

スピン-ボソン系における動的補償と直交性

東北大理 都築俊夫 (Toshio Tsuzuki)

1. 問題設定

二準位擬スピンが多自由度ボソン系と双一次の相互作用をしている。ハミルトニアンは

$$H = -\Delta \cdot \sigma_x + \sum_j \omega_j b_j^\dagger b_j + \frac{1}{2} \sigma_z \cdot u \quad (1)$$

ここで $u = \sum_j \lambda_j (b_j^\dagger + b_j)$, σ はパウリ行列。相互作用の強度スペクトル関数は熱力学極限で

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

とし、

$$J(\omega) = \omega \cdot (\omega/\omega_c)^{s-1} \cdot \exp[-\omega/\omega_c], (s > 0), \quad (3)$$

即ち、赤外領域で ω^s 、紫外領域では ω_c で切断されていると仮定する。

ハミルトニアン (1) の基底状態 (GS) を無次元正值パラメータ α , s , ω_c/Δ の関数として与えよ。これが問題。

大方の人にとって解決ずみの問題でしょう。実はそうでもないかも知れぬということを述べ、諸賢の御教示を賜りたい。

筆者の疑問を説明する。(1)のスピン-ボソン相互作用を摂動として扱おうと、 $s \leq 1$ に対して赤外発散が現われる。この発散は、ボソンの断熱効果を繰込み、有効相互作用を導入することにより除かれる。この操作により除去されない発散は意味あるものとみなす。これが標準的な処法であり、数学的形式から変分最良コヒーレント状態法と呼ばれる確立された方法である [1]。しかしこの処法においては、ボソン系の静的効果が主要であると前提されていないだろうか。今問題としている系や二重井戸系などトンネル系の場合にはこの前提は成立たず、ボソン系の効果は本質的に動的であると考えられる。このことは (1) をユニタリー演算子 $U \equiv \exp[\sigma_z v/2]$, $v = \sum_j \frac{\lambda_j}{\omega_j} (b_j^\dagger - b_j)$, で変換してみると明らかになる。

$$\tilde{H} \equiv U H U^{-1} - E_o = -\frac{1}{2} \Delta \{e^v \cdot \sigma_+ + e^{-v} \cdot \sigma_-\} + \tilde{H}_B \quad (4)$$

ここで $\tilde{H}_B = \sum_j \omega_j b_j^\dagger b_j$, $\sigma_\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y$, $E_o = -\sum_j \lambda_j^2 / 4\omega_j$ 。スピンの反転運動に伴って動的に放出または吸収されるボソンはコヒーレント状態にある。物理量の期待値を計算すると、零点ゆらぎによる赤外発散はこれらの動的ゆらぎにより完全に補償され、消失する。この機構を動的補償という [2]。この動的効果も正當に評価するとき GS はどうなるか。

2. 固有値・固有関数・直交性

z 方向を量子化軸とする。固有値方程式 $(\tilde{H} - E)\Psi = 0$ は、 $s \leq 1$ に対して、2 種の解を与える。

(2-1) 局在解

$$\Psi^{(R)} = \Phi^{(+)}|\uparrow\rangle + \frac{\Delta}{\tilde{H}_B - E} \cdot e^{-v} \Psi^{(+)}|\downarrow\rangle, \quad (5)$$

$$\Psi^{(L)} = \Phi^{(-)}|\downarrow\rangle + \frac{\Delta}{\tilde{H}_B - E} \cdot e^v \Phi^{(-)}|\uparrow\rangle, \quad (6)$$

$$\{\tilde{H}_B - E - \Delta \cdot L^{(\pm)}\} \Phi^{(\pm)} = 0 \quad (7)$$

$$L^{(\pm)} = e^{\pm v} \cdot \frac{\Delta}{\tilde{H}_B - E} \cdot e^{\mp v} \quad (8)$$

$\Phi^{(\pm)}$ はそれぞれ $\sigma_z = \pm 1$ に対応する変位をしたボソンの波動関数。 $\Psi^{(R)}$ と $\Psi^{(L)}$ はそれぞれ完全直交系をなし、固有値は (7) により決まる。両者の固有値は同一の構造をもつ。 $\omega_c/\Delta \rightarrow \infty$ の極限で GS エネルギー $E_G^{(L)}$ を調べると、正 α の全領域で α の単調増大連続関数であり、 $\alpha \rightarrow 0$ で $-\Delta$ 、 $\alpha \rightarrow \infty$ で 0 となる。

反転操作 ($\sigma_x \rightarrow \sigma_x, \sigma_y \rightarrow -\sigma_y, \sigma_z \rightarrow -\sigma_z, b_j \rightarrow -b_j, b_j^+ \rightarrow -b_j^+$) に対して $\Phi_p^{(+)}, \Psi_p^{(R)} \rightleftharpoons \Phi_p^{(-)}, \Psi_p^{(L)}$ である。ここで p は量子数。ハミルトニアンは反転対称であるから、 $\Psi_p^{(R)} \pm \Psi_p^{(L)}$ が固有関数。しかし、 $\Psi_p^{(R)}, \Psi_p^{(L)}$ は $\tilde{H}$ の固有関数であるから、反転対称化した波動関数を含めていずれも同一の固有値 E_p に属する。 $\Psi^{(L)}$ と $\Psi^{(R)}$ は直交しないので $\Psi_p^{(L)} = \sum_q \Psi_q^{(R)} \langle \Psi_q^{(R)} | \Psi_p^{(L)} \rangle$ と展開できる。同様に $\Psi^{(R)}$ を $\Psi^{(L)}$

で展開できる。熱力学極限においては、 $s \leq 1$ に対して赤外発散により

$$\langle \Psi_q^{(L)} | \Psi_p^{(R)} \rangle = 0, \quad s \leq 1 \quad (9)$$

であるから、 $\Psi^{(R)}$ と $\Psi^{(L)}$ は互に独立となる。即ち、対称性の破れた固有状態が出現する。このとき $\Psi_G^{(R)}, \Psi_G^{(L)}$ は局在 GS である。

$\Psi_G^{(R)}$ は $\sigma_z = 1$ の変位ボソンが主要であるが、(5) により $\sigma_z = -1$ 側にトンネルしたボソンが混っている。励起状態についても、 $\Psi^{(L)}$ についても同様なことが言える。

(2-2) 非局在（トンネリング）解

熱力学極限において非局在（トンネリング）状態に留まる解は何か。スピンのもつ固有のトンネル機構とボソン系の影響を正當に競合させることにより見い出される。初めの固有値方程式を $(\tilde{H}_B - E)(\tilde{H} - E)\Psi = 0$, 即ち、

$$[(\tilde{H}_B - E)^2 - \Delta^2 - \frac{1}{2}\Delta\{e^v \cdot u^{(+)} \cdot \sigma_+ - e^{-v} \cdot u^{(-)} \cdot \sigma_-\}]\Psi = 0, \quad (10)$$

と書き変える。 $u^{(\pm)} = u \pm 2\Gamma(s)\alpha\omega_c$. 新たに

$$\Psi^{(R)} = \Phi^{(+)} | \uparrow \rangle - \frac{\Delta}{(\tilde{H}_B - E)^2 - \Delta^2} u^{(+)} \cdot e^{-v} \cdot \Phi^{(+)} | \downarrow \rangle, \quad (11)$$

$$\Psi^{(L)} = \Phi^{(-)} | \downarrow \rangle + \frac{\Delta}{(\tilde{H}_B - E)^2 - \Delta^2} u^{(-)} \cdot e^v \cdot \Phi^{(-)} | \uparrow \rangle; \quad (12)$$

を導入すると、 $\Phi^{(\pm)}$ が

$$\{(\tilde{H}_B - E)^2 - \Delta^2 - \Delta^2 M^{(\pm)}\} \Phi^{(\pm)} = 0, \quad (13)$$

$$M^{(\pm)} = -e^{\pm v} \cdot u^{(\pm)} \frac{1}{(\tilde{H}_B - E)^2 - \Delta^2} u^{(\pm)} \cdot e^{\mp v}, \quad (14)$$

を充すとき、(11),(12) はいずれも (10) の解である。 $\Phi^{(+)}, \Psi^{(R)}$ と $\Phi^{(-)}, \Psi^{(L)}$ はそれぞれ互いに反転対称である。 $\Phi^{(\pm)}$ は同一の固有値構造をもつ。

元の固有値方程式の解は、ハミルトニアンの反転対称性と両立する解

$$\Psi_p^{(\kappa)} = \Psi_p^{(R)} \pm \Psi_p^{(L)}, \quad \kappa = \text{even} \quad \text{or} \quad \text{odd}, \quad (15)$$

に限られることが示せる。 $\Psi^{(R)}$ や $\Psi^{(L)}$ が単独で $\tilde{H}$ の固有関数となり得ないところが前節と違うところ。

GS エネルギー $E_G^{(T)}$ を (12) により調べる。 $s = 1$ のとき α に臨界値が存在し、その値以下の α に対して解があり、その値より大きい α に対して解は存在しない。 $\omega_c/\Delta \rightarrow \infty$ で上方から $\alpha_c = 1/2$ となる。また $\alpha < \alpha_c$ で $E_G^{(T)} < E_G^{(L)}$ であり、 $\alpha = \alpha_c$ で両者は等しい。従って $\alpha < \alpha_c$ において GS は反転対称非局在 (トンネリング) 状態となる。 $s < 1$ の場合にも同様な描像を持ってよい。しかし $\omega_c/\Delta \rightarrow \infty$ で $\alpha_c \rightarrow 0$ となり、非局在 GS は消失する。熱力学極限において、 $s \leq 1$ に対して直交性 $\langle \Psi^{(L)} | \Psi^{(R)} \rangle = 0$ が成立する。しかし波動関数は (15) に留まる。

$s = 1$ の場合の臨界値 $\alpha_c = 1/2$ は、第一章で述べた標準理論値 1 と異なる。この差が動的補償の効果だが、赤外領域に限らない全エ

エネルギー域のボソンの寄与である。

$s > 1$ の場合にはふたつの解法は処法の違いに過ぎない。

3. おわりに

スピン-ボソン系に対して動的補償に基づく理論を提唱している。GS は変分 GS ではなく、正確 GS である。本稿では文献 [2] で明確に論じていなかった反転対称性と直交性について述べた。

本研究のポイントは (1) でなく (4) をハミルトニアンとして用いるところにある。系を有限自由度系に留めて (1) と (4) との等価性を保証し、最終段階で熱力学極限を取った。動的補償により物理量に赤外発散は現われないので、この移行は問題ないと信じている。研究会の間に荒木不二洋先生に議論していただき、極限移行だけでなく、最初から無限自由度ボソン系として理論を展開するよう示唆を受け、参考論文として [3] をいただいた。荒木先生の危惧通り知識不足で未だ成果を得ていない。どなたか解決してくれませんか。また講演時には、(9) を超選択則と呼んだが、直交性に過ぎないと御注意を受けた。本稿では直交性に改めた。

末筆ですが御討論、御教示いただいた荒木不二洋先生、恒藤敏彦先生に感謝申し上げます。研究会に出席する機会を与えて下さいました世話人ならびに数理解析研究所にお礼申し上げます。

文献

- [1] R. Silbey and R.A. Harris, J. Chem. Phys. **80** (1984), 2615; J. Phys. Chem. **93**(1989),7062.
- [2] T. Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. **82**(1989), 917 and **87**(1992), 569.
- [3] H. Araki and T. Matsui, Commun. Math. Phys. **101**(1985), 213; Letters Math. Phys. **11**(1986), 87.