

実験数理物理学入門

東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻
桂 法称

概要

単純なルールで記述される古典統計力学の問題を数値的に調べてみたら、0.3333... という何やら意味ありげな値がエントロピーとして出力された—そんな状況に遭遇したら、あなたならどう思うだろう？本稿では、数値計算結果から解析的な結果を予想する研究—「実験数理物理学」の、古今東西の成功例や失敗例を紹介する。同時に、古典統計力学における転送行列法やフェルミオン系の基礎的事項などについても解説する。また、インターネット上のリソースである、On-Line Encyclopedia of Integer Sequences (OEIS) の積極的な応用方法も紹介する。

1 はじめに

ネットで検索する「調べ学習」は、大学以降はとかく悪く言われがちだが、果たしてそんなにいけないことなのだろうか？何事も中途半端なのがいけないのであって、やるからには徹底的に調べればまた話は別だろう。本稿では、筆者がそんな信念のもと、インターネット上のリソースである On-Line Encyclopedia of Integer Sequences (OEIS) [1] や Inverse Symbolic Calculator (ISC) [2] などを使って研究を進めた結果、思いがけない発見があったお話を紹介したい。

本稿 2 章では、格子上のハードコア粒子の古典統計力学系を題材に、数値計算結果から解析的な結果を予想するという、インターネット普及以前の「実験数理物理学」の成功例や失敗例を紹介する。3 章では、乱れのない Sachdev-Ye-Kitaev 模型を題材に、OEIS を使って得られた結果をヒントに、この模型が既知の可解模型にマップできることに気づいたお話を紹介する。紙面の都合で、ここでは限られた例のみしか紹介できないが、講義では本稿では触れていない例についてもいろいろと紹介する予定である。また、本稿では転送行列法やフェルミオン系の第二量子化による取り扱いなど、基礎的な事項についても説明しているので、講義前に目を通してもらえると幸いである。

さあ君も、計算機とインターネットを武器に物理の問題を解いて、第二の Ramanujan を目指そう！

2 古典統計力学と組み合わせ論

数を数えるというのは自然科学の基本でありながら、なかなかどうして難しい。中高で習う順列や組み合わせの問題でも、状況が複雑になってくると、正確な数え上げは難しいというのは実感されていることであろう。(平衡) 統計力学での基本的な対象である分配関数は、その別名である「状態和」というのが示唆するように、状態を数え上げて適切な重み (Boltzmann 重率) で足し上げたものである。したがってその計算には、場合の数の数え上げと似た困難がある。特に巨視的な系では、状態の数が系のサイズに対して指数関数的に多いため、分配関数が閉じた式で書けるのは、2 次元 Ising 模型など特別な場合に限られる。

この章では、排除体積効果のある粒子系を例に、拘束条件のある系における古典統計力学と数え上げの関係を議論する。また、転送行列の方法についても紹介する。

2.1 格子上のハードコア粒子系

系の設定

ここでは、格子上の古典的な粒子系の統計力学について議論する。まずは設定の説明から始めよう。有限の格子 (例えば正方格子や立方格子) を考え、その格子点を $i = 1, 2, \dots$ とラベルする。また、その集合を \mathcal{V} と表すことにする。さらに、 i, j が格子上の辺を形成するとき (i, j) と書き、これらからなる集合を \mathcal{B} と書くことにする^{*1}。この格子上での古典的な粒子系を考えると、その粒子配置は各格子点での粒子数を指定することで決まる。以下では、各格子点上に粒子が「いる」か「いない」かの 2 状態しかない、ハードコア粒子の場合を考えよう。つまり、格子点 i での粒子数を n_i とすると、 $n_i = 0$ か 1 に限られる。系の粒子配置は n_i を並べた集合を $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots)$ で表される。以下、粒子配置 \mathbf{n} からなる集合を \mathcal{C} と書くことにする。

定義の羅列が続いたので、ここでひとつ具体例を見てみよう。格子が 4 つの格子点からなる 1 次元のリングを考える。このとき、 $\mathcal{V} = \{1, 2, 3, 4\}$ 、 $\mathcal{B} = \{(1, 2), (2, 3), (3, 4), (4, 1)\}$ である。ハードコア粒子系では、 $\mathbf{n} = (1, 1, 0, 1)$ という配置は許される配置、すなわち \mathcal{C} の要素であるが、 $(2, 1, 3, 0)$ は許されない配置である。この例の場合、 \mathcal{C} の要素の個数は、 $2^4 = 16$ である。

再び一般的な格子に戻って議論を続けよう。ハードコア粒子系の大分配関数は以下で与えられる。

$$\Xi(z) := \sum_{n=0}^N g(n) z^n \quad (1)$$

ここで、 $N = |\mathcal{V}|$ は格子点の総数^{*2}、 $g(n)$ は n 粒子の格子上での可能な配置の総数、 z は activity (fugacity) で、逆温度 β と化学ポテンシャル μ を用いて、 $z = \exp(\beta\mu)$ と表される。

^{*1} 辺 (i, j) と (j, i) は同一視する。つまり、グラフ $(\mathcal{V}, \mathcal{B})$ は無向グラフとする。

^{*2} 集合 S の要素の個数を $|S|$ で表す。

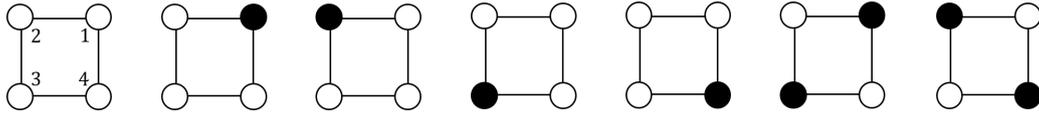


図 1 4 格子点からなるリング上の許される粒子配置。白丸が $n_i = 0$ の状態、黒丸が $n_i = 1$ の状態を表す。例えば、一番右の配置は、 $\mathbf{n} = (0, 1, 0, 1)$ に対応する。

簡単な例

まずは最も簡単な場合として、 n_i が 0 か 1 に限られるという拘束条件以外には、粒子間の相互作用が働かない場合を考えよう。この系で $g(n)$ を求めることは簡単で、これは結局 n 個の 1 と $(N - n)$ 個の 0 からなる粒子配置 $\mathbf{n} \in \mathcal{C}$ を数えればよいことになる。したがって、二項係数を使って $g(n) = \binom{N}{n}$ と書けることが分かる。これを (1) に代入し、二項定理を用いると、 $\Xi(z) = \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} z^n = (1 + z)^N$ が得られる。

この結果自体は、別の導出もできる。今の場合は粒子間相互作用がないため、この系は N 個の独立な格子点からなる系とみなすことができる。このとき、各格子点での大分配関数は、 $1 + z$ で与えられる。したがって、全系の大分配関数は、その積で与えられる訳である^{*3}。したがって、粒子数を固定しない設定で大分配関数を計算しそれを展開することで、粒子数を固定したときの場合の数 $g(n)$ が簡単に求められる。このような「母関数」的なものの見方はしばしば有用になる。

2.2 排除体積効果のあるハードコア粒子系 (1 次元)

上の例は単純過ぎたので、もう少し複雑な設定として、ハードコア粒子間に強い相互作用が働くため、隣り合う格子点を占有することができない状況を考えよう。つまり、各格子点で $n_i = 0$ か 1 という拘束条件に加えて、すべての $(i, j) \in \mathcal{B}$ について $n_i n_j = 0$ という拘束条件が課された系を考えよう。この場合の系の大分配関数も (1) 式で与えられるが、相互作用がない場合とは $g(n)$ が変わってくる。また、粒子が隣り合えないという拘束条件のため、系に配置できる粒子数の上限 $N_{\max} < N$ が存在して、 $n > N_{\max}$ では $g(n) = 0$ である点にも注意されたい。 N_{\max} は、格子の詳細に依存する。

雰囲気を掴むために、再び 4 つの格子点からなるリングの例を考えてみよう。この場合、許される粒子の配置は図 1 に示した 7 つの配置に限られる。したがって、 $N_{\max} = 2$ で、 $g(0) = 1$, $g(1) = 4$, $g(2) = 2$ である。これより、 $\Xi(z) = 1 + 4z + 2z^2$ という結果が得られる。

^{*3} この辺りがピンと来ない場合は、統計力学の教科書 ([3] など) を復習することをお勧めする。

転送行列

この結果を N 個の格子点からなる 1 次元リングに一般化したい。この場合、大分配関数は、以下のように書き換えられる。

$$\Xi(z) = \sum_{\mathbf{n} \in \mathcal{C}} z^{\sum_{i=1}^N n_i} \prod_{i=1}^N (1 - n_i n_{i+1}) \quad (2)$$

ここで、周期的境界条件 $n_{N+1} = n_1$ を課している。また、 \mathcal{C} は、 $n_i n_{i+1} = 1$ である場合も含めて全ての \mathbf{n} からなる集合である点に注意されたい。このようにしても、 $(1 - n_i n_{i+1})$ の因子があるおかげで、許されない粒子配置は $\Xi(z)$ に寄与しない。式 (2) は、次のように見通しの良い形に書き換えることができる。

$$\Xi(z) = \sum_{n_1=0,1} \sum_{n_2=0,1} \cdots \sum_{n_N=0,1} \prod_{i=1}^N T(n_i, n_{i+1}) \quad (3)$$

ここで、 $T(n_i, n_{i+1}) := (1 - n_i n_{i+1}) z^{n_i/2} z^{n_{i+1}/2}$ は転送行列と呼ばれるものの行列要素で、具体的な表式は

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T(0,0) & T(0,1) \\ T(1,0) & T(1,1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{z} \\ \sqrt{z} & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

で与えられる。転送行列を用いると (3) はさらに、 $\Xi(z) = \text{Tr}[\mathbf{T}^N]$ と書き換えられる*4。T の固有値を λ_1, λ_2 とすると、トレースの性質から $\Xi(z) = (\lambda_1)^N + (\lambda_2)^N$ と書けるが、 λ_1, λ_2 は簡単に求めることができ、その結果以下が得られる。

$$\Xi(z) = \left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4z}}{2} \right)^N + \left(\frac{1 - \sqrt{1 + 4z}}{2} \right)^N \quad (5)$$

Fibonacci 数、Lucas 数との関係

大分配関数 $\Xi(z)$ は、 $z = 1$ の場合には、可能な粒子配置の総数という特別な意味をもつ。したがって (5) も、 $z = 1$ では何かしらの自然数になるはずである。実際に計算してみれば、 $N = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$ に対して、 $\Xi(1) = 1, 3, 4, 7, 11, 18, \dots$ であることが分かるだろう。この数列が何であるかは簡単に予想が付くが、試しに OEIS [1] に代入してみよう。OEIS の使い方は簡単で、トップページの空欄に自分の調べたい数列を入力して検索ボタンを押すだけである。今の問題の場合、1, 3, 4, 7, 11, 18 を入力すると、Lucas 数 (A000032) という名前の付いた数列であることが分かる。さらに、 n 番目の Lucas 数 L_n は、Fibonacci 数 F_n (A000045) を用いて、 $L_n = F_{n-1} + F_{n+1}$ と表せることが、OEIS のコメントや Wikipedia のページを見ると分かる。この例は少し単純過ぎたが、このように得られた結果をとりあえず OEIS に入れてみることで素早く必要な情報にアクセスできることが分かるだろう。

*4 この計算は、1 次元 Ising 模型の分配関数の計算と同様なので詳細は省略する。気になる場合は、 $N = 4$ の場合に $\text{Tr}[\mathbf{T}^4] = 1 + 4z + 2z^2$ となるか確認してみるとよい。

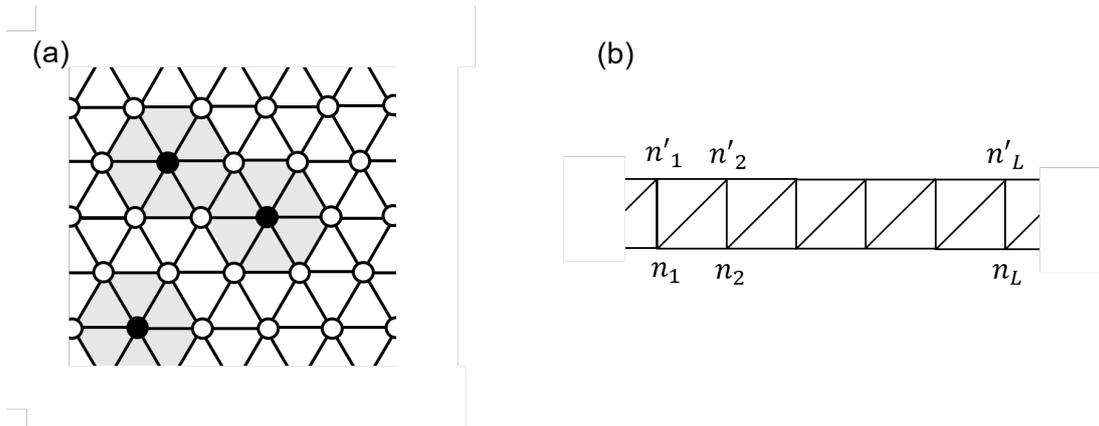


図 2 (a) 三角格子上的ハードヘキサゴン模型の模式図。白丸が $n_i = 0$ の状態、黒丸が $n_i = 1$ の状態を表す。(b) 転送行列の模式図。 $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_L)$ と $\mathbf{n}' = (n'_1, n'_2, \dots, n'_L)$ は、下の辺と上の辺上の許される粒子配置を表す。

2.3 ハードヘキサゴン模型

1次元リングの場合は簡単に大分配関数が計算できたが、一方で z に関する相転移がないなど、統計力学系としてはあまり面白くない例であった。もっと非自明な例として、三角格子上的の模型を考えよう。この場合、許される粒子配置は、例えば図 2(a) に示したようなものになる。1つの格子点に粒子を置いたとき、それに隣接する6つの格子点上に粒子を置けないため、個々の粒子はあたかも固い六角形の殻をまとったように振る舞う(図 2(a) に灰色で示した)。このことから、この模型はハードヘキサゴン模型と呼ばれており、1960年代からいろいろと調べられている。また、グラファイト表面に吸着するヘリウム原子の系がこの模型でよく記述されることが知られており、3 K 付近で比熱が鋭いピークを示すなどの相転移現象が実験で観測されている [4]。

Gaunt の予想

ハードヘキサゴン模型に関する研究の歴史的な背景については、Baxter の教科書の14章に詳しい [5]。それによると、1967年に Gaunt が級数展開により局所密度を調べることで、次の2つの z の値で特異性があるという結果を得たとある [6]。

$$z_C = 11.05 \pm 0.15, \quad z_{NP} = -0.0900 \pm 0.0003 \quad (6)$$

activity z が負の側の物理的意味は不明だが、形式的にはそちらも定義することができる。(添え字の NP は、‘non-physical’ の略。) Gaunt は、(なぜかは不明だが) これら2つの値が二次方程式の解ではないかと考えた。これらの和は $z_C + z_{NP} = 10.96 \pm 0.15$ 、積は $z_C z_{NP} = -0.995 \pm 0.014$ であり、どちらも極めて整数に近い。このことから、Gaunt はさらに、対応する二次方程式が $z^2 - 11z - 1 = 0$ ではないか? という予想を立てた。もしこれが正しいとすると、物理的な転移点に対応する z_C の値は、

$$z_C = \frac{11 + 5\sqrt{5}}{2} \simeq 11.09017 \quad (7)$$

L	4	5	6	7	8	9	10
$\ln \kappa$ in [7]	0.3323	0.3334	0.3333	0.3333	0.3333	0.3333	—
$f(L)$	0.332329	0.333411	0.333242	0.333233	0.333246	0.333242	0.333243

表1 (8) で与えられる $\ln \kappa$ の値。1 行目が Metcalf と Yang によって得られた結果 [7]。2 行目が、転送行列の最大固有値を用いて得られた結果。

で与えられることになる。残念なことに Gaunt はこの結果をどこにも出版しなかったが、後に Baxter によって得られたハードヘキサゴン模型の厳密解により、この大胆な予想が正しかったことが分かる。この話のような、数値計算結果から厳密な結果を予想し証明するという一連の流れは、実験数理物理学の好例と言えるだろう。

Metcalf と Yang の予想

一方、数値計算で得られた結果から解析的な結果を予想して、誤った結論を得たという話もある。Metcalf と Yang^{*5} は、1978 年に臨界磁場下の Ising 模型の基底状態の縮退度に関する研究を行った [7]。詳しくは述べないが、三角格子の場合の縮退度は、ハードヘキサゴン模型における $\Xi(1)$ に対応する。Metcalf と Yang は、転送行列の方法を数値的に用いて、次の基底状態エントロピー

$$\ln \kappa := \frac{1}{N} \ln \Xi(1) \quad (8)$$

を計算した。少しテクニカルだが、今の問題における転送行列を定義しておこう。図 2(b) に示す三角格子の一部を取り出した梯子状の格子を考える。下の辺の粒子配置は $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_L)$ 、上の辺の粒子配置は $\mathbf{n}' = (n'_1, n'_2, \dots, n'_L)$ で与えられるとする。ただし、ここでは周期的境界条件を課した。 \mathbf{n} (\mathbf{n}') は、上 (下) の辺における許される粒子配置とし、それらを足とする行列 T_L を考えよう。 T_L の行列要素 $T_L(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ は、 \mathbf{n}, \mathbf{n}' が $\sum_{j=1}^L n_j (n'_j + n'_{j+1}) = 0$ を満たす場合は 1、そうでない場合は 0 であると定義する。 T_L は $(F_{L-1} + F_{L+1})$ 次元の行列である点に注意されたい。

転送行列 T_L を用いて、許される粒子配置の総数は、 $\Xi(1) = \text{Tr}[(T_L)^M]$ で与えられる。ただし、 M は梯子とは垂直方向の系の長さである。 M が十分大きい場合には、 $\Xi(1)$ は T_L の最大固有値 Λ_L を用いて、 $\Xi(1) \simeq (\Lambda_L)^M$ と表せる。このことから、 $f(L) = (\ln \Lambda_L)/L$ という関数を導入すると、 $L \rightarrow \infty$ の極限での $f(L)$ の値が、熱力学極限での $\ln \kappa$ を与えると考えられる。実際に数値的に $f(L)$ を計算した結果を表 1 に載せた。Metcalf と Yang による、これとは別の外挿方法により得られた結果も載せた。彼らは 1 行目の結果から、 $\ln \kappa$ は熱力学極限で、厳密に $1/3$ になるのではないかという予想を立てたが、筆者が転送行列の方法で $L = 20$ まで計算した結果は、

$$f(20) = 0.333242721976... \quad (9)$$

となっており、これとは食い違っている。

Metcalf と Yang の論文が出た翌年の 1979 年、Baxter と Tsang は、角転送行列という別の手法により $\ln \kappa$ を数値的に計算した [8]。角転送行列は、可解格子模型やテン

*5 Chen Ping Yang (1930-2018)。Chen Ning Yang (1922-) の弟。

ソルネットワークの解析において重要となるツールであるが、ここではその詳細は成書に譲る [5,9]。結論だけ述べると、彼らの得た $\ln \kappa$ の値は、むしろ (9) に示す値に近いものであり、 $1/3$ とは異なっていた。このことから、Metcalf と Yang の予想は間違っていると考えた Baxter は、角転送行列の固有値の性質を詳しく調べ、その結果、それが八頂点模型と呼ばれる別の模型の角転送行列の固有値と似通った性質をもつことを見出した。八頂点模型は可解模型であり、このことはハードヘキサゴン模型も厳密に解けることを示唆する。これをヒントに Baxter は更に解析を進め、ハードヘキサゴン模型も可解模型であることを明らかにし、任意の z における κ の表式を求めた*6。また、上述の Gaunt の予想が正しかったことも示した。

Rogers-Ramanujan 恒等式

Metcalf と Yang の予想は結果的には間違っていたが、その後の進展への影響を考えると、むしろ creative error だったとも言えるのではないだろうか。Baxter はハードヘキサゴン模型の粒子数密度も解析し、その計算の過程で Rogers-Ramanujan 恒等式と呼ばれるものが重要な役割を果たすことを見出した。たとえば、以下は第 1 恒等式と呼ばれるものである。

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^{n^2}}{(1-q)(1-q^2)\cdots(1-q^n)} = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(1-q^{5n-4})(1-q^{5n-1})} \quad (10)$$

左辺の無限級数が、右辺では無限個の因子の積になるという驚異的な関係式である。ここでは証明はしないが、 $|q| < 1$ として両辺を q のべき乗の形で展開すると、どちらも

$$1 + q + q^2 + q^3 + 2q^4 + 2q^5 + 3q^6 + 3q^7 + 4q^8 + 5q^9 + 6q^{10} + \cdots \quad (11)$$

となることが分かる*7。この級数に出てくる q^n の係数には、 n を一定の条件を満たす形で分割したときの分割数という組み合わせ論的な意味がある。この辺りは、[日本語版 Wikipedia のページ](#) に詳しい*8。このように、三角格子上の古典粒子系という素朴に思えた問題は、Rogers-Ramanujan 恒等式と結びつき、その後 1980 年代には無限個の可解格子模型の発見や共形場理論との関係へと発展していく [12]。こんな展開は、当初は誰も予想だにできなかったのではないだろうか。

2.4 その他の話題

古典統計力学と組み合わせ論の関係についての話題は尽きない。講義では、ダイマー模型におけるある種の相関関数の解析的な表式が ISC [2] により予想され [13]、その後証明された [14] という話にも触れたい。ダイマー模型はミノタイリングという数え上げ問題と自然に結びつく。これは境界条件に敏感な問題で、たとえばアステカダイヤモンドと呼ばれる形状の中でのタイリングの総数は非常に単純な表式で書ける [15]。その他にも、ドメインウォール境界条件を課した六頂点模型の分配関数と交替符号行

*6 $z = 1$ での κ の表式については、[10] が詳しい。

*7 たとえば Mathematica を使うなら、両辺を十分大きな n まで計算した後に、Series を使って、 $q = 0$ の周りで展開すれば得られる。

*8 整数の分割については、手前味噌だが以前書いたこちらの解説 [11] が参考になるかもしれない。

列^{*9}の数え上げの関係など、物理学者・数学者の双方により盛んに研究の行われているテーマもある [17, 18]。組み合わせ論の応用は、何も古典統計力学の問題に限らない。ある種の量子多体系のエンタングルメント・エントロピーの解析でも、制限を満たすヤング図の数え上げなどが重要な役割を果たす [19, 20]。

3 フェルミオン系の基底状態の数え上げ

中高での場合の数の問題では、「区別する」「区別しない」という但し書きがあることがある。「なぜ人間は区別するのに、同じ色のボールは区別しないのか？」などと混乱した記憶があるが、大学に入ると、今度は量子の世界では原理的に区別できない同種粒子という概念があることを習う。ボールなら自分でこっそり印を付けて区別をしたりできる訳だが、そういうことが原理的にできない世界があるというのはやはり不思議だ。この区別できないという単純な仮定だけから得られる、「自然界の粒子はすべてボゾンかフェルミオンかに大別される」という結論は、学部で習う多粒子系の量子力学のハイライトだろう。

この章では、相互作用するフェルミオン系のモデルの基底状態の数え上げから、そのモデルが可解モデルであることに気づいたという筆者らの研究について紹介する。

3.1 フェルミオン演算子と Fock 空間

系の設定

まずはモデルのハミルトニアンを定義するために必要となるフェルミオン演算子を導入しよう。前章と同様に、有限の格子を考え、その格子点を $i = 1, 2, \dots, N$ とラベルする。また、その集合を \mathcal{V} とする。各 i に対して、フェルミオンの生成演算子 \hat{c}_i^\dagger と消滅演算子 \hat{c}_i を定義する^{*10}。これらの演算子は、

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{i,j}, \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_k^\dagger\} = 0 \quad (12)$$

という反交換関係を満たす。ここで、 $\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ である。式 (12) の2つ目の関係式から直ちに $(\hat{c}_i)^2 = (\hat{c}_i^\dagger)^2 = 0$ であることが分かる。さらに、格子点 i における個数演算子を $\hat{n}_i := \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$ で定義しよう。フェルミオンの場合は、 \hat{n}_i の固有値は 0 か 1 かに限られる。これは、(12) を使って

$$(\hat{n}_i)^2 = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i = \hat{c}_i^\dagger (1 - \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i) \hat{c}_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i = \hat{n}_i \quad (13)$$

となることから分かる。 \hat{n}_i の固有値が 0 か 1 かに制限されることは、2つ以上のフェルミオンが格子点 i を占有することはできないことを意味し、Pauli の排他律と呼ばれる。 \hat{n}_i を用いて、全フェルミオン数を $\hat{F} := \sum_{i \in \mathcal{V}} \hat{n}_i$ と定義する。

続いて生成演算子を用いて、多粒子系のヒルベルト空間を構成しよう。まず、フェルミオンが 1 つもない状態、つまり \hat{F} の固有値 0 の固有状態を $|\text{vac}\rangle$ と書こう。

^{*9} 1, 0, -1 を成分とする正方行列で、各行・各列の成分の総和がいずれも 1 であり、各行・各列において 0 を除いた成分 1 と -1 が交互に現れるようなもの。歴史的背景については、[16] が詳しい。

^{*10} ここでは、スピンレス・フェルミオンを考える。つまり、スピンなどの内部自由度は考えない。

この状態は、任意の i について、 $\hat{c}_i |\text{vac}\rangle = 0$ を満たす^{*11}。 \hat{F} の固有値が 1 の固有状態は、 $\hat{c}_i^\dagger |\text{vac}\rangle$ ($i = 1, 2, \dots, N$) の形で与えられる。これらが 1 粒子のヒルベルト空間を張る。同様に、 \hat{F} の固有値が F の固有状態は、 $\hat{c}_{i_1}^\dagger \hat{c}_{i_2}^\dagger \cdots \hat{c}_{i_F}^\dagger |\text{vac}\rangle$ ($i_1, i_2, \dots, i_F = 1, 2, \dots, N$) の形で与えられる。これらは、添え字に重複がある場合は状態として消えてしまう (Pauli の排他律)、また、添え字の順番を置換したものは、元の状態と符号を除いて等しいことから、独立なものは $\binom{N}{F}$ 個しかない点に注意されたい。これらによって張られる F 粒子のヒルベルト空間を \mathcal{H}_F と書くことにすると、全ヒルベルト空間は、 $\mathcal{F} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_N$ と書ける。この \mathcal{F} は、Fock 空間と呼ばれる。 \mathcal{F} の次元は 2^N である。

演算子・状態の行列・ベクトル表示

以上の議論には少し不完全な部分がある。それは、式 (12) のような反交換関係を満たす演算子の存在を最初から仮定している点である。しかし、この点は $\hat{c}_i, \hat{c}_i^\dagger$ には以下の具体的な行列表示が存在するので何ら問題はない。

$$\hat{c}_i = \overbrace{\sigma^3 \otimes \cdots \otimes \sigma^3}^{i-1} \otimes \sigma^+ \otimes \overbrace{\sigma^0 \otimes \cdots \otimes \sigma^0}^{N-i} \quad (14)$$

$$\hat{c}_i^\dagger = \sigma^3 \otimes \cdots \otimes \sigma^3 \otimes \sigma^- \otimes \sigma^0 \otimes \cdots \otimes \sigma^0 \quad (15)$$

ここで、 $\sigma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $\sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ である。また、式 (14) から分かるように、真空状態は $\mathbf{v}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ を用いて、 $|\text{vac}\rangle = \mathbf{v}_0 \otimes \mathbf{v}_0 \otimes \cdots \otimes \mathbf{v}_0$ と具体的に書ける。これらの行列・ベクトル表示は、数値的にハミルトニアンを取り扱う際に有用となる^{*12}。

3.2 乱れない Sachdev-Ye-Kitaev 模型

ハミルトニアン

ここで少々唐突だが、Sachdev-Ye-Kitaev (SYK) 模型と呼ばれるフェルミオンの模型を考えよう。SYK 模型は、ランダムに相互作用するマヨラナ・フェルミオン系を記述する模型で、ホログラフィー原理と呼ばれるものの Toy Model になっている。その詳細については、筆者には説明する能力もないので文献に譲る [21–23]。SYK 模型を調べる元々の目的からは、ランダムネスの存在は重要なのだが、そもそも乱れない場合にこの模型はどういう性質を示すのか？ということ調べたくなるのも人情だろう。2017 年に筆者らは、次のハミルトニアンで与えられる乱れない SYK 模型を考え [24]。

$$\hat{H} := \sum_{1 \leq j < i \leq N} \sum_{1 \leq k < l \leq N} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_l \quad (16)$$

ここで、 \hat{c}_i^\dagger や \hat{c}_k は前節で導入したフェルミオンの演算子で、マヨラナの場合と区別するため、複素フェルミオンと呼ばれることも多い。この模型では、元々の SYK 模型で

^{*11} $\hat{F} |\text{vac}\rangle = 0$ ならば、任意の i について $\langle \text{vac} | \hat{n}_i | \text{vac} \rangle = 0$ 。これより、 $\|\hat{c}_i |\text{vac}\rangle\|^2 = 0$ 。

^{*12} 行列やベクトルの Kronecker 積の定義については例えば [Wikipedia の Kronecker product](#) を参照せよ。Mathematica では `KroneckerProduct`、Python (NumPy) や Julia では `kron` で実装できる。

N	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Z_N	6	10	20	35	70	126	252	462	924	1716	3432
$Z_{N,N/2}$	—	5	—	14	—	42	—	132	—	429	—

表 2 ハミルトニアン (16) の基底状態の縮退度。1 行目は \hat{H} の \mathcal{F} における基底状態の総数、2 行目は \hat{H} の $\mathcal{H}_{N/2}$ における基底状態の総数。

はランダムであった $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_l$ の係数が全て 1 となっている。

基底状態の数え上げ

ハミルトニアン \hat{H} は、 $\hat{A} := \sum_{1 \leq i < j \leq N} \hat{c}_i \hat{c}_j$ を用いると、 $\hat{H} = \hat{A}^\dagger \hat{A}$ というすっきりした形に書ける。これより、 \hat{H} の固有エネルギー E の規格化された固有状態 $|\psi\rangle$ について、 $E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger \hat{A} | \psi \rangle = \|\hat{A} |\psi\rangle\|^2 \geq 0$ が成立することが分かる。したがって、 E は非負で、もし $E = 0$ の固有状態が存在すれば、その状態は \hat{H} の基底状態であることが分かる。

では $E = 0$ の状態を数えてみようと思ひ立ち、 \hat{H} を有限の格子点数 N について数値的に対角化して得られた結果が、表 2 の 1 行目である。 \hat{H} は全粒子数の演算子 \hat{F} と交換するので、各粒子数のセクター \mathcal{H}_F ごとに線形独立な基底状態を数えることもできる。たとえば、 N が偶数、 $F = N/2$ のときの結果を表 2 の 2 行目にまとめた。賢明な読者なら、これらの数列が何かすぐに見当が付くかもしれないが、筆者は分からなかったのでとりあえず OEIS に結果を入れてみた。すると驚いたことに、1 行目の Z_N については [A001405](#)、2 行目の $Z_{N,N/2}$ については [A000108](#) という数列ではないか、という予想を得た。これらは、 N を用いれば、

$$Z_N = \binom{N+1}{\lfloor \frac{N+1}{2} \rfloor}, \quad Z_{N,N/2} = \binom{N}{\frac{N}{2}} - \binom{N}{\frac{N}{2} - 2} \quad (17)$$

と二項係数を用いて書ける。ここで、 $\lfloor x \rfloor$ は、 $x \in \mathbb{R}$ 以下の最大の整数を表す。

Richardson-Gaudin 模型との関係

式 (17) のうち $Z_{N,N/2}$ は、Catalan 数そのものになっている。Catalan 数は組み合わせ論や、物理でもスピンの合成などによく現れる数列だけに、「これは何かありそうだ」と思うのが人情だろう。そう思ってよくよく考えると、実はハミルトニアンを $\hat{H} = \hat{A}^\dagger \hat{A}$ と書き換えた際に現れる \hat{A} という演算子を、次のように書き換えられることに気づく。

$$\hat{A} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \hat{c}_i J_{i,j} \hat{c}_j, \quad J_{i,j} = \begin{cases} 1 & i < j \\ 0 & i = j \\ -1 & i > j \end{cases} \quad (18)$$

$\mathbf{J} = (J_{i,j})_{i,j=1,\dots,N}$ は、 $\mathbf{J}^\top = -\mathbf{J}$ を満たす実歪対称行列である。以下、簡単のため N は偶数と仮定しよう。実歪対称行列の基本的な性質として、(i) その固有値は 0 か、 $\pm i\lambda_k$ ($\lambda_k \in \mathbb{R}$) という純虚数の組として得られる、(ii) 直交行列によって標準形に書き換えられる、ということが知られている。式 (18) の行列 \mathbf{J} については、 $\det \mathbf{J} = 1$

であることから、ゼロ固有値を含まないことが分かる。したがって、固有値は $\pm i\lambda_k$ ($k = 1, 2, \dots, N/2$) と書ける。J を標準形に変換する直交行列を \mathbf{O} とする。また、新たなフェルミオン演算子 $(\hat{f}_{1,\uparrow}, \hat{f}_{1,\downarrow}, \dots, \hat{f}_{N/2,\uparrow}, \hat{f}_{N/2,\downarrow}) = (\hat{c}_1, \dots, \hat{c}_N)\mathbf{O}$ を導入しよう。この新たなフェルミオン演算子は、反交換関係 $\{\hat{f}_{k,\sigma}, \hat{f}_{l,\tau}^\dagger\} = \delta_{k,l}\delta_{\sigma,\tau}$ などを満たす。 $\hat{f}_{k,\sigma}$ を用いると、 \hat{A} は

$$\hat{A} = \sum_{k=1}^{N/2} \lambda_k \hat{f}_{k,\uparrow} \hat{f}_{k,\downarrow} \quad (19)$$

と書き換えられる。

実は、上の \hat{A} によって定義される $\hat{H} = \hat{A}^\dagger \hat{A}$ というハミルトニアンは、Richardson-Gaudin 模型と呼ばれる可積分なフェルミオン模型の特別な場合になっている [25, 26]。したがって、元々カオス的な振る舞いを期待して導入された SYK 模型も、相互作用が一樣な場合には、それとは真逆の可積分であることが分かったのだ^{*13}。この模型が可積分であることを反映して、ハミルトニアン \hat{H} は、互いに交換する $N/2$ 個の演算子の和の形に書くことができる。また、固有状態を代数的 Bethe 仮説と呼ばれる手法を用いて構成することができる。これらの詳細については、論文を参照されたい [24]。

数え上げ再び

さて、疑問だった式 (17) の数列に話を戻そう。実はこれ自体は、可積分性などを使わなくても、比較的簡単に導出することができる。 \hat{A} は全フェルミオン数を 2 減らす演算子であることから、 \mathcal{H}_F から \mathcal{H}_{F-2} への線型写像と見なすことができる^{*14}。これを、元の \hat{A} と区別して、 $A_{F,F-2} : \mathcal{H}_F \rightarrow \mathcal{H}_{F-2}$ と書くことにしよう。 $A_{F,F-2}$ の零空間 $\text{Ker}(A_{F,F-2})$ は \mathcal{H}_F における基底状態の張るベクトル空間と同じである。ここで、次元定理から、 $\dim \text{Ker}(A_{F,F-2}) = \dim \mathcal{H}_F - \dim \text{Im}(A_{F,F-2})$ が成り立つ。一方で、 $\text{Im}(A_{F,F-2}) \subset \mathcal{H}_{F-2}$ であるから、

$$Z_{N,F} = \dim \text{Ker}(A_{F,F-2}) \geq \dim \mathcal{H}_F - \dim \mathcal{H}_{F-2} = \binom{N}{F} - \binom{N}{F-2} \quad (20)$$

という不等式が成立することが分かる。式 (17) から分かるように、 $F = N/2$ の場合はこの不等式で等式が成立する場合になっている。他の $F \leq \lfloor \frac{N+1}{2} \rfloor$ についても数値的に調べてみると、実は等式が成立することが分かる。これは、線型写像 $A_{F,F-2}$ が全射であることを示唆する。実際、この全射性は式 (19) で導入した \hat{A} の $\hat{f}_{k,\sigma}$ を用いた表示を使って証明することができるが、紙面も尽きてきたので詳細は論文 [24] の Appendix A に譲る。 $Z_{N,F} = \binom{N}{F} - \binom{N}{F-2}$ を、 $F = 0, 1, \dots, \lfloor \frac{N+1}{2} \rfloor$ について足すことにより、(17) 式の Z_N の表式が得られる。

3.3 その他の話題

講義では上述の乱れのない SYK 模型以外にも、格子上の超対称性のあるフェルミオン系についての結果も紹介する。このような模型は、Nicolai によって 1976 年に導入

^{*13} 絶対零度のエントロピーが N のオーダーであるという点は元の SYK 模型と共通である。

^{*14} $\mathcal{H}_{-1} = \mathcal{H}_{-2} = \{0\}$ とする。

された模型 [27] まで遡ることができるが、基底状態の縮退度については意外なほど調べられていない。この Nicolai 模型やその拡張についての最近の結果 [28, 29] について紹介する予定である。2 章で扱った排除体積効果のある粒子系のフェルミオン版とも呼べる模型もある [30, 31]。これらの模型における Witten 指数と呼ばれる量は、(1) 式で定義される大分配関数を用いると $\Xi(-1)$ と表せる。また、 $|\Xi(-1)|$ は基底状態の縮退度の下限を与える。時間が許せば、この辺りの話題にも触れるつもりである。

参考文献

- [1] 数学者の Sloan によって設立された 30 万以上の整数列の情報が収められているオンラインデータベース. <https://oeis.org/>.
- [2] Inverse Symbolic Calculator. <http://wayback.cecm.sfu.ca/projects/ISC/ISCmain.html>.
- [3] 田崎晴明. 統計力学 I, II. 培風館, 2008.
- [4] M. Bretz. Ordered Helium Films on Highly Uniform Graphite—Finite-Size Effects, Critical Parameters, and the Three-State Potts Model. *Physical Review Letters*, Vol. 38, No. 9, p. 501, 1977.
- [5] R. J. Baxter. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. *Dover*, 2008.
- [6] D. S. Gaunt. Hard-Sphere Lattice Gases. II. Plane-Triangular and Three-Dimensional Lattices. *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 46, No. 8, pp. 3237–3259, 1967.
- [7] B. D. Metcalf and C. P. Yang. Degeneracy of antiferromagnetic Ising lattices at critical magnetic field and zero temperature. *Physical Review B*, Vol. 18, No. 5, p. 2304, 1978.
- [8] R. J. Baxter and S. K. Tsang. Entropy of hard hexagons. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, Vol. 13, No. 3, p. 1023, 1980.
- [9] 西野友年. テンソルネットワークの基礎と応用: 統計物理・量子情報・機械学習 (SGC ライブラリ 169). サイエンス社, 2021.
- [10] <https://mathworld.wolfram.com/HardHexagonEntropyConstant.html>.
- [11] http://park.itc.u-tokyo.ac.jp/hkatsura-lab/Files/Suurikagaku_Katsura_SSD.pdf.
- [12] P. A. Pearce. Hard hexagons, hard squares and hard mathematics. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Vol. 49, No. 41, p. 411003, 2016.
- [13] P. Fendley, R. Moessner, and S. L. Sondhi. Classical dimers on the triangular lattice. *Physical Review B*, Vol. 66, No. 21, p. 214513, 2002.
- [14] E. L. Basor and T. Ehrhardt. Asymptotics of Block Toeplitz Determinants and the Classical Dimer Model. *Communications in mathematical physics*, Vol. 274, No. 2, pp. 427–455, 2007.
- [15] N. Elkies, G. Kuperberg, M. Larsen, and J. Propp. Alternating-Sign Matrices and Domino Tilings (Part I). *Journal of Algebraic Combinatorics*, Vol. 1, No. 2, pp. 111–132, 1992.
- [16] D. Bressoud and J. Propp. How the Alternating Sign Matrix Conjecture

- Was Solved. *Notices of the AMS*, Vol. 46, No. 6, pp. 637–646, 1999.
- [17] G. Kuperberg. Another proof of the alternative-sign matrix conjecture. *International Mathematics Research Notices*, Vol. 1996, No. 3, pp. 139–150, 1996.
- [18] A. V. Razumov and Y. G. Stroganov. Spin chains and combinatorics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, Vol. 34, No. 14, p. 3185, 2001.
- [19] O. Salberger, T. Udagawa, Z. Zhang, H. Katsura, I. Klich, and V. Korepin. Deformed Fredkin spin chain with extensive entanglement. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, Vol. 2017, No. 6, p. 063103, 2017.
- [20] T. Udagawa and H. Katsura. Finite-size gap, magnetization, and entanglement of deformed Fredkin spin chain. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Vol. 50, No. 40, p. 405002, 2017.
- [21] Kitaev 氏の講演が YouTube 上で見られる. <https://www.youtube.com/watch?v=wFH1huu9Jcs>.
- [22] S. Sachdev. Bekenstein-Hawking Entropy and Strange Metals. *Physical Review X*, Vol. 5, No. 4, p. 041025, 2015.
- [23] J. Maldacena and D. Stanford. Remarks on the Sachdev-Ye-Kitaev model. *Physical Review D*, Vol. 94, No. 10, p. 106002, 2016.
- [24] E. Iyoda, H. Katsura, and T. Sagawa. Effective dimension, level statistics, and integrability of Sachdev-Ye-Kitaev-like models. *Physical Review D*, Vol. 98, No. 8, p. 086020, 2018.
- [25] R. W. Richardson. Exact Eigenstates of the Pairing-Force Hamiltonian. II. *Journal of Mathematical Physics*, Vol. 6, No. 7, pp. 1034–1051, 1965.
- [26] M. Gaudin. *The Bethe Wavefunction*. Cambridge University Press, 2014.
- [27] H. Nicolai. Supersymmetry and spin systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, Vol. 9, No. 9, p. 1497, 1976.
- [28] N. Sannomiya, H. Katsura, and Y. Nakayama. Supersymmetry breaking and Nambu-Goldstone fermions with cubic dispersion. *Physical Review D*, Vol. 95, No. 6, p. 065001, 2017.
- [29] R. La, K. Schoutens, and S. Shadrin. Ground states of Nicolai and Nicolai models. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Vol. 52, No. 2, p. 02LT01, 2018.
- [30] P. Fendley, K. Schoutens, and J. de Boer. Lattice Models with $\mathcal{N} = 2$ Supersymmetry. *Physical Review Letters*, Vol. 90, No. 12, p. 120402, 2003.
- [31] P. Fendley and K. Schoutens. Exact Results for Strongly Correlated Fermions in $2+1$ Dimensions. *Physical Review Letters*, Vol. 95, No. 4, p. 046403, 2005.