物理学特別講義第二
その 3

鈴木　淳史

静岡大学 理学部

２０１７年 １０月　中央大学

可積分系の熱力学

QTM

NLIE

統計力学の方法

有限温度多体系の性質を知る。

- ミクロカノニカル集団　孤立系
- カノニカル集団　　エネルギーのやり取りをする系

統計力学の方法

有限温度多体系の性質を知る。

- ミクロカノニカル集団　孤立系
- カノニカル集団　　　エネルギーのやり取りをする系

- ミクロカノニカル集団　分配関数に関する変分原理。most dominant term をとりだす。
- カノニカル集団　　　分配関数を「全部足す」

統計力学の方法

有限温度多体系の性質を知る。

- ミクロカノニカル集団　孤立系
- カノニカル集団　　エネルギーのやり取りをする系

- ミクロカノニカル集団　分配関数に関する変分原理。most dominant term をとりだす。
- カノニカル集団　　分配関数を「全部足す」

一次元可積分量子系では

- ミクロカノニカル集団　$\sim$ Thermodynamic Bethe ansatz
- カノニカル集団　　$\sim$ Quantum Transfer Matrix (QTM)

平衡状態での物理量の期待値の評価にはカノニカル集団の方が向いているので、以下 QTM による定式化を考える。

分配関数

分配関数の評価

1. 固有値問題を解く $\mathcal{H}\Phi_i = E_i\Phi_i$
2. 足しあげる $Z = \sum_{i=1}^{2^L} \mathrm{e}^{-\beta E_j}$

両方とも $L \gg 1$ で非常に困難。
とくに後者は $|\Delta| < 1$ で $\Delta E \sim O(L^{-1})$ であるから、無限項の和が必要なため難しい。

Theorem (M. Suzuki (76))

1 次元 有限温度（T）量子系 $=$ *2* 次元 有限サイズ N　古典統計系

証明には指数関数の定義の演算子版を用いる。

$$\lim_{N\to\infty}(1+\frac{\widehat{X}}{N})^N = \mathrm{e}^{\widehat{X}}$$

以下では最も洗練されたバージョン (Klümper '92) でこれを利用する。
頂点模型であらわれた spectral parameter u が

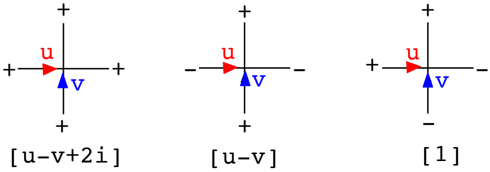
$$u = -\frac{1}{TN}$$

となり有限温度と有限サイズの橋渡しをすることになる。

- 計算途中で $N\to\infty$ を不用意にとると温度依存性も消える。
- 計算後 $N\to\infty$（ Trotter 極限) としなければ物理的結果は得られない。

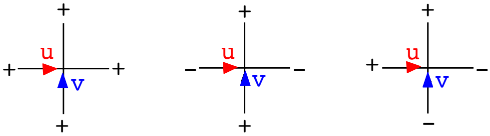
example of 2D classical system

6 頂点模型, $R^{\vee}$ $([x] := \frac{\sin \gamma x}{\sin \gamma})$



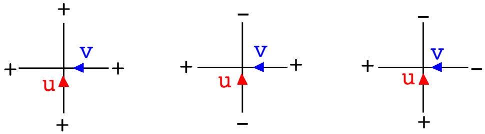
example of 2D classical system

6 頂点模型, $R^{\vee}$ $([x] := \frac{\sin\gamma x}{\sin\gamma})$



[u−v+2i]　[u−v]　[1]

または回転した図形を導入する。 $\tilde{R}$



[u−v+2i]　[u−v]　[1]

Baxter-Lüscher relation

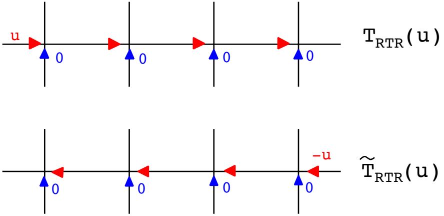
保存量で議論した通り

$$R^{\vee}_{i,i+1}(u,0) \sim 1 + u h_{i,j+1} \qquad \longrightarrow \mathcal{H} = \sum_i h_{i,i+1}$$

$$\Uparrow \qquad\qquad\qquad \Uparrow$$

2D classical　　1D quantum

2 種類の転送行列 $T_{\mathrm{RTR}}(u), \tilde{T}_{\mathrm{RTR}}(u)$, を図のように定義する。



2D system I

$|u| \ll 1$ で次が成立

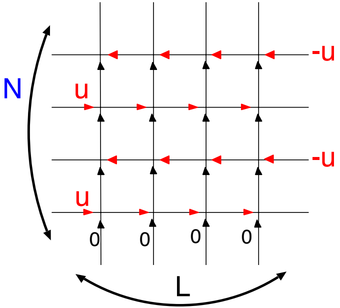
$$\begin{aligned} T_{\mathrm{RTR}}(u) &\sim e^{iP}(1+u\mathcal{H}) \\ \tilde{T}_{\mathrm{RTR}}(u) &\sim (1+u\mathcal{H})e^{-iP} \\ \mathcal{T}_{\mathrm{RTR}}(u) &:= \tilde{T}_{\mathrm{RTR}}(u)\,T_{\mathrm{RTR}}(u) \\ &\sim (1+u\mathcal{H})^2 \end{aligned}$$

- 指数関数の定義応用：

$$Z_{\mathrm{2D}}(N,L) = \mathrm{tr}\mathcal{T}_{\mathrm{RTR}}(u)^{\frac{N}{2}}$$

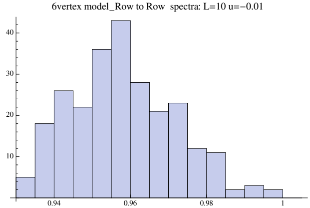
$$\sim \mathrm{tr}(1+u\mathcal{H})^N \qquad u = -\frac{\beta}{N}$$

$$\sim \mathrm{tr}e^{-\beta\mathcal{H}} = Z_{\mathrm{1Dquantum}}(\beta, L)$$



2D system II

$\mathcal{T}_{\mathrm{RTR}}(u)\Psi_j = \lambda_j \Psi_j$ とする。
$\frac{\lambda_j}{\lambda_0}$ の分布.



このとき $\Delta_j = O(1)$ に対して

$$\frac{\lambda_j}{\lambda_0} \sim \mathrm{e}^{-\frac{|u|}{L}\Delta_j}$$

$u = -\frac{\beta}{N}$ であるから

$$\left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0}\right)^N \sim \mathrm{e}^{-\frac{\beta\Delta_j}{L}} \sim O(1)$$

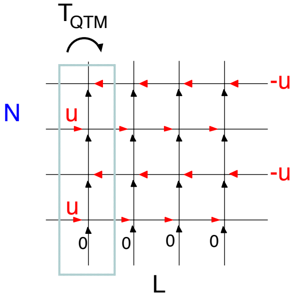
$$\mathrm{tr}\mathcal{T}_{\mathrm{RTR}}^N(u) = \lambda_0^N \Bigg(1 + \overbrace{\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right)^N + \cdots}^{\text{all relevant}}\Bigg)$$

よって ∞ 項の和が 必要

$$Z_{\text{1D quantum}}(\beta) = \mathrm{tr}\mathcal{T}_{\mathrm{RTR}}^N(u)$$

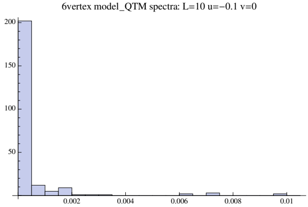
QTM I

Crucial idea
物理的な空間に作用する T_{RTR} でなく 水平方向に伝搬していく "トロッター空間" に働く T_{QTM} を考える。



$$Z_{\mathrm{2D}}(N, L) = \mathrm{tr}\, T_{\mathrm{QTM}}(u)^L$$
$$= Z_{\mathrm{1Dquantum}}(\beta, L)$$

$T_{\mathrm{QTM}}(u)$ の固有値 $\frac{\Lambda_j}{\Lambda_0}$ の分布.



QTM II

$\beta \gg 1$ のとき次が示せる。

$$\frac{\Lambda_j}{\Lambda_0} \sim \frac{\Delta_j}{\beta}$$

よって

$$Z_{\text{1Dquantum}}(\beta, L) \sim \Lambda_0^L \left(1 + \left(\frac{\Lambda_1}{\Lambda_0}\right)^L + \cdots\right) \sim \Lambda_0^L$$

for $L \to \infty$. 和はいらない

Theorem (M. Suzuki)

1 サイトあたりの自由エネルギーは $T_{\text{QTM}}(u)$ の最大固有値で与えられる。

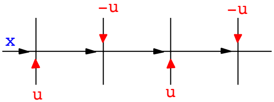
$$\boxed{f = -\frac{1}{\beta} \ln \Lambda_0}$$

しかし $N \to \infty$ でベーテ根は原点近傍に集積し、非常に singular で取り扱い辛い。

commuting QTM family

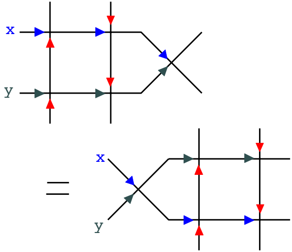
Lemma (Klümper)

QTM は可換な *1* パラメーターファミリー $T_{\mathrm{QTM}}(u,x)$ をなす。



$$[T_{\mathrm{QTM}}(u,x), T_{\mathrm{QTM}}(u,y)] = 0$$

QTM は RTR と同じ R 行列で交換する。

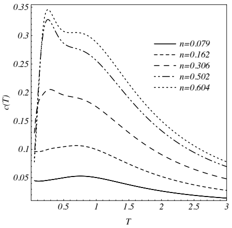


よって QISM は T_{RTR} のものと同じ である。

analyticity of QTM

- Idea

$\Lambda_0(x)$ は任意の N に対して x 空間でよい解析性 をもつ。　これにより $\Lambda_0(x)$ が決まる。



解析性の使い方。

- Use fusion hierarchy

  (Klümper, Ann. Physik 1 (1992) 540.,

  Jüttmer et al, NPB 512 (1998) 581,

  Kuniba et al. NPB 525 (1998) 597)

- Use NLIE

  (Klümper, Z. Phys B91 (1993) 507 JS

  JPA32 (1999) 2341...)

- Use HT

  (Shiroishi et al, PRL 89 117201 (2002).

  Tsuboi, JPA36 1493 (2003).)

diagonalization

- QISM は列転送行列と同じ。VEV だけ変える。($h=$ 磁場)

$$A(u,x)|\Omega\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{\beta h}{2}} a(u,x)|\Omega\rangle, \quad D(u,x)|\Omega\rangle = \mathrm{e}^{\frac{\beta h}{2}} d(u,x)|\Omega\rangle$$
$$a(u,x) = \phi_+(x+i)\phi_-(x) \quad d(u,x) = \phi_-(x+i)\phi_-(x)$$
$$\phi_\pm(x) = \left(\frac{x \pm iu}{\pm i}\right)^{\frac{N}{2}}$$

定義 $\mathfrak{a}$: 補助関数 (auxiliary function)

$$\mathfrak{a}(x) := \mathrm{e}^{\beta h} \frac{d(x)}{a(x)} \frac{Q(x+i)}{Q(x-i)} \qquad Q(x) = \prod_{j=1}^{m}(x - x_j)$$

Bethe ansatz $\rightarrow \mathfrak{a}(x_j) = -1, 1 \leq \jmath \leq m$

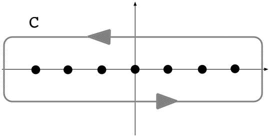
Non Linear Integral Equation

- NLIE for spin $\frac{1}{2}$ XXX　（の一つのバージョン）

仮定: 最大固有値状態でベーテ根 ($m = N/2$) はすべて実軸上に分布。
トロッター極限 $N \to \infty$ ののち
$\mathfrak{a}$: 補助関数　$A := 1 + \mathfrak{a}$

$$\boxed{\ln \mathfrak{a}(x) = \beta\epsilon_0(x + \frac{i}{2}) - \int_C K(x-y) \ln A(y) \frac{dy}{2\pi}}$$

$$K(x) = \frac{2}{(x^2+1)} \qquad \epsilon_0(x) = -h + \frac{1}{x^2 + \frac{1}{4}}$$



Non Linear Integral Equation

- NLIE for spin $\frac{1}{2}$ XXX　（の一つのバージョン）

仮定: 最大固有値状態でベーテ根 $(m = N/2)$ はすべて実軸上に分布。
トロッター極限 $N \to \infty$ ののち
$\mathfrak{a}$: 補助関数　　$A := 1 + \mathfrak{a}$

$$\boxed{\ln \mathfrak{a}(x) = \beta\epsilon_0(x + \frac{i}{2}) - \int_C K(x-y) \ln A(y) \frac{dy}{2\pi}}$$

$$-\beta f = \ln \Lambda_{\mathrm{QTM}}(0) = \frac{\beta h}{2} + \int_C \frac{1}{x(x+i)} \ln A(x) \frac{dx}{2\pi}$$

ベーテ根の位置を正確に知らなくても f は評価できる。

Non Linear Integral Equation

- NLIE for spin $\frac{1}{2}$ XXX　（の一つのバージョン）

仮定: 最大固有値状態でベーテ根 $(m = N/2)$ はすべて実軸上に分布。
トロッター極限 $N \to \infty$ ののち
$\mathfrak{a}$: 補助関数　$A := 1 + \mathfrak{a}$

$$\boxed{\ln \mathfrak{a}(x) = \beta \epsilon_0 (x + \frac{i}{2}) - \int_{\mathcal{C}} K(x-y) \ln A(y) \frac{dy}{2\pi}}$$

ベーテ根の位置を正確に知らなくても f は評価できる。

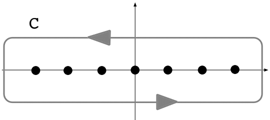
- レポート 3: 上の NLIE を導出せよ
- ヒント: 有限サイズの時と違って $\mathfrak{a}(x)$ は $\mathcal{C}$ 内に $N/2$ 次の極をもつ。

$\mathfrak{a}$ の意味 I

- $|\mathfrak{a}| \lessgtr 1$ for $\Im x \gtrless 0$　$T \ll 1$ では $|\mathfrak{a}| \gg 1$ for $\Im x < 0, |x| < \Lambda_F$
- $b(x) := \mathfrak{a}(x - \frac{i}{2})$

$$\begin{aligned}
\ln b(x) &= \beta\epsilon_0(x) - \int_{\mathcal{C}} K(x-y)\ln A(y)\frac{dy}{2\pi} \\
&= \beta\epsilon_0(x) - \int_{-\infty}^{\infty} K(x-y)\ln(1+b(y))\frac{dy}{2\pi} + \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1+a(y+\frac{i}{2}))\frac{dy}{2\pi} \\
&= \beta\epsilon_0(x) - \int_{-\Lambda_F}^{\Lambda_F} K(x-y)\ln b(y)\frac{dy}{2\pi} + O(T^2).
\end{aligned}$$

$$K(x) = \frac{2}{(x^2+1)} \qquad \epsilon_0(x) = -h + \frac{1}{x^2+\frac{1}{4}}$$



$\mathfrak{a}$ の意味 I

- $|\mathfrak{a}| \lesssim 1$ for $\Im x \gtrsim 0$　$T \ll 1$ では $|\mathfrak{a}| \gg 1$ for $\Im x < 0, |x| < \Lambda_F$
- $b(x) := \mathfrak{a}(x - \frac{i}{2})$

dressed energy function $\varepsilon(x)$ と比較

$$\ln b(x) = \beta\epsilon_0(x) - \int_{-\Lambda_F}^{\Lambda_F} K(x-y)\ln b(y)\frac{dy}{2\pi} + O(T^2)$$

$$\varepsilon(x) = \epsilon_0(x) - \int_{-\Lambda_F}^{\Lambda_F} K(x-y)\varepsilon(y)\frac{dy}{2\pi}$$

すなわち

$$\ln b(x) = \beta\varepsilon(x) + O(T^2)$$

$\mathfrak{a}$ の意味 II

- $\varepsilon =$ スピノンが $T = 0$ で真空を引きずりながら運動するエネルギー (Dressed Energy)
- $b(x) \sim \mathrm{e}^{\beta\epsilon(x)}$ はスピノン Dressed Energy の有限温度への「自然な」拡張
  - $b(x)$ は複素値なので、energy という解釈は正確には難しい
  - 通常複素エネルギーは粒子の decay を意味するが、可積分系では $\mathfrak{a}$ と $\bar{\mathfrak{a}}$ が複素部分を「やりとり」するので寿命は無限。
- もっと複雑な模型でも同様の解釈が可能
  - 例えばハバード模型では 4 つの補助関数が現れる
  - それぞれ　spinon, antispinon, upper-band holon, lower-band holon を表すと解釈できる

自由エネルギー

$b(x) := \mathfrak{a}(x - \frac{i}{2}), \quad \bar{b}(x) := \bar{\mathfrak{a}}(x + \frac{i}{2})$ とした時

$$-\beta f = \ln \Lambda(0)$$
$$= -\beta\varepsilon_g + \int_{C_-} K(x'+i)\ln(1+b(x'))dx' + \int_{C_+} K(x'-i)\ln(1+\bar{b}(x'))dx'$$
$$C_\pm = [-\infty, \infty] \pm i\epsilon.$$

ここで ε_g は $T = 0$ での ground state energy

$$\varepsilon_g = \int \varepsilon_0(x)\rho_g(x)dx$$

i.e. $T \to 0$ で積分の部分は有限温度での ground state energy からの補正を表す。

まとめ

- QTM を用いてカノニカル集団で有限温度量子系を取り扱える
- QTM は物理的空間でなく仮想的な空間に作用。
- $L \to \infty$ でサイトあたりの自由エネルギーは QTM の最大固有値だけでかける。（足しあげる必要なし)
- $N \to \infty$ でベーテ根の分布は病的なので *NLIE* を用いる。
- *NLIE* の補助関数は dressed energy の有限温度への拡張