン (SU(1,1) モデル) を考えることにする. $\Psi_{0,-1}$ は完全反対称であるから, ボゾンの運動量分布 $\nu^B(k)$ は 0 か 1 (フェルミオンの統計) をとり, フェルミオンの運動量分布 $\nu^F(k)$ は 0, 1, 2, \dots (ボゾンの統計) をとる. 最低エネルギーの分布は, $N^B = \text{odd}$ のとき

$$\nu^B(k) = \theta\left(\frac{N^B}{2} - |k|\right), \quad \nu^F(k) = N^F \delta(k, 0). \quad (7.55)$$

対応する波動関数は, $\Psi = \Psi_{0,-1} \Phi_g$ で与えられる. ただし,

$$\Phi_g = \prod_{i < j}^{N^B} \sin \frac{\pi(x_i - x_j)}{L} \quad (7.56)$$

である. $N^B = \text{even}$ のときは, 最高運動量が + 符号をとる場合と - 符号をとる場合があるので, 基底状態は 2 重縮退する.

7.3 $1/\sin^2(\pi r/N)$ の離散型フーリエ変換

$0 \leq k \leq N-1$ のとき,

$$\sum_{r=1}^{N-1} \frac{\exp(i2\pi kr/N)}{\sin^2(\pi r/N)} = 2 \left(k - \frac{N}{2}\right)^2 - \frac{N^2 + 2}{6} \quad (7.57)$$

が成立することを証明する. これは, $1/\sin^2(\pi r/N)$ の離散型フーリエ変換の式である.

証明の方針としては, 逆変換の式を求めておき, その式をフーリエ変換することによって, 欲しいものを得る.

まず, $S \equiv \sum_{k=0}^{N-1} k z^k$ を計算する. ただし, $z = \exp(i2\pi r/N)$ である.

$$\begin{aligned} (1-z)S &= z + z^2 + z^3 + \dots + z^{N-1} - (N-1)z^N \\ &= z \cdot \frac{1-z^N}{1-z} - Nz^N = -N. \end{aligned} \quad (7.58)$$

ここで, $z^N = 1$ を用いた. $r \neq 0$ ($z \neq 1$) のとき,

$$\begin{aligned} S &= \frac{N}{z-1} = \frac{N}{\exp(i2\pi r/N) - 1} = \frac{N \exp(-i\pi r/N)}{2i \sin(\pi r/N)} \\ &= \frac{N}{2i} \left(\cot \frac{\pi}{N} r - i \right). \end{aligned} \quad (7.59)$$

一方, $r=0$ のとき,

$$S = \sum_{k=0}^{N-1} k = \frac{N(N-1)}{2}. \quad (7.60)$$

したがって,

$$\sum_{k=0}^{N-1} k \exp\left(i\frac{2\pi}{N}kr\right) = \begin{cases} \frac{N(N-1)}{2}, & \text{for } r=0 \\ \frac{N}{2i} \left(\cot \frac{\pi r}{N} - i\right). & \text{for } r \neq 0 \end{cases} \quad (7.61)$$

(7.61) を両辺フーリエ変換する (つまり, 重み $\exp(-i2\pi k'r/N)$ を掛けて, r について 0 から $N-1$ まで和をとり, 全体を N で割る) と,

$$\text{左辺} = k', \quad (7.62)$$

$$\text{右辺} = \frac{1}{N} \left[\frac{N(N-1)}{2} + \sum_{r=1}^{N-1} \frac{N}{2i} \left(\cot \frac{\pi r}{N} - i\right) \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}k'r\right) \right]. \quad (7.63)$$

したがって,

$$k = \frac{N}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2i} \sum_{r=1}^{N-1} \left(\cot \frac{\pi r}{N}\right) \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}kr\right) - \frac{1}{2} (N\delta_{k,0} - 1) \quad (7.64)$$

$$\rightarrow \sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{i} \left(\cot \frac{\pi r}{N}\right) \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}kr\right) = 2k - N + N\delta_{k,0}. \quad (7.65)$$

次に, $T \equiv \sum_{k=0}^{N-1} k^2 z^k$ を計算する. $r \neq 0$ ($z \neq 1$) のとき,

$$\begin{aligned} (1-z)T &= z + 3z^2 + 5z^3 + \cdots + (2N-3)z^{N-1} - (N-1)^2 z^N \\ &= 2S - (N-1)^2 - (z + z^2 + z^3 + \cdots + z^{N-1}) \\ &= \frac{2N}{z-1} - (N-1)^2 - z \cdot \frac{1-z^{N-1}}{1-z} \\ &= \frac{2N}{z-1} - N^2 + 2N \end{aligned} \quad (7.66)$$

$$\rightarrow T = -\frac{2N}{(z-1)^2} + \frac{N^2 - 2N}{z-1}. \quad (7.67)$$

ここで,

$$\begin{aligned} (z-1)^{-2} &= [z^{1/2}(z^{1/2} - z^{-1/2})]^{-2} \\ &= z^{-1} \left(2i \sin \frac{\pi r}{N}\right)^{-2} = -\frac{1}{4z} \left(\sin \frac{\pi r}{N}\right)^{-2} \end{aligned} \quad (7.68)$$

であるから, (7.67) より,

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{(z-1)^2} [-2N + N^2(z-1) - 2N(z-1)] \\ &= -\frac{2Nz}{(z-1)^2} + \frac{N^2}{z-1} \\ &= \frac{N}{2} \left(\sin \frac{\pi r}{N}\right)^{-2} + \frac{N^2}{2i} \left(\cot \frac{\pi r}{N} - i\right). \end{aligned} \quad (7.69)$$

一方, $r=0$ のとき,

$$T = \sum_{k=0}^{N-1} k^2 = \frac{1}{6}N(N-1)(2N-1). \quad (7.70)$$

したがって,

$$\sum_{k=0}^{N-1} k^2 \exp\left(i\frac{2\pi}{N}kr\right) = \begin{cases} \frac{1}{6}N(N-1)(2N-1), & \text{for } r=0 \\ \frac{N}{2} \left[\left(\sin \frac{\pi r}{N}\right)^{-2} - Ni \cot \frac{\pi r}{N} - N \right], & \text{for } r \neq 0 \end{cases} \quad (7.71)$$

(7.71) をフーリエ変換すると,

$$k^2 = \frac{1}{N} \left\{ \frac{1}{6}N(N-1)(2N-1) + \sum_{r=1}^{N-1} \frac{N}{2} \left[\left(\sin \frac{\pi r}{N}\right)^{-2} - Ni \cot \frac{\pi r}{N} - N \right] \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}kr\right) \right\} \quad (7.72)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow k^2 &= \frac{1}{6}(N-1)(2N-1) \frac{1}{2} \sum_{r=1}^{N-1} \left(\sin \frac{\pi r}{N}\right)^{-2} \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}kr\right) \\ &\quad + \frac{N}{2} \sum_{r=1}^{N-1} \frac{1}{i} \left(\cot \frac{\pi r}{N}\right) \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}kr\right) - \frac{N}{2}(N\delta_{k,0} - 1). \end{aligned} \quad (7.73)$$

ここで, (7.65) を用いると,

$$k^2 = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^{N-1} \left(\sin \frac{\pi r}{N}\right)^{-2} \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}kr\right) + \frac{N}{2}(2k - N) + \frac{1}{6}(2N^2 + 1). \quad (7.74)$$

したがって,

$$\begin{aligned} \sum_{r=1}^{N-1} \left(\sin \frac{\pi r}{N}\right)^{-2} \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}kr\right) &= 2k^2 - N(2k - N) - \frac{1}{3}(2N^2 + 1) \\ \rightarrow \sum_{r=1}^{N-1} \frac{\exp(i2\pi kr/N)}{\sin^2(\pi r/N)} &= 2\left(k - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{N^2 + 2}{6}. \end{aligned} \quad (7.75)$$

つまり, $0 \leq k \leq N-1$ のとき, (7.75) が成立することが示された。

$1/\sin^2(\pi r/N)$ の離散型フーリエ変換の式は, k の全範囲に拡張することができる。一般に, $0 \leq k - pN \leq N-1$ (ただし, p は整数) のとき, (7.75) において k を $k - pN$ に置き換えればよい。 $\exp[i2\pi(k - pN)r/N] = \exp(i2\pi kr/N)$ を用いれば,

$$\sum_{r=1}^{N-1} \frac{\exp(i2\pi kr/N)}{\sin^2(\pi r/N)} = 2\left[k - \left(p + \frac{1}{2}\right)N\right]^2 - \frac{N^2 + 2}{6}. \quad (7.76)$$

(7.76) の左辺を $J(k)$ とおくと, $J(k)$ の k 依存性は図7-1のようになっている。図7-1は, $1/\sin^2$ の交換相互作用あるいは跳び移り積分を持つ格子モデルでの, 1粒子スペクトル (バンド) を表している。 $0 \leq k \leq N-1$ の範囲では, 波数とエネルギーの原点をずらした自由粒子のスペクトル (破線) と一致する。ブリルアン・ゾーンは $-N/2 \leq k \leq N/2 - 1$ の領域である。

参考文献

- [1] Y. Endoh, G. Shirane, R. J. Birgeneau, P. M. Richards and S. L. Holt,
Phys. Rev. Lett. **32**, 170 (1974).
- [2] I. U. Heilmann, G. Shirane, Y. Endoh, R. J. Birgeneau and S. L. Holt,
Phys. Rev. **B18**, 3530 (1978).
- [3] M. T. Hutchings, H. Ikeda and J. M. Milne, J. Phys. **C12**, L739 (1979).
- [4] S. K. Satija, J. D. Axe, G. Shirane, H. Yoshizawa and K. Hirakawa,
Phys. Rev. **B21**, 2001 (1980).
- [5] S. E. Nagler, D. A. Tennant, R. A. Cowley, T. G. Perring and S. K. Satija,
Phys. Rev. **B44**, 12361 (1991).
- [6] D. A. Tennant, T. G. Perring, R. A. Cowley and S. E. Nagler,
Phys. Rev. Lett. **70**, 4003 (1993).
- [7] S. Ma, C. Broholm, D. H. Reich, B. J. Sternlieb and R. W. Erwin,
Phys. Rev. Lett. **69**, 3571 (1992).
- [8] H. A. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931).
- [9] L. Hulthen, Arkiv. Math. Astro. Fys. **26A**, No. 11 (1938).
- [10] J. des Cloizeaux and J. J. Pearson, Phys. Rev. **128**, 2131 (1962).
- [11] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 321 (1966).
- [12] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 327 (1966).
- [13] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. **151**, 258 (1966).
- [14] J. des Cloizeaux and M. Gaudin, J. Math. Phys. **7**, 1384 (1966).
- [15] E. H. Lieb and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [16] B. Sutherland, Phys. Rev. **B12**, 3795 (1975).
- [17] P. Schlottmann, Phys. Rev. **B36**, 5177 (1987).
- [18] P. -A. Bares and G. Blatter, Phys. Rev. Lett. **64**, 2567 (1990).
- [19] P. -A. Bares, G. Blatter and M. Ogata, Phys. Rev. **B44**, 130 (1991).
- [20] P. Wiegmann, Phys. Lett. **80A**, 163 (1980).

- [21] N. Kawakami and A. Okiji, Phys. Lett. **86A**, 483 (1981).
- [22] N. Andrei, Phys. Rev. Lett. **45**, 379 (1980).
- [23] P. Wiegmann, J. Phys. C**14**, 1463 (1981).
- [24] B. Sutherland, Phys. Rev. A**4**, 2019 (1971).
- [25] B. Sutherland, Phys. Rev. A**5**, 1372 (1972).
- [26] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **60**, 635 (1988).
- [27] B. S. Shastry, Phys. Rev. Lett. **60**, 639 (1988).
- [28] Y. Kuramoto and H. Yokoyama, Phys. Rev. Lett. **67**, 1338 (1991).
- [29] N. Kawakami, Phys. Rev. B**46**, 1005 (1992).
- [30] N. Kawakami, Phys. Rev. B**46**, 3191 (1992).
- [31] H. Kiwata and Y. Akutsu, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 1441 (1992).
- [32] Z. N. C. Ha and F. D. M. Haldane, Phys. Rev. B**46**, 9359 (1992).
- [33] N. Kawakami and S. -K. Yang, Phys. Rev. Lett. **67**, 2493 (1991).
- [34] K. Hikami and M. Wadati, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 469 (1993).
- [35] K. Hikami and M. Wadati, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 4203 (1993).
- [36] H. Ujino, M. Wadati and K. Hikami, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 3035 (1993).
- [37] A. P. Polychronakos, Phys. Rev. Lett. **69**, 703 (1992).
- [38] F. Gebhard and A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **68**, 244 (1992).
- [39] F. Gebhard and A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. B**49**, 10926 (1994).
- [40] Y. Kato and Y. Kuramoto, Phys. Rev. Lett. **74**, 1222 (1995).
- [41] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **66**, 1529 (1991).
- [42] D. F. Wang, J. T. Liu and P. Coleman, Phys. Rev. B**46**, 6639 (1992).
- [43] Z. N. C. Ha and F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **73**, 2887 (1994).
- [44] 戸川 隼人：マトリクスの数値計算（オーム社，1971）
- [45] 西森 秀稔：TITPACK Ver.2.

表1-1: 物理量の厳密な計算

Haldane-Shastry モデルと長距離相互作用のある超対称 t - J モデルにおけるエネルギースペクトルの縮退度は、数値計算による経験則からわかっている。また、有限温度での静的相関関数および動的相関関数は、どのモデルにおいても厳密に求められていない。

	基底状態	エネルギー スペクトル	熱力学	絶対零度での 静的相関関数	絶対零度での 動的相関関数
Sutherland モデル	○	○	○	○	○
Haldane-Shastry モデル	○	○	○	○	○
多成分 Sutherland モデル	○	○	○	×	×
長距離相互作用のある 超対称 t - J モデル	○	○	○	○	×

表2-1: 異方的 t - J モデルにおける基底状態の縮退

N はサイト数, M は \downarrow スピンの数, Q はホール数, J_s, J_h は \downarrow スピン, ホールの一様な運動量である。 $N = \text{even}$ とする。

	M	Q	J_s	J_h	基底状態での J_s, J_h	基底状態の 縮退の有無
(α)	$\text{even} \geq 2$	odd	half-integer	integer	$J_s = \frac{N}{2} \pm \frac{1}{2}, J_h = \frac{N}{2}$	2重縮退
(β)	$\text{even} \geq 2$	$\text{even} \geq 2$	integer	half-integer	$J_s = \frac{N}{2}, J_h = \frac{N}{2} \pm \frac{1}{2}$	2重縮退
(γ)	odd	$\text{even} \geq 2$	integer	integer	$J_s = J_h = \frac{N}{2}$	縮退なし
(δ)	odd	odd	half-integer	half-integer	$J_s = J_h = \frac{N}{2} \pm \frac{1}{2}$	2重縮退
(ϵ)	0	odd	定義されず	integer	$J_h = \frac{N}{2}$	縮退なし
(ζ)	0	$\text{even} \geq 2$	定義されず	half-integer	$J_h = \frac{N}{2} \pm \frac{1}{2}$	2重縮退
(η)	odd	0	integer	定義されず	$J_s = \frac{N}{2}$	縮退なし
(θ)	$\text{even} \geq 2$	0	integer	定義されず	$J_s = \frac{N}{2}$	縮退なし

表4-1: イジング極限での解析解と数値計算

	解析解の表式 (4.1)	イジングモデルでの 数値計算
$N=10, M=5$	-2.097290935	-2.097290935
$N=10, M=4$	-1.372409700	-1.455766649
$N=10, M=3$	-0.403538426	-0.419458187
$N=10, M=2$	+0.912938407	+0.912938407

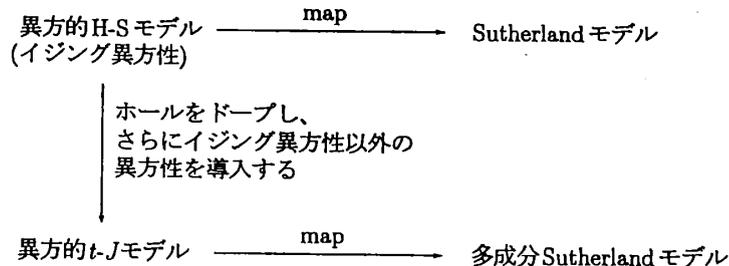


図1-1: 厳密解を求める方針

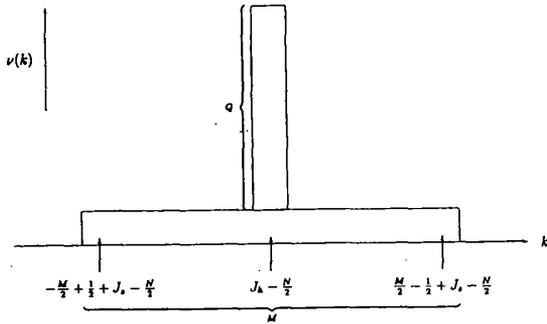


図2-1: ϕ に関する \downarrow スピン (フェルミオン) とホール (ボゾン) の基底状態の運動量分布

N はサイト数, M は \downarrow スピンの数, Q はホールの数, J_s, J_h は \downarrow スピン, ホールの一様な運動量である. k は \downarrow スピンあるいはホールの運動量, $\nu(k)$ は運動量分布である.

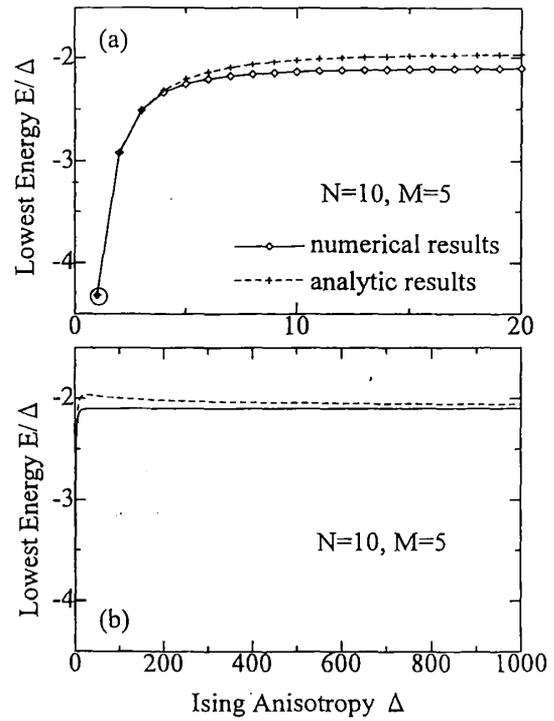


図4-1: 異方的H-Sモデルの基底エネルギー—— $S_{\text{tot}}^z = 0$ の場合

○をつけたところは, 厳密解が求められる Δ である.

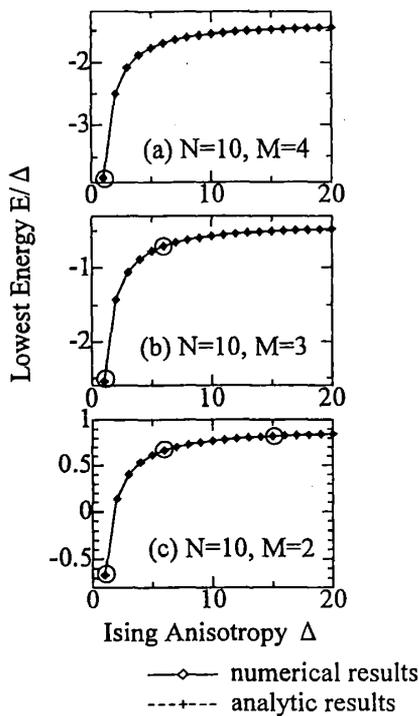


図4-2: 異方的H-Sモデルの基底エネルギー—— $S_{\text{tot}}^z \neq 0$ の場合

○をつけたところは, 厳密解が求められる Δ である.

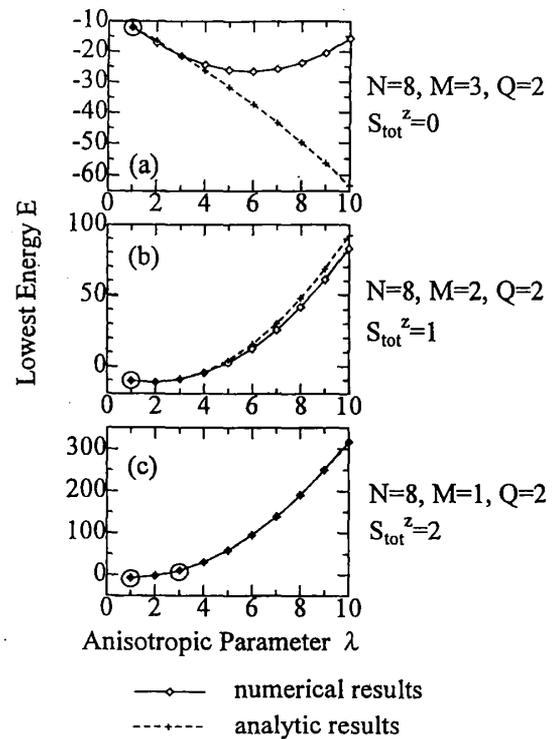


図4-3: 異方的t-Jモデルの基底エネルギー

○をつけたところは, 厳密解が求められる λ である.

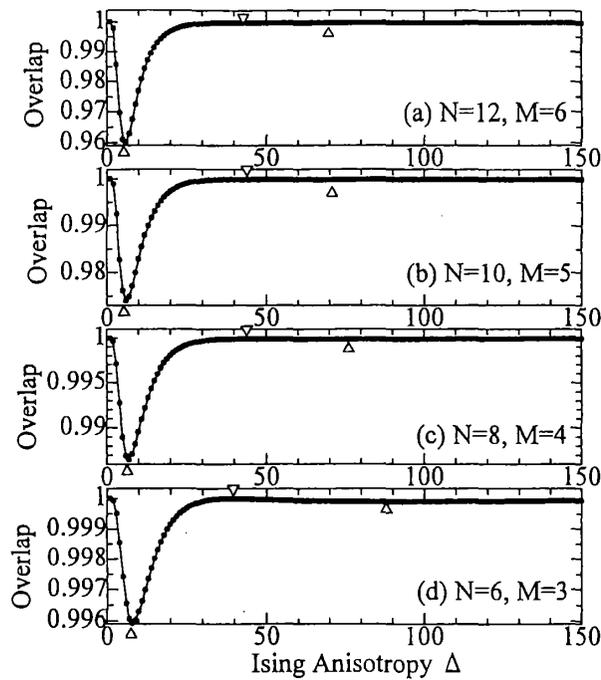


図4-4: 異方的H-Sモデルの重なり積分— $S_{\text{tot}}^z = 0$ の場合

重なり積分のイジング異方性に対する極小を Δ , 極大を ∇ で示している. それぞれの場合における極大, 極小の Δ の位置は, (a) $\Delta = 6, \Delta = 42, \Delta = 69$; (b) $\Delta = 6, \Delta = 43, \Delta = 71$; (c) $\Delta = 7, \Delta = 43, \Delta = 76$; (d) $\Delta = 8, \Delta = 39, \Delta = 88$ である.

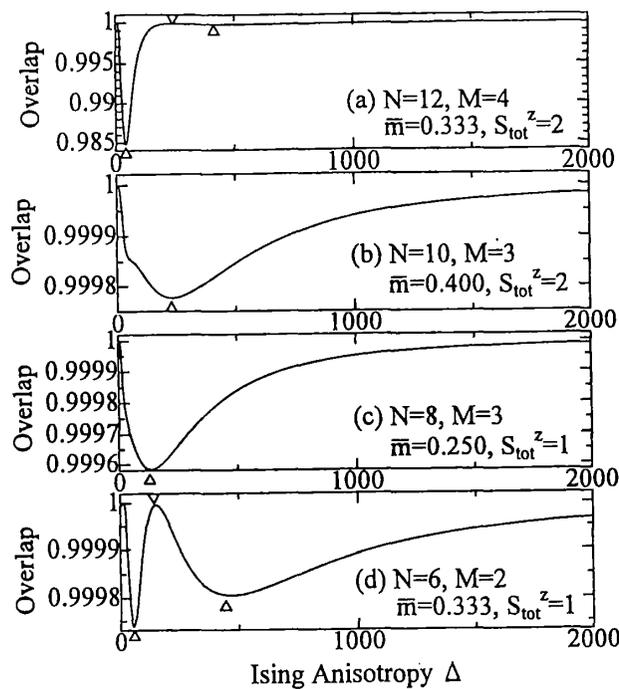


図4-5: 異方的H-Sモデルの重なり積分— $S_{\text{tot}}^z \neq 0$ の場合

\bar{m} はスピン分極密度で, $\bar{m} \equiv (N - 2M)/N$ である. 重なり積分のイジング異方性に対する極小を Δ , 極大を ∇ で示している. それぞれの場合における極大, 極小の Δ の位置は, (a) $\Delta = 41, \Delta = 242, \Delta = 434$; (b) $\Delta = 232$; (c) $\Delta = 136$; (d) $\Delta = 55, \Delta = 152, \Delta = 469$ である.

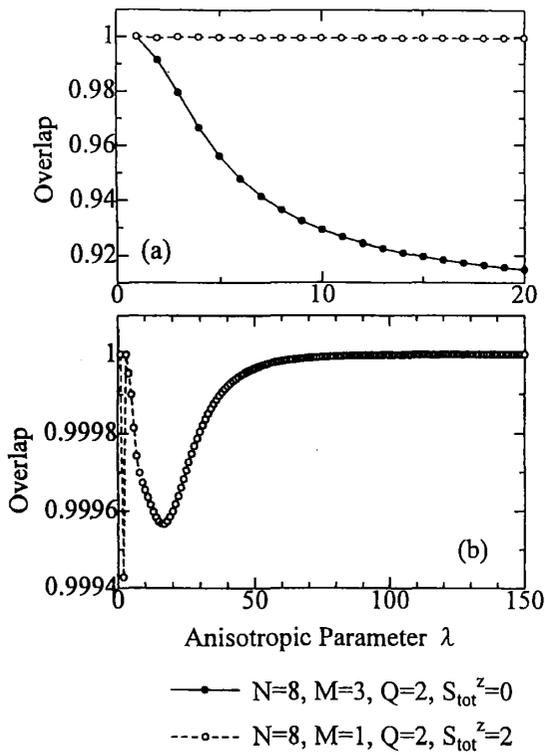


図4-6: 異方的 t - J モデルの重なり積分

(b)の場合における極小の λ の位置は、 $\lambda = 2$ と $\lambda = 16$ である。

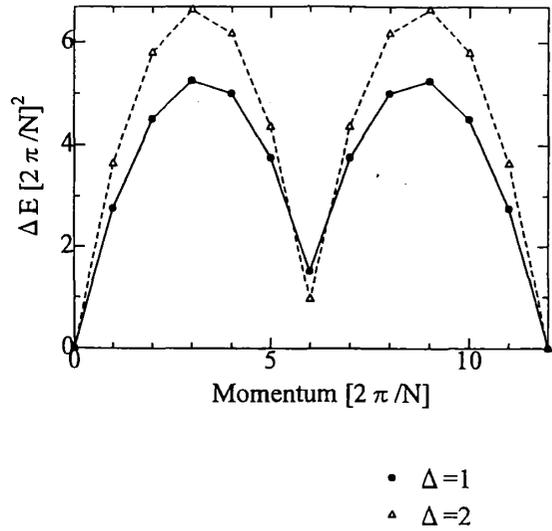


図4-7: 異方的H-Sモデルの励起スペクトル ($\Delta=1, 2$)

$N = 12$ の場合である。

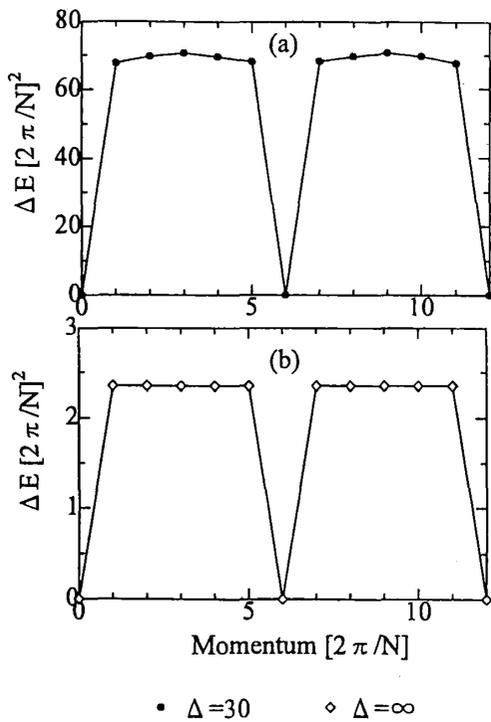


図4-8: 異方的H-Sモデルの励起スペクトル ($\Delta=30, \infty$)

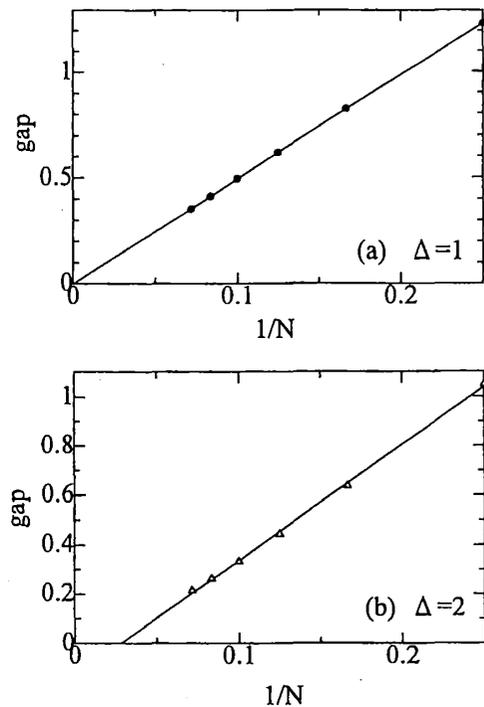


図4-9: 異方的H-Sモデルにおけるgapのサイズ依存性 ($\Delta=1, 2$)

$N = 12$ の場合。 $\Delta = \infty$ は、 $1/\sin^2$ 型イジングモデルで計算したものである。

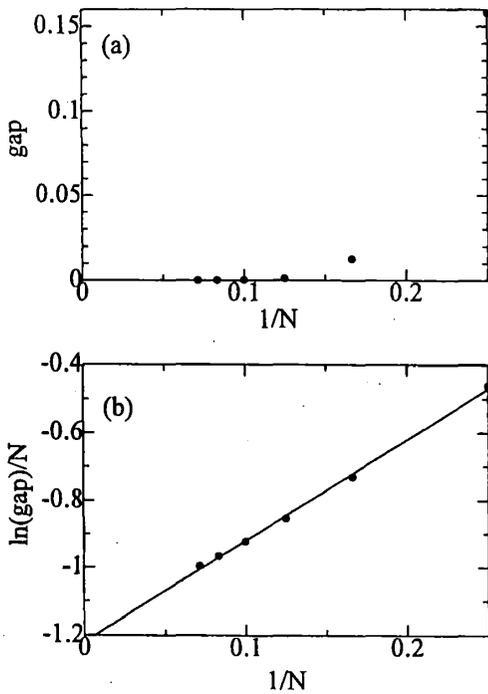


図4-10: 異方的H-Sモデルにおけるgapのサイズ依存性 ($\Delta=30$)

縦軸は, (a) 線形尺度; (b) 対数尺度である.

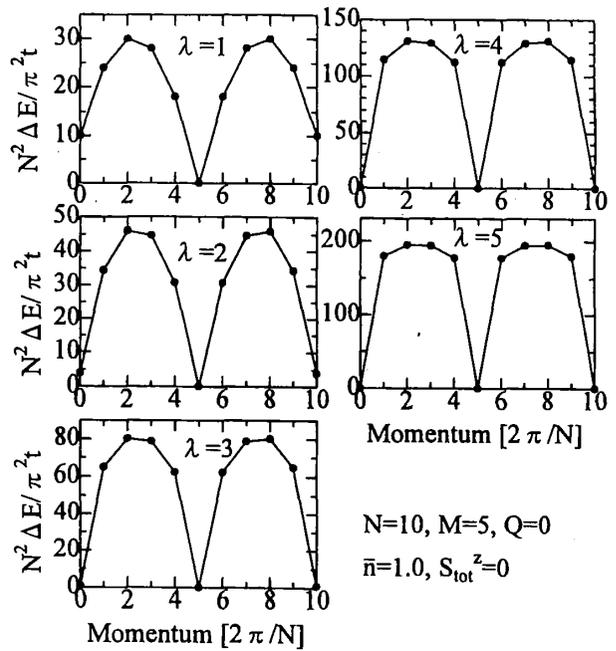


図4-11: 異方的 t - J モデルの励起スペクトル ($\bar{n}=1.0$)

\bar{n} は電子密度で, $\bar{n} \equiv (N-Q)/N$ である.

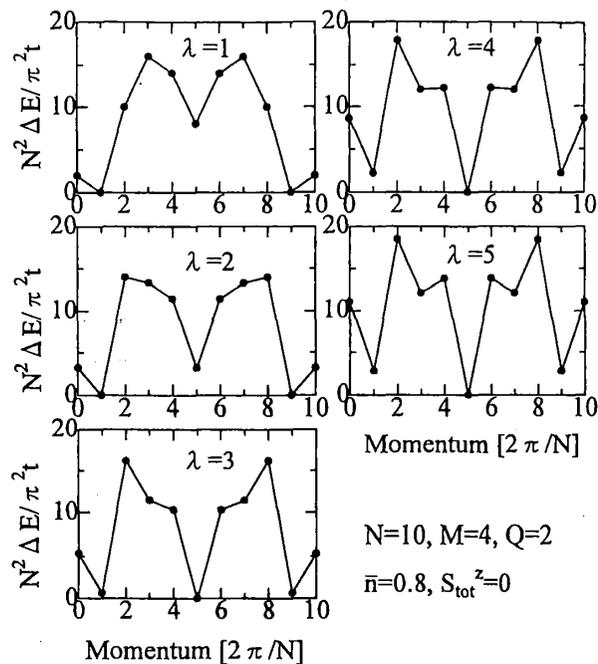


図4-12: 異方的 t - J モデルの励起スペクトル ($\bar{n}=0.8$)

\bar{n} は電子密度で, $\bar{n} \equiv (N-Q)/N$ である.

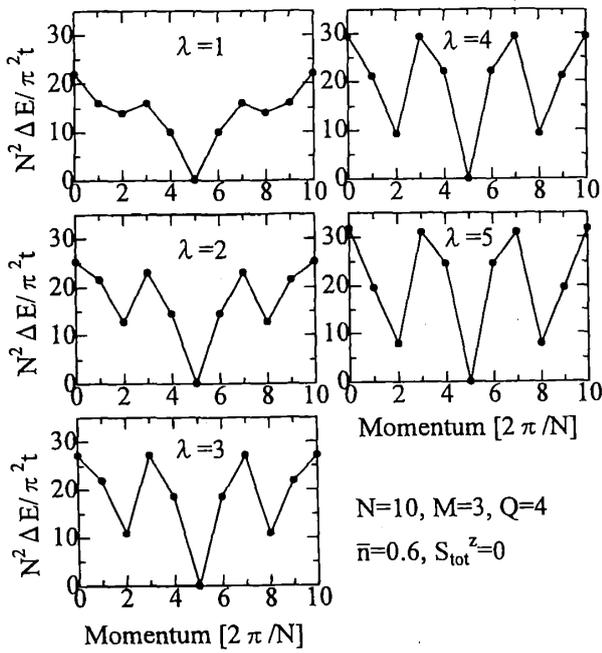


図4-13: 異方的t-Jモデルの励起スペクトル ($\bar{n}=0.6$)

\bar{n} は電子密度で, $\bar{n} \equiv (N - Q)/N$ である.

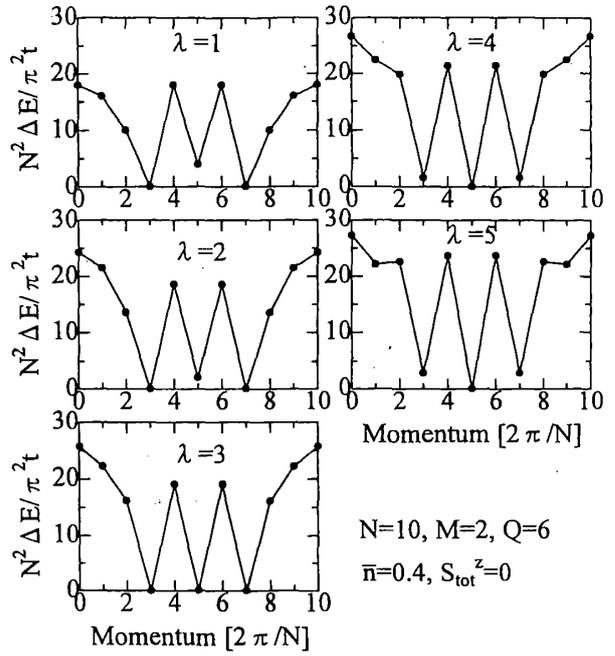


図4-14: 異方的t-Jモデルの励起スペクトル ($\bar{n}=0.4$)

\bar{n} は電子密度で, $\bar{n} \equiv (N - Q)/N$ である.

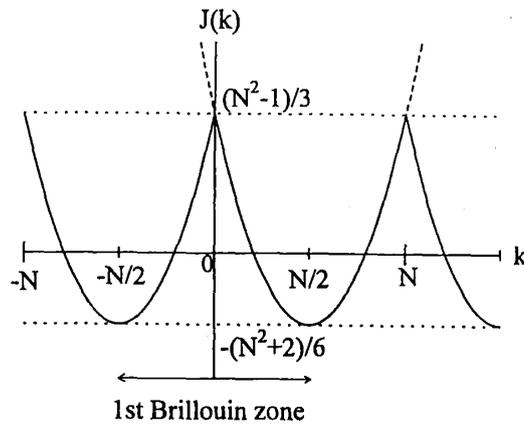


図7-1: 1粒子スペクトル $J(k)$ の k 依存性

$0 \leq k \leq N-1$ の範囲では, 波数とエネルギーの原点をずらした自由粒子のスペクトル (破線) と一致する.