数理解析研究所講究録
923巻 1995年 139-153

フェルミ粒子系の基底状態について

松井 卓 TAKU MATSUI
(東京都立大学)

§1 最近,数理物理的な立場(つまり厳密な,という意味で)から ハバード模型などの相互作用をしながら格子上を動くフェルミ粒子系の研究が行われている。

しかし,古典統計力学の数学的な研究と比較するとまだ基本的な事がらで フェルミ粒子系で 解明されていないものは多くある。ここでは,基底状態を無限系でどうとらえるかという"定式化"について話をすすめる。

最初に フェルミ粒子系について いつくか 記号を定める。 $\mathbb{Z}^d$ を d-次元の(整数)格子 とする。

生成・消滅演算子 a_j^*, a_k $(j, k \in \mathbb{Z}^d)$ は次の標準的関係式をみたすとする。

$$\{a_j, a_k\} = 0 \qquad \{a_j^*, a_k^*\} = 0$$

$$\{a_j, a_k^*\} = \delta_{jk} \mathbb{1} \tag{1.1}$$

$$n_j = a_j^* a_j$$ とおく。

$(\{A, B\} = AB + BA)$

(1.1) をみたす代数は 2×2 行列の無限テンソル積をつかって実現できる。

$$\mathfrak{A}_{loc} = \overset{\infty}{\otimes} M_2(\mathbb{C}) \qquad (1.2)$$

又，ヒルベルト空間 $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ の外積代数（フォック空間）$\Lambda^*(\ell^2(\mathbb{Z}^d))$ 上の（有界）線型作用素として実現できる。
a_j^* は

$$a_j^*(\xi(1)\wedge\xi(2)\wedge\cdots\wedge\xi(n)) = e_j\wedge\xi(1)\cdots\wedge\xi(n)$$

ここで $\xi(1),\cdots\xi(n)\in\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ e_j は $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ のベクトルで

$$e_j = \{\delta_{kj} \mid k\in\mathbb{Z}^d\}\in\ell^2(\mathbb{Z}^d)$$

又 a_j は a_j^* の（ヒルベルト空間上の作用素としての）adjoint である。

ここでは解析的な問題を考えるので (1.2) の $\mathfrak{A}_{loc}$ を C^*-代数として完備化する方があつかいやすい。

以下
$$\mathfrak{A} = \overline{\mathfrak{A}_{loc}}^{C^*\text{-alg.}} \qquad (1.3)$$

とする。（量子系を C^*-代数をつかって扱う方法及び統計力学に関する結果について比較的新しい

教科書として B. Simon : Statistical Mechanics of Lattice Gasses I (Princeton Univ) がある。)

フェルミ粒子系の時間発展をあらわすハミルトニアン H としてよく次の形のものを考える

$\Lambda (\subset \mathbb{Z}^d)$ (有限集合) として

$$H_\Lambda = \sum_{i,j\in\Lambda} t_{ij}\, a_i^* a_j + \sum_{A\subset\Lambda} V_A \prod_{A\ni j} n_j \qquad (1.4)$$

$$H = \lim_{\Lambda\to\mathbb{Z}^d} H_\Lambda \qquad (1.5)$$

ここで t_{ij} V_A は実数 A は有限集合

$H_\Lambda = H_\Lambda^*$ をみたすように t_{ij} V_A は与えられている。さらにしばしば並進不変性(格子上のシフトについての不変性)も仮定される。

$$t_{ij} = t_{0\,(i-j)} \qquad V_{A+j} = V_A \qquad (1.6)$$

並進不変性のある時 (1.5) は意味がなくなる。つまり収束しない無限和があらわれることがある。

物理で通常考えるのは次のような量である。

H_Λ の最低固有ベクトル Ω_Λ をとる。φ_Λ を

$$\varphi_\Lambda(Q) = (Q\Omega_\Lambda, \Omega_\Lambda)$$

で定める。ここで Ω_Λ はフェルミオン・フォック空間（$\Lambda^*(\ell^2(\mathbb{Z}^d))$ のこと）のベクトルであると見なしている。

"体積無限大での基底状態" φ を

$$\lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} \varphi_\Lambda(Q) = \varphi(Q) \tag{1.7}$$

で定める。

問題 1.

(1) 一般に (1.7) の極限は存在するかどうか不明である。又 Ω_Λ のとり方によって極限が異なることもある。どのような状況で (1.7) の基底状態は一意になるか。そして、もし一意でないなら全ての基底状態を求められないか。

(2) (1.7) の $\varphi(\cdot)$ はどのような性質をもつか。エルゴード性（シフトについて）が成立するか。"φ の粒子密度" は計算可能か。

ここで 粒子密度 とは 次の量である.

$n_j = a_j^* a_j$ は フォック空間内で jという格子の上に粒子が存在すれば $n_j=1$ 存在しなければ $n_j=0$ を表示する作用素と考える。

$$n_\Lambda = \frac{1}{|\Lambda|}\left(\sum_{\Lambda \ni j} n_j\right) \tag{1.8}$$

と置く。状態 φ のもつ粒子密度を

$$\lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} \varphi(n_\Lambda) = S(\varphi) \tag{1.9}$$

で定める。(ただし, この極限の存在は不明である).

問題2.

体積無限大でのハミルトニアン H のスペクトルの構造を調べる。

この場合, (1.5) の極限がどのような意味で成立するかということが問題となる。ハミルトニアンが $V_A=0$ という相互作用を持たぬ場合でも フォック空間上の非有界作用素として (1.5) の極限が存在しない時もある。

問題3.

物理では, 粒子数を固定した条件のもとでの基底状態

もしばしば考察される。これは数学的には次のように状況を設定できる。$\mathbb{Z}^d$ の有限部分集合 Λ に対し s_Λ ($0 < s_\Lambda < 1$) を1つ定める。$\Lambda \to \mathbb{Z}^d$ の極限で

$$\lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} s_\Lambda = s$$

とする。フォック空間の単位ベクトル ξ_Λ を $n_\Lambda \xi = s_\Lambda \xi$ となる部分空間での最低固有値ベクトルとする。

$$(H_\Lambda \xi_\Lambda , \xi_\Lambda) = \inf \{ (H_\Lambda \xi , \xi) \mid n_\Lambda \xi = s_\Lambda \xi \}$$

この時 $\varphi_\Lambda(Q) = (Q \xi_\Lambda , \xi_\Lambda)$ で定め

$$\varphi^{(s)}(Q) = \lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} \varphi_\Lambda(Q)$$

と置く。$\varphi^{(s)}$ は単位体積あたりの粒子数が s という条件での基底状態である。$\varphi^{(s)}$ について問題1と同じことを考えることが興味の対象となる。

上記の3つの問題は、考えるモデルによって答は異なるがこれらの問題を考えるフレームワークを数学的に定式化することは、意味があるであろう。問題1の場合はハイゼンベルク模型などのスピン系ですでに知られていることをフェルミ粒子系にも適用できる。問題3については

具体的なモデルの解析についての解析が主で一般的に何か意味のある結果があるかは，不明である。以下では，基底状態を無限自由度のフェルミ粒子系で考えた時，変分原理との関係をのべる。

§2　格子上の量子系に対し基底状態の一般的な定義は次に述べるようになる。（c.f. Bratteli & Robinson "Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics II）

最初にいくつか記号を導入する。(1.3) の CAR 代数 $\mathfrak{A}$ に対し自己同型 $\Theta(\cdot)$ を $\Theta(a_j) = -a_j$ $(j \in \mathbb{Z}^d)$ で定める。$k \in \mathbb{Z}^d$ に対し格子上のシフト $\tau_k(\cdot)$ を $\tau_k(a_j) = -a_{j+k}$ をみたす $\mathfrak{A}$ の自己同型として定義する。$\Theta^2 = id$ である。

$\mathfrak{A}_+ = \{Q \in \mathfrak{A} \mid \Theta(Q) = Q\}$　$\mathfrak{A}_- = \{Q \in \mathfrak{A} \mid \Theta(Q) = -Q\}$
とおく。

又 $\mathfrak{A}$ のゲージ作用 $\gamma_\theta(\cdot)$ を

$$\gamma_\theta(a_j) = e^{\sqrt{-1}\theta} a_j \qquad \gamma_\theta(a_j^*) = e^{-\sqrt{-1}\theta} a_j^*$$

で定め　$\mathfrak{A}^{(U)} = \{Q \mid \gamma_\theta(Q) = Q\}$　$(\subset \mathfrak{A}_+)$
とおく。

以下では 次のようなハミルトニアンを考える。

$$H = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \tau_k(h) \qquad (2,1)$$

ここで $h = h^* \in \mathfrak{A}_+$ であり以下の形のものとする。

$$h = \sum_{\substack{A\ni(0+)\\ \text{又は}\\ (0-)}} C_A \prod_{A\ni a} b_a \qquad (2,2)$$

ここで

$$b_{(j+)} = a_j^* + a_j \qquad j\in\mathbb{Z}^d$$

$$b_{(j-)} = \frac{a_j^* - a_j}{\sqrt{-1}}$$

Aは $\mathbb{Z}^d\times\{+,-\}$ の有限集合 C_A は定数で

$$\sum_{A\ni 0} |C_A|\,|A|^2 < \infty \qquad (2.3)$$

をみたすと仮定する。

この時 (2.1) は形式的和で収束しないかもしれないが

$$e^{itH}\,Q\,e^{-itH} = \alpha_t(Q)$$

は表現(ヒルベルト空間)

のとり方によらず $\mathfrak{A}$ の自己同型の一係数群として定まる。

<u>定理 2.1.</u> $Q \in \mathfrak{A}_{loc}$ に対し

$$\delta(Q) = \sqrt{-1}\,[H, Q] = \sqrt{-1} \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} [\tau_j(h), Q] \qquad (2.4)$$

と置く。この時 $\delta(\cdot)$ は well-defined で $\bar{\delta}$ は $\mathfrak{A}$ の自己同型の一係数群 $\alpha_t(\cdot)$ を生成する。

$$\alpha_t(Q) = e^{t\delta}(Q)$$

<u>定義 2.2.</u> φ : $\mathfrak{A}$ の state (規格された正線型汎関数) が $\alpha_t(\ )$ の基底状態 (ground state) であるとは

$$\frac{1}{\sqrt{-1}}\,\varphi(Q^* \delta(Q)) \geqq 0 \qquad ({}^{\forall}Q \in \mathfrak{A}_{loc}) \qquad (2.5)$$

をみたすこととする。

φ が $\mathfrak{A}$ の state ($\varphi(Q^*Q) \geqq 0$, $\varphi(\mathbb{1}) = 1$) の時 $\mathfrak{A}$ の GNS 表現を考える。つまり あるヒルベルト空間 $\mathcal{H}_\varphi$ と単位ベクトル Ω_φ $\mathfrak{A}$ の $\mathcal{H}_\varphi$ 上の表現

$\pi_\varphi(\cdot)$ $\mathfrak{A} \to \mathcal{B}(\mathcal{H}_\varphi) = \{\mathcal{H}_\varphi$ の有界線型作用素$\}$

があり

$$(\pi_\varphi(Q)\Omega_\varphi, \Omega_\varphi) = \varphi(Q)$$

となる。

もし φ が基底状態なら $\mathcal{H}_\varphi$ 上 正自己共役作用素 H_φ があり $H_\varphi \geq 0$

$$e^{itH_\varphi}\pi_\varphi(Q)e^{-itH_\varphi} = \pi_\varphi(\alpha_t(Q)) \qquad (2.6)$$

$$H_\varphi \Omega_\varphi = 0 \qquad (2.7)$$

をみたす。

逆に (2.6) (2.7) をみたす H_φ がある時 Ω_φ から定まる state φ は $\alpha_t(\cdot)$ の基底状態である。さらに、(1.7) のように最低固有ベクトルの極限から定まる state φ は 2.2 の意味での基底状態となる。

以下では主にシフト不変 $\varphi\circ\tau_j = \varphi$ $(\forall j \in \mathbb{Z}^d)$ の基底状態を考えることにする。この時次のような基底状態の特徴づけがある。

定理 2.3 φ シフト不変な $\mathfrak{A}$ の state とする。

次は同値

(i) φ 基底状態

(ii) $$\varphi(h) = \inf\{\psi(h) \mid \psi \text{ シフト不変な } \mathfrak{A} \text{ の state}\} \qquad (2.8)$$

2.3 は，基底状態とは単位体積あたりのエネルギーの平均値を最小にする状態であると読める。

§1 問題3で述べた単位体積あたりの粒子数を固定して考えたエネルギー最低の状態はどのように考えたらよいだろうか。最初に無限系で粒子密度が ρ であるということを数学的に定義する。$(0<\rho<1$ とする$)$

定義 2.4. $\mathfrak{A}$ 又は $\mathfrak{A}^{(1)}$ の state φ が粒子密度 ρ の状態であるとは，

(i) φ シフト不変 $\quad \varphi\circ\tau_j = \varphi \quad (\forall j\in\mathbb{Z}^d)$

(ii) 任意の正の自然数 l に対し

$$\lim_{\Lambda\to\mathbb{Z}^d} \varphi(n_\Lambda^l) = \rho^l \tag{2.9}$$

ここで n_Λ は (1.8) で定められている，又 $\lim_{\Lambda\to\mathbb{Z}^d}$ は van Hove の意味でとる。

任意のシフト不変な φ は粒子密度 ρ の φ_ρ へ分解できる。

$$\varphi = \int^{\oplus} \varphi_\rho \, d\mu(\rho)$$

§1 問題3 で述べた 体積無限大の state φ は $\mathfrak{A}^{U(1)}$ の基底状態である。つまり (2.5) が 任意の $Q \in \mathfrak{A}^{U(1)}$ で成立する。

<u>定理 2.5.</u> $h \in \mathfrak{A}^{U(1)}$ とする。φ を $\mathfrak{A}^{U(1)}$ の粒子密度 S をもつ state とする。この時 次は同値.

(i) φ $(\mathfrak{A}^{U(1)}, \alpha_t(1))$ の基底状態

(ii)

$$\varphi(h) = \inf\left\{ \psi(h) \;\middle|\; \psi \ \mathfrak{A}^{U(1)} \text{ の粒子密度 } S \text{ の状態} \right\}$$

次に $(\mathfrak{A}^{U(1)}, \alpha_t(1))$ の基底状態 と $(\mathfrak{A}, \alpha_t(1))$ のそれとの関係について考える。$(\mathfrak{A}, \alpha_t(1))$ の基底状態を $\mathfrak{A}^{U(1)}$ に制限すれば $\mathfrak{A}^{U(1)}$ の基底状態であるが 逆は成立しない。$H = \sum_j \tau_j(h)$ のかわりに

$$H(\mu) = \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} \tau_j(h) + \mu \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} n_j \tag{2.10}$$

を考える。$Q \in \mathfrak{A}^{U(1)}$ に対し $\left[\sum_{j \in \mathbb{Z}^d} n_j , Q \right] = 0$ なので

$H(\mu)$ の基底状態 φ を $\mathfrak{A}^{U(1)}$ に制限しても

$(\mathfrak{A}^{U(1)}, \alpha_t(\cdot))$ の基底状態となる。

<u>定理 2.6.</u>　$h \in \mathfrak{A}^{U(1)}$ とす。φ を $(\mathfrak{A}^{U(1)}, \alpha_t(\cdot))$ の粒子密度 S の基底状態とする。この時ある $\mu \in \mathbb{R}$ があり，φ の $\mathfrak{A}$ への γ_θ 不変な拡張 $\tilde{\varphi}$ は $(\mathfrak{A}, H(\mu))$ の基底状態である。

古典統計力学で canonical ensemble と grand canonical ensemble の同等をあらわす "equivalence of ensemble" という概念がある。定理 2.6 はゲージ不変基底状態と基底状態での同様な同値性を表わしていて，パラメータ μ は Chemical Potential に対応する。

§3　いくつかの簡単なモデルでは §2 の結果をつかいシフト不変な基底状態の一意性を調べることができる。ここでは次の例をあげる。

$$H = -\sum_{j,j':n.n.} \{a_j^* a_{j'} + a_{j'}^* a_j\} - \frac{\Delta}{2} \sum_{j,j':n.n.} (2n_j - 1)(2n_{j'} - 1) \tag{3.1}$$

ここで和は nearest neighbour (最近接) な点の組 (j, j') でとることにする。$\mathbb{Z}^d$ 上の模型として次のことが証明できる。

<u>定理 3.1.</u> (i) $\Delta > 1$ とする。φ_F φ_{AF} を

$$\varphi_F(a_j^* a_j) = 0 \qquad \varphi_{AF}(a_j a_j^*) = 0 \qquad (\forall j \in \mathbb{Z}^d)$$

で定まるフォック状態とする。

任意のシフト不変基底状態 φ に対し $0 \leq \lambda \leq 1$ があり

$$\varphi = \lambda \varphi_F + (1-\lambda) \varphi_{AF}$$

となる。

(ii) $\Delta = 1$ シフト不変な純粋基底状態は非可算無限ある。

(iii) $\Delta < \Delta_0 (<< -1)$ でシフト不変な基底状態は一意である。

(iv) $d = 1$ $\Delta > 1$ でシフト不変でない基底状態が存在する。

実は $d=1$ 次元の時 このモデルは Heisenbergモデルとある意味で等価である。 $\Delta \geqq 1$ は Ferromagnetic な場合 $-1 \leqq \Delta < 1$ は Antiferromagnetic massless $\Delta < -1$ は Antiferromagnetic massive な場合に対応するので 定理3.1は驚くような結果ではない。しかし 基底状態の一意性を証明しようとすると、§2のような結果を使ってすることになる。

今後 ハバード模型の基底状態も考察の対象にしたいと考える。

参考文献

T. Matsui ; Ground States of Fermions on Lattices (preprint)

T. MATSUI

e-mail matsui@metro-u.ac.jp