

朝永-Luttinger 液体における不純物問題の  
数値的研究

東京大学理学系研究科物理学専攻

濱本雄治

2007年

## 謝辞

多くの方々の協力があって、本研究を修士論文という形にまとめることができました。ここに深く感謝いたします。

指導教官である加藤岳生助教授には、「朝永-Luttinger 液体における不純物問題」というやりがいのあるテーマを与えていただき、また研究の過程において、未熟な私を熱心に指導していただきました。

理化学研究所の井村健一郎博士には、摂動繰り込み群の手法について丁寧に指導して頂き、また有益な助言もいただきました。

千葉大学の松尾武史さんには、経路積分モンテカルロ法について指導していただき、また計算機の使い方を丁寧に教えていただきました。

同じ研究室の吉見一慶さんと竹内維斗文さんには、日頃から快適な研究環境を与えていただき、また有益な議論もしていただきました。

秘書の江口浩子さんには、物性研究所における研究生生活の様々な面においてサポートしていただきました。



# 目次

第 1 章	はじめに	5
第 2 章	朝永-Luttinger 液体における不純物問題	7
2.1	朝永-Luttinger 液体	7
2.2	不純物問題の定式化	10
2.3	繰り込み群による解析	14
2.4	関連する話題	18
第 3 章	経路積分モンテカルロ法による数値シミュレーション	23
3.1	経路積分モンテカルロ法	23
3.2	虚時間方向の離散化と離散 Fourier 変換	25
3.3	Fourier 表示での局所更新	26
3.4	$\tilde{\phi}_{\nu 0}$ の局所更新	27
第 4 章	結果と考察	29
4.1	松原コンダクタンス	29
4.2	$G_{\nu}(i\omega_n \rightarrow 0)$ の温度依存性	31
4.3	相図	33
第 5 章	まとめ	35
	参考文献	37



# 第 1 章

## はじめに

微細加工技術の進歩によって、半導体界面に幅が Fermi 波長程度の量子細線を形成することが可能になった。このような系では電子が純粹に一次元的に振る舞うようになり、低温ではいわゆる朝永-Luttinger 液体としての性質を帯びようになる。朝永-Luttinger 液体の特徴として、後方散乱のような過程が含まれる場合にはハミルトニアンに  $\cos$  項が現れ、厳密には解けなくなる。このような問題を解析的に扱う強力な手法として摂動繰り込み群がある。この手法は、エネルギーのカットオフ  $\Lambda$  を徐々に小さくして低エネルギーの極限をとったとき、パラメータがどのように繰り込まれるかを調べる近似法である。ただし繰り込みの際には、例えば不純物による散乱強度のような量を摂動パラメータとして扱っており、この量が有限であるときには、摂動論的に得られた繰り込みの流れが適用できるかは定かでない。

しかしながら実際の系では、現象によっては非摂動論的に問題を扱わなければならない場合も出てくる。このような際には、摂動計算によらず問題に解を与える手法があれば理想的である。本研究では、原理的にはその要求を満たしてくれる手法として、経路積分モンテカルロ法による数値シミュレーションを用いる。経路積分モンテカルロ法では現実の系を計算機上でシミュレートし、その中での物理量を観測するだけなので、シミュレーションの可能な系ならば、基本的にどんな量でも観測可能である。しかし実際には、単純な方法ではシミュレートできない系も存在し、系に応じた工夫が必要になることもある。

本研究では、朝永-Luttinger 液体における不純物問題に関連して現れる  $\cos \phi_\rho \cos \phi_\sigma$  の形のポテンシャルを持つ系を扱い、低温でのコンダクタンスの繰り込みの様子を調べる。摂動繰り込み群による解析によって、繰り込みの流れの途中に非自明な固定点の存在が示唆される系があることが知られている。本研究で扱う系もその一つで、不純物ポテンシャルによる散乱強度が強い極限と弱い極限でコンダクタンスの相図が異なるため、散乱強度が中間的な値をとる領域において不安定な固定点の存在が予言されている [1][2]。摂動繰り込み群で直接扱うことができないこの領域を、経路積分モンテカルロ法によって調

べることは、この系の物理的性質をより深く理解する上で重要である。ただし散乱強度が中間的な値をとる領域では、経路積分モンテカルロ法を用いる際にも困難が生じる。すなわち、ある程度散乱強度が大きくなってくると、素励起のエネルギースケールとポテンシャル障壁の高さが競合するようになり、Bose 場の経路に関して、周期ポテンシャルの底の間をトンネルするキック構造が多く見られるようになる。従来の経路積分モンテカルロ法ではこのキック構造を効率的にシミュレーションすることが困難であったが、近年開発されたクラスター更新の手法によってこの困難は解決された [3]。したがって、経路積分モンテカルロ法を用いて不純物による散乱強度が中間的な値をとることは、原理的に可能になったと考えられる。

本研究の目標は、朝永-Luttinger 液体における不純物問題に経路積分モンテカルロ法を適用したときの振る舞いを調べ、この問題を扱うことが可能であることを確認することである。そのために電荷およびスピンのコンダクタンスを観測して、摂動繰り込み群による解析から得られている相図 [1][2] を再現することを試みる。

## 第 2 章

# 朝永-Luttinger 液体における不純物問題

相互作用する一次元電子系の低エネルギー励起を記述する理論手法として、通常、朝永-Luttinger 液体の形式が用いられる。この形式では Fermi 粒子の密度揺らぎが Bose 的な素励起として振る舞い、より高次元の系で用いられる Fermi 液体の形式とは本質的に異なる。そのため、単純な系を扱ったとしても現象は自明でなくなり、相互作用のない系から摂動的に現象を予測することはできない。朝永-Luttinger 液体の形式の利点の 1 つは、もとの Fermi 粒子の場が素励起の場を用いて厳密に表現できることである。これにより、一次元電子系は Bose 場のハミルトニアンで記述され、Bose 粒子の一粒子的な挙動を扱うことで現象を解析的に調べることが可能になる。

本研究における不純物の問題とは、一次元系の中に不純物を置いたとき、その影響が低温でコンダクタンスなどの物理量にどう現れるかを扱うものである。解析的には、不純物による後方散乱の弱い極限と強い極限についてコンダクタンスの振る舞いが調べられている [1][2]。それによると、まず素励起間の相互作用が斥力的であるとき ( $K < 1$ )、0K で電子は不純物ポテンシャルによって完全に反射される。逆に相互作用が引力的であるとき ( $K > 1$ )、電子は不純物ポテンシャルを完全に透過する。

この章では、朝永-Luttinger 液体を簡単に復習し、上述の解析的な扱いについてレビューを行う。

### 2.1 朝永-Luttinger 液体

朝永-Luttinger 液体の歴史は古く、すでに多くの優れたレビューが存在する [4][5][6]。しかしながら、素励起を記述する Bose 場については問題に応じてある程度自由な表式が選べるため、文献によって表記が異なるのが普通である。この節ではそのような曖昧さを



回避するために，朝永-Luttinger 液体の形式に現れる量について，この論文で用いる表式を定義する．

一次元電子系のハミルトニアンから朝永-Luttinger 液体の形式を導く際の出発点は，Fermi 面上の電子の低エネルギー励起が Fermi 面のごく近傍で起こることを仮定し，自由電子の運動エネルギーを  $k_F$  のまわりの線形分散で近似することである．

$$E \simeq v_F(\pm k - k_F) . \quad (\hbar \equiv 1) \quad (2.1)$$

ただし複号は電子の一次元の運動方向を表し，エネルギーは Fermi 面から測った．低エネルギーの自由電子系を，右向きの分枝と左向きの分枝で独立の別々の線形分散を持つ模型で置き換えたると，密度演算子  $\rho_{rs}(q)$ <sup>1)</sup> は Bose 的な特徴を帯びるようになる．すなわち密度演算子の交換関係を計算すると

$$[\rho_{rs}(-q), \rho_{r's'}(q')] = \delta_{qq'} \delta_{rr'} \delta_{ss'} \frac{qrL}{2\pi} \quad (L \text{ は一次元系の長さ}) \quad (2.2)$$

が得られ， $\rho_{rs}(q)$  によってこの模型の素励起が表現可能であることを示唆している．実際，ハミルトニアンは運動項と相互作用項がともに  $\rho_{rs}(q)$  の 2 次形式で

$$\begin{aligned} H = & \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{q>0,rs} \rho_{rs}(q) \rho_{rs}(-q) \\ & + \frac{1}{L} \sum_{qrss'} [g_2 \rho_{rs}(q) \rho_{-r,s}(q) + g_4 \rho_{rs}(q) \rho_{rs}(-q)] \end{aligned} \quad (2.3)$$

となることが示される．ただし相互作用のうち，後方散乱とウムクラップ散乱は考慮しない<sup>2)</sup>． $g_2$  と  $g_4$  はそれぞれ逆向きおよび同じ向きに運動する 2 電子の前方散乱の強さを表し，相互作用が引力的ならば正，斥力的ならば負である．相互作用項はもともと電子の生成消滅演算子の 4 次であったので  $\rho_{rs}(q)$  の 2 次で置き換わっても不思議ではない．しかし電子の生成消滅演算子の 2 次であったはずの運動項まで  $\rho_{rs}(q)$  の 2 次で置き換わるのは， $\rho_{rs}(q)$  が (2.2) のように生成消滅演算子の役割も果たすからである．

以下の議論では，密度演算子  $\rho_{rs}(q)$  の代わりに次のような新しい Bose 場を導入して用いることにする．

$$\phi_s(x) = -\frac{i\pi}{L} \sum_{q \neq 0} \sum_{r=\pm} \frac{1}{q} e^{-\alpha|q|/2 - iqx} \rho_{rs}(q) - \frac{\pi x}{L} \sum_{r=\pm} \rho_{rs}(0) , \quad (2.4)$$

$$\theta_s(x) = \frac{i\pi}{L} \sum_{q \neq 0} \sum_{r=\pm} \frac{1}{q} e^{-\alpha|q|/2 - iqx} r \rho_{rs}(q) + \frac{\pi x}{L} \sum_{r=\pm} r \rho_{rs}(0) . \quad (2.5)$$

1) 電子密度  $\psi^\dagger(x)\psi(x)$  の Fourier 係数． $q$  は波数， $r = \pm$  は運動方向， $s = \pm$  はスピンを表す．

2) SU(2) 対称性を仮定すると後方散乱の結合定数  $g_1$  は低エネルギーで 0 に繰り込まれる (irrelevant)．またウムクラップ過程は half-filling や quarter-filling などの特別な場合を除いて irrelevant である．

$\alpha$  は電子系のバンド幅で決まるカットオフで，計算の最後で  $\alpha \rightarrow 0$  とする．これらの場は交換関係

$$[\phi_s(x), \theta_{s'}(y)] = -i\pi \delta_{ss'} \Theta(x-y) \quad (2.6)$$

$$\Theta(x) \equiv \int^x dy \delta(y) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.7)$$

を満たすため， $x$  あるいは  $y$  で微分することにより

$$[\phi_s(x), \partial_y \theta_{s'}(y)] = [\theta_s(x), \partial_y \phi_{s'}(y)] = i\pi \delta_{ss'} \delta(x-y) \quad (2.8)$$

が得られる．つまり  $\phi_s(x)$  と  $\theta_s(x)$  は，一方の場の空間微分が他方の場の共役な運動量となるような関係にある． $\phi_s(x)$  と  $\theta_s(x)$  を導入したことにより，これらの Bose 場を用いて電子の Fermi 場  $\psi_{rs}(x)$  が次のように表現できることにある．

$$\psi_{rs}(x) = \frac{\eta_{rs}}{\sqrt{2\pi\alpha}} \exp[irk_F x - i\{r\phi_s(x) + \theta_s(x)\}] \quad (2.9)$$

$L \rightarrow \infty$  のとき  $\eta_{rs}$  は Majorana 演算子と呼ばれ，反交換関係

$$\{\eta_{rs}, \eta_{r's'}\} = 2\delta_{rr'}\delta_{ss'} \quad (\eta_{rs}^\dagger = \eta_{rs}) \quad (2.10)$$

を満たす．(2.9) で  $\eta_{rs}$  を導入したのは  $\psi_{rs}(x)$  が正しく Fermi 場の反交換関係を満たすためであるが，ボソン化の後ではとくに重要でないので省略する．また  $s = \pm$  の自由度の代わりに電荷・スピン自由度  $\nu = \rho, \sigma$  を

$$\phi_\rho(x) = \phi_+(x) + \phi_-(x) \quad , \quad \phi_\sigma(x) = \phi_+(x) - \phi_-(x) \quad (2.11)$$

$$\theta_\rho(x) = \theta_+(x) + \theta_-(x) \quad , \quad \theta_\sigma(x) = \theta_+(x) - \theta_-(x) \quad (2.12)$$

$$[\phi_\nu(x), \theta_{\nu'}(y)] = -2\pi i \delta_{\nu\nu'} \Theta(x-y) \quad (2.13)$$

のように定義すると，(2.9) は

$$\psi_{rs}(x) = \frac{\eta_{rs}}{\sqrt{2\pi\alpha}} \exp[irk_F x - \frac{ir}{2}\{\phi_\rho(x) + s\phi_\sigma(x)\} - \frac{i}{2}\{\theta_\rho(x) + s\theta_\sigma(x)\}] \quad (2.14)$$

と表すこともできる．以下，この  $\phi_\nu(x)$ ， $\theta_\nu(x)$  による表式を用いることにするが，このときのハミルトニアンは波動場の形で

$$H_0 = \sum_\nu \int \frac{dx}{4\pi} \left[ \frac{u_\nu}{K_\nu} \left( \frac{\partial \phi_\nu}{\partial x} \right)^2 + u_\nu K_\nu \left( \frac{\partial \theta_\nu}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (2.15)$$

と書ける． $u_\nu$  は音速， $K_\nu$  は素励起間相互作用のパラメータであり，次のように定義される．

$$u_\rho = \frac{1}{2\pi} \sqrt{(2\pi v_F + 2g_4)^2 - (g_1 - 2g_2)^2} \quad , \quad u_\sigma = \frac{1}{2\pi} \sqrt{(2\pi v_F)^2 - g_1^2} \quad (2.16)$$

$$K_\rho = \sqrt{\frac{2\pi v_F + 2g_4 + g_1 - 2g_2}{2\pi v_F + 2g_4 - g_1 + 2g_2}} \quad , \quad K_\sigma = \sqrt{\frac{2\pi v_F + g_1}{2\pi v_F - g_1}} \quad (2.17)$$

ここでは先程は考慮しなかった逆向きに運動する 2 電子間の後方散乱

$$H_1 = \frac{1}{L} \sum_{kqq's's'} g_{1\perp} a_{+,ks}^\dagger a_{-,qs}^\dagger a_{+,q+2k_F+q',s'} a_{-,k-2k_F-q',s'} \quad (2.18)$$

も含めた  $a_{rqs}^\dagger, a_{rqs}$  は電子の生成消滅演算子である． $g_{1\perp}$  は  $g_2, g_4$  と同様，相互作用が引力的なら正，斥力的なら負である．したがって  $K_\nu$  は相互作用が斥力的なら  $< 1$ ，引力的なら  $> 1$  である．後方散乱を無視して  $g_{1\perp} \rightarrow 0$  とすれば  $K_\sigma \rightarrow 1$  であるが，今は一般的に  $K_\sigma$  は  $\neq 1$  の値も取るものとして扱う．

## 2.2 不純物問題の定式化

前節では外場のない一次元系を考えていたが，今この系の  $x = 0$  に不純物を置いた場合を考える [1][2]．不純物による後方散乱が十分弱い場合と強い場合の両極限で，それぞれ後方散乱の強さとトンネルの強さを摂動として，不純物の影響を解析的に扱う．

### 2.2.1 摂動ハミルトニアン

簡単のため，不純物ポテンシャルとして  $\delta$  関数的なものを考える．まず不純物による後方散乱の弱い極限では，摂動ハミルトニアンは後方散乱の過程に対応して

$$\delta H_{\text{backward}} \simeq \tilde{v} \sum_s [\psi_{+,s}^\dagger(0) \psi_{-,s}(0) + \text{H.c.}] \quad (2.19)$$

$$= \frac{\tilde{v}}{2\pi\alpha} \sum_s [e^{-i\{\phi_\rho(0)+s\phi_\sigma(0)\}} + \text{H.c.}] \quad (2.20)$$

$$= v \cos \phi_\rho(0) \cos \phi_\sigma(0) \quad , \quad v \equiv 2\tilde{v}/\pi\alpha \quad (2.21)$$

と表せる． $v$  は後方散乱の強さを表す摂動パラメータである．一方，後方散乱の強い極限でこの系は  $x = 0$  で弱く結合した 2 つの半無限系 (1, 2 とラベルする) と見なせる．そして両方の系で端  $x = 0$  からの影響が無視できるほど小さいと仮定すると，それぞれの系は近似的に半無限系における形式で記述できる．ところで，自由度  $\nu$  の密度および流れは Bose 場を用いてそれぞれ

$$\rho_\nu(x) = -\frac{1}{\pi} \frac{\partial \phi_\nu}{\partial x} \quad , \quad j_\nu(x) = \frac{v_\nu K_\nu}{\pi} \frac{\partial \theta_\nu}{\partial x} \quad (2.22)$$

と表すことができる．今の場合， $x = 0$  近傍に電子はいないがトンネル電流は有限であるから，区間  $[-0, +0]$  で (2.22) を積分すると

$$\phi_\nu^{(1)}(+0) - \phi_\nu^{(2)}(-0) = 0 \quad , \quad \theta_\nu^{(1)}(+0) - \theta_\nu^{(2)}(-0) \neq 0 \quad (2.23)$$

が得られる．このとき摂動ハミルトニアンは，2つの系をつなぐトンネルの過程に対応して

$$\delta H_{\text{tunnel}} \simeq \tilde{t} \sum_s [\psi_{+,s}^{(1)\dagger}(0) \psi_{+,s}^{(2)}(0) + \psi_{-,s}^{(2)\dagger}(0) \psi_{-,s}^{(1)}(0)] \quad (2.24)$$

$$= \frac{\tilde{t}}{2\pi\alpha} \sum_s [e^{\frac{i}{2}\{\theta_\rho^{(1)}(+0) - \theta_\rho^{(2)}(-0)\} + \frac{is}{2}\{\theta_\sigma^{(1)}(+0) - \theta_\sigma^{(2)}(-0)\}} + \text{H.c.}] \quad (2.25)$$

$$= t \cos \vartheta_\rho(0) \cos \vartheta_\sigma(0) \quad , \quad t \equiv 2\tilde{t}/\pi\alpha \quad (2.26)$$

となる．ここで新しい Bose 場

$$\vartheta_\nu(x) = \frac{1}{2} [\theta_\nu^{(1)}(x > 0) - \theta_\nu^{(2)}(x < 0)] \quad (2.27)$$

$$\Theta_\nu(x) = \frac{1}{2} [\theta_\nu^{(1)}(x > 0) + \theta_\nu^{(2)}(x < 0)] \quad (2.28)$$

を導入した．以上で不純物による後方散乱に関する摂動ハミルトニアン (2.21)(2.26) が得られた．それぞれ後方散乱が弱い極限と強い極限に対応し，条件は正反対であるが同じ形をしている．そのため，次項で見るとようにこれらの摂動は，不純物による散乱強度が強い極限と弱い極限で同様にして扱うことが可能である．

### 2.2.2 有効作用

有限温度の系を扱う場合には分配関数  $Z$  が求まればよい．一般には  $Z$  が厳密に求まることの方がまれであるが，系によってはより扱いやすい形になるよう工夫できることもある．(2.15) のように無摂動ハミルトニアンが場の 2 次形式で書かれている場合はその一例で， $Z$  を経路積分表示したときに Gauss 積分によって系を少数自由度に落とすことができる．またこのとき得られる少数自由度に対する作用を有効作用と呼び  $S_{\text{eff}}$  で表す．まず後方散乱の弱い場合の摂動ハミルトニアン  $\delta H_{\text{backward}}$  を考えたときの有効作用を計算する．交換関係 (2.13) および Heisenberg の運動方程式から， $\phi_\nu(x)$  に共役な運動量は

$$\Pi_\nu(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial \theta_\nu}{\partial x} = \frac{1}{2\pi u_\nu K_\nu} \frac{\partial \phi_\nu}{\partial t} \quad (2.29)$$

であるから， $\phi_\nu(x)$  で表したラグランジアンおよび分配関数は

$$L = \sum_\nu \int dx \Pi_\nu(x) \frac{\partial \phi_\nu}{\partial t} - H_0 - \delta H_{\text{backward}} \quad (2.30)$$

$$= \sum_\nu \int \frac{dx}{4\pi} \left[ \frac{1}{u_\nu K_\nu} \left( \frac{\partial \phi_\nu}{\partial t} \right)^2 - \frac{u_\nu}{K_\nu} \left( \frac{\partial \phi_\nu}{\partial x} \right)^2 \right] - v \cos \phi_\rho(0) \cos \phi_\sigma(0) \quad (2.31)$$

$$Z = \int \mathcal{D}\phi_\rho \int \mathcal{D}\phi_\sigma \exp \left[ i \int dt L \right] \quad (2.32)$$

$$= \int \mathcal{D}\phi_\rho \int \mathcal{D}\phi_\sigma \exp \left[ i \sum_\nu \int dt \int \frac{dx}{4\pi} \left\{ \frac{1}{u_\nu K_\nu} \left( \frac{\partial \phi_\nu}{\partial t} \right)^2 - \frac{u_\nu}{K_\nu} \left( \frac{\partial \phi_\nu}{\partial x} \right)^2 \right\} - iv \int dt \cos \phi_\rho(0, t) \cos \phi_\sigma(0, t) \right] \quad (2.33)$$

となる．ここで  $it \rightarrow \tau$  として虚時間表示<sup>3)</sup>に移る．

$$Z = \int \mathcal{D}\phi_\rho \int \mathcal{D}\phi_\sigma \exp \left[ - \sum_\nu \int_0^\beta d\tau \int \frac{dx}{4\pi} \left\{ \frac{u_\nu}{K_\nu} \left( \frac{\partial \phi_\nu}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{u_\nu K_\nu} \left( \frac{\partial \phi_\nu}{\partial \tau} \right)^2 \right\} - v \int d\tau \cos \phi_\rho(0, \tau) \cos \phi_\sigma(0, \tau) \right] \quad (2.34)$$

$$= \int \mathcal{D}\phi_\rho \int \mathcal{D}\phi_\sigma e^{-S[\phi_\rho, \phi_\sigma]} . \quad (2.35)$$

こうして虚時間表示の作用

$$S[\phi_\rho, \phi_\sigma] \equiv S_0[\phi_\rho, \phi_\sigma] + \delta S[\phi_\rho, \phi_\sigma] \quad (2.36)$$

$$= \sum_\nu \int d\tau \int \frac{dx}{4\pi} \left[ \frac{u_\nu}{K_\nu} \left( \frac{\partial \phi_\nu}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{u_\nu K_\nu} \left( \frac{\partial \phi_\nu}{\partial \tau} \right)^2 \right] + v \int d\tau \cos \phi_\rho(0, \tau) \cos \phi_\sigma(0, \tau) \quad (2.37)$$

が得られた．虚時間作用に含まれる Bose 場のうち  $\phi_\nu(x \neq 0, \tau)$  は 2 次形式なので  $\phi_\nu$  に関する Gauss 積分で消せそうであるが，微分されているので Fourier する必要がある．しかしそのまま Fourier 変換してしまうと (2.37) の  $\cos$  項も変換が複雑になり，Gauss 積分ができなくなる．そこで任意の  $\tau$  につき  $\phi_\nu^0(\tau) = \phi_\nu(0, \tau)$  を満たす Bose 場  $\phi_\nu^0(\tau)$  を導入して， $\cos$  に含まれる  $\phi_\nu(0, \tau)$  と取り替えてしまう． $\phi_\nu^0(\tau)$  に課せられた拘束条件は， $\tau$  全体に対する  $\delta$  関数

$$\delta(\phi_\nu(0, \tau) - \phi_\nu^0(\tau)) \propto \int \mathcal{D}\lambda_\nu \exp \left[ \int d\tau \lambda_\nu(\tau) \{ \phi_\nu(0, \tau) - \phi_\nu^0(\tau) \} \right] \quad (2.38)$$

<sup>3)</sup> 虚時間表示の場合は  $\phi_\nu(x, t) \equiv e^{iH_0 t} \phi_\nu(x, 0) e^{-iH_0 t} \xrightarrow{it \rightarrow \tau} e^{H_0 \tau} \phi_\nu(x, 0) e^{-H_0 \tau} \equiv \phi_\nu(x, \tau)$  と書く．

を用いて虚時間作用の中にもめる<sup>4)</sup> .

$$Z = \int \mathcal{D}\phi_\rho \int \mathcal{D}\phi_\sigma \int \mathcal{D}\phi_\rho^0 \int \mathcal{D}\phi_\sigma^0 \times e^{-S_0[\phi_\rho, \phi_\sigma] - \delta S[\phi_\rho^0, \phi_\sigma^0]} \delta(\phi_\rho(0, \tau) - \phi_\rho^0(\tau)) \delta(\phi_\sigma(0, \tau) - \phi_\sigma^0(\tau)) \quad (2.39)$$

$$\propto \int \mathcal{D}\phi_\rho \int \mathcal{D}\phi_\sigma \int \mathcal{D}\phi_\rho^0 \int \mathcal{D}\phi_\sigma^0 \int \mathcal{D}\lambda_\rho \int \mathcal{D}\lambda_\sigma \times \exp \left[ -S_0[\phi_\rho, \phi_\sigma] - \delta S[\phi_\rho^0, \phi_\sigma^0] + \sum_\nu \int d\tau \lambda_\nu(\tau) \{ \phi_\nu(0, \tau) - \phi_\nu^0(\tau) \} \right] \quad (2.40)$$

$$\equiv \int \mathcal{D}\phi_\rho \int \mathcal{D}\phi_\sigma \int \mathcal{D}\phi_\rho^0 \int \mathcal{D}\phi_\sigma^0 \int \mathcal{D}\lambda_\rho \int \mathcal{D}\lambda_\sigma \times e^{-S_0[\phi_\rho, \phi_\sigma] - \delta S[\phi_\rho^0, \phi_\sigma^0] - S_1[\phi_\rho, \phi_\sigma, \phi_\rho^0, \phi_\sigma^0, \lambda_\rho, \lambda_\sigma]} . \quad (2.41)$$

ここで, それぞれの場について Fourier 変換

$$\phi_\nu(x, \tau) = \frac{1}{L\beta} \sum_{q_n} \sum_{\omega_m} \tilde{\phi}_\nu(q_n, \omega_m) e^{iq_n x - i\omega_m \tau} \quad (2.42)$$

$$\phi_\nu^0(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} \tilde{\phi}_\nu^0(\omega_m) e^{-i\omega_m \tau} \quad , \quad \lambda_\nu(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} \tilde{\lambda}_\nu(\omega_m) e^{-i\omega_m \tau} \quad (2.43)$$

$$q_n = \frac{2\pi n}{L} \quad , \quad \omega_m = \frac{2\pi m}{\beta} \quad (n, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (2.44)$$

を施し, 虚時間作用の中で平方の形を作る. まず  $\tilde{\phi}_\nu(q_n, \omega_m)$  については

$$S_0 = \frac{1}{L\beta} \sum_\nu \sum_{q_n} \sum_{\omega_m} \frac{u_\nu^2 q_n^2 + \omega_m^2}{4\pi u_\nu K_\nu} |\tilde{\phi}_\nu(q_n, \omega_m)|^2 \quad (2.45)$$

$$\equiv \frac{1}{L\beta} \sum_\nu \sum_{q_n} \sum_{\omega_m} A_\nu(q_n, \omega_m) |\tilde{\phi}_\nu(q_n, \omega_m)|^2 \quad (2.46)$$

$$S_1 = \frac{1}{\beta} \sum_\nu \sum_{\omega_m} \left[ \frac{1}{L} \sum_{q_n} \left\{ -\frac{1}{2} \tilde{\lambda}_\nu^*(\omega_m) \tilde{\phi}_\nu(q_n, \omega_m) - \frac{1}{2} \tilde{\lambda}_\nu(\omega_m) \tilde{\phi}_\nu^*(q_n, \omega_m) \right\} + \frac{1}{2} \tilde{\lambda}_\nu^*(\omega_m) \tilde{\phi}_\nu^0(\omega_m) + \frac{1}{2} \tilde{\lambda}_\nu(\omega_m) \tilde{\phi}_\nu^{0*}(\omega_m) \right] \quad (2.47)$$

$$S_0 + S_1 = \frac{1}{\beta} \sum_\nu \sum_{\omega_m} \left[ \frac{1}{L} \sum_{q_n} \left\{ A_\nu \left| \tilde{\phi}_\nu - \frac{1}{2A_\nu} \tilde{\lambda}_\nu \right|^2 - \frac{1}{4A_\nu} |\tilde{\lambda}_\nu|^2 \right\} + \frac{1}{2} \tilde{\lambda}_\nu^* \tilde{\phi}_\nu^0 + \frac{1}{2} \tilde{\lambda}_\nu \tilde{\phi}_\nu^{0*} \right] \quad (2.48)$$

となり, Boltzmann 因子の中に  $e^{-A_\nu |\tilde{\phi}_\nu - \tilde{\lambda}_\nu / 2A_\nu|^2 / L\beta}$  が現れる. ゆえに各  $\nu, q_n, \omega_m$  につき  $\tilde{\phi}_\nu(q_n, \omega_m)$  に関する Gauss 積分を行えば, 虚時間作用から  $\tilde{\phi}_\nu(q_n, \omega_m)$  を除くことが

<sup>4)</sup> 正確には実時間  $t$  のときに (2.38) を導入し, それから  $it \rightarrow \tau$  とするので指数の肩の  $i$  が消える.

できる．すると (2.48) で  $q_n$  に依存するのは  $A_\nu(q_n, \omega_m)$  のみになり， $q_n$  に関する和が実行できる．すなわち

$$\frac{1}{L} \sum_{q_n} \frac{1}{4A_\nu(q_n, \omega_m)} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{K_\nu}{2u_\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{q^2 + (\omega_m/u_\nu)^2} = \frac{\pi K_\nu}{2|\omega_m|} \equiv B_\nu(\omega_m). \quad (2.49)$$

さらに  $\tilde{\lambda}_\nu(\omega_m)$  についても同様に平方の形を作り積分を行えば  $\tilde{\phi}_\nu^0(\omega_n)$  が残る．

$$S_0 + S_1 \rightarrow \frac{1}{\beta} \sum_{\nu} \sum_{\omega_m} \left[ -B_\nu |\tilde{\lambda}_\nu|^2 + \frac{1}{2} \tilde{\lambda}_\nu^* \tilde{\phi}_\nu^0 + \frac{1}{2} \tilde{\lambda}_\nu \tilde{\phi}_\nu^{0*} \right] \quad (2.50)$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{\nu} \sum_{\omega_m} \left[ -B_\nu \left| \tilde{\lambda}_\nu - \frac{1}{2B_\nu} \tilde{\phi}_\nu^0 \right|^2 + \frac{1}{4B_\nu} |\tilde{\phi}_\nu^0|^2 \right] \quad (2.51)$$

$$\rightarrow \sum_{\nu} \sum_{\omega_m} \frac{|\omega_n|}{2\pi K_\nu \beta} |\tilde{\phi}_\nu^0|^2. \quad (2.52)$$

よって  $\phi_\nu^0(\tau)$  に関する有効作用

$$S_{\text{eff}} = \sum_{\nu} \sum_{\omega_m} \frac{|\omega_n|}{2\pi K_\nu \beta} |\tilde{\phi}_\nu^0(\omega_m)|^2 - v \int d\tau \cos \phi_\rho^0(\tau) \cos \phi_\sigma^0(\tau) \quad (2.53)$$

が得られる．この形から，朝永-Luttinger 液体で不純物による後方散乱を考慮した場合，その有効作用は不純物の位置での Bose 場  $\phi_\nu^0(\tau)$  のみで表されることがわかる．すなわち，一次元系に敷き詰められた無限個の自由度  $\phi_\nu(x)$  に関する問題が， $\phi_\nu^0(\tau)$  のみで記述されるゼロ次元系の問題に書き換えられたわけである．

後方散乱の強い場合の摂動ハミルトニアン  $\delta H_{\text{tunnel}}$  を用いても有効作用を計算すると，後方散乱が弱い場合の有効作用 (2.53) と同じ形で

$$S_{\text{eff}} = \sum_{\nu} \sum_{\omega_m} \frac{|\omega_n|}{2\pi K_\nu \beta} |\tilde{\vartheta}_\nu^0(\omega_m)|^2 - t \int d\tau \cos \vartheta_\rho^0(\tau) \cos \vartheta_\sigma^0(\tau) \quad (2.54)$$

が得られる．

### 2.3 繰り込み群による解析

前項では，不純物による後方散乱が弱い場合と強い場合についてそれぞれ有効作用を求めたが，それらは

$$\phi_\nu^0 \leftrightarrow \vartheta_\nu^0, \quad K_\nu \leftrightarrow K_\nu^{-1}, \quad v \leftrightarrow t \quad (2.55)$$

なる対応関係のもとで同等であることがわかった．よって以下では前者の場合の有効作用

$$S_{\text{eff}} = \sum_{\nu} \sum_{\omega_m} \frac{|\omega_n|}{2\pi K_\nu \beta} |\tilde{\phi}_\nu(\omega_m)|^2 + v \int d\tau \cos \phi_\rho(\tau) \cos \phi_\sigma(\tau) \quad (2.56)$$

を用いてさらに解析を進める．簡単のため， $x = 0$ における Bose 場  $\phi_\nu^0(\tau)$ ,  $\theta_\nu^0(\tau)$  の添え字 0 は省略した．今，後方散乱が十分弱いので， $v$  に関する摂動を考える．ただし，このとき分配関数

$$Z = \int \mathcal{D}\phi_\rho \int \mathcal{D}\phi_\sigma \times \exp \left[ -\sum_\nu \sum_{\omega_m} \frac{|\omega_n|}{2\pi K_\nu \beta} |\tilde{\phi}_\nu(\omega_m)|^2 - v \int d\tau \cos \phi_\rho(\tau) \cos \phi_\sigma(\tau) \right] \quad (2.57)$$

を  $v$  について展開し，すべての  $\tilde{\phi}_\nu(\omega_n)$  について積分を行うことで各次数の摂動を計算するというわけにはいかない．なぜなら，Bose 場の定義 (2.4)(2.5) からわかるように  $\omega \propto q \rightarrow 0$  では赤外発散が生じるからである．そこで  $\tilde{\phi}_\nu(\omega_n)$  をすべて積分するのではなく，高い周波数の  $\tilde{\phi}(\omega_n)$  から徐々に積分していく繰り込み群の方法を用いる．1 回の繰り込み群変換は系の粗視化と再規格化からなり，粗視化によって得られた系がもとの格子間隔のスケールで見たときにどう変化するかを調べる．今の場合，低エネルギー励起を考えているので  $|\omega_n|$  にはカットオフ  $\Lambda$  が存在し， $\tilde{\phi}_\nu(\omega_n)$  のうち高い周波数の部分  $\tilde{\phi}_\nu(\Lambda' < |\omega_n| < \Lambda)$  ( $\Lambda' \equiv \Lambda - d\Lambda$ ) を積分することが粗視化に対応する．また， $\omega_n$  の幅が  $\Lambda'/\Lambda$  に減少したのに対応して  $\tau$  の格子間隔は  $\Lambda/\Lambda'$  に引き伸ばされる．よって  $\tau$  を  $\Lambda'/\Lambda$  倍して新しい変数  $\tau'$  を考えて元の間隔に戻す必要がある．高周波の成分を分離して

$$\phi_\nu(\tau) = \phi'_\nu(\tau) + h_\nu(\tau) \quad (2.58)$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{|\omega_n| < \Lambda'} \tilde{\phi}'_\nu(\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} + \frac{1}{\beta} \sum_{\Lambda' < |\omega_n| < \Lambda} \tilde{h}_\nu(\omega_n) e^{-\omega_n \tau} \quad (2.59)$$

と表すことにすると分配関数 (2.57) は

$$Z = \int \mathcal{D}\phi'_\rho \int \mathcal{D}\phi'_\sigma \exp \left[ -\sum_\nu \sum_{|\omega_m| < \Lambda'} \frac{|\omega_n|}{2\pi K_\nu \beta} |\tilde{\phi}'_\nu(\omega_m)|^2 + \log \langle e^{-v\Gamma} \rangle_{h_\rho h_\sigma} \right] \quad (2.60)$$

$$\langle X \rangle_{h_\rho h_\sigma} \equiv Z_{h_\rho}^{-1} Z_{h_\sigma}^{-1} \int \mathcal{D}h_\rho \int \mathcal{D}h_\sigma e^{-\sum_\nu \sum_{\Lambda' < |\omega_n| < \Lambda} \frac{|\omega_n|}{2\pi K_\nu \beta} |\tilde{h}_\nu(\omega_n)|^2} X[h_\rho; h_\sigma] \quad (2.61)$$

$$\Gamma[\phi'_\rho; \phi'_\sigma; h_\rho; h_\sigma] \equiv \int d\tau \cos [\phi'_\rho(\tau) + h_\rho(\tau)] \cos [\phi'_\sigma(\tau) + h_\sigma(\tau)] \quad (2.62)$$

となる．ここで  $h_\nu$  は高周波数の成分， $\phi'_\nu$  は繰り込まれた Bose 場である．また  $Z_{h_\nu}$  は自由度  $h_\nu$  に対応する分配関数である．(2.60) の第 1 項は (2.57) で  $\omega_n$  の和の範囲を  $d\Lambda = \Lambda - \Lambda'$  だけ縮めた形をしているので  $\log \langle e^{-v\Gamma} \rangle_{h_\rho h_\sigma}$  が粗視化後のポテンシャル項である． $v$  が小さい場合を考えているので，この項を  $v$  に関して

$$\log \langle e^{-v\Gamma} \rangle_{h_\rho h_\sigma} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_n}{n!} (-v)^n \quad (2.63)$$



と展開したとき，キュムラント  $C_n$  は

$$C_1 = \langle \Gamma \rangle_{h_\rho h_\sigma} \quad (2.64)$$

$$C_2 = \langle \Gamma^2 \rangle_{h_\rho h_\sigma} - \langle \Gamma \rangle_{h_\rho h_\sigma}^2 \quad (2.65)$$

$$C_3 = \langle \Gamma^3 \rangle_{h_\rho h_\sigma} - 3\langle \Gamma^2 \rangle_{h_\rho h_\sigma} \langle \Gamma \rangle_{h_\rho h_\sigma} + 2\langle \Gamma \rangle_{h_\rho h_\sigma}^3 \quad (2.66)$$

...

のように  $n$  次以下のモーメント  $\langle \Gamma^n \rangle_{h_\rho h_\sigma}$ ,  $\langle \Gamma^{n-1} \rangle_{h_\rho h_\sigma}$ ,  $\dots$ ,  $\langle \Gamma \rangle_{h_\rho h_\sigma}$  を用いて表される．ゆえに  $\nu$  に関して 2 次までの摂動を考えることにすると， $\langle \Gamma \rangle_{h_\rho h_\sigma}$  と  $\langle \Gamma^2 \rangle_{h_\rho h_\sigma}$  が必要である．まず  $\langle \Gamma \rangle_{h_\rho h_\sigma}$  については (2.62) で  $\cos$  の加法定理を用いて

$$\begin{aligned} \langle \Gamma \rangle_{h_\rho h_\sigma} &= \int d\tau [\cos \phi'_\rho(\tau) \langle \cos h_\rho(\tau) \rangle_{h_\rho} - \sin \phi'_\rho(\tau) \langle \sin h_\rho(\tau) \rangle_{h_\rho}] \\ &\quad \times [\cos \phi'_\sigma(\tau) \langle \cos h_\sigma(\tau) \rangle_{h_\sigma} - \sin \phi'_\sigma(\tau) \langle \sin h_\sigma(\tau) \rangle_{h_\sigma}] \end{aligned} \quad (2.67)$$

と変形できる．ガウシアン平均の定義 (2.61) から， $\langle \{h_\nu(\tau)\}^{n_0} \rangle_{h_\nu}$  に Wick の定理を用いることができる．また  $n_0$  が奇数の場合は期待値が 0 になる．よって

$$\langle \cos h_\nu(\tau) \rangle_{h_\nu} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \times (2n-1)!! \{ \langle [h_\nu(\tau)]^2 \rangle_{h_\nu} \}^n \equiv e^{-\frac{1}{2}G_\nu(0)} \quad (2.68)$$

$$\langle \sin h_\nu(\tau) \rangle_{h_\nu} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \times 0 = 0 \quad (2.69)$$

のように  $\langle \sin h_\nu(\tau) \rangle_{h_\nu}$  の項は落ちる<sup>5)</sup>．ここで 2 点相関関数

$$G_\nu(\tau - \tau') \equiv \langle h_\nu(\tau) h_\nu(\tau') \rangle_{h_\nu} \quad (2.70)$$

を導入した． $h_\nu(\tau)$  を Fourier 変換し  $\tilde{h}_\nu^*(\omega_n) = \tilde{h}_\nu(-\omega_n)$  であること<sup>6)</sup> に注意すれば  $G_\nu(0)$  が計算できて

$$\begin{aligned} G_\nu(0) &= Z_{h_\nu}^{-1} \int \mathcal{D}h_\nu e^{-\sum_{\Lambda' < |\omega_n| < \Lambda} \frac{|\omega_n|}{2\pi K_\nu \beta} |\tilde{h}_\nu(\omega_n)|^2} \\ &\quad \times \frac{1}{\beta^2} \sum_{\Lambda' < |\omega_n| < \Lambda} |\tilde{h}_\nu(\omega_n)|^2 \end{aligned} \quad (2.71)$$

$$= \frac{1}{\beta^2} \sum_{\Lambda' < \omega_n < \Lambda} \frac{2\pi K_\nu \beta}{\omega_n} \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} K_\nu \log \frac{\Lambda}{\Lambda'} \quad (2.72)$$

となり，1 次のモーメント

$$\langle \Gamma \rangle_{h_\rho h_\sigma} = \int d\tau \cos \phi'_\rho(\tau) \cos \phi'_\sigma(\tau) e^{-\frac{1}{2}(K_\rho + K_\sigma) \log(\Lambda/\Lambda')} \quad (2.73)$$

$$= \left( \frac{\Lambda'}{\Lambda} \right)^{\frac{1}{2}(K_\rho + K_\sigma)} \int d\tau \cos \phi'_\rho(\tau) \cos \phi'_\sigma(\tau) \quad (2.74)$$

<sup>5)</sup> 因子  $(2n-1)!! = (2n-1)(2n-3)(2n-5)\dots 5 \cdot 3 \cdot 1 = (2n)!/2^n n!$  は  $h_\nu(\tau)$  のペアを作る場合の数．

<sup>6)</sup>  $\tilde{h}_\nu(\omega_n)$  の実部と虚部を経路積分の変数として用いると  $\omega_n$  の範囲がもとの半分になる．

が得られる．次に  $\langle \Gamma^2 \rangle_{h_\rho h_\sigma}$  についても同様に計算すると

$$\begin{aligned} \langle \Gamma^2 \rangle_{h_\rho h_\sigma} &= \int d\tau \int d\tau' \langle \cos [\phi'_\rho(\tau) + h_\rho(\tau)] \cos [\phi'_\rho(\tau') + h_\rho(\tau')] \rangle_{h_\rho} \\ &\quad \times \langle \cos [\phi'_\sigma(\tau) + h_\sigma(\tau)] \cos [\phi'_\sigma(\tau') + h_\sigma(\tau')] \rangle_{h_\sigma} \end{aligned} \quad (2.75)$$

$$\langle \cos [\phi'_\nu(\tau) + h_\nu(\tau)] \cos [\phi'_\nu(\tau') + h_\nu(\tau')] \rangle_{h_\nu} \quad (2.76)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \langle \cos [\phi'_\nu(\tau) + \phi'_\nu(\tau') + h_\nu(\tau) + h_\nu(\tau')] \\ &\quad + \cos [\phi'_\nu(\tau) - \phi'_\nu(\tau') + h_\nu(\tau) - h_\nu(\tau')] \rangle_{h_\nu} \end{aligned} \quad (2.77)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} [\cos \{\phi'_\nu(\tau) + \phi'_\nu(\tau')\} \langle \cos \{h_\nu(\tau) + h_\nu(\tau')\} \rangle_{h_\nu} \\ &\quad + \cos \{\phi'_\nu(\tau) - \phi'_\nu(\tau')\} \langle \cos \{h_\nu(\tau) - h_\nu(\tau')\} \rangle_{h_\nu}] \end{aligned} \quad (2.78)$$

$$\langle \cos [h_\nu(\tau) \pm h_\nu(\tau')] \rangle_{h_\nu} = \exp \left[ -\frac{1}{2} [h_\nu(\tau) \pm h_\nu(\tau')]^2 \right] = e^{-G_\nu(0) \mp G_\nu(\tau-\tau')} \quad (2.79)$$

となるので，2次のモーメント

$$\begin{aligned} \langle \Gamma^2 \rangle_{h_\rho h_\sigma} &= \frac{1}{4} e^{-G_\rho(0) - G_\sigma(0)} \int d\tau \int d\tau' \\ &\quad \times [\cos \{\phi'_\rho(\tau) + \phi'_\rho(\tau')\} e^{-G_\rho(\tau-\tau')} + \cos \{\phi'_\rho(\tau) - \phi'_\rho(\tau')\} e^{G_\rho(\tau-\tau')}] \\ &\quad \times [\cos \{\phi'_\sigma(\tau) + \phi'_\sigma(\tau')\} e^{-G_\sigma(\tau-\tau')} + \cos \{\phi'_\sigma(\tau) - \phi'_\sigma(\tau')\} e^{G_\sigma(\tau-\tau')}] \end{aligned} \quad (2.80)$$

も得られる．(2.74) と (2.80) の結果から， $dl \equiv -d\Lambda/\Lambda$  として繰り込み群方程式は

$$\frac{dv}{dl} = \left[ 1 - \frac{1}{2}(K_\rho + K_\sigma) \right] v \quad (2.81)$$

$$\frac{dv_\rho}{dl} = (1 - 2K_\rho)v_\rho \quad , \quad \frac{dv_\sigma}{dl} = (1 - 2K_\sigma)v_\sigma \quad (2.82)$$

となる．ただし (2.80) は，もとの有効作用には含まれない高次の過程に対応しているため，それに対応する散乱ポテンシャルの高さを  $v_\rho$ ,  $v_\sigma$  で表した．それぞれ電荷およびスピンの自由度についての不純物による後方散乱に対応する．

同様に，不純物による後方散乱が強い極限に対応する繰り込み群方程式は，(2.81)(2.82) に (2.55) の変換を施すことにより

$$\frac{dt}{dl} = \left[ 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{K_\rho} + \frac{1}{K_\sigma} \right) \right] t \quad (2.83)$$

$$\frac{dt_\rho}{dl} = \left[ 1 - \frac{2}{K_\rho} \right] t_\rho \quad , \quad \frac{dt_\sigma}{dl} = \left[ 1 - \frac{2}{K_\sigma} \right] t_\sigma \quad (2.84)$$

となる． $t_\rho$ ,  $t_\sigma$  はそれぞれ電荷およびスピンの自由度の高次の透過の過程に対応する．

以上の繰り込み群方程式を相図にして表したのが図 2.1, 2.2 である．不純物の位置を通過するコンダクタンスの繰り込まれかたに従って，領域 I~IV と呼ぶことにした．それぞれの領域は

- I: 電荷とスピンの自由度について，ともに絶縁
- II: 電荷の自由度は完全伝導，スピンの自由度は絶縁
- III: 電荷の自由度は絶縁，スピンの自由度は完全伝導
- IV: 電荷とスピンの自由度について，ともに完全伝導

を意味している．このように，朝永-Luttinger 液体における不純物問題では，不純物による後方散乱の強弱によって相境界が変化することが特徴的である．

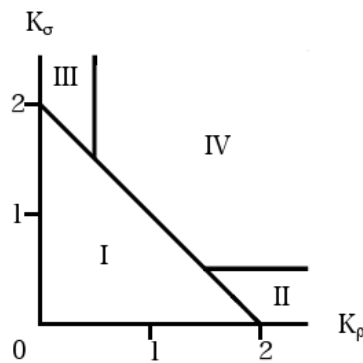


図 2.1 不純物散乱が弱いときの相図

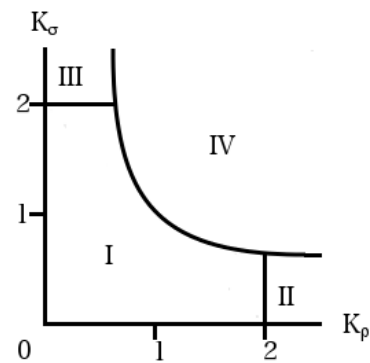


図 2.2 不純物散乱が強いときの相図

## 2.4 関連する話題

前節で解析した有効作用 (2.56) の第 1 項は，量子散逸系における Caldeira-Leggett 模型の散逸項と同じ形をしている．朝永-Luttinger 液体における不純物問題を量子散逸系の観点から解釈すると，(2.56) に現れる不純物の位置の Bose 場  $\phi_\nu(\tau)$  は，補助場  $\lambda_\nu(\tau)$  を介して熱浴  $\{\phi_\nu(x \neq 0, \tau)\}$  と相互作用する巨視的な変数である．熱浴とのエネルギー授受が  $\phi_\nu(\tau)$  に対する摩擦として働き，巨視的には一次元系のコンダクタンスの変化として観測される．この節では量子散逸系における Caldeira-Leggett 模型の基本事項まとめ，さらに周期ポテンシャルの存在する量子散逸系として RSJ 模型を取り上げる．

### 2.4.1 量子散逸系

質量  $M$  の質点が時刻  $t$  に位置  $X(t)$  にあるとして，この質点がポテンシャル  $V$  と摩擦を受ける場合の運動を考える．摩擦は質点の速度に比例すると仮定して摩擦係数を  $\eta$  と表

すと， $X(t)$  の運動方程式は

$$M\ddot{X}(t) + \eta\dot{X}(t) + V'(X) = 0 \quad (2.85)$$

と書ける．この方程式では摩擦によって質点が失ったエネルギーの行き先が不明であり，この系を完全に記述するにはその行き先に関する情報も含める必要がある．Caldeira と Leggett は，散逸したエネルギーの受取手として無限個の調和振動子を仮定し，ラグランジアン

$$L = \frac{M}{2}\dot{X}^2 - V(X) + \sum_i \left[ \frac{m_i}{2}\dot{x}_i^2 - \frac{m_i\omega_i^2}{2}x_i^2 - c_i x_i X \right] \quad (2.86)$$

から (2.85) の運動方程式が導けることを示した [7][8]．ここで  $m_i, x_i, \omega_i$  は，それぞれ  $i$  番目の振動子の質量，位置，および振動数を表す． $[\dots]$  内の最後の項は振動子と質点との相互作用を表し，その強さを  $c_i$  とした．(2.86) から (2.85) を導くには，まず  $X, x_i$  に関する Euler-Lagrange の運動方程式から

$$M\ddot{X} + V'(X) + \sum_i c_i x_i = 0 \quad , \quad m_i\ddot{x}_i + m_i\omega_i^2 x_i + c_i X = 0 \quad (2.87)$$

を得る．第 2 式の Fourier 変換から

$$\tilde{x}_i(\omega) = \int dt x_i(t) e^{i\omega t} = \frac{c_i \tilde{X}(\omega)}{m_i(\omega^2 - \omega_i^2)} \simeq \frac{c_i}{2m_i\omega_i} \frac{\tilde{X}(\omega)}{\omega - \omega_i + i\epsilon} \quad (\epsilon \rightarrow +0) \quad (2.88)$$

となるので，これを (2.87) の第 1 式に代入すれば  $X$  の運動方程式が得られる．運動方程式 (2.85) との比較から，(2.87) の第 3 項の Fourier 変換の虚部が摩擦項に対応する．したがって

$$\text{Im} \sum_i c_i \tilde{x}_i = -i \int \frac{d\omega}{2\pi} \left[ \frac{\pi}{2} \sum_i \frac{c_i^2}{m_i\omega_i} \delta(\omega - \omega_i) \right] \tilde{X}(\omega) e^{-i\omega t} \quad (2.89)$$

$$\equiv -i \int d\omega J(\omega) \tilde{X}(\omega) e^{-i\omega t} . \quad (2.90)$$

ここで導入したスペクトル関数  $J(\omega)$  が  $\omega$  に比例する形で

$$J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_i \frac{c_i^2}{m_i\omega_i} \delta(\omega - \omega_i) \rightarrow \eta\omega \quad (2.91)$$

と表せるように  $m_i, \omega_i, c_i$  が調節できたとすると，確かに (2.85) が得られる．とくに  $J(\omega) = \eta\omega$  の場合をオーミック散逸と呼ぶ．

次に，Caldeira-Leggett 模型のラグランジアン (2.86) を用いて有効作用を計算する．手順は 2.2.2 と同様で，分配関数を経路積分で表して，Boltzmann 因子の肩に現れる 2 次

の項を経路に関する Gauss 積分で消していく．まず虚時間表示の作用

$$S = S_0 + S_1 \quad (2.92)$$

$$S_0 = \int d\tau \left[ \frac{M}{2} \left( \frac{dX}{d\tau} \right)^2 + V(X) \right] \quad (2.93)$$

$$S_1 = \int d\tau \sum_i \left[ \frac{m_i}{2} \left( \frac{dx_i}{d\tau} \right)^2 + \frac{m_i \omega_i^2}{2} x_i^2 + c_i x_i X \right] \quad (2.94)$$

を用いて分配関数は

$$Z = \int \mathcal{D}X \int \mathcal{D}\{x_i\} e^{-S_0[X] - S_1[X, \{x_i\}]} = \int \mathcal{D}X e^{-S_0[X]} \int \mathcal{D}\{x_i\} e^{-S_1[X, \{x_i\}]} \quad (2.95)$$

と表せる．ただし  $\tau = \beta$  において周期的境界条件  $X(\beta) = X(0)$ ,  $x_i(\beta) = x_i(0)$  が課してあるものとする．次に  $S_1$  で  $x_i$ ,  $X$  を Fourier 変換し,  $x_i$  について平方の形を作れば

$$S_1 = \frac{1}{2\beta} \sum_i \sum_{\omega_n} [A_i(\omega_n) |\tilde{x}_i(\omega_n)|^2 + c_i \{ \tilde{x}_i^*(\omega_n) \tilde{X}(\omega_n) + \tilde{x}_i(\omega_n) \tilde{X}^*(\omega_n) \}] \quad (2.96)$$

$$A_i(\omega_n) \equiv m_i(\omega_n^2 + \omega_i^2) \quad (2.97)$$

$$= \frac{1}{2\beta} \sum_i \sum_{\omega_n} \left[ A_i \left| \tilde{x}_i + \frac{c_i}{A_i} \tilde{X} \right|^2 - \frac{c_i^2}{A_i} |\tilde{X}|^2 \right] \quad (2.98)$$

となるので,  $\tilde{x}_i$  に関して Gauss 積分が実行できる．その結果,  $X$  に関する有効作用が

$$Z = \int \mathcal{D}X e^{-S_{\text{eff}}[X]} \quad (2.99)$$

$$S_{\text{eff}} = S_0 - \frac{1}{2\beta} \sum_i \sum_{\omega_n} \frac{c_i^2}{m_i(\omega_n^2 + \omega_i^2)} |\tilde{X}(\omega_n)|^2 \quad (2.100)$$

$$= S_0 - \frac{1}{2\beta} \sum_i \frac{c_i^2}{m_i} \int d\tau \int d\tau' \left[ \sum_{\omega_n} \frac{e^{i\omega_n(\tau-\tau')}}{\omega_n^2 + \omega_i^2} \right] X(\tau) X(\tau') \quad (2.101)$$

のように得られる．[...] は公式<sup>7)</sup>を用いて

$$[\dots] = \frac{\beta}{2\omega_i} \frac{\cosh[\omega_i(|\tau - \tau'| - \beta/2)]}{\sinh(\beta\omega_i/2)} = \frac{\beta}{2\omega_i} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\omega_i|\tau-\tau'-n\beta|} \quad (2.102)$$

と計算できるので, (2.101) はさらに

$$S_{\text{eff}} = S_0 - \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \left[ \sum_i \frac{c_i^2}{4m_i\omega_i} e^{-\omega_i|\tau-\tau'|} \right] X(\tau) X(\tau') \quad (2.103)$$

$$= S_0 - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) e^{-\omega|\tau-\tau'|} X(\tau) X(\tau') \quad (2.104)$$

7)  $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos nx}{n^2+a^2} = \frac{\pi}{2a} \frac{\cosh[a(\pi-x)]}{\sinh a\pi} - \frac{1}{2a^2}$  .

と変形できる．ここで再びオーミック散逸  $J(\omega) = \eta\omega$  の場合を考えると

$$S_{\text{eff}} = S_0 - \frac{\eta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \int_0^{\infty} d\omega \omega e^{-\omega|\tau-\tau'|} X(\tau) X(\tau') \quad (2.105)$$

$$= S_0 - \frac{\eta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \frac{X(\tau) X(\tau')}{|\tau - \tau'|^2} \quad (2.106)$$

$$= S_0 + \frac{\eta}{2\beta} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\omega_n} |\omega_n| e^{i\omega_n(\tau-\tau')} X(\tau) X(\tau') \quad (2.107)$$

$$= \int d\tau \left[ \frac{M}{2} \left( \frac{dX}{d\tau} \right)^2 + V(X) \right] + \frac{\eta}{2\beta} \sum_{\omega_n} |\omega_n| |\tilde{X}(\omega_n)|^2 \quad (2.108)$$

となる<sup>8)</sup>．最後の行の第2項は質点から熱浴へのエネルギー散逸を表す項であるが，同時に(2.56)の有効作用の第1項と同じ形をしている．すなわち，朝永-Luttinger 液体における不純物問題とは，周期ポテンシャルの中で  $K_{\nu}^{-1}$  に比例する摩擦を受ける，質量ゼロの Bose 場  $\phi_{\nu}(\tau)$  の運動を調べることに他ならない．ただし2つの Bose 場  $\phi_{\rho}(\tau)$ ,  $\phi_{\sigma}(\tau)$  はポテンシャル項を介し， $\cos \phi_{\rho}(\tau) \cos \phi_{\sigma}(\tau)$  の形で相互作用しているところがこの模型の特殊な点である．

## 2.4.2 RSJ 模型

10 程度の厚さの絶縁皮膜を2つの超伝導体で挟んだ系を考える．2つの超伝導体の秩序パラメータの位相が異なる場合，位相差  $\theta$  をゼロするような電流が流れることが知られている．この系を Josephson 接合と呼び，また流れる電流

$$I(t) = 2eE_J \sin \theta(t) \quad (2.109)$$

を Josephson 電流と呼ぶ． $E_J$  は Josephson 電流によって接合が持つエネルギーの大きさを表す量である．位相差  $\theta$  は接合にかけられた電圧  $V$  に由来し，両者には

$$\dot{\theta}(t) = 2eV(t) \quad (2.110)$$

の関係がある．このとき  $\theta$  に関する運動方程式を求めることを考える．Josephson 接合に電圧をかけた場合，準粒子など影響のため抵抗が発生する．また接合面はコンデンサの働きもするので静電容量を持つ．RSJ 模型<sup>9)</sup>では接合自身が持つ抵抗と静電容量を Josephson 接合から切り離して考え，コンデンサ，抵抗器，および抵抗や静電容量のない Josephson 接合を並列につないだ回路を等価回路として用いる．今，この回路に流れ込む

8)  $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(x+2\pi n)^2} = \frac{1}{4} \frac{1}{\sin^2(x/2)} = -\sum_{n=1}^{\infty} n \cos nx$

9) Resistivity shunted junction model. 脇にそらした抵抗器あるいはその抵抗値をシャント抵抗と呼ぶ．

電流をゼロとした場合，電流の保存の式は

$$C\dot{V}(t) + \frac{V(t)}{R_S} + \frac{2eE_J}{\hbar} \sin \theta(t) = 0 \quad (2.111)$$

と表すことができる． $C$ ,  $R_S$  はそれぞれ等価回路の静電容量およびシャント抵抗である．これに (2.110) を代入して  $V$  を消去すると

$$\frac{1}{8E_C} \ddot{\theta}(t) + \frac{\alpha}{2\pi} \dot{\theta}(t) + E_J \sin \theta(t) = 0 \quad , \quad \alpha \equiv \frac{R_Q}{R_S} \quad (2.112)$$

となる． $E_C \equiv e^2/2C$  はコンデンサの静電エネルギー， $R_Q = h/4e^2$  は量子抵抗である．(2.112) の運動方程式において

$$\theta \rightarrow X \quad , \quad \frac{1}{8E_C} \rightarrow M \quad , \quad \frac{\alpha}{2\pi} \rightarrow \eta \quad , \quad -E_J \cos \theta \rightarrow V(X) \quad (2.113)$$

の置き換えを行うと，散逸系の運動方程式 (2.85) が得られることがわかる．よって RSJ 模型は  $\cos$  型の周期ポテンシャルを持った  $\theta(\tau)$  に関する量子散逸系として考えることができる． $\theta(\tau)$  に関する有効作用は，(2.108) に対して逆の置き換えを行うことで

$$S_{\text{eff}} = \int d\tau \left[ \frac{1}{16E_C} \left( \frac{d\theta}{d\tau} \right)^2 - E_J \cos \theta(\tau) \right] + \frac{\alpha}{4\pi\beta} \sum_{\omega_n} |\omega_n| |\tilde{\theta}(\omega_n)|^2 \quad (2.114)$$

のように得られる．これは朝永-Luttinger 液体における不純物問題の有効作用 (2.56) について片方の Bose 場を一定とし，運動項による高エネルギーのカットオフを要請したものと考えることができるので， $E_J$  が小さい極限と大きい極限では 2.3 のときと同様に扱うことができる [9]．ただし Bose 場が 1 つだけなので繰り込み群の相図はずっと単純なものになる．すなわち  $T \rightarrow 0$  としたとき，周期ポテンシャルの高さ  $E_J$  は， $\alpha < 0$  のときには 0 に繰り込まれ，一方  $\alpha > 0$  のときには  $\infty$  に繰り込まれる．RSJ 模型の観点から考えると，前者の場合は  $\theta(\tau)$  が非局在化して抵抗が増大し，後者の場合は  $\theta(\tau)$  が局在化して位相がそろい，超伝導になる<sup>10)</sup>．

RSJ 模型のような周期ポテンシャルを持つ系では，低温でポテンシャルの谷の間をトンネルするキंक構造を持つ経路が優勢になるため，局所更新を用いた従来の経路積分モンテカルル口法でこのような系を扱うことは困難であった [10]．Werner と Troyer は，キंक構造をを持つ経路を効率的に生成するクラスター更新の方法を用いてこの困難を克服し，局在-非局在転移を精度よく観測することに成功した [3]．

<sup>10)</sup> RSJ 模型では (2.110) のように  $\dot{\theta}(\tau)$  が電圧に比例するのに対し，朝永-Luttinger 液体では (2.29) のように  $\dot{\phi}_\nu(\tau)$  が電流に比例する．したがって後者の場合は  $\dot{\phi}_\nu(\tau)$  の非局在化が超伝導，局在化が抵抗の増大に対応する．

## 第 3 章

# 経路積分モンテカルロ法による数値シミュレーション

計算機を用いて系の熱力学的性質を調べる手段の1つとしてモンテカルロ法がある．この方法では系を数値的にシミュレートし，ランダムに生成した系の状態における物理量を直接観測することで，その熱力学平均を求めることができる．以下で述べるように，系の状態が定常分布の中からエルゴード的に選ばれるならば，このようなシミュレーションは原理的に可能である．ただし，状態を生成する方法は任意に選ぶ必要があるため，有限の回数でエルゴード的な観測を行うには，状況に応じた適当な方法を採用する必要がある．

本研究では経路積分モンテカルロ法を用いて (2.56) の有効作用

$$S_{\text{eff}} = \sum_{\nu} \sum_{\omega_m} \frac{|\omega_n|}{2\pi K_{\nu} \beta} |\tilde{\phi}_{\nu}(\omega_n)|^2 + v \int_0^{\beta} d\tau \cos \phi_{\rho}(\tau) \cos \phi_{\sigma}(\tau) \quad (3.1)$$

で記述される系のシミュレーションを行う．これは 2.4.2 の RSJ 模型と似た形をしているため，RSJ 模型で行われたモンテカルロシミュレーション [3][10] の手法が応用できると考えられる．

この章では経路積分モンテカルロ法の基本事項をまとめ，本研究で用いた数値シミュレーションの手法を説明する．

### 3.1 経路積分モンテカルロ法

物理量  $A$  の熱力学平均  $\langle A \rangle$  を求めるには，系の取り得る状態に関して  $A$  と Boltzmann 因子の積のトレースをとればよい．とくに系が (3.1) のように虚時間表示の経路  $\phi_{\nu}(\tau)$  の作用汎関数で記述されている場合，Boltzmann 因子は  $e^{-S_{\text{eff}}[\phi_{\rho}, \phi_{\sigma}]}$  となり，またトレ-



スは  $\phi_\nu(\tau)$  に関する経路積分で表される．よって分配関数および  $A$  の熱力学平均は

$$Z = \int \mathcal{D}\phi_\rho \int \mathcal{D}\phi_\sigma e^{-S_{\text{eff}}[\phi_\rho, \phi_\sigma]} \quad (3.2)$$

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \int \mathcal{D}\phi_\rho \int \mathcal{D}\phi_\sigma e^{-S_{\text{eff}}[\phi_\rho, \phi_\sigma]} A[\phi_\rho, \phi_\sigma] \quad (3.3)$$

で与えられる．ただし，経路には  $\phi_\nu(\beta) = \phi_\nu(0)$  の周期的境界条件が課されているものとする．(3.3) によると，2本の経路  $\phi_\rho(\tau), \phi_\sigma(\tau)$  で表されるすべての状態について  $A$  を観測すれば  $\langle A \rangle$  が求まるが， $\phi_\nu(\tau)$  は連続変数なので状態は無限個存在する．しかし数値シミュレーションで無限個の状態を網羅するのは不可能である．そこでモンテカルロ法では，代わりにランダムに生成した有限の  $m$  個の状態に関するアンサンブル平均

$$\langle A \rangle \simeq Z^{-1} \sum_{\phi_\rho, \phi_\sigma} e^{-S_{\text{eff}}[\phi_\rho, \phi_\sigma]} A[\phi_\rho, \phi_\sigma] \quad , \quad Z \simeq \sum_{\phi_\rho, \phi_\sigma} e^{-S_{\text{eff}}[\phi_\rho, \phi_\sigma]} \quad (3.4)$$

によって  $\langle A \rangle$  を近似する．生成される状態の分布が十分エルゴード的であるならば，観測数  $m$  が大きいほど近似の精度は増す．モンテカルロ法にはいくつか種類があるが，(3.2)~(3.4) のように経路に関してトレースをとる場合を，とくに経路積分モンテカルロ法と呼ぶ．

(3.4) の近似を採用する場合，有限の  $m$  に対して近似の精度を上げるためにはいくつか工夫が必要である．もっとも基本的な工夫としては，Boltzmann 因子  $e^{-S_{\text{eff}}[\phi_\rho, \phi_\sigma]}$  を状態  $\phi_\rho(\tau), \phi_\sigma(\tau)$  の生成確率とみなす方法が考えられる．仮に状態を一様分布から生成させたとすると，高エネルギーの状態の多くは因子  $e^{-S_{\text{eff}}[\phi_\rho, \phi_\sigma]}$  のために和にはあまり寄与しない．そこで  $e^{-S_{\text{eff}}[\phi_\rho, \phi_\sigma]}$  で重みを付けた分布に従って状態を生成し

$$\langle A \rangle \simeq Z^{-1} \sum'_{\phi_\rho, \phi_\sigma} A[\phi_\rho, \phi_\sigma] \quad (3.5)$$

を計算すれば，(3.4) よりも和に寄与する状態が増えて効率的である．ここで  $\sum'$  は  $e^{-S_{\text{eff}}[\phi_\rho, \phi_\sigma]}$  の確率で状態を生成した  $m$  個の状態に関する和を表す．ある定常分布に従って状態を生成するには，詳細釣り合いの条件<sup>1)</sup>

$$W(i \rightarrow j) P(i) = W(j \rightarrow i) P(j) \quad (3.6)$$

を満たすマルコフ過程<sup>2)</sup> によって状態を次々に更新していけばよい．ここで  $W(i \rightarrow j)$  は状態  $i$  から状態  $j$  への更新確率， $P(i)$  はこの定常分布における状態  $i$  の実現確率で，今

<sup>1)</sup> 緩い条件  $\sum_{ij} W(i \rightarrow j) P(i) = \sum_{ij} W(j \rightarrow i) P(j)$  でも目的は達成できるが，より強い条件 (3.6) を課した方が実用上便利である．

<sup>2)</sup> 状態の発展の仕方として，ある状態が直前の状態の情報だけに基づいて生成される過程．

の場合  $e^{-S_{\text{eff}}[\phi_\rho, \phi_\sigma]}$  に等しい．したがって  $\phi_\nu^{(\text{old})}(\tau) \rightarrow \phi_\nu^{(\text{new})}(\tau)$  の遷移に対して (3.6) は

$$\frac{W(\phi_\nu^{(\text{old})}(\tau) \rightarrow \phi_\nu^{(\text{new})}(\tau))}{W(\phi_\nu^{(\text{new})}(\tau) \rightarrow \phi_\nu^{(\text{old})}(\tau))} = e^{S_{\text{eff}}^{(\text{old})}[\phi_\rho, \phi_\sigma] - S_{\text{eff}}^{(\text{new})}[\phi_\rho, \phi_\sigma]} \quad (3.7)$$

となる．これは更新確率の比に対する条件しか与えないので，更新確率そのものはこの条件を満たす範囲で自由に決められる．通常は Metropolis 法と呼ばれる

$$W(\phi_\nu^{(\text{old})}(\tau) \rightarrow \phi_\nu^{(\text{new})}(\tau)) = \min\{1, e^{S_{\text{eff}}^{(\text{old})}[\phi_\rho, \phi_\sigma] - S_{\text{eff}}^{(\text{new})}[\phi_\rho, \phi_\sigma]}\} \quad (3.8)$$

の形を採用することが多い．また新しい状態を生成するアルゴリズムは任意であるが，それによって状態が更新されていく過程はエルゴード的である必要がある．つまり，有限の  $n$  回の更新の間に  $\phi_\rho(\tau), \phi_\sigma(\tau)$  が様々な状態を経験しなければならない．とくに相転移点の近くでは単純な更新の仕方だけでは，有限の計算時間内で有効的にエルゴード性を満たさなくなることもあり，例えばクラスター更新の方法のような特別な工夫が必要になる [3]．

## 3.2 虚時間方向の離散化と離散 Fourier 変換

この節では数値シミュレーションのための準備として，(3.1) の有効作用を離散的な表示に書き換える．まず虚時間方向の長さ  $\beta$  を  $N$  等分して  $\tau$  に関する積分を和で近似する．このとき虚時間の最小単位は有限の  $\Delta\tau = \beta/N$  となるが，これは  $\omega_n$  に  $\Delta\tau^{-1}$  程度のカットオフを与えたことに相当する．離散化された虚時間  $\tau_j \equiv j \Delta\tau$  の各  $j$  に対応する Bose 場を

$$\phi_{\nu j} \equiv \phi_\nu(\tau_j) \quad (j = 0, 1, 2, \dots, N-1) \quad (3.9)$$

と表すことにし， $\phi_{\nu j}$  の離散 Fourier 変換を

$$\phi_{\nu j} \equiv \frac{1}{N} \sum_{n=-N/2+1}^{N/2} \tilde{\phi}_{\nu n} e^{-\frac{2\pi i}{N} j n} \quad (\tilde{\phi}_{\nu, -n} = \tilde{\phi}_{\nu n}) \quad (3.10)$$

で定義する．このとき，もとの Fourier 変換の定義 (2.43) とは  $\tilde{\phi}_{\nu n} = \tilde{\phi}(\omega_n)/\Delta\tau$  の対応がある．以上の準備をもとに (3.1) を書き換えると

$$S_{\text{eff}} \simeq \sum_{\nu} \sum_{k=-N/2+1}^{N/2} \frac{|k|}{K_{\nu} N^2} |\tilde{\phi}_{\nu k}|^2 + v \Delta\tau \sum_{j=0}^{N-1} \cos \phi_{\rho j} \cos \phi_{\sigma j} \quad (3.11)$$

$$= \sum_{\nu} \left[ \frac{1}{2K_{\nu} N} |\tilde{\phi}_{\nu, N/2}|^2 + \sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{2k}{K_{\nu} N^2} |\tilde{\phi}_{\nu k}|^2 \right] + v \Delta\tau \sum_{j=0}^{N-1} \cos \phi_{\rho j} \cos \phi_{\sigma j} \quad (3.12)$$

となる．これらの表式は  $\phi_{\nu j}$  と  $\tilde{\phi}_{\nu n}$  の混在した形をしているが，実際は  $\phi_{\nu j}$  のみで表すことも可能である．まず (3.1) に戻って右辺の第1項を  $S_0$  と置き， $\tilde{\phi}_{\nu}(\omega_n)$  を逆 Fourier 変換すると

$$S_0 = \sum_{\nu} \frac{1}{K_{\nu}\beta^2} \int d\tau \int d\tau' \left[ \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n| e^{i\omega_n(\tau-\tau')} \right] \phi_{\nu}(\tau) \phi_{\nu}(\tau') \quad (3.13)$$

$$= - \sum_{\nu} \frac{1}{2K_{\nu}\beta^2} \int d\tau \int d\tau' \frac{\phi_{\nu}(\tau) \phi_{\nu}(\tau')}{\sin^2 \left[ \frac{\pi}{\beta}(\tau - \tau') \right]} \quad (3.14)$$

となる．ここで

$$\frac{1}{2K_{\nu}\beta^2} \int d\tau \int d\tau' \frac{[\phi_{\nu}(\tau)]^2}{\sin^2 \left[ \frac{\pi}{\beta}(\tau - \tau') \right]} = - \sum_{\omega_n} \frac{|\omega_n|}{2\pi K_{\nu}} \int d\tau [\phi_{\nu}(\tau)]^2 e^{i\omega_n\tau} \delta_{\omega_n,0} \quad (3.15)$$

$$= 0 \quad (3.16)$$

であることに注意すると，(3.14) は

$$S_0 = \sum_{\nu} \frac{1}{4K_{\nu}\beta^2} \int d\tau \int d\tau' \frac{[\phi_{\nu}(\tau) - \phi_{\nu}(\tau')]^2}{\sin^2 \left[ \frac{\pi}{\beta}(\tau - \tau') \right]} \quad (3.17)$$

と表すこともできる．(3.14) あるいは (3.17) は，異なる  $\tau$  における  $\phi_{\nu}(\tau)$  間での長距離相互作用を表している．最後に (3.14) の形を用いて  $S_{\text{eff}}$  を  $\phi_{\nu j}$  で表すと

$$S_{\text{eff}} = - \sum_{\nu} \frac{1}{2K_{\nu}N^2} \sum_{j \neq j'} \frac{\phi_{\nu j} \phi_{\nu j'}}{\sin^2 \left[ \frac{\pi}{N}(j - j') \right]} + v \Delta\tau \sum_{j=0}^{N-1} \cos \phi_{\rho j} \cos \phi_{\sigma j} \quad (3.18)$$

となる．

### 3.3 Fourier 表示での局所更新

前節で得られた有効作用の表式を用いて，状態を効率的に更新する方法を考える．3.1 節で説明したように，状態を更新する過程では詳細釣り合いの条件 (3.7) を満たしていることが必要である．そのような更新の仕方として，各  $j$  について  $\phi_{\nu j}$  に独立に変位を与え，新しい経路を生成する方法が考えられる．これを局所更新と呼ぶ． $\phi_{\nu j}$  に関する局所更新では，経路の変化による有効作用の変化量を (3.18) を用いて計算し，(3.8) の確率で更新を行う．この際，(3.18) の長距離相互作用の項の計算には  $\mathcal{O}(N^2)$  の時間がかかる．よってこの方法では  $N$  を大きくしたときに計算時間が著しく増大するため，低温領域をシミュレートする方法としては実用的でない．

そこで  $\phi_{\nu j}$  と  $\tilde{\phi}_{\nu k}$  の混在する (3.12) の形の有効作用を利用することを考える [11]． $\phi_{\nu j}$  と  $\tilde{\phi}_{\nu k}$  がともに与えられているならば，この有効作用の計算は  $\mathcal{O}(N)$  の時間しかかからない．ただし状態の更新の過程で  $\phi_{\nu j}$  と  $\tilde{\phi}_{\nu k}$  は常に同期させておく必要があるため，そ

のときの Fourier 変換に一般に  $\mathcal{O}(N^2)$  の計算時間がかかる．しかしながら，この計算には高速 Fourier 変換が利用でき，計算時間は  $\mathcal{O}(N \log N)$  に抑えることができる<sup>3)</sup>．よって (3.12) の表示を用いて局所更新を行うことにする．(3.12) の第 1 項が  $\phi_{\nu k}$  の 2 次であることを利用して， $\tilde{\phi}_{\nu k}$  の更新確率を (3.8) に似た形で

$$W(|\tilde{\phi}_{\nu k}^{(\text{old})}| \rightarrow |\tilde{\phi}_{\nu k}^{(\text{new})}|) = e^{-\frac{|\tilde{\phi}_{\nu k}^{(\text{new})}|^2}{2\sigma_{\nu k}^2}} \min\{1, e^{S_V^{(\text{old})}[\phi_\rho, \phi_\sigma] - S_V^{(\text{new})}[\phi_\rho, \phi_\sigma]}\} \quad (3.19)$$

$$\sigma_{\nu k}^2 \equiv \begin{cases} K_\nu N & k = N/2 \\ K_\nu N^2 / 4k & k = 1, 2, \dots, N/2 - 1 \end{cases} \quad (3.20)$$

$$S_V \equiv v \Delta\tau \sum_{j=0}^{N-1} \cos \phi_{\rho j} \cos \phi_{\sigma j} \quad (3.21)$$

と表す．(3.19) による更新の判定を指数因子と  $\min\{\dots\}$  で 2 段階に分けて考える．まず，一様な確率で  $|\tilde{\phi}_{\nu k}|$  を生成し，更新を指数因子に比例する確率で判定したとすると，新しい  $|\phi_{\nu k}|$  の分布はこの指数因子に比例した分布になる．よって初めからガウシアン

$$f(|\tilde{\phi}_{\nu k}|) \propto \exp\left[-\frac{|\tilde{\phi}_{\nu k}|^2}{2\sigma_{\nu k}^2}\right] \quad (3.22)$$

の重みを付けて新しい  $|\tilde{\phi}_{\nu k}|$  を生成すれば，指数因子で更新の判定をする手間が省ける．分散  $\sigma^2$  の正規分布  $f$  に従う乱数  $x$  を得るには，2 つの一様乱数  $r_1, r_2 \in [0, 1)$  を Box-Muller 法で

$$x = \sigma \sqrt{-2 \log(1 - r_1)} \{\cos 2\pi r_2 \text{ or } \sin 2\pi r_2\} \quad (3.23)$$

と変換すればよい．続いて新しい状態  $\tilde{\phi}_{\nu k}$  を逆 Fourier 変換で  $\phi_{\nu j}$  に戻し， $\min\{\dots\}$  の判定をすれば 1 回の局所更新が完了する．ここでは簡単のため， $\tilde{\phi}_{\nu k}$  の絶対値を更新したが，代わりに  $\tilde{\phi}_{\nu k}$  の実部あるいは虚部を更新する場合も上と同じ手続きで行うことができる．

### 3.4 $\tilde{\phi}_{\nu 0}$ の局所更新

(3.12) の有効作用には  $\tilde{\phi}_{\nu 0}$  が含まれないので，3.3 で説明した方法では  $\tilde{\phi}_{\nu 0}$  の更新は行えない．エルゴード的な更新を行うためには  $\tilde{\phi}_{\nu 0}$  だけ別の方法で更新する必要がある．そこで Fourier 変換の定義

$$\tilde{\phi}_{\nu 0} = \sum_{j=0}^{N-1} \phi_{\nu j} = N \bar{\phi}_\nu \quad , \quad \bar{\phi}_\nu \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \phi_{\nu j} \quad (3.24)$$

<sup>3)</sup> すべての  $k$  に関する計算時間は  $\sim \mathcal{O}(N^2 \log N)$  である

に注意すると，経路  $\phi_{\nu j}$  の重心  $\bar{\phi}_{\nu}$  をずらすことで  $\phi_{\nu 0}$  が更新されることがわかる． $\bar{\phi}_{\nu}$  をずらす方法として，経路  $\phi_{\nu j}$  を  $j$  に関して一様にずらすのが簡単である．ずれの値は範囲  $[-\delta, \delta]$  ( $\delta > 0$ ) からランダムに生成し，更新の過程で更新確率が 5 割程度<sup>4)</sup> になるように  $\delta$  を調節する． $\bar{\phi}_{\nu}$  をずれによる有効作用の変化量を計算し，更新確率として (3.8) を用いれば  $\tilde{\phi}_{\nu 0}$  の更新が完了する．ここで (3.17) に注意すると，経路を一様にずらしたときに有効作用で変化するのはポテンシャル項  $S_V$  のみで， $\tilde{\phi}_{\nu 0}$  の更新確率は

$$W(\tilde{\phi}_{\nu 0}^{(\text{old})} \rightarrow \tilde{\phi}_{\nu 0}^{(\text{new})}) = \min \{1, e^{S_V^{(\text{old})}[\phi_{\rho}, \phi_{\sigma}] - S_V^{(\text{new})}[\phi_{\rho}, \phi_{\sigma}]}\} \quad (3.25)$$

となる．

<sup>4)</sup>  $\delta$  が大きいと経路は大きく変化するが更新確率は下がる．逆に， $\delta$  が小さいと更新確率は上がるが経路はほとんど変化しない．更新確率を介して  $\delta$  をこれらの中間にすることで，更新の最適化を図る．

## 第 4 章

# 結果と考察

本研究では，朝永-Luttinger 液体における不純物問題に関して，電荷とスピンのコンダクタンスを数値的に求めることで相転移の様子を調べた．電荷とスピンのコンダクタンスについては，松原コンダクタンス<sup>1)</sup>

$$G_\nu(i\omega_n) = \frac{|\omega_n|}{\pi} \int_0^\beta d\tau \langle \phi_\nu(\tau) \phi_\nu(0) \rangle e^{i\omega_n \tau} \quad (\nu = \rho, \sigma) \quad (4.1)$$

を  $\omega_n \rightarrow 0$  に外挿することで与えられる． $T \rightarrow 0$  で  $G_\nu(i\omega)$  が 0 あるいは  $K_\nu$  に繰り込まれていく様子は， $\beta$  を大きくしながら外挿して得られた  $G_\nu(i\omega_n \rightarrow 0)$  の変化を追えばよい．また  $G(i\omega_n)$  自身の形状からも， $i\omega \sim 0$  付近での凹凸を調べることで，相転移しているかどうかの情報がある程度得られる．

この章では，経路積分モンテカルロ法を用いた数値シミュレーションによって，電荷とスピンのコンダクタンスに関して得られた結果をまとめる．また，数値計算で用いるパラメータの値として，虚時間を離散化した際のメッシュの大きさを  $\Delta\tau = 0.25$ ，二重 cos ポテンシャルの高さを  $v = 1$  とした．

### 4.1 松原コンダクタンス

$K_\rho = 1.0, 0.6, 0.2$  について， $K_\sigma$  を  $[0.5, 2.2]$  の間で変化させながら (4.1) の松原コンダクタンスを観測した． $K_\rho$  をこのように設定したのは，予想される相図においてそれぞれ  $I \rightarrow IV$ ， $II \rightarrow IV$ ，および  $I \rightarrow III$  の相転移を観測することを意図したためである．以下，温度  $\beta = 64$  (メッシュ数 256) のときに得られた結果を列挙する．

---

<sup>1)</sup>  $2e^2/h$  で規格化した．

### 4.1.1 $K_\rho = 1.0$ のとき

図 4.1, 4.2 は, それぞれ  $K_\rho = 1.0$  に対する電荷およびスピンの松原コンダクタンスである. 両グラフについて,  $\omega_n \rightarrow 0$  としたとき  $K_\sigma > 1$  では  $G_\rho(i\omega_n \rightarrow 0)/K_\rho$  および  $G_\sigma(i\omega_n \rightarrow 0)/K_\sigma$  は 1 に近くなり, 一方,  $K_\rho < 1$  では  $K_\sigma$  が小さくなるにつれて 1 より小さい値にずれていく傾向が見て取れる. しかし,  $K_\sigma > 0.9$  で曲線のうねりが大きくなるため, これらのグラフからは転移点が  $K_\sigma \gtrsim 1$  の辺りにあることしかわからない.

$K_\rho = K_\sigma = 1$  は, 電荷とスピンの両方の自由度で相互作用がなくなる特別な点である. このときコンダクタンスは  $T \rightarrow 0$  としても繰り込まれず, 不純物による散乱ポテンシャルの高さと電子のエネルギーのみによって決まる値をとる. 両グラフについて  $K_\sigma = 1$  のとき  $G_\nu(i\omega_n \rightarrow 0) \lesssim K_\nu$  であることから, 散乱ポテンシャルほとんど効いていないことがわかる. これはポテンシャルの項が  $v \cos \phi_\rho(\tau) \cos \phi_\sigma(\tau)$  の形をしているためで, 例えば  $\phi_\rho(\tau)$  が受ける周期ポテンシャルの高さは  $v$  未満の  $|v \cos \phi_\sigma(\tau)|$  に弱められている.  $\omega_n$  のカットオフ  $\omega_c \sim \Delta\tau^{-1} = 4$  に比べて  $v = 1$  はそれほど小さくないが, ポテンシャルの影響がほとんどないように見えるのはこのような事情による. 超伝導相と絶縁相の間の転移は,  $\omega_c$  とポテンシャルの高さが競合するパラメータのときに起こるので, よりはっきりとした転移を見るためには, ポテンシャルが十分効いてくる程度まで  $v$  を大きくする必要がある.

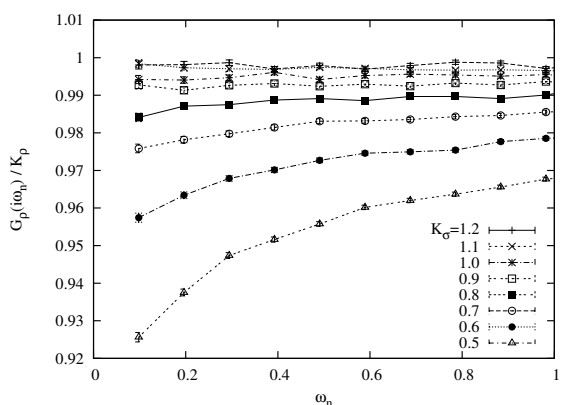


図 4.1  $K_\rho = 1.0$  のときの  $G_\rho(i\omega_n)$

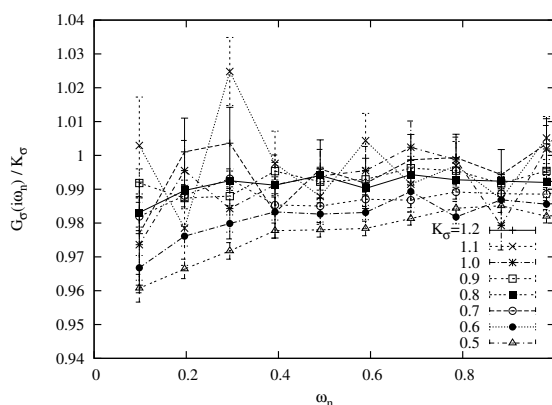
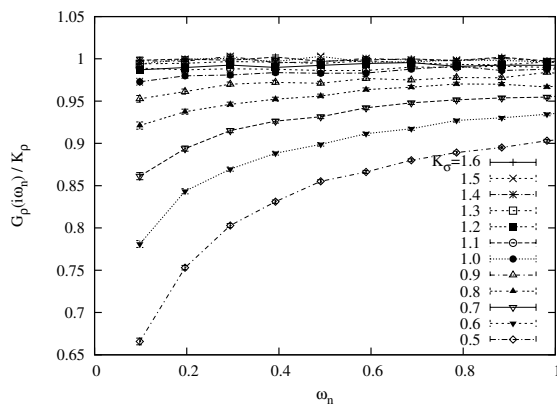
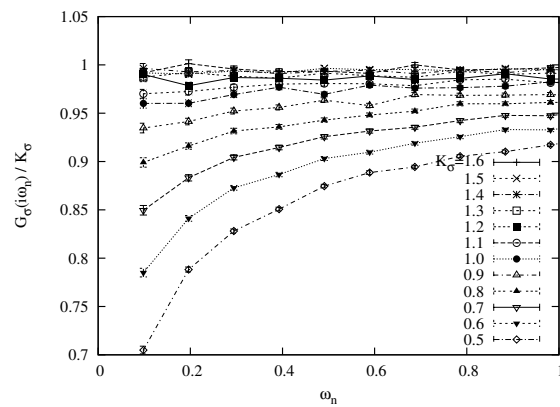


図 4.2  $K_\rho = 1.0$  のときの  $G_\sigma(i\omega_n)$

### 4.1.2 $K_\rho = 0.6$ のとき

図 4.3, 4.4 は, それぞれ  $K_\rho = 0.6$  に対する電荷およびスピンの松原コンダクタンスである. 電荷のグラフについては  $K_\sigma = 1.2$  の辺り, スピンのグラフでは  $K_\sigma = 1.4$  の辺りで  $K_\rho = 1.0$  のときと同様の転移が起きているように見える. 上で触れたとおり,

$K_\rho = 0.6$  での観測は III  $\rightarrow$  IV の相転移を見ることを目的としていたが,  $v$  があまり大きくないとき III  $\rightarrow$  IV の相転移線は  $K_\rho = 0.5$  の線とほとんど重なるので,  $K_\rho = 0.6$  を固定した場合 III  $\rightarrow$  IV の相転移は観測されない可能性がある. その場合, 図 4.3, 4.4 のグラフで観測されているのは I  $\rightarrow$  IV の相転移ということになる. さらに  $K_\rho$  を固定して III  $\rightarrow$  IV の相転移を見るためには  $\Delta K_\nu \lesssim 0.1$  程度の解像度が必要なので, いずれにせよ図 4.3, 4.4 のグラフでこの相転移を正確に決めることはである. 解像度を高めるためには, 温度  $T$  を小さくしてコンダクタンスの繰り込みを大きくする必要がある.

図 4.3  $K_\rho = 0.6$  のときの  $G_\rho(i\omega_n)$ 図 4.4  $K_\rho = 0.6$  のときの  $G_\sigma(i\omega_n)$ 

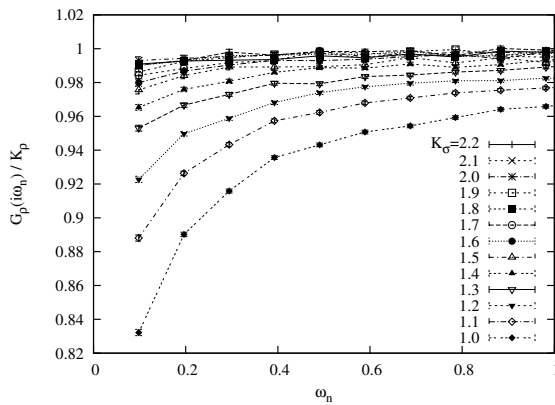
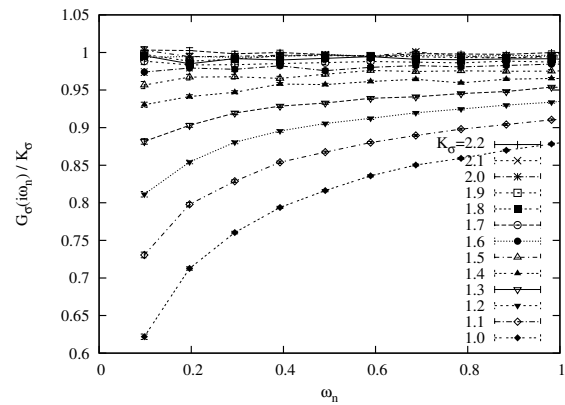
### 4.1.3 $K_\rho = 0.2$ のとき

図 4.5, 4.6 は, それぞれ  $K_\rho = 0.2$  に対する電荷およびスピンの松原コンダクタンスである.  $K_\rho = 1.0, 0.6$  の場合と異なる点は, 電荷のグラフで  $\omega_n \rightarrow 0$  としたとき  $G_\rho(i\omega_n)/K_\rho$  が常に 1 未満である点である. それに対し, スピンのグラフでは  $K_\sigma = 1.9$  の辺りで  $K_\rho = 1.0, 0.6$  のときと同様の相転移が観測される.  $G_\rho(i\omega_n \rightarrow 0)$  は 0 に繰り込まれ,  $G_\sigma(i\omega_n \rightarrow 0)$  は  $K_\sigma$  に繰り込まれるという振る舞いは, 摂動繰り込み群から得られる相図における III の相で見られる. したがって図 4.5, 4.6 は I  $\rightarrow$  III の相転移を観測しているものと考えられる. ただし  $K_\rho = 1.0, 0.6$  のときと同様に, この温度領域では相転移点が正確に決められる程度の精度は得られない.

## 4.2 $G_\nu(i\omega_n \rightarrow 0)$ の温度依存性

$K_\rho = 0.1, K_\sigma = 2.5$  に固定し, 温度を低温の  $\beta/\Delta\tau = 256, 1024, 2048$  で変化させたときのコンダクタンスの温度依存性を観測した.  $K_\rho = 0.1, K_\sigma = 2.5$  は相 III に対応し, 摂動繰り込み群によって低温で  $G_\rho(i\omega_n \rightarrow 0) \rightarrow 0, G_\sigma(i\omega_n \rightarrow 0) \rightarrow K_\sigma$  のように繰り込まれるという結論が得られている (ただしポテンシャルの高さについて  $v \ll 1$  あるいは

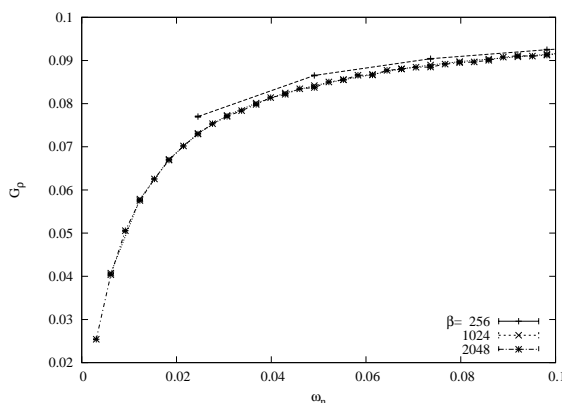
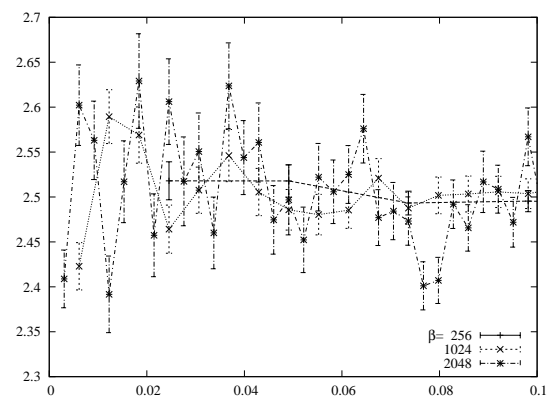


図 4.5  $K_\rho = 0.2$  のときの  $G_\rho(i\omega_n)$ 図 4.6  $K_\rho = 0.2$  のときの  $G_\sigma(i\omega_n)$ 

$v \gg 1$  が仮定されており、かつ二次摂動を利用している)。そこで、相 III でのコンダクタンスの温度依存性を数値的に求めることで、この結論が  $v = 1$  の場合についても有効であるか調べた。

図 4.7, 4.8 は  $K_\rho = 0.1, K_\sigma = 2.5$  としたときに、温度  $\beta = 256, 1024, 2048$  で観測した電荷とスピンの松原コンダクタンスである。図 4.5, 4.6 の  $K_\sigma > 1.9$  で見られた傾向が低温でも観測されることがわかる。超伝導相で  $\phi_\nu(\tau)$  の揺らぎが増大するため、 $G_\sigma(i\omega_n)$  については収束が悪く誤差が大きいが、振動の中心は  $\omega_n \rightarrow 0$  で約 2.5 に外挿されることがわかる。

図 4.9, 5.0 は、松原コンダクタンスの最初の 5 点を用いて  $\omega_n \rightarrow 0$  に外挿して得られた、電荷とスピンのコンダクタンス  $G_\nu(i\omega \rightarrow 0)$  である。これらのグラフからは、 $T \rightarrow 0$  としたときに  $G_\rho(i\omega_n \rightarrow 0) \rightarrow 0, G_\sigma(i\omega_n \rightarrow 0) \rightarrow K_\sigma$  のように変化する傾向が見え、摂動繰り込み群から得られる結論と一致する。ゆえに、 $\beta = 2048$  の低温までは  $v$  が有限のときにも、相 III について摂動繰り込み群から得られる結論を支持する計算結果が得られた。

図 4.7  $K_\rho = 0.1, K_\sigma = 2.5$  での  $G_\rho(i\omega_n)$  の温度依存性図 4.8  $K_\rho = 0.1, K_\sigma = 2.5$  での  $G_\sigma(i\omega_n)$  の温度依存性

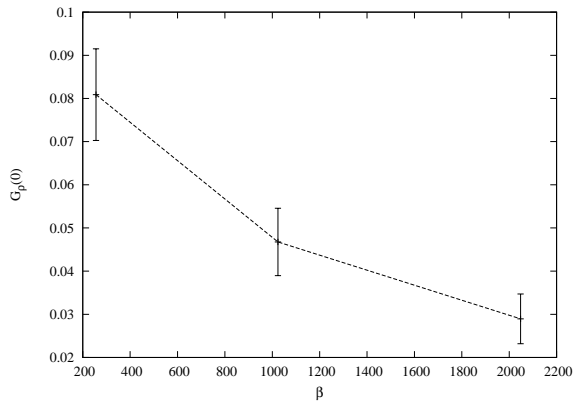


図 4.9  $G_\rho(0)$  の温度依存性

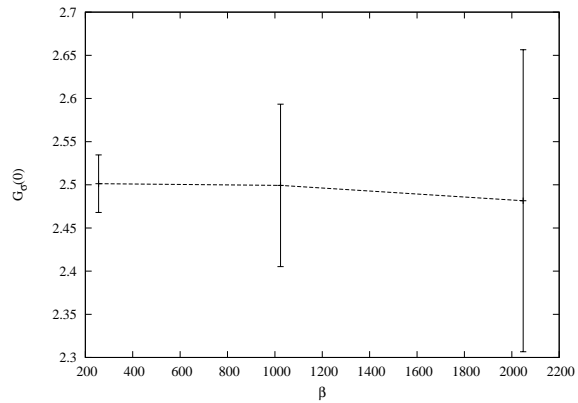


図 4.10  $G_\sigma(0)$  の温度依存性

### 4.3 相図

$\beta = 64$  で観測した松原コンダクタンスを  $\omega_n \rightarrow 0$  に外挿して得られたコンダクタンス  $G_\rho(i\omega_n \rightarrow 0)$  の  $K_\sigma$  依存性を図 4.11 にまとめた．相転移線を決定するためには低温に行くにつれて  $G_\rho(i\omega_n \rightarrow 0)$  がどう変化するかを調べる必要があるが， $\beta = 64$  でもある程度ポテンシャルが繰り込まれていると考えれば，図 4.11 から相転移線の形状を推測することができる．つまり，各  $K_\rho$  に対して  $G_\rho(i\omega_n \rightarrow 0)$  の値が  $K_\rho$  未満から  $K_\rho$  に移るときの  $K_\rho$  をつないだ線は，摂動繰り込み群の一次摂動で得られる I  $\rightarrow$  IV の相転移線  $K_\rho + K_\sigma = 2$  に大体一致する．図 4.11 には  $K_\rho + K_\sigma = 2$  の直線も書き込んだ．

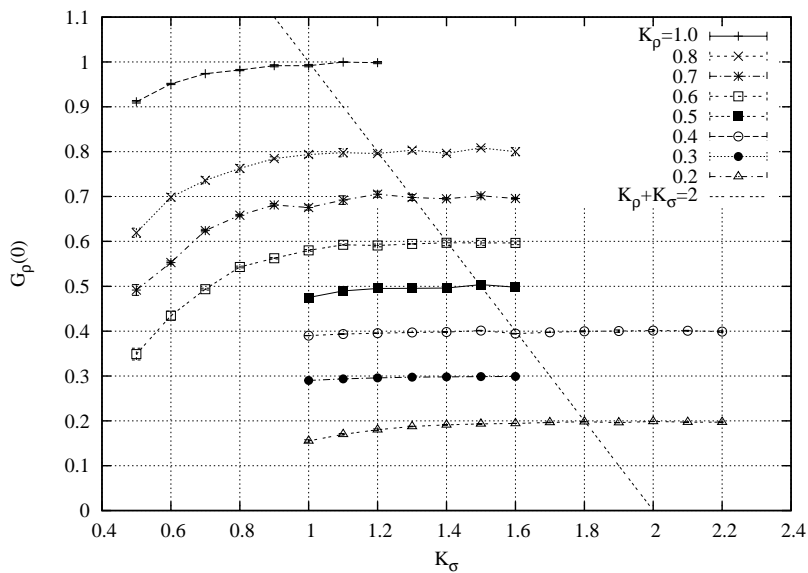


図 4.11  $G_\rho(0)$  の  $K_\rho$  依存性



## 第 5 章

# まとめ

本研究では経路積分モンテカルロ法を用いた数値シミュレーションによって、朝永-Luttinger 液体における不純物問題の研究を行った。その際、電荷およびスピンのコンダクタンスを観測し、それらが繰り込まれる様子を調べることで、摂動繰り込み群から得られている相図を再現することを試みた。またパラメータとして不純物による散乱の強さを  $v = 1$  年、温度については  $\beta = 64 \sim 2048$  (メッシュ数  $256 \sim 8192$ ) まで観測した。その結果として

- 摂動繰り込み群の結果から予想される  $K_\rho, K_\sigma$  の値で絶縁層から超伝導相への転移が起きている
- 2 次の摂動計算から予言される相 III において、電荷のコンダクタンスは 0 に繰り込まれ、スピンのコンダクタンスは  $K_\sigma$  に繰り込まれる

ことが確認された。また、相 I $\rightarrow$ IV の転移線も不明瞭ながら確認された (図 4.11)。

本研究で相転移が明瞭に観測できなかった原因として

- 温度がまだ十分低くない
- 不純物による散乱強度は  $v = 1$  では小さすぎる

ことが挙げられる。 $v$  を大きくすると  $\phi_\nu(\tau)$  がキंक構造をとるようになり、このような場合に低温領域でシミュレーションを行うには [3] のクラスター更新の方法が必要になる。よって今後の課題は

- [3] を場が  $\phi_\rho(\tau), \phi_\sigma(\tau)$  の場合に拡張する
- クラスター更新を用いて  $v > 1$  の場合についてさらに低温のシミュレーションを行う

ことである。



## 参考文献

- [1] C. L. Kane and M. P. A. Fisher. Transmission through barriers and resonant tunneling in an interacting one-dimensional electron gas. *Physical Review B*, Vol. 46, pp. 15233–15262, December 1992.
- [2] A. Furusaki and N. Nagaosa. Single-barrier problem and Anderson localization in a one-dimensional interacting electron system. *Physical Review B*, Vol. 47, pp. 4631–4643, February 1993.
- [3] P. Werner and M. Troyer. Efficient Simulation of Resistively Shunted Josephson Junctions. *Physical Review Letters*, Vol. 95, No. 6, pp. 060201–+, August 2005.
- [4] J. Sólyom. The Fermi gas model of one-dimensional conductors. *Advances in Physics*, Vol. 28, pp. 201–303, March 1979.
- [5] H. J. Schulz. Fermi liquids and non-Fermi liquids. *ArXiv Condensed Matter e-prints*, March 1995.
- [6] J. Voit. One-dimensional Fermi liquids. *Reports of Progress in Physics*, Vol. 58, pp. 977–1116, September 1995.
- [7] A. O. Caldeira and A. J. Leggett. Influence of Dissipation on Quantum Tunneling in Macroscopic Systems. *Physical Review Letters*, Vol. 46, pp. 211–214, January 1981.
- [8] A. O. Caldeira and A. J. Leggett. Quantum tunnelling in a dissipative system. *Annals of Physics*, Vol. 149, pp. 374–456, September 1983.
- [9] M. P. A. Fisher and W. Zwerger. Quantum Brownian motion in a periodic potential. *Physical Review B*, Vol. 32, pp. 6190–6206, November 1985.
- [10] N. Kimura and T. Kato. Temperature dependence of zero-bias resistances of a single resistance-shunted Josephson junction. *Physical Review B*, Vol. 69, No. 1, pp. 012504–+, January 2004.
- [11] L. Capriotti, A. Cuccoli, A. Fubini, V. Tognetti, and R. Vaia. Simulating quantum dissipation in many-body systems. *Europhysics Letters*, Vol. 58, pp. 155–161,

April 2002.