ファインマン統計力学 **7**章 スピン波

理学部物理学科 3 年 政岡凜太郎 2022 年 9 月 26 日

目次

導入

スピン波

演算子法

Bethe 仮設

代数的 Bethe 仮設

導入

本日の目標

- 磁性体の低温での振る舞いを、スピン波の概念を使って定性的に理解する.
- 1次元 Heisenberg 模型の厳密解の構成方法について知る.

Pauli 行列を

$$\sigma_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_i^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
 (1.1)

と定義する.ただし,この行列は $|\uparrow\rangle_i\,,|\downarrow\rangle_i$ を基底とする空間に作用するものである.また,

$$\sigma_i^{\pm} = \sigma_i^x \pm i\sigma_i^y, \quad \sigma_i^{+} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_i^{-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$
 (1.2)

とする.

4

今回主に扱うハミルトニアンは、一般的には

$$H = \sum_{\langle i,j\rangle} J_{ij} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \tag{1.3}$$

と書かれる.これを Heisenberg 模型という.最も簡単な例としては,1 次元で最近接相互作用のみを取り入れた場合,

$$H_{XXX} = -J \sum_{n=1}^{N} \sigma_n \cdot \sigma_{n+1}$$
 (1.4)

と書かれる.この場合も単に Heisenberg 模型と呼んだり,あるいは XXX 模型と呼んだりもする.z 軸方向の相互作用の強さを変えたものは,XXZ 模型と呼ばれ,

$$H_{XXZ} = -J \sum_{n=1}^{N} (\sigma_n^x \sigma_{n+1}^z + \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + \Delta \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z)$$
 (1.5)

と書かれる.

まず、2 スピン系 $H = -J\sigma_1 \cdot \sigma_2$ を考える.

$$\Pi^{1,2} = \frac{\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + 1}{2} = \frac{\sigma_1^z \sigma_2^z + 1}{2} + \frac{\sigma_1^+ \sigma_2^- + \sigma_1^- \sigma_2^+}{4}$$
(1.6)

と定義すると, $H = -J(2\Pi^{1,2} - 1)$ と書ける.ここで,

$$\Pi^{1,2} |\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad \Pi^{1,2} |\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle,$$

$$\Pi^{1,2} |\uparrow\downarrow\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle, \quad \Pi^{1,2} |\downarrow\uparrow\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$$

となる. $\Pi^{1,2}$ はスピン 1 とスピン 2 を入れ替える変換であり,スピン置換演算子という.

ハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{n=1}^{N} (2\Pi^{n,n+1} - 1) = -J \sum_{n=1}^{N} \sigma_n \cdot \sigma_{n+1}$$
 (1.7)

である. Heisenberg の運動方程式

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}_n = \frac{i}{\hbar}[H, \boldsymbol{\sigma}_n] \tag{1.8}$$

は,交換関係

$$[\sigma_1^i \sigma_2^i, \sigma_1^j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_1^k \sigma_2^i = 2i(\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2)^j$$
(1.9)

より,

$$\hbar \dot{\boldsymbol{\sigma}}_n = 2J\boldsymbol{\sigma}_n \times (\boldsymbol{\sigma}_{n+1} + \boldsymbol{\sigma}_{n-1}) \tag{1.10}$$

と書ける.

7

 σ_n を大きさ 1 の古典的なベクトルとみなす. $\sigma_z \approx 1$ のとき,方程式を線形化でき,

$$\hbar \dot{\boldsymbol{\sigma}}_n = 4J \boldsymbol{\sigma}_n \times \boldsymbol{e}_z + \boldsymbol{e}_z \times (\boldsymbol{\sigma}_{n+1} + \boldsymbol{\sigma}_{n-1}) \tag{1.11}$$

と近似できる. $\sigma_{n+1}+\sigma_{n-1}=2\sigma_n$ と近似すると, σ_n は単に z 軸まわりのラーモア歳差運動をする.次に,

$$\sigma_n^x \approx c \sin \omega t e^{ink} \tag{1.12}$$

$$\sigma_n^y \approx c \cos \omega t e^{ink} \tag{1.13}$$

という解を仮定する.これを (1.11) に代入すると,

$$\hbar\omega = 4J(1-\cos k) \tag{1.14}$$

を得る.ここで,波数の次元について注意しておく.今回扱うのは全て格子間隔を 1 とした格子であり,波数は無次元量になる.通常の 1/(距離) の次元を持つ波数 にしたければ,格子間隔を a として, $k \to ka$ と置き換えれば良い.

スピン波

XXX 模型

$$H = -J \sum_{n=1}^{N} \sigma_n \cdot \sigma_{n+1} = -J \sum_{n=1}^{N} (2\Pi^{n,n+1} - 1)$$
 (2.1)

の基底状態を求めよう.強磁性 (-J<0) の場合,

$$|0\rangle \equiv |\uparrow \cdots \uparrow\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\uparrow\rangle_N \tag{2.2}$$

は基底状態である.明らかにこれは H の固有状態である.さらに $\Pi^{n,n+1}$ の期待値は最大 1 であるから,最低エネルギー状態になっている.

反強磁性 (-J>0) の場合,基底状態を求めるのは途端に難しくなる.素朴にスピンが交互に並んだ状態 (Néel 状態)

$$|N\acute{e}el\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\cdots\rangle$$
 (2.3)

を考えて,H を掛けてみると, $|\cdots \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \cdots \rangle$ のような項が出てきてしまう.したがって,Néel 状態は固有状態ではない 1 .

¹関連する話が田崎さんの講義ノートに載っている.

しばらくは,強磁性的な場合 (-J<0) を考える.基底状態のエネルギーが 0 になるように,

$$H' = H + NJ = -2J \sum_{n=1}^{N} (\Pi^{n,n+1} - 1)$$
 (2.4)

と定義する. 基底状態の次にエネルギーが低い状態は,1 つを除いて他のスピンが揃った状態だと考えられる. ここで,

$$|n\rangle = |\uparrow \cdots \downarrow \rangle, \quad (n = 1, 2, \dots, N)$$
 (2.5)

は全て等価で、どれも固有状態ではない、そこで、 $|n\rangle$ の重ね合わせ

$$|\psi\rangle = \sum_{n} \psi_n |n\rangle \tag{2.6}$$

を考えてみる.

 $|\psi
angle$ が固有状態となる条件は,

$$E\sum_{n} \psi_{n} |n\rangle = -2J \sum_{m} (\Pi^{m,m+1} - 1) \sum_{n} \psi_{n} |n\rangle$$

$$= -2J \sum_{n} \sum_{\xi = \pm 1} \psi_{n} (\Pi^{n,n+\xi} - 1) |n\rangle$$

$$= -2J \sum_{n} \sum_{\xi = \pm 1} (\psi_{n+\xi} - \psi_{n}) |n\rangle$$
(2.7)

したがって、

$$E\psi_n = -2J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n)$$
(2.8)

が成り立てばよい.この線形連立方程式の解として, $\psi_n=e^{ikn}$ とおくと,

$$E = -2J(e^{ik} + e^{-ik} - 2) = 4J(1 - \cos k) = 8J\sin^2\frac{k}{2}$$
 (2.9)

となる. 周期的境界条件から、波数は $k=2\pi l/N,\ l\in\mathbb{Z}$ と離散化されている.

高次元への拡張は容易である.d 次元格子で最近接相互作用のみを考える.位置 x にあるスピンだけが下向きである状態を, $|x\rangle$ と書く.

$$|\psi\rangle = \sum_{x} \psi(x) |x\rangle, \quad x \in \mathbb{Z}^d$$
 (2.10)

という状態を考えれば, $|\psi
angle$ が固有状態となる条件は,1 次元の場合と同様にして

$$E\psi(\boldsymbol{x}) = -2J \sum_{i=1}^{d} \sum_{\xi=\pm 1} (\psi(\boldsymbol{x} + \xi \boldsymbol{e}_i) - \psi(\boldsymbol{x}))$$
 (2.11)

と求まる.ただし, e_i は第 i 成分が 1 であり,その他の成分が 0 であるような単位ベクトルである. $\psi(x)=e^{ik\cdot x}$ とおけば,

$$E(\mathbf{k}) = 4J \sum_{i=1}^{d} (1 - \cos k_i) = 8J \sum_{i=1}^{d} \sin^2 \frac{k_i}{2}$$
 (2.12)

となる.

次に,下向きのスピンが 2 つあるような場合を考えよう.この場合 2 つのスピン 波が存在し,一般にそれらは相互作用をする.波動関数を $|\psi^{(2)}\rangle$ と書いて,

$$|\psi^{(2)}\rangle = \sum_{x_1 \neq x_2} \psi(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle$$
 (2.13)

と展開する.展開係数として、相互作用をしない2つの波

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}_1 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}_2)}$$
(2.14)

を考えてみる.波動関数が満たすべき条件は、(2.11)と同様に

$$E\psi(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2}) = -2J \sum_{i=1}^{d} \sum_{\xi=\pm 1} (\psi(\mathbf{x}_{1} + \xi \mathbf{e}_{i}, \mathbf{x}_{2}) - \psi(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2}) + \psi(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2} + \xi \mathbf{e}_{i}) - \psi(\mathbf{x}_{1}, \mathbf{x}_{2}))$$
(2.15)

となり,(2.14) は $E=E(k_1)+E(k_2)$ をエネルギーにもつ固有状態となるように見える.しかし, x_1,x_2 が隣接している場合, Π^{x_1,x_2} によって下向きスピンの入れ替わりが起こる.これは (2.15) では考慮していない.

マグノンの統計力学

系が十分大きければ,2 つのスピンが隣接する場合の寄与はその他の寄与に比べて小さい.ここから相互作用しない 2 個のスピン波 (2.14) を近似的な固有状態とすることができる.

さらに多数のスピン波があっても,その間の相互作用を無視すれば,固有状態の波 動関数は,

$$\psi(\boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_M) = \exp(i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{x}_1 + \cdots + \boldsymbol{k}_M\cdot\boldsymbol{x}_M)$$
 (2.16)

と書ける. このエネルギーは

$$E = \sum_{m=1}^{M} E(\boldsymbol{k}_m) \tag{2.17}$$

となる.ここまでくれば,スピン波を 1 つの粒子だとみなしてグランドカノニカル集団の方法を適用することができる.複数のスピン波は同じ波数をとっても問題ないから,これは Bose 粒子である.スピン波の素励起を $\frac{70}{2}$ と呼ぶ.

低温の場合,低いエネルギーのモードのみが励起される.低エネルギーでのマグノンの分散関係は

$$E(\mathbf{k}) \approx c\mathbf{k}^2, \quad c = 2J$$
 (2.18)

と書ける.フォノンのエネルギーは低温では |k| に比例していたが,マグノンでは k^2 に比例していることが分かる.

マグノンの粒子数は保存しなくてよいので化学ポテンシャルは0である. 粒子数の期待値は、

$$\langle n \rangle_{\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\beta c \mathbf{k}^2} - 1} \tag{2.19}$$

で与えられる.

したがって3次元格子の場合、内部エネルギーは、

$$U = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{ck^2}{e^{\beta ck^2} - 1} 4\pi k^2 dk$$
 (2.20)

となる.ただし, $V\to\infty$ の極限をとり,和を積分で置き換えた.積分は Brillouin ゾーン内で行うべきだが,低温では k が大きい場合の寄与が無視できるので,積分範囲を無限大にとった.

積分を無次元化すると,

$$U = \frac{cV}{2\pi^2} \left(\frac{1}{\beta c}\right)^{5/2} \int_0^\infty \frac{x^5}{e^{x^2} - 1} \, \mathrm{d}x$$
 (2.21)

であり, $U \propto T^{5/2}$ が分かる.したがって,比熱は $T^{3/2}$ に比例する.

$$C \propto T^{3/2} \tag{2.22}$$

d 次元格子の場合のマグノンの粒子数は,

$$\sum_{k} \langle n \rangle_{k} = \frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{0}^{\infty} \frac{S_{d-1}k^{d-1}}{e^{\beta ck^{2}} - 1} dk$$

$$= \frac{VS_{d-1}}{(2\pi)^{3}} \left(\frac{1}{\beta c}\right)^{d/2} \int_{0}^{\infty} \frac{x^{d-1}}{e^{x^{2}} - 1} dx$$
(2.23)

となる. ただし、 S_{d-1} は単位 d-1 次元球面の面積である.

d=3 のとき,マグノンの粒子数は $T^{3/2}$ に比例する.すなわち,磁化は $T^{3/2}$ に比例して減少していく.またマグノン 1 個あたりの比熱が T^0 に比例することが分かる.

d < 2 のとき, $x \to 0$ での被積分関数は

$$\frac{x^{d-1}}{e^{x^2} - 1} \approx x^{d-3} \tag{2.24}$$

となり、積分 (2.23) は発散する. マグノン数の発散は、 $d \le 2$ のとき有限温度で強磁性状態が不安定であることを意味する.

マグノンのエネルギー k=0 において 0 になる.これはマグノンの 1 粒子状態がつくるエネルギーバンドと基底状態の間にギャップがないことを意味している.

このことを別の方法で確かめることもできる。我々は基底状態として,全てのスピンが上を向いた状態を考えた。しかしこの選択は恣意的であって,別の方向を向いた基底状態を考えても良い。例えば,全てのスピンが上方向から微小な角度 θ だけ傾いた状態を考える。

$$|\chi\rangle = \bigotimes_{n=1}^{N} \left(\cos\frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle_n + \sin\frac{\theta}{2} |\downarrow\rangle_n\right)$$
 (2.25)

 θ の 2 次以上の項を無視すると,

$$|\chi\rangle = |\uparrow \cdots \uparrow\rangle + \frac{\theta}{2}(|\downarrow\uparrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle + \cdots)$$
 (2.26)

となる.基底状態の項を取り除くと,k=0 の場合のスピン波 $|\chi'\rangle=\sum_n|n\rangle$ が得られる. $|\chi\rangle$ は $|\uparrow\cdots\uparrow\rangle$ と同じ固有値をもつから, $|\chi'\rangle$ も同じ固有値をもつ.

Heisenberg 模型は連続的な対称性 (SU(2)) 対称性) をもっている.一般に,模型が連続的対称性をもつ場合,基底状態は以下のどちらかになる.

- 1 つの対称な基底状態
- 連続的な変換で移り合う無限に縮退した基底状態

強磁性 Heisenberg 模型は後者の場合である。このとき、もともとの模型には対称性があったにも関わらず、実現する基底状態を1つ選択することで系の対称性が失われる。これを対称性が自発的に破れたという。

対称性が自発的に破れていても、もともとの対称性の名残として、基底状態をすぐ近くの基底状態に移す励起が存在する.これは基底状態に大域的な対称性変換を施すものであるから、長波長であり、また基底状態の間の変換であるから、エネルギーを要さない.

このように、対称性の自発的破れによって生まれる長波長・低エネルギーの励起を南部-Goldstone モードという。あるいはそれを素励起とみなして南部-Goldstone ボソンという。マグノンはこの一例となっている。

一般に、

南部-Goldstone の定理

系にローレンツ対称性がある場合,系のグローバルな連続的対称性が自発的に破れると,破れた対称性一つに付き一つゼロ質量ボソンが現れる.

が知られている.素粒子論において,質量ゼロは線形分散 $E \propto |m{p}|$ を意味する.

物性においてはローレンツ対称性があるという仮定が外れるので,素粒子の場合とは違った結果が現れる.強磁性体のマグノンの場合,SU(2) の Lie 代数は 3 次元である.基底状態では z 軸まわりの U(1) 対称性だけが守られているから,破れた対称性の数は 2 つである.しかし,現れる南部-Goldstone ボソンは 1 成分のマグノンだけである.またマグノンは 2 乗分散 $E \propto |\mathbf{k}|^2$ をもつ.

反強磁性体の場合も対称性の自発的破れが生じる。ただし、このとき破れた対称性 J_x, J_y に対応して、2 成分のマグノンが現れることが知られている。またこれらは 強磁性の場合と違って線形分散をもつ。

このように、対称性の自発的破れといっても、現れるボソンの数と、低エネルギーの分散関係の次数はモデルによって異なる。実は、これらの要素を左右するのは破れた対称性の間の交換関係の期待値であることが知られている。マグノンの例でいうと、

$$\langle 0|[J_x, J_y]|0\rangle = i \langle 0|J_z|0\rangle \tag{2.27}$$

である.強磁性では $\langle 0|J_z|0 \rangle \neq 0$ になり,その結果, J_x 方向の励起と J_y 方向の励起は独立にはなりえず,1 つの励起になる.一方反強磁性の場合 $\langle 0|J_z|0 \rangle = 0$ となり, J_x 方向と J_y 方向の独立な励起が存在する.

さらに例外的な場合を除き、分散関係の次数も (2.27) から分かるようである.詳細な話はここに載っている.

演算子法

 S_l を大きさ S のスピン演算子とする. またハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j \tag{3.1}$$

とする.ただし $\langle i,j \rangle$ は最近接格子点を意味する.まず強磁性 (J>0) の場合を考える.昇降演算子 S_+^\pm と粒子数演算子 n_l を

$$S_l^{\pm} = S_l^x \pm i S_l^y, \quad n_l = S - S_l^z$$
 (3.2)

と定義する. S^z_l の固有値 M の固有状態 $|M\rangle$ に対し,

$$S_l^{\pm} |M\rangle = \sqrt{(S \mp M)(S \pm M + 1)} |M \pm 1\rangle.$$
 (3.3)

となる.

ここで,S-M=n によって $|M\rangle$ を $|n\rangle$ と書き換える.また $a_l^\dagger a_l=n_l$ によって Bose 粒子の生成消滅演算子 a_l^\dagger, a_l を導入すれば,

$$S_l^+ |n\rangle = \sqrt{n(2S - n + 1)} |n - 1\rangle$$
$$= \sqrt{n} \cdot \sqrt{2S - a_l^{\dagger} a_l} |n - 1\rangle$$
$$= \sqrt{2S - a_l^{\dagger} a_l} \cdot a_l |n\rangle$$

と書ける. S_i^- についても同様に計算することで

$$S_l^z = S - a_l^{\dagger} a_l \tag{3.4}$$

$$S_l^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_l^{\dagger} a_l}{2S} \right)^{1/2} a_l,$$
 (3.5)

$$S_l^- = \sqrt{2S} a_l^{\dagger} \left(1 - \frac{a_l^{\dagger} a_l}{2S} \right)^{1/2}$$
 (3.6)

を得る.

これらを $H=-J\sum_{\langle i,j \rangle}[S_i^zS_j^z+(S_i^+S_j^-+S_i^-S_j^+)/2]$ に代入し,平方根を Taylor 展開すると, n_l/S による展開式が得られる.

$$H = -JS^{2} \sum_{\langle i,j \rangle} 1 + JS \sum_{\langle i,j \rangle} (n_{i} + n_{j} - a_{i}^{\dagger} a_{j} - a_{i} a_{j}^{\dagger})$$

$$-J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[n_{i} n_{j} - \frac{1}{4} \left(a_{i}^{\dagger} (n_{i} + n_{j}) a_{j} + a_{j}^{\dagger} (n_{j} + n_{i}) a_{i} \right) \right] + \cdots$$

$$= -\frac{NzJS^{2}}{2} + zJS \sum_{i} a_{i}^{\dagger} a_{i} - JS \sum_{\langle i,j \rangle} \left(a_{i}^{\dagger} a_{j} - a_{j}^{\dagger} a_{i} \right)$$

$$+ \frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[a_{i}^{\dagger} a_{j}^{\dagger} (a_{i} - a_{j})^{2} + (a_{i}^{\dagger} - a_{j}^{\dagger})^{2} a_{i} a_{j} \right] + \cdots$$

$$(3.8)$$

ただし N は格子点の総数であり、z は最近接格子点の数である.

(3.8) において、定数部分およびマグノンの相互作用を無視すると、

$$H = zJS \sum_{i} a_i^{\dagger} a_i - JS \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^{\dagger} a_j + a_j^{\dagger} a_i)$$
 (3.9)

となる. ここで,

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_i} a_{\mathbf{k}}, \quad a_i^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_i} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$$
 (3.10)

と定義する. k は結晶運動量であり、 \sum_k は Brillouin ゾーン内の和である.

$$\sum_{i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_{i}} = N\delta_{\mathbf{k},\mathbf{0}} \tag{3.11}$$

が成り立つことに注意すると、(3.9) 第1項は,

$$\frac{zJS}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'} \sum_{i} e^{i(-\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}_{i}} = zJS \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}$$
(3.12)

と書ける.

(3.9)第2項は,

$$\begin{split} &-\frac{JS}{N}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k'}}(a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k'}}+a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k'}}a_{\boldsymbol{k}})\sum_{\langle i,j\rangle}e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}_{i}+\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{x}_{j})}\\ &=-\frac{JS}{N}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k'}}(a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k'}}+a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k'}}a_{\boldsymbol{k}})\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{\delta}}e^{i\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{\delta}}\sum_{i}e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k'})\cdot\boldsymbol{x}_{i}} \end{split}$$

と書ける.ここで δ はある格子点を基準としたときの最近接格子点の位置を表している.d 次元立方格子の場合 $\delta=\pm e_1,\dots,\pm e_d$ である.さらに変形を続けると,

$$= -\frac{JS}{2} \sum_{\mathbf{k}, \delta} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} (a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}) = -JS \sum_{\mathbf{k}, \delta} \cos(\mathbf{k}\cdot\delta) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}$$
(3.13)

したがって、マグノンの対角化されたハミルトニアン

$$H = \sum_{k} \epsilon_{k} a_{k}^{\dagger} a_{k}, \quad \epsilon_{k} = zJS \left[1 - \frac{1}{z} \sum_{\delta} \cos(k \cdot \delta) \right]$$
(3.14)

を得る.この結果は以前に波動関数を仮定して導いたものと同じである.

反強磁性の場合

反強磁性の場合を考える. ハミルトニアンは

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \tag{3.15}$$

である. ただし J>0 である.

反強磁性の場合,格子点を A 格子と B 格子の部分格子に分割すると扱いやすい。また,同じ格子に属するスピンの間では相互作用がないと仮定する.この仮定はスピンをフラストレーションなく上下交互に並べられることを意味している.

A 格子のスピン演算子に対し,(3.4)-(3.6) によって a_l^{\dagger}, a_l を定義する.B 格子に対しては, b_l^{\dagger}, b_l を以下のように定義する.

$$S_l^z = b_l^{\dagger} b_l - S, \tag{3.16}$$

$$S_l^+ = \sqrt{2S}b_l^{\dagger} \left(1 - \frac{b_l^{\dagger}b_l}{2S}\right)^{1/2} \tag{3.17}$$

$$S_l^- = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{b_l^{\dagger} b_l}{2S} \right)^{1/2} b_l \tag{3.18}$$

これは A 格子の場合の定義に対し, S_l^z の符号を入れ替え, S_l^+ と S_l^- を入れ替えたものになっている.

H を S の一次の項まで展開すると,

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[(S - a_i^{\dagger} a_i)(b_j^{\dagger} b_j - S) + \frac{2S}{2} (a_i b_j + a_i^{\dagger} b_j^{\dagger}) \right]$$

$$= -\frac{NzJS^2}{2} + zJS \left(\sum_{i \in A} a_i^{\dagger} a_i + \sum_{j \in B} b_j^{\dagger} b_j \right) + JS \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i b_j + a_i^{\dagger} b_j^{\dagger})$$

$$\equiv H_0 + H_1 + H_2$$
(3.19)

となる. ただし N は格子点の総数であり、z は最近接格子点の数である. ここで、

$$a_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_i} a_{\mathbf{k}}, \quad a_i^{\dagger} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_i} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$$
 (3.20)

$$b_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j} b_{\mathbf{k}}, \quad b_j^{\dagger} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j} b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$$
(3.21)

と Fourier 変換する.

$$\sum_{i \in A} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i} = \frac{N}{2} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{0}} \tag{3.22}$$

に注意すると、

$$H_1 = zJS \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}})$$
(3.23)

となる.また,

$$H_{2} = \frac{2JS}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (a_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}} + a^{\dagger}_{-\mathbf{k}}b^{\dagger}_{-\mathbf{k}'}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_{i}+\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}_{j})}$$

$$= \frac{2JS}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (a_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}'} + a^{\dagger}_{-\mathbf{k}}b^{\dagger}_{-\mathbf{k}'}) \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \sum_{i \in A} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}_{i}}$$

$$= zJS \sum_{\mathbf{k}} (\gamma^{*}_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}b_{-\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}}a^{\dagger}_{\mathbf{k}}b^{\dagger}_{-\mathbf{k}}). \tag{3.24}$$

ただし、 $\gamma_{\mathbf{k}} \equiv \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}}/z$ と定義した.

以上より、

$$H = zJS \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} b_{-\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{-\mathbf{k}}^{\dagger})$$
(3.25)

を得る.ただし定数部分は除いた.これを対角化したいので,Bogoliubov 変換

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \theta_{\mathbf{k}} & e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \sinh \theta_{\mathbf{k}} \\ e^{i\phi_{\mathbf{k}}} \sinh \theta_{\mathbf{k}} & \cosh \theta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix}$$
(3.26)

を用いる. ϕ_k, θ_k は後で求めるとして,まずこの変換の性質について述べておく.変換行列を $U(\phi_k, \theta_k)$ とおくと,これは明らかにエルミートである.また θ に関する加法性

$$U(\phi, \theta)U(\phi, \theta') = U(\phi, \theta + \theta')$$
(3.27)

が成り立つ、 $U(\phi,0)=I$ であるから $U(\phi,-\theta)=U(\phi,\theta)^{-1}$ である、さらに,

$$\eta U(\phi, \theta) \eta = U(\phi, -\theta) = U(\phi, \theta)^{-1}, \quad \eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(3.28)

が分かる.

ここで,

$$\begin{pmatrix}
[A,C] & [A,D] \\
[B,C] & [B,D]
\end{pmatrix} = \begin{bmatrix}
A \\
B
\end{pmatrix} \begin{pmatrix}
C & D
\end{pmatrix}$$
(3.29)

という表記を導入しよう. すると,

$$\begin{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \beta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}'}^{\dagger} & \beta_{\mathbf{k}'} \end{pmatrix} \end{bmatrix} = U \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} & b_{-\mathbf{k}'} \end{pmatrix} \end{bmatrix} U$$

$$= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U \eta U = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U \eta U \eta \eta$$

$$= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \eta \tag{3.30}$$

となる. すなわち

$$[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = [\beta_{\mathbf{k}}, \beta_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \tag{3.31}$$

$$[\alpha_{\mathbf{k}}, \beta_{\mathbf{k}'}] = [\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \beta_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = 0 \tag{3.32}$$

となる.その他の交換関係は明らかにゼロになるから,Bogoliubov 変換は交換関係を保つ.

ハミルトニアンは

$$H = zJS \sum_{k} \begin{pmatrix} a_{k}^{\dagger} & b_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \gamma_{k}^{*} \\ \gamma_{k} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k} \\ b_{-k}^{\dagger} \end{pmatrix} - zJS \sum_{k} 1$$
 (3.33)

と書ける.ここで,

$$\gamma_{k} = e^{i\phi_{k}}|\gamma_{k}| \tag{3.34}$$

$$\tanh(2\theta_k) = |\gamma_k| \tag{3.35}$$

によって ϕ_k , θ_k を定義すると,

$$\begin{pmatrix} 1 & \gamma_{k}^{*} \\ \gamma_{k} & 1 \end{pmatrix} = \sqrt{1 - |\gamma_{k}|^{2}} U(\phi_{k}, 2\theta_{k})$$
(3.36)

と書ける.そこで,Bogoliubov 変換 (3.26) を用いると, $U(\phi_{m{k}},2\theta_{m{k}})=U(\phi_{m{k}},\theta_{m{k}})U(\phi_{m{k}},\theta_{m{k}})=U^\dagger(\phi_{m{k}},\theta_{m{k}})U(\phi_{m{k}},\theta_{m{k}})$ から,

$$H = zJS \sum_{k} \sqrt{1 - |\gamma_{k}|^{2}} \left(\alpha_{k}^{\dagger} - \beta_{k} \right) \begin{pmatrix} \alpha_{k} \\ \beta_{k}^{\dagger} \end{pmatrix} - zJS \sum_{k} 1$$
 (3.37)

となる. したがって,

$$H = \sum_{k} \epsilon_{k} (\alpha_{k}^{\dagger} \alpha + \beta_{k}^{\dagger} \beta_{k}) - zJS \sum_{k} \left(1 - \sqrt{1 - |\gamma_{k}|^{2}} \right)$$
(3.38)

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = zJS\sqrt{1 - |\gamma_{\mathbf{k}}|^2} \tag{3.39}$$

と書ける. α_k , β_k は独立な 2 つのマグノンを表している. d 次元立方格子の場合,

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^{d} \cos k_i = 1 - \frac{\mathbf{k}^2}{2d} + \cdots$$
 (3.40)

であるから、長波長で

$$\epsilon_{\mathbf{k}} \approx 2dJ\sqrt{\frac{\mathbf{k}^2}{d}} = 2\sqrt{d}J|\mathbf{k}|$$
 (3.41)

となる. したがって, 反強磁性では 2 種類の線形分散のマグノンが現れる.

Bethe 仮設

2個のスピン波 (厳密な取り扱い)

ここでは Bethe による 1 次元 Heisenberg 模型の厳密な取り扱いを,スピン波が 2 個の場合に行う.まず真空を

$$|0\rangle \equiv |\uparrow \cdots \uparrow\rangle \tag{4.1}$$

と定義する.強磁性の場合は真空が基底状態となる.また n 粒子状態を

$$|x_1, x_2, \dots, x_n\rangle = \sigma_{x_1}^- \sigma_{x_2}^- \cdots \sigma_{x_n}^- |0\rangle$$
 (4.2)

とおく、ただし $x_1 < x_2 < \cdots < x_n$ とする、2 粒子状態の固有状態として,以下の形のものを仮設する、

$$|\psi\rangle = \sum_{1 \le x_1 < x_2 \le N} \psi(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle,$$
 (4.3)

$$\psi(x_1, x_2) = A_{12}e^{i(k_1x_1 + k_2x_2)} + A_{21}e^{i(k_2x_1 + k_1x_2)}.$$
 (4.4)

 k_1, k_2 を擬運動量と呼ぶ、Bethe 仮設法においては,まず解の形を仮定して,あとでそれが厳密解であることを示す.

まず、波動関数は $1 \le x_1 < x_2 \le N$ に対して周期的境界条件

$$\psi(x_2, x_1 + N) = \psi(x_1, x_2) \tag{4.5}$$

を満たしていなければならない. (4.4) からこの条件を

$$e^{ik_2N}A_{12} = A_{21}, \quad e^{ik_1N}A_{21} = A_{12}$$
 (4.6)

と書き換えられる。また、

$$e^{i(k_1+k_2)N} = 1 (4.7)$$

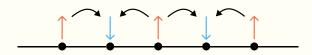
が分かる.

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{4.8}$$

$$H = -J \sum_{i} \sigma_{i} \cdot \sigma_{i+1} + NJ = -2J \sum_{i} (\Pi^{i,i+1} - 1)$$
 (4.9)

(4.9) を $|x_1,x_2\rangle$ を基底として展開したときの成分を考える. $x_2-x_1>1$ のとき,

$$E\psi(x_1, x_2) = -2J \Big[\psi(x_1 - 1, x_2) + \psi(x_1 + 1, x_2) + \psi(x_1, x_2 - 1) + \psi(x_1, x_2 + 1) - 4\psi(x_1, x_2) \Big].$$
 (4.10)



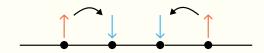
さらに, $A_{12} \exp(i(k_1x_1 + k_2x_2))$ に掛かる係数だけを取り出すと,

$$E = -2J(e^{-ik_1} + e^{ik_1} + e^{-ik_2} + e^{ik_2} - 4)$$

= $4J(2 - \cos k_1 - \cos k_2)$ (4.11)

次に $x_2 - x_1 = 1$ のとき,

$$E\psi(x_1, x_2) = -2J \Big[\psi(x_1 - 1, x_2) + \psi(x_1, x_2 + 1) - 2\psi(x_1, x_2) \Big].$$
 (4.12)



これが (4.10) と整合するように, 境界条件

$$2\psi(x, x+1) = \psi(x, x) + \psi(x+1, x+1) \tag{4.13}$$

を課す. $(\psi(x,x)$ はまだ定義されていなかった). したがって,

$$2(A_{12}e^{ik_2} + A_{21}e^{ik_1}) = (A_{12} + A_{21})\left(1 + e^{i(k_1 + k_2)}\right)$$
(4.14)

となる.

(4.14)を整理すると,

$$\frac{A_{12}}{A_{21}} = -\frac{1 + e^{i(k_1 + k_2)} - 2e^{ik_1}}{1 + e^{i(k_1 + k_2)} - 2e^{ik_2}} \tag{4.15}$$

となる. ここで, ラピディティ λ_i を

$$e^{ik_j} = \frac{\lambda_j + i}{\lambda_j - i} \tag{4.16}$$

で定義すれば,

$$\frac{A_{12}}{A_{21}} = -\frac{(\lambda_1 - i)(\lambda_2 - i) + (\lambda_1 + i)(\lambda_2 + i) - 2(\lambda_1 + i)(\lambda_2 - i)}{(\lambda_1 - i)(\lambda_2 - i) + (\lambda_1 + i)(\lambda_2 + i) - 2(\lambda_1 - i)(\lambda_2 + i)}$$

$$= \frac{2i\lambda_1 - 2i\lambda_2 - 4}{2i\lambda_1 - 2i\lambda_2 + 4} = \frac{\lambda_1 - \lambda_2 + 2i}{\lambda_1 - \lambda_2 - 2i} \tag{4.17}$$

となる.この式と(4.6)を見比べることで,

$$\left(\frac{\lambda_1 + i}{\lambda_1 - i}\right)^N = \frac{\lambda_1 - \lambda_2 + 2i}{\lambda_1 - \lambda_2 - 2i} \tag{4.18}$$

を得る. この式と添字 1,2 を入れ替えた式をまとめて Bethe 仮設方程式という.

 k_1,k_2 が実数のとき, λ_1,λ_2 は実数となる.しかし,一般に λ_1,λ_2 は実数とは限らない.ここでは,

$$\lambda_1 = \lambda + i + i\epsilon, \quad \lambda_2 = \lambda - i - i\epsilon.$$
 (4.19)

という解を考える.ただし, λ は実数であり, ϵ は微小な複素数である.これを Bethe 仮設方程式 (4.18) に代入すると,

$$\left(\frac{\lambda + 2i + i\epsilon}{\lambda + i\epsilon}\right)^N = \frac{4i + 2i\epsilon}{2i\epsilon} \tag{4.20}$$

となる.左辺は N が大きければ非常に大きくなる.一方右辺も $\epsilon \to 0$ とすることでいくらでも大きくできる.したがって両辺が釣り合うような ϵ が存在するだろう.このようにして得られる解をストリング解と呼ぶ.このとき,

$$e^{ik_1} \approx \frac{\lambda + 2i}{\lambda}, \quad e^{ik_2} \approx \frac{\lambda}{\lambda - 2i} = e^{ik_1^*}$$
 (4.21)

である.

したがって,実数 u, v によって

$$k_1 = u + iv, \quad k_2 = u - iv$$
 (4.22)

とおく.

$$\operatorname{Re}(e^{ik_1}) = e^{-v}\cos u = 1$$
 (4.23)

から $e^v = \cos u$ が分かる. また

$$e^{i(k_1+k_2)N} = e^{2iuN} = 1 (4.24)$$

からuが決定される.波動関数は、

$$\psi(x_1, x_2) = e^{iu(x_1 + x_2)} \left(A_{12} e^{v(x_2 - x_1)} + A_{21} e^{-v(x_2 - x_1)} \right)$$
(4.25)

と表される.

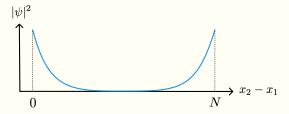
ここで, (4.24) から

$$\frac{A_{12}}{A_{21}} = e^{ik_1N} = e^{iuN}e^{-vN} = \pm e^{-vN}$$
(4.26)

なので,

$$\psi(x_1, x_2) = A_{21}e^{iu(x_1 + x_2)} \left(\pm e^{-v(x_1 + N - x_2)} + e^{-v(x_2 - x_1)} \right)$$
(4.27)

となる. したがって波動関数は $x_2 = x_1$ と $x_2 = x_1 + N$ にピークをもつ.



ストリング解のエネルギーは、

$$\frac{E}{4J} = 2 - \cos(u + iv) - \cos(u - iv)
= 2(1 - \cos u \cosh v)
= 2\left(1 - \cos u \cdot \frac{1}{2}\left(\cos u + \frac{1}{\cos u}\right)\right)
= \sin^2 u = \frac{1}{2}(1 - \cos(k_1 + k_2))$$
(4.28)

と計算される. $k_1 = k_2 = K$ のとき,

$$\frac{E}{4J} = \frac{1}{2}(1 - \cos 2K) = K^2 - \frac{K^4}{3} + \dots$$
 (4.29)

となる.一方波数 K の相互作用しないスピン波が 2 個ある場合のエネルギーは

$$\frac{E}{4J} = 2(1 - \cos K) = K^2 - \frac{K^4}{12} + \dots$$
 (4.30)

したがって 2 個のスピン波の結合エネルギーは JK^4 である.

M 個のスピン波を表す状態を $|\psi^{(M)}
angle$ と書き,

$$|\psi^{(M)}\rangle = \sum_{1 \le x_1 < \dots < x_M \le N} \psi(x_1, \dots, x_M) |x_1, \dots, x_M\rangle$$
 (4.31)

と展開する. Bethe 仮設波動関数を

$$\psi(x_1, \dots, x_M) = \sum_{P \in S_M} A_P \exp\left(i \sum_{j=1}^M k_{Pj} x_j\right)$$
 (4.32)

と定義する.

周期的境界条件から

$$\psi(x_2, \dots, x_M, x_1 + N) = \psi(x_1, x_2, \dots, x_M)$$
(4.33)

となる. 左辺を計算すると,

$$\psi(x_2, \dots, x_M, x_1 + N) = \sum_{P \in S_M} e^{k_{PM}N} A_P \exp\left(i \sum_j k_{Pj} x_{j+1}\right)$$
(4.34)

$$= \sum_{P \in S_M} e^{k_{P1}N} A_{PR} \exp\left(i \sum_j k_{Pj} x_j\right). \tag{4.35}$$

ただし R は巡回置換 $j \mapsto j+1$ を表す.

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & M-1 & M \\ 2 & 3 & \cdots & M & 1 \end{pmatrix}$$
 (4.36)

したがって,以下の条件を得る.

$$e^{ik_{P1}N}A_{PR} = A_P, \quad \frac{A_{PR}}{A_P} = e^{ik_{P1}N}.$$
 (4.37)

次に,固有値方程式に Bethe 波動関数を代入する.まず,

$$|x_1 - x_2| > 1, |x_2 - x_3| > 1, \dots, |x_{M-1} - x_M| > 1$$
 (4.38)

のとき,

$$E\psi(x_1,...,x_M) = \sum_{j=1}^{M} \sum_{\xi=\pm 1} (\psi(...,x_j+\xi,...) - \psi(...,x_j,...))$$
 (4.39)

となる.次に $x_{j+1}=x_j+1$ の場合にこの式を適用すると, $\psi(\dots,x_j,x_j,\dots)$ という項と $\psi(\dots,x_j+1,x_j+1,\dots)$ という項が出てくる.そこで,境界条件

$$2\psi(\dots, x_j, x_j + 1, \dots)$$

= $\psi(\dots, x_j, x_j, \dots) + \psi(\dots, x_j + 1, x_j + 1, \dots)$ (4.40)

を課す.すると余計な項による寄与が消えてくれて、(4.39)が任意の場合に成り立つ.

(4.40) を係数 A(P) で表そう. まず M=3 の場合を考えてみる.

$$2\psi(x_1, x_2, x_2 + 1) = \psi(x_1, x_2, x_2 + 1) + \psi(x, x_2 + 1, x_2 + 1)$$
(4.41)

という式に,

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = A_{123}e^{i(k_1x_1 + k_2x_2 + k_3x_3)} + A_{132}e^{i(k_1x_1 + k_3x_2 + k_2x_3)} + \cdots$$
(4.42)

を代入する. (4.41) の中で x_1 依存性が $e^{ik_1x_1}$ という形になる項だけを取り出せば,(4.42) の最初の 2 項を考えるだけでよく,

$$2\left(A_{123}e^{ik_3} + A_{132}e^{ik_2}\right) = (A_{123} + A_{132})\left(1 + e^{i(k_3 + k_2)}\right) \tag{4.43}$$

を得る. 同様にして,

$$2\left(A_{231}e^{ik_1} + A_{213}e^{ik_3}\right) = (A_{231} + A_{213})\left(1 + e^{i(k_1 + k_3)}\right) \tag{4.44}$$

$$2\left(A_{312}e^{ik_2} + A_{321}e^{ik_1}\right) = (A_{312} + A_{321})\left(1 + e^{i(k_2 + k_1)}\right) \tag{4.45}$$

を得る.

M 粒子の場合も同様に考えられる. π_j を j と j+1 を入れ替える置換とすれば、

$$2\left(A_{P}e^{ik_{P(j+1)}} + A_{P\pi_{j}}e^{ik_{Pj}}\right)$$

$$= (A_{P} + A_{P\pi_{j}})\left(1 + \exp\{i(k_{P(j+1)} + k_{Pj})\}\right)$$
(4.46)

$$\frac{A_{P\pi_j}}{A_P} = -\frac{1 + \exp\{i(k_{P(j+1)} + k_{Pj})\} - 2\exp(k_{Pj})}{1 + \exp\{i(k_{Pj} + k_{P(j+1)})\} - 2\exp(ik_{P(j+1)})}$$
(4.47)

となる.2 粒子の場合と同様にラピディティを

$$e^{ik_j} = \frac{\lambda_j + i}{\lambda_j - i} \tag{4.48}$$

で定義すれば、

$$\frac{A_{P\pi_j}}{A_P} = \frac{\lambda_{Pj} - \lambda_{P(j+1)} + 2i}{\lambda_{Pj} - \lambda_{P(j+1)} - 2i} \tag{4.49}$$

巡回置換 R は以下のように表せる.

$$R = \pi_1 \pi_2 \cdots \pi_{M-1} \tag{4.50}$$

 $R_{j} = \pi_{1}\pi_{2}\cdots\pi_{j-2}\pi_{j-1}$ とすると, $R_{M} = R,\ R_{1} = e$ であり,

$$\frac{A_{PR}}{A_P} = \frac{A_{PR_M}}{A_{R_{M-1}}} \frac{A_{PR_{M-1}}}{A_{PR_{M-2}}} \cdots \frac{A_{PR_3}}{A_{PR_2}} \frac{A_{PR_2}}{A_{PR_1}}$$
(4.51)

と分解できる.ここで, $R_j j = 1$, $R_j (j+1) = j+1$ であるから,

$$\frac{A_{PR_{j+1}}}{A_{PR_j}} = \frac{A_{PR_j\pi_j}}{A_{PR_j}} = \frac{\lambda_{P1} - \lambda_{P(j+1)} + 2i}{\lambda_{P1} - \lambda_{P(j+1)} - 2i}$$
(4.52)

である. これを j+1=2,3,...,M の場合で掛け合わせて,

$$\frac{A_{PR}}{A_P} = \prod_{l \neq P1} \frac{\lambda_{P1} - \lambda_l + 2i}{\lambda_{P1} - \lambda_l - 2i} \tag{4.53}$$

を得る.

(4.37), (4.53) から,

$$\left(\frac{\lambda_j + i}{\lambda_j - i}\right)^N = \prod_{l \neq j} \frac{\lambda_j - \lambda_l + 2i}{\lambda_j - \lambda_l - 2i}, \quad (j = 1, 2, \dots, M)$$

$$\tag{4.54}$$

が分かる.これが M 粒子の場合の Bethe 仮設方程式である.

Bethe 仮設の排他律

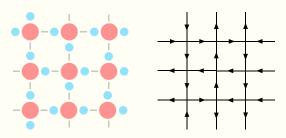
ここまで 1 次元 Heisenberg 模型のスピン波の波動関数を求めてきたが,実はこれは Bose 粒子であるマグノンとは異なった性質をもっている.

Bethe 仮設法では複数のスピン波は同じ擬運動量をとることができない. 簡単のため 2 粒子で考えると,もし $k_1=k_2$ ならば,(4.15) から $A_{12}=-A_{21}$ となり,波動関数はゼロになる.

代数的 Bethe 仮設

six-vertex model

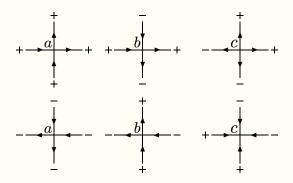
まず six-vertex model を紹介する. これは 2 次元の氷をモデル化したものである.



左の図では,正方格子の各辺で水素原子の配置に 2 通りの自由度が存在する.これを頂点を結ぶ矢印として書いたのが右の図である.

各頂点が電気的に中性であるという条件を課すと、各頂点で流入する矢印と流出する矢印の数が等しくなる.これを ice rule という.

Ice rule を考慮すると,あり得る頂点は 6 通り存在する.ここからこの模型を six-vertex model と呼ぶ.矢印の反転に対する対称性を仮定すると,Boltzmann weight a,b,c によって模型は決定される.



ここで,右向き・上向きの矢印を正とし,左向き・下向きの矢印を負とした. Boltzmann weight 全体を定数倍しても,分配関数は変わらないので,a,b,c は自由に規格化してよい. six-vertex model の頂点は,上下左右の矢印の符号に対して,0,a,b,c のいずれかを返すようなテンソルだとみなせる. α 行目,n 列目の頂点を,2 つのスピンの合成系に対する演算子として,L 演算子を

$$L_{\alpha,n} = \frac{a+b}{2} 1_{\alpha} 1_n + \frac{a-b}{2} \sigma_{\alpha}^z \sigma_n^z + \frac{c}{2} (\sigma_{\alpha}^- \sigma_n^+ + \sigma_{\alpha}^+ \sigma_n^-)$$
 (5.1)

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a(1+\sigma_n^z) + b(1-\sigma_n^z) & c\sigma_n^- \\ c\sigma_n^+ & a(1-\sigma_n^z) + b(1+\sigma_n^z) \end{pmatrix}$$
(5.2)

$$= \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & c & 0 \\ 0 & c & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix} \tag{5.3}$$

と定義する.ここで, $\langle k|_{\alpha} \ \langle j|_n \ L_{\alpha,n} \ |i\rangle_n \ |l\rangle_{\alpha} = (L_{\alpha,n})^i_j|_{kl}$ は頂点 (α,n) の Boltzmann weight であり,添字 i,j,k,l はそれぞれ上下左右の矢印の符号を表している.

モノドロミー行列 T および転送行列 τ は, α 行目の頂点 $(\alpha,1),\dots,(\alpha,N)$ に対し,

$$(T_{\alpha})_{kl} = (L_{\alpha,1}L_{\alpha,2}\cdots L_{\alpha,N})_{kl}$$

$$(5.4)$$

$$\tau_{\alpha} = \operatorname{tr} T_{\alpha} = \sum_{i} (L_{\alpha,1} L_{\alpha,2} \cdots L_{\alpha,N})_{kk}$$
 (5.5)

と定義される. α についての添字は支障がなければ省略する.モノドロミー行列は $T^{i_1i_2\cdots i_N}_{j_1j_2\cdots j_N}|_{kl}$ という添字をもち,転送行列は $\tau^{i_1i_2\cdots i_N}_{j_1j_2\cdots j_N}$ という添字をもつ.上下方向に並んだ転送行列 τ を全て掛け合わせてトレースをとれば分配関数が得られる:

$$Z = \operatorname{tr}\left(\tau^{N}\right) = \sum_{i_{1},\dots,i_{N}} (\tau^{N})_{i_{1}\cdots i_{N}}^{i_{1}\cdots i_{N}}.$$
(5.6)

したがって分配関数を求めるためには、au の固有値が分かればよい.

a, b, c を以下のようなパラメーター $\lambda, \eta \in \mathbb{C}$ で表すと便利である.

$$\begin{cases} a = \sin(\lambda + 2\eta) \\ b = \sin(\lambda) \\ c = \sin(2\eta) \end{cases}, \begin{cases} a = \lambda + 2\eta \\ b = \lambda \\ c = 2\eta \end{cases}, \begin{cases} a = \sinh(\lambda + 2\eta) \\ b = \sinh(\lambda) \\ c = \sinh(2\eta) \end{cases}$$
(5.7)

パラメーター表示の使い分けは、

$$\Delta = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab} = \cos(2\eta), \ 1, \ \cosh(2\eta)$$
 (5.8)

によって行う. $|\Delta|<1$ の場合は左, $\Delta=1$ の場合は真ん中, $\Delta>1$ の場合は右を採用する. $\Delta\leq-1$ の場合は今は考えない. 具体的な計算は $|\Delta|<1$ の場合で行うが,その他の場合も結果は同じである.

L 演算子 $L_{\alpha,n}$ を

$$L_{\alpha,n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & b/a & c/a & 0\\ 0 & c/a & b/a & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
 (5.9)

と定義し直す.実は,XXZ model のハミルトニアンと six-vertex model の転送行列の間には,

$$H_{XXZ} = \frac{\sin(2\eta)}{2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} \ln \tau(\lambda) \bigg|_{\lambda=0} + \frac{1}{4} N \cos(2\eta)$$
 (5.10)

という関係が成り立つ.これを証明しよう.

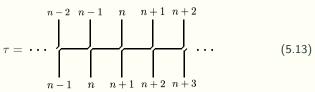
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\ln\tau(\lambda) = \tau(\lambda)^{-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\tau(\lambda) \tag{5.11}$$

より、 $\tau^{-1}(0)$ と $\tau'(0)$ をそれぞれ求めることにする.

 $\lambda=0$ のとき, b=0, $a=c=\sin(2\eta)$ となる. したがって,

$$L_{\alpha,n}(\lambda=0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \Pi^{(\alpha,n)}$$
 (5.12)

と書ける. $L_n(0)$ を掛け合わせてトレースをとることで,転送行列 au(0) が求まる.これは以下のように図示すると分かりやすい.



すなわち,au(0) は全ての格子のスピンを左にシフトさせるような演算子である. よって $au^{-1}(0)$ は,スピンを右にシフトさせることがわかる. つぎに $\tau'(0)$ を求める. $\lambda=0$ のとき,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} \left(\frac{b}{a} \right) \Big|_{\lambda=0} = \frac{1}{\sin(2\eta)}, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} \left(\frac{c}{a} \right) \Big|_{\lambda=0} = -\frac{\cos(2\eta)}{\sin(2\eta)} \tag{5.14}$$

となることから、

$$L'_{\alpha,n}(\lambda=0) = \frac{1}{\sqrt{|1-\Delta^2|}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & -\Delta & 0\\ 0 & -\Delta & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(5.15)

と書ける.

以上の結果から、

$$\tau (\lambda)^{-1} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} \tau(\lambda) \Big|_{\lambda=0} = \sum_{n=1}^{N} \dots \boxed{ \begin{bmatrix} n-1 & n & n+1 & n+2 \\ L'(0) & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & \\ & & & \\ & & \\ & & & \\ & &$$

となる. Σ の中身を計算すると,

$$\Pi^{(n,n+1)}L'_{n+1,n}(0) = \frac{1}{\sqrt{|1-\Delta^2|}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\Delta & 1 & 0\\ 0 & 1 & -\Delta & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (5.16)

(5.16) を n について足し合わせると,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} \ln \tau(\lambda) \Big|_{\lambda=0} \\
= \frac{1}{\sqrt{|1-\Delta^2|}} \sum_{n=1}^{N} \left[\Delta \frac{\sigma_n^z \sigma_{n+1}^z - 1_n 1_{n+1}}{2} + \frac{\sigma_n^+ \sigma_n^- + \sigma_n^- \sigma_n^+}{4} \right]. \tag{5.17}$$

したがって,

$$H_{XXZ} = \frac{\sqrt{|1 - \Delta^2|}}{2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} \ln \tau(\lambda) \bigg|_{\lambda = 0} + \frac{1}{4} N\Delta \tag{5.18}$$

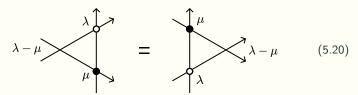
となって,目的の式が示された.この式は $\Delta>1$ の場合にも成り立つ. $\Delta=1$ の場合は $\eta\to0$ の極限をとって,

$$H_{XXX} = \eta \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} \ln \tau(\lambda) \Big|_{\lambda=0} + \frac{1}{4}N.$$
 (5.19)

となる.

Yang-Baxter 関係式

異なる Boltzmann weight から構成される L 演算子 $L(\lambda), L(\mu)$ に対し,以下の図で表されるような関係式を考えてみる.



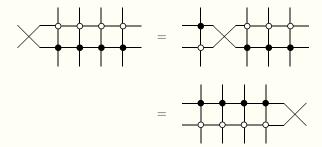
ここで矢印は正の向きとする方向を表している.式で書くと,

$$R(\lambda - \mu)(L_n(\lambda) \otimes L_n(\mu)) = (L_n(\mu) \otimes L_n(\lambda))R(\lambda - \mu)$$
(5.21)

である. $R(\lambda-\mu)$ は R 演算子と呼ばれ,ここでは L 演算子と同じである.

まず Yang-Baxter 関係式が成り立つと,何が嬉しいかを説明する.

 $R(\lambda - \mu)(T(\lambda) \otimes T(\mu))$ を考え、Yang-Baxter 関係式を繰り返し用いると、



両辺に $R^{-1}(\lambda-\mu)$ を掛けてトレースをとることで、転送行列の間の交換関係

$$[\tau(\lambda), \tau(\mu)] = 0 \tag{5.22}$$

が得られる.

Yang-Baxter 関係式を具体的に解いて、頂点が満たすべき条件を求めよう.まず、 (5.20) を以下のように改変しておく.

この変形は矢印の反転に対する対称性から従う.さらに,基準となる方向を反転 して,

とする. これは 2 つの頂点 (無印と白丸) で $a \leftrightarrow b$ という変換をしたことを意味している. 後で元に戻せば正しい結果を与える.

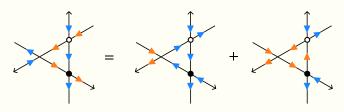
(5.20) は $2^6=64$ 個の方程式の集まりであるが,実際は 3 つの方程式で表せる.

- ice rule のために,流入する矢印の数と流出する矢印の数は等しくなる.したがって,両辺が 0 でないのは ${}_6C_3=20$ 通りだけである.
- さらに矢印の反転に対する対称性から、10 通りだけ考えれば良い。
- 10 通りのうちの 4 通りでは、(5.20) の左辺と右辺がちょうど矢印を反転した ものになり、恒等式を与える。これは、

$$\begin{pmatrix}
j_1 & j_2 & j_3 \\
i_1 & i_2 & i_3
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
\text{in in in in out out out out out}, & \begin{pmatrix}
\text{in out in out out in out}, \\
\text{out in in out out in out out}, \\
\text{out out in in out out out}, & \begin{pmatrix}
\text{in in out out}, \\
\text{in out out}, \\
\text{out out out}, \\
\text{out}, \\$$

という場合である.ただし, \inf は流入する矢印を表し, \inf は流出する矢印を表す.

● 残りの 6 通りから,6 個の方程式が得られるが,左辺と右辺を入れ替えたもの が出てくるので実質的な方程式の数は 3 個である. そのうちの1つは,



という式で表される. $a(\lambda-\mu)=a,\ a(\lambda)=a',\ a(\mu)=a''$ のようにおいて,Boltzmann weight を使って書くと,

$$cb'b'' = ca'a'' + ac'c'' (5.26)$$

となる. 頂点を巡回させることで, 残りの方程式は以下のように求まる.

$$bc'b'' = ac'a'' + ca'c'' (5.27)$$

$$bb'c'' = aa'c'' + cc'a''$$
 (5.28)

自明でない解が存在する条件は、

$$\det \begin{pmatrix} ca' & -cb' & ac' \\ ac' & -bc' & ca' \\ cc' & 0 & aa' - bb' \end{pmatrix}$$

$$= cc'(aa' - bb')(-a'b + ab') + cc'(-a'b'c^2 + abc'^2) = 0.$$

両辺を 2aa'bb'cc' で割ると,

$$\frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab} - \frac{a'^2 + b'^2 - c'^2}{2a'b'} \equiv \Delta - \Delta' = 0.$$
 (5.29)

よって $\Delta=\Delta'=\Delta''$ が分かる.またこの式は $a\leftrightarrow b,\ a'\leftrightarrow b'$ としても不変だから,もとの Yang-Baxter 関係式の解も同様である.

 $\Delta = 1$ の場合を考える、パラメーターのとり方を変えて、L 演算子を

$$L_n(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda + \eta \sigma_n^z & \eta \sigma_n^- \\ \eta \sigma_n^+ & \lambda - \eta \sigma_n^z \end{pmatrix}$$
 (5.30)

で定義する. これは今までの定義で $\lambda + \eta \rightarrow \lambda$ としたものである.

またモノドロミー行列の成分表示を

$$T(\lambda) = L_1(\lambda) \cdots L_N(\lambda) = \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix}$$
 (5.31)

と書く.

モノドロミー行列の間の関係式

$$R(\lambda - \mu) \cdot T(\lambda) \otimes T(\mu) = T(\mu) \otimes T(\lambda) \cdot R(\lambda - \mu)$$
 (5.32)

から、16個の交換関係

$$\begin{pmatrix}
a & 0 & 0 & 0 \\
0 & b & c & 0 \\
0 & c & b & 0 \\
0 & 0 & 0 & a
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
AA' & AB' & BA' & BB' \\
AC' & AD' & BC' & BD' \\
CA' & CB' & DA' & DB' \\
CC' & CD' & DC' & DD'
\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}
A'A & A'B & B'A & B'B \\
A'C & A'D & B'C & B'D \\
C'A & C'B & D'A & D'B \\
C'C & C'D & D'C & D'D
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
a & 0 & 0 & 0 \\
0 & b & c & 0 \\
0 & c & b & 0 \\
0 & 0 & 0 & a
\end{pmatrix}$$
(5.33)

を得る.ただし,引数を省略して, $a=a(\lambda-\mu), A=A(\lambda), A'=A(\mu)$ などと表した.

このうち使う交換関係は3つだけで,1行目4列目,1行目2列目,2行目4列目 に注目すると,

$$B(\lambda)B(\mu) = B(\mu)B(\lambda) \tag{5.34}$$

$$a(\lambda - \mu)A(\lambda)B(\mu) = b(\lambda - \mu)A(\mu)B(\lambda) + c(\lambda - \mu)B(\mu)A(\lambda)$$
 (5.35)

$$b(\lambda - \mu)B(\lambda)D(\mu) + c(\lambda - \mu)D(\lambda)B(\mu) = a(\lambda - \mu)B(\mu)D(\lambda)$$
 (5.36)

を得る.

代数的 Bethe 仮設法においては,転送行列 $au(\lambda)$ の固有状態として,

$$|M\rangle = B(\lambda_1) \cdots B(\lambda_M) |0\rangle$$
 (5.37)

と書けるものを仮定する.まず真空 $|0\rangle=|\uparrow\rangle_1\left|\uparrow\rangle_2\cdots\left|\uparrow\right\rangle_N$ が $\tau(\lambda)$ の固有状態であることを示す.

$$L_n(\lambda) |\uparrow\rangle_n = \begin{pmatrix} (\lambda + \eta) |\uparrow\rangle_n & \eta |\downarrow\rangle_n \\ 0 & (\lambda - \eta) |\uparrow\rangle_n \end{pmatrix}$$
 (5.38)

が上三角行列であることに注目すると、

$$T(\lambda)|0\rangle = \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix} |0\rangle = \begin{pmatrix} (\lambda + \eta)^N |0\rangle & * \\ 0 & (\lambda - \eta)^N |0\rangle \end{pmatrix}$$
(5.39)

と書ける. トレースをとると,

$$\tau(\lambda)|0\rangle = (\alpha(\lambda) + \delta(\lambda))|0\rangle.$$
 (5.40)

ただし、 $\alpha(\lambda) = (\lambda + \eta)^N$ 、 $\delta(\lambda) = (\lambda - \eta)^N$ と定義した.

次に、1 粒子状態として、 $B(\lambda_1)|0\rangle$ を考える.

$$\tau(\lambda)B(\lambda_1)|0\rangle = [A(\lambda) + D(\lambda)]B(\lambda_1)|0\rangle \stackrel{?}{\propto} B(\lambda_1)|0\rangle$$
 (5.41)

ここで,

$$A(\lambda)B(\lambda_1)|0\rangle = \frac{a(\lambda_1 - \lambda)}{c(\lambda_1 - \lambda)}B(\lambda_1)\alpha(\lambda)|0\rangle + \frac{b(\lambda_1 - \lambda)}{c(\lambda_1 - \lambda)}B(\lambda)\alpha(\lambda_1)|0\rangle \quad (5.42)$$

である. 同様に,

$$D(\lambda)B(\lambda_1)|0\rangle = \frac{a(\lambda - \lambda_1)}{c(\lambda - \lambda_1)}B(\lambda_1)\delta(\lambda)|0\rangle + \frac{b(\lambda - \lambda_1)}{c(\lambda - \lambda_1)}B(\lambda)\delta(\lambda_1)|0\rangle \quad (5.43)$$

である.したがって, $B(\lambda_1)|0\rangle$ が $\tau(\lambda)$ の固有状態になるための条件として,

$$\frac{b(\lambda_1 - \lambda)}{c(\lambda_1 - \lambda)}\alpha(\lambda_1) + \frac{b(\lambda - \lambda_1)}{c(\lambda - \lambda_1)}\delta(\lambda_1) = 0$$
 (5.44)

が導かれる.

 $b(\lambda)$ は奇関数, $c(\lambda)$ は偶関数なので,(5.44) は

$$\frac{\alpha(\lambda_1)}{\delta(\lambda_1)} = \left(\frac{\lambda_1 + \eta}{\lambda_1 - \eta}\right)^N = 1 \tag{5.45}$$

となる. λ_1 をリスケールすれば,

$$\left(\frac{\lambda_1 + i}{\lambda_1 - i}\right)^N = 1\tag{5.46}$$

となる. これは 1 粒子状態に対する Bethe 仮設方程式である. さらに, 2 粒子状態が転送行列の固有状態となる条件

$$\tau(\lambda)B(\lambda_1)B(\lambda_2)|0\rangle \propto B(\lambda_1)B(\lambda_2)|0\rangle$$
 (5.47)

を考える.同様に交換関係を用いると, λ_1,λ_2 に対する 2 粒子状態の Bethe 仮設方程式を得ることができる.

- [1] R.P. ファインマン,和訳;西川恭治,『ファインマン統計力学』 (丸善出版, 2009).
- [2] 芳田 奎,『磁性』(岩波書店,1991).
- [3] 渡辺悠樹, 村山斉. (2013). 南部・ゴールドストーンボソンの統一的理解 (交流). 日本物理学会誌, 68(4), 200-208.
- [4] Franz Utermohlen. Spin-Wave Theory Using the Holstein-Primakoff Transformation
- [5] 出口哲生. (2000). 1 次元量子系の厳密解とベーテ仮説の数理物理. 物性研究, 74(3), 255-319.
- [6] 和達三樹,『岩波講座 現代の物理学 14 非線形波動』(岩波書店, 1992)
- [7] Franchini, F. (2017). An introduction to integrable techniques for one-dimensional quantum systems.