

散逸二重井戸系における相転移の解析

青木健一¹ 金沢大学 自然科学研究科
小林玉青² 米子工業高等専門学校 教養教育科

通常の量子力学の二重井戸ポテンシャル系では、トンネル効果があり、対称性の保たれた量子的状態である。ところが摩擦に代表されるエネルギー散逸の効果を取り入れると、トンネル効果が抑制され、状態は局在化した古典的状态となり、系の対称性は破れる。この局在化相転移を引き起こす臨界結合定数を散逸のある二重井戸ポテンシャル系で定量的に得ることが目的である。

1 Caldeira-Leggett 模型

ミクロの作用において、ターゲット自由度 q から、無限個の調和振動子で構成される環境自由度へのエネルギー散逸を記述する Caldeira-Leggett 模型 (1) を用いる。[1]

$$S[q, \{x_\alpha\}] = \int dt \left\{ \frac{1}{2} M \dot{q}^2 - V_0(q) + \sum_\alpha \left[\frac{1}{2} m_\alpha \dot{x}_\alpha^2 - \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha^2 x_\alpha^2 - q C_\alpha x_\alpha \right] \right\}. \quad (1)$$

環境自由度の経路積分を行うと、ユークリッド経路積分において、虚時間方向の非局所有効相互作用 (2) が現れる。 η がエネルギー散逸の大きさを表し、 η_c が求めたい局在化相転移の臨界結合である。

$$\Delta S_{\text{NL}} = \frac{\eta}{4\pi} \int ds d\tau \frac{(q(s) - q(\tau))^2}{|s - \tau|^p}. \quad (2)$$

この相互作用を虚時間方向に離散化し、1次元統計系としてみると、離れたサイト間の長距離相互作用 (3) に帰着する。パラメタ p は長距離相互作用の距離に伴うダンピング指数である。

$$\frac{\eta}{2\pi} \epsilon^{2-p} \sum_n \frac{(x_i - x_{i+n})^2}{n^p}. \quad (3)$$

2 Block Renormalization Group (BDRG)

ミクロの自由度を積分する Decimation くりこみ群 (DRG) の手法を用いて系の分配関数を計算する [2] が、長距離相互作用 (3) がある場合には、通常の DRG は有効ではない。そこで、図 1 の左側のように、相互作用の最大距離を n と限り、レンジ n に対応するサイト数 n 個を含むブロックに系を分割し、くりこみ変換を行う Block Decimation Renormalization Group (BDRG) を定義する。

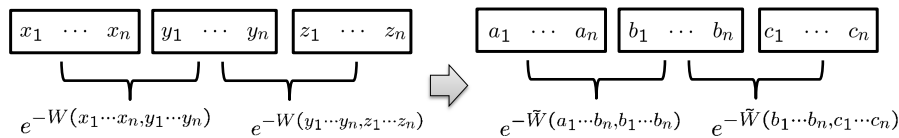


図 1: 量子力学系における BDRG

系はブロック間最近接相互作用模型となり、ブロック間の相互作用である bi-local potential $W(x_1 \cdots x_n, y_1 \cdots y_n)$ で表される T 行列 (4) の積 $T^{(k+1)} = T^{(k)} T^{(k)}$ として、 k 回目のくりこみ変換が定義できる。

$$T = e^{-W(x_1 \cdots x_n, y_1 \cdots y_n)} = \langle x_1 x_2 \cdots x_n | \hat{U} | y_1 y_2 \cdots y_n \rangle. \quad (4)$$

¹e-mail address: aoki@hep.s.kanazawa-u.ac.jp

²e-mail address: kobayasi@yonago-k.ac.jp

しかし、量子力学において各サイトの自由度は無限大であり、適切な状態に限って計算することになる。経路積分における実際の操作としては、完全系をはさみ、(5)のように変更した基底を制限することにより実現される。(5)はくりこみ変換における T 行列の初期値であるが、多重積分を含む。

$$\begin{aligned} T &= \int dx_1 \cdots dx_n dy_1 \cdots dy_n \langle a_1 \cdots a_n | x_1 \cdots x_n \rangle \langle x_1 \cdots x_n | \hat{U} | y_1 \cdots y_n \rangle \langle y_1 \cdots y_n | b_1 \cdots b_n \rangle \\ &= \int dx_1 \cdots dx_n dy_1 \cdots dy_n \psi_{a_1}^*(x_1) \cdots \psi_{a_n}^*(x_n) e^{-W(x_1 \cdots x_n, y_1 \cdots y_n)} \psi_{b_1}(y_1) \cdots \psi_{b_n}(y_n). \end{aligned} \quad (5)$$

BDRG によって、有限レンジでの分配関数から外場感受率を計算した後、我々は、Finite Range Scaling (FRS) の手法を用いて、無限レンジでの情報を得て、臨界結合 η_c を評価する。FRS では、Finite Range exponent $\beta(6)$ を仮定する。すると無限レンジ極限における対数外場感受率は、長距離イジング模型では、実軸上の zeta 関数を用いて得られる。すなわち、 $\beta(n = \infty, p, \eta_c) = 1$ となる時が、外場感受率 χ が発散する局在化相転移点である。

$$\log \chi(n) - \log \chi(n-1) \equiv \left(\frac{1}{n}\right)^{\beta(n,p,\eta)}, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \log \chi(n) = \zeta(\beta(\infty, p, \eta)) \simeq \frac{1}{\beta-1}. \quad (6)$$

これまで BDRG と FRS を用いた解析では、摩擦のない二重井戸ポテンシャルの基底状態と第一励起状態の 2 状態を採用する近似の場合に、 η_c を定量的に求めることに成功している [3]。得られた結果は、インスタント計算 [4] とモンテカルロシミュレーションによる結果 [5] のパラメタ領域を補完する。次に、くりこみ群の初期値となる T 行列を Monte Carlo サンプルとして直接生成し、系の状態を近似せずに解析する Full-BDRG によって、臨界結合定数を求める事を考えたい。

$n \geq 2$ の場合、 T 行列はエルミート行列ではないが、任意の正方行列は適当な n 次正則行列 S を用いて $STS^{-1} = T_J$ とすることにより、ジョルダン標準形 (7) には出来る。

$$T_J = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \lambda_2 & 1 & \cdots & \emptyset \\ \vdots & \vdots & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \emptyset & \vdots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \lambda_n \end{pmatrix}, \quad \int d\mathbf{y} T(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}) = \lambda \phi(\mathbf{x}). \quad (7)$$

ジョルダン固有値 λ_i は (7) の固有値方程式から得られる。 k 回のくりこみ変換後には、

$$T^{(k)} = \begin{pmatrix} \lambda_0^{2^k} & & & \\ & \lambda_1^{2^k} & & \\ \emptyset & & \ddots & \end{pmatrix} = \lambda_0^{2^k} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right)^{2^k} & & \\ \emptyset & & \ddots & \end{pmatrix}, \quad (8)$$

となって、非対角成分は残るが、くりこみ回数 $k \rightarrow \infty$ では、分配関数 $Z = \text{Tr} T^{(k)}$ から得られる物理量に関しては、最大固有値 λ_0 が支配的である。

実際に、外場感受率 χ や自由エネルギー F を求めるためには、サイト変数に対して 1 次の外場 h を導入し、統計系のサイズを $N = 2^k$ として、

$$\chi = -\left. \frac{\partial^2 F(h)}{\partial h^2} \right|_{h=0}, \quad F(h) = -\frac{1}{N} \log Z(h). \quad (9)$$

摂動論ではエネルギー固有値に対して h が 1 次の変化はないから、(9) より、

$$\lambda_0(h) = \lambda_0(0) + \frac{\lambda_0(0)}{2} \chi h^2, \quad (10)$$

となり、 $h = 0$ 及び、 h を導入した T 行列の最大固有値の比が分かれば、外場感受率 χ が計算される。

この固有値を利用する方法は、2 状態近似 BDRG[3] において行った T 行列の初期値 (5) を得るために、多重積分を実行する労力を軽減する可能性がある。これは計算量が増大する Full-BDRG を行う際に有益であろう。よって今回は結合定数 η の値を変えながら、外場 h も導入し、 T 行列のジョルダン固有値及び対応する固有状態の構造を調べる。

(3) においてサイトの自由度を 2 点、つまり状態を二重井戸の底に完全に局在化するガウス関数で近似すると、系は長距離相互作用 $K_n^{[p]}$ を持つイジングスピン模型と同等になる。

$$K_n^{[p]} \equiv \frac{\eta}{n^p}, \quad H = \sum_{n, i; n \geq i} K_n \sigma_i \sigma_{i+n} + \sum_i h \sigma_i. \quad (11)$$

まずはこの長距離相関をもつイジングスピン模型の T 行列について調べる。

なお、我々は行列積を計算する BDRG と FRS を用いて、長距離相関があるイジングスピン模型の場合に、 η_c を定量的に得ることに成功している [6]。少ない計算リソース・計算時間で、モンテカルロシミュレーションの結果と同等であり [7]、1960 年代にイジング模型に関して数多くの仕事がなされた数理物理学関係の結果とも一致する [8]。よって、今回、固有値の方法で得られる結果は、行列積を用いた従来の BDRG による結果と比較可能である。

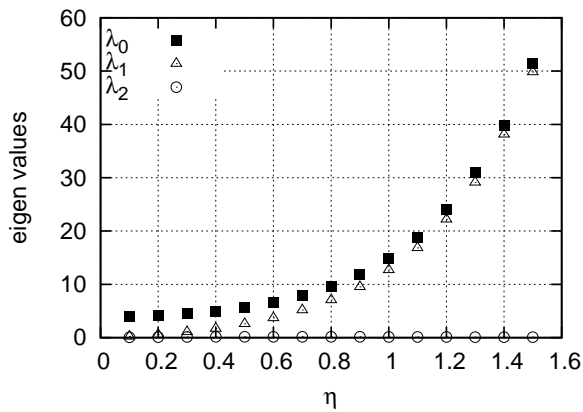


図 2: Eigen values at $n = 2$, $p = 1.7$

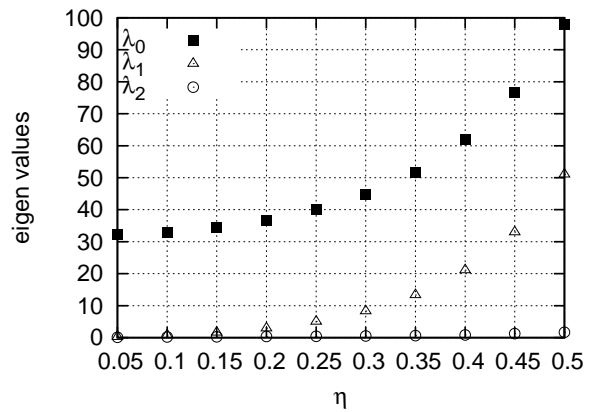


図 3: Eigen values at $n = 5$, $p = 1.7$

それでは長距離相互作用のあるイジングスピン系の T 行列を見てみる。イジング系では自由度は 2 つしかないため、BDRG において、相互作用の最大距離 n のブロック内の状態数は 2^n だから、状態間の相互作用を記述する T 行列は $2^n \times 2^n$ 次元である。例えば、 $n = 2$ の場合、相互作用は (11) の K_1, K_2 のみであり、 T 行列は実際に (12) となる。

$$T^{(n=2)} = \begin{matrix} & \begin{matrix} |\uparrow\uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow\rangle & |\downarrow\uparrow\rangle & |\downarrow\downarrow\rangle \end{matrix} \\ \begin{matrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{matrix} & \begin{pmatrix} e^{2K_1+2K_2} & e^{K_1} & e^{-K_1} & e^{-2K_2} \\ e^{-K_1} & e^{-2K_1+2K_2} & e^{-2K_2} & e^{K_1} \\ e^{K_1} & e^{-2K_2} & e^{-2K_1+2K_2} & e^{-K_1} \\ e^{-K_2} & e^{-K_1} & e^{K_1} & e^{2K_1+2K_2} \end{pmatrix} \end{matrix}. \quad (12)$$

ジョルダン固有値 ($h = 0$) の結果を $n = 2$ (図 2) の場合と $n = 5$ (図 3) の場合について、横軸 η に対して示す。 λ_0 が最大固有値で、以下、絶対値が大きい順に $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ としている。 $n = 2$ (図 2) の場合、 η が大きい強結合領域では λ_0 と λ_1 に対応する固有状態がそれぞれ $|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle$ と $|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle$ となっており、スピンの揃った状態が支配的であることがわかる。スピンの揃っていない $|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$ の固有値はほぼ 0 になっている。一方、 η が小さい弱結合領域における固有状態は、強結合領域のよ

うに分離されておらず、飛び抜けて大きい最大固有値の状態は4状態すべてを等しく含む. $n = 5$ (図3)の場合も事情は同様であり, λ_3 以下の固有値はほとんど0になっているためグラフでは省略した.

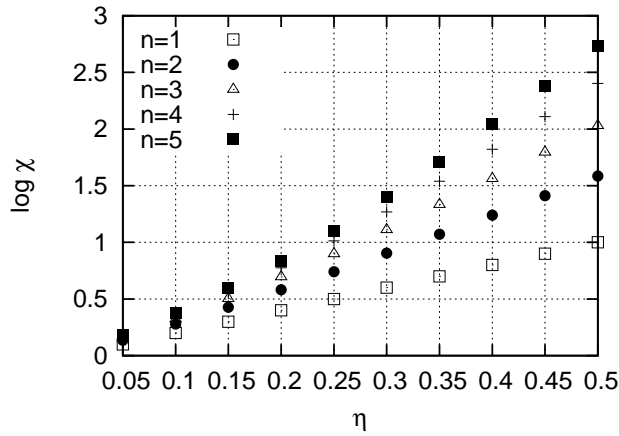


図 4: $\log \chi$ at $n = 1 \sim 5$, $p = 1.7$

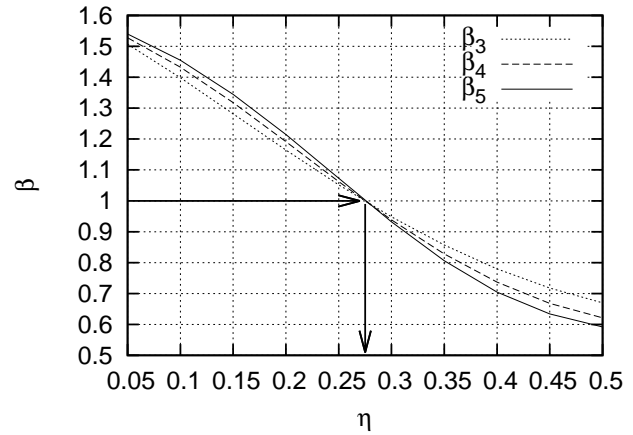


図 5: η_c at $n = 5$, $p = 1.7$

この最大固有値を用いて, (10) のように, 対数外場感受率 $\log \chi(n)$ を相互作用の最大距離 $n = 1 \sim 5$ について計算したグラフが図 4 である. $n \rightarrow \infty$ において $\log \chi$ が発散する η_c があるはずだが, $\log \chi$ の発散の度合いが変化するポイントは (10) から判別できない. そこで FRS の手法 (6) を用いて, $n \rightarrow \infty$ の相転移点を図 5 のグラフとして得る. 図 5 では縦軸は FRS 指数 β であり, $n = 1 \sim 5$ の外場感受率の値を使っている. $\beta = 1$ に相当する η が臨界結合 $\eta_c = 0.28$ である. この結果は, 行列積を用いた BDRG と FRS の結果に一致している [6].

今回, T 行列の最大固有値を求めて FRS を行う手法も従来の T 行列積を計算していく方向と同等に有効であることが分かった. したがって今後は 2 つの方法を長距離相互作用にある量子力学系に適用することを並行して試み, 精度向上と計算の省力化を考えていきたい.

参考文献

- [1] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **46**, 211(1981); Ann. of Phys. **149**, 374(1983).
- [2] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773(1975).
- [3] K-I. Aoki, T. Kobayashi, Mod. Phys. Lett. B, **26**, 1250202(2012).
- [4] S. Chakravarty, Phys. Rev. Lett. **49**, 681(1982). A. J. Bray, M. A. Moore, Phys. Rev. Lett. **49**, 1545(1982).
- [5] T. Matsuo, Y. Natsume and T. Kato, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 103002(2006); Phys. Rev. B **77**, 184304(2008).
- [6] K-I. Aoki, T. Kobayashi and H. Tomita, Prog. Theor. Phys. **119**, 509(2008).
- [7] E. Luijten, HWJ Blöte, Phys. Rev. B, **56**, 8945(1997); E. Luijten and H. Meßingfeld, Phys. Rev. Lett. **86**, 5305(2001).
- [8] F. J. Dyson, Commun. Math. Phys. **12**, 91(1969); R. B. Griffiths, Commun. Math. Phys., **6**, 121(1967).