

Heat transport via a local two-state system

Masanari Kato¹, Takeo Kato¹ and Keiji Saito

¹ IOP Publishing, Temple Circus, Temple Way, Bristol BS1 6HG, UK

E-mail: kato@issp.u-tokyo.ac.jp

February 2014

Abstract. test

1. Introduction

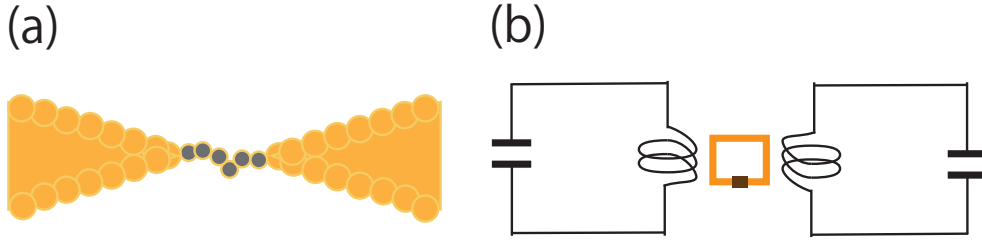


Figure 1. (a)molecular junction, (b)Josephson junction in the super conducting circuit

2. Model and Exact Formula

In this section, we explain the model which describes the heat transport via a local two-state system. Then, we derive the exact formula of liner heat conductance in this system by using the Keldysh formalism.

When we discuss the heat transport via a zero-dimensional object, we should consider the system where a local oscillator is localized between two phonon baths. Now, we adopt the double well potential as the local oscillator because this potential can denote the boson interaction caused by nonlinearity. In reality, this system can be implemented as the molecular junction or the Josephson junction in the super conducting circuit[?](Fig. 1). At low temperature, when the potential barrier is infinitely higher than the energy level difference from the ground state to the first excited state, the local oscillator can be regarded as the two-state system described by the ground state where the system is localized at the right or left well. Then, we can relate the two-state system to the pseudo-spin system. Then, the Hamiltonian of local oscillator is described by the Pauli matrix $\sigma_i (i : x, y, z)$ as

$$H = \frac{\hbar\Delta}{2}\sigma_x + \frac{\hbar\epsilon}{2}\sigma_z, \quad (1)$$

where Δ is the tunneling amplitude and ϵ is the bias of the system, i.e., the difference in the ground-state energies of the local two states. In this study, we assume the symmetric double well, i.e., $\epsilon = 0$. Then, the local two-state system coupling to two phononic baths is described by the spin-boson Hamiltonian:

$$H = \frac{\hbar\Delta}{2}\sigma_x + \sum_{\nu=L,R} \sum_{\nu k} \hbar\omega_{\nu k} b_{\nu k}^\dagger b_{\nu k} + \frac{\sigma_z}{2} \sum_{\nu=L,R} \sum_{\nu k} \hbar\lambda_{\nu k} (b_{\nu k} + b_{\nu k}^\dagger), \quad (2)$$

where $\omega_{\nu k}$, $b_{\nu k}$ is the frequency and annihilation operator of phonon with the wavenumber k in the ν th bath, and $\lambda_{\nu k}$ is the coupling strength between the local two-state system and phonons in two phononic baths. (Fig. 2) is the image? of this system. The spectral function defined as

$$I_\nu(\omega) \equiv \sum_{\nu k} \lambda_{\nu k}^2 \delta(\omega - \omega_{\nu k}) \quad (3)$$

characterizes the behavior of heat transport under the spin-boson model. We assume that the spectral function takes the form of power law:

$$I_\nu(\omega) = \alpha_\nu \tilde{I}_\nu(\omega), \quad (4)$$

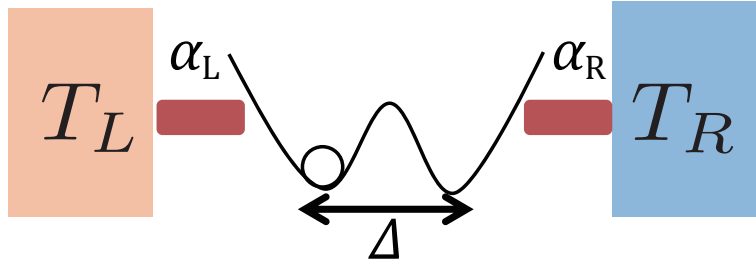


Figure 2. The two-state system coupling to two phononic baths. If the temperature of two baths is slightly different, phonon can be transported from one bath to another.

$$\tilde{I}_\nu(\omega) = 2\omega_c^{1-s}\omega^s f(\omega/\omega_c), \quad (5)$$

where α_ν is the dimensionless coupling strength between the local two-state system and the ν th heat bath, ω_c is the cutoff frequency satisfying $\omega_c \gg \Delta, \epsilon$, and $f(\omega/\omega_c)$ is the cutoff function in the range $[0,1]$. For simplicity, we assume the cutoff function $f(\omega/\omega_c)$ takes the form of step function $\theta(\omega_c - \omega)$. The case of $s = 1$ is called “ohmic” and the ohmic case is studied in detail as we discussed in the section 1. The case of $s > 1$ and $s < 1$ is called “super-ohmic” and “sub-ohmic”, respectively, and these non-ohmic case is our main interest. Starting with this setup, we derive the exact formula of thermal conductance under the spin-boson model by using Keldysh formalism.

First, we define the operator of the heat current flowing from the ν th bath into the local two-state system as

$$J_\nu \equiv \frac{dH_{\text{bath},\nu}}{dt}, \quad (6)$$

where the Hamiltonian of the ν th bath is defined as $H_{\text{bath},\nu} \equiv \sum_k \hbar\omega_{\nu k} b_{\nu k}^\dagger b_{\nu k}$. This operator follows the Heisenberg’s equation of motion, then

$$J_\nu = -\frac{i}{\hbar} [H_{\text{bath},\nu}, H] \quad (7)$$

$$= -i \sum_k \frac{\lambda_{\nu k}}{2} \hbar\omega_{\nu k} \sigma_z (-b_{\nu k} + b_{\nu k}^\dagger). \quad (8)$$

The ensemble average of heat current $\langle J_\nu(t) \rangle = \text{Tr}[\rho J_\nu(t)]$, where ρ is the density matrix of initial state, is calculated as

$$\langle J_\nu(t) \rangle = \text{Re} \left[\sum_k \frac{\hbar^2 \omega_{\nu k} \lambda_{\nu k}}{2} G_{\sigma_z, b_{\nu k}^\dagger}^<(t_1, t_2) \right] \Big|_{t_1=t_2=t}, \quad (9)$$

where the lesser Green’s function is defined as

$$G_{\sigma_z, b_{\nu k}^\dagger}^<(t_1, t_2) \equiv -\frac{i}{\hbar} \langle b_{\nu k}^\dagger(t_2) \sigma_z(t_1) \rangle. \quad (10)$$

Then, by using Keldysh formalism, we can derive the heat current at the steady state[13]:

$$\langle J_\nu \rangle = \frac{\hbar}{4} \int_0^\infty d\omega \hbar\omega \left[\text{Im}[G_{\sigma_z, \sigma_z}^r(\omega)] I_\nu(\omega) n_\nu(\hbar\omega) - i G_{\sigma_z, \sigma_z}^<(\omega) \frac{I_\nu(\omega)}{2} \right], \quad (11)$$

where $n_\nu(\hbar\omega)$ means the Bose-Einstein distribution function and the retarded Green's function is defined as

$$G_{A,B}^r(t_1, t_2) \equiv -\frac{i}{\hbar}\theta(t_1 - t_2)\langle[A(t_1), B(t_2)]\rangle. \quad (12)$$

Here, we introduce the quantity γ_ν which denotes the symmetry of coupling to the two baths:

$$\gamma_\nu = \frac{\int_0^\infty d\omega \hbar\omega G_{\sigma_z, \sigma_z}^<(\omega) I_\nu(\omega)}{\sum_{\nu'=L,R} \int_0^\infty d\omega \hbar\omega G_{\sigma_z, \sigma_z}^<(\omega) I_{\nu'}(\omega)}. \quad (13)$$

Remarking the conservation law of the particle number $\langle J_L \rangle + \langle J_R \rangle = 0$, $\langle J_L \rangle$ can be denoted as follows by γ_ν

$$\begin{aligned} \langle J_L \rangle &= \gamma_R \langle J_L \rangle - \gamma_L \langle J_R \rangle \\ &= \frac{1}{4} \int_0^\infty d(\hbar\omega) \hbar\omega \text{Im}[G_{\sigma_z, \sigma_z}^r(\omega)] [\gamma_R I_L(\omega) n_L(\hbar\omega) - \gamma_L I_R(\omega) n_R(\hbar\omega)]. \end{aligned} \quad (14)$$

Here, we assume $\tilde{I}_L(\omega) = \tilde{I}_R(\omega) = \tilde{I}(\omega)$, then $\langle J_L \rangle$ is

$$\langle J_L \rangle = \frac{\alpha_L \alpha_R}{4(\alpha_L + \alpha_R)} \int_0^\infty d(\hbar\omega) \hbar\omega \text{Im}[G_{\sigma_z, \sigma_z}^r(\omega)] \tilde{I}(\omega) [n_L(\hbar\omega) - n_R(\hbar\omega)]. \quad (15)$$

In the linear response regime, thermal conductance is defined as

$$\kappa \equiv \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{\langle J_L \rangle}{\Delta T}. \quad (16)$$

Finally, we can get the exact formula of thermal conductance:

$$\kappa = \frac{k_B \alpha \omega_c^{1-s}}{4} \int_0^\infty d(\hbar\omega) \text{Im}[\chi(\omega)] \omega^s \left[\frac{\beta \hbar \omega / 2}{\sinh(\beta \hbar \omega / 2)} \right]^2, \quad (17)$$

where we assumed the symmetric coupling strength $\alpha = \alpha_L = \alpha_R$ and substituted the response function $\chi(\omega)$ for $G_{\sigma_z, \sigma_z}^r(\omega)$ by considering the linear response theory. Eq. (18) is the main result in this section. When we evaluate the value of conductance (18), we have to calculate the response function $\text{Im}[\chi(\omega)]$. But, except the special case like ‘‘Toulouse limit’’ ($\alpha = 1/2$ in the ohmic case), it is difficult to analytically calculate $\text{Im}[\chi(\omega)]$. Here, in this study, we numerically evaluate $\text{Im}[\chi(\omega)]$ by the Monte Carlo method. Although we explain how to numerically calculate $\text{Im}[\chi(\omega)]$ in section 4 in detail, in the next section, we derive the approximate formulas of thermal conductance (18) in three different situations.

3. Approximate Formulas

本章では、前章で求めた熱コンダクタンスの解析表式に対して、いくつかの近似手法による近似解を求める。量子相転移および特徴的なエネルギースケールを決める断熱くりこみの手法を紹介した後、cotunneling、sequential tunneling、incoherent tunneling の3つのトンネル過程の考え方に基づく近似手法を導入し、熱コンダクタンスの近似表式を計算する。また、これらの近似手法の適用範囲についても議論する。また本章以降 $\hbar = 1$ とする。

3.1. Adiabatic renormalization

断熱くりこみとは、 $T = 0$ においてトンネル振幅 Δ がカットオフ周波数に比べて十分小さい場合 ($\omega_c \gg \Delta$) に「二準位系の運動に対して瞬間的に追従する熱浴中ボゾンの効果をトンネル振幅にくりこむ操作」である。これによって系の特徴的なエネルギースケール (有効トンネル振幅) を求めることができる。この手法は、近藤模型における Poorman's scaling の方法と同等である。ここでは文献 [5] に従い、くりこみの手法を説明する。

まず、系の波動関数が左右どちらかの井戸に局在して動かないときの、全系の波動関数 Ψ_L, Ψ_R を以下で定義する。

$$\Psi_L = |\sigma_z = -1\rangle \prod_a |a-\rangle, \quad \Psi_R = |\sigma_z = 1\rangle \prod_a |a+\rangle. \quad (19)$$

ここで、 $|a+\rangle(|a-\rangle)$ は系の波動関数が右 (左) に局在して動かないときの a 番目の調和振動子の基底状態であり、孤立した調和振動子の基底状態の波動関数を $\pm \Delta x_a$ だけ平行移動して得られる。次に量子トンネル効果があり、時間発展によって系の波動関数が左右の井戸間を行き来する場合を考える。この場合も、 a 番目の調和振動子の振動数が系の特徴的な振動数 Δ に比べて十分大きい ($\omega_a \gg \Delta$) とき、調和振動子は系の動きに瞬間的に追従すると考えてよく、

$$|a+\rangle = \exp(i\Delta x_a \hat{p}_a) |a-\rangle \quad (20)$$

としてよい。ここで、 \hat{p}_a は a 番目の調和振動子の運動量演算子である。これらの調和振動子の断熱的效果をくりこんだトンネル振幅 Δ' は

$$\Delta' = \Delta \prod_a \langle a+ | a- \rangle = \Delta \prod_a \langle a- | \exp(i\Delta x_a \hat{p}_a) | a- \rangle \quad (21)$$

と書ける。ここで $0 < p < 1$ を満たす実数 p を用いて低周波数カットオフを $p\omega_c$ とし、 $p\omega_c < \omega_a < \omega_c$ を満たす調和振動子をくりこむとすると

$$\Delta'(p) = \Delta \exp \left(-\frac{1}{2} \int_{p\omega_c}^{\omega_c} d\omega \frac{I(\omega)}{\omega^2} \right) \quad (22)$$

となる。また、いま左右の熱浴のスペクトル関数 $I_{L,R}(\omega)$ は同型であるので、添字を省略し $I(\omega) \equiv I_{L,R}(\omega) = 2\alpha\omega_c^{1-s}\omega^s f(\omega/\omega_c)$ と定義する。式 (22) で p を小さくしてくりこみの手続きを徐々に低エネルギーの振動子に行っていくことを考えるが、くりこみの手続きは $\Delta'(p) < p\omega_c$ の条件を満たす必要がある。もし、ある $p = p^*$ で $\Delta'(p) = p\omega_c$ を満たすすると、くりこみはそれ以上行うことができなくなる。そのときの p の値から系の特徴的なエネルギースケールである有効トンネル振幅 $\Delta_{\text{eff}} = \Delta'(p^*)$ が求まる。

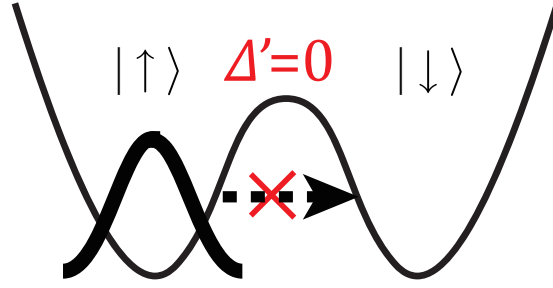


Figure 3. 局在転移。トンネル振幅 $\Delta' = 0$ となりトンネル効果が全く起こらず、状態が左右いずれかに局在している。

オーミック散逸 ($s = 1$) では、 $0 \leq \alpha < 1$ の場合、くりこみの途中で $\Delta'(p) = p\omega_c$ が満たされ、 $p = p^*$ でくりこみが止まり Δ_{eff} は有限となり、

$$\Delta_{\text{eff}} = \Delta \left(\frac{\Delta}{\omega_c} \right)^{\alpha/(1-\alpha)} \quad (23)$$

と与えられる。このときの Δ_{eff} は、第1章での近藤模型へのマップしたあとの近藤温度と $T_K = \Delta_{\text{eff}}/k_B$ の関係にあり [5, ?]、トンネル過程を議論する上での重要な温度スケールを与える。一方、 $\alpha \geq 1$ のときには $\Delta_{\text{eff}} = 0$ となる。これは、トンネル効果が全く起こらないことを意味しており、状態が左右のいずれかの井戸に局在化する局在転移を示唆している (図3)。 $\alpha = 1$ における量子相転移はKT転移である。

スーパーオーミック散逸 ($s > 1$) では、常に有効トンネル振幅は有限となり、

$$\Delta_{\text{eff}} = \Delta e^{-F}, \quad (24)$$

$$F \equiv \frac{1}{2} \int_0^\infty d\omega \frac{I(\omega)}{\omega^2} = \alpha \Gamma(s-1) \quad (25)$$

となる。一方、サブオーミック散逸 ($0 < s < 1$) では、 $\Delta/\omega_c \rightarrow 0$ の極限では $\Delta_{\text{eff}} = 0$ となる [5]。ただし、有限の Δ/ω_c に対しては、温度ゼロにおいて、ある臨界値 $\alpha = \alpha_c$ において量子相転移の存在が知られている [?]。ここで α_c はスペクトル関数の指数 s および Δ/ω_c によって決まる臨界値である。この量子相転移 (局在転移) を解析することが、本研究の目的の1つである。ここで、断熱くりこみの結果

本研究では、熱コンダクタンスの近似解を計算するにあたって、 Δ_{eff} が有限の値として求まる領域では Δ_{eff} を典型的な温度スケールとし、 $\Delta_{\text{eff}} \rightarrow 0$ となる領域では Δ を典型的な温度スケールとして採用する。

3.2. Sequential tunneling

二準位系と熱浴の間の結合が十分弱いときは、結合を摂動として取り扱うことができる。まず、二準位系と熱浴の間に結合がないときは、二準位系は量子トンネル効果によって基底状態 $|0\rangle$ と励起状態 $|1\rangle$ の間にエネルギー差 Δ が生じる。次に熱浴の効果を2次摂動で取り入れると、熱浴から二準位系のエネルギー差 Δ に対応するエネルギーのフォノンが吸収・放出されることで熱輸送が行われる (図4)。この過程は確率的であり、マスター方程式によって記述される [?] が、輸送過程は吸収と放出の2つのステップから成り、輸送前後でフォノン (ボゾン) の位相情報は保たれていない点に留意すべきである。

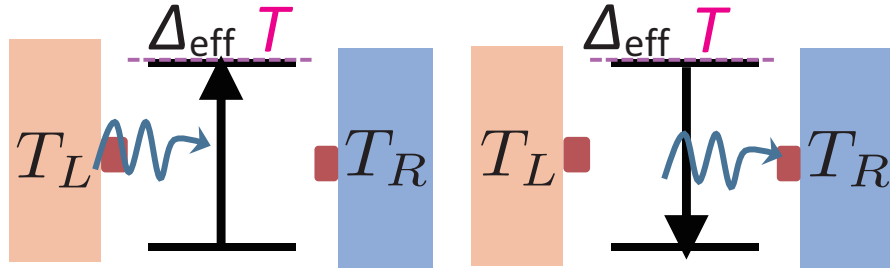


Figure 4. Sequential tunneling 過程の模式図。温度 T がエネルギー準位差 Δ_{eff} に等しいため、このエネルギーを持つボゾンの吸収・放出の2つの過程によって輸送が起こる。

ここでは簡単のため、応答スペクトル関数

$$S(\omega) \equiv \frac{\text{Im}[\chi(\omega)]}{\omega} \quad (26)$$

を利用した議論を行う (この方法は、マスター方程式を解いて得られる結果と同じ結果を与える)。二準位系と熱浴の間に結合がないとき、応答スペクトル関数 $S(\omega)$ は $\omega = \pm\Delta$ にピークを持ったデルタ関数型の関数として

$$S(\omega) = \frac{\Delta}{\pi} [\delta(\omega - \Delta) + \delta(\omega + \Delta)] \quad (27)$$

と計算される。二準位系と熱浴の間の結合が弱ければ、同様に

$$S(\omega) \simeq A [\delta(\omega - \Delta_{\text{eff}}) + \delta(\omega + \Delta_{\text{eff}})] \quad (28)$$

の形で応答スペクトル関数を近似できると期待される。実定数 A は Kramers-Kronig の関係式

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega S(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\text{Im}[\chi(\omega)]}{\omega} \quad (29)$$

$$= \text{Re}[\chi(0)] \quad (30)$$

より $A = \pi \text{Re}[\chi(0)]/2 = \pi \chi_m/2$ を満たす。ここで χ_m は以下の式で定義される二準位系の応答係数 (二準位系をスピンとみなしたときの帯磁率) である。

$$\chi_m \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\langle \sigma_z \rangle}{\epsilon} \quad (31)$$

量子トンネル振幅が Δ_{eff} の二準位系の帯磁率は $\chi_m = (2/\Delta_{\text{eff}}) \tanh(\beta\Delta_{\text{eff}}/2)$ と計算できるので、式 (18) より

$$\kappa = \frac{\alpha \omega_c^{1-s}}{4} \int_0^{\omega_c} d\omega S(\omega) \omega^{s+1} \left[\frac{\beta\omega/2}{\sinh(\beta\omega/2)} \right]^2 \quad (32)$$

$$\simeq \frac{\pi \alpha \omega_c^{1-s}}{4} \frac{\Delta_{\text{eff}}^s}{2n(\Delta_{\text{eff}}) + 1} \left[\frac{\beta\Delta_{\text{eff}}/2}{\sinh(\beta\Delta_{\text{eff}}/2)} \right]^2 \quad (33)$$

と求まる。ここで、 $n(\omega)$ はボーズ・アインシュタイン分布である。式 (33) の温度依存性は $\kappa \propto \beta^2 e^{-\beta\Delta_{\text{eff}}}$ となっており、低温に向けて指数関数的に減少していく。これは熱浴のフォノンの熱ゆらぎが小さくなるにつれて、系がエネルギー Δ_{eff} のフォノンを吸収する確率が急激に減少するからである。 Δ_{eff} は系を励起するのに必要なエネルギーであ

り、これより低温で輸送が急速に抑えられる現象は、量子ドット系におけるクーロンブロッケード現象に類似している。

Sequential tunneling は二準位系と熱浴の結合が十分弱いときにより記述となるが、温度領域に制限がかかる。まず温度が低くなると、次節で記述する cotunneling 過程が優勢となる。オーミック散逸では $\alpha < 1$ のときのみ sequential tunneling が起こる。またサブオーミック散逸の場合は、温度が高くなると散逸が系のコヒーレンスを破壊してしまうので、次々節で記述する incoherent tunneling による記述がよくなる。一方、 $s \geq 2$ のスーパーオーミック散逸のときには、結合の強度によらず sequential tunneling 過程がよい記述となる温度領域が存在するが、 $1 < s < 2$ のスーパーオーミック散逸では、量子力学的なマスター方程式から、デルタ関数型の応答スペクトルによる sequential tunneling の仮定が成り立たなくなるクロスオーバー温度 $T \simeq \Delta_{\text{eff}} \alpha^{-1} (\omega_c / \Delta_{\text{eff}})^{s-1}$ が存在することが示唆されている [5]。

3.3. Cotunneling

系のエネルギースケール Δ_{eff} よりも十分低温の領域における熱コンダクタンスの近似的表式を求める。ただし、ここでは局在転移は起こらない場合を考え、 $\Delta_{\text{eff}} \neq 0$ とする。この温度領域では熱コンダクタンスの解析表式 (18) の積分において、 $(\beta\omega/2)/\sinh(\beta\omega/2)$ の因子により、低温では ω がゼロ近傍の寄与が支配的である。さらに、 $T = 0$ において応答関数 $\text{Im}[\chi(\omega)]$ と二準位系の帯磁率 χ_m を関係付ける、以下の関係式が成り立つことが知られている [?]。

$$\lim_{\omega \rightarrow 0+} \frac{\text{Im}[\chi(\omega)]}{\omega^s} = 2\pi\alpha \left(\frac{\chi_m}{2} \right)^2 \quad (34)$$

ここで帯磁率 χ_m は式 (31) で定義される。この関係式は、オーミック散逸のときには近藤模型でフェルミ流体理論を考察して得られるス波関係式 [16, ?, ?] と等価である。以下では式 (34) を一般化ス波関係式と呼ぶ。一般化ス波関係式 (34) は $T = 0$ で成り立つ関係式であるが、ここで $T \ll \Delta_{\text{eff}}$ を満たす有限温度でも成り立つと仮定すると、この領域の熱コンダクタンスの近似解は式 (18) から

$$\kappa \simeq \frac{\pi\omega_c^{s-1}\chi_m^2}{8} \int_0^{\omega_c} d\omega I_L(\omega) I_R(\omega) \left[\frac{\beta\omega/2}{\sinh(\beta\omega/2)} \right]^2 \quad (35)$$

と求まる。この表式は cotunneling 近似で得られる表式とほぼ同じである [?]。ただし、通常の摂動論に基づく cotunneling 過程の計算では、上式の χ_m が $2/\Delta$ に置き換わっているのに対し、式 (35) は χ_m を通して断熱くりこみの効果も含まれるため、適用範囲が広い。

さらに式 (35) の積分を $\beta\omega = x$ と変数変換して温度依存性を露わにすると

$$\kappa \simeq \frac{\pi\omega_c^{1-s}}{8} (\alpha\chi_m)^2 F(s) T^{2s+1}, \quad (36)$$

$$F(s) = \int_0^{\beta\omega_c} dx x^{2s} \left[\frac{x/2}{\sinh(x/2)} \right]^2 \quad (37)$$

となる。ここで、帯磁率の温度依存性についても考慮する必要があるが、オーミック散逸やスーパーオーミック散逸の場合は熱浴中の全ボゾンの効果を Δ にくくりこむことが

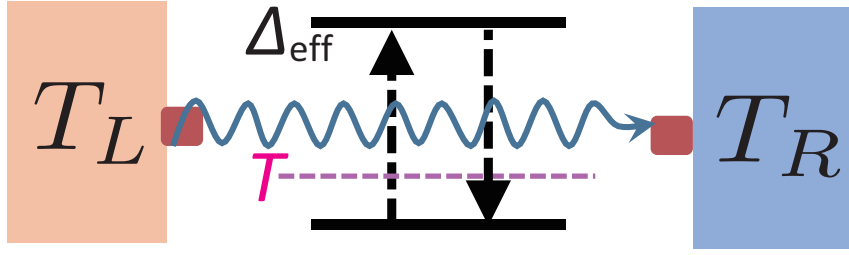


Figure 5. Cotunneling 過程の模式図。二準位系のエネルギー準位差 Δ_{eff} に比べて温度 T が非常に小さいため、本来ボソンは吸収されないはずだが、パーチャルな励起によるボソン輸送が起こる。

できるので、単純に Δ_{eff} の準位差を持った孤立した二準位系の帯磁率を計算すれば良い。この結果、簡単な計算により低温領域で $\chi_m = 2 \tanh(\beta \Delta_{\text{eff}}/2) / \Delta_{\text{eff}}$ と求まる。これより、低温領域における熱コンダクタンスの温度依存性は $\kappa \propto T^{2s+1}$ となることがわかる。一方、サブオーミック散逸では帯磁率 χ_m の解析的な計算はスーパーオーミックのように孤立した二準位系に落とし込めないため容易では無い。そこで本研究では数値計算によって得られる χ_m を使って解析を行う。

Cotunneling 過程を使った熱輸送の模式図を図 5 に示す。低温領域ではエネルギー分裂 Δ_{eff} に比べて温度 T が十分小さいため、sequential tunneling 過程において熱浴からフォノンを吸収して二準位系を励起する過程が抑制される。しかし、より高次の摂動(系と熱浴の結合の 4 次摂動)まで考えると、系のパーチャルな励起によって引き起こされる cotunneling(図 5)によって熱が輸送される。Cotunneling 過程では、位相の情報を保ったまま 1 プロセスで熱が運ばれる点に留意すべきである。

Cotunneling 領域は Δ_{eff} が有限となる場合であれば、任意の s , 任意の結合強度 α に対して、低温領域でよい記述となる。一方、量子相転移によって局在転移が生じて、 $\Delta_{\text{eff}} = 0$ となる場合は、cotunneling 過程は生じず、常に次節の incoherent tunneling 過程となる。

3.4. Incoherent tunneling

$T \gg \Delta_{\text{eff}}$ を満たす高温領域を考える。この領域では、熱ゆらぎによって二準位系の量子性(重ね合わせ状態)が壊され、結果として系は左右の井戸に局在した状態を確率的に行き来するようになる。このとき、系は次の古典的なマスター方程式によって記述できる。

$$\frac{dP_+(t)}{dt} = \Gamma P_-(t) - \Gamma P_+(t) \quad (38)$$

ここで、 P_+ は粒子(スピン)が右の井戸に存在する(アップをとる)確率、 P_- は粒子(スピン)が左の井戸に存在する(ダウンをとる)確率で $P_+ + P_- = 1$ を満たす。このマスター方程式は、sequential tunneling 過程で扱ったマスター方程式と比べて、左右の井戸に局在した状態を基底としている点異なる。 Γ は単位時間あたりの遷移確率で、量子トンネル振幅 Δ に関する摂動計算(フェルミの黄金律)から

$$\Gamma = \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-Q(t)}, \quad (39)$$

$$Q(t) = \int_0^\infty d\omega \frac{I(\omega)}{\omega^2} \left\{ \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right) [1 - \cos(\omega t)] + i \sin(\omega t) \right\} \quad (40)$$

と求まる [5]。式 (39) の導出については付録 B に載せた。式 (38) を初期条件 $P_+(0) = 1$ のもとで解くと、 $P_+(t) = (1 + e^{-2\Gamma t})/2$ となる。これより $\langle \sigma_z(t) \rangle$ は

$$\langle \sigma_z(t) \rangle = \frac{P_+ - P_-}{P_+ + P_-} = e^{-2\Gamma t} \quad (41)$$

と書ける。よって、以下で定義される相関関数 $C(t)$ は、式 (41) を用いて

$$C(t) \equiv \langle \sigma_z(t) \sigma_z(0) + \sigma_z(0) \sigma_z(t) \rangle / 2 \quad (42)$$

$$= \langle \sigma_z(t) \sigma_z(0) \rangle \quad (43)$$

$$= e^{-2\Gamma|t|} \quad (44)$$

と求まり、さらに $C(t)$ をフーリエ変換すると

$$C(\omega) = \frac{4\Gamma}{\omega^2 + 4\Gamma^2} \quad (45)$$

が得られる。ここで、揺動散逸定理より

$$C(\omega) = \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right) \text{Im}[\chi(\omega)] \quad (46)$$

が成り立ち、高温領域 $T \gg \Delta$ では

$$C(\omega) \simeq 2 \frac{\text{Im}[\chi(\omega)]}{\beta\omega} = 2TS(\omega) \quad (47)$$

$$(48)$$

と近似してよいので、応答スペクトル関数 $S(\omega)$ は

$$S(\omega) = \frac{2\Gamma/T}{\omega^2 + 4\Gamma^2} \simeq \frac{2\Gamma}{\omega^2 T} \quad (49)$$

と求まる。これを式 (18) に代入すると、この領域における近似解は

$$\kappa \simeq \frac{\alpha\omega_c^{1-s}}{4} \int_0^{\omega_c} d\omega \frac{2\Gamma}{T} \omega^{s-1} \left[\frac{\beta\omega/2}{\sinh(\beta\omega/2)} \right]^2 \quad (50)$$

$$= \frac{\alpha\omega_c^{1-s}}{2} G(s) \Gamma T^{s-1} \quad (51)$$

と求まる。ここで

$$G(s) = \int_0^{\beta\omega_c} dx x^{s-1} \left[\frac{x/2}{\sinh(x/2)} \right]^2 \quad (52)$$

とおいた。 Γ の具体的な計算に関しては、式 (39) における $Q(t)$ の収束性から s の値によって場合分けする必要がある。オーミック散逸 ($s = 1$) における Γ の計算は文献 [?] で行われており、この結果

$$\kappa \simeq \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(\alpha)}{4\Gamma(\alpha + 1/2)} \frac{\Delta^2}{\omega_c} \left(\frac{\pi T}{\omega_c} \right)^{2\alpha-1} \quad (53)$$

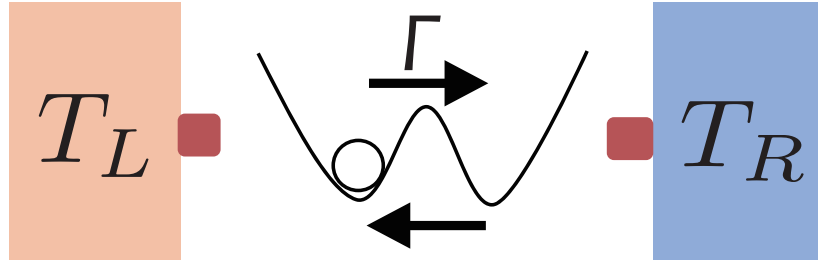


Figure 6. Incoherent tunneling 過程の模式図。単位時間あたりのトンネル確率 Γ で左右の井戸のトンネルが起こり、これに揺さぶられたボゾンが輸送される。

となることがわかる。また、サブオーミック散逸 ($s < 1$) における Γ は鞍点法によって計算でき、この結果は

$$\Gamma = \frac{\Delta^2}{4} e^{-\frac{\beta\Lambda_1}{4}} \sqrt{\frac{\pi\beta}{\Lambda_2}}, \quad (54)$$

$$\Lambda_1 = 8T\alpha\Gamma(s-1) + 16T\alpha\Gamma(s-1) \left(\frac{T}{\omega_c}\right)^{s-1} (2 - 2^{s-1})\zeta(s-1), \quad (55)$$

$$\Lambda_2 = T \left(\frac{T}{\omega_c}\right)^{s-1} 2\alpha(2^{s+1} - 1)\Gamma(s+1)\zeta(s+1) \quad (56)$$

となる [付録 B]。ここで、 $\zeta(x)$ はゼータ関数である。これより、サブオーミック散逸における incoherent tunneling 過程の熱コンダクタンスの近似解は

$$\kappa \simeq \frac{\alpha\omega_c^{1-s}}{2} G(s) \frac{\Delta^2}{4} e^{-\frac{\beta\Lambda_1}{4}} \sqrt{\frac{\pi\beta}{\Lambda_2}} T^{s-1} \quad (57)$$

と書ける。

Incoherent tunneling 過程の模式図を図 6 に示す。この過程では、系の波動関数は常に左右の井戸のどちらかに局在しており、左右の井戸の間を遷移確率 Γ で行き来する運動が生じることによって、熱浴から別の熱浴へと熱輸送が起こる。Incoherent tunneling では、系の位相情報は常に失われており、輸送前後でフォノンのコヒーレンスは失われている。

Incoherent tunneling 過程は散逸の影響が強い状況で生じる。具体的には $0 < s < 2$ の高温側で生じる。特に量子相転移による局在転移が生じると、任意の温度領域で熱輸送は incoherent tunneling 過程で記述される。一方、 $s \geq 2$ のスーパーオーミック散逸では、incoherent tunneling 過程は生じない。これは、式 (39) で決まる遷移確率の式で、積分が発散することから示唆される。

4. Monte Carlo method

In this section, we map the spin-boson model to the Ising model with long-range interactions on the imaginary axis by deriving the partition function of the spin-boson model in the imaginary time form. And, we explain how to numerically calculate the response function $\text{Im}[\chi(\omega)]$ by Monte Carlo method to the long-range Ising model.

First, we divide the spin-boson hamiltonian (??) into two parts:

$$H = \frac{\Delta\sigma_x}{2} + H_z, \quad (58)$$

$$H_z = \sum_{\nu=L,R} \sum_k \omega_{\nu k} b_{\nu k}^\dagger b_{\nu k} + \sum_{\nu=L,R} \sum_k \frac{\sigma_z}{2} \lambda_{\nu k} (b_{\nu k} + b_{\nu k}^\dagger). \quad (59)$$

Then, the partition function $Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}]$ can be described as

$$Z = Z_+ + Z_-, \quad (60)$$

$$Z_\pm = \langle \pm | \text{Tr}_{\text{boson}}[e^{-\beta H}] | \pm \rangle, \quad (61)$$

where $|\pm\rangle$ means the eigen state of σ_z , i.e., $\sigma_z |\pm\rangle = \pm 1 |\pm\rangle$, and Tr_{boson} means the trace for the boson's degree of freedom. Here, we introduce $\tilde{\sigma}_x(u)$ defined as $\tilde{\sigma}_x(u) \equiv e^{iH_z u} \sigma_x e^{-iH_z u}$, then we can expand Z_+ into

$$\begin{aligned} Z_+ &= \text{Tr}_{\text{boson}} \left[\langle + | e^{-\beta H_z} e^{-\int_0^\beta du \Delta \tilde{\sigma}_x(u)/2} | + \rangle \right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \text{Tr}_{\text{boson}} \left[\langle + | e^{-\beta H_z} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^{\tau_{2n-1}-\tau_c} d\tau_{2n} \left(\frac{\Delta}{2} \right)^{2n} \tilde{\sigma}_x(\tau_1) \dots \tilde{\sigma}_x(\tau_{2n}) | + \rangle \right] \end{aligned} \quad (62)$$

where τ_c is the cutoff on the imaginary time axis and it is given by $\tau_c = 1/\omega_c$. By calculating the trace for the boson's degree of freedom, we can derive the instanton-like partition function with n-kink pairs? [5, 6]:

$$Z_+ = Z_0 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\Delta\tau_c}{2} \right)^{2n} \int_0^\beta \frac{d\tau_1}{\tau_c} \dots \int_0^{\tau_{2n-1}-\tau_c} \frac{d\tau_{2n}}{\tau_c} \exp \left[\sum_{j>i}^{2n} (-1)^{i+j} W(\tau_j - \tau_i) \right] \quad (63)$$

where Z_0 is the partition function of bosons in the heat bath, and $W(\tau)$ is given by

$$W(\tau) = \int_0^\infty d\omega \frac{I(\omega)}{\omega^2} \frac{\cosh(\beta\omega/2) - \cosh(\beta\omega/2 - \tau)}{\sinh(\beta\omega/2)}. \quad (65)$$

We can calculate Z_- in the same way. If we regard $\tilde{\sigma}_x(\tau_j)$ as a kink charge, Eq. (64) can be regarded as the “kink” representation of the one-dimensional Ising model with the system states distinguished by the kink-degree of freedom $\{\tilde{\sigma}_x(\tau_i)\}$. Now, we consider rewriting it to the “spin” representation. Generally, the partition function of the one-dimensional Ising model with long-range interactions with the lattice constant a is written in the kink representation as

$$Z_{\text{ising}} = \sum_{n=0}^{\infty} y^{2n} \int_0^\beta \frac{d\tau_1}{a} \dots \int_0^{\tau_{2n-1}-a} \frac{d\tau_{2n}}{a} \exp \left[\sum_{j>i}^{2n} (-1)^{i+j} 4U \left(\frac{\tau_j - \tau_i}{a} \right) \right] \quad (66)$$

where $U(\tau)$ is the kink-kink interaction, and y is the chemical potential which satisfies $y = e^{2U(0)}$. According to [6, 7], we can calculate the spin-spin interaction $V(n)$ from the

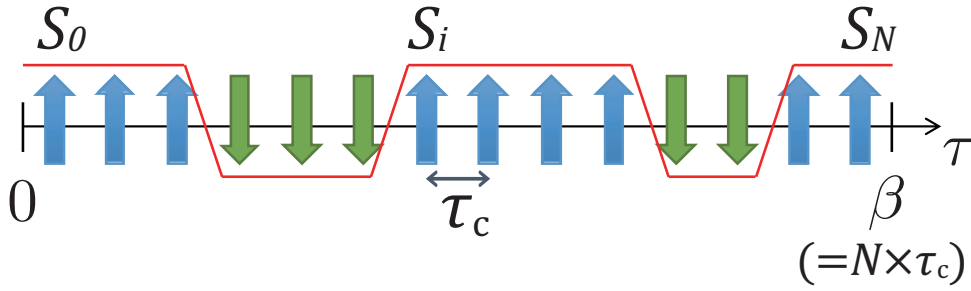


Figure 7. the one-dimensional Ising model with long-range interactions on the imaginary τ -axis.

kink-kink interaction $U(n)$ by the following recurrence relation:

$$V(n) = U(n+1) - 2U(n) + U(n-1), \quad (n : \text{integer} > 0), \quad (67)$$

then, Eq. (66) is described by $V(n)$ as

$$Z_{\text{ising}} = \sum_{S_1 \dots S_N} \exp \left[- \sum_{j>i} V(j-i) S_i S_j \right], \quad (68)$$

where S_i , ($i : \text{integer}$) is the spin of the i th site, N is the total number of sites, and S_i satisfies the boundary condition $S_i = S_{i+N}$ (Fig. 7). In this study, we divide β in length on the τ -axis into N parts, i.e., $\tau_c = \beta/N$. Then, we put Ising spins on the each sites and chose $V(n)$ as Eq. (66) becomes our desiring partition function(64). Specifically, we decide $U(n)$ from $W(\tau)$, and calculate $V(n)$ by Eq. (67). Actually, we can derive $V(n) \propto n^{-(s+1)}$ for the large enough total number of sites N , i.e., $n/N \ll 1$. In this way, we can map the spin-boson model to the one-dimensional Ising model with long-range interactions.

Now, we remark the algebraic relation between the response function $\chi(\omega)$ and the spin-correlation function $C(\tau)$:

$$\chi(\omega) = C(i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta), \quad (69)$$

$$C(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} C(\tau), \quad (70)$$

$$C(\tau) = \langle \sigma_z(\tau) \sigma_z(0) \rangle, \quad (71)$$

where Eq. (70) means the analytic continuation. These relations means we can derive $\text{Im}[\chi(\omega)]$ by calculating $C(\tau)$. And, we can derive $C(\tau)$ by calculating the spin correlation $\langle S_i S_0 \rangle$ of the long-range Ising model because they satisfies $\langle \sigma_z(\tau_i) \sigma_z(0) \rangle \simeq \langle S_i S_0 \rangle$. In this study, we use the Monte Carlo method to calculate $C(\tau)$ of the Ising model derived from Eq. (68). But, it takes very long time to numerically calculate $C(\tau)$ because the Ising model derived from Eq. (68) has $r^{-(s+1)}$ long-range interactions. Especially, this problem notably appears in the low temperature. It is known that if you use the single flip method [8], the relaxation time of the system diverges near the critical temperature (called “critical slowing down”). This problem can be solved by the cluster-flip method like the Wolff algorithm[14]. In this study, we use an efficient Monte

Carlo method based on the Wolff algorithm developed by E.Luijten [15]. The Luijten's algorithm utilizes the cumulative frequency distribution and in this algorithm we need not look at all spins in order to build a cluster but calculate the site at which the spin to add into a cluster first appears. Actually, we can realize more efficient implementation by making use of the bisection method to calculate the site. In this way, we adopt the Wolff method utilizing the cumulative frequency distribution to calculate the spin correlation $\langle S_i S_0 \rangle$.

5. Numerical result

本章では、量子モンテカルロ法による数値計算の結果を示す。まず、第 5.1 節において、一般の散逸における熱コンダクタンスの温度依存性を示し、どのようなトンネル過程が支配的となるかを近似解と比較することで具体的に調べる。その後、第 5.2 節で、断熱くりこみの理論から示唆されるサブオーミック散逸における局在転移に関する計算結果を示す。本章では $\omega_c = 1$ とし、すべてのエネルギースケールおよび温度スケールを ω_c を単位として記述する。

5.1. Thermal conductance

5.1.1. Ohmic case オーミック散逸 ($s = 1$) の熱コンダクタンスの温度依存性はすでに先行研究 [?] によって得られている (図??参照)。オーミック散逸では $\Delta/\omega_c \ll 1$ であれば、近藤模型と同様にエネルギーを Δ_{eff} でスケールすることによって、熱コンダクタンスが 1 つのユニバーサルな温度依存性を示すことが知られている。具体的には温度を Δ_{eff} によって規格化し、熱コンダクタンスを次元解析から Δ_{eff} で割って規格化すると、同一の曲線に乗ることがわかる (図??参照)。

簡単にオーミック散逸におけるトンネル機構をまとめる。まず、散逸強度が $0 < \alpha < 1$ の範囲にあるときは、低温において T^3 に比例する熱コンダクタンスが得られる。これは cotunneling 過程による解析解の温度依存性と一致する。一方、任意の散逸強度で高温において $T^{2\alpha-1}$ に比例する熱コンダクタンスが得られる。これは incoherent tunneling 過程による解析解の温度依存性と一致する。また、散逸強度 α が小さいときは、中間温度領域で sequential tunneling 過程の温度依存性に近い振る舞いが得られる。

より詳しく温度依存性を調べるために、ここではまず散逸強度 α が小さい場合を議論する。図 8 (a) にオーミック散逸 ($\alpha = 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}$) における熱コンダクタンスの温度依存性の計算結果を示す。ここでは逆温度 $\beta (= N)$ は $\beta = 64$ から $\beta = 8192$ までとり、広い温度領域で精度良く計算を行うために量子トンネル振幅を $\Delta/\omega_c = 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}$ とした。このグラフでは熱コンダクタンス κ を、 Δ_{eff}/k_B だけでなく α でも割っている。これは、sequential tunneling 機構による熱輸送が行われている時、計算データが同一曲線に乗るようにするためである。図 8(a) のグラフから明らかなように、温度の上昇に伴い熱コンダクタンスが cotunneling 機構による温度依存性から sequential tunneling 機構による温度依存性へとクロスオーバーしている様子がみてとれる。また両者の機構の近似解と数値計算結果はよく一致していることがわかる。

次に cotunneling から sequential tunneling へのクロスオーバー温度 T_c を見積もるため、 $\Delta = 0.1$ において、sequential tunneling 機構による解析解 (33)(図 8(a) の緑色の曲線) と、 α の値を変化させた時の cotunneling 機構による解析解 (36)(図 8(a) の紫色の曲線) の交点を数値的に決めた。ただし、cotunneling 機構の解析解 (36) 中の帯磁率 χ_m は数値計算による結果を用いた。その結果を図 8 (b) のデータ点に示す。クロスオーバー温度 T_c より低温側が cotunneling 領域、高温側が sequential tunneling 領域である。また、摂動論による近似計算では、解析解 (36) の表式において χ_m を $2/\Delta$ とした結果が得られ、クロスオーバー温度 T_c は

$$T_c^5 \sinh\left(\frac{\Delta}{T_c}\right) = \frac{\Delta^5}{4\alpha F(1)} \quad (72)$$

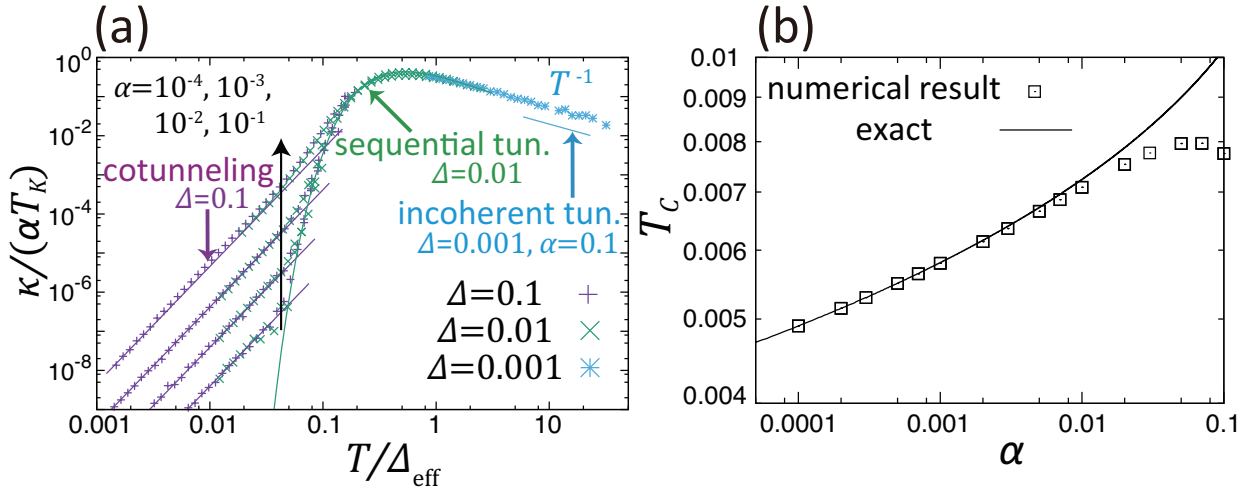


Figure 8. (a) オーミック散逸における熱コンダクタンスの温度依存性、(b) クロスオーバー温度 T_c と結合定数 α の関係 ($\Delta = 0.01$)。 (a) では、グラフは両対数スケールとしており、データ点は量子モンテカルロ法による計算結果で、各データはボトムからトップまでそれぞれ $\alpha = 10^{-4}$ (bottom), 10^{-3} , 10^{-2} , 10^{-1} (top) に対応している。ただし、 $\Delta = 0.001$ については $\alpha = 0.1$ のみの計算結果である。紫色の実線が $\Delta = 0.1$ における cotunneling 機構の式 (36) を α で除した近似曲線、緑色の実線は $\Delta = 0.01$ における sequential tunneling 機構の式 (33) を α で除した近似曲線である。量子モンテカルロ計算においては、 5×10^4 熱化ステップ、 25×10^5 モンテカルロステップで計算を行った。 (b) では、データ点は式 (36) と式 (33) の近似曲線の交点を求めることで計算した cotunneling から sequential tunneling へのクロスオーバー温度 T_c であり、実線は解析的に求めた T_c と α の関係を表す。

を数値的に解くことで得られる。ここで、 $F(1)$ は式 (36) の $F(s = 1)$ を意味する。この結果を図 8 (b) の実線に示す。摂動論による結果は $\alpha = 0.01$ 程度までは、帯磁率を数値計算したものとよく一致しているが、 α がそれ以上大きくなるとずれてくることがわかる。

最後に $\alpha \geq 1$ での熱コンダクタンスを議論する。この領域では $T_K = 0$ となるため、有限温度で cotunneling 機構は発現しない。また、量子力学的な重ね合わせ状態は完全に破壊されてしまっているため、sequential tunneling 機構も働かず、すべての温度領域で incoherent tunneling による熱輸送が生じることがわかる。図 9 に $\alpha = 1, 1.25, 1.5, 1.75, 2.0$ のときの熱コンダクタンスの温度依存性を示す。データ点はモンテカルロ計算の結果を表し、実線は incoherent tunneling の解析解 (53) を示す。ただし、式 (53) をそのまま用いるとデータ点とのずれが生じるため、 ω_c を $2\omega_c$ と取り直している。この違いは、もとのスピン・ボゾンモデルをイジングモデルにマップする際に生じるものであると考えられる。実際、この違いはただ単に T_K の大きさを少し変えるだけの効果を持ち、図??のようなスケーリング曲線 (エネルギーを T_K で規格化したときに得られる曲線) に直したときは違いが現れない。

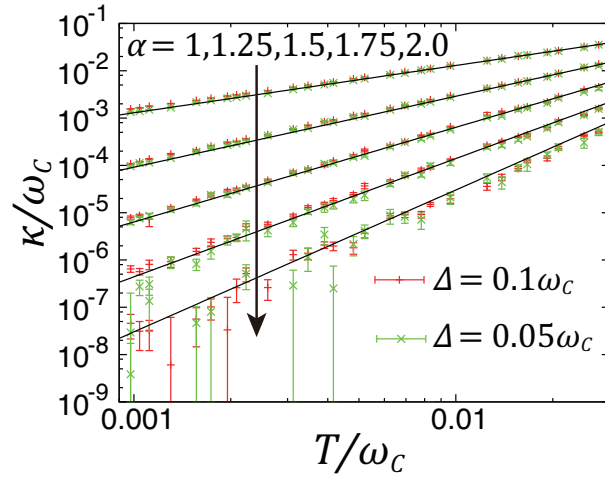


Figure 9. $\alpha \geq 1$ におけるオーミック散逸の熱コンダクタンスの温度依存性。各データはトップから ボトムまでそれぞれ $\alpha = 1.0$ (top), 1.25, 1.5, 1.75, 2.0(bottom) に対応している。実線は incoherent tunneling の近似曲線 (53) である。

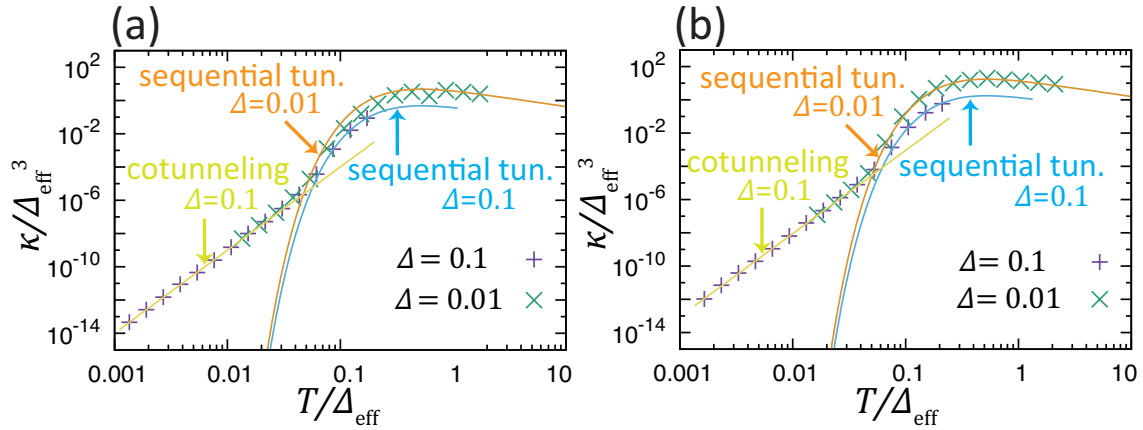


Figure 10. $s = 2.0$ のスーパーオーミック散逸における熱コンダクタンスの温度依存性: (a) $\alpha = 0.1$ 、(b) $\alpha = 0.3$ 。両対数スケールとしており、データ点は量子モンテカルロ法による計算結果、黄色の実線が $\Delta_{\text{eff}} = 0.1$ における cotunneling 機構の近似曲線 (36)、水色と橙色の実線はそれぞれ $\Delta_{\text{eff}} = 0.1, 0.01$ における sequential tunneling 機構の近似曲線 (33) である。量子モンテカルロ計算においては、 10^6 熱化ステップ、 5×10^7 モンテカルロステップで計算を行った。

5.1.2. *Super ohmic case* スーパーオーミック散逸 ($s > 1$) は散逸の効果は弱く、常に式 (25) で与えられるような有効相互作用 Δ_{eff} を定義できる。ここでは $s = 2.0$ および $s = 1.5$ のスーパーオーミック散逸における熱コンダクタンスの温度依存性を議論する。

まず、 $s = 2.0$ のときの熱コンダクタンスの温度依存性を議論する。結合定数 $\alpha = 0.1, 0.3$ とした場合の結果を図 10 の (a) と (b) にそれぞれ示す。ここで、 s を変化させたときに次元を保つため、縦軸を $\Delta_{\text{eff}}^{2s-1}$ で割っている。データ点はモンテカルロ計算の結果を表し、高温側の実線は sequential tunneling 機構の式 (33)、低温側の実線は cotunneling 機構の式 (36) を表す。低温側では cotunneling 機構による熱輸送によってよく説明されるのに対し、高温側では sequential tunneling 機構による熱輸送によってよく説明され

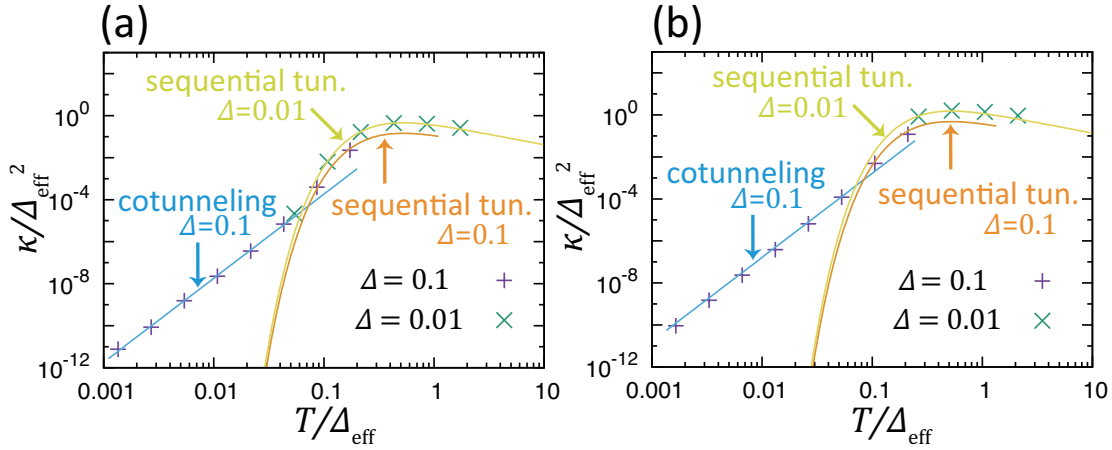


Figure 11. $s = 1.5$ のスーパーオーミック散逸における熱コンダクタンスの温度依存性: (a) $\alpha = 0.1$ 、(b) $\alpha = 0.3$ 。両対数スケールとしており、データ点は量子モンテカルロ法による計算結果、水色の実線が $\Delta = 0.1$ における cotunneling 機構の近似曲線 (36)、橙色と黄色の実線はそれぞれ $\Delta = 0.1$, 0.01 における sequential tunneling 機構の近似曲線 (33) である。量子モンテカルロ計算においては、 10^6 熱化ステップ、 5×10^7 モンテカルロステップで計算を行った。

ることがわかる。また同時に、式 (34) の一般化ス波関係式がスーパーオーミック散逸の低温領域で確かに成り立つことも、この計算によって示唆される。 $s = 2.0$ のスーパーオーミック散逸では量子力学的な重ね合わせ状態を破壊することはないため、incoherent tunneling 機構の熱輸送は生じない。これらの特徴は $s > 2$ のスーパーオーミック散逸でも同様に成り立つと期待される。

一方、 $1 < s < 2$ のスーパーオーミック散逸では、高温で重ね合わせ状態が破壊される場合がある。それを具体的に見るために、 $s = 1.5$ のスーパーオーミック散逸における熱コンダクタンスの温度依存性を議論する。まず、熱浴との結合強度を比較的小さな値である $\alpha = 0.1, 0.3$ とした場合の結果を、図 11 の (a) および (b) に示す。データ点はモンテカルロ計算の結果を表し、高温側の実線は sequential tunneling 機構の式 (33)、低温側の実線は cotunneling 機構の式 (36) を表す。 $s = 2$ の場合と同様に、低温側では cotunneling 機構による熱輸送が、高温側では sequential tunneling 機構による熱輸送が実現されている。

さらに熱浴との結合強度を $\alpha = 1.0$ とした結果を図 12 に示す。この場合は、低温では cotunneling の近似解とよく合っているが、 T/Δ_{eff} が 1 よりも大きくなるにつれて、sequential tunneling の表式からデータ点が乖離していく様子が見られる。これは温度ゆらぎによって incoherent tunneling が起こっているからと予想される。しかし、 $1 < s \leq 2$ ではフェルミの黄金律から求まるトンネル確率 Γ の式 (39) の指数部分 $Q(t)$ に特異点が現れ [?], Γ を容易に導出することはできないため、本研究ではこの領域の熱コンダクタンスの近似解は導出しなかった。ただし、別の角度からこの予想の妥当性を確かめることは可能である。量子モンテカルロ法で計算した応答スペクトル関数 $S(\omega)$ (図 13) を見ると、 $N = 512$ ではデルタ関数で近似できるような $\omega = \pm\Delta_{\text{eff}}$ 近傍に鋭い 2 つのピークを持つ関数になっているが、 N の減少に伴い徐々にピークが鈍くなり $N = 64$ では Lorentz 型の関数となっている。これは、第 3 章の議論を踏まえると、熱輸送機構が sequential

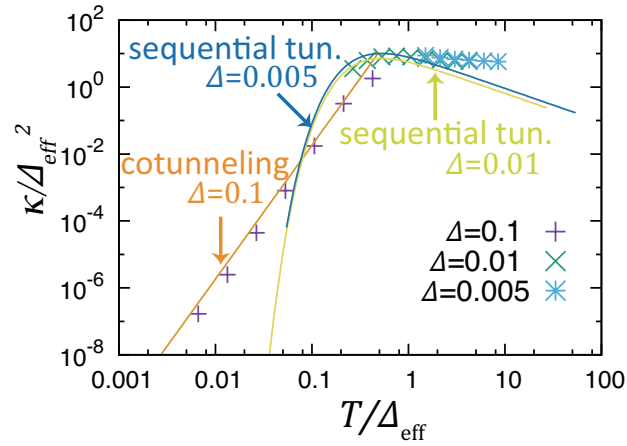


Figure 12. $s = 1.5, \alpha = 1.0$ のスーパーオーミック散逸における熱コンダクタンスの温度依存性。両対数スケールとしており、データ点は量子モンテカルロ法による計算結果、橙色の実線が $\Delta = 0.1$ における cotunneling 機構の近似曲線 (36)、黄色と青色の実線はそれぞれ $\Delta = 0.01, 0.005$ における sequential tunneling 機構の近似曲線 (33) である。量子モンテカルロ計算においては、 10^6 熱化ステップ、 5×10^7 モンテカルロステップで計算を行った。

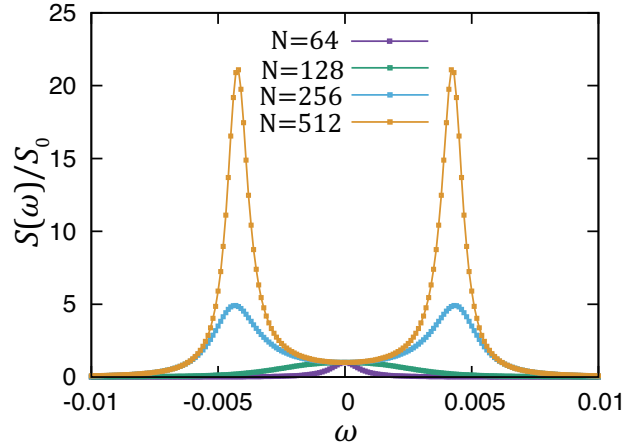


Figure 13. $s = 1.5, \alpha = 1.0, \Delta = 0.01$ における応答スペクトル関数。縦軸は応答スペクトル関数 $S(\omega)$ を $\omega = 0$ におけるスペクトル関数の値 S_0 で割っている。温度の上昇 (N の減少) に伴いデルタ関数型のダブルピークから Lorentz 型のシングルピーク関数へのクロスオーバーが起こる。

tunneling から incoherent tunneling へとクロスオーバーしていることを意味する。

5.1.3. Sub ohmic case 次にサブオーミック散逸における熱輸送を議論する。一般にサブオーミック散逸では s が小さくなるとイジング模型の長距離相互作用が大きくなるため、Wolff法で形成されるクラスターサイズも非常に大きくなり、結果として低温領域でモンテカルロ法の状態更新に膨大な時間を費やす。そこで、 s の値として極端に小さい値 $s = 0.9$ をまず調べる。熱浴との結合強度を $\alpha = 0.1$ および 0.3 とした場合の結果を図 14 に示す。データ点はモンテカルロ計算の結果を表し、高温側の実線は incoherent tunneling 機構の式 (57)、低温側の実線は cotunneling 機構の式 (36) を表す。

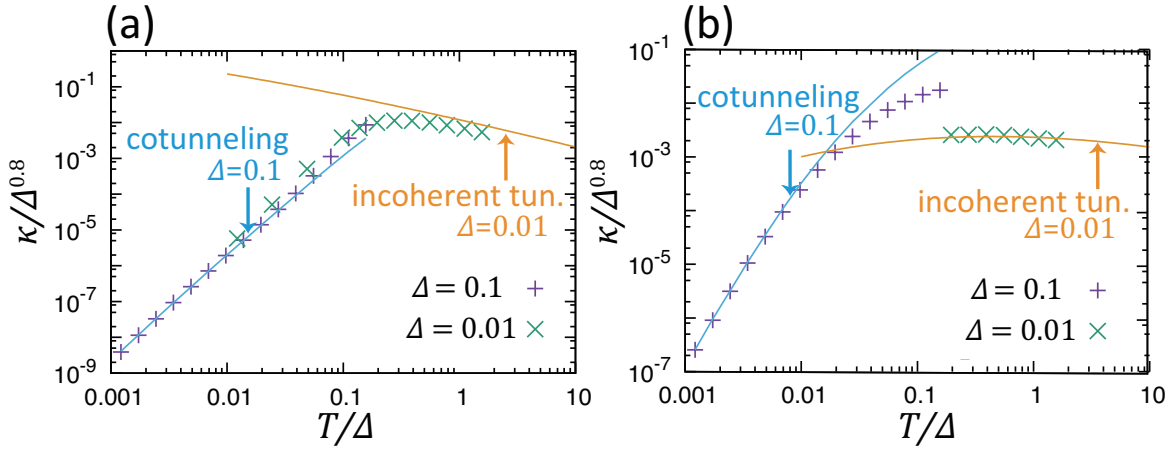


Figure 14. (a) $s = 0.9$ のサブオーミック散逸における熱コンダクタンスの温度依存性: (a) $\alpha = 0.1$ 、(b) $\alpha = 0.3$ 。両対数スケールとしており、データ点は量子モンテカルロ法による計算結果、水色の実線が $\Delta = 0.1$ における cotunneling 機構の近似曲線 (36)、橙色の実線は $\Delta = 0.01$ における incoherent tunneling 機構の近似曲線 (57) である。量子モンテカルロ計算においては、 10^6 熱化ステップ、 5×10^7 モンテカルロステップで計算を行った。

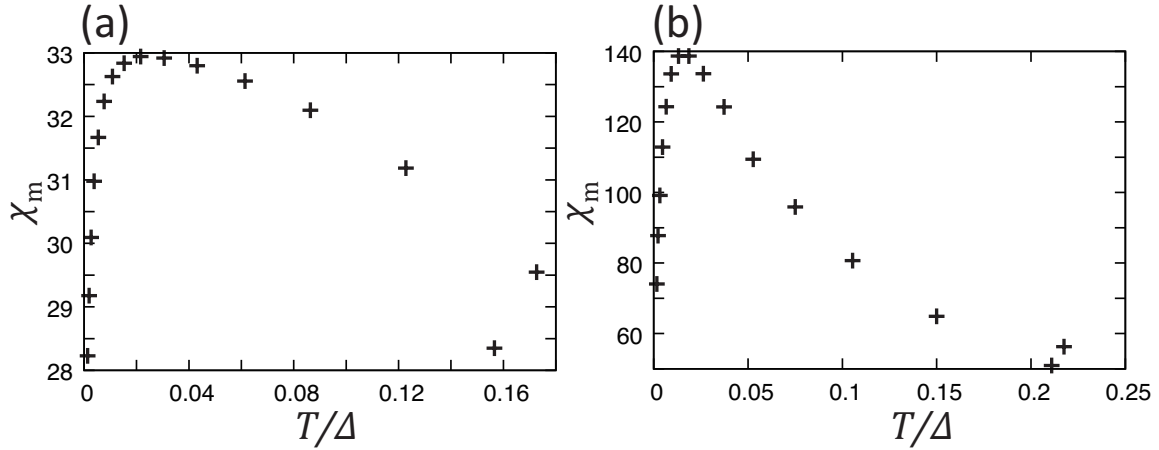


Figure 15. $s = 0.9, \Delta = 0.1$ おける帯磁率の温度依存性: (a) $\alpha = 0.1$ 、(b) $\alpha = 0.3$ 。

まず、低温の熱輸送は cotunneling によって生じることが図 14 からみてとれる。ただし、cotunneling 機構の式 (36) を用いるにあたっては、数値計算で求めた帯磁率 χ_m (図 15) を利用し、式 (36) の数値積分を二重指数関数型数値積分公式 [?] を用いて行った。図 15 に示されるように、帯磁率 χ_m は低温で特異的な温度依存性を示しており、図 14 の低温でのデータ点を合わせるためには、この温度依存性を考慮する必要がある。なお、図 15 に示される低温における帯磁率 χ_m の特異な振る舞いは、サブオーミックで生じる量子相転移と何らかの関係があると思われるが、現時点では理由はわかっていない。低温領域では、オーミックやスーパーオーミック散逸で現れる cotunneling の温度依存性の振る舞い T^{2s+1} と比較すると、低温での χ_m の温度依存性によって κ が僅かに抑制されているが、ほぼ $2s + 1$ のべきに近い振る舞いが得られていることがわかる。よって概ね、cotunneling の T^{2s+1} に比例する温度依存性が低温で実現されていると言える。

一方、図 14 より、高温の熱輸送は式 (57) の incoherent tunneling による熱輸送が生じていることがわかる。サブオーミック散逸では散逸の影響が強いため、sequential tunneling による熱輸送は起こらないと考えられる。

数値計算上の議論として、先述の通りサブオーミック散逸では長距離相互作用がスーパーオーミック散逸のときと比べて大きいため、低温領域で計算時間が非常に長くなる。これは量子モンテカルロ法の限界であり、本研究でも図 14(b) の計算では、incoherent tunneling 領域で $N = 512$ が計算可能な上限であった。これより低温を見るには量子モンテカルロ法のアルゴリズムの変更などの工夫が必要である。

5.2. Phase transition in sub ohmic regime

局在転移とは、温度ゼロ ($\beta = N \rightarrow \infty$) において量子力学的な摩擦 α が臨界摩擦 α_c を超えると、トンネル効果が全く起こらなくなり ($\Gamma \rightarrow 0$) 波動関数が局在化する現象である。これを調べるために、次のように定義される Binder パラメーターを導入する。

$$B \equiv \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle \sigma_z \rangle^4}{\langle \sigma_z^2 \rangle^2} \right) \quad (73)$$

Binder パラメーターは相転移の臨界係数を決めるのに有効な物理量であり、この理由を以下で説明する。一般に、ある物理量 A の平均値 $\langle A \rangle$ は、有限サイズスケーリング仮説から

$$\langle A \rangle(L, T) = L^{x_A/\nu} \tilde{f}_A(L^{1/\nu} t) \quad (74)$$

と書ける。ここで、 L はシステムサイズ、 T は温度、 $t \equiv |(T_c - T)/T_c|$ である。また x_A および ν はそれぞれ臨界点近傍 ($T \sim T_c$) において

$$\langle A \rangle(\infty, T) \propto \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right|^{-x_A}, \quad (75)$$

$$\xi \propto \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right|^{-\nu} \quad (76)$$

を満たす臨界指数である。ここで、もし $x_A = 0$ となるような物理量 A を選んだ場合、式 (74) は

$$\langle A \rangle(L, T) = \tilde{f}_A(L^{1/\nu} t) \quad (77)$$

と書け、臨界点近傍 ($t \sim 0$) で $\langle A \rangle(L, T)$ が L に依存しなくなる。つまり、システムサイズ L を変化させたとき、 L に依らず定点となる温度 T が臨界温度 T_c ということになる。そして、Binder パラメーターは $x_A = 0$ となる物理量なので、本研究ではこの性質を利用して臨界摩擦 α_c を求める。

$s = 0.6$, $\Delta = 0.01$ のサブオーミック散逸において、Binder パラメーターの α 依存性を調べた結果が図 16(a) である。このパラメーターに対して、Binder パラメーターは $\alpha = 0.09$ 付近で交点を持つ。拡大図を図 16(a) 中の挿入図に示す。ここで、局在転移は $T \rightarrow 0$ ($N \rightarrow \infty$) で起こるので、 N と $2N$ における Binder パラメーターの交点を $\alpha_{N,2N}$ とすると、 $\alpha_{N,2N}$ は N の増加に伴って臨界摩擦 α_c に収束するはずである。データから $\alpha_{N,2N}$ を求め、その N 依存性を調べたグラフが図 16(b) である。 N を大きくするに従い、 $\alpha_{N,2N}$ がある値に収束する様子がみてとれる。 $1/N$ の二次関数によって $\alpha_{N,2N}$ をフィッ

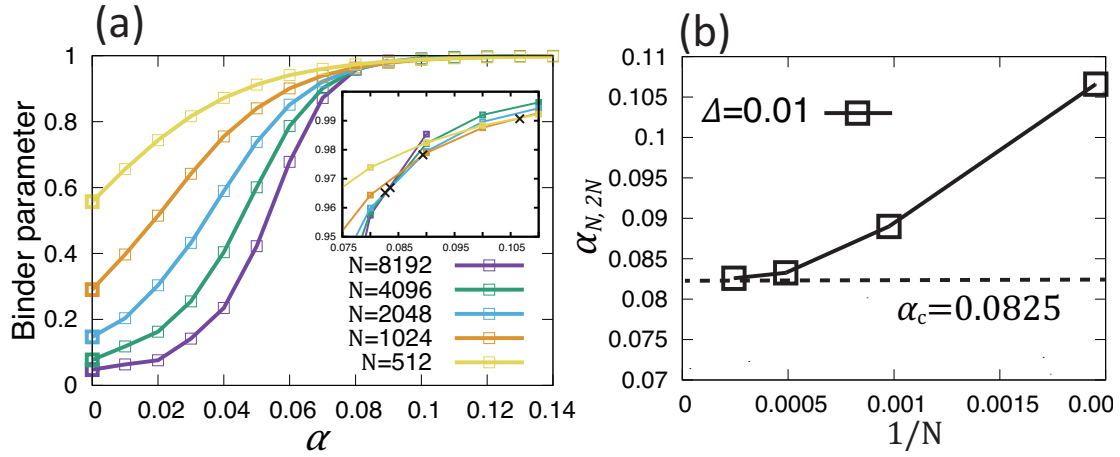


Figure 16. (a) $s = 0.6$, $\Delta = 0.01$ における Binder パラメーターの α 依存性、(b) Binder パラメーターの交点。(a) の埋め込み図中の \times 印は N と $2N$ における Binder パラメーターの交点を表す。(b) 中の点線はフィッティングで得た零点近傍の漸近線である。

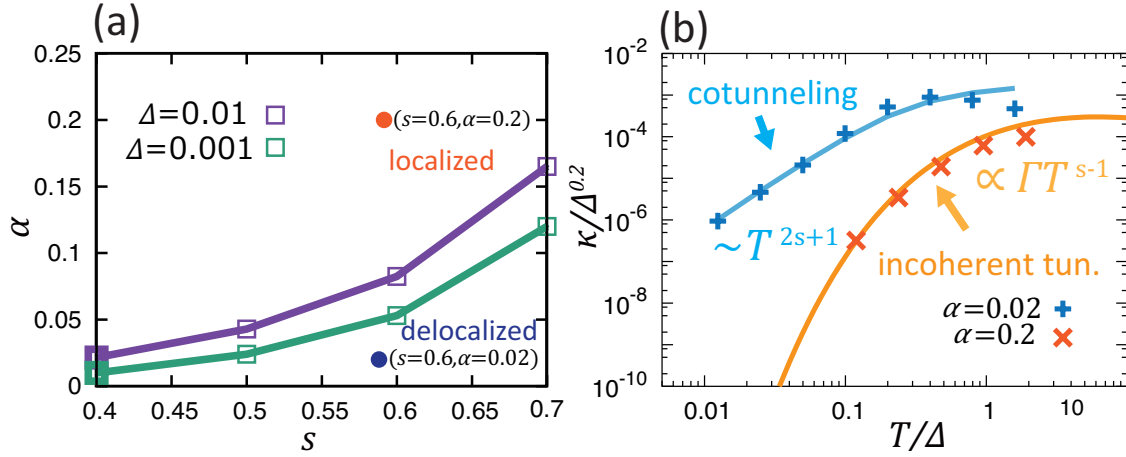


Figure 17. (a) $T = 0$ における局在転移の相図、(b) $\Delta = 0.01$ での局在相 ($s = 0.6, \alpha = 0.2$)・非局在相 ($s = 0.6, \alpha = 0.02$) における熱コンダクタンスの温度依存性。水色の実線が $\Delta = 0.01, \alpha = 0.02$ における cotunneling 機構の近似曲線 (36)、橙色の実線は $\Delta = 0.01, \alpha = 0.2$ における incoherent tunneling 機構の近似曲線 (57) である。

とし、外挿によって $N \rightarrow \infty$ での α_c を計算すると、図 16(b) の場合は $\alpha_c = 0.0825$ と求まる。

この手続きを $s < 1$ を満たす各 s に対して行った結果、 α と s についての局在転移の相図が得られる (図 17(a))。この結果は先行研究の数値くりこみ群による結果 [?] と定量的におおよそ一致している。ここでは相図の中で、 $\Delta = 0.01$ に対して局在相を代表する点 $(s, \alpha) = (0.6, 0.2)$ および非局在相を代表する点 $(s, \alpha) = (0.6, 0.02)$ の 2 点で、熱コンダクタンスの温度依存性を示したのが図 17(b) である。局在相のパラメーター $(s, \alpha) = (0.6, 0.2)$ ではすべての温度領域で incoherent tunneling による熱輸送でよく記述されるのに対し、非局在相のパラメーター $(s, \alpha) = (0.6, 0.02)$ では低温で cotunneling による熱輸送が生じていることがわかる。ただし、非局在相のパラメーター $(s, \alpha) = (0.6, 0.02)$ では、高温で incoherent tunneling による熱輸送へとクロスオーバーすると期待される

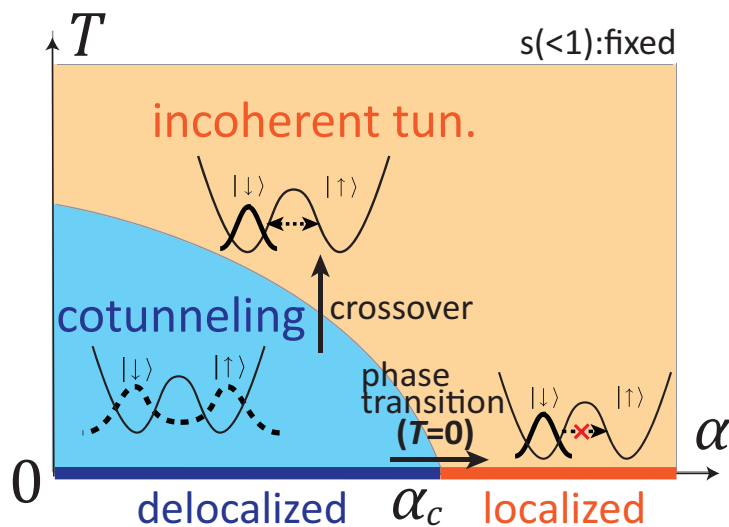


Figure 18. サブオーミック散逸における熱輸送機構の相図。

が、数値計算の精度の問題により、そこまでの温度領域の計算ができなかった。このように、量子相転移によって波動関数が局在すると、cotunneling 領域がなくなり、熱コンダクタンスの温度依存性が大きく変わることがわかる。最後に、温度 T と結合強度 α に関する相図の模式図を図 18 にまとめる。

6. Summary

- [1] D. Goldhaber-Gordon et al., *Nature* **391**, 156 (1998).
- [2] W. van der Wiel et al., *Science* **289**, 2105 (2000).
- [3] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [4]
- [5] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1(1987).
- [6] K. Völker, *Phys. Rev B* **58**, 1862 (1998).
- [7] J. Cardy, *J. Phys. A* **14**, 1407 (1981).
- [8] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* 2nd edition, (Cambridge University Press, UK, 2005).
- [9] F. Guinea, V. Hakim and A. Muramatsu, *Phys. Rev. B* **32**, 4410 (1985); F. Guinea, *Phys. Rev. B* **32**, 4486 (1985).
- [10] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* 4th Edition, (World Scientific, Singapore, 1999).
- [11] Y. Meir and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2512 (1992).
- [12] K. Saito and T. Kato, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 214301 (2013).
- [13] K. Saito, *Europhys Lett.* **83**, 50006 (2008)
- [14] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
- [15] E. Luijten and H. W. Blöte, *Int. J. Mod. Phys. C* **6**, 359 (1995).
- [16] H. Shiba, *Prog. Theor. Phys.* **54**, 967 (1975).
- [17] H. Grabert and U. Weiss, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1605 (1985).
- [18] M. P. A. Fisher and A. T. Dorsey, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1609 (1985).
- [19] T. Ojanen and A. -P. Jauho, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 155902 (2008).
- [20] D. Segal, *Phys. Rev. B* **87**, 195436 (2013).
- [21] D. Segal, *Phys. Rev. E* **90**, 012148 (2014).
- [22] C. Wang, J. Ren, and J. Cao, *Scientific Reports* **5**, 11787 (2015).
- [23] J. Ren, P. Hänggi and B. Li, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 170601 (2010).
- [24] T. Chen, X.B. Wang and J. Ren, *Phys. Rev. B* **87**, 144303 (2013).