一次元 random transverse-Ising model の 基底状態 相転移

東大理　浅川　仁, 鈴木　増雄

○ モデル

一次元 random transverse-Ising model は、次のハミルトニアンで記述される。

$$\mathcal{H} = -\sum_{j=1}^{L-1} \tau_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - \gamma \sum_{j=1}^{L} \sigma_j^x$$

システムサイズを L として open boundary condition を課している。ここで、$\{\tau_j\}$ は確率変数であり、

$$\tau_j = \begin{cases} 1 & : \text{prob. } p \\ r & : \text{prob. } 1-p \end{cases}$$

とする。このモデルは transverse field γ が変化するとき、ある値 γ_c のところで相転移を起こすことが期待される。今回は $p = 0.5$ の場合について γ_cの r依存性を評価した結果を報告する。

○ ボンド配位 $\{\tau_j\}$ に対する対角化

この研究では数値的に γ_c を評価する。その準備として先ず、一つのボンド配位 $\{\tau_j\}$ に対して、このハミルトニアンを対角化する方法を説明する。

Jordan-Wigner 変換により、この系のハミルトニアンは、スピンレスフェルミオンを用いて表される。

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \left\{ c_i^\dagger A_{ij} c_j + \frac{1}{2} \left(c_i^\dagger B_{ij} c_j^\dagger + \text{h.c.} \right) \right\} + E_0$$

ここで、A, B は $L \times L$ の行列である。このハミルトニアンは、カノニカル変換により normal mode 展開

$$\mathcal{H} = \sum_k \omega_k \left(\xi_k^\dagger \xi_k - \frac{1}{2} \right)$$

ができる。normal-mode frequency $\{\omega_k\}$ は、行列 $M \equiv (A-B)(A+B)$ の固有値 $\{\mu_k\}$ を用いて、$\omega_k = \sqrt{\mu_k}$ で与えられる。

更に、行列の固有ベクトルを用いることで、ボンド配位 $\{\tau_j\}$ をもつサンプルに対して、任意の二点間のグリーン関数

$$G_{l,m} \equiv -i \langle \bar{\psi}_l \psi_m \rangle;$$

$$\psi_j \equiv c_j^\dagger + c_j, \quad \bar{\psi}_j \equiv i(c_j^\dagger - c_j)$$

が数値的に評価できる。従って、次のような二点関数が計算できる。

- order parameter 相関

$$\begin{aligned} C_{zz}(l,m) &\equiv \langle \sigma_l^z \sigma_m^z \rangle \\ &= \det \begin{pmatrix} G_{l,l+1} & G_{l,l+2} & \cdots & G_{l,m} \\ \vdots & & & \vdots \\ G_{m-1,l+1} & \cdots & \cdots & G_{m-1,m} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

• energy density 相関

$$C_{xx}(l,m) \equiv \langle \sigma_l^x \sigma_m^x \rangle - \langle \sigma_l^x \rangle \langle \sigma_m^x \rangle = -G_{m,l} G_{l,m}$$

○ **転移点の評価**

前述の方法によって、各サンプルに対する相関関数 $C(x;L|\{\tau_j\})$ が評価できるので、そのランダム平均として、このランダム系（有限系）の相関関数が計算される。つまり、

$$C(x;L) \equiv [C(x;L|\{\tau_j\})]_{\rm av}$$

である。さらに、相関関数の長距離 $(1 \ll x \ll L)$ における振舞いが

$$C(x;L) = C_0 \exp\left(-\frac{x}{\xi(L)}\right)$$

であることから、相関長は

$$\xi^{-1}(L) = -\frac{d}{dx}\log C(x;L)$$

と求められる。実際の計算では、微分は差分で置き換える。

有限系の相関長を用いて、現象論的くりこみ群 (finite-size scaling) の方法により相転移点 γ_c が決定できる。つまり、

$$\frac{\xi(L)}{L} = \frac{\xi(L')}{L'} \quad \text{at } \gamma = \gamma_c$$

によって転移点が決まる。実際に order parameter の相関長から決定した転移点を Fig.1 に× で示す。

次に、相関関数の評価を経由せずに、転移点を評価することを考える。上述の計算では、

$$\xi^{-1}(L) = -\frac{d}{dx}\log[C(x;L|\{\tau_j\})]_{\rm av}$$

によって、相関長を評価した。ここで、ansatz として、$L \to \infty$ において（少なくとも臨界点直上では）log 微分とランダム平均の演算が可換であるとする。このとき、

$$\xi^{-1}(L) = \left[-\frac{d}{dx}\log C(x;L|\{\tau_j\})\right]_{\rm av} = \left[\frac{1}{v(\{\tau_j\})}\Delta E(L|\{\tau_j\})\right]_{\rm av}$$

と書き換えられる。但し、$\Delta E(L|\{\tau_j\})$, $v(\{\tau_j\})$ はそれぞれ、各サンプルにおける、ギャップと素励起の速度である。さらに、この表式が、

$$\xi^{-1}(L) = \frac{1}{v}[\Delta E(L|\{\tau_j\})]_{\rm av} \equiv \frac{1}{v}\Delta E(L)$$

とかけるとする。以上の ansatz のもとで、臨界点を決定する方程式は

$$L\Delta E(L) = L'\Delta E(L') \quad \text{at } \gamma = \gamma_c$$

となる。

有限系のギャップのランダム平均 $\Delta E(L)$ として、$r = 1$ の (pure 系) 場合の類推から、(order parameter の相関に対して)

$$\Delta E(L) = [\omega_1]_{\rm av}$$

を計算する。ここで、ω_1は、各サンプルにおける normal mode の最小の frequency である。

実際に、$L\Delta E(L)$ を異なる L についてプロットした結果を Fig.2 に示す。さらに、この方法によって評価した転移点を Fig.1 に◇で表す。この結果は、前述の方法で得られたものと、良い一致を示している。このことは、上述の ansatz の妥当性を示唆していると考えられる。

○ モデルの一般化と今後の問題

今回議論したモデルは、次の random XY model の特別な場合である。

$$\mathcal{H} = -\sum_{j=1}^{L-1}\left(J_j^x\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + J_j^y\sigma_j^y\sigma_{j+1}^y\right) - \sum_{j=1}^{L}\Gamma_j\sigma_j^z$$

ここで、$\{J_j^x\},\{J_j^y\}$ および $\{\Gamma_j\}$ は確率変数である。

このモデルの考察には、今回の方法がそのまま適用できる。つまり、Jordan-Wigner 変換を用いて normal mode 展開ができて、

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j}\left\{c_i^\dagger A_{ij}c_j + \frac{1}{2}\left(c_i^\dagger B_{ij}c_j^\dagger + \mathrm{h.c.}\right)\right\} + E_0 = \sum_k \omega_k\left(\xi_k^\dagger\xi_k - \frac{1}{2}\right)$$

と表せる。ここで、$M \equiv (A-B)(A+B)$ の固有値 $\{\mu_k\}$ を用いて$\omega_k = \sqrt{\mu_k}$ である。更に $L\to\infty$ において、臨界点直上で、

$$\begin{aligned}\xi^{-1}(L) &\equiv -\frac{d}{dx}\log\left[C(x;L|\{J_j\})\right]_{\mathrm{av}} \\ &= \frac{1}{v}\left[\Delta E(L|\{J_j\})\right]_{\mathrm{av}} \equiv \frac{1}{v}\Delta E(L)\end{aligned}$$

が成り立つならば、臨界点の決定方程式は、

$$L\Delta E(L) = L'\Delta E(L')$$

となる。このことは、このモデルの臨界点を決める問題が、random matrix M の固有値分布の問題に置き変わったことを意味している。

よく知られているように、この一般化されたモデルは、pure 系の場合、ユニバーサリティーの異なる二種類の臨界現象を示す。これらの臨界現象がランダムネスの効果によってどのような影響を受けるかは、きわめて興味深い問題である。

random transverse-Ising model における γ_c の p 及び r 依存性や、一般化されたモデルの相転移については、今後計算を続けていく予定である。

Fig.1 : random transverse-Ising model の相図

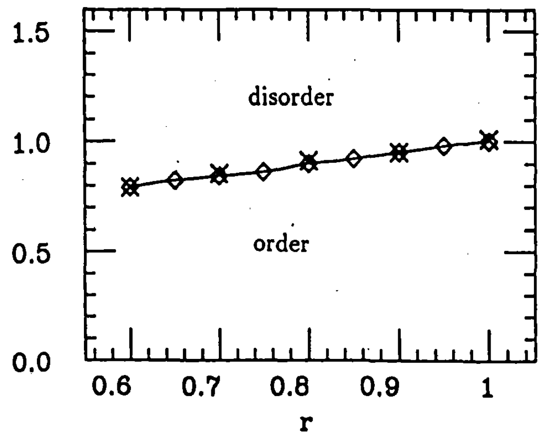
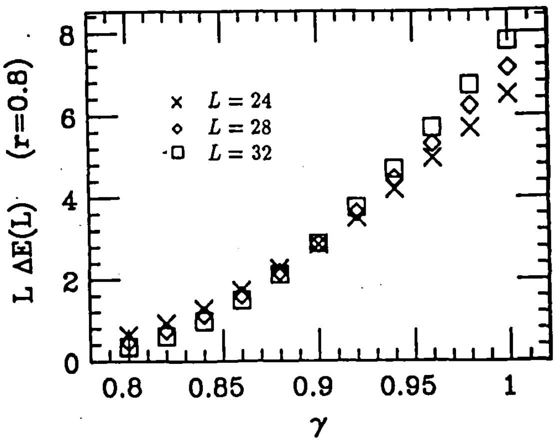


Fig.2 : 現象論的くりこみ群による転移点の評価



○ Note added

発表の直後の計算により、一次元 random transverse-Ising model の転移点が解析的に求められることが分かった。以下にその方法を述べる。

ハミルトニアンを改めて

$$\mathcal{H} = -\sum_{j=1}^{L-1} J_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - \Gamma \sum_{j=1}^{L} \sigma_j^x$$

$$J_j = \begin{cases} J_0 & : \text{prob. } p \\ J_1 & : \text{prob. } 1-p \end{cases}$$

とかく。$J_0, J_1 > 0$ とし、$\gamma = \Gamma/J_0$, $r = J_1/J_0$である。

Suzuki-Trotter 変換により、この量子系の分配関数は（システムサイズ L, トロッター数 n）

$$Z_{L,n} = C^{Ln} \sum_{\{s_{j,k}\}} \exp\left[-\beta \sum_{j,k} \{-E_1 s_{j,k} s_{j,k+1} - E_2(j) s_{j,k} s_{j+1,k}\}\right],$$

$$E_1 = -\frac{1}{2\beta} \log\tanh\frac{\beta\Gamma}{n}, \quad E_2(j) = \frac{J_j}{n}, \quad C = \left(\frac{1}{2}\sinh\frac{2\beta\Gamma}{n}\right)^{\frac{1}{2}}$$

となる。二次元古典系

$$H = -E_1 \sum_{j,k} s_{j,k} s_{j,k+1} - \sum_{j,k} E_2(j) s_{j,k} s_{j+1,k}$$

において、$E_2(j)$ が確率分布　$P(E_2(j))$ に従うとき、その臨界点β_c は、

$$2\beta E_1 + \int_0^\infty dE_2 P(E_2) \log\tanh\beta E_2 = 0$$

で与えられることが知られている。（例えば、McCoy & Wu "The two dimensional Ising model"）

今のモデルでは、

$$P(E_2) = p\,\delta\left(E_2 - \frac{J_0}{n}\right) + (1-p)\,\delta\left(E_2 - \frac{J_1}{n}\right)$$

である。従って、Γ_c を求める方程式は、

$$\left(\tanh\frac{\beta J_0}{n}\right)^p \left(\tanh\frac{\beta J_1}{n}\right)^{1-p} \left(\tanh\frac{\beta\Gamma}{n}\right)^{-1} = 1$$

となり、量子系への極限操作 $n \to \infty$ から、

$$\Gamma_c = J_0^p J_1^{1-p}$$

を得る。更に、両辺を J_0 で割って、

$$\gamma_c = r^{1-p}$$

となる。

前述の数値計算による結果 ($p = 0.5$) は、$\gamma_c = \sqrt{r}$ と、1 % の誤差の範囲で一致している。このことは、計算における ansatz の正当性を示唆していると考えられる。このモデルにおいて、全ての物理量が厳密に求められているのではないし、一般化されたモデルについての厳密解も存在しない。従って、ここで用いた数値計算の方法を適用して、厳密解ともつきあわせながら、この系についての理解を深めて行きたいと考えている。