数理解析研究所講究録
第159巻 1972年 90-98

一次元ハイゼンベルグ模型について

阪大教養物理 高橋 実

§1. Bethe 仮説と基底状態エネルギー

各原子が$\frac{1}{2}$スピンを持ち，最近接原子と交換相互作用をしている系を考えよう。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = J\sum_{i=1}^{N}\left(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z - \frac{1}{4}\right), \quad S_{N+1} \equiv S_1 \qquad (1)$$

と書ける。これは $2^N \times 2^N$ 行列とみなすことが出来る。$J > 0$ のときは強磁性的であるといい，$J > 0$ のときは反強磁性的であるという。$J < 0$ の場合には基底状態は非常に簡単であって，かつN重縮退をしている。その一つは各スピンがすべてz方向にそろったものであり

$$\psi_0 = |\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle \qquad (2)$$

と書ける。これの固有エネルギーはゼロである。$S_z=\sum_{i=1}^{N} S_i^z$ はハミルトニアン(1)と可換であるので，固有状態は S_z の値で分類することが出来る。

$$S_z = \frac{N}{2}, \frac{N}{2}-1, \cdots, -\frac{N}{2}. \qquad (3)$$

$S_z = \frac{N}{2}$ の状態は(2)の Ψ_0 しかない。 $S_z = \frac{N}{2} - M$ の状態は

$$S_{x_1}^- S_{x_2}^- \cdots S_{x_M}^- \Psi_0 \qquad 1 \leq x_1 \leq x_2 < \cdots < x_M \leqq N$$

であって，全部で C_N^M 個存在する。 この状態の一次結合より(1)の固有状態を作ることが出来る。

$$\Psi = \sum_{1 \leq x_1 < x_2 < \cdots < x_M \leqq N} f(x_1, x_2, \cdots, x_M) S_{x_1}^- S_{x_2}^- \cdots S_{x_M}^- \Psi_0 \quad (4)$$

とすれば(1)の固有値問題は

$$E f(x_1, x_2, \cdots, x_M) = J \sum_{i=1}^{M} \left\{ \sum_{s=\pm 1} (1 - \delta_{x_i+1, x_{i+1}}) f(x_1, \cdots, x_i \pm s, x_{i+1}, \cdots, x_M) \right\}$$
$$+ J \sum_{i=1}^{M} \delta_{x_i+1, x_{i+1}} f(x_1, x_2, \cdots, x_M) \qquad (5)$$

と書ける。 ここで f を $M!$ 個の平面波の一次結合であると仮定しよう，

$$f = \sum_P A(P) \exp(i \sum_{j=1}^{M} k_{Pj} x_j) \qquad (6)$$

P は $1, 2, \cdots, M$ の置換である，

$$P = \begin{pmatrix} 1, 2, \cdots, M, \\ P1, P2, \cdots, PM, \end{pmatrix}.$$

$k_1, k_2, \cdots, k_M$ はM個の数であり，擬似運動量(quasi-momenta)と呼ばれる。このような仮定を通常Bethe仮説[1]と呼ぶ。このような仮定によって正しい固有状態を作れるかどうかはハミルトニアンの性質によるが，幸運なことに平面波の振幅A(P)を次のように与えれば固有状態を作ることが出来る，

$$A(P) = \exp\left(\frac{i}{2}\sum_{j<l} \phi_{Pj\,Pl}\right)$$

$$2\cot\frac{\phi_{jl}}{2} = \cot\frac{k_j}{2} - \cot\frac{k_l}{2} \qquad (7)$$

エネルギー固有値は

$$E = -J\sum_{j=1}^{M}(1-\cos k_j) \qquad (8)$$

であり，全運動量は

$$K = \sum_{j=1}^{M} k_j \qquad (9)$$

で与えられる。周期的境界条件

$$f(x_1, x_2, \cdots, x_{M-1}, N+1) = f(1, x_1, x_2, \cdots, x_{M-1})$$

は

$$e^{ik_jN} = \prod_{\substack{l\neq j\\ l=1}}^{M} \exp(i\phi_{jl}) \qquad j=1,2,\cdots,M \qquad (10)$$

がなりたてば満足される。

M = 1 であれば (10)は

$$e^{ik_1N}=1$$

と書けて　$k_1=2\pi n/N$　が解である。したがってエネルギー，運動量固有値は

$$E=-J(1-\cos k_1)\ ,\qquad K=k_1 \tag{11}$$

である。$M\geqq 2$ のときは k_1, k_2 はもはや $2\pi n/N$ のような簡単なものではなく，連立超越方程式を解かねばならなくなる。しかしながら N，M → ∞ の極限では単位原子当りの基底状態エネルギーは線形積分方程式に帰着出来ることを次に示そう。

擬似運動量 k_j を $\lambda_j=\cot(k_j/2)$ で置きかえて方程式を考察しよう。(10) は

$$\left(\frac{\lambda_j+i}{\lambda_j-i}\right)^N=\prod_{l\neq j}\left(\frac{\lambda_j-\lambda_l+2i}{\lambda_j-\lambda_l-2i}\right)\qquad j=1,2,\cdots,M \tag{12}$$

と書ける。これの対数をとり i で割れば

$$2\tan^{-1}\lambda_j=2\pi I_j+2\sum_{l=1}^{M}\tan^{-1}\frac{\lambda_j-\lambda_l}{2}\qquad j=1,2,\cdots,M \tag{13}$$

を得る。I_j は N−M が偶数(奇数)ならば半奇整数(整数)である。この項は対数の多価性により，当然つけ加えられなければならない。整数又は半整数の set $\{I_j\}$ を与えることにより，$\{\lambda_j\}$ が求められ，したがって一つの固有状態が定まる。Hulthen [2] は J > 0 のときの基底状態に対

しては

$$I_j = \frac{M-1}{2}, \frac{M-3}{2}, \cdots, -\frac{M-1}{2} \tag{14}$$

であると仮定した。これが正しいことは Yang－Yang [3] により厳密に証明された。$N, M \to \infty$ の極限での Λ の分布関数を $\rho(\Lambda)$ としよう。(13) は

$$2\tan\Lambda = 2\pi h(\Lambda) + \int_{-B}^{B} 2\tan^{-1}\left(\frac{\Lambda-\Lambda'}{2}\right)\rho(\Lambda')\,d\Lambda' \tag{15a}$$

と書ける。また (14) より

$$\frac{dh}{d\Lambda} = \rho(\Lambda) \tag{15b}$$

であるから，(15a) を Λ で微分すれば

$$\frac{2}{\Lambda^2+2} = 2\pi\rho(\Lambda) + \int_{-B}^{B} \frac{4}{(\Lambda-\Lambda')^2+4}\rho(\Lambda')\,d\Lambda' \tag{16a}$$

を得る。ここで B，$-B$ は Λ の分布の上限と下限をあらわす。(8) より

$$E/N = -\int_{-B}^{B} \frac{2J}{\Lambda^2+1}\rho(\Lambda)\,d\Lambda \tag{16b}$$

が得られ，又

$$(N-2S_z)/N = M/N = \int_{-B}^{B} \rho(\Lambda)\,d\Lambda \tag{16c}$$

は自明である。

$B \to \infty$ では方程式 (16a) はフーリエ変換により解析的に求められる。$\tilde{\rho}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\Lambda}\rho(\Lambda)\,d\Lambda$ とすれば (16a) は

$2\pi e^{-|\omega|} = 2\pi \tilde{\rho}(\omega) + 2\pi e^{-2|\omega|}\tilde{\rho}(\omega)$ となり，我々は

$\tilde{\rho}(\omega) = \dfrac{1}{e^{\omega}+e^{-\omega}}$ ，　及び　$\rho(\Lambda) = \dfrac{1}{4}\,\mathrm{sech}\,\dfrac{\pi\Lambda}{2}$ を得る。

これを(16 b)，(16 c) に代入して

$$E = -2J\ln 2 \,, \qquad S_z = 0 \tag{17}$$

を得る。かくして一次元反強磁性ハイゼンベルグ模型の基底状態エネルギーが求められた。

Orbach [4] は上記の Bethe 仮説の方法はハイゼンベルグ－イジング模型のハミルトニアン

$$\mathcal{H} = J\sum_{i=1}^{N} S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta\, S_i^z S_{i+1}^z \tag{18}$$

に対しても適用出来ることを見出し，方程式(16)に非常によく似た線形積分方程式を導いた。Walker [5] は $\Delta > 1$, $S_z = 0$ のときその積分方程式はフーリエ変換で解析的に解けることを見出した。Cloizeaux－Gaudin [6] 及び Yang-Yang [3] は $|\Delta| < 1$, $S_z = 0$ における基底状態エネルギーを解析的に求めた。余談ながら(18)において $\Delta = 1$ とおけば (1) と等価になる。したがって(18)は(1)の一般化であると考えられる。

ごく最近 Baxter [7] は X-Y-Z 模型のハミルトニアン

$$\mathcal{H}=\sum_{i=1}^{N} J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z \tag{19}$$

の $N\to\infty$ の極限における，単位原子当りの基底状態エネルギーを解析的に求めた。

§2、　励起状態及び熱力学

励起状態についても同様の方法により論じることが出来る。ハミルトニアン(1)で $J<0$ すなわち強磁性の場合における素励起を考察しよう。$M=1$ の励起状態は(11)で与えたように　$E=|J|(1-\cos K)$ である。$M=2$ の場合，パラメーター Λ_1, Λ_2 は必ずしも実でない。複素数の場合，Λ_1 Λ_2 は互いに複素共役な pair を複素平面上で作る。これはマグノンの bound state であると考えることが出来る。n 個のマグノンの bound state に対して Λ は

$$\Lambda = \xi + (n+1-2j)i + O(\exp - \delta N), \quad \delta>0,\ j=1,2,\cdots,n$$

なる string（複素平面上での）を作る。ここで ξ は実数である。(8)及び(9)より　このマグノン bound state のエネルギー，運動量は

$$E=\frac{|J|}{n}(1-\cos K) \tag{20}$$

なる関係を持つことがわかる。

小生[8]はこのようなマグノン bound state を全部考察することによって，すべての固有状態が記述出来るとして，(1)の有限温度における自由エネルギーを求める積分方程式を導いた。この積分方程式は非線形であり，かつ無限個の未知函数を含んでいる。これと同様の理論はハミルトニアン(18)及び(19)に対しても作ることが出来る。この積分方程式の導出には厳密でない点がいくつかあるが，温度零の極限，高温展開，及び高磁場展開等で知られている厳密な結果と一致している。

参考文献

1) H. Bethe, Z. Phys. 71 (1931), 205.
2) L. Hulthen, Arkiv mat. Astr. Fys. 26A (1938) No 11.
3) C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. 147 (1966) 303; 150 (1966) 321, 327; 151 (1966), 258.
4) R. Orbach, Phys. Rev. 112 (1955), 309.
5) L. R. Walker, Phys. Rev. 116 (1959), 1089.

6) J. des Cloizeaux and M. Gaudin, J. Math. Phys. 7 (1966), 1384.

7) R. J. Baxter, Phys. Rev. Letters 26 (1971), 832, 834, Ann. Phys. (N. Y.) 70 (1972), 193 and preprint.

8) M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. 46 (1971), 401.

9) M. Gaudin, Phys. Rev. Letters 26 (1971), 1301. M. Takahashi and M. Suzuki, preprint ISSP (1972) A 518 (submitted to Prog. Theor. Phys.)