

# 量子統計力学の可解模型： 素励起、臨界現象、非平衡ダイナミクス<sup>1</sup>

お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科

出口 哲生<sup>2</sup>

## Abstract

最近、孤立した量子多体系の非平衡ダイナミクスが活発に研究されている。特に、外部変数を急変させた後の量子系の時間発展を、量子クエンチ (quantum quench) とよぶ。70年代に McCoy 達により可解系で量子クエンチが議論されたが、最近冷却原子系の実験等に刺激され、再び注目されている。

孤立量子系のダイナミクスは、量子統計力学の基礎の視点からも興味深い。量子多体系の純粋状態を任意に与えると、ほとんどの場合、その状態に関する物理量の期待値は、平衡値に非常に近い値に近づくことが、最近再発見された。量子状態の典型性 (typicality) の視点である。さらに、与えられた純粋状態のユニタリな時間発展の中で、局所演算子の期待値は平衡状態のアンサンブル平均値に収束する、と予想されている。このときエントロピーは全く変化しないが、しかし、緩和のような振る舞いが見られる。

3日間の講義では最初に、可積分量子系の例を紹介し、デルタ関数型ポテンシャルで相互作用する1次元ボース気体に対してベータ仮設の方法を説明する。次に、ホール励起など典型的な素励起を詳しく解説する。さらに、低励起スペクトルでの系の振る舞いとCFTとの対応の概略をスケッチする。量子多体問題の様々な手法が可積分量子系で具体的に実現される点が教育的であると思われる。さらに、代数的ベータ仮設を説明し、スラブノフ公式など演算子の期待値や形状因子を求めるに役立つ定理を解説する。そして、1次元ボース気体やXXX鎖等での最近の結果を紹介する。

## 講義内容の目次：

- 1. 可積分量子系の例：1次元ハイゼンベルグ模型 (XXX鎖)、1次元ボース気体、1次元ハバード模型
- 2. 1次元ボース気体の厳密解の波動関数に対するベータ仮設の方法：完全性
- 3. 1次元ボース気体 (およびXXX鎖) の素励起スペクトルと共形場理論 (CFT)
- 4. 代数的ベータ仮設法の基礎と様々な応用： 転送行列からハミルトニアンへの導出；形状因子公式と量子逆散乱問題公式
- 5. 孤立量子可解系の非平衡ダイナミクスと量子状態の典型性

<sup>1</sup>物性若手夏の学校の講義の原稿

<sup>2</sup>E-mail: deguchi@phys.ocha.ac.jp

# 1 はじめに

物理学で可解模型を研究する意義について少し説明してみたい。物理系で相互作用の効果調べるとき、何かはっきりした解析的な結果が導かれるとそれは一つの目安となり、その物理的意味を理解することが容易になるであろう。例えば、磁性体の相転移の臨界現象の研究において、2次元イジング模型が果たした役割がその典型である。すなわち、厳密解は相互作用する物理系の自明でない振る舞いを理解する上で手掛かりの一つとなる場合がある。

例えば、本講義で解説する可解模型には、基底状態からの低励起スペクトルにおいてギャップレスの励起が存在するパラメータ領域がある。そこでは相関関数がべき的に減衰するなど、絶対零度ではあるが相転移の臨界現象と似たような振る舞いが出現する [1, 2, 3, 4]。システムサイズ  $L$  を大きくするとき励起エネルギーの大きさがその逆数  $1/L$  に比例して小さくなり、さらに線形分散関係が成立する場合、系のゆらぎの振る舞いはスケール不変性を一般化する共形不変性を示す場の理論（共形場の理論）[2] で記述され、相関関数のべき的振る舞いにおける臨界指数などが共形場の理論によって説明できる例が、経験的に知られている。最近、量子XYZ鎖など代表的な可積分量子系において、相関関数のべき的振る舞いが代数的ベータ仮説を用いてほぼ厳密に導出された [5]。物性物理では、 $c = 1$  の共形場の理論で記述される量子系は朝永・ラッティンジャー流体と呼ばれる。

最近の例では量子クエンチなど量子多体系の時間発展に関して、量子系が可積分である場合にその多体効果が厳密に調べられている [6]。ちなみに、共形場理論の視点でも孤立量子系のダイナミクスが議論されている [7]。ただし、実験系と対応する有限系のダイナミクスでは分散関係の非線形性が重要となり、通常のラッティンジャー流体では記述できない [8]。この場合には直接、可積分量子系を研究する方が分かり易いであろう。このように、可解模型は量子多体系のダイナミクスを理解する上でも重要となる可能性がある。

一般に、量子多体系を物理学の枠組みの中で理解する上で、素励起や繰り込み群の考え方が役に立つ場合が多い。量子臨界現象でもこの二つは重要である。例えば、繰り込み群はスケール不変性あるいは共形不変性に対応する。可積分模型の理論を追うと技術的な側面が印象付けられるかもしれないが、しかし、さらに踏み込んで可解模型で記述される物理現象を理解するためには、一般的な量子多体系で役立つ見方の応用も重要である。

ただし、量子クエンチや非平衡ダイナミクスなど最近の発展を眺めると、新しい素材も出現しつつあり、素励起や繰り込み群など従来の枠組みだけでは把握しきれない面も感じられる。内容的に新しい要素が加わって来ていると言える。

この講義では可積分量子系の理論を展開するが、量子多体系で重要な素励起や繰り込みなど基本的な重要概念が応用される事例と位置づけ、物性物理学の基本の理解を試みる [9]。さらに最近取り扱いが可能となってきた量子多体系の非平衡ダイナミクスに関する説明し、今後の学問的発展を担う多くの若手研究者に、未来を展望する材料を提供することを目標としたい。

## 2 可積分量子系の例

### 2.1 1次元量子ハイゼンベルグ模型 – 量子スピン系の厳密解

ハイゼンベルグ (Heisenberg) 模型は、磁石を量子力学的に説明するために導入された模型の一つである。絶縁体の磁性を微視的に記述するためのもので、各格子点上に本来は電子に由来するスピン角運動量演算子  $\mathbf{S}$  が定義されている。格子点  $j$  上のスピン角運動量変数を  $\mathbf{S}_j$  と表す。そして、隣接する格子点上の電子の波動関数が重なるため、隣接する格子点上のスピン変数の間に交換相互作用がはたらくと考える。次のハミルトニアンで定義される。

$$\mathcal{H} = -2J \sum_{\langle j,k \rangle} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k \quad (2.1)$$

ここで記号  $\langle j, k \rangle$  は格子点  $j$  と  $k$  が互いに隣接する格子点であることを表し、和は全ての隣接する格子点のペアに関して足し合わせるものとする。そして、スピン  $1/2$  のスピン角運動量演算子  $\mathbf{S}$  は、各成分がパウリ行列  $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$  で与えられるベクトルを表す。

$$\mathbf{S}_j = (S_j^X, S_j^Y, S_j^Z) = \left( \frac{1}{2}\sigma_j^x, \frac{1}{2}\sigma_j^y, \frac{1}{2}\sigma_j^z \right). \quad (2.2)$$

簡単のため、 $\hbar = 1$  とおいた。パウリ行列と 2 行 2 列の単位行列  $I$  は、以下で与えられる。

$$\sigma^X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

ハイゼンベルグ模型のハミルトニアン (2.1) において結合定数  $J$  が正のとき ( $J > 0$ )、基底状態は強磁性的となる。一方、 $J$  が負の場合、反強磁性的になる。このとき、反強磁性ハイゼンベルグ模型とよぶ。

この模型 (2.1) をハイゼンベルグ模型と呼ぶのは、ハイゼンベルグが強磁性の微視的原因として隣り合う原子上の電子の波動関数の交換積分を考察したこと由来する。ただし、 $\vec{S}_j \cdot \vec{S}_k$  というスピン変数同士の結合を数式で表したのは Dirac である。電子の波動関数の重なりから交換積分  $J$  を導くことは、磁性の教科書を参照のこと [10]。

1 次元格子上的ハイゼンベルグ模型のハミルトニアンを考えよう。周期的境界条件  $\mathbf{S}_{N+1} = \mathbf{S}_1$  を仮定する。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{XXX}} &= -J \sum_{j=1}^N \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} \\ &= -J \sum_{j=1}^N \left( S_j^X S_{j+1}^X + S_j^Y S_{j+1}^Y + S_j^Z S_{j+1}^Z \right). \end{aligned} \quad (2.4)$$

1 次元系の場合、量子ハイゼンベルグ模型では反強磁性の場合を取り扱うことが多い。

1 次元の場合に、格子点  $j$  の上のスピン演算子  $\mathbf{S}_j$  に関して補足する。単位行列  $I$  の  $n$  重のテンソル積を、 $I^{\otimes n}$  と表そう。すると、 $j$  番目の格子点上のパウリ行列  $\sigma_j^X$  は、次のように表される。

$$\sigma_j^X = \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I}^{j-1} \otimes \sigma^X \otimes \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I}^{N-j} = I^{\otimes(j-1)} \otimes \sigma^X \otimes I^{\otimes(N-j)} \quad (2.5)$$

1 次元反強磁性 XXX 模型 (量子ハイゼンベルグ模型) の特徴として、以下のような事柄が挙げられる。ただし簡単のため、格子点数  $N$  は偶数とする。

- 基底状態は全スピン 0 ( $S = 0$ )、量子揺らぎあり (古典的ネール状態でない)
- 基底状態は臨界状態、ギャップなし
- 励起状態はスピノン (spinon) という「キンク解」

## 2.2 異方性をもつ可解量子スピン鎖の例

量子ハイゼンベルグ模型 (2.4) のスピン変数の結合は等方的で、ハミルトニアンには回転対称性が存在する。一方、回転対称性を壊すような異方的な結合定数が存在すると、結合定数の値に応じて基底状態が変化する場合がある。(これを量子相転移という。)

等方的な量子ハイゼンベルグ模型を量子 XXX 模型 (あるいは簡単に XXX 模型)、そして  $Z$  軸方向のスピン変数の結合定数が他成分と異なる模型を量子 XXZ 模型 (あるいは XXZ 模型) とよぶ。つまり XXZ 模型では  $X$  成分と  $Y$  成分の結合定数は同じで  $Z$  成分の

結合定数だけ異なる。この1次元異方的ハイゼンベルグ模型（あるいは量子XXZ鎖とよぶ）のハミルトニアンは、しばしば以下のように表される [3]。

$$\mathcal{H}_{XXZ} = -J \sum_{\ell=1}^N \left( S_{\ell}^X S_{\ell+1}^X + S_{\ell}^Y S_{\ell+1}^Y + \Delta S_{\ell}^Z S_{\ell+1}^Z \right), \quad \text{where } \vec{S}_{N+1} = \vec{S}_1. \quad (2.6)$$

ここで変数  $\Delta$  は異方性を表す変数であり、その値に応じて基底状態は異なる。 $|\Delta| \leq 1$  の場合、励起スペクトルにギャップがなく、基底状態は量子的な臨界状態であると考えられる。一方、 $|\Delta| > 1$  の場合、励起スペクトルにはギャップが存在する。

異方的ハイゼンベルグ模型をさらに一般化して、XYZ 全ての方向の結合定数が異なる模型を XYZ 模型とよぶ。そして1次元 XYZ 模型のハミルトニアンは以下に与えられる。

$$\mathcal{H}_{XYZ} = - \sum_{\ell=1}^N \left( J_X S_{\ell}^X S_{\ell+1}^X + J_Y S_{\ell}^Y S_{\ell+1}^Y + J_Z S_{\ell}^Z S_{\ell+1}^Z \right), \quad \text{where } \vec{S}_{N+1} = \vec{S}_1. \quad (2.7)$$

ここで XXZ 模型は  $J_X = J_Y = J, J_Z = J\Delta$  の場合に対応する。1次元 XYZ 模型の基底状態はその結合定数  $J_X, J_Y, J_Z$  に依存するが、詳細になるのでここでは省略する。

量子XXZ鎖を1次元異方的ハイゼンベルグ模型とよんだ。しかし量子力学的に考えると、XXZ結合は回転対称性（あるいは  $SU(2)$  対称性）を持たないため、本来の量子力学的スピン変数の異方的な相互作用とみなすことは難しい。このため、量子XXZ鎖のスピンを擬スピンとよぶこともある。実際、結晶場以外の効果で回転対称性を破るような相互作用をスピン変数の間に摂動効果として導くことは容易でなく、かなり複雑な物質でないと実現できない。量子XXZ鎖を1次元異方的ハイゼンベルグ模型ともよぶのは、この模型が何らかの意味での異方性を示す一方、可解で厳密な解析が可能であるからなのである。

## 2.3 デルタ関数型ポテンシャルで相互作用する1次元粒子の量子系

### 2.3.1 Lieb-Liniger 模型：相互作用する1次元ボース粒子系

相互作用する量子力学的粒子系の最も簡単な例 [11] として、デルタ関数型ポテンシャルで相互作用する1次元ボース粒子の系を考える。次のハミルトニアンで記述される1次元ボース粒子系を、リーブ・リニガー模型 (Lieb-Liniger 模型、LL 模型と略す) とよぶ [12, 13]。

$$\mathcal{H}_{LL} = - \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \sum_{j,k=1}^N c \delta(x_j - x_k) \quad (2.8)$$

ここでボース粒子の質量を  $m$  とするとき、 $2m = 1$  および  $\hbar = 1$  となる単位系を採用した。1次元系の長さを  $L$  とし、周期的境界条件を課す。波動関数は粒子の座標の置換に関して完全対称とする。

波動関数に対する条件を具体的に書いてみよう。 $N$  個のボース粒子の座標をそれぞれ  $x_1, x_2, \dots, x_N$  と表す。系の長さは  $L$  なのでその範囲を、 $0 \leq x_j \leq L$  とする。量子統計性より、全体の波動関数  $\Psi(x_1, \dots, x_N)$  は座標の置換に関して完全対称でなければならない。

$$\Psi(\dots, x_j, x_{\ell}, \dots) = \Psi(\dots, x_{\ell}, x_j, \dots) \quad \text{for } j \neq \ell \quad (2.9)$$

さらに周期的境界条件を満たさなければならない。

$$\Psi(x_1, \dots, x_j + L, \dots, x_N) = \Psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad (2.10)$$

3節でベータ仮設に基づいて波動関数を導く。実は、粒子間相互作用が斥力の場合、すなわち  $c > 0$  のとき、デルタ関数型ポテンシャルで相互作用する1次元ボース粒子の系において、ベータ固有状態の完全性が証明されている [14, 15]。すなわち、最初は波動関数を

仮定して出発するが、最終的には完全性が示される。この結果、少なくとも斥力 ( $c > 0$ ) の場合、ベテ仮設波動関数の他に解を探す必要はない。

結合定数  $c$  が無限大の極限で記述される量子系を、Tonks-Girardeau(TG) 気体とよぶ [11]。1次元系の場合、散乱効果は散乱長で良く近似されるので、粒子間相互作用が単純なデルタ関数型ポテンシャルであっても現実的な系の性質を表すことができる [16]。LL 模型も TG 気体も冷却原子系で実現されるような可積分量子系である。このため、LL 模型を 1次元ボース気体の模型と考え、1次元ボース気体の厳密解とよぶことができる。

### 2.3.2 デルタ関数型ポテンシャルで相互作用する 1次元フェルミ粒子の系

M. Gaudin と C.N. Yang によって独立に、1次元周期系の中をデルタ関数で相互作用するスピン 1/2 のフェルミ粒子系の厳密解が求められた [17, 18]。スピン 1/2 のフェルミ粒子を電子とみなすと、電子系の厳密解と解釈できる。

## 2.4 1次元ハバード模型 – 強相関電子系の厳密解

1次元ハバード模型の厳密解 [19] は、デルタ関数型相互作用ポテンシャルを持つ 1次元中のスピン 1/2 のフェルミ粒子系に対するベテ仮設を拡張とみなすと理解しやすいであろう。ハバード模型は、格子に強く束縛された電子模型から出発してホッピング（飛び移り）とクーロン相互作用を取り入れた模型なので、遷移金属などの電子系の模型とみなすことができる [20]。

周期的な 1次元格子鎖の各格子点上に原子が位置し、その原子にほぼ局在した電子状態が存在すると仮定する。電子状態としてはワニアー波動関数を考える。電子は上向きか下向きのスピンを持ち、各原子において上向き（下向き）の電子は一個しか存在できないとする。つまりパウリの排他律である。（バンドは一個ということ）このとき、格子点  $j$  上にスピン  $\sigma$  を持つ電子を生成する演算子（消滅させる演算子）を  $c_{j,\sigma}^\dagger$  ( $c_{j,\sigma}$ ) とする。これらはフェルミオン演算子であり、反交換関係を満たす。隣接する格子点上の電子の波動関数は互いに少しだけ重なり、このため電子は最近接格子点へ移動できると考える。さらに電子間にはクーロン力に由来する相互作用が作用する。ただし局在電子状態（実はワニアー波動関数）から出発するので、同じ格子点を占有する電子同士の間には電子間相互作用が存在しないと仮定できる。隣接する電子の波動関数の重なりは小さく、電子間相互作用も非常に小さい。この結果、同一の格子点に上向きスピンと下向きスピンの電子が一個ずつ存在する場合だけ、電子間相互作用が出現する。

1次元ハバード模型のハミルトニアンは、以下のように与えられる。

$$\mathcal{H}_{Hubbard} = -t \sum_{j=1}^L \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c_{j,\sigma}^\dagger c_{j+1,\sigma} + c_{j+1,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}) + U \sum_{j=1}^L n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow} \quad (2.11)$$

ここで格子点の総数は  $L$  とする。周期的境界条件は、 $c_{L+1,\sigma} = c_{1,\sigma}$  および  $c_{L+1,\sigma}^\dagger = c_{1,\sigma}^\dagger$  で与えられる。そして結合定数は、 $4t$  はバンド幅に対応し、ハバード結合定数  $U$  は電子間のクーロン力に対応する。 $n_{j,\sigma} = c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}$  は  $j$  番目の格子点上のスピン  $\sigma$  をもつ電子数を表す。

1次元ハバード模型の特徴としては、以下のような事柄が挙げられる。

- ハバード結合定数が斥力的のとき ( $U > 0$ )、ハーフフィリングでモット絶縁体を実現する
- スピン自由度と電荷自由度が分離（スピノン励起、ホロン励起）
- ハバード結合定数が引力的のとき ( $U < 0$ )、スピギャップが存在する

1次元ハバード模型のスピン部分のスペクトルは 1次元反強磁性量子ハイゼンベルグ模型と細かい点を除けばほぼ同じである。ちなみに、ハバード結合定数が大きい場合には摂動論を用いて、ハバード模型から反強磁性ハイゼンベルグ模型が導かれることは良く知られて

いる [21]。1次元ハバード模型の低励起スペクトルは共形場理論あるいは朝永・ラッチインジャー流体を実現する。系の大きさ  $L$  が十分に大きい場合、電荷ギャップ励起状態も含めてスピン自由度と電荷自由度の分離が成立する。共形場理論および朝永・ラッチインジャー流体では励起エネルギーの線形分散関係はその前提であるが、電荷ギャップ励起状態では線形分散関係は成立しない。しかしその場合でも、1次元ハバード模型ではスピン・電荷分離が実現している [4, 22]。

### 3 1次元ボース気体の厳密解

#### 3.1 波動関数に対するベーテ仮設法

##### 3.1.1 対称群

$n$  個の正整数  $1, 2, \dots, n$  の列を一つ考える。これを  $n$  個の正整数  $1, 2, \dots, n$  の順列とよぶ。これを  $p_1, p_2, \dots, p_n$  と表す。整数  $1, 2, \dots, n$  に対して、それぞれ順列  $p_1, p_2, \dots, p_n$  の整数を対応させる写像を、置換とよび、次の記号で表す。

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_n \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

すなわち  $P(j) = p_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) である。以後、 $P(j)$  を  $P_j$  と表す。

整数  $1, 2, \dots, n$  の置換全体は、群をつくる。これを  $n$  次の対称群とよび、記号  $S_n$  で表す。単位元を  $e$  と表す。

二つの整数  $j$  と  $k$  のみを交換し他の整数は動かさない置換を互換とよび、記号  $(j, k)$  で表す。特に、隣り合う整数  $j$  と  $j+1$  の互換を、記号  $\pi_j$  で表す。すなわち、

$$\pi_j = (j, j+1) \quad (3.2)$$

である。次の定理が数学で証明されている [23]。

**Theorem 3.1**  $n$  次の対称群は次の定義関係式を満たす  $n-1$  個の演算子  $\pi_1, \dots, \pi_{n-1}$  で生成される。

$$\pi_j^2 = e, \quad \text{for } j = 1, 2, \dots, n-1, \quad (3.3)$$

$$\pi_j \pi_{j+1} \pi_j = \pi_{j+1} \pi_j \pi_{j+1}, \quad \text{for } j = 1, 2, \dots, n-2. \quad (3.4)$$

この定理から、次のことが読み取れる。一つは、任意の置換は互換  $\pi_j$  の積として表されること、もう一つは、互換  $\pi_j$  達の積が二つ与えられ、どちらも同じ置換を表すとき、関係式 (3.4) を用いて必ず一方から他方を導出できること、である。後者はすなわち、与えられた置換を互換  $\pi_j$  の積として表す際の不定性は、関係式 (3.4) を用いた変形で尽くされる、ということの意味する。可解模型では、関係式 (3.4) は Yang-Baxter 方程式に対応する。

##### 3.1.2 一般の座標領域に対して定義された波動関数

波動関数の構成方法を説明する。最初に、固有値方程式（時間に依存しないシュレーディンガー方程式）

$$-\sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \Psi(x_1, \dots, x_N) + 2c \sum_{j < \ell}^N \delta(x_j - x_\ell) \Psi(x_1, \dots, x_N) = E \Psi(x_1, \dots, x_N) \quad (3.5)$$

において、二つの粒子の座標が一致しない場合、左辺は自由粒子のハミルトニアンと同じである。そこで、粒子の座標が互いにどれも異なる場合には自由粒子の波動関数が対応し、二つの粒子の座標が一致する場合にのみ、相互作用の効果を考えれば良い。

粒子の座標  $x_1, \dots, x_N$  を任意に与え、これらを小さい順番にならべる。このとき、ある置換  $Q$  を用いて、 $x_{Q1} \leq \dots \leq x_{QN}$  と小さい方から順番に並べることができる。逆に、座標  $x_j$  の間に不等式  $x_{Q1} < x_{Q2} < \dots < x_{QN}$  が成り立つような  $N$  次元空間の領域を考えると、順列  $Q1, Q2, \dots, QN$  あるいは置換  $Q$  を用いてこの領域に名前をつけることができる。そしてこの置換  $Q$  に対応する領域を、領域  $Q$  とよぶ。

こうして、置換  $Q$  に対応する領域  $Q$  で粒子座標  $x_j$  は次を満たす。

$$x_{Q1} \leq x_{Q2} \leq \dots \leq x_{QN} \quad (3.6)$$

この領域の波動関数を  $\Psi_{Q1, Q2, \dots, QN}(x_1, \dots, x_N)$  あるいは  $\Psi_Q(x_1, \dots, x_N)$  と表す。すなわち、全体の波動関数  $\Psi(x_1, \dots, x_N)$  は、領域  $Q$  では、

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \Psi_Q(x_1, \dots, x_N) \quad (3.7)$$

と表される。

例えば  $N = 3$  の場合、 $x_2 < x_1 < x_3$  となる領域に対して、順列 213 を対応させる。そして、置換  $Q$  は  $Q1 = 2, Q2 = 1, Q3 = 3$  より、以下のように与えられる。

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ Q1 & Q2 & Q3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

波動関数に対するベータ仮設法では、領域  $Q$  での波動関数  $\Psi_Q(x_1, \dots, x_N)$  を次のように仮定する。

$$\Psi_{Q1, Q2, \dots, QN}(x_1, \dots, x_N) = \sum_{P \in S_N} A_P(Q) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{Pj} x_{Qj}\right). \quad (3.9)$$

後で示すように、振幅  $A_P$  は領域の間の接続条件が成り立つように定めることができる。さらに、擬運動量  $k_j$  は周期的境界条件 (2.10) を満たすように  $k_j$  定めることができる。

以上をまとめる。粒子数が  $N$  の場合、座標の全定義域は全部で  $N!$  個の領域に分かれ、それぞれに置換  $Q$  が対応する。そして、各領域ごとに波動関数  $\Psi_Q(x_1, \dots, x_N)$  を定義し、それらの間の接続条件を満たすように全体の波動関数を構成する。(振幅  $A_P$  を定める。) そして、さらに波動関数が周期的境界条件 (2.10) を満たすようにする。(擬運動量  $k_j$  の値を定める。)

### 3.1.3 $N=2$ の場合

#### 各領域で定義された波動関数

2粒子の場合の波動関数  $\Psi(x_1, x_2)$  は、領域  $x_1 < x_2$  に対する波動関数  $\Psi_{12}(x_1, x_2)$  と領域  $x_2 < x_1$  に対する波動関数  $\Psi_{21}(x_1, x_2)$  の二つの波動関数を導入して定義する。

$$\Psi(x_1, x_2) = \begin{cases} \Psi_{12}(x_1, x_2) & \text{for } x_1 < x_2 \\ \Psi_{21}(x_1, x_2) & \text{for } x_2 < x_1 \end{cases} \quad (3.10)$$

そして、 $x_1 < x_2$  の領域では波動関数  $\Psi(x_1, x_2)$  は次式で与えられ、

$$\Psi_{12}(x_1, x_2) = A_{12}(12) \exp(i(k_1 x_1 + k_2 x_2)) + A_{21}(12) \exp(i(k_2 x_1 + k_1 x_2)) \quad (3.11)$$

$x_2 < x_1$  の領域では波動関数  $\Psi(x_1, x_2)$  は次式で与えられる。

$$\Psi_{21}(x_1, x_2) = A_{12}(21) \exp(i(k_1 x_2 + k_2 x_1)) + A_{21}(21) \exp(i(k_2 x_2 + k_1 x_1)) \quad (3.12)$$

## 波動関数の完全対称性

ボース・アインシュタイン統計のために、波動関数は座標の置換に対して対称となる。

$$\Psi(x_1, x_2) = \Psi(x_2, x_1) \quad (3.13)$$

$x_1 < x_2$  のとき、この条件は  $\Psi_{12}(x_1, x_2) = \Psi_{21}(x_2, x_1)$  と表され、振幅に対する次の関係式が導かれる。

$$\begin{aligned} & A_{12}(12) \exp(i(k_1 x_1 + k_2 x_2)) + A_{21}(12) \exp(i(k_2 x_1 + k_1 x_2)) \\ &= A_{12}(21) \exp(i(k_1 x_1 + k_2 x_2)) + A_{21}(21) \exp(i(k_2 x_1 + k_1 x_2)) \end{aligned} \quad (3.14)$$

これから次が導かれる。

$$A_{12}(12) = A_{12}(21), \quad A_{21}(12) = A_{21}(21) \quad (3.15)$$

この結果、振幅  $A_P(Q)$  は領域  $Q$  に依存せず、置換  $P$  のみで決まる。これを  $A_P$  と表そう。

$N = 2$  の場合のこの結論は、一般の  $N$  粒子の場合にも成り立つことが後で示される。

## 領域の境界における波動関数の連続性

領域の境界  $x_1 = x_2$  における波動関数の連続性の条件を考えよう。波動関数が座標の置換に関して完全対称であり、さらにどの領域でも波動関数とその内部で連続であれば、異なる領域との境界において、波動関数は連続であることが導かれる。このため、振幅に関する条件 (3.15) が成り立てば、波動関数は境界において連続であることが導かれる。

実際、各領域で波動関数が連続であれば、 $x_1 < x_2$  のときに  $x_1$  を増加させて  $x_2$  に近づける極限は  $\Psi_{12}(x_2, x_2)$  を与える。そこでボース・アインシュタイン統計性から、 $x_1 < x_2$  のとき  $\Psi_{12}(x_1, x_2) = \Psi_{21}(x_2, x_1)$  であるので、

$$\lim_{x_1 \rightarrow x_2; x_1 < x_2} \Psi_{12}(x_1, x_2) = \lim_{x_1 \rightarrow x_2; x_1 < x_2} \Psi_{21}(x_2, x_1) = \Psi_{21}(x_2, x_2) \quad (3.16)$$

より  $\Psi_{12}(x_2, x_2) = \Psi_{21}(x_2, x_2)$  が成り立つ。波動関数は領域 12 と 21 の境界で連続である。

## 領域の間での波動関数の接続条件の導出

$N = 2$  の場合、次のハミルトニアンを考える。

$$\mathcal{H}_{LL} = -\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + 2c\delta(x_1 - x_2) \quad (3.17)$$

これに対して、固有値方程式 (3.5) が成り立つ。

$$-\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \Psi(x_1, x_2) - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \Psi(x_1, x_2) + 2c\delta(x_1 - x_2)\Psi(x_1, x_2) = E\Psi(x_1, x_2) \quad (3.18)$$

粒子 2 の座標をはさむ微小な区間  $[x_2 - \epsilon, x_2 + \epsilon]$  において、固有値方程式を座標  $x_1$  に関して積分する。

$$\int_{x_2 - \epsilon}^{x_2 + \epsilon} \mathcal{H}_{LL} \Psi(x_1, x_2) dx_1 = \int_{x_2 - \epsilon}^{x_2 + \epsilon} E\Psi(x_1, x_2) dx_1 = O(\epsilon) \quad (3.19)$$

右辺は任意の小数  $\epsilon$  に対して小さな数となるので、ゼロとおける。

$$\begin{aligned} \int_{x_2 - \epsilon}^{x_2 + \epsilon} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \Psi(x_1, x_2) dx_1 &= \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi(x_1, x_2) \right]_{x_2 - \epsilon}^{x_2 + \epsilon} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi(x_1, x_2) \Big|_{x_2 + \epsilon} - \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi(x_1, x_2) \Big|_{x_2 - \epsilon} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi_{21}(x_1, x_2) \Big|_{x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi_{12}(x_1, x_2) \Big|_{x_2} \end{aligned} \quad (3.20)$$

ここで重心座標  $X$  と相対座標  $x$  をそれぞれ、 $X = (x_1 + x_2)/2$  および  $x = x_1 - x_2$  と定めよう。逆に解くと次のようになる。

$$x_1 = X + x/2, \quad x_2 = X - x/2 \quad (3.21)$$

ここで変数  $s$  を用いて変数  $x_1$  を表し、さらに座標変換 (3.21) を行う。すなわち、 $x_1(s) = x_1(X(s), x(s))$  とする。このとき次が成り立つ。

$$\frac{dx_1}{ds} = \frac{\partial x_1}{\partial X} \frac{dX}{ds} + \frac{\partial x_1}{\partial x} \frac{dx}{ds} \quad (3.22)$$

変数  $x_1$  に関する積分を変数  $s$  に関する積分に変換し、それを  $X$  と  $x$  の積分に戻す。

$$\begin{aligned} \int_{x_1(A)}^{x_1(B)} f(x_1) dx_1 &= \int_{s_A}^{s_B} f(x_1(s)) \frac{dx_1}{ds} ds \\ &= \int_{s_A}^{s_B} f(x_1) \left( \frac{\partial x_1}{\partial X} \frac{dX}{ds} + \frac{\partial x_1}{\partial x} \frac{dx}{ds} \right) ds \\ &= \int_{X_A}^{X_B} f(x_1) dX + \int_{x_A}^{x_B} f(x_1) dx \end{aligned} \quad (3.23)$$

ここで  $x_1 = x_1(A)$  と  $x_1 = x_1(B)$  に対応する変数  $s$  の値をそれぞれ  $s_A$  および  $s_B$  とし、変数  $X$  と  $x$  の値をそれぞれ  $X_A$  と  $X_B$ 、さらに  $x_A$  と  $x_B$  とする。すなわち、 $X_A = X(s(A))$ 、 $X_B = X(s(B))$  および  $x_A = x(s(A))$ 、 $x_B = x(s(B))$  である。こうして次式が導かれる。

$$\begin{aligned} &\int_{x_2-\epsilon}^{x_2+\epsilon} 2c \delta(x_1 - x_2) \Psi(x_1, x_2) dx_1 \\ &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} 2c \delta(x) \Psi(X + x/2, x_2) \frac{1}{2} dx + \int_{x_2-\epsilon/2}^{x_2+\epsilon/2} 2c \delta(x) \Psi(X + x/2, x_2) dx \\ &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} c \delta(x) \Psi(X + x/2, x_2) dx + O(\epsilon) \\ &= c \Psi(x_2, x_2) + O(\epsilon). \end{aligned} \quad (3.24)$$

よって、次の接続条件が導かれる。

$$\left. \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi(x_1, x_2) \right|_{x_2+\epsilon} - \left. \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi(x_1, x_2) \right|_{x_2-\epsilon} = c \Psi(x_2, x_2) \quad (3.25)$$

あるいは各領域で定義される波動関数を用いて、次のようにあらわされる。

$$\left. \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi_{21}(x_1, x_2) \right|_{x_2} - \left. \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi_{12}(x_1, x_2) \right|_{x_2} = c \Psi(x_2, x_2) \quad (3.26)$$

ここで  $x_1 = x_2 + \epsilon$  ならば  $x_2 < x_1$  であり領域  $(Q1, Q2) = (2, 1)$  に属し、一方  $x_1 = x_2 - \epsilon$  ならば  $x_1 < x_2$  であり領域  $(Q1, Q2) = (1, 2)$  に属することに注意する。

接続条件 (3.26) は、 $N = 2$  の場合のシュレーディンガー方程式を相対座標と重心座標に分離し、相対座標に関して積分することによって導くこともできる。おそらく量子力学の解法としては、その方法の方が普通であろう。ただし上の方法は、一般の  $N$  体の場合の接続条件を導くのが見易いという利点がある。

#### 接続条件を満たす振幅

領域 (12) と領域 (21) で定義された波動関数は、それぞれ次のように表される。

$$\begin{aligned} \Psi_{12}(x_1, x_2) &= A_{12} e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + A_{21} e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}, \quad \text{for } x_1 < x_2, \\ \Psi_{21}(x_1, x_2) &= A_{12} e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1)} + A_{21} e^{i(k_2 x_2 + k_1 x_1)}, \quad \text{for } x_2 < x_1. \end{aligned} \quad (3.27)$$

これらを微分すると、次の関係式が導かれる。

$$\begin{aligned} & \left. \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi_{21}(x_1, x_2) \right|_{x_2} - \left. \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi_{12}(x_1, x_2) \right|_{x_2} \\ &= i(k_2 A_{12} + k_1 A_{21}) e^{i(k_1+k_2)x_2} - i(k_1 A_{12} + k_2 A_{21}) e^{i(k_1+k_2)x_2} \\ &= i(k_1 - k_2)(-A_{12} + A_{21}) e^{i(k_1+k_2)x_2}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

領域 (12) と (21) の境界で波動関数はすでに連続なので、座標  $x_1$  を座標  $x_2$  に近づけると ( $x_1 \rightarrow x_2$ ) 次が導かれる。

$$\Psi_{12}(x_2, x_2) = (A_{12} + A_{21}) e^{i(k_1+k_2)x_2} \quad (3.29)$$

これらを接続条件に代入すると次式が導かれる。

$$i(k_1 - k_2)(-A_{12} + A_{21}) = c(A_{12} + A_{21}). \quad (3.30)$$

よって、振幅に対する次の関係式が導かれる。以後、右辺を  $S_{12}$  と表す。

$$\frac{A_{21}}{A_{12}} = \frac{k_1 - k_2 - ic}{k_1 - k_2 + ic} \quad (3.31)$$

$S_{12}$  はスカラー量ではあるが、S 行列とよぶことができる。一般の場合、次で定義する。

$$S_{j\ell} = \frac{k_j - k_\ell - ic}{k_j - k_\ell + ic} \quad (3.32)$$

添字  $j$  と  $\ell$  は擬運動量  $k_j$  と  $k_\ell$  を表し、 $j$  行  $\ell$  列を意味しない。((3.31) 式は  $A_{21}/A_{12} = S_{12}$ 。)

#### 周期的境界条件

$0 \leq x_1 < x_2 \leq L$  のとき、 $x_2 < x_1 + L$  となるので、座標  $(x'_1, x'_2) = (x_1 + L, x_2)$  は領域 (21) に属する。よって、次式を得る。

$$\begin{aligned} \Psi_{21}(x_1 + L, x_2) &= A_{12} e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1 + k_2 L)} + A_{21} e^{i(k_2 x_2 + k_1 x_1 + k_1 L)} \\ &= e^{ik_1 L} A_{21} e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + e^{ik_2 L} A_{12} e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)} \end{aligned} \quad (3.33)$$

よって、 $\Psi_{12}(x_1, x_2) = \Psi_{21}(x_2, x_1 + L)$  が条件を満たす任意の座標に対して成り立つ必要十分条件は次で与えられる。

$$A_{12} = e^{ik_1 L} A_{21}, \quad A_{21} = e^{ik_2 L} A_{12} \quad (3.34)$$

よって接続条件から、次式が導かれる。

$$\begin{aligned} e^{ik_1 L} &= \frac{A_{12}}{A_{21}} = S_{21} = \frac{k_2 - k_1 - ic}{k_2 - k_1 + ic} = \frac{k_1 - k_2 + ic}{k_1 - k_2 - ic}, \\ e^{ik_2 L} &= \frac{A_{21}}{A_{12}} = S_{12} = \frac{k_1 - k_2 - ic}{k_1 - k_2 + ic} = \frac{k_2 - k_1 + ic}{k_2 - k_1 - ic}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

まとめると、次のようにあらわされる。これをベーテ仮設方程式とよぶ。

$$e^{ik_j L} = \prod_{\ell=1; \ell \neq j}^2 \frac{k_j - k_\ell + ic}{k_j - k_\ell - ic}, \quad \text{for } j = 1, 2. \quad (3.36)$$

### 3.1.4 一般の $N$ ボース粒子の場合

#### 波動関数の完全対称性

ボース・アインシュタイン統計性から、振幅  $A_P(Q)$  が領域を表す置換  $Q$  に依存しないことを示す。

粒子の位置座標が置換  $Q$  を用いて、 $x_{Q1} \leq x_{Q2} \leq \dots \leq x_{QN}$  と小さい順番に並べられるとする。このとき、次が成り立つ。

$$\Psi(x_{Q1}, x_{Q2}, \dots, x_{QN}) = \Psi_e(x_{Q1}, x_{Q2}, \dots, x_{QN}) \quad (3.37)$$

ここで  $e$  は対称群の単位元を表す。波動関数の完全対称性より、次式が成り立つ。

$$\Psi(x_{Q1}, x_{Q2}, \dots, x_{QN}) = \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (3.38)$$

よって、領域  $Q$  の波動関数と領域  $e$  の波動関数との間に次の関係が成り立つ。

$$= \Psi_Q(x_1, x_2, \dots, x_N) = \Psi_e(x_{Q1}, x_{Q2}, \dots, x_{QN}) \quad (3.39)$$

両辺にベーテ仮設波動関数の形 (3.9) を代入すると、

$$\sum_{P \in S_N} A_P(Q) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{Pj} x_{Qj}\right) = \sum_{P \in S_N} A_P(e) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{Pj} x_{Qj}\right). \quad (3.40)$$

任意の座標に対して成り立つので、よってどの置換  $P$  に対しても  $A_P(Q) = A_P(e)$  となる。すなわち、振幅は領域に依存しない。以後、 $A_P(e)$  を  $A_P$  と表す。

#### 領域境界での波動関数の連続性

振幅  $A_P(Q)$  が領域  $Q$  に依存しないとき、すなわちどの置換  $P$  に対しても  $A_P(Q) = A_P$  が成り立つとき、波動関数 (3.9) は領域の境界で連続となる。すなわち、隣り合う境界  $Q\pi_i$  で定義された波動関数  $\Psi_Q(x_j)$  と  $\Psi_{Q\pi_i}(x_j)$  は、その境界線上  $x_{Qi} = x_{Q(i+1)}$  において  $\Psi_Q(x_j) = \Psi_{Q\pi_i}(x_j)$  が成り立ち、値が一致する。ここで記号  $\pi_j$  は置換  $(j, j+1)$  を表すことに注意する。

波動関数が各領域で連続であれば、量子統計性から、 $N=2$  の場合と同様にして、領域の境界でも連続であることが導かれる。波動関数 (3.9) を仮定すると、具体的に確かめることもできる。実際、ベーテ仮設の波動関数  $\Psi_Q(x_1, \dots, x_N)$  と  $\Psi_{Q\pi_i}(x_1, \dots, x_N)$  は、以下のように表される。

$$\Psi_Q(x_j) = \sum_{P \in S_N} A_P \exp\left(i \sum_{j=1; j \neq i, i+1}^N k_{Pj} x_{Qj} + i \left\{ k_{Pi} x_{Qi} + k_{P(i+1)} x_{Q(i+1)} \right\}\right), \quad (3.41)$$

$$\Psi_{Q\pi_i}(x_j) = \sum_{P \in S_N} A_P \exp\left(i \sum_{j=1; j \neq i, i+1}^N k_{Pj} x_{Qj} + i \left\{ k_{Pi} x_{Q(i+1)} + k_{P(i+1)} x_{Qi} \right\}\right). \quad (3.42)$$

よって、 $x_{Qi} = x_{Q(i+1)}$  のとき、次の連続性の条件が成り立つ。

$$\begin{aligned} \Psi_Q(x_{Qi} = X_{Q(i+1)}) &= \Psi_{Q\pi_i}(x_{Qi} = X_{Q(i+1)}) \\ &= \sum_{P \in S_N} A_P \exp\left(i \sum_{j=1; j \neq i, i+1}^N k_{Pj} x_{Qj} + i \left\{ k_{Pi} + k_{P(i+1)} \right\} x_{Qi}\right). \end{aligned} \quad (3.43)$$

## 領域境界での波動関数の接続条件

領域  $Q$  と  $Q\pi_i$  の境界で、波動関数の接続条件を考えよう。

固有値方程式 (3.5) を変数  $x_{Q_i}$  に関して座標  $x_{Q(i+1)}$  を挟む微小区間で積分すると、次の接続条件が導かれる。

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x_{Q_i}} \Big|_{x_{Q(i+1)+\epsilon}} - \frac{\partial \Psi}{\partial x_{Q_i}} \Big|_{x_{Q(i+1)-\epsilon}} = c\Psi(x_{Q_1}, \dots, x_{Q_i} = x_{Q(i+1)}, \dots, x_{Q_N}) \quad (3.44)$$

ここで微分係数は領域で定義された波動関数を用いて、次のように表される。

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x_{Q_i}} \Big|_{x_{Q(i+1)+\epsilon}} = \frac{\partial \Psi_{Q\pi_i}}{\partial x_{Q_i}} \Big|_{x_{Q(i+1)}}, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial x_{Q_i}} \Big|_{x_{Q(i+1)-\epsilon}} = \frac{\partial \Psi_Q}{\partial x_{Q_i}} \Big|_{x_{Q(i+1)}} \quad (3.45)$$

波動関数の式 (3.41) と (3.42) から、次の関係式が導かれる。

$$i(k_{P_i} - k_{P(i+1)})(-A_P + A_{P\pi}) = c(A_P + A_{P\pi_i}) \quad (3.46)$$

よって、次式を得る。

$$\frac{A_{P\pi_i}}{A_P} = \frac{k_{P_i} - k_{P(i+1)} - ic}{k_{P_i} - k_{P(i+1)} + ic}. \quad (3.47)$$

$S$  行列の定義 (3.32) より上式は、 $A_{P\pi_i}/A_P = S_{P_i, P(i+1)}$  と表される。振幅  $A_P$  を  $A_P = A_{P_1, P_2, \dots, P_N}$  と表すと次式が成り立つ。

$$\frac{A_{P\pi_i}}{A_P} = \frac{A_{P_1, \dots, P(i+1), P_i, \dots, P_N}}{A_{P_1, \dots, P_i, P(i+1), \dots, P_N}} = S_{P_i, P(i+1)}. \quad (3.48)$$

## 波動関数に対する周期的境界条件

整数 1 に対して 2 を、2 に対して 3 を対応させ、 $N-1$  に対して  $N$ 、そして  $N$  に対して 1 を対応させる置換を、整数 1 から  $N$  までの巡回置換とよぶ。そして記号  $(12 \dots N)$  で表そう。

置換  $Q$  に対応する領域  $Q$  において、次の周期的境界条件を考える。

$$\Psi(x_{Q_1}, x_{Q_2}, \dots, x_{Q_N}) = \Psi(x_{Q_1} + L, x_{Q_2}, \dots, x_{Q_N}) \quad (3.49)$$

このとき、 $0 \leq x_{Q_1} \leq \dots \leq x_{Q_N} \leq L$  より、次の不等式が成り立つ。

$$x_{Q_2} \leq \dots \leq x_{Q_N} \leq L + x_{Q_1} \quad (3.50)$$

そこで、 $(x_{Q_1} + L, x_{Q_2}, \dots, x_{Q_N})$  は領域  $(12 \dots N)$  に属す。そして座標  $y_j$  を  $(y_1, y_2, \dots, y_N) = (x_{Q_1} + L, x_{Q_2}, \dots, x_{Q_N})$  によって定める。すると、以下が導かれる。

$$\begin{aligned} \Psi(x_{Q_1} + L, x_{Q_2}, \dots, x_{Q_N}) &= \Psi_{(12 \dots N)}(x_{Q_1} + L, x_{Q_2}, \dots, x_{Q_N}) \\ &= \sum_{P \in S_N} A_P \exp \left( i \sum_{j=1}^N k_{P_j} y_{(12 \dots N)j} \right) \\ &= \sum_{P \in S_N} A_P \exp \left( i \sum_{j=1}^{N-1} k_{P_j} y_{j+1} + i k_{P_N} y_1 \right) \\ &= \sum_{P \in S_N} A_{P(12 \dots N)} \exp \left( i \sum_{j=1}^{N-1} k_{P(12 \dots N)j} y_{j+1} + i k_{P(12 \dots N)N} y_1 \right) \\ &= \sum_{P \in S_N} A_{P(12 \dots N)} \exp \left( i \sum_{j=1}^{N-1} k_{P(j+1)} y_{j+1} + i k_{P1} y_1 \right) \\ &= \sum_{P \in S_N} A_{P(12 \dots N)} e^{i k_{P1} L} \exp \left( i \sum_{j=1}^N k_{P_j} x_{Q_j} \right). \end{aligned} \quad (3.51)$$

この結果を (3.40) 式と比較すると、次の関係式が導かれる。

$$A_P = A_{P(12\dots N)} \exp(ik_{P1}L) \quad (3.52)$$

ここで振幅を  $A_P = A_{P1,P2,\dots,P_N}$  と表すと、接続条件より以下のように変形される。

$$\begin{aligned} A_{P1,P2,\dots,P_N} &= S_{P2,P1} A_{P,2P1,P3,\dots,P_N} \\ &= S_{P2,P1} S_{P3,P1} A_{P,2P3,P1,\dots,P_N} \\ &= S_{P2,P1} S_{P3,P1} \cdots S_{P_N,P1} A_{P,2P3,\dots,P_N,P1} \\ &= S_{P2,P1} S_{P3,P1} \cdots S_{P_N,P1} A_{P(12\dots N)} \end{aligned} \quad (3.53)$$

そこで、(3.52) より次が導かれる。

$$\exp(ik_{P1}L) = S_{P2,P1} S_{P3,P1} \cdots S_{P_N,P1} \quad (3.54)$$

$j = P1$  と表すと、 $S_{P2,P1} S_{P3,P1} \cdots S_{P_N,P1} = \prod_{\ell=1;\ell \neq j}^N S_{\ell,j}$  より、次のベーター仮設方程式が導かれる。

$$\exp(ik_j L) = \prod_{\ell=1;\ell \neq j}^N \frac{k_j - k_\ell + ic}{k_j - k_\ell - ic}, \quad \text{for } j = 1, 2, \dots, N. \quad (3.55)$$

### 3.1.5 Yang-Baxter 方程式とインバーション関係式

領域の間の波動関数の接続条件 (3.47) は、全体として矛盾がないのであろうか。ここで、対称群の生成演算子  $\pi_j$  に対する関係式 (3.3) と (3.4) が重要である。

S 行列の定義 (3.32) から、次の関係式が容易に導かれる。これをインバーションとよぶ。

$$S_{j\ell} = 1/S_{\ell j} \quad (3.56)$$

ここで  $S_{\ell j}^* = 1/S_{\ell j}$  に注意する。以下、関係式 (3.3) が S 行列のインバーション (3.56) に対応することを示そう。 $Q = P\pi_j$  と表すと、振幅に対して次式が導かれる。

$$\begin{aligned} \frac{A_{P\pi_j\pi_j}}{A_P} &= \frac{A_{P\pi_j\pi_j}}{A_{P\pi_j}} \frac{A_{P\pi_j}}{A_P} = \frac{A_{Q\pi_j}}{A_Q} \frac{A_{P\pi_j}}{A_P} \\ &= S_{Qj,Q(j+1)} S_{Pj,P(j+1)} \end{aligned} \quad (3.57)$$

ここで  $Qj = P(j+1)$  および  $Q(j+1) = Pj$  に注意すると、 $S_{Qj,Q(j+1)} = S_{P(j+1),Pj}$  となり、インバーション (3.56) より  $A_{P\pi_j\pi_j}/A_P = 1$  となる。よって、関係式 (3.3) に対応する変形で振幅は変化しないことが確かめられた。

次に関係式 (3.4) に対しては、次式を確かめることができる。

$$A_{P\pi_j\pi_{j+1}\pi_j} = A_{P\pi_{j+1}\pi_j\pi_{j+1}} \quad (3.58)$$

両辺を  $A_P$  で割る。左辺は S 行列を用いて次のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{A_{P\pi_j\pi_{j+1}\pi_j}}{A_P} &= \frac{A_{P\pi_j\pi_{j+1}\pi_j}}{A_{P\pi_j\pi_{j+1}}} \frac{A_{P\pi_j\pi_{j+1}}}{A_{P\pi_j}} \frac{A_{P\pi_j}}{A_P} \\ &= S_{P(j+1),P(j+2)} S_{Pj,P(j+2)} S_{Pj,P(j+1)} \end{aligned} \quad (3.59)$$

右辺も S 行列を用いて次のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{A_{P\pi_{j+1}\pi_j\pi_{j+1}}}{A_P} &= \frac{A_{P\pi_{j+1}\pi_j\pi_{j+1}}}{A_{P\pi_{j+1}\pi_j}} \frac{A_{P\pi_{j+1}\pi_j}}{A_{P\pi_{j+1}}} \frac{A_{P\pi_{j+1}}}{A_P} \\ &= S_{Pj,P(j+1)} S_{Pj,P(j+2)} S_{P(j+1),P(j+2)} \end{aligned} \quad (3.60)$$

S 行列はスカラーなので、交換は自明である。よって次の Yang-Baxter 関係式が成立する。

$$S_{P(j+1),P(j+2)} S_{Pj,P(j+2)} S_{Pj,P(j+1)} = S_{Pj,P(j+1)} S_{Pj,P(j+2)} S_{P(j+1),P(j+2)} \quad (3.61)$$

よって、関係式 (3.4) に対して振幅が矛盾しないこと、すなわち (3.58) 式が確認された。

### 3.1.6 波動関数のベーテ仮設のまとめ

1次元周期系の中の  $N$  個のボース粒子の系において、LL 模型のハミルトニアン  $\mathcal{H}_{LL}$  の固有状態をベーテ仮設に基づいて構成する方法をまとめよう。置換  $Q$  に対応する領域  $Q$  において、粒子の座標は  $x_{Q1} < x_{Q2} < \dots < x_{QN}$  と小さい方から順に並ぶ。そして波動関数は次のように与えられる [1, 3]。

$$\Psi_Q(x_1, \dots, x_N) = \sum_{P \in S_N} A_P \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{Pj} x_{Qj}\right). \quad (3.62)$$

ここで  $S_N$  は  $N$  次の対称群 (あるいは置換群)、すなわち 1 から  $N$  までの整数の置換全体の群を表し、 $P_j$  は整数  $j$  を置換  $P$  で置換したものを表す。振幅  $A_P$  は波動関数の接続条件 (3.47) から定まる。記号  $T_{a,b} = k_a - k_b + ic$  と置換  $P$  の符号  $(-1)^P$  を用いて次のように表すこともできる。

$$A_P = (-1)^P \prod_{1 \leq a < b \leq N} T_{Pa, Pb}. \quad (3.63)$$

そして、擬運動量  $k_j$  が次のベーテ仮設方程式を満たすとき、波動関数 (3.62) は周期的境界条件を満たし、その結果、LL 模型の固有状態を与える。

$$\exp(iLk_j) = \prod_{b=1; b \neq j}^N \frac{k_j - k_b + ic}{k_j - k_b - ic} \quad (j = 1, 2, \dots, N). \quad (3.64)$$

擬運動量  $k_j$  を持つベーテ固有状態を  $|k_j\rangle$  と表す。その運動量  $P$  とエネルギー  $E$  は以下のように定義される。

$$P = \sum_{j=1}^N k_j, \quad E = \sum_{j=1}^N k_j^2 \quad (3.65)$$

### 3.1.7 ベーテ方程式の解と量子数： ベーテ仮設の排他性、そして完全性

ベーテ仮設方程式の表式 (3.64) からその対数をとった表式 (3.70) を導こう。積で表されたベーテ仮設方程式 (3.64) を直接解くことも可能であるが、その対数をとると、後で見ると、量子数  $I_j$  を用いて解を表すことができる。まず、次の関数を定義する [3]。

$$e(x) = \frac{x+i}{x-i} \quad (3.66)$$

これを用いて (3.64) 式の右辺は  $\prod_{b=1; b \neq j}^N e((k_j - k_b)/c)$  と表される。

関数  $e(x)$  は一意的である。すなわち、 $e(x) = e(y)$  ならば  $x = y$  となる。実数  $x$  に対して  $e(x)$  は絶対値 1 を複素数を与えるので、その偏角を  $x$  で表そう。

$$e^{i\theta} = \frac{e^{i\theta/2}}{e^{-i\theta/2}} = \frac{\cos \theta/2 + i \sin \theta/2}{\cos \theta/2 - i \sin \theta/2} = \frac{1 + i \tan \theta/2}{1 - i \tan \theta/2} = -\frac{\tan \theta/2 - i}{\tan \theta/2 + i} \quad (3.67)$$

よって、次の関係式が導かれる。

$$\frac{\tan \theta/2 + i}{\tan \theta/2 - i} = -e^{-i\theta} \quad (3.68)$$

そこで、 $x = \tan \theta/2$  とおくと、両辺の対数をとって次式が導かれる。

$$\frac{1}{i} \log e(x) = \frac{1}{i} \log(-1) - \theta = (2n+1)\pi - 2 \tan^{-1} x \quad (3.69)$$

ここで  $n$  は対数関数の分岐に対応するある整数を表す。積で表されたベーテ仮設方程式 (3.64) の両辺の対数から、次式が導かれる。

$$k_j = \frac{2\pi}{L} I_j - \frac{1}{L} \sum_{a \neq j}^N 2 \tan^{-1} \left( \frac{k_j - k_a}{c} \right) \quad (j = 1, 2, \dots, N.) \quad (3.70)$$

ここで量子数  $I_j$  は粒子数  $N$  が奇数のとき整数値、そして偶数のとき半整数値をとる。また、関数  $\tan^{-1} x$  の分岐は、その値が  $-\pi/2$  から  $\pi/2$  にあるものを選ぶ。

量子数  $I_j$  はどれも互いに異なるものとする。そして、ベーテ方程式 (3.70) の解は、 $N$  個の異なる量子数  $I_j$  の集合と対応する。この事実はベーテ仮設法を適用できる様々な可解模型において同様に成り立つ経験則であり、「ベーテ仮設の排他律」とよばれることもある。実際、LL模型で結合定数  $c$  が正の場合（斥力相互作用）には、ベーテ仮設波動関数の完全性が証明されている [14, 15]。この結果、斥力の場合には、ベーテ仮設の排他律も証明されたと言える。

ベーテ仮設方程式 (3.70) から、運動量  $P$  は量子数の和で与えられることが導かれる。

$$P = \frac{2\pi}{L} \sum_{j=1}^N I_j. \quad (3.71)$$

## 3.2 基底状態と励起状態：素励起の例

### 3.2.1 離散的な取扱い

#### 基底状態

基底状態での量子数  $I_j$  は、 $I_j = j - (N + 1)/2$  ( $j = 1, 2, \dots, N$ ) と表される [1, 2, 3]。

$$(I_1, \dots, I_N) = \left( -\frac{N-1}{2}, -\frac{N-1}{2} + 1, \dots, \frac{N-1}{2} \right) \quad (3.72)$$

実際、擬運動量の二乗の和が最も小さくなるようにするには、擬運動量  $k_j$  の絶対値が小さくなるように量子数  $I_j$  を選ばば良い。例えば、粒子数  $N = 5$  の場合、基底状態の量子数  $I_j^{(g)}$  は以下のように与えられる。

$$\{I_j^{(g)}\} = (-2, -1, 0, 1, 2) \quad (3.73)$$

この結果を納得するには、結合定数  $c$  が非常に大きい場合を考えると分かり易いであろう。特に結合定数  $c$  が無限大の場合、ベーテ仮設方程式 (3.70) の右辺はゼロになる。そこで擬運動量  $k_j$  は  $k_j = 2\pi I_j/L$  と求められる。そこでエネルギーは量子数  $I_j$  の二乗の和に比例するので、量子数  $I_j$  の二乗の和が最も小さい場合に基底状態を与える。よって、 $I_j^{(g)} = j - (N + 1)/2$  ( $j = 1, 2, \dots, N$ ) と与えられる。

#### 励起状態：様々な素励起

励起状態として、ホール励起 (hole excitations) を考えよう（正確には粒子・ホール励起 particle-hole excitations の一つ）。リーブはこれを II 型励起とよんだ [13]。基底状態の右から  $p$  番目の量子数を取り去って、代わりに一番大きな量子数の右隣の量子数  $(N + 1)/2$  を占有する。この固有状態を、簡単に  $|p\rangle_{II}$  と表す。粒子数  $N = 5$  の場合、以下ようになる。

$$\begin{aligned} |p=0\rangle_{II} &= (-2, -1, 0, 1, 2) \\ |p=1\rangle_{II} &= (-2, -1, 0, 1, \times, 3) \\ |p=2\rangle_{II} &= (-2, -1, 0, \times, 2, 3) \\ |p=3\rangle_{II} &= (-2, -1, \times, 1, 2, 3) \\ |p=4\rangle_{II} &= (-2, \times, 0, 1, 2, 3) \\ |p=5\rangle_{II} &= (\times, -1, 0, 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (3.74)$$

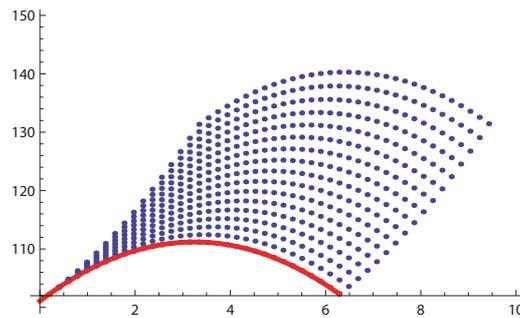


Figure 3-1: 1次元ボース気体の励起スペクトル： 横軸は運動量  $P$ 、縦軸はエネルギー固有値を表す。

$|p=0\rangle_{\text{II}}$  は基底状態を表す。ホールの位置は  $\times$  で表され、整数  $p$  が大きくなるにつれて次第に左に移動する。量子数  $I_j$  の和は整数  $p$  を与える。よって、状態  $|p\rangle_{\text{II}}$  の全運動量  $P$  は、(3.71) 式により、 $P = 2\pi p/L$  と求められる。II型励起状態の運動量と励起エネルギーの関係は、図の実線で示されている。ちなみに、II型励起は回転系では Yrast 状態に相当する [24, 25]。

このように、多体系において相互作用の結果、運動量と励起エネルギーを持ち、粒子とみなせるような励起が出現することがある。これを素励起とよぶ。固体では、格子振動に出現するフォノン (音響子) や電荷の集団運動に由来するプラズモンなどが挙げられる。

リーブの I 型励起を説明する。基底状態の最大 (あるいは最小) の量子数を取り去り、非占有の大きな (あるいは小さな) 整数あるいは半整数を占有させる。粒子励起 (particle excitations) とよべる。ただし正確には粒子・ホール励起の一種である。

粒子数  $N = 5$  の場合、例えば以下のような状態が存在する。

$$\begin{aligned} |p=0\rangle_{\text{I}} &= (-2, -1, 0, 1, 2) \\ |p=1\rangle_{\text{I}} &= (-2, -1, 0, 1, \times, 3) \\ |p=2\rangle_{\text{I}} &= (-2, -1, 0, 1, \times, \times, 4) \\ |p=3\rangle_{\text{I}} &= (-2, -1, 0, 1, \times, \times, \times, 5) \end{aligned} \quad (3.75)$$

### 3.2.2 素励起のエネルギーと連続極限

#### Euler-Maclaurin 公式

関数  $f(x)$  は何回でも微分可能とする。このとき、次の公式が成り立つ。

$$\frac{1}{L} \sum_{j=n_1}^{n_2} f(j/L) = \int_{(n_1-1/2)/L}^{(n_2+1/2)/L} f(z) dz - \frac{1}{24L^2} \left( \frac{df}{dz} \left( \frac{n_2+1/2}{L} \right) - \frac{df}{dz} \left( \frac{n_1-1/2}{L} \right) \right) + o\left(\frac{1}{L^2}\right), \quad (3.76)$$

これを用いて、和を積分で近似することができる。

#### 量子数を与える関数 (counting function)

ベーテ仮設方程式を表すために、次の関数を定義する [1, 2, 3, 9]。

$$z_L(k) = \frac{k}{2\pi} + \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^N 2 \tan^{-1}((k - k_\ell)/c) \quad (3.77)$$

ベーテ仮設方程式 (3.70) は次のように表される。

$$z_L(k_j) = \frac{I_j}{L} \quad \text{for } j = 1, 2, \dots, N. \quad (3.78)$$

ベータ根の密度分布をその微分  $\rho_L(k) = dz_L/dk$  で定義する。

$$\rho_L(k) = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^N \frac{1}{2\pi} K(k - k_\ell) \quad (3.79)$$

ここで  $K(x) = 2c/(x^2 + c^2)$  である。

例えば基底状態では、擬運動量  $k_j$  から  $n$  個先の  $k_{j+n}$  の間で  $z_L(k)$  の変化は  $\Delta z_L = I_{j+n} - I_j = n$  であるので、擬運動量の単位長さ当たりの根の個数は、 $n/(k_{j+n} - k_j)$  で評価される。すなわち、 $n/(k_{j+n} - k_j) = \Delta z_L / \Delta k$  がベータ根の密度を与える。よって  $\rho_L(k)$  をベータ根の密度分布とよぶ。

ベータ根の密度分布  $\rho_L(k)$  は常に正である。よって、量子数を与える関数  $z_L(k)$  は変数  $k$  に関して単調増加である。そこで、量子数の最大値および最小値に対応する擬運動量  $Q^\pm$  を次のように定めることができる。

$$z_L(Q^\pm) = \frac{I^\pm}{L} \quad (3.80)$$

ただし、 $I^+ = I_{\max} + 1/2$  および  $I^- = I_{\min} - 1/2$  とする。ここで  $I_{\max} = I_1$  であり、 $I_{\min} = I_N$  である。公式 (3.76) を用いて和を積分で近似することができる。

$$\frac{1}{L} \sum_{\alpha=1}^N f(k_\alpha^{(1)}) = \int_{Q^-}^{Q^+} f(k) \rho_L(k) dk + O(1/L^2). \quad (3.81)$$

衣を着たベータ根の密度 (**dressed root density**) (ベータ解の実効密度)

公式 (3.81) を用いて、ベータ根の密度分布のバルク部分  $\rho(k|Q^\pm)$  に対する次の積分方程式を導かれる。

$$\rho(k|Q^\pm) = \frac{1}{2\pi} + \int_{Q^-}^{Q^+} \frac{1}{2\pi} K(k - k') \rho(k'|Q^\pm) dk' \quad (3.82)$$

演算子  $\hat{K}$  の関数  $f(k)$  への作用を次式で定義する。

$$(\hat{K}f)(k) = \int_{Q^-}^{Q^+} K(k - q) f(q) dq. \quad (3.83)$$

積分方程式 (3.82) の形式的な解は、次の無限級数で与えられる。

$$|\rho\rangle = |\rho_0\rangle + \left(\frac{1}{2\pi} \hat{K}\right) |\rho_0\rangle + \left(\frac{1}{2\pi} \hat{K}\right)^2 |\rho_0\rangle + \dots \quad (3.84)$$

ここで  $|\rho_0\rangle$  は  $\langle k|\rho_0\rangle = 1/(2\pi)$  で定義される。あるいは次のように表すこともできる。

$$|\rho_0\rangle = \int_{Q^-}^{Q^+} |q\rangle \frac{dq}{2\pi} \quad (3.85)$$

ベータ根密度のバルク部分  $\rho(k|Q^\pm)$  を、衣を着た密度分布関数 (dressed density) とよぶ。すなわち、相互作用の結果、単純な一様分布  $|\rho_0\rangle$  から変化するためである。そして相互作用の非自明な効果は無限級数の形に表されていると解釈できる [1]。

積分方程式 (3.82) の解は本来は無限級数で与えられる。しかし、形式的には次のように表すと分かり易い。

$$|\rho\rangle = \frac{I}{I - \frac{1}{2\pi} \hat{K}} |\rho_0\rangle. \quad (3.86)$$

また、次式のような完全性を仮定すると計算上便利である。本当は積分の両端が  $\pm\infty$  の場合に正しいが、区間  $[Q_+, Q_-]$  の成分しか取り扱わない場合にはこれで十分なのである。

$$I = \int_{Q^-}^{Q^+} |k\rangle\langle k| dk \quad (3.87)$$

演算子  $\hat{K}$  の作用 (3.83) は  $(\hat{K}f)(k) = \langle k|\hat{K}|f\rangle$  と表して以下のように理解できる。

$$\begin{aligned} \langle k|\hat{K}|f\rangle &= \int_{Q^-}^{Q^+} \langle k|\hat{K}|q\rangle \langle q|f\rangle dq \\ &= \int_{Q^-}^{Q^+} K(k-q) f(q) dq \end{aligned} \quad (3.88)$$

ここで  $\langle k|\hat{K}|q\rangle = K(k-q)$  により行列要素  $\langle k|\hat{K}|q\rangle$  を定めた。

### 実効エネルギー (dressed energy) と実効粒子密度 (dressed charge)

粒子励起やホール励起など、粒子数が変化する励起状態も取り扱いたいので、化学ポテンシャル  $\mu$  を導入して、LLハミルトニアンをルジャンドル変換を考えよう。

$$\mathcal{H}_{\mu,L} = \mathcal{H}_{LL} - \mu N \quad (3.89)$$

このとき系のエネルギーは  $E = \sum_{j=1}^N (k_j^2 - \mu)$  と表される。そこで、 $\epsilon_0(k) = k^2 - \mu$  とおく。次の積分方程式で定義される量を、実効エネルギー (dressed energy) [1] とよぶ。

$$\epsilon(k|Q^\pm) = \epsilon_0(k) + \int_{Q^-}^{Q^+} \frac{1}{2\pi} K(k-k') \epsilon(k'|Q^\pm) dk' \quad (3.90)$$

これを用いて励起エネルギーをコンパクトに表すことができる。さらに、次の成分方程式で定義される量を、実効粒子密度 (dressed charge) [1] とよぼう。

$$\mathcal{Z}(k|Q^\pm) = 1 + \int_{Q^-}^{Q^+} \frac{1}{2\pi} K(k-k') \mathcal{Z}(k'|Q^\pm) dk' \quad (3.91)$$

物理的な意味としては dressed charge は dressed energy の化学ポテンシャルによる微分、 $\mathcal{Z}(k) = -\partial\epsilon(k)/\partial\mu$  である。

### 粒子・正孔 (ホール) 励起

$N$  粒子の基底状態において、 $j_h$  番目の量子数  $I_{j_h}$  を非占有とし、基底状態の最大量子数  $I_{\max}$  よりも大きな量子数  $I_p$  が占有されるとする。この粒子・正孔 (ホール) 励起状態 (particle-hole excitation) のエネルギー固有値を実効エネルギー (dressed energy) を用いて表してみよう。まず、量子数を与える関数  $z_L^{(1)}(k)$  は次式で与えられる。

$$z_L^{(1)}(k) = \frac{k}{2\pi} + \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{N-1} \frac{2}{2\pi} \tan^{-1}((k-k_j)/c) + \frac{1}{L} \frac{2}{2\pi} \tan^{-1}((k-k_p)/c) \quad (3.92)$$

階段関数を  $H(x) = 1$  ( $x \geq 0$ ) および  $H(x) = 0$  ( $x < 0$ ) と定める。そして量子数を  $I_j^{(1)} = I_j^{(g)} + H(j-j_h)$  と与える。このとき、粒子・正孔励起のベータ仮設方程式は、以下のように表される。

$$\begin{aligned} z_L^{(1)}(k_j) &= \frac{I_j^{(1)}}{L} \quad \text{for } j = 1, 2, \dots, N-1, \\ z_L^{(1)}(k_p) &= \frac{I_p^{(1)}}{L} \end{aligned} \quad (3.93)$$

量子数関数  $\hat{z}(k)$  を次式で定める。

$$\hat{z}(k) = z^{(1)}(k) - \frac{1}{L}H(k - \tilde{k}_h) \quad (3.94)$$

ここでホールの擬運動量  $\tilde{k}_h$  は不等式  $k_{j_{h-1}} < \tilde{k}_h < k_{j_h}$  を満たすものとする。このとき、 $\hat{z}(k_j) = I_j^{(g)}/L$  ( $j = 1, 2, \dots, N-1$ ) となる。よって、微分  $d\hat{\rho}/dk$  で擬運動量  $k_j$  ( $j = 1, 2, \dots, N-1$ ) の密度分布を十分に良く近似できる。

$$\hat{\rho}(k|Q^\pm) = \frac{1}{2\pi} - \frac{1}{L}\delta(k - \tilde{k}_h) + \frac{1}{2\pi L}K(k - k_p^{(1)}) + \int_{Q^-}^{Q^+} K(k - q)\hat{\rho}(q|Q^\pm)\frac{dq}{2\pi} \quad (3.95)$$

ホールの量子数  $I_{j_h}$  と粒子の量子数  $I_p$  を持つ粒子・正孔励起のエネルギー  $E_{p,h}$  は次式で定義される。

$$E_{p,h} = \sum_{j=1}^{N-1} \epsilon_0(k_j) + \epsilon_0(k_p) \quad (3.96)$$

粒子・正孔励起のベータ根密度  $\hat{\rho}(k|Q^\pm)$  を用いて、次のように評価される。

$$\begin{aligned} E_{p,h} &= L \int_{Q^-}^{Q^+} \epsilon_0(k)\hat{\rho}(k|Q^\pm)dk + \epsilon_0(k_p) \\ &= L \int_{Q^-}^{Q^+} \epsilon(k)\frac{dk}{2\pi} + \epsilon(k_p) - \epsilon(\tilde{k}_h) + O(1/L). \end{aligned} \quad (3.97)$$

この式は、リーブの I 型励起エネルギーと II 型励起エネルギーの両方を含んだ一般的な結果を表す [25, 26]。

#### エネルギー固有値の有限サイズスケールリング

基底状態で波数  $Q^\pm$  は、 $Q^+ = Q_0$  および  $Q^- = -Q_0$  と表される。基底状態から少しだけ積分範囲  $Q^\pm$  が変化することにより導かれる励起状態のエネルギー固有値を求めよう。粒子数  $N$  および運動量変化  $2\pi\Delta D/L$  は次式で表される。

$$\begin{aligned} \frac{N}{L} &= z_L(Q^+) - z_L(Q^-) \\ \frac{\Delta D}{L} &= \frac{1}{2}(z_L(Q^+) + z_L(Q^-)) \end{aligned} \quad (3.98)$$

確認すると、基底状態では  $\Delta D = 0$  である。

基底状態から少しだけ積分範囲  $Q^\pm$  がシフトし、基底状態から粒子数や運動量が変化する場合は励起状態のエネルギー  $E$  は、 $\Delta N$  と  $\Delta D$  を用いて次のように表される。紙数の都合で詳細は他で述べる [27]。

$$\begin{aligned} E_{N,\Delta D} &= \sum_{j=1}^N \epsilon_0(k_j) \\ &= L\epsilon_\infty - \frac{\pi v_F}{6L} + \frac{2\pi v_F}{L} \left\{ \left( \frac{\Delta N}{2Z} + Z\Delta D \right)^2 + \left( \frac{\Delta N}{2Z} - Z\Delta D \right)^2 \right\} + O\left(\frac{1}{L^2}\right). \end{aligned} \quad (3.99)$$

## 4 可積分量子系の低励起スペクトルと共形場理論 (CFT)

厳密に解ける模型では、全てのエネルギー固有値が解析的に求められる。基底状態近傍の低いエネルギー励起状態での系の振る舞いは、線形分散関係が近似的に成り立つ範囲では共形場理論を用いた特徴付けが可能である。

## 4.1 スカラーボソン： 共形場理論の例

共形対称性を持つ場の理論の例として、長さ  $L$  の周期的境界条件を満たす自由スカラーボソン場を考える。ラグランジアンは以下のように与えられる。

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} g \int dx \left\{ (\partial_t \phi)^2 - (\partial_x \phi)^2 \right\} \quad (4.1)$$

場  $\phi$  の値は半径  $R$  の円周上に制限されていると仮定する。これはもともとのストリング理論ではコンパクト化半径に対応する。

次に、スカラーボソン場の周期的境界条件を以下のように与える。

$$\phi(x + L) = \phi(x, t) + 2\pi \hat{m} R \pmod{2\pi R} \quad (4.2)$$

ここで演算子  $\hat{m}$  の固有値  $m$  は整数値をとるものとする。状態ベクトルによって演算子  $\hat{m}$  の固有値  $m$  は異なる。しかし、整数値であれば境界条件は満たされる。

## 4.2 可積分系の相関関数の漸近的振る舞いの導出

矩形への共形変換

全複素平面を幅  $L$  の無限に長い矩形に写像する共形変換

$$w = \frac{L}{2\pi} \log z \quad (4.3)$$

すなわち  $z = \exp(2\pi w/L)$  を考える。この共形変換の有用性は J. Cardy によって示された [28]。

漸近的振る舞い

可積分系の相関関数の漸近的振る舞いを共形場理論を用いて予想することは、Bogoliubov 達によって最初に議論された [29]。以下に簡単に紹介する。系は並進対称性をもつと仮定しよう。すると、

$$\begin{aligned} \phi(0, \tau) &= \exp(\tau \mathcal{H}) \phi(0, 0) \exp(-\tau \mathcal{H}) \\ \phi(x, 0) &= \exp(ix \mathcal{P}) \phi(0, 0) \exp(-ix \mathcal{P}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

そして共形場理論、 $z = \tau + ix$   $\bar{z} = \tau - ix$  によって  $z$  と  $\bar{z}$  を定め、場の演算子  $\phi(x, \tau)$  を  $\phi(z, \bar{z})$  と表す。ここで  $\tau$  は虚時間、 $\tau = it$  に注意する。

このとき、相関関数に対して形状因子展開を行うと次が導かれる [29]。

$$\langle \phi(z, \bar{z}) \phi(0, 0) \rangle_L = \sum_n |\langle \phi(0, 0) | n \rangle|^2 \exp \left[ -\tau (E_L^n - E_L^0) - ix P_L^n \right] \quad (4.5)$$

一方、場  $\phi$  の共形変換に関する共変性から、次のような和が導かれる。

$$\begin{aligned} \langle \phi(z, \bar{z}) \phi(0, 0) \rangle_L &= \langle \phi(0, 0) \rangle_L^2 + \frac{A(\pi/L)^{2\Delta_0 + 2\bar{\Delta}_0}}{[\sinh(\pi z/L)]^{2\Delta_0} [\sinh(\pi \bar{z}/L)]^{2\bar{\Delta}_0}} \\ &+ \frac{\tilde{A}(\pi/L)^{2\bar{\Delta}_0 + 2\Delta_0}}{[\sinh(\pi z/L)]^{2\bar{\Delta}_0} [\sinh(\pi \bar{z}/L)]^{2\Delta_0}} + \frac{B(\pi/L)^{2\Delta_1 + 2\bar{\Delta}_1} \cos(2k_F x)}{[\sinh(\pi z/L)]^{2\Delta_1} [\sinh(\pi \bar{z}/L)]^{2\bar{\Delta}_1}} + \dots \end{aligned} \quad (4.6)$$

### 4.3 有限サイズ量子系のエネルギースペクトル

有限サイズの補正の計算から、量子スピンの低励起スペクトルは以下のように展開される。

$$E_{ex} = L e_{\infty} - \frac{\pi c}{6L} + \frac{2\pi v}{L} (h_{n,m} + \bar{h}_{n,m}) \quad (4.7)$$

$c$  はセントラルチャージ、 $h_{n,m}$  ( $\bar{h}_{n,m}$ ) は正則な (反正則な) コンフォーマル次元、系の臨界指数などを与えるコンフォーマル次元  $h_{nm}$  は、次式のように与えられる。

$$h_{n,m} = 2\pi g \left( \frac{n}{4\pi g R} + \frac{1}{2} m R \right)^2 + N \quad (4.8)$$

ここで  $m$  は境界条件に関係し、 $n$  は状態の運動量の量子数に対応する。 $N$  ( $\bar{N}$ ) は粒子・正孔 (ホール) 励起に対応する非負整数である。 $g = \pi$  のとき、(4.7) は可解模型の有限サイズ補正の計算 (3.99) に対応する。

## 5 代数的ベーテ仮設法

### 5.1 量子XXX鎖のR行列

#### 5.1.1 Yang-Baxter 方程式

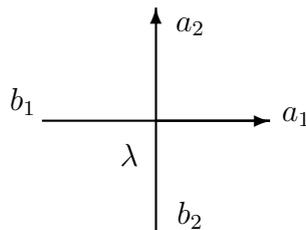


Figure 5-1: R行列の行列要素  $R(\lambda)_{b_1, b_2}^{a_1, a_2}$  が対応する配置。水平な線分は空間  $V_1$  に対応し、変数  $a_1$  と  $b_1$  が定義されている。垂直な線分は区間  $V_2$  に対応し、変数  $a_2$  と  $b_2$  が定義されている。

天降りではあるが、量子XXX鎖のR行列は次のように与えられる [9]。

$$R(\lambda) = \begin{pmatrix} a(\lambda) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\lambda) & c(\lambda) & 0 \\ 0 & c(\lambda) & b(\lambda) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a(\lambda) \end{pmatrix}_{[1,2]} = \begin{pmatrix} \lambda + \eta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & \eta & 0 \\ 0 & \eta & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda + \eta \end{pmatrix}_{[1,2]} \quad (5.1)$$

ここでR行列は空間  $V_1$  と  $V_2$  のテンソル積  $V_1 \otimes V_2$  に作用するものとする。 $(a, b)$  の行列要素が1で、他の成分は全てゼロとなる単位行列を  $e^{a,b}$  と表す。R行列の行列要素  $R(\lambda)_{b_1, b_2}^{a_1, a_2}$  単位行列のテンソル積  $e_{[1]}^{a_1, b_1} \otimes e_{[2]}^{a_2, b_2}$  に対応する。

$$R(\lambda) = \sum_{a_1, b_1, a_2, b_2=1,2} R(\lambda)_{b_1, b_2}^{a_1, a_2} e_{[1]}^{a_1, b_1} \otimes e_{[2]}^{a_2, b_2} = \begin{pmatrix} R(\lambda)_{11}^{11} & R(\lambda)_{12}^{11} & R(\lambda)_{21}^{11} & R(\lambda)_{22}^{11} \\ R(\lambda)_{11}^{12} & R(\lambda)_{12}^{12} & R(\lambda)_{21}^{12} & R(\lambda)_{22}^{12} \\ R(\lambda)_{11}^{21} & R(\lambda)_{12}^{21} & R(\lambda)_{21}^{21} & R(\lambda)_{22}^{21} \\ R(\lambda)_{11}^{22} & R(\lambda)_{12}^{22} & R(\lambda)_{21}^{22} & R(\lambda)_{22}^{22} \end{pmatrix}_{[1,2]} \quad (5.2)$$

量子XXX鎖のR行列は、次のヤン・バクスター関係式を満たす。

$$\begin{aligned} & \sum_{c_1, c_2, c_3=1,2} R(\lambda_2 - \lambda_3)_{c_2, c_3}^{a_2, a_3} R(\lambda_1 - \lambda_3)_{c_1, b_3}^{a_1, c_3} R(\lambda_1 - \lambda_2)_{b_1, b_2}^{c_1, c_2} \\ = & \sum_{c_1, c_2, c_3=1,2} R(\lambda_1 - \lambda_2)_{c_1, c_2}^{a_1, a_2} R(\lambda_1 - \lambda_3)_{b_1, c_3}^{c_1, a_3} R(\lambda_2 - \lambda_3)_{b_2, b_2}^{c_2, c_3} \end{aligned} \quad (5.3)$$

4行4列の行列で表されたR行列を拡張して、 $N$ 個のテンソル積  $V^{\otimes N}$  の任意の2成分に作用する演算子を導入する。テンソル積空間  $V^{\otimes N}$  において、 $i$ 番目と  $j$ 番目の空間に作用するR行列  $R_{ij}$  を次のように定める。ただし、 $i < j$  とする。

$$\begin{aligned} R_{ij}(\lambda) = & \sum_{a_1, a_2, b_1, b_2} R_{b_1, b_2}^{a_1, a_2}(\lambda) I_{(1)} \otimes \cdots \otimes I_{(i-1)} \otimes e_{(i)}^{a_1, b_1} \otimes I_{(i+1)} \\ & \otimes I_{(i+2)} \otimes \cdots \otimes I_{(j-1)} \otimes e_{(j)}^{a_2, b_2} \otimes I_{(j+1)} \otimes \cdots \otimes I_{(N)}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

拡張されたR行列  $R_{jk}$  を用いて、ヤン・バクスター関係式は次のように表される。

$$R_{23}(\lambda_2 - \lambda_3) R_{13}(\lambda_1 - \lambda_3) R_{12}(\lambda_1 - \lambda_2) = R_{12}(\lambda_1 - \lambda_2) R_{13}(\lambda_1 - \lambda_3) R_{23}(\lambda_2 - \lambda_3). \quad (5.5)$$

ヤン・バクスター関係式 (5.5) において変数  $\lambda_j$  は空間  $j$  に対応することに注意すると、より簡単に以下のように表すこともできる。

$$R_{23} R_{13} R_{12} = R_{12} R_{13} R_{23}. \quad (5.6)$$

R行列  $R_{ij}$  の作用するベクトル空間はテンソル積空間  $V_i \otimes V_j$  であり、図では各ベクトル  $V_i$  に直線が対応し、まっすぐ続く。たとえば、ヤン・バクスター関係式は (5.5) は3つの直線の二通りの交わり方に対応する。

### 5.1.2 ヤン・バクスター関係式の確認

ヤン・バクスター関係式を書き下してみよう。図において、添え字の列を次のように表す。

$$\begin{pmatrix} a_3 & a_2 & a_1 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

R行列は次の保存則を持つ。 $a_1 + a_2 \neq b_1 + b_2$  のとき  $R(\lambda)_{b_1, b_2}^{a_1, a_2} = 0$ , である。この保存則などを用いて、以下の三つの場合を考えれば、十分であることを示すことができる。

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

最初の場合に対応する Yang-Baxter 方程式は、以下で与えられる。

$$a(v) \cdot c(u+v) \cdot a(u) = c(u) \cdot a(u+v) \cdot c(v) + b(u) \cdot c(u+v) \cdot b(v). \quad (5.9)$$

### 5.1.3 L演算子の定義

補助空間  $0$  と量子空間  $n$  の間に作用するR行列  $R_{0n}$  を考える。これを、格子点  $n$  の上に定義されたL演算子とよぶ。

$$L_n(\lambda) = R_{0n}(\lambda - \eta/2). \quad (5.10)$$

引数は後の都合のために、 $\eta/2$  だけずらしてある。

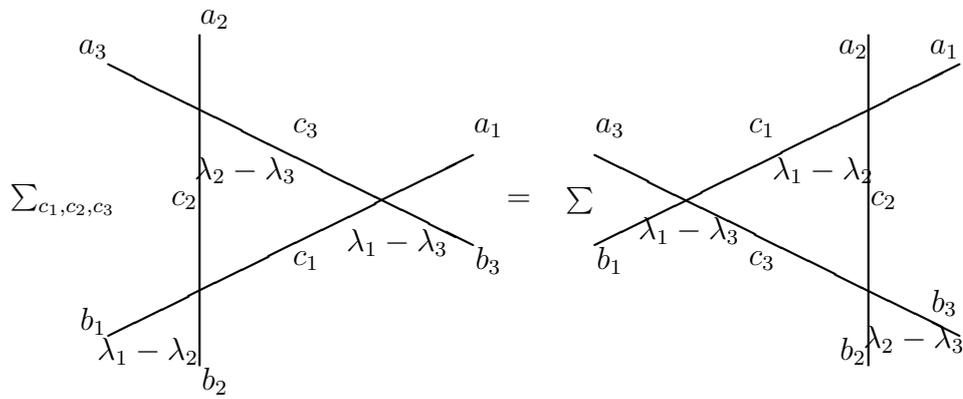


Figure 5-2: ヤン・バクスター関係式：ラピディティは直線に対して定められ、R行列の引数は交差する直線の角度に対応し、それは各直線のラピディティの差で与えられる。

L 演算子は格子点  $n$  の上に定義されたスピン変数を行列要素とする「行列」で、具体的には次式で与えられる。

$$L_n(\lambda) = \lambda I_0 \otimes I_n + \frac{\eta}{2} \sum_{a=x,y,z} \sigma_0^a \otimes \sigma_n^a \quad (5.11)$$

ここで  $I_n$  および  $\sigma_n^a$  ( $n = 1, \dots, N$ ) は  $n$  番目の量子空間  $V_n$  に作用する演算子である。一方、 $I_0$  および  $\sigma_0^a$  は補助空間  $V_0$  に作用する演算子である。そして、L 行列の  $(j, k)$  成分の行列要素は、補助空間  $V_0$  に作用する演算子の  $(j, k)$  成分の行列要素に対応する。すなわち、L 演算子の行列要素  $(L_n(\lambda))_{jk}$  は次のように表される。

$$(L_n(\lambda))_{jk} = \lambda (I_0)_{jk} I_n + \frac{\eta}{2} \sum_{a=x,y,z} (\sigma_0^a)_{jk} \sigma_n^a \quad (5.12)$$

以下のように行列で表すと、分かりやすいであろう。

$$L_n(\lambda) = \lambda \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & I_n \end{pmatrix}_{[0]} + \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_n^x \\ \sigma_n^x & 0 \end{pmatrix}_{[0]} + \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_n^y \\ i\sigma_n^y & 0 \end{pmatrix}_{[0]} + \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} \sigma_n^z & 0 \\ 0 & -\sigma_n^z \end{pmatrix}_{[0]} = \begin{pmatrix} \lambda I_n + \frac{\eta}{2} \sigma_n^z & \eta \sigma_n^- \\ \eta \sigma_n^+ & \lambda I_n - \frac{\eta}{2} \sigma_n^z \end{pmatrix}_{[0]} .$$

#### 5.1.4 モノドロミー行列の定義

転送行列を L 演算子の積から定義する。はじめに、モノドロミー行列  $T(\lambda) = T_{012\dots N}(\lambda)$  を次式で定義する。

$$T(\lambda) = L_N(\lambda) \cdots L_2(\lambda) L_1(\lambda) \quad (5.13)$$

ここで右辺の積は、L 演算子  $L_n(\lambda)$  を  $n$  番目の格子点上に作用するスピン演算子を要素とする 2 行 2 列の行列と見なして計算される。

モノドロミー行列はスピン変数を行列要素にもつ 2 行 2 列の行列である。その要素を次のように表す。

$$T(\lambda) = \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

XXX 鎖の転送行列はモノドロミー行列のトレースで与えられる。

$$\tau(\lambda) = \text{tr}_0 T(\lambda) = A(\lambda) + D(\lambda) . \quad (5.15)$$

## 5.2 XXZ鎖のハミルトニアン of 転送行列からの導出

転送行列  $\tau(\lambda)$  と XXX ハミルトニアン  $\mathcal{H}_{XXX}$  の関係を議論する [9]。

まず最初に、L 演算子は特別な場合に置換演算子と一致することに注意する。

$$\begin{aligned} L_n(\lambda = \eta/2) &= \eta/2 \left( I_0 \otimes I_n + \sum_{a=x,y,z} \sigma_0^a \otimes \sigma_n^a \right) \\ &= \eta \Pi^{(0,n)} \end{aligned} \quad (5.16)$$

ここで記号  $\Pi^{(0,n)}$  は、 $n$  番目の格子点上のスピン  $|\uparrow, \downarrow\rangle_n$  と補助空間 (0 番目格子点) のスピン  $|\uparrow, \downarrow\rangle_0$  とに作用する置換演算子を表し、その作用は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \Pi^{(0,n)} |\uparrow\rangle_0 |\downarrow\rangle_n &= |\downarrow\rangle_0 |\uparrow\rangle_n, \quad \Pi^{(0,n)} |\downarrow\rangle_0 |\uparrow\rangle_n = |\uparrow\rangle_0 |\downarrow\rangle_n, \\ \Pi^{(0,n)} |\uparrow\rangle_0 |\uparrow\rangle_n &= |\uparrow\rangle_0 |\uparrow\rangle_n, \quad \Pi^{(0,n)} |\downarrow\rangle_0 |\downarrow\rangle_n = |\downarrow\rangle_0 |\downarrow\rangle_n. \end{aligned} \quad (5.17)$$

このことを用いて、 $\lambda = \eta/2$  のときに転送行列は格子並進演算子 (運動量演算子) の逆演算子と一致することが示される。

$$\begin{aligned} \tau(\lambda = \eta/2) &= \text{tr} (L_N(\eta/2) \cdots L_1(\eta/2)) \\ &= \eta^N \text{tr} (\Pi^{(0,N)} \cdots \Pi^{(0,1)}) \\ &= \eta^N \Pi^{(12 \cdots N-1 N)} \end{aligned} \quad (5.18)$$

ここで  $\Pi^{(12 \cdots N)}$  は 1 を 2 に、2 を 3 に、 $\dots$ 、 $N-1$  を  $N$  に、そして 1 を  $N$  に変換する巡回置換であり、次式を用いた。

$$\text{tr}_0 (\Pi^{(0,N)} \cdots \Pi^{(0,1)}) = \Pi^{(12 \cdots N)} \quad (5.19)$$

上式を導く。最初に、置換演算子  $\Pi^{(0,1)}$  を置換  $\Pi^{(0,2)}$  と交換させると、番号 0 が 1 に変更される。

$$\Pi^{(0,2)} \Pi^{(0,1)} = \Pi^{(01)} \Pi^{(12)} \quad (5.20)$$

そこで、置換  $\Pi^{(01)}$  を左へ次々に移動していくと次が導かれる。

$$\left( \Pi^{(0,N)} \Pi^{(0,N-1)} \cdots \Pi^{(02)} \right) \Pi^{(01)} = \Pi^{(01)} \left( \Pi^{(1,N)} \Pi^{(1,N-1)} \cdots \Pi^{(1,2)} \right) \quad (5.21)$$

次に、以下の二つの置換の積を合成して長さ 3 の巡回置換になる。

$$\Pi^{(1,3)} \Pi^{(1,2)} = \Pi^{(123)} \quad (5.22)$$

そして  $N-1$  個の積を合成すると長さ  $N$  の巡回置換になる。

$$\Pi^{(1,N)} \Pi^{(1,N-1)} \cdots \Pi^{(1,2)} = \Pi^{(12 \cdots N)} \quad (5.23)$$

こうして、次式が成り立つ。

$$\text{tr} (\Pi^{(0,N)} \cdots \Pi^{(0,1)}) = \text{tr} (\Pi^{(0,1)}) \Pi^{(12 \cdots N)} \quad (5.24)$$

最後に、量子空間  $V_1$  のベクトル  $|\sigma_1\rangle_1$  への作用を計算する。

$$\begin{aligned} \text{tr} (\Pi^{(01)}) |\sigma_1\rangle_1 &= \sum_{\alpha=1,2} {}_0\langle \alpha | \Pi^{(01)} | \alpha \rangle_0 |\sigma_1\rangle_1 \\ &= \sum_{\alpha=1,2} {}_0\langle \alpha | |\sigma_1\rangle_0 \langle \alpha | \\ &= \sum_{\alpha=1,2} \delta(\alpha, \sigma_1) |\alpha\rangle_1 \\ &= |\sigma_1\rangle_1. \end{aligned} \quad (5.25)$$

つまり、 $\text{tr}(\Pi^{(0,1)})$  は恒等的に 1 である。よって、式 (5.19) が成立する。

転送行列の対数微分  $\frac{d}{d\lambda} \log \tau(\lambda)$  を議論する。まず、L 演算子の積のトレースの微分は、以下のように計算される。

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \tau(\lambda)|_{\lambda=\eta/2} &= \frac{d}{d\lambda} \text{tr}(L_N(\lambda) \cdots L_2(\lambda) L_1(\lambda))|_{\lambda=\eta/2} \\ &= \sum_{j=1}^N \text{tr} \left( L_N(\eta/2) \cdots L_{j+1}(\eta/2) \frac{d}{d\lambda} L_j(\lambda)|_{\lambda=\eta/2} L_{j-1}(\eta/2) \cdots L_1(\eta/2) \right) \\ &= \eta^{N-1} \sum_{j=1}^N \text{tr}_0 \left( \Pi^{(0,N)} \cdots \Pi^{(0,j+1)} \cdot I_0 \otimes I_j \cdot \Pi^{(0,j-1)} \cdots \Pi^{(0,1)} \right) \quad (5.26) \end{aligned}$$

運動量演算子の計算 (5.19) と同様にして、次式を示すことができる。

$$\sum_{j=1}^N \text{tr}_0 \left( \Pi^{(0,N)} \cdots \Pi^{(0,j+1)} \cdot I_0 \otimes I_j \cdot \Pi^{(0,j-1)} \cdots \Pi^{(0,1)} \right) = \Pi^{1 \cdot 2 \cdots j-1 \cdot j+1 \cdots N} \quad (5.27)$$

転送行列の対数微分は、以下のように計算される。

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \log \tau(\lambda)|_{\lambda=\eta/2} &= \frac{1}{\tau(\eta/2)} \frac{d}{d\lambda} \tau(\lambda)|_{\lambda=\eta/2} \\ &= \eta^{-1} \sum_{j=1}^N \Pi^{(N \cdots 2 \cdot 1)} \text{tr}_0 \left( \Pi^{(0,N)} \cdots \Pi^{(0,j+1)} (I_0 \otimes I_j) \Pi^{(0,j-1)} \cdots \Pi^{(0,1)} \right) \\ &= \eta^{-1} \sum_{j=1}^N \Pi^{(j-1, j)} = \eta^{-1} \sum_{j=1}^N \Pi^{(j, j+1)} \\ &= \eta^{-1} \sum_{j=1}^N (\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} + I_j \otimes I_{j+1}) / 2 \quad (5.28) \end{aligned}$$

ここで周期的境界条件と、 $\Pi^{(N \cdots 2 \cdot 1)} \Pi^{1 \cdot 2 \cdots j-1 \cdot j+1 \cdots N} = \Pi^{(j-1, j)}$  を用いた。

### 5.3 代数的ベーテ仮説におけるスカラー積と量子逆散乱公式

#### 5.3.1 L 演算子に対するヤン・バクスター方程式

前節で導入された R 行列と L 演算子を用いて、ヤン・バクスター方程式を書き直してみよう。 $R_{12}R_{13}R_{23} = R_{23}R_{13}R_{12}$  において、

$$1 \rightarrow 0, \quad 2 \rightarrow \underline{0}, \quad 3 \rightarrow n,$$

と置き換えると、次式が成り立つ。

$$R_{0\underline{0}} R_{0n} R_{\underline{0}n} = R_{\underline{0}n} R_{0n} R_{0\underline{0}} \quad (5.29)$$

二つの異なる補助空間  $V_0$  および  $V_{\underline{0}}$  への作用をテンソル積空間  $V_0 \otimes V_{\underline{0}}$  への作用として、 $R_{0n}(\lambda - \eta/2) = L_n(\lambda) \otimes I_{\underline{0}}$  および  $R_{\underline{0}n}(\lambda - \eta/2) = I_0 \otimes L_n(\lambda)$  と表す。すなわち  $R_{0n}(\lambda - \eta/2)$  では二番目の補助空間  $V_{\underline{0}}$  への作用は自明な作用なので、 $R_{0n}(\lambda - \eta/2)$  を  $R_{0n}(\lambda - \eta/2) \otimes I_{\underline{0}}$  と表し、二番目の補助空間に作用する R 行列  $R_{\underline{0}n}(\lambda - \eta/2)$  は一番目の補助空間  $V_0$  に関しては自明な作用なので、 $R_{\underline{0}n}(\lambda - \eta/2)$  を  $I_0 \otimes R_{\underline{0}n}(\lambda - \eta/2)$  と表す。このとき、ヤン・バクスター関係式は以下のように表される。

$$R_{0\underline{0}}(\lambda - \mu) (L_n(\lambda) \otimes L_n(\mu)) = (I_0 \otimes L_n(\mu)) (L_n(\lambda) \otimes I_{\underline{0}}) R_{0\underline{0}}(\lambda - \mu) \quad (5.30)$$

### 5.3.2 モノドロミ一行列に関するヤン・バクスター方程式

L演算子に対するヤン・バクスター方程式 (5.30) の両辺に左から置換演算子  $\Pi^{00}$  を作用させると、 $\Pi^{00}(I_0 \otimes L_n(\mu))(L_n(\lambda) \otimes I_0) = (L_n(\mu) \otimes I_0)(I_0 \otimes L_n(\lambda))\Pi^{00}$  より、次が導かれる [27]。

$$\Pi^{00}R_{00}(\lambda - \mu)(L_n(\lambda) \otimes L_n(\mu)) = (L_n(\mu) \otimes L_n(\lambda))\Pi^{00}R_{00}(\lambda - \mu) \quad (5.31)$$

これを繰り返し適用して、モノドロミ一行列に対するヤン・バクスター方程式が成り立つ。

$$\Pi^{00}R_{00}(\lambda - \mu)(T(\lambda) \otimes T(\mu)) = (T(\mu) \otimes T(\lambda))\Pi^{00}R_{00}(\lambda - \mu) \quad (5.32)$$

R行列  $R(\lambda)$  を  $a(\lambda)$  で割り、 $b(\lambda)/a(\lambda)$  と  $c(\lambda)/a(\lambda)$  をそれぞれ  $b(\lambda)$  と  $c(\lambda)$  と表すことにする。さらに引数を省略して、 $b = b(\lambda - \mu)$ 、 $c = c(\lambda - \mu)$ 、そして  $A = A(\lambda)$  および  $A' = A(\mu)$  などのように表す。すると関係式 (5.32) はモノドロミ一行列の演算子要素間の交換関係を与える。左辺は以下のように与えられる。

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & b & 0 \\ 0 & b & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} AA' & AB' & BA' & BB' \\ AC' & AD' & BC' & BD' \\ CA' & CB' & DA' & DB' \\ CC' & CD' & DC' & DD' \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} AA' & AB' & BA' & BB' \\ cAC' + bCA' & cAD' + bCB' & cBC' + bDA' & cBD' + bDB' \\ bAC' + cCA' & bAD' + cCB' & bBC' + cDA' & bBD' + cDB' \\ CC' & CD' & DC' & DD' \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.33)$$

同様にして、右辺は以下のようになる。

$$\begin{pmatrix} A'A & cA'B + bB'A & bA'B + cB'A & B'B \\ A'C & cA'D + bB'C & bA'D + cB'C & B'D \\ C'A & cC'B + bD'A & bC'B + cD'A & D'B \\ C'C & cC'D + bD'C & bC'D + cD'C & D'D \end{pmatrix} \quad (5.34)$$

1行4列成分から、 $BB' = B'B$  が導かれる。つまり、B演算子は互いに交換する ( $B(\lambda)B(\mu) = B(\mu)B(\lambda)$ )。1行3列成分および2行4列成分からそれぞれ次が導かれる。

$$BA' = bA'B + cB'A, \quad B'D = cBD' + bDB' \quad (5.35)$$

これらは生成演算子Bと転送行列を構成するAやDとの交換関係である。全て上向きスピンのベクトルを、真空状態  $|0\rangle$  とよぶ。モノドロミ一行列の定義から次が導かれる。

$$A(\lambda)|0\rangle = \alpha(\lambda)|0\rangle, \quad D(\lambda)|0\rangle = \delta(\lambda)|0\rangle \quad (5.36)$$

ここで  $\alpha(\lambda) = (\lambda + \eta/2)^N$  および  $\delta(\lambda) = (\lambda - \eta/2)^N$  である。以下が示される。

**Propostion 5.1** ラピディティ  $\lambda_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) がベーター仮設方程式

$$\frac{\alpha(\lambda_j)}{\delta(\lambda_j)} \prod_{k=1, k \neq j}^n \frac{b(\lambda_j - \lambda_k)}{b(\lambda_k - \lambda_j)} = 1 \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (5.37)$$

を満たすとき、 $\prod_{j=1}^n B(\lambda_j)|0\rangle$  は転送行列  $\tau(\lambda_0)$  の固有ベクトルとなる。

$$\tau(\lambda_0)B(\lambda_1)B(\lambda_2) \cdots B(\lambda_n)|0\rangle = \Lambda(\lambda_0)B(\lambda_1)B(\lambda_2) \cdots B(\lambda_n)|0\rangle \quad (5.38)$$

固有値  $\Lambda(\lambda_0)$  は以下のように与えられる。

$$\Lambda(\lambda_0) = \alpha(\lambda_0) \prod_{j=1}^n b(\lambda_j - \lambda_0)^{-1} + \delta(\lambda_0) \prod_{j=1}^n b(\lambda_0 - \lambda_j)^{-1} \quad (5.39)$$

### 5.3.3 スカラー積公式

代数的ベーテ仮設におけるスカラー積を次で定義する。

$$S_n(\{\mu\}, \{\lambda\}) = \langle 0 | \prod_{\alpha=1}^n C(\mu_\alpha) \prod_{\beta=1}^n B(\lambda_\beta) | 0 \rangle \quad (5.40)$$

スラブノフのスカラー積公式を紹介する [30]。行列  $\hat{H}$  の行列要素を次式で定義する。

$$\hat{H}(\{\lambda\}, \mu_b)_{ab} = \frac{\varphi(\eta)}{\varphi(\lambda_a - \mu_b)} \left( \alpha(\mu_b) \prod_{j=1; j \neq a}^n \varphi(\lambda_j - \mu_b + \eta) - \delta(\mu_b) \prod_{j=1; j \neq a}^n \varphi(\lambda_j - \mu_b - \eta) \right). \quad (5.41)$$

ラピディティ  $\{\lambda_b\}$  ( $b = 1, 2, \dots, n$ ) はベーテ仮設方程式の解とする。このとき、スカラー積  $S_n(\{\mu\}, \{\lambda\})$  は以下のように行列式を用いて表される。

$$S_n(\{\mu\}, \{\lambda\}) = \frac{\det \hat{H}(\{\mu\}, \{\lambda\})}{\prod_{1 \leq \alpha < \beta \leq n} \varphi(\mu_\alpha - \mu_\beta) \prod_{1 \leq \alpha < \beta \leq n} \varphi(\lambda_\beta - \lambda_\alpha)} \quad (5.42)$$

### 5.3.4 量子逆散乱問題の公式

ヤン・バクスター方程式と R 行列のユニタリティーを用いて、XXZ 鎖の任意の局所演算子  $x_j$  がモノドロミー行列の要素を用いて表される [31]。(実は非常に簡明に導出できる [27].)

$$x_j = \prod_{a=1}^{j-1} (A(\xi_a) + D(\xi_a)) \text{tr}_0 (x_0 T_{012 \dots N}) \prod_{a=1}^j (A(\xi_a) + D(\xi_a))^{-1} \quad (5.43)$$

上の公式 (5.43) とスラブノフのスカラー積公式 (5.42) を用いて、XXZ 鎖の任意の局所演算子に関する形状因子を、行列式を用いて書き下すことができる [31]。解析的にも数値計算的にも非常に便利な公式が導かれる。この方法の延長上で、代数的ベーテ仮設を用いて相関関数の漸近展開が導かれている [5]。

## 6 LL 模型の第二量子化と形状因子公式

LL 模型の第二量子化の結果をレビューする。ただし、導出はまだ簡単化 [27] されていない。

### 6.1 LL 模型の第二量子化

LL 模型を第二量子化すると、第二量子化ハミルトニアン  $\mathcal{H}_{\text{NLS}}$  は次式で与えられる [1]。

$$\int_0^L \left( \frac{\partial \hat{\psi}^\dagger}{\partial x}(x, t) \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial x}(x, t) + c \hat{\psi}^\dagger(x, t) \hat{\psi}^\dagger(x, t) \hat{\psi}(x, t) \hat{\psi}(x, t) \right). \quad (6.1)$$

ここで場の演算子  $\hat{\psi}(x)$  は次の正準交換関係を満たす。

$$\begin{aligned} [\psi(x, t), \psi(y, t)^\dagger] &= \delta(x, y), \\ [\psi(x, t), \psi(y, t)] &= [\psi(x, t)^\dagger, \psi(y, t)^\dagger] = 0. \end{aligned} \quad (6.2)$$

場の演算子は以下のハイゼンベルグ運動方程式を満たす。

$$i \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} = - \frac{\partial^2 \hat{\psi}}{\partial x^2} + 2c \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^2. \quad (6.3)$$

古典場の場合、非線形波動の分野では、非線形シュレーディンガー方程式 (Nonlinear Schrödinger equation, NLS) とよばれる。冷却原子系の分野では、グロス・ピタエフスキー (Gross-Pitaevskii, GP) 方程式とよばれる。非線形シュレーディンガー方程式は、ソリトン解を持つことが知られている。

## 6.2 形状因子の行列式公式

形状因子とは、中性子散乱などで散乱体を表す摂動ハミルトニアンを固有状態ではさんだ行列要素のことである。もともとは基底状態  $|G\rangle$  と励起状態  $|\text{excited}\rangle$  の間の行列要素のことを形状因子 (form factor) とよぶ。ところがベーテ仮設の可解量子系の場合、形状因子に対する式が、基底状態と励起状態の間だけでなく、任意のベーテ仮設固有状態の間でも同様に成立する場合が多い。このため可積分量子系では、任意のベーテ固有状態の間の行列要素のことも形状因子と呼ぶことがある [30]。

粒子数密度の演算子を  $\hat{\rho}(x) = \hat{\psi}^\dagger(x, 0)\hat{\psi}(x, 0)$  で定義する。このとき、ベーテ固有状態  $|k_j\rangle$  と  $|k'_j\rangle$  の間の形状因子 (行列要素) は次のように行列式で表される [30, 32, 33, 34]。

$$\begin{aligned} \langle k'_a | \hat{\rho}(0) | k_a \rangle &= (-1)^{N(N+1)/2} (P - P') C(k'_a, k_b) \\ &\times \prod_{j=1}^N (V_+^{-1}(k_j) - V_-^{-1}(k_j)) \\ &\times \prod_{j<\ell}^N \sqrt{\frac{K(k'_j - k'_\ell)}{K(k_j - k_\ell)}} \cdot \frac{\det(I + U(k, k'))}{\sqrt{\det G(k) \det G(k')}}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

ここで  $P$  と  $P'$  はそれぞれベーテ固有状態  $|k_a\rangle$  と  $|k'_a\rangle$  の全運動量を表す。積分核  $K(x)$  は  $K(x) = 2c/(x^2 + c^2)$ 、そして  $G(k)$  はゴードン (Gaudin) 行列を表し、ベーテ固有状態のノルムを表すのに用いられる [1]。

$$G(k)_{ab} = \delta_{a,b} \left( L + \sum_{j=1}^N K(k_a - k_j) \right) - K(k_a - k_b). \quad (6.5)$$

そして  $C(k'_a, k_b)$  は  $a$  行  $b$  列の行列要素が  $1/(k'_a - k_b)$  と擬運動量の差の逆数で与えられる行列の行列式を表し、Cauchy 行列式とよばれる。次のように差積を用いて表される。

$$\begin{aligned} C(k'_a, k_b) &= \det_N \left( \frac{1}{k'_a - k_b} \right) \\ &= \frac{\prod_{a<b}^N (k'_a - k'_b) \prod_{a<b}^N (k_b - k_a)}{\prod_{a,b=1}^N (k'_a - k_b)}. \end{aligned} \quad (6.6)$$

因子  $V_\pm(x)$  は積  $V_\pm(x) = \prod_{a=1}^N (x - k_a \mp ic)/(x - k'_a \mp ic)$  で定義される。そして  $(N-1) \times (N-1)$  行列  $U(k, k')$  の  $(j, \ell)$  成分 ( $1 \leq j, \ell \leq N-1$ ) は次式で表される。

$$U(k, k')_{j,\ell} = \frac{\prod_{a=1}^N (k'_a - k_j)}{N} \frac{K(k_j - k_\ell) - K(k_N - k_\ell)}{V_+^{-1}(k_j) - V_-^{-1}(k_j)}. \quad (6.7)$$

形状因子が行列式で表されることによる利点は多い。実際、計算時間が大幅に短縮される。例えばもし、長さ  $N$  の 1 次元格子系で定義された量子スピン系において状態ベクトルのノルムを計算すると、まともに計算すると指数関数的な時間が必要になるであろう。各サイトで上向きと下向きの二つの場合があり、それが  $N$  個連なるので、ベクトルの成分の数は  $2^N$  になるためである。一方、 $N$  行  $N$  列の行列式の計算にかかる時間は  $N$  の 3 乗かそれ以下である。指数関数的な時間と比較すれば、非常に速い。

## 7 孤立量子系のダイナミクス

### 7.1 孤立量子系における長時間の振る舞いと量子統計力学の基礎

#### フォン・ノイマンの予想

孤立した量子多体系のダイナミクスが統計力学の基礎とも関連して最近、大きく注目されている [6]。初期状態としてある純粋状態を与えたとき、孤立した多自由度の量子系の時間発展で物理量の期待値はどのように振る舞うか、という非常に基本的な問題である。ただしハミルトニアンはエルミートであり、時間発展はユニタリなので量子状態は初期状態と同じで全く変化しない。しかし、系の自由度が十分大きいとき、分系の中で定義できるような局所的な物理量演算子の期待値は、時間発展で次第に熱平衡状態の値に近づく、という予想が比較的最近、定式化（再導出）された [35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43]。

$$\langle A(t) \rangle \rightarrow \langle A(\infty) \rangle \quad (t \rightarrow \infty). \quad (7.1)$$

この予想は本質的にはフォン・ノイマンによって最初に提案された [43]。しかし、誤解のためか、その後完全に忘れ去られた。そして田崎論文 [35] が一つの引き金となって典型性の重要性が明らかにされ [36]、その研究の流れの中でフォン・ノイマンの論文は最近になって再発見された [43]。

フォン・ノイマンの予想は一般の量子系を対象とし、系が可積分かどうかは関係しない。しかし、可積分量子系での局所物理量の期待値の長時間の振る舞いは、非可積分量子系とは異なり、一般化されたギブス分布に収束する、という興味深い予想が Rigol 達によって提案された [37]。可積分量子系の時間発展は非常に長い時間追跡可能であるため、可積分量子系のダイナミクスを具体的に調べる研究が欧米を中心として最近多数発表されている [44, 45]。

#### 孤立量子系の緩和

孤立量子系の緩和という表現が、現在ではしばしば用いられる。最近では、平衡化 (equilibration) あるいは初期状態依存性がない場合には熱化 (thermalization) ともよばれる。そもそも孤立量子系の時間発展で系のエントロピーは変化しないので、従来の意味での緩和とよぶのはあまり適当ではない。しかし、部分系で定義できるような物理量の期待値を見る限りでは、時間発展で緩和する様子が観察される。このことを例えば可積分量子系を用いて確認できる [46]。

実際、孤立量子系であっても観測される対象を部分系とみなし、孤立系の他の部分全体を熱浴とみなすことができるとき、孤立量子系における緩和 (relaxation)、という表現を用いても従来の緩和に近い意味を持たせることができるであろう。ただし、コーヒーにクリームを加えて経過を観察する場合には、クリームの混合に伴って全体のエントロピーは増大するが、しかし、孤立量子系の時間発展では、系全体のエントロピーは全く変化しない。そこで、この点ではまだ異なっていることに注意しなければならない。

#### 量子クエンチ

孤立した量子多体系のダイナミクスに密接に関連するもう一つの話題として、量子クエンチ (quantum quench) が挙げられる [47]。ハミルトニアンのパラメーターを突然変化させた後、どのような緩和ダイナミクスが起こるか、という問題である。量子クエンチは可積分量子系でも現在、非常に活発に研究されている [48, 49, 50, 51, 52]。特に、初期時刻に系の一部分のみを変化させる場合は局所クエンチ (local quench)、系全体の変化あるいは系の無限極限を考えるような場合は大局的クエンチ (global quench) と分類される。

量子クエンチなどの孤立量子系のダイナミクス、そして典型性や後で述べる固有状態の熱化の仮説 [53, 54, 55] は、量子統計力学の基礎に関する重要な研究課題であるが、しかし、おそらく 20 年前には面白いと思う人は少なかったと思われる。最近の十数年間の冷却原子系の実験の発展 [56, 57, 58, 59, 60] によって支援された結果、十分に現実的な研究課題であると認識されるようになった [44, 45]。

## 7.2 孤立量子系の熱化のシナリオ

### 7.2.1 非可積分系の緩和： ギブス分布

非可積分量子系では、保存量はハミルトニアンエネルギー固有値のみである。そして、長時間の時間発展の後に物理量  $A$  の期待値はある漸近値  $\langle A(\infty) \rangle$  に近づき、その値は小正準分布のアンサンブル平均値で与えられる、という予想が提案された [38]。少し詳しく述べると、量子状態  $|\Psi\rangle$  を任意にひとつ選ぶとき、確率的にみて非常に多くの場合、局所的な物理量  $\hat{A}$  の量子状態  $|\Psi\rangle$  に関する期待値は小正準分布による物理量演算子  $\hat{A}$  のアンサンブル平均値とほとんど同じ値を与える、という予想である。後で典型性を用いて説明するが、正確さを少し犠牲にして分かりやすく直感的述べると、次のように表現できる。

命題： 量子状態  $|\Psi\rangle$  はエネルギーの範囲が  $E$  から  $E + \Delta E$  の固有状態の線形結合で表される任意の純粋状態とする。系の自由度  $N$  が非常に大きいとき、状態  $|\Psi\rangle$  の密度行列  $|\Psi\rangle\langle\Psi|$  は小正準分布の密度行列  $\rho_{\text{MC}}(E)$  で近似される。

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| \approx \rho_{\text{MC}}(E). \quad (7.2)$$

小正準分布と正準分布における物理量演算子の平均値の差を無視できるとき、簡単のため、小正準分布の密度行列  $\rho_{\text{MC}}(E)$  を正準分布の密度行列  $\exp(-\beta E)/Z$  で表すと見易い。このとき (7.2) 式は次のように表される。

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| \approx \exp(-\beta E)/Z. \quad (7.3)$$

### 7.2.2 可積分系の緩和： 一般化ギブス分布

可積分量子系では多数の保存量が存在するため、可積分系の時間発展は非可積分系の場合とは異なることが期待される [53]。そして、可積分量子系では物理量の期待値は長時間の時間発展の後に一般化されたギブス分布 (Generalized Gibbs Ensemble, GGE) に収束する、という予想が提案された [37]。これは温度に対応する変数  $\beta$  を一般化する拡張された熱力学変数  $\lambda_j$  が、独立な保存量演算子  $\hat{I}_j$  の数だけ存在し、その値は初期状態における保存量演算子の期待値  $I_j$  で決定される、というものである。可積分量子系の自由度を  $N$  とする。一般化されたギブス分布の予想は次のように表現できる。

命題： 量子状態  $|\Phi\rangle$  はエネルギーの範囲が  $E$  から  $E + \Delta E$  の固有状態の線形結合で表される任意の純粋状態とする。系の自由度  $N$  が非常に大きいとき、状態  $|\Phi\rangle$  の密度行列は一般化ギブス分布の密度行列  $\rho_{\text{GGE}}$  で近似される。

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| \approx \rho_{\text{GGE}}(\{I_j\}) \quad (7.4)$$

ここで一般化ギブス分布  $\rho_{\text{GGE}}$  は変数  $\lambda_j$  と保存量  $\hat{I}_j$  の状態  $|\Phi\rangle$  での期待値を  $I_j$  を用いて次式で表される [61]。

$$\rho_{\text{GGE}}(\{I_j\}) = \exp\left(-\sum_{j=1}^N \lambda_j I_j\right) / Z \quad (7.5)$$

一般化ギブス分布の予想はまだ明確な証明は与えられていない。また、最近では反例も見つかっている [62]。しかし、初期状態の  $N$  個の保存量の値が平衡値に反映するので、一般にはもっともらしく思われるシナリオである。また歴史的には、線形応答における保存量の効果が 70 年代初めに議論された [63, 64]。これらとも深く関係すると思われる。

このように、形状因子の行列式公式などを用いて可積分系の時間発展を特徴づけることは、量子ダイナミクスにおいて現在、重要な研究課題の一つとなっている。

## 8 典型性と E T H

### 8.1 量子状態の典型性と平衡化

なぜ孤立量子多体系の物理量の期待値が次第に熱平衡値に近づくと考えられるのであろうか。一つの考え方として、任意の量子状態で物理量を平均すると、その値は熱平衡状態の値に非常に近い、という典型性を用いる説明が挙げられる [39, 40, 41, 42]。以下、典型性を特徴づける不等式を導く [39]。

ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  で特徴づけられる量子多体系を考えよう。エネルギー固有値  $E_j$  の固有状態を  $|E_j\rangle$  と表す。そして、 $\{|E_j\rangle\}$  は完全系を作るものとする。さて、エネルギーの値が  $E$  から  $E + \Delta E$  の範囲内の固有状態の線形結合で表される任意の純粋状態を  $|\Psi\rangle$  とする。

$$|\Psi\rangle = \sum_{j \in S} c_j |E_j\rangle \quad (8.1)$$

ここで記号  $S$  はエネルギーの値が  $E$  から  $E + \Delta E$  の範囲内の固有状態のラベル  $j$  全体の集合を表す。係数  $c_j$  の分布として状態空間中で等方的かつ一様な分布を仮定しよう。

$$P(\{c_j\}) = C \delta \left( 1 - \sum_{j \in S} |c_j|^2 \right) \quad (8.2)$$

物理量演算子  $A$  の期待値を  $\langle \Psi | A | \Psi \rangle$  と表し、状態  $|\Psi\rangle$  の取り方に関する平均を  $\overline{\langle \Psi | A | \Psi \rangle}$  と表す。このとき、演算子  $A$  の期待値の状態に関する平均値  $\overline{\langle A \rangle}$  は、次のように導かれる。

$$\begin{aligned} \overline{\langle A \rangle} &= \overline{\langle \Psi | A | \Psi \rangle} \\ &= \sum_{j \in S} \sum_{k \in S} c_j^* c_k \langle E_j | A | E_k \rangle \\ &= \sum_{j, k \in S} \overline{c_j^* c_k} A_{jk}. \end{aligned} \quad (8.3)$$

ここで  $A_{jk} = \langle E_j | A | E_k \rangle$  である。等方的かつ一様な分布の仮定 (8.2) より、次が導かれる。

$$\overline{c_j^* c_k} = \frac{1}{d} \delta_{jk} \quad (8.4)$$

ここで  $d$  はエネルギー殻内の固有状態の生成するヒルベルト空間の次元を表す。次元  $d$  は系のサイズに関して指数関数的に増大し、一般に非常に大きな数となる。この結果 (8.4) を式 (8.3) へ代入すると、物理量  $A$  の期待値の平均値は小正準分布のアンサンブル平均と一致することが導かれる。

$$\overline{\langle A \rangle} = \frac{1}{d} \sum_{k \in S} A_{kk}. \quad (8.5)$$

物理量演算子の期待値の平均からの偏り  $\Delta \langle A \rangle$  を、 $\Delta \langle A \rangle = \langle A \rangle - \overline{\langle A \rangle}$  で定める。このとき、偏り  $\Delta \langle A \rangle$  の二乗平均値は、次式で定義される。

$$\overline{(\Delta \langle A \rangle)^2} = \overline{\langle A \rangle^2} - (\overline{\langle A \rangle})^2 \quad (8.6)$$

この値は次のように評価される [39]。

$$\overline{(\Delta \langle A \rangle)^2} \leq \frac{\|A\|_{op}^2}{d+1} \quad (8.7)$$

ここで  $\|A\|_{op}$  は演算子  $A$  の固有値の中で絶対値が最大のものを表す。この不等式 (8.7) が典型性を表す根拠となる。すなわち、演算子  $A$  の固有値の中での絶対値が最大のものは、シ

ステムサイズに関して高々べき的に増大すると予想される。一方、エネルギー殻中の固有状態が生成するヒルベルト空間の次元  $d$  は、システムサイズに関して指数関数的に増加する。この結果、系の自由度が大きい場合、基本不等式の右辺は非常に小さくなり、物理量の期待値と熱平衡値との差は非常に小さくなるのである。

典型性の基本不等式 (8.7) の上の導出では、球対称一様分布 (8.2) を仮定した。このため、小正準分布の微視的な導出とは言えない。しかし、典型性の本質を明らかにする分かり易い議論と言えるであろう。

## 8.2 固有状態の熱化仮説 (ETH)

熱化がなぜ起こるのかを追求すると、次の予想に近づくであろう。エネルギー  $E$  の固有状態においてある物理量の期待値を求めると、その値はエネルギー  $E$  の熱平衡状態での物理量の期待値、すなわち熱平衡値、に非常に近い、という予想である。これを固有状態の熱化の仮説 (Eigenstate Thermalization Hypothesis, ETH) とよぶ [53, 54, 38, 55]。

前節の記号を用いると、エネルギー固有状態  $|E_j\rangle$  における物理量演算子  $A$  の期待値  $\langle E_j|A|E_j\rangle$  が、熱平衡状態での  $A$  の値に非常に近い、という予想である。

$$\langle E_j|A|E_j\rangle \approx \frac{1}{d} \sum_{k \in S} A_{kk} = \overline{\langle \hat{A} \rangle}. \quad (8.8)$$

ただしエネルギー固有値  $E_j$  はエネルギー殻  $[E, E + \Delta E]$  の中に含まれるものとする。すなわち、 $E < E_j < E + \Delta E$  が成り立つと仮定する。固有状態の熱化の仮説は、個々の固有状態がすでに小正準分布の密度行列にほとんど等価である、と解釈できる。

$$|E_j\rangle\langle E_j| \approx \rho_{\text{MC}}(E_j). \quad (8.9)$$

## 8.3 まとめ

典型性あるいは固有状態の熱化仮説が成り立てば、たいいていの量子状態で局所物理量の期待値は対応する熱平衡状態での期待値に非常に近いことが導かれる。しかし、時間発展に関してはまだ議論されいない。どのように平衡に近づくか、平衡化の様子は明らかでない。その解明には具体例を調べる必要があり、議論すべき課題は多く残されている。

## 謝辞

第59回物性若手夏の学校の組織委員の皆様、特に担当の加藤 愛理さん（東大清水研）や西口大貴さん（東大佐野研）にお世話になったことを感謝します。とても勉強になりました。

## References

- [1] V.E. Korepin, N.M. Bogoliubov and A.G. Izergin, *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993)
- [2] 川上則雄、梁成吉「共形場理論と1次元量子系」(岩波書店、1997)
- [3] M. Takahashi, *Thermodynamics of one-dimensional solvable models* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [4] F.H.L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper and V.E. Korepin, *The one-dimensional Hubbard model* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
- [5] N. Kitanine, K.K. Kozłowski, J. M. Maillet, N.A. Slavnov and V. Terras, *J. Stat. Mech.* (2009) P04003.

- [6] 出口哲生、佐藤純、上西慧理子、可積分量子多体系の非平衡ダイナミクスと統計力学の基礎、日本物理学会誌 (出版予定)。
- [7] J. Cardy, Phys. Rev. Lett. **112**, 220401 (2014).
- [8] A. Imambekov, T.L. Schmidt and L. I. Glazman, Rev. Mod. Phys. **84**, 1253 (2012).
- [9] 出口哲生、物性研究 Vol. 74-3 (2000-6) pp. 255-319.
- [10] 永宮健夫「磁性の理論」(吉岡書店、1987)、芳田奎「磁性」(岩波書店、1991)、金森順次郎「磁性」(培風館、1969)。
- [11] M. Girardeau, J. Math. Phys. (NY) **1**, 516 (1960).
- [12] E. H. Lieb and W. Liniger, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963).
- [13] E.H. Lieb, Phys. Rev. **130**, 1616 (1963).
- [14] T.C. Dorlas, Commun. Math. Phys. **154**, 347 (1993).
- [15] 量子数の組に対してベータ方程式 (3.70) の解が一的に定まることは、ベータ方程式 (3.70) が Yang-Yang (1969) の作用 [1] の停留条件を与え、Yang-Yang 作用の正定値性から導かれる。さらに、連続的な波動関数を格子を用いて正則化し、相互作用定数  $c$  をゼロに近づける弱結合の極限を用いて、ベータ固有状態の完全性が証明される [14]。
- [16] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).
- [17] M. Gaudin, Phys. Lett. **24A**, 55-56 (1967).
- [18] C.N. Yang, Phys. Rev. Lett. **19**, 1312-1314 (1967).
- [19] E.H. Lieb and F.Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [20] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963); J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A276**, 238 (1963); J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **30**, 275 (1963).
- [21] 斯波弘行「固体の電子論」(丸善、1996)。
- [22] T. Deguchi, F.H.L. Essler, F. Göhmann, V.E. Korepin, A. Klümper and K. Kusakabe, Phys. Reports **331** (2000) pp. 197-281.
- [23] W. Magnus, A. Karras, and D. Solitar, *Combinatorial Group Theory* (Dover, Pub., 1976, New York).
- [24] R. Kanamoto, L. D. Carr and M. Ueda, Phys. Rev. A **81**, 023625 (2010).
- [25] E. Kaminishi, R. Kanamoto, J. Sato and T. Deguchi, Phys. Rev. A **83**, 031601(R) (2011).
- [26] E. Kaminishi, J. Sato and T. Deguchi, J. Phys.: Conf. Series **497**, 012030 (2014).
- [27] 出口哲生、「応用のためのヤン・バクスター方程式入門」(原稿準備中、サイエンス社)
- [28] J. Cardy, Nucl. Phys. B **270** [FS16], 186 (1986).
- [29] N.M. Bogoliubov, A.G. Izergin and N.Yu. Reshetikhin, J. Phys. A: Math. Gen. **20** (1987) 5361-5369.
- [30] N. A. Slavnov, Teor. Mat. Fiz. **79**, 232 (1989); **82**, 389 (1990).
- [31] N. Kitanine, J. M. Maillet and V. Terras, Nucl. Phys. B **554** [FS], 647 (1999).
- [32] T. Kojima, V.E. Korepin, N.A. Slavnov, Commun. Math. Phys. **188**, 657 (1997).
- [33] J.-S. Caux, P. Calabrese and N. A. Slavnov, J. Stat. Mech. (2007) P01008.
- [34] P. Calabrese and J.-S. Caux, J. Stat. Mech. (2007) P08032.
- [35] H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **80**, 1373 (1998).

- [36] S. Goldstein, J.L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zanghi, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 050403 (2006)
- [37] M. Rigol, V. Dunjko, V. Yurovsky, and M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 050405 (2007).
- [38] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii, *Nature* **452**, 854 (2008).
- [39] 杉田歩、数理解析研講究録 1507 巻 2006 年 147–159.
- [40] A. Sugita, *Nonlinear Phenom. Complex Syst.* **10**, 192 (2007).
- [41] P. Reimann, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 160404 (2007); **101**, 190403 (2008).
- [42] P. Reimann, *New. J. Phys.* **12**, 055027 (2010).
- [43] R. Tumulka, *Eur. Phys. J. H* **35**, 201 (2010) [J. von Neumann, *Z. Phys.* 57, 30 (1929)]
- [44] A. Polkovnikov, K. Sengupta, A. Silva, and M. Vengalattore, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 863 (2011)
- [45] V.I. Yukalov, *Laser Phys. Lett.* **8**, 485 (2011).
- [46] J. Sato, R. Kanamoto, E. Kaminishi, and T. Deguchi, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 110401 (2012).
- [47] E. Barouch, B.M. McCoy and M. Dresden, *Phys. Rev.* **2**, 1075 (1970).
- [48] P. Calabrese and J. Cardy, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 136801 (2006); *J. Stat. Mech.* (2007) P06008.
- [49] D. Rossini, S. Suzuki, G. Mussardo, G.E. Santoro and A. Silva, *Phys. Rev. B* **82**, 144302 (2010).
- [50] J. Mossel and J.-S. Caux, *New J. Phys.* **12** (2010) 055028.
- [51] A.C. Cassidy, C.W. Clark, and M. Rigol, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 140405 (2011).
- [52] P. Calabrese, F.H.L. Essler, and M. Fagotti, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 227203 (2011).
- [53] J.M. Deutsch, *Phys. Rev. A* **43**, 2046 (1991).
- [54] M. Srednicki, *Phys. Rev. E* **50**, 888 (1994).
- [55] T. N. Ikeda, Y. Watanabe, and M. Ueda, *Phys. Rev. E* **84**, 021130 (2011).
- [56] S. Inouye, M.R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D.M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, *Nature* **392**, 151 (1998).
- [57] A. Görlitz, J.M. Vogels, A.E. Leanhardt, C. Raman, T.L. Gustavson, J.R. Abo-Shaer, A.P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 130402 (2001).
- [58] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T.W. Hänsch, and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 160405 (2001).
- [59] T. Kinoshita, T. Wenger and D.S. Weiss, *Science* **305**, 1125 (2004); *Phys. Rev. Lett.* **95**, 190406 (2005); *Nature* **440**, 900 (2006).
- [60] M. Gring, M. Kuhnert, T. Langen, T. Kitagawa, B. Rauer, M. Schreitl, I. Mazets, D. Adu Smith, E. Demler, J. Schmiedmayer, *Science* **337**, 1318 (2012).
- [61] E.T. Jaynes, *Phys. Rev.* **106**, 620 (1957); **108**, 171 (1957).
- [62] B. Wouters, J. De Nardis, M. Brockmann, D. Fioretto, M. Rigol and J.-S. Caux, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 117202 (2014).
- [63] P. Mazur, *Physica* **43**, 533 (1969).
- [64] M. Suzuki, *Physica* **51**, 277 (1971).