

令和 5 年 6 月 19 日現在

機関番号：13801

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2022

課題番号：18K03452

研究課題名(和文) 動的量子相関関数の厳密な解析と平衡・非平衡系への応用

研究課題名(英文) Exact analysis on dynamical quantum correlation functions and its applications to equilibrium and non-equilibrium systems

研究代表者

鈴木 淳史 (Suzuki, Junji)

静岡大学・理学部・教授

研究者番号：40222062

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：低次元量子可積分系の動的相関関数に対して、量子転送行列法、完全WKB法および熱的形状因子展開法を組み合わせることにより新たな厳密な評価方法の枠組みを構築した。この枠組みを具体的に低次元磁性鎖の代表的なモデルに適用することにより動的相関関数に関する定量的な評価に成功した。この結果、頂点作用素の方法を用いた独立な結果を検証するばかりでなく、その結果をはるかに超える高次の補正の評価まで行うことが可能になった。さらに久保公式を通じて実験による検証が可能である動的形状因子やスピン conductivityなどの量を定量的に評価した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

可積分系とはいえ、既存の方法論では困難であった動的相関関数の定量的評価に対して、新しい方法論を構築することにより、久保公式になら近似を行うことなしに、実験検証可能である輸送係数の評価が可能となった。これにより強相関系の理論と実験の間に新たな橋をかけることができた、と考えている。いまだ実験的な検証が難しい spin conductivity に対して定量的な予言を与えることで実験研究に刺激を与えることを期待している。

研究成果の概要(英文)：We establish a new framework in the exact evaluation of dynamical correlation functions of low dimensional quantum integrable systems. This is accomplished by combining the quantum transfer matrix, the exact WKB and the thermal form factor expansion methods. By applying the framework to the prototypes of magnetic chains, we are able to study their dynamical correlation functions quantitatively. As a result, we can confirm the results obtained by an independent method (vertex operators) and go further to examine the contributions from higher excitations. The exact data on dynamical correlation functions make it possible to evaluate the transport properties of low dimensional materials directly from the celebrated Kubo formula. As explicit example, we evaluate the dynamical form factor and the optical spin conductivity which are expected to be studied by experiments.

研究分野：物性基礎論、統計力学、数理物理学

キーワード：量子相関 動的相関関数 量子転送行列法 完全WKB法 熱的形状因子展開 久保公式 spin conductivity

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

### 1. 研究開始当初の背景

近年、冷却原子系などを用いて可積分一次元量子系が優れた近似で実現できるようになり、これらに対して中性子散乱や、光電子分光などの手法を用いて実験的に動的応答関数の詳細な解析が可能となった。一方、理論面では、相関関数の解析は長年の難問であった。可積分な模型であるとはいえ、既存の厳密解の手法では低励起エネルギー準位に関する情報程度しか得られず、相関関数を定量的に評価するには至っていなかった。空間的領域において大きな成功を収めた共形場理論の手法は、時間的領域の有限温度ダイナミクスに対して定性的にも誤った結果を導く。tDMRG や iTEBD といった標準的な数値的手法も、時間的領域の漸近的振舞いに対して十分信頼できる結果を与えるとは言い難い状況にあった。

### 2. 研究の目的

本研究は、可積分一次元量子系の動的応答関数に対し新たな定量的解析を開発し、それを利用して以下の課題に適用することを目的とした。

- (1) 実験可能である低次元量子系の輸送係数に関して、厳密かつ高精度な評価を行う。特に平衡系でのダイナミクスに関して、様々な空間、時間、温度領域でどのような非線形励起が主要な役割を果たすかを明らかにする。
- (2) 非平衡可積分なクエンチ系がどのように一般化ギブス状態に熱化していくか、その詳細を明らかにする。

### 3. 研究の方法

本研究では、元々静的な量子系の分配関数を評価する方法として提案された量子転送行列の方法を動的に拡張することを出発点とした。動的応答関数を取り扱うために量子転送行列に対して量子逆問題を解き、局所的なスピン演算子を量子逆散乱法の演算子によって表現した。ここに形状因子展開の方法を組み合わせることにより、可積分一次元量子系の動的応答関数に関して厳密な表式を導出した。物理的な結果を得るためには最終的に Trotter 数  $N$  を無限にする (Trotter 極限) 必要があるが、この表式では  $N$  個程度の変数を含んでおり、そのままでは実用には適さない。そこで非線形積分方程式の方法と完全 WKB 法を用いて Trotter 極限を解析的行うことにより、この表式を定量的解析が可能な形で簡略にした。結果として得られる表式は少数個のパラメータのみ含んでおり、これらに関して数値積分を行うことにより動的応答関数を高精度に評価することが可能となる。

### 4. 研究成果

#### (1) この定式化でのいくつかの仮定に関する高温極限における証明

我々の定式化は(物理的には正しいと考えられる)いくつかの仮定に基づいている。たとえば

- (a) 熱力学的極限と Trotter 極限が交換可能であること。
- (b) 量子転送行列の最大固有値がユニークであること。
- (c) 非線形積分方程式の解がユニークであること。
- (d) 非線形積分方程式のレベルで Trotter 極限が可能であること。

などである。具体的な問題に取り掛かる前に、高温極限においてこれらの是非に対して検討を行った。この極限では、不動点定理などを用いれば上の事柄を厳密な証明が可能であることを示すことができた。

#### (2) 有限温度における XX 模型の厳密な動的相関関数の評価

XX 模型の有限温度における動的相関関数を、上述の方法で取り扱うことによりフレッドホルム行列による表現を導出した。これを利用することにより、この問題において標準的な Pfaffian による表示や標準的な数値的方法である t-DMRG や Matrix product 法に比較して、はるかに長い時間間隔で定量的に信頼できる結果を得ることに成功した (図 1)。その結果、漸近解析によって Its らに

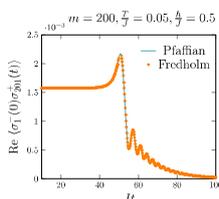


図1 200サイトはなれたスピン動的相関関数。Pfaffian法と我々の方法 (Fredholm) との比較

予言されていたギャップレス相とギャップ相での振る舞いの違いを定量的に明らかにした。また我々のフレッドホルム行列表示により Its らの手法では評価できなかった係数を同定する事に成功した。さらに新規な現象として、ギャップレス相において動的相関関数がスピン距離の偶奇により定性的に異なる振る舞いを示すことを見出し、非線形 Luttinger 流体の立場からの解釈を与えた。このフレッドホルム行列式を任意の温度で解析的

に取り扱うことはいまだに困難であるが、高温極限で行列リーマン・ヒルベルト問題ととらえ直すことにより、任意のスピン間隔、任意の磁場に対する横磁場相関の高温極限での主要項に

ついて定係数まで含めて決定し、これにより 1970 年代後半より未解決であった問題に解答を得ることができた。

### (3) ゼロ温度における XXZ 模型の厳密なスピン相関関数の評価

上述のように XX 模型の動的相関関数に関して、満足行く定量的結果は得られたが、この模型はバルクでは相互作用の存在しない模型であり、その意味で不満が残る。そこで強相関係のプロトタイプとしてスピン 1/2 の XXZ 模型をとりあげ、その動的相関関数を解析した。形式的には XX 模型と同様な表現が可能であるが、XX 模型では単一のフレッドホルム行列を

取り扱えば良いのに対して XXZ 模型では(原理的には)無限個のフレッドホルム行列を取り扱う必要がある。そのため定量的な解析を行う際に、フレッドホルム行列の評価に関する数値誤差の累積が避けられない。そこでゼロ温度の極限では、動的相関関数に寄与するのは粒子・正孔型励起に限られることに注目した。さらに、この場合にはフレッドホルム行列の比が有限次元行列の行列式で表現できることを見出し、さらに Trotter 極限でそれらの有限次元行列の行列要素がガウスの超幾何関数およびその一般化によって表現できることを示した。これにより、非自明な相互作用をする量子系における動的相関関数を、解析的な関数を用いて明示的に表すことに初めて成功した。形状因子展開であるため、定量的評価のために形式的には無限次まで足し上げる必要がある。しかしスピン相互作用の異方性が大きい場合は、最初の数項を評価することで高精度な結果(厳密値が知られている近距離の静的相関関数の場合、その誤差は 0.01%程度)が得られることを数値計算によって明らかにした。これとは独立に tDMRG による数値計算を行い、それぞれの結果を比較し、広い時間範囲での一致が確かめられた。さらに、動的相関関数が広い範囲の時間間隔、距離間隔が評価できるため、これを直接フーリエ変換することにより、中性子散乱によって測定可能なスピン構造因子を評価することができた(図 2)。

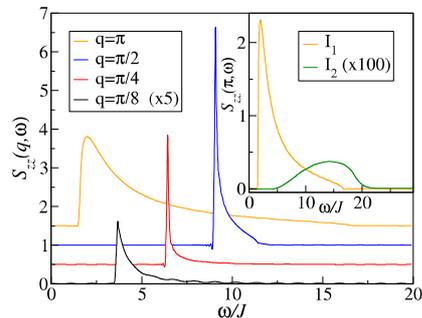


図 2 様々な運動量に対するスピン構造因子

### (4) ゼロ温度における XXZ 模型のカレント相関関数および spin conductivity の厳密な評価

(2), (3)では局所的な演算子の動的相関関数に関する考察を行ったが、近年非局所な演算子の量子相関に関して実験的知見が得られ始めている。とくにスピントロニクス分野では局所的な演算子よりも、非局所的なスピнкаレント演算子に多くの興味向けられている。そこで我々もこのスピнкаレントの相関関数に関する考察を行った。これは特殊な 4 点相関関数にあたる。可積分条件であるヤン・バクスター関係式と twist 演算子を用いることにより、カレント相関関数がスピン相関関数と非常に類似した形に形状因子展開できることを見出し、やはりゼロ温度の極限でスピン相互作用の異方性が大きい場合に、高精度な評価が行えることを示した。特に主要項である 1 粒子・正孔励起からの寄与に対して解析的な表式を導いた。結果はバーンズの G 関数やガンマ関数など既知の関数により明示的に表示できる。さらに高次の励起からの寄与に関してはいまだに解析的な取り扱いが難しいが、数値的な評価は可能である。この結果を用いて久保公式より直接、ゼロ温度のスピン conductivity の評価を行った(図 3)。現在まで実験的には、spin conductivity のゼロ振動数の特異部分である Drude weight に関する測定が主に行われており有限振動数の測定は困難で、あまり行われていない。ここでの理論的予想が実験的検証の刺激となることを期待している。

### (5) グルーオン散乱振幅の評価

当研究の手法は物性系のみならず量子場理論などへの応用も可能である。とくに非線形方程式の技法を適用することによって、超対称性ヤン・ミルズ場理論において、大きな化学ポテンシャルの極限におけるグルーオン散乱振幅の評価を得ることができた。

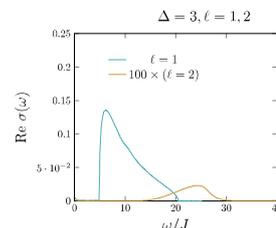


図 3  $\Delta = 3$ でのスピン conductivity の実部。青線は 1 粒子・正孔励起からのオレンジ線は 2 粒子・正孔励起からの寄与 (を 100 倍したもの)

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 7件/うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 F. Gohmann, K. Kozlowski, J. Sirker, J. Suzuki	4. 巻 12
2. 論文標題 Spin conductivity of the XXZ chain in the antiferromagnetic massive regime.	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SciPost	6. 最初と最後の頁 1-28
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.21468/SciPostPhys.12.5.158	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する
1. 著者名 C. Babenko, F. Gohmann, K. Kozlowski, J. Sirker, J. Suzuki	4. 巻 126
2. 論文標題 Exact Real-Time Longitudinal Correlation Functions of the Massive XXZ Chain	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 210602
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevLett.126.210602	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する
1. 著者名 F. Gohmann, S. Goonane, K. Kozlowski, J. Suzuki	4. 巻 377
2. 論文標題 Thermodynamics of the Spin 1/2 Heisenberg-Ising Chain at High Temperatures: a Rigorous Approach	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Comm. Math. Phys.	6. 最初と最後の頁 623-673
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s00220-020-03749-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する
1. 著者名 C. Babenko, F. Gohmann, K. Kozlowski, J. Suzuki	4. 巻 62
2. 論文標題 A thermal form factor series for the longitudinal two-point function of the Heisenberg-Ising chain in the antiferromagnetic massive regime	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Math. Phys.	6. 最初と最後の頁 49pages
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/5.0039863	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Frank Goehmann, Karol K. Kozlowski, Jesko Sirker, Junji Suzuki	4. 巻 100
2. 論文標題 Equilibrium dynamics of the XX chain	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155428
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.155428	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Frank Goehmann, Karol K. Kozlowski, Junji Suzuki	4. 巻 61
2. 論文標題 High-temperature analysis of the transverse dynamical two-point correlation function of the XX quantum-spin chain	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Mathematical Physics	6. 最初と最後の頁 013301 (29pp)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5111039	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Frank Goehmann, Karol K. Kozlowski, Junji Suzuki	4. 巻 2020
2. 論文標題 Long-time large-distance asymptotics of the transverse correlation functions of the XX chain in the spacelike regime	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Letters in Mathematical Physics	6. 最初と最後の頁 15pages
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11005-020-01276-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Katsushi Ito, Yuji Satoi, Junji Suzuki	4. 巻 2018:2
2. 論文標題 MHV amplitudes at strong coupling and linearized TBA equations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of high energy physics	6. 最初と最後の頁 37 pages
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/JHEP08(2018)002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 5件 / うち国際学会 5件）

1. 発表者名 Junji Suzuki
2. 発表標題 Exact dynamical correlations
3. 学会等名 Integrable Quantum Many-Body Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Junji Suzuki
2. 発表標題 Fredholm determinants and the equilibrium dynamics of quantum spin chains
3. 学会等名 Correlations in Integrable Quantum Many-Body Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Junji Suzuki
2. 発表標題 Variations on Zamolodchikov's themes
3. 学会等名 Non-Perturbative Methods in Field Theory and String Theory (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Junji Suzuki
2. 発表標題 The equilibrium dynamics of quantum spin chains
3. 学会等名 Correlations in Integrable Quantum Many-Body Systems III (Germany) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Junji Suzuki
2. 発表標題 Fredholm determinants and the equilibrium dynamics of quantum spin chains
3. 学会等名 Correlations in Integrable Quantum Many-Body Systems IV (Germany) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	国場 敦夫  (Kuniba Atsuo)	東京大学・大学院総合文化研究科・教授	
	(70211886)	(12601)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計1件

国際研究集会 New trends in integrable systems	開催年 2019年～2019年
--	--------------------

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
ドイツ	ブッパータル大学			
カナダ	ウイニーペグ大学			
フランス	ENS リヨン			