DMRGと並進対称性の破れ

京都産業大学 理学部　堀田 知佐
東北大学 理学部　柴田 尚和

物性研究のハイライトのひとつが自発的対称性の破れに伴う新たな秩序状態を見出すことである．一般に，系のハミルトニアンが持つ対称性が自発的に破れた場合，有限系における取扱いは注意を要する．例えば並進対称性が破れた基底状態について無限系で ϕ^+, ϕ^- という二つの縮退する波動関数が得られた場合，周期的境界 (PBC) をもつ有限系では両者が重ね合わさった $\phi_0 \simeq \phi^+ + \phi^-$ が唯一の基底状態としてあらわれ、$\phi_1 \simeq \phi^+ - \phi^-$ が low lying excited state として存在する．この ϕ_1 は 系のサイズ N とともに N^{-1} よりも急激に基底状態に漸近し，バルクの極限で ϕ_0 と縮退する [1]．一方，DMRG では，開放端境界条件 (OBC) において，その精度が最も保障されることが知られている．これは PBC と比べ，波動関数の変分性を保障するに十分な基底の数を画期的に減らすことができるためである．しかし OBC では 端が開いたことにより PBC の有限系では保持されていた並進対称性が破れ，バルクの基底状態とは直交するはずの励起状態まで混ざり合うことによって，本来はバルクで存在しないはずの構造も現れる．ただし，この「端の効果」は通常，適切なサイズスケーリングを行うことで十分な精度で除去することができる．一方，逆に「端の効果」を摂動として逆手に取った解析法もしばしば行われる [2]．並進対称性が破れた結果，相関関数で ”見る ”べき系の特徴が局所的な物理量に explicit に周期構造としてあらわれるため，それを解析することによって基底状態が持つ最も支配的な相関の性質を見極めることができるのである．

しかし，基底状態の基本的な性質が既に明らかになっている場合を除いて，こうした「局所的な物理量の測定」はときに危険を伴う．代表的な例が，1 次元近藤格子モデルにおいて近藤カップリング J が小さな領域である．この領域では相関が非常に遠くまで及ぶため，有限系の解析が非常に困難である．実際 Xavier らは 系の中央における局所的なダイマー秩序パラメタ $\langle S_i S_{i+1} \rangle$ に対して ブロック状態数 $m \sim 3500$, $N = 96$ までの計算を行い，サイズ外挿をした結果，$J/t \sim 0.5$ 付近で系が並進対称性を破り，電荷ギャップが開くという結論を提示した [3]．この結果に対し，我々は (i) 系の端に化学ポテンシャルを加え，実効的に境界を「ひねる」，(ii) 計算の精度を保証することが困難な周期的境界条件や反周期的境界条件 (APBC) を敢えて用いる，といった多角的な方向で境界条件が系に及ぼす影響を調べた [4]．その結果，彼らの局所物理量に関する計算結果は再現されたものの，ダイマー・ダイマー相関関数が系の境界条件に強く依存し，特に (ii) において冪的な減衰を示すことがわかった．このことは，並進対称性の破れが実際起こりうるどうかを判断する上で，通常の OBC を用いた有限サイズスケーリングのみの解析は危険を伴うことを強く示唆している．

以上のように並進対称性の破れを正確に見極めるためには 相関関数の (I) サイズ依存性, (II)m 依存性, (III) 境界条件依存性を調べることが必要条件となる．しかしこうした解析は非常な労力を伴うため，信頼性を失わずかつ より簡便な解析方法が求められる．そこで，基底状態の性質が既に明らかないくつかの系について，　エンタングルメントエントロピーを新たな物理量として使用する試みについても議論したい．

1) T. Koma, H. Tasaki, J. Stat. Phys. **76** (1994) 314.

2) N. Shibata, *et.al.* Phys. Rev. B **56** (1997) 330.

3) J. C. Xavier, *et.al.* Phys. Rev. Lett. 90, (2003) 247204;

4) N. Shibata and C. Hotta, arXiv:cond-mat/0503476v1 (2005); C. Hotta and N. Shibata, Physica B 378-380, 1039 (2006).