

一次元量子スピンの

ダイナミックスへの試み

東大物性研 今田正俊

§1. はじめに

一次元量子系の統計力学の厳密な取り扱いについて、今までもかなり独立に発展してきた、いくつかの方法の間の関連が、最近になってかなりはっきりしてきている。一番顕著な例は、ベータ仮説による方法と、量子論的な逆散乱法の間の関係である。非線型シュレーディンガー方程式や量子スピン系のような、相互作用する一次元量子多体系の厳密な固有状態を求める試みは、歴史的にはベータ仮説による方法の方が早くから行なわれている。ベータ仮説による方法はいわばオー量子化の形で固有状態を求めるのに対して、最近になって発展してきた量子逆散乱法では、対応する生成消滅演算子を定義して、オニ量子化による定式化になっている。

熱力学的な量を求める方法は、今のところベータ仮説を用いる方法の方が有用であり、量子逆散乱法は新たな知見や、より簡単な方法を与えるような例はほとんどない。ベータ仮説を用いて、はじめて熱力学を議論したのはYang-Yangである。彼らはベータ仮説で導入される擬似運動量 x の複素平面上で、粒子と空孔という概念を導入した。粒子と空孔の分布関数、 $\rho(x)$ と $\rho^h(x)$ に対して、自由エネルギー極小の条件を課すと、 $\varepsilon(x) \equiv T \ln[\rho^h(x)/\rho(x)]$ に対する、非線型な積分方程式が得られる。これを解けば、自由エネルギーや比熱のような量は $\varepsilon(x)$ を使ってあらわすことができる。Yang-Yangは δ 関数型の相互作用をするボーズ粒子系を考えたが、Takahashi-Suzukiは、次式で与えられるXYZスピン系

$$\mathcal{H} = -2 \sum_i (J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z) \quad (1)$$

に対しても同様の方法が使えることを示した。

XYZスピン系の相関関数については、今のところ、ほとんど何もわかっていない。BaxterはXYZスピン系に対して、基底状態($T=0$)での擬似運動量平面での粒子と空孔の分布を求め、基底状態のエネルギーを計算した。Johnson-Krinsky-McCoyは、基底状態での粒子と空孔の分布からいくつかの粒子を空孔の位置に移動することによって素励起を定義して、その励起エネルギーを求めた。有限温度での素励起は、与えられた温度での平衡状態における粒子と空孔の分布からいくつかの粒子を空孔の位置に移動すれば得られる。有限温度で波数(位置)と周波数(時間)の両方に依存する相関関数は、動的構造因子

$$S_{ii}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{i,f} |\langle f | S_i^i(\mathbf{q}) | i \rangle|^2 e^{-\beta E_i} \delta(E_f - E_i - \omega) \quad (2)$$

により与えられる。但し $|i\rangle$ は固有値 E_i を持つ、ハミルトニアン $\mathcal{H}$ の固有状態、 $S_i^i(\mathbf{q})$ は波数 $\mathbf{q}$ の i 成分スピンオペレーター、また Z は分配関数である。(2)式はYang-Yangの差分法的考察を用いれば、

$$S_{ii}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_f |\langle f | S_i^i(\mathbf{q}) | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_{eq} - \omega) \quad (3)$$

と書いてもよい。但し $|eq\rangle$ は平衡状態における粒子と空孔の分布で与えられる、ある代表的な状態である。相関関数を求めるためには、有限温度で、平衡状態からの励起エネルギースペクトルと、スピン演算子に関する行列要素 $\langle f | S_i^i(\mathbf{q}) | eq \rangle$ を

知らなければならぬ。ここでは最初に Takahashi-Suzuki の方法を用いて、有限温度でいくつかの素励起について励起スペクトルを求めて、温度依存性を議論しよう。次に、行列要素 $\langle f | S^{(g)} | g \rangle$ を求めるために、量子逆散乱法を使う試みについて論じる。

§2. 有限温度励起スペクトル

平衡状態によって与えられる粒子と空孔の分布から、いくつかの粒子を空孔の位置に移動させると、有限温度での素励起を作ることはできる。このとき移動させなかった残りの粒子も、実際には相互作用の結果、周期的境界条件を満たすように、わずかなずつ擬似運動量の値がずれる。この back flow の効果も考慮に入れて、素励起による全エネルギーと運動量の変化を求めれば、励起に対する分散曲線を描くことができる。一般的に、全運動量の変化が 0 であるような、エネルギーギャップ Δ の温度依存性を調べてみると、高温でエネルギーギャップは、温度に比例している。しかしながら、こうして求められた分散曲線を通常の素励起の thermal renormalization の描像と単純に同一視はできない。有限温度での相関関数は、1つや2つの素励起によって決まるものではなく、温度によって決まるものの中に素励起のエネルギースペクトルが稠密に分布することによって、動的構造因子が巾を拵てくると予想される。どのタイプの素励起によって、動的構造因子のピークが与えられるのかを簡単に決める方法は、今後に残された課題である。

§3. スピン系に対する Gel'fand Levitan 法

Bethe Ansatz を用いて行列要素 $\langle f | S^{(g)} | i \rangle$ を求めることには、まだ誰も成功していない。ここでは量子逆散乱法を用いてオニ量子化で考えてみる。行列要素を計算するためには、スピン演算子 $S^{(g)}$ をオニ量子化で得られる生成消滅演算子を使ってあらわすことが必要となる。これは逆散乱問題の言葉でいえば、Gel'fand-Levitan の問題を解くことに相当する。簡単のために Ising-like な XXZ model (1) 式で $J_y = J_z$ かつ $|J_y| < |J_x|$ の場合を考えよう。量子逆散乱法によれば、系の固有状態を決める生成消滅演算子は、逆散乱問題で導入される散乱データを使ってあらわすことができる。非線型シュレーディンガー方程式のときには、生成演算子 $R^*(x)$ 及び消滅演算子 $R(x)$ が次の性質を満たすことを示せる。

$$\begin{aligned} [H, R^*(x)] &= x^2 R^*(x), & R^*(x_1) R^*(x_2) &= S(x_2, x_1) R^*(x_2) R^*(x_1) \\ R(x_1) R^*(x_2) &= S(x_1, x_2) R^*(x_2) R(x_1) + 2\pi \delta(x_1 - x_2) \end{aligned} \quad (4)$$

ここで $S(x_1, x_2)$ は非線型シュレーディンガー方程式の二体散乱の S 行列、 x_1, x_2 は擬似運動量をあらわすパラメタであり、 H はハミルトニアンである。このように、固有状態の生成消滅演算子はフェルミオンでもボゾンでもないような交換関係を満たしている。 XXZ model の場合にも同様の関係が成り立っていて、生成消滅演算子間の交換関係は (4) で

$$S(x_1, x_2) = \frac{\sin(x_1 - x_2 + 2\gamma)}{\sin(x_1 - x_2 - 2\gamma)}$$

とすればよい。但し γ は $\gamma = i\alpha$, $J_x = J_z \cosh(2\gamma)$ によって決まる量で、Baxter の導入したパラメタである。非線型シュレーディンガー方程式に対する Gel'fand Levitan 問題に比べて XXZ 系の方が事情は複雑であるが、基本的には XXZ 系に対して、Gel'fand Levitan の方法によって、逆問題を解くことができる。途中の計算は省略して結果だけを記すと、例えば $S_n^- = S_n^+ + i S_n^1$ で定義される演算子は

$$S_n^- = \frac{1}{4i \sin \gamma \cos \gamma e^{i\gamma}} \left[\int_{-\pi}^{\pi} d\nu' e^{i\nu'} R^*(\nu') \left(\frac{\sin(\nu' - \gamma)}{\sin(\nu' + \gamma)} \right)^n + \frac{1}{2} \sum_s e^{i\nu_s^{(0)}} R_s^* \left(\frac{\sin(\nu_s^{(0)} - \gamma)}{\sin(\nu_s^{(0)} + \gamma)} \right)^n \right]$$

+ ... (R* の高次の項) ...

という形にあらわされる, 但しここで添字 s は複素擬似運動量をもった束縛状態をあらわしている。R* の高次の項は, Gel'fand Levitan 方程式に対する逐次代入により, 原理的には任意の次数まで求めることができるが, 任意の次数に対するコンパクトな表式はまだ求められていない。

XYZ モデルの動的相関関数を求めることは大変困難な問題であるが, 完全可積分系での平衡状態からの擾乱起と相関関数における役割は重要な問題であり, 今後の発展が期待される。