

量子スピン系のスペクトルの ギャップについて

東京都立大学 松井 卓 (Taku Matsui)

§1 以下では 量子スピン系のハミルトニアンのスペクトル
特に、最低固有値とその他のスペクトルとの間のギャップに
ついて得た結果を解説する。

ここでは、 d 次元格子 \mathbb{Z}^d 上でのスピン系の量子力学を
考える。簡単のためスピン $\frac{1}{2}$ の系を考える。

Λ を \mathbb{Z}^d 内の 1辺の長さ L の d 次元立方体とする。 Λ 上の
物理的観測可能量は 次の行列のテンソル積でかか来る。

$$A_\Lambda = \bigotimes_{\Lambda} M_2(\mathbb{C}) \quad (1)$$

$$Q = \bigotimes_{\Lambda \ni j} Q_j \quad (2)$$

ここで $M_2(\mathbb{C}) = \{ 2 \times 2 \text{ 複素行列} \}$ A_Λ は $M_2(\mathbb{C})$

を $|\Lambda| = L^d$ 個テンソルしたものの $Q_j \in M_2(\mathbb{C})$ で
 Q は Λ の点 $j \in \mathbb{Z}^d$ に対応する成分は Q_j である A_Λ
 の元である。ハロウリのスピンの行列 σ を次で定めた。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$j = (j_1, j_2, \dots, j_d) \in \Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ に対し

$$\sigma_\alpha^{(j)} = \underbrace{1 \otimes \dots \otimes 1}_{j_1} \otimes \underbrace{1 \otimes \dots \otimes 1}_{j_2} \otimes \underbrace{\sigma_\alpha}_{j_3} \otimes \underbrace{1 \otimes \dots \otimes 1}_{j_d} \in A_\Lambda$$

$(\alpha = x, y, z)$

この系のハミルトニアンは、次のようになる。 $k \in \mathbb{Z}^d$
 に対し $\alpha_k^\wedge(\cdot)$ を Λ に周期境界条件を課した時の
 格子上の translation とする

$$\alpha_k^\wedge(\sigma_\alpha^{(j)}) = \sigma_\alpha^{(j+k)} \quad (\alpha = x, y, z) \quad (13)$$

h を A_Λ のエルミート行列 とすると ハミルトニアン

$$H_\Lambda = \sum_{k \in \Lambda} \alpha_k^\wedge(h) \quad (14)$$

例えば $\frac{1}{2}$ スピン非等方的ハイゼンベルグ模型の

Λ ニルトニアニハ.

$$H_{\Lambda} = - \sum_{|j-j'|=1} \left\{ \sigma_x^{(j')} \sigma_x^{(j)} + \varepsilon \sigma_y^{(j')} \sigma_y^{(j)} + \delta \sigma_z^{(j')} \sigma_z^{(j)} \right\} \quad (15)$$

ただし和は Λ 内の最近接点の組でとる。

以下では次のようなハミルトニアン(量子イジング模型)も考える。

$$H_{\Lambda} = - \sum_{j \in \Lambda} \sigma_x^{(j)} - \varepsilon \sum_{|j-j'|=1} \sigma_z^{(j')} \sigma_z^{(j)} \quad (16)$$

統計力学ではこのようなハミルトニアンの $Z^d \rightarrow \Lambda$ の極限での固有値の挙動が問題となる。より具体的には (1) 最低固有値の多重度は何か。 (2) 最低固有値とその他の固有値との間にギャップはあるか。

最低固有値を与えるベクトル(又はこのベクトルから定まる A_{Λ} の線形汎関数)を基底状態と呼ぶ。

上の問題を考える際、次の事を頭に置く必要がある。

今、考えるハミルトニアン H_Λ の固有値を

$$E_\Lambda^{(0)} \leq E_\Lambda^{(1)} \leq E_\Lambda^{(2)} \leq \dots$$

とする。($E_\Lambda^{(k)}$ に対応するベクトルは 1次元になるようにする。) $E_\Lambda^{(k)}$ の (規格化された) 固有ベクトルを $\psi_\Lambda^{(k)}$ と置く。この時, “物理的に意味のある” 模型で次のような例がある。

$$(a) \quad \lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} |E_\Lambda^{(1)} - E_\Lambda^{(2)}| = 0 \quad (7)$$

一方 ある $Q \in A = \bigcup_\Lambda A_\Lambda$ があり

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} (\psi_\Lambda^{(1)}, Q\psi_\Lambda^{(1)}) \neq \lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} (\psi_\Lambda^{(2)}, Q\psi_\Lambda^{(2)}) \quad (8)$$

$$(b) \quad \left\{ \begin{array}{l} E_\Lambda^{(2)} - E_\Lambda^{(1)} > \epsilon \quad (\Lambda \text{ に 一様に}) \\ E_\Lambda^{(0)} = E_\Lambda^{(1)} \end{array} \right. \quad (9)$$

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} (\psi_\Lambda^{(1)}, Q\psi_\Lambda^{(1)}) = \lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} (\psi_\Lambda^{(0)}, Q\psi_\Lambda^{(0)}) \quad (10)$$

$$(\forall Q \in A)$$

無限自由度の量子力学を考えたということは,

(a) の場合 基底状態は (少なくとも) 2つあると言える。

(b) の場合 基底状態は一意的であると考える。

このような解釈は物理的には自然だが数学的にはあきまりしないので $\Lambda = \mathbb{Z}^d$ で問題の定式化を行う方がよい。これは作用素環の理論を使って実行できる。

(Bratteli & Robinson : Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics (II) を参照)

ここでは、無限系での一般論でなく具体例(5)(6)について述べよう。

定理 1. (5)において $|\varepsilon| < 1$ で定義された $\eta(\varepsilon)$ で

$\lim_{|\varepsilon| \rightarrow 1} \eta(\varepsilon) = 0$ が存在し

$|\varepsilon| < 1$ $|\delta| < 1$ $|\varepsilon - \delta| < \eta(\varepsilon)$ なら

$$|E_{\Lambda}^{(0)} - E_{\Lambda}^{(1)}| \leq C_1 |\Lambda| e^{-C_2 |\Lambda|} \quad (11)$$

$$E_{\Lambda}^{(2)} - E_{\Lambda}^{(1)} > m \quad (12)$$

ここで m, C_1, C_2 には Λ による (ε, δ) は依存する) 定数

定理 2. 量子イジング模型 (8) では, ある $\varepsilon_0 > 0$

($d \frac{5}{3} > \varepsilon_0 > \frac{3}{10d}$) が存在し

$$E_{\Lambda}^{(1)} - E_{\Lambda}^{(0)} > m(\varepsilon) > 0 \quad \text{for } |\varepsilon| < \varepsilon_0. \quad (13)$$

§2 この §2 では 定理 2 について アウフィア を説明する。

定理 1 と似た方法を示せる。(T. Matsui On ground state degeneracy of Z_2 symmetric quantum spin models Publ. R.I.M.S. Vol 27 657-679 (1991) により評 (の解説がある)

今 $X_{\Lambda} = \prod_{\Lambda} \{1, -1\}$ (集合 $\{1, -1\}$ の $|\Lambda|$ 個の積集合)

$\sigma \in X_{\Lambda}$ に対し $\sigma^{(i)}$ は σ の成分の値を対応させる関数とする。又 $\mathcal{H}_{\Lambda} = \bigotimes_{\Lambda} \mathbb{C}^2$ の C.O.N.S を次のように置く。

$$\left\{ |\sigma\rangle = \bigotimes_{\Lambda} e_{\sigma^{(i)}} \quad , \quad \sigma \in X_{\Lambda} \right\}$$

ここで $e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $e_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
この時

$$\langle \sigma' | e^{-\beta H_{\Lambda}} | \sigma \rangle > 0 \quad (\beta > 0) \quad (14)$$

つまり 行列 $e^{-\beta H_{\Lambda}}$ の要素は全て正 での Perron Frobenius の定理が $-\beta H_{\Lambda}$ に使える

基底状態 Ω_Λ は正ベクトルで

$$\Omega_\Lambda = \sum_{\sigma \in X_\Lambda} C_\Lambda(\sigma) |\sigma\rangle, \quad C_\Lambda(\sigma) > 0 \quad (15)$$

X_Λ 上の確率測度 $d\mu_\Lambda(\sigma)$ を

$$d\mu_\Lambda(\sigma) = \frac{1}{Z_\Lambda} C_\Lambda(\sigma) \prod_{\lambda \in \Lambda} d\sigma^\lambda \quad (16)$$

ここで Z_Λ は規格化定数 ($\int d\mu_\Lambda(\sigma) = 1$)

$d\sigma^\lambda$ は $\int \sigma^\lambda d\sigma^\lambda = 0$ で定まる測度 (有限積)

つまり $V_\Lambda : \mathcal{H}_\Lambda = \bigotimes_{\lambda \in \Lambda} \mathbb{C}^2 \longrightarrow L^2(d\mu_\Lambda(\sigma))$ を

$$f = \sum_{\sigma \in X_\Lambda} f(\sigma) |\sigma\rangle, \quad V_\Lambda f(\sigma) = \frac{1}{C(\sigma)} f(\sigma) \quad (17)$$

で定めた。この時

$$V_\Lambda \sigma_z^{(j)} V_\Lambda^{-1} = \sigma^{(j)} \text{ の掛け算} \quad (18)$$

$$V_\Lambda \sigma_\lambda^{(j)} V_\Lambda^{-1} f_{(\sigma)} = \left[\frac{d\mu_\Lambda(\sigma_j)}{d\mu_\Lambda(\sigma)} \right]^{\frac{1}{2}} f(\sigma_j) \quad (19)$$

ここで σ_j は σ の j 成分の 1 を λ に換えたもの

で

$$\left[\frac{d\mu_\Lambda(\sigma_j)}{d\mu_\Lambda(\sigma)} \right]^{\frac{1}{2}} = \frac{C_\Lambda(\sigma_j)}{C_\Lambda(\sigma)} \quad (20)$$

は Radon-Nikodym derivative (Jacobian) と見る。

$e^{-\beta H_\Lambda}$ の正値性は

$$e^{-\beta L_\Lambda} = V_\Lambda e^{-\beta H_\Lambda} V_\Lambda^{-1} \quad (21)$$

が 正関数を正関数にうつすマルコフ半群になることに対応する。

上の式は $t-t=0$ である。しかしこのように L^2 空間で見ると, $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$ の極限は自然に考えられる。実際 $|\Lambda|$ が小さいという条件のもとで

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} d\mu_\Lambda(\sigma), \lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} e^{-\beta L_\Lambda}$$

は存在し, それぞれ $\prod_{\mathbb{Z}^d} \{1, -1\}$ 上の測度とマルコフ半群を定めることが示せる。このような状況で, 基底状態の一貫性は不変測度の一貫性 (エルゴード性) に, キャットラの存在は収束が指数的に早いことに対応する。このような問題は Holley-Stroock の Stochastic Ising model というマルコフ過程下の古典的結果からある程度わかっている。

量子イジング模型の場合

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} L_\Lambda f(\sigma) = \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} \sqrt{\frac{d\mu(\sigma_j)}{d\mu(\sigma)}} (f(\sigma) - f(\sigma_j)) \quad (22)$$

$(f(\sigma)$ は $X = \prod_{\mathbb{Z}^d} \{-1, 1\}$ 上の "良い regularity" を持つ関数)

とまた: Stochastic Ising model のマルコフ連鎖の generator となる。 $|\varepsilon| < \varepsilon_0$ ならば次のような評価が成立する。

$$\log C_\Lambda(\varepsilon) = \sum_{A \subset \Lambda} J_A \prod_{A \ni j} \sigma_j^{(j)}$$

と置くと ある $\delta > 0$ があり

$$\sup_{\Lambda \ni j} \sum_{A \ni j} |J_A| e^{\delta(|A| + \text{diameter}(A))} \leq C \varepsilon \quad (23)$$

ここで C は Λ に依存しない定数, $|A|$ は \mathbb{Z}^d の部分集合 A の点の個数, $\text{diameter}(A)$ は A の半径である。

(23) ならば ε が小さいと $\frac{d\mu(\sigma_j)}{d\mu(\sigma)}$ の変動量が小さくなり定数に近づきエルゴード性が成立することになる。

(Stochastic Ising model については Liggett の本 "Interacting Particle Systems" Springer を見よ。)

実は Ω が 大々くなるとエルゴード性が本当に破れる
こともわかる。

定理 1 についても基本的にはマルコフ連鎖の問題へ持ち
込む方向で証明できる。(ただし現れる連鎖は既製のものを
持つ Ω のものであるが性質は Stochastic Ising
model に似ている。)

定理 1, 2 のアイデアの部分を述べたが、実際には
(23) の証明が一番面倒である。ここではクラスター展開
(今の場合は非常に簡単な方) という統計力学特有の
手法が使われる。