量子相転移直上での熱流

大阪大学 理学研究科　齊藤 圭司、宮下精二

1次元横磁場XYChain は絶対0度において 横磁場の大きさを調節すると量子相転移を起こすことが知られている [1, 2, 3, 4, 5]。我々はこの系に極低温で熱を流したとき、熱流の振る舞いが横磁場の関数としてどのように振る舞うかを、特に量子相転移点付近に注意して調べた。

熱的な相転移に対しては熱伝導係数における比熱の発散や Critical Slowing Down の効果に関する研究がある [6, 7, 8]。例えば2次元 Creutz Model による研究では $T_{\rm C}$ 上で 熱伝導度は Critical slowing down の効果によって急激に小さくなるものの 厳密には有限の値を取る [7]。ただし $T_{\rm C}$ 上での熱伝導係数の higher の微分に関する特異性の可能性は残されている。

これらの熱的相転移の結果を踏まえ 同じように Critical slowing down のある量子相転移上でどのような 熱流の振る舞いを示すか考えてみる。1次元量子XY chain,

$$H = -\frac{J}{4}\sum_{n=1}^{N-1}\left(\sigma_n^x\sigma_{n+1}^x+\sigma_n^y\sigma_{n+1}^y\right)-\frac{\Gamma}{2}\sum_{n=1}^{N}\sigma_n^z, \tag{1}$$

に対して両側に異なる温度 $T_{\rm L}, T_{\rm R}$ の熱浴をつけ、$T_{\rm L}=0$ と設定し 横磁場を変えたときの熱流を見ることにする。問題設定としては 2段階に分けられる。最初に系の両側にのみ熱浴がつき、系内部には外界の環境は直接接触しないとき熱流がどう振る舞うか。次に系内部にも 外界の環境を表現する self-consistent 熱浴（定常状態において熱浴と系とに熱のやり取りがないという条件で温度が決定される熱浴 [9]）が接触したとき熱流がどう振る舞うか、である。ここでは問題設定の内の最初の問題、つまり bulk な系の両側にのみ熱浴がついている場合をまず考えてみる。

よく知られているように Jordan-Wigner 変換を施すと (1) は fermion 演算子 $c_k, c_k^\dagger$ を使い、

$$H = \sum_k \hbar\omega_k c_k^\dagger c_k - \frac{\Gamma N}{2}, \tag{2}$$

$$\omega_k = -J\left(\cos k+\gamma\right)/\hbar,$$

$$\gamma = \frac{\Gamma}{J}, \tag{3}$$

となる。横磁場の変化を与えるパラメターは今の場合 γ となる。

更に phonon 熱浴をつけたときの密度演算子に対する定常状態の式 [10]、

$$\frac{1}{i\hbar}\left[H,\rho\right]-\frac{\mu\pi}{\hbar}\left\{\left[\sigma_1^x,R_{\rm L}\rho\right]+\left[\sigma_1^x,R_{\rm L}\rho\right]^\dagger+\left[\sigma_N^x,R_{\rm R}\rho\right]+\left[\sigma_N^x,R_{\rm R}\rho\right]^\dagger\right\} = 0, \tag{4}$$

に対して operator $R_{\rm L}$ と $R_{\rm R}$ を fermion で表現し $\langle c_k c_{k'}\rangle$ と $\langle c_k c_{k'}^\dagger\rangle$ とに対する閉じた連立1次方程式を作る。

[1] E-mail: saitoh@spin.t.u-tokyo.ac.jp

その結果得られる $\langle c_k c_{k'} \rangle$ と $\langle c_k c_{k'}^\dagger \rangle$ の値を熱流を求める式に代入すると、最終的に熱流は weak coupling limit のもとで、

$$J_{\rm E,L} \;=\; -2\mu \int_0^\pi dk\, \zeta(\omega_k)\omega_k \sin^2 k\, e^{-\beta_{\rm R}\hbar|\omega_k|}. \tag{5}$$

と表される。$\zeta(\omega_k)$ は熱浴の spectral density $I(\omega_k)$ で書かれる関数で $\zeta(\omega_k) := I(\omega_k) - I(-\omega_k)$ と定義される。spectral density を $I(\omega) = I_0\omega^\alpha$[11] と表すと、$\zeta(\omega_k)$ は

$$\begin{aligned} \zeta(\omega) &= I_0|\omega|^\alpha {\rm sign}\,(\omega) \\ &= I_0\omega^\alpha\,[2\Theta(\omega)-1]^{\alpha+1}, \end{aligned} \tag{6}$$

となる。この時 (5) は 熱浴の spectral density の関数形に応じて γ に関する higher の微分に特異性を示す。α が整数でないときは

$$\left|\frac{\partial^{[\alpha+2]} J_{\rm E,L}}{\partial\gamma^{[\alpha+2]}}\right|_{\gamma\le 1} \;=\; \infty, \tag{7}$$

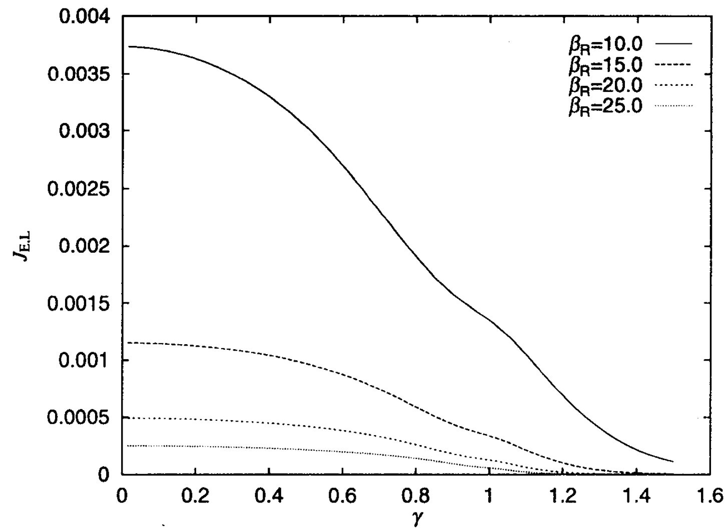
$$\left|\frac{\partial^{[\alpha+2]} J_{\rm E,L}}{\partial\gamma^{[\alpha+2]}}\right|_{\gamma> 1} \;<\; \infty. \tag{8}$$

となる。ここで [...] は Gauss の記号。つぎに α が整数の時は

$$\begin{aligned} \left.\frac{\partial^n J_{\rm E,L}}{\partial\gamma^n}\right|_{\beta_{\rm R}\to+\infty} &= 0 \quad \text{for} \quad n = 0, 1, \cdots, \alpha+1, \\ \left.\frac{\partial^{\alpha+2} J_{\rm E,L}}{\partial\gamma^{\alpha+2}}\right|_{\beta_{\rm R}\to+\infty} &= 4\mu I_0(\alpha+1)!(\alpha+1)\int_0^\pi dk\;[2\Theta(\omega_k)-1]^\alpha\,\delta(\omega_k)\sin^2 k\, e^{-\beta_{\rm R}\hbar\omega_k[2\Theta(\omega_k)-1]} \\ &= \begin{cases} \frac{-4\mu I_0\hbar(\alpha+1)^2\alpha!}{J}\sqrt{1-\gamma^2} & 0<\gamma\le 1 \\ 0 & \gamma\ge 1. \end{cases} \end{aligned} \tag{9}$$

となる。

様々な温度 $T_{\rm R} = 1/\beta_{\rm R}$ に対する γ の関数としての熱流の振る舞いは下図のようになる。



The energy flux for various $\beta_{\rm R}$. The spectral density is Ohmic type, $\alpha = 1$.

$\gamma > 1$では基底状態が 秩序相にあるため熱は流れにくい、それに対して$\gamma \leq 1$では 基底状態は無秩序相にあるので熱は流れやすくなる。そしてその境目$\gamma = 1$では3回微分に特異性が現れる。

以上のように 系がbulk の時は量子相転移上の点で熱流のγに関するhigher の微分が特異性を示すことが分かった。この特異性は基底状態と第一励起状態との間のエネルギーギャップの微分不連続性から来るものであり極めて自然な結果と言える。このような 微分の特異的な振る舞いが、系内部にも外界の影響があるとき（問題設定の2番目）、どのように残るかあるいは消えていくかは今後の課題である。

参考文献

[1] P. Ray and B. K. Chakrabarti, Phys. Lett. **7** 431 (1983).

[2] R. R. dos Santos and R. B. Stinchcombe, J. Phys. A **14** 2741 (1981).

[3] R. Z. Bariev and I. Peschel, Phys. Lett A, **153** 166 (1991).

[4] R. Micnas and L. Kowalewski, Physica A **127** 422 (1984).

[5] A. I. Bugrij and V. N. Shadura, Phys. Lett. A **150** 171 (1990).

[6] R. Harris and M. Grant, Phys. Rev. B **38**, 9323 (1988).

[7] K. Saito, S. Takesue, and S. Miyashita, Phys. Rev. E. **59** 2783 (1999)

[8] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49** 435 (1977).

[9] M. Bolsterli, M. Rich, and W. M. Visscher, Phys. Rev. A **1**, 1086 (1970), M. Rich and W. M. Visscher, Phys. Rev. B, **6** 2164 (1974).

[10] K. Saito, S. Takesue, and S. Miyashita, cond-mat/9810069.

[11] H, Grabert, P. Schramn, and G. Ingold, Phys. Rep. **3**, 115 (1988).