DENSITY MATRIX OF AN IMPENETRABLE BOSE GAS AND THE FIFTH PAINLEVÉ TRANSCENDENT

Tetsuji Miwa

平成31年10月19日

江口さんとの思い出から始めます．東京文京区の教育大附属中学で，江口さんは1年上の有名人でした．初めて会った時の記憶はありませんが，卓球部ではダブルスのパートナーでした．江口さんがフォアの下回転のサーブを出すのを，後ろで見守っていたのを覚えています．どの運動部も学習院との対抗戦が最大の目標でしたが、我々のペアはそこに出場するレベルにはるかに遠く，したがって長続きもしませんでした．ちなみに江口さんは高校では柔道部に変わりました．

江口さんが有名だったのは数学の才能でした．オイラーの公式

$$e^{\pi i} = -1$$

を，江口さんが大そう気に入ったという話を，私が中学1年の時に伝え聞いた記憶があります．

大学時代はほとんど会うこともありませんでしたが，佐藤先生，神保さんとの共同研究でイジング模型の仕事をした後，3人で米国を訪ねてシカゴに立ち寄った時，江口さんがみんなをピザ屋に連れて行ってくれました．穴ぐらのようなお店から妻とホテルに戻るとベビーシッターのふたりも含めて4人の子供達は全員眠り込んでいました．

その頃の我々の研究をPhysica Dの第1巻に出版した論文のタイトルが上記の標題です．今日はその一部をお話ししたいと思います．

I 問題設定

まず，後に扱うより広く，有限温度の平衡状態でフェルミ粒子とそれに対応するボーズ粒子の密度行列を計算します．これは次の論文の内容です．

A. Lenard One-dimensional Impenetrable Bosons in Thermal Equilibrium, Journal of Mathematical Physics **7**, 1268(1966)

問題設定から入りましょう．N粒子の1次元シュレーディンガー方程式を考えます．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}\psi_N = E\psi_N$$

ボーズ粒子の場合の波動関数を$\psi_N^{\mathbf{b}}$，フェルミ粒子の場合を$\psi_N^{\mathbf{f}}$と書きます．どちらも長さLの箱$\Omega = [-L/2, L/2]$に入れて，境界条件として両端の値を0とします．また

$$\psi_N = 0 \text{ if } x_i = x_j \text{ for some } 1 \le i < j \le N$$

という条件を課します．この条件は$\psi_N^{\mathbf{f}}$の場合はフェルミ粒子の反対称性から従いますが，ボーズ粒子の場合はデルタ関数ポテンシャルで係数が無限大の場合に相当し，これをImpenetrable Bosonsと呼びます．両者の間には

$$\psi_N^{\mathbf{b}}(x_1, \ldots, x_N) = \prod_{1\le i<j\le N} \mathrm{sgn}(x_j - x_i)\cdot\psi_N^{\mathbf{f}}(x_1, \ldots, x_N) \tag{1}$$

という関係があります．1粒子状態は両者一致します．

$$u_\nu(x) = \begin{cases} (2/L)^{\frac{1}{2}} \sin(\pi\nu x/L) & (\nu = 2, 4, \cdots) \\ (2/L)^{\frac{1}{2}} \cos(\pi\nu x/L) & (\nu = 1, 3, \cdots) \end{cases}$$

フェルミ粒子の場合の N 粒子波動関数とそのエネルギーは $\alpha = (\nu_1, \ldots, \nu_N)$ $(1 \le \nu_1 < \cdots < \nu_N)$ に対して

$$\psi^{\mathbf{f}}_{N,\alpha} = (N!)^{-\frac{1}{2}} \det_{1\le n,m\le N} u_{\nu_n}(x_m)$$

$$E_{N,\alpha} = \sum_{n=1}^{N} \epsilon_{\nu_n}, \quad \epsilon_{\nu_n} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\nu_n^2$$

で与えられます．波動関数に行列式が現れるのがフェルミ粒子の特徴です．対応するボーズ粒子の波動関数は (1) であり，同じエネルギーを持ちます．

これらの粒子系の分配関数 $\mathcal{Z}$ と統計力学的生起確率 $P_{N,\alpha}$ は

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\alpha} z^N \exp(-E_{N,\alpha}/kT),$$

$$P_{N,\alpha} = z^N \exp(-E_{N,\alpha}/kT)/\mathcal{Z}$$

で与えられます．z は粒子数のパラメタです．問題は粒子の密度行列

$$(x_1, \ldots, x_n|\rho_n|x_1', \ldots, x_n') = \sum_{N=n}^{\infty} P_{N,\alpha} \frac{N!}{(N-n)!} \int_\Omega dx_{n+1} \cdots \int_\Omega dx_N$$
$$\times \psi_{N,\alpha}(x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}, \ldots, x_N) \psi^*_{N,\alpha}(x_1', \ldots, x_n', x_{n+1}, \ldots, x_N)$$

の計算です．まずフェルミ粒子について計算し，ボーズ粒子の場合は関係式 (1) によってこれに帰着させます．

II フレドホルムの積分方程式の理論

関数 $f(x,x')$ に対して行列式の記法を用意します．

$$f\begin{pmatrix} x_1,x_2,\ldots,x_N \\ x'_1,x'_2,\ldots,x'_N \end{pmatrix} = \det_{1\le n,m\le N} f(x_n,x'_m)$$

フェルミオンの密度行列は

$$(x_1,\ldots,x_n|\rho_n^{\mathbf{f}}|x'_1,\ldots,x'_n) = \mathcal{D}_\Omega[f]\begin{pmatrix} x_1,\ldots,x_n \\ x'_1,\ldots,x'_n \end{pmatrix}/\mathcal{D}_\Omega[f],$$

$$\mathcal{D}_\Omega[f] = \sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{N!}\int_\Omega dx_1\cdots\int_\Omega dx_N f\begin{pmatrix} x_1,\ldots,x_N \\ x_1,\ldots,x_N \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{D}_\Omega[f]\begin{pmatrix} x_1,\ldots,x_n \\ x'_1,\ldots,x'_n \end{pmatrix} = \sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{(N-n)!}\int_\Omega dx_{n+1}\cdots\int_\Omega dx_N f\begin{pmatrix} x_1,\ldots,x_n,x_{n+1},\ldots,x_N \\ x'_1,\ldots,x'_n,x_{n+1},\ldots,x_N \end{pmatrix},$$

$$f(x,y) = z\sum_{\nu=1}^{\infty}\exp(-\epsilon_\nu/kT)u_\nu(x)u_\nu^*(y)$$

と計算されます．ここに現れる分母・分子をそれぞれ $f(x,y)$ を核とするフレドホルム行列式・フレドホルム小行列式と呼びます．これらは無限級数であり密度行列は無限級数の比ですが，積分方程式のフレドホルム理論によると，この比は無限級数の行列式になります．すなわち積分方程式

$$F(x,y) + \int_\Omega f(x,t)F(t,y)dt = f(x,y)$$

の解（無限級数で与えられる）$F(x,y)$ を使うと

$$\mathcal{D}_\Omega[f]\begin{pmatrix} x_1,\ldots,x_n \\ x'_1,\ldots,x'_n \end{pmatrix}/\mathcal{D}_\Omega[f] = F\begin{pmatrix} x_1,\ldots,x_n \\ x'_1,\ldots,x'_n \end{pmatrix}$$

言い換えるとフェルミオンの密度行列は 1 粒子の密度行列の行列式で与えられることになります。

$$(x_1,\ldots,x_n|\rho_n^{\mathbf{f}}|x_1',\ldots,x_n') = \det_{1\le i,j\le n}(x_i|\rho_n^{\mathbf{f}}|x_j')$$

これはよく知られています．Lenardの見つけたことは関係式(1)を使って計算するとボゾンの密度行列が$F(x,y)$を核とするフレドホルム小行列式で表されるということでした．

$$(x_1,\ldots,x_n|\rho_n^{\mathbf{b}}|x_1',\ldots,x_n') = \prod_{1\le i<j\le n}\mathrm{sgn}(x_j-x_i)\prod_{1\le i<j\le n}\mathrm{sgn}(x_j'-x_i')$$
$$\times\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-2)^j}{j!}\int_J dx_{n+1}\cdots\int_J dx_{n+j}F\begin{pmatrix}x_1,\ldots,x_n,x_{n+1},\ldots,x_{n+j}\\ x_1',\ldots,x_n',x_{n+1},\ldots,x_{n+j}\end{pmatrix}$$

ここで積分区間Jは実軸上に$2n$個の点$x_1,\ldots,x_n,x_1',\ldots,x_n'$ を並べたときに，n個の小区間ができる，その直和です．

核$F(x,y)$は積分方程式を$f(x,y)$の和の各項ごとに解いて得られます．

$$F(x,y)=\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{1}{1+z^{-1}\exp(\epsilon_\nu/kT)}u_\nu(x)u_\nu(y)$$

ここでまず$L\to\infty$の極限と取ると無限和が積分になります．

$$\lim_{L\to\infty}F(x,y)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds\cos s(x-y)}{1+z^{-1}\exp(\bar{h}^2s^2/2mkT)}$$

次に$z=\exp(\mu/kT)$とスケール変換して$T\to 0$の極限を取ります．

$$F(x,y)\to\frac{1}{2\pi}\int_{-(2\pi\mu)^{\frac{1}{2}}}^{(2\pi\mu)^{\frac{1}{2}}}\cos s(x-y)=\frac{1}{\pi(x-y)}\sin\left(\frac{(2m\mu)^{\frac{1}{2}}}{\hbar}(x-y)\right)$$

が得られます．よって$\mu=\pi^2\hbar^2/2m$と調節してボゾンの密度関数が核

$$F(x,y)=\frac{\sin\pi(x-y)}{\pi(x-y)}$$

に対するフレドホルム小行列式を使って表示することができました．

III モノドロミー保存変形理論

我々の論文に合わせて変数や関数の記法を変えるので，これまでの数式たちをいったんリセットします．$2n$ 個の実数 $a_1 < \cdots < a_{2n}$ に対し区間の直和 $I = [a_1, a_2] \sqcup \cdots \sqcup [a_{2n-1}, a_{2n}]$ 上で

$$K(x, x') = \frac{\sin(x - x')}{x - x'} = \frac{e^{i(x-x')} - e^{-i(x-x')}}{2i(x - x')}$$

を核とするフレドホルム積分方程式のレゾルベント $R_I(x, x'; \lambda)$ を考えます．これは積分方程式

$$R_I(x, x'; \lambda) - \lambda \int_I dx_1 R_I(x, x_1) K(x_1, x') = K(x, x') \tag{2}$$

の解であり，フレドホルム（小）行列式について以下の一般的事実を利用します．

$$\begin{aligned}\Delta_I \begin{pmatrix} x_1, \ldots, x_r \\ x'_1, \ldots, x'_r \end{pmatrix}; \lambda \Bigg) &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^j}{j!} \\ &\times \int_I dx_1 \cdots \int_I dx_j K \begin{pmatrix} x_1, \ldots, x_r, x_{r+1}, \ldots, x_{r+j} \\ x'_1, \ldots, x'_r, x_{r+1}, \ldots, x_{r+j} \end{pmatrix} \\ &= (-\lambda)^r \Delta_I(\lambda) R_I \begin{pmatrix} x_1, \ldots, x_r \\ x'_1, \ldots, x'_r \end{pmatrix}; \lambda \Bigg)\end{aligned}$$

密度行列への応用は $r = n, \lambda = -2, \{x_1, \ldots, x_n, x'_1, \ldots, x'_n\} = \{a_1, \ldots, a_{2n}\}$ の場合を扱います．

以下では複素平面上の解析関数を扱います．I を正の向きに一周する積分路を C_I とします．

$$h_I(x) = \frac{1}{2\pi i} \log \frac{(x - a_1) \cdots (x - a_{2n-1})}{(x - a_2) \cdots (x - a_{2n})}$$

を用いると $\int_I dx \to \int_{C_I} h_I(x) dx$ によって実軸上の積分を複素積分に置き換えることができき，レゾルベントは複素平面上で次のノイマン級数

表示を持ちます．$(x_0 = x, x_{l+1} = x')$

$$R_I(x,x';\lambda) = \sum_{l=0}^{\infty} \lambda^l \int_{C_I} \cdots \int_{C_I} dx_1 \cdots dx_l$$
$$\times K(x_0,x_1)h_I(x_1)K(x_1,x_2)h_I(x_2)\cdots h_l(x_l)K(x_l,x_{l+1})$$

$R_I(x,x';\lambda)$ は x, x' について複素平面全体で正則です．$K(x,x_1)$ は $x = x_1$ で正則なので x について C_I の内外の区別なく定義されています．特異性がないためむしろ捉えがたいのです．積分方程式の右辺を $\frac{sin(x-x')}{x-x'}$ から半分の $\frac{\pm e^{\pm i(x-x')}}{2i(x-x')}$ に変えたものを $R_I^{\pm}(x,x';\lambda)$ と書けば，この関数は x が C_I の内と外では食い違います．内側の関数を $\tilde{R}_I^{\pm}(x,x';\lambda)$ とすると

$$R_I^{\pm}(x,x';\lambda) - \tilde{R}_I^{\pm}(x,x';\lambda) = \mp\frac{\pi i\lambda}{2}\cdot 2\pi i\cdot h_I(x)R_I(x,x';\lambda)$$

となって局所的な多価性が見えてきます．また，$x\to\infty$ の挙動も

$$R_I^{\pm}(x,x';\lambda) \sim \frac{e^{\pm ix}}{x}$$

となって混合がなくなります．さらに x' を消して x だけの関数を扱うために $x'\to\infty$ での二つの挙動 $\frac{e^{\pm ix'}}{x'}$ の片方 (の係数) だけを取ることにします．

$$R_{\pm I}^{\pm'}(x;\lambda) = \mp \lim_{\substack{|x'|\to\infty \\ \pm\mathrm{Im}x'>0}} 2ix'e^{\pm ix'}R_I^{\pm'}(x,x';\lambda)$$

こうして，よいモノドロミー性質を持つ 2×2 行列

$$Y_{I,\infty}(x) = \begin{pmatrix} R_+^+(x;\lambda) & R_+^-(x;\lambda) \\ R_-^+(x;\lambda) & R_-^-(x;\lambda) \end{pmatrix}$$

が出来上がりました．

ここから一気に結果を述べます．積分区間の端点 $a_1, \ldots, a_{2n}$ における局所モノドロミーは

$$Y_I(x) = Y_{I,\infty}(x) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \hat{Y}_I(x) \left(\frac{(x-a_1)\cdots(x-a_{2n-1})}{(x-a_2)\cdots(x-a_{2n})} \right)^{\begin{pmatrix} 0 & i\lambda/2 \\ & 0 \end{pmatrix}}$$

$x = \infty$ での漸近挙動は

$$Y_{I,\infty}(x) = (1 + O(1/x))\, e^{A_\infty x}, \quad A_\infty = \begin{pmatrix} i & \\ & -i \end{pmatrix}$$

これらをつないで，$x, a_1, \ldots, a_{2n}$ を独立変数とする $Y_I(x)$ の線型微分方程式系が出来上がります．

$$\begin{aligned}
&dY_I(x) = \Omega Y_I(x) \\
&\Omega = \sum_{j=1}^{2n} A_j \; d\log(x - a_j) + A_\infty dx \\
&A_j = \hat{Y}_I(a_j) \begin{pmatrix} 0 & \lambda_j \\ & 0 \end{pmatrix} Y_I(a_j)^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} r_{+,j} \\ r_{-,j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{-,j} & -r_{+,j} \end{pmatrix} \\
&r_{\pm,j} = \sqrt{-2\lambda_j} R_{\pm,I}(a_j;\lambda), \quad \lambda_j = (-1)^{j+1} \frac{i\lambda}{2}
\end{aligned}$$

ここからが圧巻です．この線型偏微分方程式系の適合条件は $d^2 = 0$ を書き下したものですが，それがフレドホルム行列式の対数微分を用いてハミルトン方程式系に書くことができてしまいます．

$$\begin{aligned}
&\omega_I(\lambda) = d \log \Delta_I(\lambda) \\
&= -\frac{1}{4} \sum_{1 \le j < j' \le 2n} (r_{+j} r_{-j'} - r_{+j'} r_{-j})^2 d\log(a_j - a_{j'}) + i \sum_{1 \le j \le 2n} r_{+j} r_{-j} da_j \\
&dr_{\pm j} = \{ r_{\pm j}, \omega_I(\lambda) \}, \quad \{ r_{+j}, r_{+j'} \} = \{ r_{-j}, r_{-j'} \},\ \{ r_{+j}, r_{-j'} \} = \delta_{j,j'}
\end{aligned}$$

$n=1$ の結果を具体的に書き下しましょう．$a_1=-t/2, a_2=t/2$ とします．フレドホルム行列式 $\Delta_I(\lambda)$ とフレドホルム小行列式 $\Delta_I(a_2, a_1\lambda)$ それぞれの対数微分は非線形微分方程式の解となります.

$$\sigma^{\mathrm{det}} = t\frac{d}{dt}\log\Delta_I(\lambda)$$

$$\left(t\frac{d^2\sigma^{\mathrm{det}}}{dt^2}\right)^2 = -4\left(\sigma^{\mathrm{det}} - t\frac{d\sigma^{\mathrm{det}}}{dt} - \left(\frac{d\sigma^{\mathrm{det}}}{dt}\right)^2\right)\left(\sigma^{\mathrm{det}} - t\frac{d\sigma^{\mathrm{det}}}{dt}\right)$$

$$\sigma^{\mathrm{min}} = t\frac{d}{dt}\log\Delta_I(\lambda)$$

$$\left(t\frac{d^2\sigma^{\mathrm{min}}}{dt^2}\right)^2 = -4\left(\sigma^{\mathrm{min}} - t\frac{d\sigma^{\mathrm{min}}}{dt} - \left(\frac{d\sigma^{\mathrm{min}}}{dt}\right)^2\right)\left(\sigma^{\mathrm{min}} - t\frac{d\sigma^{\mathrm{min}}}{dt} + 1\right)$$

以上で私の話を終わります.