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

$$|x_1, x_2, \ldots, x_n\rangle = \sigma^-_{x_1} \sigma^-_{x_2} \cdots \sigma^-_{x_n} |0\rangle \tag{4.2}$$

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．

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

$$\psi(x_1, x_2) = A_{12} e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + A_{21} e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}. \tag{4.4}$$

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 $1 \leq x_1 < x_2 \leq N$ 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

$$e^{ik_2 N} A_{12} = A_{21}, \quad e^{ik_1 N} A_{21} = A_{12} \tag{4.6}$$

と書き換えられる．また，

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

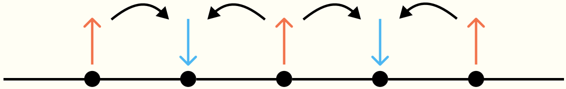
が分かる．

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

$$H = -J \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_{i+1} + NJ = -2J \sum_i (\Pi^{i,i+1} - 1) \tag{4.9}$$

(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，

$$\begin{aligned} E\psi(x_1, x_2) =& -2J\Big[\psi(x_1 - 1, x_2) + \psi(x_1 + 1, x_2) \\ &+ \psi(x_1, x_2 - 1) + \psi(x_1, x_2 + 1) - 4\psi(x_1, x_2)\Big]. \end{aligned} \tag{4.10}$$

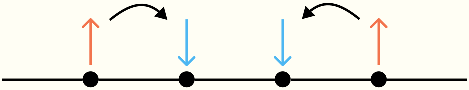


さらに，$A_{12}\exp(i(k_1x_1 + k_2x_2))$ に掛かる係数だけを取り出すと，

$$\begin{aligned} E &= -2J(e^{-ik_1} + e^{ik_1} + e^{-ik_2} + e^{ik_2} - 4) \\ &= 4J(2 - \cos k_1 - \cos k_2) \end{aligned} \tag{4.11}$$

次に $x_2 - x_1 = 1$ のとき，

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



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，

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

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_j を

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

で定義すれば，

$$\begin{aligned}\frac{A_{12}}{A_{21}} &= -\frac{(\lambda_1 - i)(\lambda_2 - i) + (\lambda_1 + i)(\lambda_2 + i) - 2(\lambda_1 + i)(\lambda_2 - i)}{(\lambda_1 - i)(\lambda_2 - i) + (\lambda_1 + i)(\lambda_2 + i) - 2(\lambda_1 - i)(\lambda_2 + i)} \\ &= \frac{2i\lambda_1 - 2i\lambda_2 - 4}{2i\lambda_1 - 2i\lambda_2 + 4} = \frac{\lambda_1 - \lambda_2 + 2i}{\lambda_1 - \lambda_2 - 2i}\end{aligned} \tag{4.17}$$

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，

$$\lambda_1 = \lambda + i + i\epsilon, \quad \lambda_2 = \lambda - i - i\epsilon. \tag{4.19}$$

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，

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

である．

したがって，実数 u, v によって

$$k_1 = u + iv, \quad k_2 = u - iv \tag{4.22}$$

とおく．

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

から $e^v = \cos u$ が分かる．また

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

から u が決定される．波動関数は，

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

と表される．

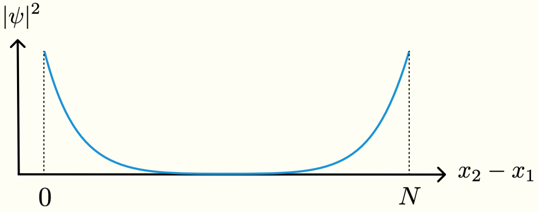
ここで，(4.24) から

$$\frac{A_{12}}{A_{21}} = e^{ik_1 N} = e^{iuN} e^{-vN} = \pm e^{-vN} \tag{4.26}$$

なので，

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

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，

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

と計算される．$k_1 = k_2 = K$ のとき，

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

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

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

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 $|\psi^{(M)}\rangle$ と書き，

$$|\psi^{(M)}\rangle = \sum_{1\leq x_1<\cdots<x_M\leq N} \psi(x_1,\ldots,x_M)\,|x_1,\ldots,x_M\rangle \tag{4.31}$$

と展開する．Bethe 仮設波動関数を

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

と定義する．

周期的境界条件から

$$\psi(x_2, \ldots, x_M, x_1 + N) = \psi(x_1, x_2, \ldots, x_M) \tag{4.33}$$

となる．左辺を計算すると，

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

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

ただし R は巡回置換 $j \mapsto j+1$ を表す．

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

したがって，以下の条件を得る．

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

次に，固有値方程式に Bethe 波動関数を代入する．まず，

$$|x_1 - x_2| > 1,\ |x_2 - x_3| > 1, \ldots,\ |x_{M-1} - x_M| > 1 \tag{4.38}$$

のとき，

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

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

$$\begin{aligned} &2\psi(\ldots, x_j, x_j + 1, \ldots) \\ &= \psi(\ldots, x_j, x_j, \ldots) + \psi(\ldots, x_j + 1, x_j + 1, \ldots) \end{aligned} \tag{4.40}$$

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．

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

という式に，

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

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，

$$\begin{aligned} &2\left(A_P e^{ik_{P(j+1)}} + A_{P\pi_j} e^{ik_{Pj}}\right) \\ &= (A_P + A_{P\pi_j})\left(1 + \exp\left\{i(k_{P(j+1)} + k_{Pj})\right\}\right) \end{aligned} \tag{4.46}$$

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

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，

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

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

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

である．これを $j+1 = 2, 3, \ldots, M$ 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，

$$\left(\frac{\lambda_j + i}{\lambda_j - i}\right)^N = \prod_{l \neq j} \frac{\lambda_j - \lambda_l + 2i}{\lambda_j - \lambda_l - 2i}, \quad (j = 1, 2, \ldots, M) \tag{4.54}$$

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．