

「スピン - ボソン系における非断熱効果と動的補償定理」*

平成3年科学研究費研究成果報告
(一般研究(c)02640269)

東北大学理学部 都築 俊夫

(1992年3月14日受理)

内容目次

研究目的	180
研究発表	180
研究経過	182
1. 発端：動的補償	182
2. 最低エネルギー状態：強相互作用領域から	186
3. 最低エネルギー状態：弱相互作用領域から	190
4. 基底状態の相図	192
5. 赤外破綻 対 動的補償	193
6. 新しい熱平均計算法	194
7. 状態和	195
8. 動力学	197
9. 二重井戸系と動的補償	197
10. まとめと今後の課題	201
11. 目標の達成度	201
謝辞	201
参考文献とその説明	202
表、図とその説明	204

* 科研費報告書の一部を研究公開のため、掲載したものである。

研究目的

二準位擬スピン-ボソン系（以後、スピン-ボソン系またはS-B系と略記）は、一見簡単な系にみえるが、本質的に非線形な量子系である。この非線形性と量子性の相乗が生み出す物理は未だ解明されたとは言い難い。本研究は、“赤外破綻”に代えて、“動的補償”を指導概念として、この系の物理を総合的かつ体系的に解明しようとする。

研究発表

1. 学会誌等

- 1) TSUZUKI, Toshio
Tunneling Coherence and Localization in a Spin-Boson System: A Dynamic Extension of the Anderson Orthogonality Theorem,
Solid State Communications 71, No.10, 813-816(1989, September).
- 2) TSUZUKI, Toshio
Ground State of a Spin-Boson System
— The Dynamic Compensation Theorem and the Orthogonality Theorem —,
Progress of Theoretical Physics 82, No.5, 917-929 (1989, November).
- 3) TSUZUKI, Toshio
Energy Spectra of a Spin-Boson System in the White Bath Limit,
Progress of Theoretical Physics 83, No.1, 29-36 (1990, January).
- 4) TSUZUKI, Toshio
Dynamic Compensation Theorem and Exact Partition Function of a Spin-Boson System,
Solid State Communications 74, No.8, 743-746 (1990, May).
- 5) TSUZUKI, Toshio
Statistical Mechanics of a Spin-Boson System
— The Dynamic Compensation Theorem and the Exact Partition Function —,
Progress of Theoretical Physics 84, No.1, 81-93 (1990, July)
- 6) TSUZUKI, Toshio
Statistical Mechanics of a Spin-Boson System.II
— Thermodynamics in a Decoupling Approximation —,
Progress of Theoretical Physics 84, No.2, 228-232 (1990, August).
- 7) 都築 俊夫
スピン-ボソン系における非断熱効果と動的補償定理、
物性研究 54, No.5, 565-575 (1990.8),
素粒子論研究 82, No.3, C123-133 (1990.12).
- 8) TSUZUKI, Toshio
Statistical Mechanics of a Spin-Boson System.III
— A Closed Equation for the Partition Function —,
Progress of Theoretical Physics 85, No.1, 31-37 (1991, January).

- 9) TSUZUKI, Toshio
A Method of Finding Thermal Average by Differential Operation,
Solid State Communications 77, No.5, 345-346 (1991, February).
- 10) TSUZUKI, Toshio
Dynamics of a Spin-Boson System
— How Does the Dynamic Compensation Manifest Itself —,
Progress of Theoretical Physics 85, No.2, 205-219 (1991, February).
- 11) TSUZUKI, Toshio
The Quantum Tunneling-Localization Transition of the Ground State of a Spin-Boson
System,
Solid State Communications 79, No.1, 9-12 (1991, July).
- 12) TSUZUKI, Toshio
Ground State of a Spin-Boson System.II
— Wavefunction and Variational Study —,
Progress of Theoretical Physics 87, No.3, (1992, March).
- 13) TSUZUKI, Toshio
Dynamic Compensation as a New Concept of Renormalization,
Solid State Communications (投稿中).

2. 口頭発表

- 1) 都築 俊夫
スピン-ボソン系における非断熱効果と動的補償定理
「進化の力学への場の理論的アプローチ」研究会
(京都大学基礎物理学研究所) 1990年3月
- 2) 都築 俊夫
スピン-ボソン系における非断熱効果と動的補償定理
日本物理学会 1990年10月 (予稿集 3, p.520)
- 3) 都築 俊夫
二準位スピン-ボソン系の基底状態
日本物理学会 1991年9月 (予稿集 3, p.487)
- 4) 都築 俊夫
スピン-ボソン系の動的補償理論
「ISQM-TOKYO '92」国内研究会 (東京大学生産技術研究所) 1991年11月

研究経過

1. 発端:動的補償 [1,2]

本研究が対象とするスピン-ボソン系のハミルトニアンは ($\hbar = 1$ の単位系)

$$H = H_S + H_B + H_{S-B}, \quad (1)$$

$$H_S = -\Delta \cdot \sigma_x,$$

$$H_B = \sum_j \omega_j \left(b_j^\dagger b_j + \frac{1}{2} \right),$$

$$H_{S-B} = \frac{1}{2} \sigma_z \cdot u, \quad u = \sum_j \lambda_j (b_j^\dagger + b_j),$$

である。準位間隔 2Δ の二準位系 S が調和振動子系で記述されるボソン系 B と H_{S-B} によって相互作用している。 σ_x, σ_z はパウリ行列、 $[b_j, b_l^\dagger] = \delta_{j,l}$ 。相互作用スペクトル密度は

$$\sum_j \lambda_j^2 \delta(\omega_j - \omega) = 2\alpha J(\omega) \quad (2)$$

とする。ここで α は無次元定数。環境 B は十分大きな系で励起スペクトルは j の連続関数であるとする。エネルギー依存性 $J(\omega)$ は赤外極限で ω^s (ただし $s > 0$)、紫外領域では ω_c で切断されているとする ($\omega_c \gg 2\Delta$ を仮定)。具体的関数形として本研究では

$$J(\omega) = \omega \cdot \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right)^{s-1} \cdot e^{-\omega/\omega_c}, \quad (3)$$

を用いる。ここに採用した S-B 系は Leggett[3,4] に始まる巨視的量子現象への散逸効果の研究において用いられた模型のひとつと同一である [5]。

ハミルトニアン (1) を見れば次のことに気付く。スピンの反転運動の特性時間は $1/2\Delta$ と見積られ、従って環境 B を構成するボソンのうち $\omega_j > 2\Delta$ なる高エネルギーボソンと $\omega_j < 2\Delta$ なる低エネルギーボソンとではスピン S の運動に及ぼす影響は質的に異なるであろう。前者は S の運動に追従でき、 S と一体となって運動する。即ち、 S の衣となる。 B の S に対する断熱効果と呼び、 S の物理的パラメータ Δ, λ_j に繰り込まれる。後者は S の運動に追従できず、 S の運動を妨げ、減衰をもたらす。これを非断熱効果と呼ぶ。

伝統的処法においては、両効果を区別して扱えると仮定し、まず断熱効果を繰り込む。得られた Δ の有効値のもとで非断熱効果を評価する。これは相互作用する多自由度系における断熱効果と非断熱効果を取り扱う標準処法である。

具体的に見る。本研究の着想を説明するため、 B は S の運動に完全に追従すると仮定してみよう。数学的にはユニタリー演算子 $U = \exp[\sigma_z v/2]$,

$$v = \sum_j \frac{\lambda_j}{\omega_j} (b_j^\dagger - b_j) \quad (4)$$

により H_{S-B} を消去して

$$\tilde{H} \equiv UHU^{-1} = \tilde{H}_S + \tilde{H}_B + E_0, \quad (5)$$

$$\tilde{H}_S \equiv UH_SU^{-1} = -\frac{1}{2}\Delta\{e^v \cdot \sigma_+ + e^{-v} \cdot \sigma_-\}, \quad (6)$$

$$\tilde{H}_B \equiv U(H_B + H_{S-B})U^{-1} = \sum_j \omega_j b_j^+ b_j, \quad (7)$$

を扱えばよい。ここで定数項 $E_0 = \sum_j (\omega_j/2 - \lambda_j^2/4\omega_j)$ 。完全追従仮定の下では、基底状態の波動関数は

$$\Psi_G = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\uparrow, 0\rangle + |\downarrow, 0\rangle\}, \quad (8)$$

ととることになる。 $|\uparrow, 0\rangle$ はスピンの上向き ($\sigma_z = 1$) であり、かつ $\sigma_z = 1$ とした H_{S-B} によって定められる振動中心をもつ変位ボソンがひとつも励起されていない状態を表す。 $|\downarrow, 0\rangle$ についても同様。基底エネルギーは $E_G = -\Delta \cdot \exp[-F]$,

$$F = \frac{1}{2} \sum_j \left(\frac{\lambda_j}{\omega_j} \right)^2 = \alpha \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2}, \quad (9)$$

となる。エネルギーの原点を E_0 とした。デバイ・ワラー因子 (フランツ・コンドン因子) を決める F は、 $s > 1$ では $\alpha\Gamma(s-1)$ となり Δ の有効値は $\Delta_{eff} = \Delta \cdot \exp[-\alpha\Gamma(s-1)]$, $s \leq 1$ では F は赤外ボソンの寄与により発散し、 $\Delta_{eff} = 0$ となる。断熱効果の寄与は s の大きさにより質的に異なった結果をもたらす。 $s \leq 1$ での赤外発散の帰結は“赤外破綻”と呼ばれる。

完全追従仮定は明らかに過剰近似である。断熱効果は Δ のみならず λ_j をも修正する。有効 λ_j が g_j であるとし、(4) の v を $v' = \sum_j (g_j/\omega_j) \cdot (b_j^+ - b_j)$ に代えて変換すると

$$\tilde{H}' = \tilde{H}'_S + \tilde{H}'_B + \tilde{H}'_{S-B} + E'_0, \quad (10)$$

$$\tilde{H}'_S = -\frac{1}{2}\Delta\{e^{v'} \cdot \sigma_+ + e^{-v'} \cdot \sigma_-\},$$

$$\tilde{H}'_B = \sum_j \omega_j b_j^+ b_j,$$

$$\tilde{H}'_{S-B} = \frac{1}{2}\sigma_z \sum_j (\lambda_j - g_j) \cdot (b_j + b_j^+),$$

$$E'_0 = \sum_j \frac{1}{4\omega_j} (\lambda_j - g_j)^2 + E_0.$$

(8) と同型の基底状態波動関数を仮定し、 \tilde{H}' の期待値を極小とするよう g_j を決めると

$$g_j = \frac{\omega_j}{\omega_j + 2\Delta_{eff}} \lambda_j,$$

$$\Delta_{eff} = \Delta \cdot e^{-F}, \quad F = \frac{1}{2} \sum_j \left\{ \frac{\lambda_j}{\omega_j + 2\Delta_{eff}} \right\}^2, \quad (11)$$

$$E_G = -\Delta_{eff} + \sum_j \frac{1}{4\omega_j} \left\{ \frac{2\Delta_{eff} \cdot \lambda_j}{\omega_j + 2\Delta_{eff}} \right\}^2$$

となる。 Δ_{eff} は(11)により自己無撞着に決める。もし $\Delta_{eff} \neq 0$ ならば赤外発散は除去される。白色極限 ($2\Delta/\omega_c$ は無微小だが有限) を考えることにする。 $s > 1$ ならば(11)と(9)との定量的差は無視でき、 Δ_{eff} は α の増加とともに指数関数的に減少する。 S のもつトンネルコヒーレンスは α の全域にわたって B により弱められるが破壊されることはない。 $s > 1$ に対してもともと赤外破綻は起こらないから当然である。 $s \leq 1$ の場合はどうか。まず $s = 1$ とすると

$$F \cong \alpha \left\{ \ln \left(\frac{\omega_c}{2\gamma\Delta_{eff}} \right) - 1 \right\}$$

と見積られ

$$\frac{\Delta_{eff}}{\Delta} = \left[\gamma \cdot e \cdot \frac{2\Delta}{\omega_c} \right]^{\alpha/(1-\alpha)}, \quad (1 > \alpha > 0)$$

$$= 0, \quad (\alpha \geq 1)$$

となる[6,5]。相互作用が強い時、赤外破綻によってコヒーレンスは完全に破壊されるが、弱い時には破綻することなくコヒーレンスは生き残る。その臨界値は

$$\alpha_c^{ad} = 1. \quad (12)$$

$\alpha < \alpha_c^{ad}$ の場合には

$$\tilde{H}'_{S-B} = \frac{1}{2} \sigma_z \sum_j \frac{2\Delta_{eff}}{\omega_j + 2\Delta_{eff}} \lambda_j (b_j + b_j^+), \quad (13)$$

が残っており、 $\omega_j < 2\Delta_{eff}$ なるボソンによる非断熱効果の源となる。 $1 > s > 0$ の場合には

$$F \cong \alpha \cdot \frac{\pi s}{\sin \pi s} \left\{ \left(\frac{\omega_c}{2\Delta_{eff}} \right)^{1-s} - \frac{1}{\Gamma(2-s)} \right\}$$

と見積られ、 $s \rightarrow 1$ でない限り $\Delta_{eff} = 0$ とみなせる(白色極限)。 $s \rightarrow 1$ では既に与えた結果に帰する。断熱繰り込みの結果を臨界値 α_c^{ad} でまとめると

$$\alpha_c^{ad} = \begin{cases} \infty, & (s > 1), \\ 1, & (s = 1), \\ 0, & (s < 1), \end{cases} \quad (14)$$

となる。

断熱繰り込みのシナリオを復習してみよう。(i) 赤外発散を $\pm g_j/2\omega_j$ で指定されるコヒーレント状態 (の積) によって除去することをもくろむ。(ii) g_j は最良基底状態を選ぶ。(iii) トンネルコヒーレンスが生き残ったとき ($\Delta_{eff} \neq 0$)、非断熱効果を非コヒーレント (incoherent) ボソン励起により (13) を用いて記述する。もともと赤外発散がない場合 ($s > 1$) でも定量的に改良された取り扱い法のひとつになっている。

このシナリオは $\Delta_{eff} \neq 0$ の場合に系の物理を記述する最適の方法であるかどうか反問してみよう。 B の S への断熱効果も非断熱効果もスピンの反転運動に伴う効果が最重要である。断熱繰り込み $\lambda_j \rightarrow g_j$ によって \hat{H}'_S から赤外ボソン ($\omega_j \ll 2\Delta_{eff}$) が除去され、 \hat{H}'_S はスピンの反転 (σ_{\pm} に注意) に伴う非断熱効果をほとんど生み出さない。一方、 \hat{H}'_{S-B} は実際上赤外ボソンのみを含むが、 σ_z のみに依存することから分かるように、スピンの向きを変えないので反転運動の間隙にボソンを非コヒーレントに放出または吸収する。従ってこの非断熱効果は変位した平衡点の囲りで微小振動するボソンによるものである。断熱繰り込み処法はスピン-ボソン系の物理を記述する適切な処法とは言い難い。

スピンの反転運動に伴うボソンの断熱効果、非断熱効果という観点からみれば、コヒーレントボソンのみで記すハミルトニアン (5) が適切な出発点と思われる。先の赤外破綻の問題はどうか。ハミルトニアン (6) が示すように、スピンの反転毎にボソンをコヒーレントに励起する。反転毎に許されたすべてのエネルギーをもつボソンを 0 個から無限個まですべての個数励起する。その際、同じエネルギーをもつボソンの位相は揃っている。ボソンを介在してスピンの二準位間を遷移する上でエネルギー的には全く問題がない。このことは赤外極限のボソンに限ってもいえる。励起状態にあるスピンの赤外ボソンを非可逆に放出してエネルギーを B に散逸するという描像を単純にもつことは出来ない。たった一個のスピンの巨視系 B を強く分極するのである。従ってスピンへの反作用もまた強い。スピン-ボソン系 (1) または (5) は強相関系のひとつと認識されるべきである。ハミルトニアン (5) を出発点にスピンの反転運動に伴って動的に励起されたボソンの寄与 (B からの反作用) を完全に取込めば、みかけの赤外発散は完全に補償され (動的補償)、我々の系にはもともと赤外発散は存在しないことが証明できる [1,2]。先の因子 F で書くと

$$F \rightarrow \frac{1}{2} \sum_j \left(\frac{\lambda_j}{\omega_j} \right)^2 \{1 - e^{i\omega_j x}\}, \quad (15)$$

のように置き換えられる。ここで $\exp[i\omega_j x]$ を含む部分が動的励起ボソンからの寄与である (x は加え上げるための補助積分変数)。今後使用する用語でいえば、「ボソンの零点ゆらぎに由来する赤外発散は動的ゆらぎの寄与によって完全に補償される」という動的補償定理に基づいてスピン-ボソン系の物理を展開する。

動的補償はスピン-ボソン系に限られたものではない。それは縮退したポテンシャル極小をもつ系 (量子トンネル系) におけるトンネルコヒーレンスの物理を支配する。二重井戸系における動的補償もこの報告に含める。本報告は自己完結的に書いたつもりである。

2. 最低エネルギー状態：強相互作用領域から [7,8]

相互作用強度 α が十分大きい場合にはトンネルコヒーレンスは極めて弱められているかまたは消失していると期待される。このことは \hat{H} 中 \hat{H}_B を非摂動ハミルトニアン、 \hat{H}_S を摂動ハミルトニアンとして自己エネルギーを求め量子力学を展開する可能性を示唆する。全系の波動関数を

$$\Psi = \Psi^{(+)}|\uparrow\rangle + \Psi^{(-)}|\downarrow\rangle, \quad (16)$$

とスピン状態によって分け、さらに

$$\Psi^{(\pm)} = \Phi^{(\pm)} + \frac{\Delta}{\hat{H}_B - E} \cdot e^{\pm\nu} \cdot \Phi^{(\mp)}, \quad (17)$$

と書くと、シュレジンガー方程式 $\hat{H}\Psi = E\Psi$ は分離されて

$$\{\hat{H}_B - E - \Delta\hat{L}^{(\pm)}\}\Phi^{(\pm)} = 0, \quad (18)$$

$$\hat{L}^{(\pm)} = e^{\pm\nu} \cdot \frac{\Delta}{\hat{H}_B - E} \cdot e^{\mp\nu}, \quad (19)$$

を得る。 $\hat{L}^{(\pm)}$ がボソンの自己エネルギー演算子である。ここでエネルギー E は E_0 から測られている。 $\Phi^{(\pm)}$ の意味は、(19)から知られるように、トンネルコヒーレンスの自己エネルギー効果を取り込んだ物理的変位ボソンの状態を記述する。全波動関数を(16)と分解した時上向きスピンと直積するボソン波動関数 $\Psi^{(+)}$ には $\Phi^{(+)}$ に加えて、(17)の第二項で表された、 (\downarrow) -変位ボソンがトンネルした部分がある。 $\Psi^{(-)}$ についても同様。

最低エネルギー状態に対する変分波動関数をコヒーレント状態 $b_j|\xi_j\rangle = \xi_j|\xi_j\rangle$ の積

$$\Phi^{(\pm)} = |\vec{\xi}\rangle = \prod_j |\xi_j\rangle, \quad (20)$$

ととり、変分エネルギー E を求めよう。(18)から

$$E = -\Delta \cdot L^{(\pm)}(\vec{\xi}^*, \vec{\xi}) + \sum_j \omega_j |\xi_j|^2, \quad (21)$$

$$L^{(\pm)}(\vec{\xi}^*, \vec{\xi}) = \frac{\Delta}{\omega_c} \int_0^\infty dx e^{-\delta \cdot x} \text{Im} \exp \left[- \sum_j (1 - e^{i\omega_j x / \omega_c}) \cdot \left\{ |\xi_j|^2 \mp \frac{\lambda_j}{\omega_j} (\xi_j + \xi_j^*) \right\} - i \frac{E}{\omega_c} \cdot x - w(x) \right], \quad (22)$$

$$\begin{aligned}
 w(x) &= \sum_j \left(\frac{\lambda_j}{\omega_j} \right)^2 (1 - e^{i\omega_j x/\omega_c}), & (23) \\
 &= 2\alpha\Gamma(s-1) \cdot \{1 - (1-ix)^{1-s}\}, & (s > 1) \\
 &= 2\alpha \cdot \ln(1-ix), & (s = 1) \\
 &= \frac{2\alpha\Gamma(s)}{1-s} \cdot \{(1-ix)^{1-s} - 1\}, & (1 > s > 0)
 \end{aligned}$$

ここで $e^{-\delta \cdot x}$ は収束因子 ($\delta \rightarrow 0_+$)。 (22), (23) において因子 $1 - \exp[i\omega_j x/\omega_c]$ が動的補償を表す。変分結果は、 $\varepsilon \equiv E/\Delta$, $\tilde{\Delta} \equiv \Delta/\omega_c$ として、

$$\xi_j = \xi_j^* = \pm \frac{\lambda_j}{\omega_j} \cdot \frac{\tilde{\Delta} \cdot P(\frac{\omega_j}{\omega_c}; \varepsilon)}{1 + \tilde{\Delta} \cdot P(\frac{\omega_j}{\omega_c}; \varepsilon)}, \quad (24)$$

$$P(y; \varepsilon) = \tilde{\Delta} \int_0^\infty dx e^{-\delta \cdot x} \text{Im} \frac{(1 - e^{ixy})}{y} \cdot \exp[-i\tilde{\Delta} \cdot \varepsilon \cdot x - Q(x; \varepsilon)], \quad (25)$$

$$Q(x; \varepsilon) = 2\alpha \int_0^\infty dy \frac{1 - e^{ixy}}{y^2} \cdot \frac{y^s e^{-y}}{[1 + \tilde{\Delta} \cdot P(y; \varepsilon)]^2}, \quad (26)$$

となる。従って変分エネルギーは

$$\varepsilon = -L(\varepsilon) + X(\varepsilon), \quad (27)$$

$$L(\varepsilon) = \tilde{\Delta} \int_0^\infty dx e^{-\delta \cdot x} \text{Im} \exp[-Q(x; \varepsilon) - i\tilde{\Delta} \cdot \varepsilon \cdot x], \quad (28)$$

$$X(\varepsilon) = 2\alpha \tilde{\Delta} \int_0^\infty dy y^{s-1} \cdot e^{-y} \cdot \left[\frac{P(y; \varepsilon)}{1 + \tilde{\Delta} \cdot P(y; \varepsilon)} \right]^2, \quad (29)$$

によって決められる。(24)における \pm は $\Phi^{(\pm)}$ のそれに対応する。(25)~(29)は $\Phi^{(\pm)}$ いずれに対しても有効である。動的補償によって赤外発散はない。ひとこと注釈しておきたいことがある。(24)にはもともと $\tilde{\Delta} \cdot \omega_j \cdot P/[\omega_j + \tilde{\Delta} \cdot \omega_j \cdot P]$ が現れる。 P を(25)によって定義することによって赤外特性を予め取り出している。

白色極限 $\bar{\Delta} \ll 1$ において P, Q, X を評価しよう。最初に指摘すべきことは、(26) で定義される $Q(x; \varepsilon)$ を $w(x)$ によって置きかえてよいということ。従って P と X は、注釈 [9] に説明した理由によって無視してよい。固有値方程式は

$$\varepsilon = -L_0(\varepsilon), \quad (30)$$

$$L_0(\varepsilon) = \bar{\Delta} \int_0^\infty dx e^{-\delta \cdot x} \text{Im} \exp[-i\bar{\Delta} \cdot \varepsilon \cdot x - w(x)], \quad (31)$$

と近似することになる。為された近似をコヒーレント状態を指定するパラメータ ξ_j でみてみよう。 $s \leq 1$ の場合すべての j に対して $\xi_j = 0$ 、 $s > 1$ の場合 $0 \leq \omega_j/\Delta < |\varepsilon_G|$ のボソンに対して $\xi_j = (\lambda_j/\omega_j) \cdot \sigma_z$, $\sigma_z = \pm 1$, その他のボソンに対して $\xi_j = 0$ となっている。このことの意味は後に議論する。ここで最低エネルギーを ε_G と書いた。系の基底状態については第4章で論ずる。

(30) は (21) において初めから $\bar{\xi} = 0$ とおいたものにほかならない。論文 [1,2] で対角近似と呼んだものである。

(31) は外部パラメータとして $\bar{\Delta}$ と α のみを含む。 $\bar{\Delta}$ を固定して α の関数としてどのような解 (トンネルコヒーレンスを持っているか、いないか) があるということに関心がある。 α が十分大きい強相互作用領域で解の性質をしれば、(31) は α の連続関数であるから、 α を弱めてもその性質は持続する。 s の値による $w(x)$ の性質の違いが重要である [9]。

(2-1) $s = 1$ の場合

$$\begin{aligned} L_0(\varepsilon) &= \bar{\Delta} \int_0^\infty dx e^{-\delta \cdot x} \text{Im} \frac{e^{-i\bar{\Delta} \cdot \varepsilon \cdot x}}{(1 - ix)^{2\alpha}} \\ &\cong \frac{\bar{\Delta}}{2\alpha - 1} \{1 + O(\bar{\Delta} \cdot \varepsilon)\}, \end{aligned} \quad (32)$$

となり、 $\alpha \gg 1$ に対して $|\varepsilon| < 1$ なる解は唯ひとつ

$$\varepsilon_G \cong -\frac{\bar{\Delta}}{2\alpha - 1} \quad (33)$$

しかない。これはトンネルコヒーレンスを消失した局在解である。固有値方程式は数式上もうひとつの解 $\varepsilon \cong 2\alpha/\bar{\Delta} \gg 1$ をもつが、これは ε_G と対をなすトンネリング励起状態のエネルギーではありえない非物理的解である。

数値解を第1図に示す。右から実線で入り、途中で破線となり、 $\alpha \rightarrow 0$ で $\varepsilon_G = -1$ となる曲線である。縦軸は対数尺である。図の外になるが、 α が大きくなると (33) に接続する。

(2-2) $1 > s > 0$ の場合

L_0 の被積分関数は、 $s = 1$ の場合と同様に、 $w(x)$ によって支配され、 x の大きい領域は寄与しない。従って

$$L_0(\varepsilon) \cong \frac{1}{2\alpha\Gamma(s) - \bar{\Delta} \cdot \varepsilon}, \quad (34)$$

となり、唯一の局在解

$$\varepsilon_G \cong -\frac{\bar{\Delta}}{2\alpha\Gamma(s)}, \quad (35)$$

を持つ。数値解を第3図に示した。右から実線で入ってくる曲線である。途中から破線に変わるが α の0極限まで続く。

(2-3) $s > 1$ の場合

$$L_0(\epsilon) = \bar{\Delta} \int_0^\infty dx e^{-\delta \cdot x} \text{Im} \exp[i\bar{\Delta} \cdot \epsilon \cdot x - 2\alpha\Gamma(s-1)\{1 - \frac{1}{(1-ix)^{s-1}}\}], \quad (36)$$

なる故、被積分関数の性質は $s \leq 1$ の場合から大きく変わる。 $w(x)$ は大きな x に対する収束因子とならない。積分へ寄与する x の主領域は $1/\bar{\Delta} \cdot |\epsilon|$ 近傍となるから $w(x)$ を $2\alpha\Gamma(s-1)$ と近似して

$$L_0(\epsilon) \cong -\frac{1}{\epsilon} e^{-2\alpha\Gamma(s-1)}, \quad (37)$$

と評価される。従ってふたつの解が存在し、その一方は

$$\epsilon_G \cong -e^{-\alpha\Gamma(s-1)}, \quad (38)$$

であり、他方は ϵ_G と対をなすトンネリング励起状態のエネルギー

$$\epsilon_T \cong e^{-\alpha\Gamma(s-1)}, \quad (39)$$

となる。 $s > 1$ の場合には、(36) はトンネルコヒーレンスを持つ基底状態を与える。

(36) による数値計算の結果は示さない。次章で別の公式による結果を第4図に示すが、(36) は ϵ_G を良く近似している。

(2-4) まとめ

白色極限で正当化される (30), (31) は

- (i) $s \leq 1$ の場合、 α の全域で唯一の局在最低エネルギー状態を与える。 $\alpha > \alpha_c$ で基底状態となる (第4章)。
- (ii) 基底エネルギー ϵ_G は断熱繰り込みによる局在値 $\epsilon_G^{ad} = 0$ より低い。
- (iii) $s > 1$ に対してトンネリング基底状態を与える。 ϵ_G と ϵ_G^{ad} との差は小さい。
- (iv) 局在解の場合 $\vec{\xi} = 0$ である。変位ボソンはその平衡点のまわりで安定である。
- (v) トンネリング解の場合、高エネルギーボソンは $\vec{\xi} = 0$ であるが、低エネルギーボソン ($\omega_j/\Delta < |\epsilon_G|$) は $\xi_j = (\lambda_j/\omega_j) \cdot \sigma_z$ であり、局在していないことを意味する。

3. 最底エネルギー状態：弱相互作用領域から [1,2,7,8]

ボソン波動関数 (17) に基づく理論は、 $s \leq 1$ の場合局在最低エネルギー状態しか与えなかった。(1) 中の相互作用 H_{S-B} はトンネルコヒーレンスを破壊するものであるとはいえ、 $\alpha \neq 0$ ならばどんなに弱くともコヒーレンスが破壊されてしまうとは考え難い。我々の系は赤外発散がない系であるから。それ故、(17) とは異なった波動関数を構成して理論を展開してみよう。波動関数はトンネルコヒーレンスを持つとして、 Δ で特徴付けられている固有コヒーレンス (H_S が示すコヒーレンス) を顕わに取り出そう。(17) に代えて

$$\Psi^{(\pm)} = \Phi^{(\pm)} \pm \frac{\Delta}{(\tilde{H}_B - E)^2 - \Delta^2} \cdot e^{\pm v} \cdot u^{(\pm)} \cdot \Phi^{(\mp)}, \quad (40)$$

ととる。 $\Phi^{(\pm)}$ は

$$\{(\tilde{H}_B - E^2) - \Delta^2 - \Delta^2 \cdot \hat{M}^{(\pm)}\} \Phi^{(\pm)} = 0, \quad (41)$$

$$\hat{M}^{(\pm)} \equiv -e^{\pm v} \cdot u^{(\pm)} \cdot \frac{1}{(\tilde{H}_B - E)^2 - \Delta^2} \cdot u^{(\pm)} \cdot e^{\mp v}, \quad (42)$$

によって決められる [1,2,7,8]。ここで $u^{(\pm)} = u \pm 2\alpha\omega_c \Gamma(s)$ 。 $\Phi^{(\pm)}$ の意味は前章と同様に説明される。重要な違いは自己エネルギー $\hat{M}^{(\pm)}$ がトンネルコヒーレンスを顕わに取り入れて定義されていること。従って、 Δ で表されるトンネルコヒーレンスと v 及び u で導入されるコヒーレンス破壊効果との競合として記述している。これらの表式は近似を全く含まない正確式であるが、エネルギー分母中の Δ がその実効値に置き換わっていないという意味でトンネルコヒーレンスを強調しすぎているというべきであろう。弱相互作用領域からの接近という理由である。

(20) と同様に試行関数をコヒーレント状態の積に取って変分しよう。出発点となる式は

$$\left\{ \sum_j \omega_j |\xi_j|^2 - E \right\}^2 + \sum_j \omega_j^2 |\xi_j|^2 - \Delta^2 \{1 + M^{(\pm)}(\vec{\xi}^*, \vec{\xi})\} = 0, \quad (43)$$

$$M^{(\pm)}(\vec{\xi}^*, \vec{\xi}) \equiv \langle \vec{\xi} | \hat{M}^{(\pm)} | \vec{\xi} \rangle$$

$$= \frac{1}{\tilde{\Delta}} \int_0^\infty dx e^{-\delta \cdot x} \sin(\tilde{\Delta} x)$$

$$\times \text{Re} \left\{ \exp \left[- \sum_j (1 - e^{i\omega_j x / \omega_c}) \left\{ |\xi_j|^2 \mp \frac{\lambda_j}{\omega_j} (\xi_j + \xi_j^*) \right\} \right. \right.$$

$$\left. \left. - i\tilde{\Delta} \cdot \varepsilon \cdot x - w(x) \right] \cdot [k_{s+1}(x) + \{k_s(x) \mp \frac{1}{\omega_c} \sum_l \lambda_l (\xi_l^* + \xi_l e^{i\omega_l x / \omega_c})\} \right.$$

$$\left. \left. \cdot \{k_s(x) \mp \frac{1}{\omega_c} \sum_l \lambda_l (\xi_l^* e^{i\omega_l x / \omega_c} + \xi_l)\} \right] \right\}, \quad (44)$$

である。ここで $k_s(x) = 2\alpha\Gamma(s)/(1-ix)^s$ 。変分表式は複雑で長々しいので文献 [8] を参照していただく。白色極限の結果をコヒーレンス状態を指定するパラメータ

$$\xi_j = \bar{\Delta} \cdot \frac{\lambda_j}{\omega_j} \cdot \Lambda_T\left(\frac{\omega_j}{\omega_c}; \varepsilon\right) \cdot \sigma_z, \quad (\sigma_z = \pm 1), \quad (45)$$

で書くと、 $s = 1$ に対して

$$\Lambda_T(y; \varepsilon) \sim \frac{\bar{\Delta}^k \cdot \ln(1/\bar{\Delta})}{y + b \cdot \bar{\Delta}^{1+k} \cdot \ln(1/\bar{\Delta})}, \quad (46)$$

$k = 1/4 + 2\alpha(1 + 2\alpha)$, $s \neq 1$ に対して

$$\Lambda_T(y; \varepsilon) \sim \frac{\bar{\Delta}^q}{y + b' \cdot \bar{\Delta}^{1+q}} \quad (47)$$

$q = 1, s > 1$, および $q = (1+s)/(3-s), 1 > s > 0$, となる。 b と b' は正であり、それらの ε 依存は無視しうる。物理的意味は $\omega_j/\Delta \lesssim \bar{\Delta}^k \cdot \ln(1/\bar{\Delta})$ 又は $\bar{\Delta}^q$ のボソンに対して $\xi_j = (\lambda_j/\omega_j) \cdot \sigma_z$, 残り的高エネルギー領域のボソンに対して $\xi_j = 0$ ということ。エネルギーを決めるとき、 $\xi \neq 0$ の寄与は高次補正となるので、(43) で $\xi = 0$ と取り

$$\varepsilon^2 = 1 + M_0(\varepsilon), \quad (48)$$

$$M_0(\varepsilon) = \frac{1}{\bar{\Delta}} \int_0^\infty dx e^{-\delta \cdot x} \sin(\bar{\Delta} \cdot x) \\ \times \text{Re}(\{k_{s+1}(x) + [k_s(x)]^2\} \cdot \exp[-i\bar{\Delta} \cdot \varepsilon \cdot x - w(x)]), \quad (49)$$

となる。これは $\Phi^{(\pm)}$ いずれにも有効。[1,2] で導入した対角近似が白色極限で保証されたことになる。

(48) を解析的に調べることは容易でない。数値計算の結果 [1,2,7,8] をまとめる。

(3-1) $s = 1$ の場合

最も関心を持たれている場合である。トンネルコヒーレンスは α がある値 α_m より小さい時生き残る。第1図において $\alpha = 0$ で -1 となる実線が ε_G である。十分に白色でない場合には α_m 近傍は破線で示してある (次章参照)。 c を1程度の正定数として

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \{1 + c \cdot \bar{\Delta}^{2\alpha} \cdot \ln(1/\bar{\Delta})\}, \quad (50)$$

と見積られる (表I参照)。白色極限で $\alpha_m \rightarrow 1/2$ である。有効値 Δ_{eff}/Δ を第2図に示す。 $\alpha \rightarrow \alpha_m$ で $\Delta_{eff} \rightarrow 0$ となる。 ε_G の上 $2\Delta_{eff}/\Delta$ にトンネリング励起状態 (そのエネルギーを ε_T とする) がある。 $\alpha > \alpha_m$ では ε に実数値を与える解はない。(48) を充す物理的解が存在しなくなったと解釈する。第4図中に $s = 1$ の場合の ε_G と ε_T を同時に示す (白色極限)。 α の全域にわたる描像は次

章で扱う。

(3-2) $1 > s > 0$ の場合

第3図に $s = 1/2$ の場合の結果を示す。横軸 α の値に注意。トンネルコヒーレンスは白色極限では残存しない。白色だが Δ が無限小でない場合に α の極めて弱い領域で生き残れる。

(3-3) $s > 1$ の場合

白色極限では α の全域でトンネルコヒーレンスがある (第4図)。断熱近似においてすら赤外発散は存在しなかったため、(48)、(30)、断熱繰り込み (11)、完全追従近似 (9) いずれも問題とする程の定量的差異はない。

4. 基底状態の相図 [7,8]

前二章で明らかになったことは、 $1 \geq s > 0$ の場合波動関数 (17) はトンネルコヒーレンスを失った局在最低エネルギー状態を与え、(40) はトンネルコヒーレンスを持つトンネリング最低エネルギー状態を与える (ただし $\alpha < \alpha_m$) ということである。 $s > 1$ の場合にはともにトンネリング基底状態を与える。これらの結果によって基底状態の相図を α の関数として与えよう。

(4-1) $s = 1$ の場合

第1図に白色領域における基底エネルギーを実線で示した。トンネリング解と局在解は臨界値 α_c で交差する。 α_c は表 I に与えた。相図を第5図に示した。 α_c においてトンネリング状態と局在状態との間で弱い一次転移をする。トンネリング間隙は第2図に見られるように微少である。安定状態、準安定状態 (第1図中の破線) を表 II にまとめてある。第1図には $\omega_c/2\Delta = 10^4$ の場合に断熱繰り込みによる基底エネルギーを点線で示した。それは本研究の値よりも α の全域で高いエネルギーをもつ。

白色極限では

$$\alpha_c = \alpha_m = \frac{1}{2}, \tag{51}$$

となり、二次転移する。この臨界値は断熱繰り込みの $\alpha_c^{ad} = 1$ と大きく異なっている。

表 I $s = 1$ の場合の α_c と α_m

$2\Delta/\omega_c$	α_c	α_m
10^2	0.513	0.526
10^3	0.502	0.505
10^4	0.500	0.500

表 II 安定 (基底) 状態と準安定状態

	トンネリング解	局在解
$\alpha < \alpha_c$	安定	準安定
$\alpha_c < \alpha < \alpha_m$	準安定	安定
$\alpha_m < \alpha$	存在せず	安定

(4-2) $1 > s > 0$ の場合

第3図に $s = 1/2$ の場合を例示した。白色領域での定性的相図は $s = 1$ の場合に似ているが、決定的な違いは白色極限で $\alpha > 0$ の全域でトンネリング解は存在せず、局在解となることである ($\alpha_c = \alpha_m \rightarrow 0$)。

(4-3) $s > 1$ の場合

白色極限では α の全域でトンネリング解である。 α の増大はトンネルコヒーレンスを弱めるが破壊しつくすことはない。

5. 赤外破綻 対 動的補償

本研究の動的補償理論は赤外破綻に基づくパラダイム理論 [5,10] と $1 \geq s > 0$ の場合に本質的に異なる記述を与える。この点について検討しよう。

すでに証明したように、本研究のスピン-ボソン系には赤外発散はもともと存在しない。赤外破綻の概念を持ち込むことを試みてみよう。第1章で概略説明したように、動的補償の核心は (23) で与えられる関数 $w(x)$ にある。動的補償の内容のうち赤外発散を除去するという点を強調して、(23) における $1 - \exp[i\omega_j x/\omega_c]$ を $\omega_j x/\omega_c = 1$ で性格分けして $\omega_j/\omega_c < 1/x$ で 0 , $\omega_j/\omega_c > 1/x$ で 1 と置き換えよう。動的ゆらぎの寄与は低エネルギー領域では零点ゆらぎからの寄与と互いに打ち消し合い、高エネルギー領域では自ら互いに打ち消し合うと考える。

$$w(x) \cong 2\alpha \int_{\omega_c/x}^{\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2}, \tag{52}$$

とし、赤外領域を ω_c/x で切断したことになる。赤外破綻概念による断熱繰り込み (11) と対応させれば $x = \omega_c/2\Delta_{eff}$ となる。(23) が示すように完全に動的補償された $w(x)$ の x の特性値は $x = 1$ しかない。動的補償は赤外発散を補償するだけでなく、全エネルギー領域のボソンに寄与させるのである。赤外発散の断熱繰り込みは x の特性量を桁違いの量に変えてしまう。

固有値方程式を与える関数 L_0 , (31), あるいは M_0 , (49), の被積分関数は x の特性値には $w(x)$ および $k_s(x)$ から決まる $x = 1$ の他に、 $x = 1/\bar{\Delta} \cdot |\varepsilon| \sim \omega_c/|\varepsilon_G|$ と (M_0 の場合さらに) $1/\bar{\Delta} = \omega_c/\Delta$ がある。トンネリング解の場合 $\omega_c/|\varepsilon_G| \sim \omega_c/\Delta_{eff}$ である。赤外破綻理論ではひとつの特性値 $\sim \omega_c/\Delta_{eff}$ に帰してしまっただけになる。このことは理論の性格を本質的に変える。今一度 $w(x)$ の表式を見て欲しい。 $1 \geq s > 0$ では $w(x)$ の実部は x の増大とともに増大し、 $x \geq 1$ に対して $\exp[-w(x)]$ は 0 とみなされる。もう一方の特性値は二次的な意味しか持たなくなる。赤外破綻理論ではこの二次的特性値が主役となってしまふ。 $s = 1$ における α_c の相違はここに起因している [11]。

$s > 1$ の場合には $x \geq 1$ に対して動的補償による寄与は無視出来るようになり、 $w(x)$ は零点ゆらぎによる一定値になる。 x の積分領域は特性値 $\omega_c/\Delta_{eff} (\gg 1)$ 程度拡っており積分域の全域

で w を一定に取ってよい。即ち、 $w(x)$ に切断作用はないことになる。これは $s > 1$ の場合に零点ゆらぎの寄与すら赤外発散を持たないことに由来する。動的補償理論も x の特性値は、他の理論と同様に、 ω_c/Δ_{eff} となる。いくつかの理論が定量的にすら同じ結果を与えるのは当然である。

なお、第一章で解説した断熱繰り込み法 [6] は最適コヒーレント状態抽出法といえる。この観点での Gross の仕事 [12] はそれなりに面白い。近藤問題における Anderson 達の繰り込み群方程式の処方 [13,14] の応用 [15,5] や長距離力をもつイジング系への写映法 [16] 等は赤外破綻を作業概念として採用している故、本著者には受け入れ難いものである。

Gross は第三論文 [17] において、本研究でいう強相互作用領域からの理論を \hat{H}_S の二次摂動で展開している。動的補償は摂動展開においても各次で成立するので、補償を受けた表式を導いていることを極く最近知った [8]。同時期の独立な仕事であるが、動的補償という一般概念に到らなかったことを残念に思う。第三章のトンネリング状態の取扱いは本著者の独創である [18]。

以上によって、スピン-ボソン系 (1) の基底状態について基本的な理解を得たと考える。励起状態についての予備的考察は論文 [21] にある。

6. 新しい熱平均計算法 [22]

状態和や有限温度における動力学を調べるためには熱平均を取る必要がある。本研究の過程でカノニカル平均を微分操作で計算する方法を開発した。後章で使うのでここに簡単に紹介しておく。

統計演算子 $\hat{\rho}(\beta) \equiv \exp[-\beta\hat{H}_0]/\text{Tr} \exp[-\beta\hat{H}_0]$, $\hat{H}_0 = \sum_j \epsilon_j a_j^\dagger a_j$, による任意の演算子 $\hat{A}(a^+, a)$ の平均は公式

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &\equiv \text{Tr} \hat{\rho}(\beta) \hat{A}(a^+, a) \\ &= \exp \left[\sum_j f(\epsilon_j) \frac{\partial}{\partial \xi_j} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j^*} \right] A(\vec{\xi}^*, \vec{\xi}) \Big|_{\vec{\xi}=\vec{\xi}^*=0}, \end{aligned} \quad (53)$$

によって計算出来る。ここで a_j と a_j^\dagger はボーズ統計またはフェルミ統計に従う消滅および発生演算子。 ξ_j は a_j のコヒーレント状態 (Glauber 状態または Grassmann 状態) の指標で、複素数または Grassmann 数である。 $f(\epsilon_j)$ はボーズまたはフェルミ分布関数。 $\hat{A}(a^+, a)$ はノーマルオーダーリングで表現されているとする。この公式の興味ある特色は、力学と熱統計効果を完全に分離するところにある。[第1段階] 相互作用に由来する力学と量子ゆらぎ (零点ゆらぎ) の効果を取り入れた (即ち、絶対零度での量子力学により決まる) コヒーレント状態表示 $A(\vec{\xi}^*, \vec{\xi})$ を見い出せ。[第2段階] 公式 (53) によって温度効果を計算せよ。

7. 状態和 [23-26]

全系の状態和を $Z(\beta) = Z_B(\beta) \cdot 2U(\beta)$ と書くと、前章の方法を用いて $U(\tau) = \tilde{U}(\tau; 0, 0)$,

$$\tilde{U}(\tau; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}) = \exp \left[\sum_j f_B(\omega_j) \frac{\partial}{\partial \xi_j} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j^*} \right] U(\tau; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}), \quad (54)$$

$$U(\tau; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}) \equiv \langle \vec{\xi}, \uparrow | e^{\tau \tilde{H}_B} \cdot e^{-\tau \tilde{H}} | \uparrow, \vec{\xi} \rangle, \quad (55)$$

によって計算する。ここで $Z_B(\beta) = \text{Tr} \exp[-\beta \tilde{H}_B]$, $f_B(\omega) = 1/[e^{\beta\omega} - 1]$ 。計算技術として変数 $\tau(\beta \geq \tau \geq 0)$ を導入した。基底状態の場合と同様に、 $U(\tau; \vec{\xi}^*, \vec{\xi})$ を強相互作用領域と弱相互作用領域 ($s \leq 1$ では局在領域とトンネリング領域) で導く。

(7-1) 強相互作用領域

$x = \omega_c \tau$ として

$$\begin{aligned} U(x; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}) &= 1 + \bar{\Delta}^2 \int_0^x dx_1 \int_0^{x_1} d\tau_2 \exp[-w(i(x_1 - x_2)) + V(x_1, x_2; \vec{\xi}^*, \vec{\xi})] \\ &\cdot \exp \left[V \left(x_1, x_2; 0, \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}^*} \right) \right] U(x_2; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}), \end{aligned} \quad (56)$$

$$V(x_1, x_2; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}) = v \left(-\frac{ix_1}{\omega_c}; \vec{\xi}^*, \vec{\xi} \right) - v \left(-\frac{ix_2}{\omega_c}; \vec{\xi}^*, \vec{\xi} \right), \quad (57)$$

$$v(t; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}) = \sum_j \frac{\lambda_j}{\omega_j} (e^{i\omega_j t} \xi_j^* - e^{-i\omega_j t} \xi_j), \quad (58)$$

となる。零点ゆらぎに対する動的補償は w によって表されている。熱的ゆらぎに関して顕わに見るため (54) によって \tilde{U} の方程式にすると

$$\begin{aligned} \tilde{U}(x; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}) &= 1 + \bar{\Delta}^2 \int_0^x dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \exp[-W_T(x_1 - x_2) \\ &+ V(x_1, x_2; \vec{\xi}^*, \vec{\xi})] \cdot \exp \left[D \left(x_1, x_2; \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}}, \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}^*} \right) \right] \tilde{U}_2(x_2; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}), \end{aligned} \quad (59)$$

$$D(x_1, x_2; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}) = V \left(x_1, x_2; \left\{ f_B(\omega_j) \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right\}, \left\{ [1 + f_B(\omega_j)] \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j^*} \right\} \right), \quad (60)$$

$$W_T(x) = w(ix) + 2 \sum_j \left(\frac{\lambda_j}{\omega_j} \right)^2 \left\{ 1 - \cosh \frac{\omega_j x}{\omega_c} \right\} \cdot f_B(\omega_j), \quad (61)$$

となる。\$W_T\$の右辺第2項中 \$\cosh\$ に依存する部分が動的補償を表し、熱的ゆらぎによる赤外発散を補償する。零点ゆらぎも熱的ゆらぎも、赤外領域で同じエネルギー依存性を持つようになる。動的補償のもたらす興味深い性質である。\$\bar{U}\$は赤外発散とは無縁である。

(7-2) 弱相互作用領域

スピンの固有トンネルコヒーレンスを顕わに取り入れて、\$\bar{U}\$に対する方程式を書くと

$$\begin{aligned} \bar{U}(x; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}) &= \cosh x \bar{\Delta} + \int_0^x dx_1 G_1(x, x_1, 0) \cdot \frac{\partial}{\partial x_1} \exp[-W_T(x_1) + V(x_1, 0; \vec{\xi}^*, \vec{\xi})] \\ &+ \int_0^x dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 G_1(x, x_1, x_2) \left\{ \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_2} \exp[-W_T(x_1 - x_2) \right. \\ &\left. + V(x_1, x_2; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}) \right\} \cdot \exp \left[D(x_1, x_2; \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}}, \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}^*}) \right] \cdot \bar{U}(x_2; \vec{\xi}^*, \vec{\xi}), \end{aligned} \quad (62)$$

$$G_1(x, x_1, x_2) = \sinh(x - x_1) \bar{\Delta} \cdot \sinh(x_1 - x_2) \bar{\Delta}, \quad (63)$$

となる。\$U(x; \vec{\xi}^*, \vec{\xi})\$に対する方程式は(62)において \$W_T(x_1), W_T(x_1 - x_2)\$をそれぞれ \$w(ix_1), w(i(x_1 - x_2))\$に代え、\$D \to V(x_1, x_2; 0, \partial/\partial \vec{\xi})\$として得られる。

状態和は動的補償によって赤外発散とは無縁であることが明らかになった。基底エネルギーに対して動的補償は大きな効果があった。有限温度効果についてはどうであろうか。まず \$\delta W_T \equiv W_T - w\$が示す温度依存性を見よう。\$x_c \equiv \beta \omega_c\$として

$$\delta W_T(x) = 4\alpha \int_0^\infty dy y^{s-2} e^{-y} \cdot \frac{1 - \cosh(x \cdot y)}{e^{x_c \cdot y} - 1} \quad (64)$$

関心のある温度領域 \$x_c \gg \beta \Delta \gg 1\$では、\$s = 1\$に対して

$$\delta W_T(x) \cong 2\alpha \ln \left[\frac{x_c}{\pi x} \sin \left(\frac{\pi x}{x_c} \right) \right]$$

と近似される。\$x\$の特性値は \$x_c\$程度であることを示し、\$\exp[-W_T(x)]\$については無視してよい(\$w(ix)\$に支配される)。\$1 > s > 0\$に対しても特性値を \$x_c^{(s+1)/2}\$程度とみなして同様な議論が出来る。\$s > 1\$の場合には、特性値は \$x_c^{(s+1)/2}\$と見積れることは同じであるが、基底エネルギーの場合と同様に切断関数としての働きはない。まとめると \$s \le 1\$に対して温度効果は弱いと期待される。実際、\$s = 1\$の場合のトンネリング間隔 \$\Delta_{eff}(T)/\Delta\$を切断近似 [25] で評価すると第6図と

なる。十分低温では温度依存性はほとんどなく、従って比熱を計算すれば $\Delta_{eff}(T)$ で特徴付けられるショットキー型となる。

スピン-ボソン相互作用の効果は基底状態で尽くされている。

熱力学の定量的解析はこれからの課題である。

8. 動力学 [27]

スピン S の持つ固有トンネルコヒーレンスが環境 B の作用によって破壊されるか、あるいは持続するか、その時間的挙動に関心がある [5]。次の初期条件を採用する。

[初期条件] 時刻 $t < 0$ でスピンは上向き状態にあり、ボソンは H_B で指定される熱平均状態にあったとする。 $t = 0$ でこの拘束が解かれる。

S 行列を $\hat{S}(t) \equiv \exp[i\tilde{H}_B t] \cdot \exp[-i\tilde{H} t]$ と書く。時刻 t において上向き状態にスピンを発見する確率

$$P_{\uparrow}(t) = \text{Tr} \hat{\rho}_B(\beta) |\langle \uparrow | \hat{S}(t) | \uparrow \rangle|^2, \quad (65)$$

σ_z の平均値

$$\langle \sigma_z(t) \rangle = \text{Tr} \hat{\rho}_B(\beta) \cdot \langle \uparrow | \hat{S}^+(t) \sigma_z \hat{S}(t) | \uparrow \rangle, \quad (66)$$

などの振舞いを知りたい。第6章の方法が使える。 \hat{S} のコヒーレント状態表示を求めることになる。 $x = \omega_c t$ と書くと、 $S_{11}(x; \xi, \xi) \equiv \langle \xi, \uparrow | \hat{S}(t) | \uparrow, \xi \rangle$ は前章の U の表式で x, x_1, x_2 を ix, ix_1, ix_2 で置き換えると得られる。 $S_{12}(x; \xi, \bar{\xi}) \equiv \langle \xi, \uparrow | \hat{S}(t) | \downarrow, \bar{\xi} \rangle$ 等については、表式が長くなるので、書き下すことはしない。

動力学において動的補償を担う基本関数は $w_T(x) = W_T(-ix)$ である。(65),(66) の構造に関する検討は [27] で行った。定量的検討は未だに進行していない。

9. 二重井戸系と動的補償 [28]

この章では、動的補償が、二準位スピン-ボソン系という特殊な系に限られたものではなく、縮退したポテンシャル極小をもつ量子トンネル系に対して有効な概念であることを示す。Caldeira-Leggett の二重井戸模型 [29,4] を例として採る。参考文献として [30,31] を挙げておく。ここでは \hbar を復元する。

ハミルトニアン (1) で H_S と H_{S-B} を

$$H_S = \frac{1}{2M} P^2 + V(Q), \quad V(Q) = \frac{M\nu^2}{8\bar{Q}^2} (Q^2 - \bar{Q}^2)^2, \quad (67)$$

$$H_{S-B} = \frac{1}{2} u \cdot Q + gQ^2, \quad u = \sum_j C_j (b_j^\dagger + b_j), \quad (68)$$

ととる。スペクトル強度は

$$\sum_j C_j^2 \delta(\omega_j - \omega) = \frac{4\hbar\eta}{\pi} J(\omega). \quad (69)$$

$J(\omega)$ は (3) と同じ。 η は抵抗係数の次元をもつ正定数。 $g \equiv \sum_j C_j^2 / 4\hbar\omega_j = \Gamma(s)\omega_c\eta/\pi$ 。 H_{S-B} 中 gQ^2 は counter 項と呼ばれ、 H_S を不変にするよう加えられた。

動的補償の概念を導入しようとするとき、以前のスピン-ボソン系との大きな違いに気付く。実際、以前との類推で変換

$$U = \exp\left[\frac{1}{2}Q \cdot v\right], \quad v = \sum_j \frac{C_j}{\hbar\omega_j} (b_j^+ - b_j), \quad (70)$$

によって H_{S-B} を消去してもうまくない。二準位系の場合には、 Q は 2 値であるから、量子数 j のボソンに対してコヒーレントボソン演算子 U は唯ひとつであった。二重井戸系では無限に準位があるので、しかるべき準備が必要になる。

H_S の固有値 Ω_n と固有関数 ϕ_n は既知としよう。 $\phi_n(-Q) = (-1)^n \phi_n(Q)$ 。 $n = 0$ を基底状態とし、エネルギーの大きさの順に状態を番号付けた。隣り合った偶数番目と奇数番目の状態 $(2n, 2n+1)$ に組分けすると、下から $V(0)/\hbar\nu = M\nu Q^2/8\hbar$ 程度の組がそれぞれ微少なトンネリング間隙だけ分裂していると考えてよい。(70) に代えて、これらの組ごとにユニタリ変換を導入すれば、スピン-ボソン系で開発した方法が使えるだろう。

規格完全直交系 $\{|n\rangle\}$ として

$$|2n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\phi_{2n}(Q) + \phi_{2n+1}(Q)\} \quad (71)$$

$$|2n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\phi_{2n}(Q) - \phi_{2n+1}(Q)\}$$

を採る。 $|2n\rangle$ と $|2n+1\rangle$ はそれぞれ右および左の井戸領域に高い確率振幅を与えるとする。全系の波動関数 Ψ を

$$\Psi = \sum_n X_n(\{b_j^+, b_j\}) \cdot |n\rangle, \quad (72)$$

と展開すると、 $H\Psi = E\Psi$ から

$$\begin{aligned} & \{H_B + \frac{1}{2}Q_k \cdot u + gQ_k^2 + \tilde{\Omega}_k - E\} X_{2k} - \Delta_k \cdot X_{2k+1} \\ &= - \sum_{n \neq k} \{ \langle 2k | H_{S-B} | 2n \rangle X_{2n} + \langle 2k | H_{S-B} | 2n+1 \rangle X_{2n+1} \}, \end{aligned} \quad (73)$$

$$\begin{aligned} & \{H_B - \frac{1}{2}Q_k \cdot u + gQ_k^2 + \tilde{\Omega}_k - E\} X_{2k+1} - \Delta_k \cdot X_{2k} \\ &= - \sum_{n \neq k} \{ \langle 2k+1 | H_{S-B} | 2n \rangle X_{2n} + \langle 2k+1 | H_{S-B} | 2n+1 \rangle X_{2n+1} \}, \end{aligned} \quad (74)$$

をうる。ここで記号

$$\begin{aligned}
 Q_k &\equiv \langle 2k|Q|2k \rangle = - \langle 2k+1|Q|2k+1 \rangle, \\
 \tilde{\Omega}_k &\equiv \frac{1}{2}(\Omega_{2k+1} + \Omega_{2k}) + g\{\langle 2k|Q^2|2k \rangle - Q_k^2\}, \\
 \Delta_k &\equiv \frac{1}{2}(\Omega_{2k+1} - \Omega_{2k}) - g \langle 2k|Q^2|2k+1 \rangle,
 \end{aligned} \tag{75}$$

を導入した。 $\langle 2k+1|Q^2|2k+1 \rangle = \langle 2k|Q^2|2k \rangle$ を用いている。ユニタリ変換

$$U_k = \exp\left[\frac{1}{2}Q_k \cdot v\right], \quad v = \sum_j \frac{C_j}{\hbar\omega_j}(b_j^+ - b_j), \tag{76}$$

によって変位したボソンの波動関数

$$\Psi_{2k} = U_k \cdot X_{2k}, \quad \Psi_{2k+1} = U_k^{-1} \cdot X_{2k+1}, \tag{77}$$

を定義すると、(73) と (74) は

$$\{\tilde{H}_B + \tilde{\Omega}_k - E\}\Psi_{2k} - \Delta_k \cdot e^{Q_k \cdot v} \Psi_{2k+1} = -R_{2k}, \tag{78}$$

$$\{\tilde{H}_B + \tilde{\Omega}_k - E\}\Psi_{2k+1} - \Delta_k \cdot e^{-Q_k \cdot v} \Psi_{2k} = -R_{2k+1}, \tag{79}$$

$$\begin{aligned}
 R_{2k} = \sum_{n \neq k} &\left[U_k \cdot \langle 2k|H_{S-B}|2n \rangle \cdot U_n^{-1} \Psi_{2n} \right. \\
 &\left. + U_k \cdot \langle 2k|H_{S-B}|2n+1 \rangle \cdot U_n \Psi_{2n+1} \right], \tag{80}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 R_{2k+1} = \sum_{n \neq k} &\left[U_k^{-1} \cdot \langle 2k+1|H_{S-B}|2n \rangle U_n^{-1} \Psi_{2n} \right. \\
 &\left. + U_k^{-1} \cdot \langle 2k+1|H_{S-B}|2n+1 \rangle U_n \Psi_{2n+1} \right], \tag{81}
 \end{aligned}$$

となる。(78),(79) が我々の基礎方程式である。
(9-1) 二準位近似

最低の二準位だけで閉じる。(78),(79)で右辺を無視して

$$\{\tilde{H}_B + \tilde{\Omega}_0 - E\}\Psi_0 - \Delta_0 \cdot e^{Q_0 \cdot v} \Psi_1 = 0, \quad (82)$$

$$\{\tilde{H}_B + \tilde{\Omega}_0 - E\}\Psi_1 - \Delta_0 \cdot e^{-Q_0 \cdot v} \Psi_0 = 0, \quad (83)$$

となり、既に論じたスピン-ボソン系と同じになる。断熱繰り込みによる基底エネルギーの計算は [32] にある。

(9-2) 四準位近似

最低の四準位だけで閉じる。4個の独立な波動関数 $\Phi_l, l = 0 \sim 3$, を定義して Ψ_l 展開する。完全な表式をここに書き下すことはせず、最低の二準位に対する上位の二準位の効果を最低次で考慮することにする。

[強相互作用領域から] Φ_0 に対する固有値方程式は

$$\begin{aligned} & [\tilde{H}_B + \tilde{\Omega}_0 - E - \Delta_0 \cdot \hat{L}_0^{(+)} \\ & - (\Delta_0 \cdot \Delta_1)^{-1/2} \{G_{02} \hat{L}_{02}^{(+)} G_{20} + G_{03} \hat{L}_{03}^{(+)} G_{30}\}] \Phi_0 = 0, \end{aligned} \quad (84)$$

$$\hat{L}_0^{(+)} = U_0^2 \cdot \frac{\Delta_0}{\tilde{H}_B + \tilde{\Omega}_0 - E} \cdot U_0^{-2},$$

$$\hat{L}_{02}^{(+)} = \hat{L}_{20}^{(+)} = U_0 U_1^{-1} \cdot \frac{(\Delta_0 \cdot \Delta_1)^{1/2}}{\tilde{H}_B + \tilde{\Omega}_1 - E} \cdot U_1 U_0^{-1}, \quad (85)$$

$$\hat{L}_{03}^{(+)} = \hat{L}_{30}^{(+)} = U_0 U_1 \cdot \frac{(\Delta_0 \cdot \Delta_1)^{1/2}}{\tilde{H}_B + \tilde{\Omega}_1 - E} \cdot U_1^{-1} U_0^{-1},$$

$$G_{ij} = U_0 \cdot \langle i | H_{S-B} | j \rangle \cdot U_0^{-1}, \quad (86)$$

となる。 Φ_1 に対する方程式は $C_j \rightarrow -C_j$ (即ち、 $u \rightarrow -u, v \rightarrow -v$ および記号の定義として $\hat{L}^{(+)} \rightarrow \hat{L}^{(-)}$) として得られる。エネルギー準位 E は C_j の符号に依らないので、(84) は基底状態と第一励起状態のエネルギーを与える。それらが縮退していなければ、基底エネルギーと随伴トンネリング励起エネルギーを与える。縮退していれば、局在基底エネルギーとなる。

(84) は演算子 \hat{L} によってボソンの影響を受けている。既に知ったように \hat{L} は動的補償の演算子表現である。 G_{ij} は赤外発散をもたらさないので、(84) は赤外発散と無縁である。四準位系として正確な表式を作ってもこの結果は変わらない。

スピン-ボソン系の結果から、(84) は局在状態を与えると期待されるが、定量的解析は今後の課題である。

[弱相互作用領域から] Φ_0 に対する固有値方程式は

$$[(\tilde{H}_B + \tilde{\Omega}_0 - E)^2 - \Delta_0^2 - \Delta_0^2 \cdot \hat{M}_0^{(+)} - \Delta_0 \Delta_1 \{\hat{M}_{02}^{(+)} + \hat{M}_{03}^{(+)}\}] \Phi_0 = 0, \quad (87)$$

と書ける。ここで

$$\hat{M}_0^{(+)} = U_0^2 \cdot u^{(+)} \cdot \frac{1}{(\bar{H}_B + \bar{\Omega}_0 - E)^2 - \Delta_0^2} \cdot u^{(+)} \cdot U_0^{-2}, \quad (88)$$

$u^{(+)} = Q_0 u + 4Q_0^2 g$ 。 $\hat{M}_{02}^{(+)}$, $\hat{M}_{03}^{(+)}$ の表式は省略する。いずれの $\hat{M}^{(+)}$ も動的補償の演算子表現となっている。従って赤外発散を含まないことは示せた。

10. まとめと今後の課題

(10-1) スピン-ボソン系について

動的補償概念に基づく量子力学、統計力学および動力学の枠組を完成した。動的補償を担う基本関数は w およびその有限温度（かつ時間依存）への拡張 W_T （あるいは w_T ）である。この関数の特性が $s \leq 1$ の場合決定的に重要になる。パラダイムである赤外破綻理論は赤外発散を断熱繰り込みによって除去するが、この操作が基本関数 w の性質を全く変えてしまった。赤外ボソンだけではなく、広範なエネルギー領域のボソンが全体としてスピンとボソンの相互作用特性を決める。動的補償理論こそ正しい理論である。

基底状態の相図およびトンネルコヒーレンスが維持されている場合のトンネリング間隙を定めた。臨界値 $\alpha_c = 1/2$ は断熱繰り込み値 $\alpha_c^{ad} = 1$ と異なる。スピン-ボソン系を模型として適用可能な現実系では $\alpha \ll 1$ と見積られるようである。このような α の領域では、動的補償理論の記述と赤外破綻理論の記述との間の定量的差異は僅少である。 $\alpha > 1/2$ と見積られる現実系があればと思う。ふたつの理論の質的相違は大きいことを再度強調したい。

熱力学・統計力学と動力学については未だ定式化しただけに留まっている。定量的検討が今後の課題である。基底状態に対する変分方程式も簡単化することなく解いてみたいものである。

(10-2) 二重井戸系について

系 S が二重井戸系である場合の動的補償理論を試みた。この報告には概要を示したに過ぎないが、有効性を見取れたと思う。さまざまな量子トンネル系に応用したい。

11. 目標の達成度

スピン-ボソン系の基底状態については成果を挙げる事が出来た。定量的解析が手強わく、熱力学・統計力学、動力学に関しては定式化に留まったことは残念である。

二重井戸系への応用は当初計画には含まれていなかった。動的補償が量子トンネル系を研究するためのひとつの有効な概念であることを示した。評価に値する。

謝辞

本研究の過程で多くの方々に議論していただき、また御批判を賜った。お礼申し上げます。

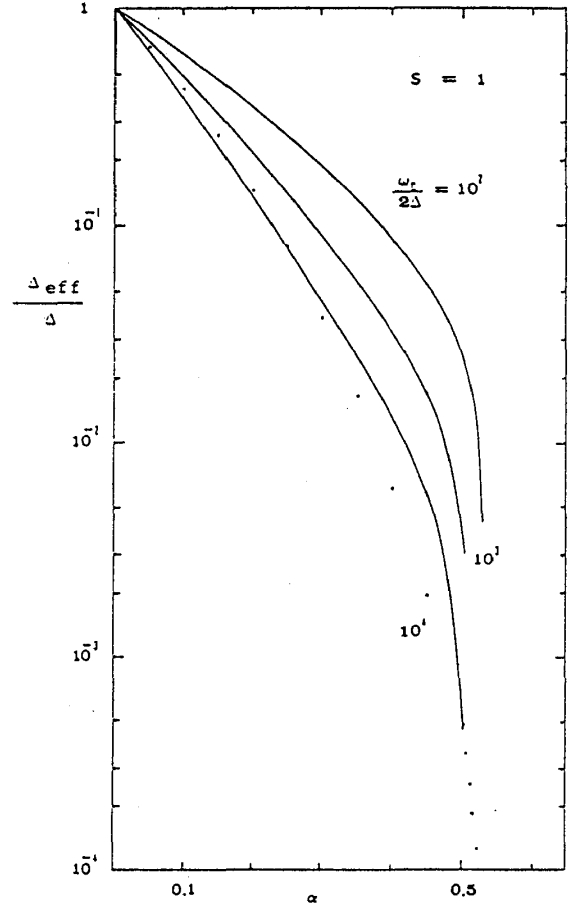
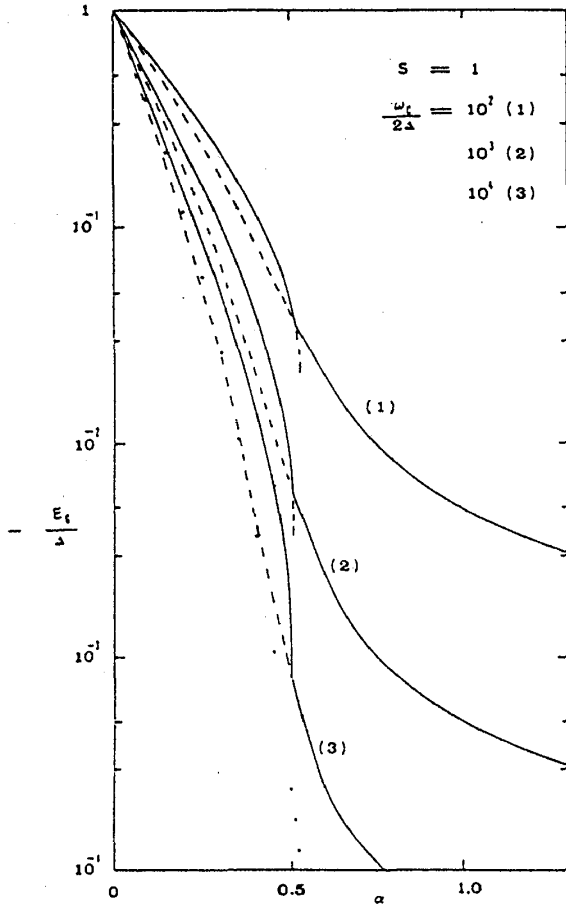
特に、近藤淳先生、斯波弘行先生、山田耕作先生には近藤効果、フェルミ面効果に係わって多大な御教示を賜りました。

本研究の数値計算は山形典子さんの補助なしには実行できませんでした。ここに記し、感謝いたします。東北大学大型計算機センターを利用しました。

文献と注釈

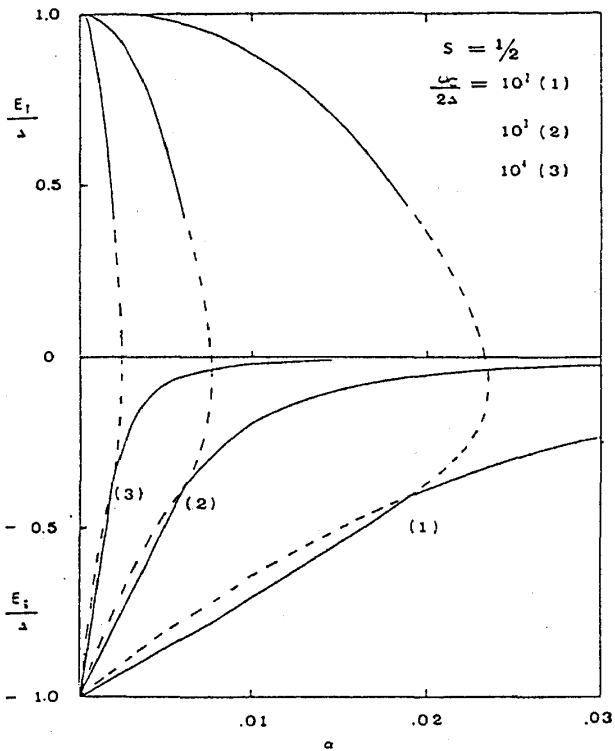
- [1] T.Tsuzuki, Solid State Commun. 71 (1989), 813. (研究発表論文 1)
- [2] T.Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. 82 (1989), 917. (研究発表論文 2)
- [3] A.J.Leggett, Prog. Theor. Phys. Suppl. No.69 (1980), 80.
- [4] A.O.Caldeira and A.J.Leggett, Ann. Phys. 149 (1983), 374.
- [5] A.J.Leggett, A.T.Dorsey, M.P.A.Fisher, A.Garg and W.Zwinger, Rev. Mod. Phys. 59 (1987), 1, およびそこに引用されている文献。
- [6] R.Silbey and R.A.Harris, J. Chem. Phys. 80 (1984), 2615.
- [7] T.Tsuzuki, Solid State Commun. 79 (1991), 9. (研究発表論文 11)
- [8] T.Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. 87 (1992), No.3. (研究発表論文 12)
- [9] 大きな x の領域における $w(x)$ の振舞いの違いに注目する。 $\exp[-w(x)]$ は、 $s \leq 1$ の場合には積分の収束因子として働くが、 $s > 1$ の場合には一定値に近づき収束作用はない。前者の場合 P は $O(\Delta)$ の一定値、後者の場合 $P \cong \exp[-2\alpha\Gamma(s-1)]/(y \cdot |\epsilon|) \sim |\epsilon_G|/y$ と評価できる。(26)において $y^2 \cdot (1 + \Delta \cdot P)^2 \rightarrow y^2$ とすることは、 $s \leq 1$ では良い近似であり、 $s > 1$ でも、発散が無いので、悪い近似ではない。以上の結果、 X/L は $s \leq 1$ に対して $O(\Delta^2)$ 、 $s > 1$ に対して $O(\Delta \cdot |\epsilon_G|)^{s-1}$ となる。ここで ϵ_G は結果として得られる最低エネルギーの値であり、 $s > 1$ に対して $\epsilon_G \cong -\exp[-\alpha\Gamma(s-1)]$ 。
- [10] 1987年頃以前の文献については[5]にほとんど尽くされている。以後については、本著者の知る限り、精密化研究であると思う。
- [11] 動的補償理論が $s < 1$ の場合にも白色領域でトンネリング解を与えるのもこのためである。
- [12] E.P.Gross, J. Stat. Phys. 54 (1989), 405 and 429.
- [13] P.W.Anderson and G.Yuval, Phys. Rev. Lett. 23 (1969), 89;
G.Yuval and P.W.Anderson, Phys. Rev. B1 (1970), 1522.
- [14] P.W.Anderson, G.Yuval and D.R.Hamann, Phys. Rev. B1 (1970), 4464.
- [15] F.Guina, V.Hakim and A.Muramatsu, Phys. Rev. B32 (1985), 4410.
- [16] H.Spohn and R.Dümcke, J. Stat. Phys. 41 (1985), 389.
- [17] E.P.Gross, J. Stat. Phys. 54 (1989), 437.
- [18] スピンの反転運動がコヒーレントボソンの生成を伴うという基本着想は、この系の量子ランジュヴァン力学を研究中に得た[19,20]。動的補償理論はトンネリング状態の研究から始まった[1,2]。
- [19] 都築 俊夫、「巨視的量子コヒーレンスへの環境効果の動的理論」(平成元年度科学研究費補助金(一般研究C)研究成果報告書、1990年3月)。
- [20] T.Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. 81 (1989), 770.
- [21] T.Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. 83 (1990), 29. (研究発表論文 3)

- [22] T.Tsuzuki, Solid State Commun. 77 (1991), 345. (研究発表論文 9)
- [23] T.Tsuzuki, Solid State Commun. 74 (1990), 743. (研究発表論文 4)
- [24] T.Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. 84 (1990), 81. (研究発表論文 5)
- [25] T.Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. 84 (1990), 228. (研究発表論文 6)
- [26] T.Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. 85 (1991), 31. (研究発表論文 8)
- [27] T.Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. 85 (1991), 205. (研究発表論文 10)
- [28] T. Tsuzuki, Solid State Commun. (投稿中)。 (研究発表論文 13)
- [29] A.O.Caldeira and A.J.Leggett, Phys. Rev. Lett. 46 (1981), 211.
- [30] A.J.Bray and M.A.Moore, Phys. Rev. Lett. 49 (1982), 1545.
- [31] S.Chakravarty and S.Kivelson, Phys. Rev. B32 (1985), 76.
- [32] A.Tanaka and A.Sakurai, Prog. Theor. Phys. 76 (1986), 999.

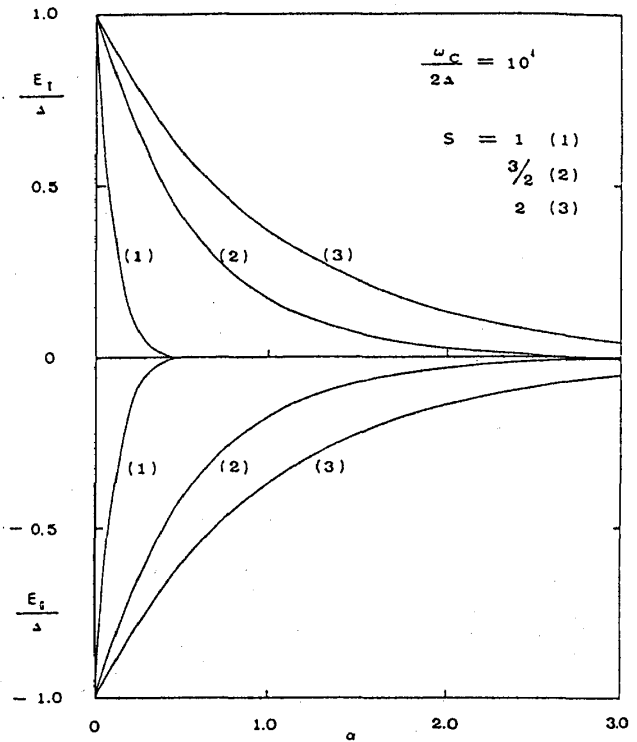


第1図 基底状態エネルギー $-\varepsilon_G \equiv E_G/\Delta$ 。 $s = 1$ 。三通りの白色度 $\omega_c/2\Delta$ に対して α の関数として示した。縦軸は対数尺。ひとつの $\omega_c/2\Delta$ に対して、トンネリング解は $0 \leq \alpha < \alpha_c$ で基底(安定)状態(実線で示す)、 $\alpha_c < \alpha < \alpha_m$ で準安定状態(破線)、 $\alpha > \alpha_m$ では存在しない。局在解は $\alpha > \alpha_c$ で基底(安定)状態(実線)、 $\alpha < \alpha_c$ で準安定状態(破線)。断熱線り込みによる ε_G を $\omega_c/2\Delta = 10^4$ の場合に点線で例示した。どの白色度でも本研究で得た ε_G が低いエネルギーを与える。白色極限で $\alpha_c = \alpha_m = 1/2$ (表I参照)。

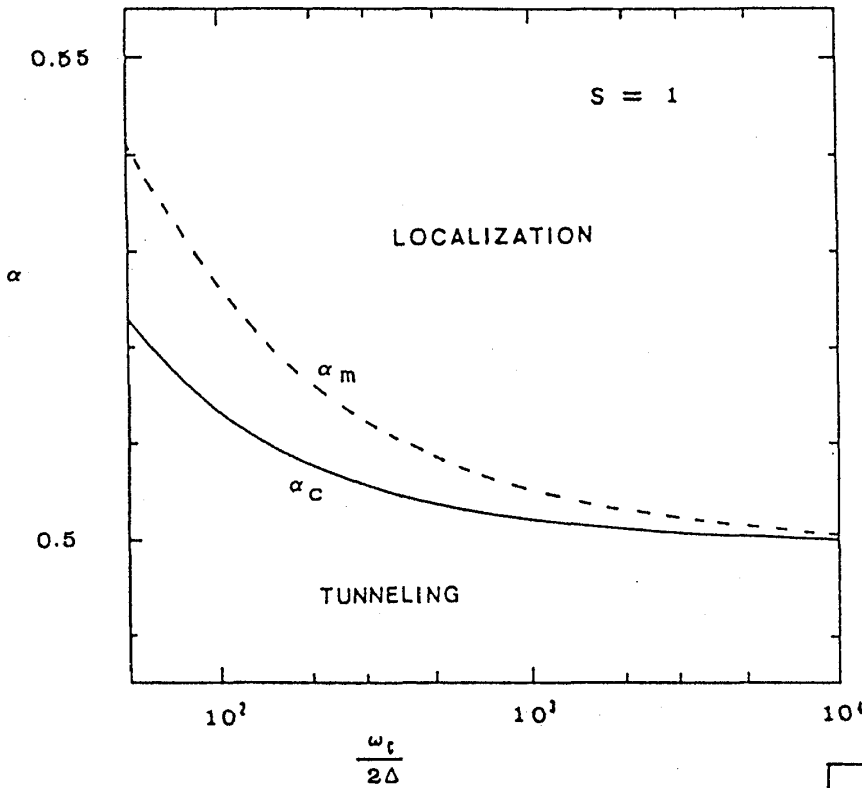
第2図 $s = 1$ の場合の基底状態と随伴トンネリング励起状態との間の半値間隙 Δ_{eff}/Δ 。 $\alpha = \alpha_c$ で終る。準安定状態($\alpha_c < \alpha < \alpha_m$)での値は示していないが、 α_m まで存在し、 α_m で0となる。点線は $\omega_c/2\Delta = 10^4$ における断熱線り込み結果。



第3図 $s = 1/2$ の場合の基底状態エネルギー。トンネリング解がある領域では随伴トンネリング励起エネルギーも示した。実線、破線の意味は第1図と同じ。白色極限で $\alpha_c = \alpha_m = 0$ 。



第4図 $s = 3/2$ および 2 でのトンネリング基底状態エネルギーとその随伴励起状態エネルギー。 $s = 1$ の場合も同時に示した。 $\omega_c / 2\Delta = 10^4$ は白色極限とみなせる。



第5図 $s=1$ の場合の基底状態相図。 $\omega_c/2\Delta$ は白色領域に取った。 $\alpha < \alpha_c$ ではトンネリング基底状態、 $\alpha > \alpha_c$ では局在基底状態となる。トンネリング状態は $\alpha_c < \alpha < \alpha_m$ で準安定となり、 $\alpha > \alpha_m$ では存在しない。局在状態は $\alpha < \alpha_c$ で準安定。白色極限で $\alpha_c = \alpha_m = 1/2$ 。

第6図 トンネリング間隙の有効値 $\Delta_{eff}(T)/\Delta$ の温度依存性。 $s=1, \omega_c/2\Delta = 10^3$ 。温度依存性は弱い。相互作用効果は基底状態において尽くされていることを示す。

