

開放端境界条件における spin-1/2 XYZ鎖の局所保存量

深井康平

東京大学物性研究所 D2

July 20, 2022

① イン트로ダクション

② 周期境界 spin-1/2 XYZ 鎖の全ての局所保存量の表式

③ 開放端 spin-1/2 XYZ 鎖の局所保存量の構造

④ まとめ

量子可積分系における無数の局所保存量

- ✓ 保存量：ハミルトニアンと交換する演算子 $[H, Q] = 0$
- ✓ 量子可積分系：Bethe 仮設により厳密に解け得る量子多体系

ex: spin-1/2 XYZ 鎖：磁性体のモデル, 1d Hubbard: 固体中電子の有効模型, etc...

- **無数の局所 (Local) 保存量** $Q_2, Q_3, Q_4, Q_5, \dots, Q_k, \dots$ の存在
- Q_k は最大で隣接 k サイトに作用する演算子の線形結合 $\rightarrow$ Local
- Bethe 仮設における転送行列の展開で求められる

転送行列(from Bethe仮設) 高次の局所保存量

$$\log T(\lambda) = \lambda \boxed{Q_2} + \lambda^2 Q_3 + \lambda^3 Q_4 + \dots$$

$\parallel$
 H : 最初の Q_2 はハミルトニアン自身

無限個の局所保存量 $\{Q_k\}$ の存在自体は知られていたが...

問題意識

- ✓ 転送行列の展開は難しく、 Q_k の具体的な表式は多くの場合で不明

モチベーション

- ✓ 孤立量子系の非平衡ダイナミクス
無数の局所保存量の存在 → ~~熱平衡化~~ $\rho_{\text{can}} = e^{-\beta H}$
→ 一般化ギブス分布に緩和する $\rho_{\text{GGE}} = e^{-\sum_k \lambda_k Q_k}$, λ_k : 一般化温度
- ✓ 量子多体系における厳密な結果 → 数理的な面白さ
- ✓ 連続極限における場の理論との対応

可解な格子上の量子系
(反強磁性XXX鎖)

可解な場の理論
(Massive Thirring model)

$$H^{\text{lattice}} \xrightarrow{\text{連続極限}} H^{\text{continuum}}$$

$$Q_k^{\text{lattice}} \xrightarrow[\text{?}]{\text{連続極限}} Q_k^{\text{continuum}}$$

場の理論の保存量の情報をどの程度格子上の量子系から引き出せるか？

① イン트로ダクション

② 周期境界 spin-1/2 XYZ 鎖の全ての局所保存量の表式

③ 開放端 spin-1/2 XYZ 鎖の局所保存量の構造

④ まとめ

スピン 1/2 XYZ 鎖 (周期境界) : 可積分 by Bethe 仮設

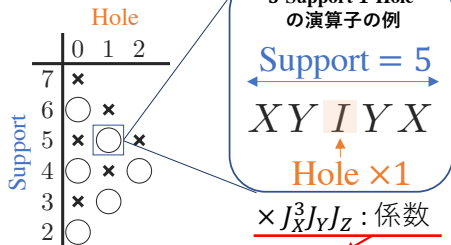
$$H_{XYZ}^c = \sum_{i=1}^L J_X X_i X_{i+1} + J_Y Y_i Y_{i+1} + J_Z Z_i Z_{i+1} = J_X XX + \cdots$$

(c : 周期境界 (closed), X, Y, Z は Pauli 行列、site index と並進和は省略)

- ✓ **周期境界では Boost operator が存在** : $[B, Q_k^c] = Q_{k+1}^c$
 - 逐次的に Q_k^c を求めるための関係式が求められた [Grabowski, Mathieu, Ann.Phys, 1995]。
 - これにより保存量は原理的には計算可能だが、実用的には非常に複雑
- ✓ 等方的な XXX 鎖の場合 ($J_X = J_Y = J_Z$) は全ての Q_k^c の表式が求まった [Grabowski, Mathieu, Ann.Phys, 1995]。
- ✓ より一般の異方的な場合である XYZ 鎖での一般的な局所保存量の表式は求められていなかった。→ 次スライドでより詳しく解説

局所保存量の構造 : Support と Hole による分解

$Q_{k=6}^c$ の構成要素



これが一般的には求まっていない

- ✓ ○ : 構成要素が存在
- ✓ ○ を全て足す → 局所保存量 Q_k^c
- ✓ ○ の条件 → 後述の doubling-product に相当

✓ 出現する演算子の種類は分かったが (by Boost op.)、その係数の一般項までは求まっていなかった

(XXX の場合は、係数は一般化 Catalan 数になる [Grabowski, Mathieu, Ann.Phys, 1995])

他の保存量の具体形

$$Q_2^c = H^c$$

Hole	
Support	0
3	x
2	○

$J_X X X + \dots$

$$Q_3^c$$

Hole	
Support	0
4	x
3	○ x
2	x

$J_X J_Y (X Z Y - Y Z X) + \dots$

$$Q_4^c$$

Hole	
Support	0 1
5	x
4	○ x
3	x ○
2	○

$J_X J_Y J_Z (X Z X Z - Z X Z X) + \dots$
 $+ J_X^2 J_Y X Z Z X + J_X^2 J_Z X Y Y X + \dots$
 $J_X J_Y J_Z X I X + \dots$
 $J_X^3 X X + \dots$

$$Q_5^c$$

Hole	
Support	0 1
6	x
5	○ x
4	x ○ x
3	○ x
2	x

$$Q_6^c$$

Hole		
Support	0 1 2	
7	x	
6	○ x	
5	x ○ x	
4	○ x ○	
3	x ○	
2	○	

- ✓ 高次の係数は複雑、係数の一般解は求まっていなかった (Grabowski, Mathieu, Ann.Phys, 1995 では Q_6^c までの具体形の記述のみあり)

Q_5^c [Grabowski, Mathieu, Ann.Phys, 1995] (※ノテーションが違う)

$$\tilde{F}_{5,0}^5 = \sum_{j \in \Lambda} (((\hat{\sigma}_j \times \tilde{\sigma}_{j+1}) \times \tilde{\sigma}_{j+2}) \times \tilde{\sigma}_{j+3}) \cdot \hat{\sigma}_{j+4},$$

$$\tilde{F}_{3,1}^5 = \sum_{j \in \Lambda} \sum_{a \in \{x,y,z\}} \left(\frac{\lambda_x \lambda_y \lambda_z}{\lambda_a} \right) \epsilon^{abc} (\hat{\sigma}_j^a \tilde{\sigma}_{j+2}^b \hat{\sigma}_{j+3}^c + \hat{\sigma}_j^b \tilde{\sigma}_{j+1}^c \hat{\sigma}_{j+3}^a),$$

$$\tilde{F}_{3,0}^5 = - \sum_{j \in \Lambda} \sum_{a \neq b \neq c} (\lambda_b)^2 \epsilon^{abc} \hat{\sigma}_j^a \tilde{\sigma}_{j+1}^b \hat{\sigma}_{j+2}^c.$$

Q_6^c [Grabowski, Mathieu, Ann.Phys, 1995] (※ノ ー テ ー シ ョ ン が 違 う)

$$\tilde{F}_{6,0}^6 = \sum_{j \in \Lambda} (((\tilde{\sigma}_j \times \tilde{\sigma}_{j+1}) \times \tilde{\sigma}_{j+2}) \times \tilde{\sigma}_{j+3}) \times \tilde{\sigma}_{j+4}) \cdot \tilde{\sigma}_{j+5},$$

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{4,1}^6 = & \sum_{j \in \Lambda} \sum_{a \neq b} \left[\left(\frac{\lambda_x \lambda_y \lambda_z}{\lambda_a} \right) (\hat{\sigma}_j^a \tilde{\sigma}_{j+2}^b \tilde{\sigma}_{j+3}^a \hat{\sigma}_{j+4}^b - \hat{\sigma}_j^a \tilde{\sigma}_{j+2}^b \tilde{\sigma}_{j+3}^b \hat{\sigma}_{j+4}^a) \right. \\ & + \hat{\sigma}_j^b \tilde{\sigma}_{j+1}^a \tilde{\sigma}_{j+2}^b \hat{\sigma}_{j+4}^a - \hat{\sigma}_j^a \tilde{\sigma}_{j+1}^b \tilde{\sigma}_{j+2}^b \hat{\sigma}_{j+4}^a) \\ & \left. + \lambda_a \lambda_b (\hat{\sigma}_j^a \tilde{\sigma}_{j+1}^b \tilde{\sigma}_{j+3}^a \hat{\sigma}_{j+4}^b - \hat{\sigma}_j^a \tilde{\sigma}_{j+1}^b \tilde{\sigma}_{j+3}^b \hat{\sigma}_{j+4}^a) \right], \end{aligned}$$

$$\tilde{F}_{2,2}^6 = \sum_{j \in \Lambda} \sum_{a \in \{x,y,z\}} \left(\frac{\lambda_x \lambda_y \lambda_z}{\lambda_a} \right)^2 \hat{\sigma}_j^a \hat{\sigma}_{j+3}^a,$$

$$\tilde{F}_{4,0}^6 = \sum_{j \in \Lambda} \sum_{a \neq b} (\lambda_b^2 - \lambda_a^2) \hat{\sigma}_j^a \tilde{\sigma}_{j+1}^b \tilde{\sigma}_{j+3}^b \hat{\sigma}_{j+4}^a,$$

$$\tilde{F}_{2,1}^6 = \sum_{j \in \Lambda} \sum_{a \in \{x,y,z\}} \lambda_a^2 \left(\frac{\lambda_x \lambda_y \lambda_z}{\lambda_a} \right) \hat{\sigma}_j^a \hat{\sigma}_{j+2}^a,$$

$$\tilde{F}_{2,0}^6 = \sum_{j \in \Lambda} \sum_{a \neq b \neq c} (\lambda_a^2 + \lambda_b^2)(\lambda_a^2 + \lambda_c^2) \hat{\sigma}_j^a \hat{\sigma}_{j+1}^a.$$

これらの係数の規則性、一般項は知られていなかった

道具 : doubling-product の導入 N.Shiraishi, EPL, 2019

- ✓ H_{XYZ}^c + 磁場 $hZ \rightarrow$ 高次の局所保存量の非存在 $\rightarrow$ この意味で非可積分 [N.Shiraishi, EPL, 2019]
- ✓ doubling-product (スピン演算子の表記) を使用
 $\rightarrow$ ハミルトニアンとの交換関係が容易 (doubling 内の代数で閉じる)

doubling-product (N.Shiraishi, EPL, 2019) での定義を拡張

$$\overline{A_1 A_2 \cdots A_t} \equiv A_1 (A_1 A_2) (A_2 A_3) \cdots (A_{t-1} A_t) A_t \quad (A_i \in \{X, Y, Z\})$$

$$\text{e.g. } \overline{XY} = XZY, \quad \overline{XYZ} = XZXZ, \quad \overline{Y^2} = \overline{YY} = YIY \text{ (1-hole),}$$
$$\overline{Z^3} = \overline{ZZZ} = ZIIIZ \text{ (2-hole),}$$

- ✓ ○ の制限はちょうど doubling-product に相当

(※以降、doubling の定義を factor 倍変更したものを使用)

非可積分の証明で用いられた doubling-product を可積分系に応用する

周期境界 XYZ 鎖の局所保存量の一般解

Y.Nowaza, K.Fukai, PRL, 2020

$$H_{XYZ}^c = J_X \bar{X} + J_Y \bar{Y} + J_Z \bar{Z} \text{ (doubling で表記)}$$

- ✓ doubling-product で局所保存量をより初等的に計算
- ✓ 演算子の係数に規則性があることを発見、係数を予測
スピン演算子ではなくて doubling を引数と見ることが大事
- ✓ 予想された局所保存量の表式が実際に保存量になっていることを帰納的に証明

周期境界 XYZ 鎖の局所保存量の一般解 [Y.Nowaza, K.Fukai, PRL, 2020]

$$Q_k(n, m) = \sum_{\bar{\mathbf{A}} \in (n, m)} \underbrace{R^{n, m} (A_1 A_2 \cdots A_t)}_{\parallel} \overline{A_1^{m_1+1} A_2^{m_2+1} \cdots A_t^{m_t+1}}$$

$A_i \in \{X, Y, Z\}$

$$\sum_{\tilde{n}=0}^n \underbrace{\frac{f(n - \tilde{n}, m + \tilde{n})}{J_X J_Y J_Z \text{ の対称多項式}}}_{\text{doubling 依存}} \underbrace{S_{\tilde{n}} (A_1 A_2 \cdots A_t)}_{\sum_{i=1}^t m_i = m : \text{Hole}}$$

(* 最近 1d Hubbard 模型の局所保存量の表式も得られた [K. Fukai, ArXiv 2022 in preparation])

係数の一般解に出現する関数の具体系

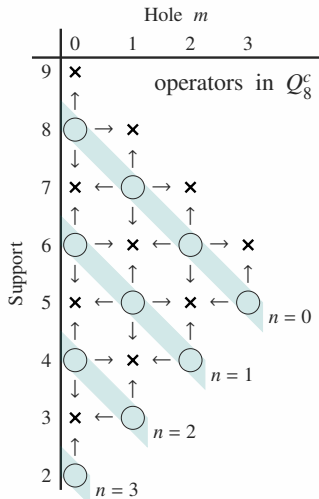
※詳細省略

$$f(n, m) = \begin{cases} \frac{m}{n+m} \sum_{p=1}^n \binom{n+m}{p} \sum_{j_1+j_2+\dots+j_p=n}^{j_1, j_2, \dots, j_p \geq 1} a_{j_1} a_{j_2} \cdots a_{j_p} & \text{for } n \geq 1, \\ 1 & \text{for } n = 0. \end{cases}$$

$$a_n \equiv \frac{J_X^2 \left(J_Y^{2(n+2)} - J_Z^{2(n+2)} \right) + \text{c.p.}}{(J_X^2 - J_Y^2)(J_Y^2 - J_Z^2)(J_Z^2 - J_X^2)}$$

$$S_p(A_1 A_2 \cdots A_l) \equiv \begin{cases} \sum_{1 \leq j_1 \leq j_2 \leq \dots \leq j_p \leq l} J_{A_{j_1}}^2 J_{A_{j_2}}^2 \cdots J_{A_{j_p}}^2 & \text{for } p \geq 1 \\ 1 & \text{for } p = 0 \end{cases}$$

周期境界 XYZ 鎖の局所保存量の構造と交換子の打ち消し



- ✓ ○ : 保存量の構成要素が存在
- ✓ × : 構成要素無し
- ✓ "↑, ←, ↓, →" は ハミルトニアンとの交換子で出現する演算子の行き先を示す
- ✓ × で打ち消しが起こる → 保存量

① イン트로ダクション

② 周期境界 spin-1/2 XYZ 鎖の全ての局所保存量の表式

③ 開放端 spin-1/2 XYZ 鎖の局所保存量の構造

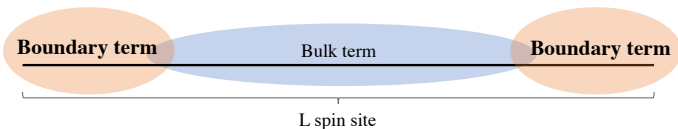
④ まとめ

開放端の局所保存量=Bulk term + Boundary term

スピン 1/2 XYZ 鎖 (開放端) : Bethe 仮設で厳密に解け得る

$$H_{XYZ}^o = \sum_{i=1}^{L-1} J_X X_i X_{i+1} + J_Y Y_i Y_{i+1} + J_Z Z_i Z_{i+1} \quad (+\vec{J}_{left} \cdot \vec{\sigma}_1 + \vec{J}_{right} \cdot \vec{\sigma}_L)$$

$$Q_k^o = \underbrace{q_k^{L\text{-boundary}}}_{\text{Boundary term}} + \underbrace{Q_k^{\text{bulk}}}_{\text{Bulk term}} \quad (+\underbrace{q_k^{R\text{-boundary}}}_{\text{Boundary term}})$$



- ✓ **Bulk term=周期境界** → Y. Nowaza, K. Fukai, PRL, 2020 より既知
($Q_k^{\text{bulk}} = \sum_{j=1}^{L-k+1} q_k^c(j)$) : 周期境界の時の保存量密度の和

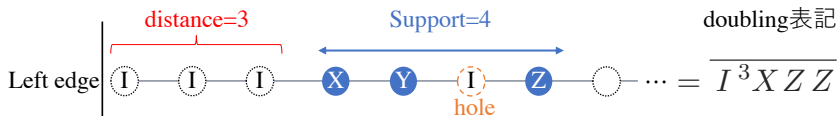
目的 : Boundary term $q_k^{L\text{-boundary}}$ の表式を求める

- (境界の磁場は簡単のため考えない $\vec{J}_{left} = \vec{J}_{right} = 0$
簡単のため、システムサイズが十分大きい場合を考えて、左の boundary term のみに注目。

開放端と周期境界の違い

周期境界の場合より複雑 [Grabowski, Mathieu, J. Phys. A, 1996]

- ✓ **Boost operator の非存在** $[B, Q_k^o] = Q_{k+1}^o$
→ 漸次的に局所保存量を計算する手法なし
- ✓ 奇数次は保存しない $Q_2^o, Q_3^o, Q_4^o, Q_5^o, Q_6^o, Q_7^o, \dots$
- ✓ 周期境界では存在しなかった演算子のクラスがある
→ doubling を拡張する必要あり
- ✓ **boundary からの距離の指標** : (*support*, *hole*, *distance*)



4-support 1-hole 3-distance operator の例

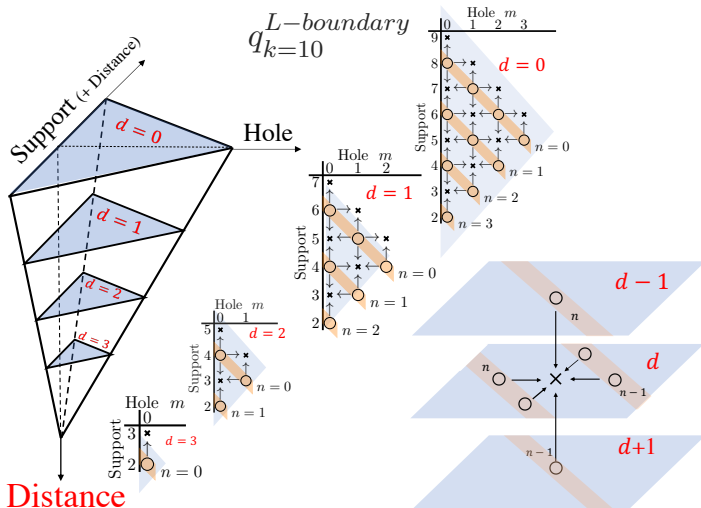
(※開放端では、並進和は取らない)

新しく分かったこと

これまで開放端では XXX の場合の局所保存量の表式も求まっていなかった

- ✓ Boost operator の非存在にも関わらず、**漸次的に局所保存量を構成する方法を開発**
→ それを用いて計算機での (シンボリック) 計算により、**20 次までの具体形を計算した**
(先行研究 [Grabowski, Mathieu, J. Phys. A, 1996] では XXX で 8 次までの具体形が示されていた)
- ✓ その 20 次までの計算機実験データから法則を読み取り...
 - 一部のクラスの係数に関しては一般解が厳密に求まった。
 - doubling を拡張して、周期境界では出現しなかった演算子の規則性を発見した。

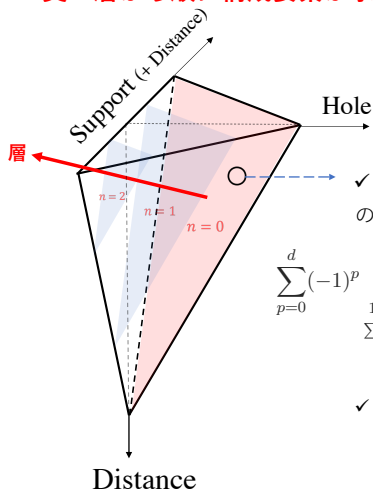
局所保存量の漸次的な計算方法



- ✓ $\times$ において、連立方程式を解くことなく、漸次的に演算子の係数が求まる

一番外側の層は厳密解が求まった

奥の層から順に構成要素が求まる



✓ この○ ($n = 0, m, d$)に属する演算子 $\overline{A_1^{1+m_1} \dots}$ の係数は厳密に計算できる。

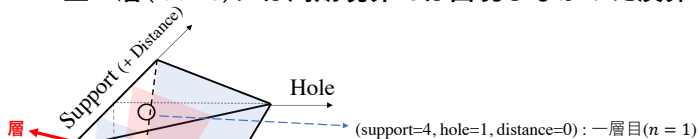
$$\sum_{p=0}^d (-1)^p \sum_{\substack{1 \leq j_1, \dots, j_{p+1} \\ \sum_{i=1}^{p+1} j_i = d+1}} \left(\prod_{i=1}^p T_{j_i} \right) \left(T_{j_{p+1}} + (-1)^{1+m_1} A_1^{j_{p+1}} \right)$$

$$A_1 \in \{X, Y, Z\} \quad T_j \equiv J_X^{2j} + J_Y^{2j} + J_Z^{2j}.$$

✓ 一番左の演算子 A_1 の種類に依存

出現する演算子のクラス

上の層($n > 0$)には周期境界では出現しなかった演算子も出現する



$$-2J_X^2 \left(\overline{X \text{ } I Y^2} + \overline{X \text{ } I Z^2} \right)$$

周期境界では出現しなかった演算子(doublingの中に I が存在)
→doublingで表すことで規則性が見つけやすかった

Q_{20}^0 までの具体形から予想される性質

- ✓ n 層目は最大 n 個の I がdoublingに入る
- ✓ I は左から偶数番目のdoubling stringに入り得る
- ✓ 左から $2n$ 番目以降に I は入らない

① イントロダクション

② 周期境界 spin-1/2 XYZ 鎖の全ての局所保存量の表式

③ 開放端 spin-1/2 XYZ 鎖の局所保存量の構造

④ まとめ

- ✓ 量子可積分系の局所保存量の具体形の計算は一般に困難
- ✓ 周期境界 spin-1/2 XYZ 鎖の全ての局所保存量の一般解を構築
- ✓ 開放端の場合も漸次的に局所保存量を計算する方法を開発、一部の係数は厳密に求まった。
- ✓ doubling 表記を用いることで、周期境界の場合に出現しなかった演算子の出現パターンを発見

JSR Fellowship