数理解析研究所講究録
第1705巻2010年203-211

Wilsonの数値くりこみ群とエネルギースケールの選択性

新潟大学理学部物理学科　　奥西巧一

§introduction

くりこみ群はもともと場の量子論から発生した概念であるが、2次相転移の臨界現象を主な舞台にWilson-Fisher-Kadanoffらなどにより統計力学におけるくりこみ群が確立され、自然界の階層構造を説明するうえで現代物理学の最も基本的な概念のひとつになっている。その要約は自由度の粗視化（部分和）とスケール変換の組み合わせにより、高エネルギー短波長の自由度を徐々に間引きながら最終的には低エネルギー長波長の物理を記述する有効モデルを導くというところにある。通常、熱相転移現象では系全体に広がるマクロスケールのゆらぎが重要なため、ミクロな世界を支配する量子ゆらぎは本質的な役割はしないであろうというのがナイーブな期待であり、実際にそれでよい場合が多い。このような系では、臨界点におけるゆらぎの粗視化を実空間による描像に基づいて定式化した実空間くりこみ群が直感的にも分かりやすく、最近の統計力学の教科書でも三角格子イジング模型での成功が典型例としてよく論じられている。しかし、低次元の量子系の基底状態における量子相転移、量子臨界系になると話が別で、本質的に量子ゆらぎの効果が重要になるためブロックスピン変換のような実空間的扱いには特有の注意が必要になる。この意味で1次元の実空間くりこみ群には質的に少し異なる困難が内在していると言ってもよいだろう。

特有の難しさをはらんでいる低次元量子系の実空間くりこみ群のはずだが、歴史的にはWilson自身がいわゆる近藤効果に対して定式化した実空間数値くりこみ群がいきなり大成功した[1]。近藤問題とは金属中の一磁性不純物問題のことで、自由電子からなるフェルミ縮退気体中に空間的に局在した不純物スピンが一つ埋まっているという状況に相当する。これは非自明な相互作用の効果を含む最も基礎的な問題のひとつであり、実験的な発見以来さまざまな理論家の努力を経て最終的にはベーテ仮設による厳密解に至っている。しかし、厳密解以前にWilsonは、近藤問題を少し変則的な実空間の1次元量子多体系にマップしたのちに数値くりこみ群（Wilson NRG）的に扱うことで、その本質的な部分を鮮やかに示してみせたのである。これで実空間数値くりこみ群の黄金時代の到来といきたかったところかもしれないが、しかしながらそう甘くはなかった。

Wilson NRGの成功に触発されて1980年代に実空間くりこみ群の王道であろうブロックスピン変換にもとづく空間くりこみ群が1次元量子多体系に対して盛んに研究されたが、定量的はおろか定性的にも間違った答えを出すことがしばしばであったのである。このため、Wilson NRGは例外で、実空間くりこみ群はむしろ使えない方法だという実空間くりこみ暗黒の時代が1990年代初頭まで続いていた。現代的な観点から見れば、結果的に、1次元系ではブロックスピン変換が量子エンタングルメントをうまく保持する変換になっていなかったということになるだろう[3]。ところが1992年にS.R.Whiteが1密度行列くりこみ群（DMRG）という実空間くりこみ群的手法をあみ出し[2]、驚くべき精度で基底状態の物理量の期待値を計算してみせて以降、とりまく状況は一転した。DMRGは現在まで実用的にも大成功しており、現在では実空間くりこみ群は強力な手法だと考える向きが体勢を占めているように見受けられる。しかしながらじつはこのDMRG、くりこみ群とは名前は付いているが、理論の中にスケール変換が含まれていないため、教科書で習うくりこみ群とは少し異なる概念の数値計算法だと考えなければならない。

このように歴史をひきずって1次元量子系の実空間くりこみ群に対する“印象”は2転3転しているが、結局のところ現在においても、1次元量子臨界系を正しく扱えている実空間くりこみ群はWilson NRG唯一だという状況には変わりはない。果たして、難しいはずの1次元量子臨界系の実空間数値くりこみ群がなぜWilson NRGはうまくいってしまったのか？　その謎は解かねばならないし、今後の研究に対するいろいろな示唆が含まれているように思う。元祖Wilsonによるくりこみ群の仕事だからかどうかは分からないが、この“なぜ”に対する答えは議論されたことが無い。この研究ではこのなぜを最も簡単に説明することが目標である。

§近藤問題とWilson NRG

近藤問題は金属中に局在磁性不純物がひとつ存在するときに、磁性不純物と自由電子の相互作用により低温で電気抵抗が増大するという問題である。この問題は原点に存在する不純物の持つ局在スピンSと自由電子の持つスピンσが結合定数J_Kの交換相互作用で結合しているというモデルで記述される。金属中の自由電子は等方的なフェルミ面を持つと仮定すると、基本的には動径方向の自由度が問題になるため、モデルハミ

ルトニアンは

$$\mathcal{H}=\sum_i -i\frac{\partial}{\partial x_i}+J_K S\cdot\sigma_i\delta(x_i) \tag{1}$$

となる。ここで x_i、σ_i は i 番目の電子の 1 次元座標とスピン自由度を表す。近藤問題で重要なのは、ギャップレスの励起を担うフェルミ面近傍の自由電子である。Wilson は log 離散化という手法を用いてフェルミ面近傍の低エネルギー励起を担う自由電子を選択的に取り込みながら離散化し、1 次元格子上の強束縛模型にマップすることで巧みに数値計算に乗せることに成功した。導出は煩雑なので省略するが、離散化された近藤問題のハミルトニアンは

$$H_\Lambda^N=\Lambda^N\sum_{n=0}^{N}\Lambda^{-n}(c_{n,\sigma}c_{n+1,\sigma}^\dagger+\mathrm{h.c})+\tilde{J}_K S\cdot\sigma_0 \tag{2}$$

の形となる[1]。Λ が離散化にともなうカットオフのパラメーターで、$c_n^\dagger$ が離散化された電子の演算子である。この模型で重要なところは、単純な強束縛模型とは異なり log 離散化により自由電子間の遷移振幅が Λ^{-n} という因子分だけ空間的に変調されているところである。Wilson はこの問題を数値的に解くために、ハミルトニアンを

$$H_\Lambda^{N+1}=\Lambda H_\Lambda^N+(c_{N,\sigma}c_{N+1,\sigma}^\dagger+\mathrm{h.c}) \tag{3}$$

というように N, $N+1$ 間のハミルトニアンに対して成り立つ反復関係に書き直し、対角化を行いながらサイト数を逐次増やしていくというやり方を取った。通常、サイトが増えれば対角化すべき行列の次元も指数関数的に増し、すぐに計算機の処理能力を超えてしまう。しかし、フェルミ面近傍の低エネルギーの励起のみが重要であるため、Wilson は増える自由度のうち高エネルギーに相当する状態を落としつつ、行列の次元を一定に保ちながら計算を進め、最終的に低エネルギー状態を正しく記述する有効ハミルトニアンを得たのである。

くりこみ群の観点から Wilson NRG の手続きを見直してみよう。数値計算のさい高エネルギー側にカットオフを入れ、カットオフ以上の状態を落として粗視化を行っていることはすぐに分かる。しかし、もう一方の重要な要素であるスケール変換がどこに入っているのかと問われると、はたと困ってしまう。単純に (3) を見ても、サイト数は一つ増えてはいる

[1] Wilson の元論文では結合定数には 1 程度の大きさの因子がかかり、N や n のラベル付けも半整数になっているが以下の議論では簡単のために整数のみを用いている。重要なのは Λ^{-n} の部分における指数関数的な n 依存性なので本質は変わらない。

が長さスケールが変わっているかといわれるとそういうことは無さそうである。実は、log 離散化のカットオフ Λ^{-n} の因子が反復関係 (3) の度にかかることでエネルギースケールを下げる役割を担っている。最も小さなエネルギースケールを 1 に固定し、反復の度にフェルミ面から遠い側の電子のエネルギースケールを Λ だけ大きくしているのである。この意味で、Wlison NRG は座標のスケール変換ではなく、離散化のために導入された Λ によりエネルギースケールがコントロールされており、通常のくりこみ群とは趣をまったく異にする理論になっている。もとのハミルトニアン (2) に戻ってみれば、n が大きい側の結合定数が Λ^{-n} で小さくなるわけだから、不純物スピンから離れた側の電子の効果を指数的に落とす役割をになっており、ある意味で実行システムサイズ $L \sim \log \Lambda$ 程度の有限系を考えていることに相当する [4]。もともとフェルミ面近傍のギャップレス励起は赤外発散を含んでいるが、この Λ は実行システムサイズを有限にすることで長波長のゆらぎを落として、数値計算を可能にしていることになる。したがって、Λ には（無限系における）赤外発散の実空間におけるカットオフという意味合いを与えることが出来よう。すなわち、Wilson NRG は、かならずしも座標のスケール変換に頼らず、高エネルギーと低エネルギーの 2 種類のカットオフを巧みに組み合わせることにより上手に低エネルギー物理に重要な状態を引き出す理論になっているのである。しかし、実際の数値計算が定量的にもうまく働くということは単に定性的なだけではなく、数式の上でもしっかりした裏づけのある理論になっているはずである。もう少し log 離散化のカットオフの役割をきちんと理解したい。

§Wilson NRG の波動関数

物事は本質的な部分を含みながらできるだけ簡単な問題を考えるほうが良い。近藤問題にとって重要なのは不純物スピンそのものではなく、ギャップレス励起を担うフェルミ面近傍の自由電子である。ここでは簡単化のためにスピン自由度もはずして、スピンレスの自由フェルミオンにおける低エネルギーカットオフの Λ の役割を考えるよう。

$$H_\Lambda^N = \sum_{n=1}^{N} e^{\lambda n}(c_n c_{n+1}^\dagger + \mathrm{h.c}) \tag{4}$$

ここで、便宜上 $\lambda = \log \Lambda$ を導入した。自由フェルミオンだから 1 粒子問題が解ければ理解できるわけであるが、非一様な系なのでフーリエ変換はあまり役に立たない。解析的な扱いは後に回して、まず、数値対角化に

よる結果を示そう。そのほうが直感的な理解はずっと容易である。図1は $N = 200$ に対する固有値分布を表している。横軸は固有値の番号 j で小さいほうから並べてある。縦軸はエネルギー固有値の絶対値を表し、対数スケールになっていることに注意していただきたい。まず気が付くのが固有値がきれいに直線に乗っていることである ($j \simeq 100$ もしくは $j \simeq 1$ or 200 は直線からずれているがこれは系の端状態に相当するためであり、バルク部分に相当するほとんどの固有値が直線に乗っている)。もちろん $\lambda = 0$ がカットオフなしの一様な強束縛模型に対応しており、その場合の固有値は cos 型のバンドになるが、そこからパラメーター λ で図1のように変形されたことになる。

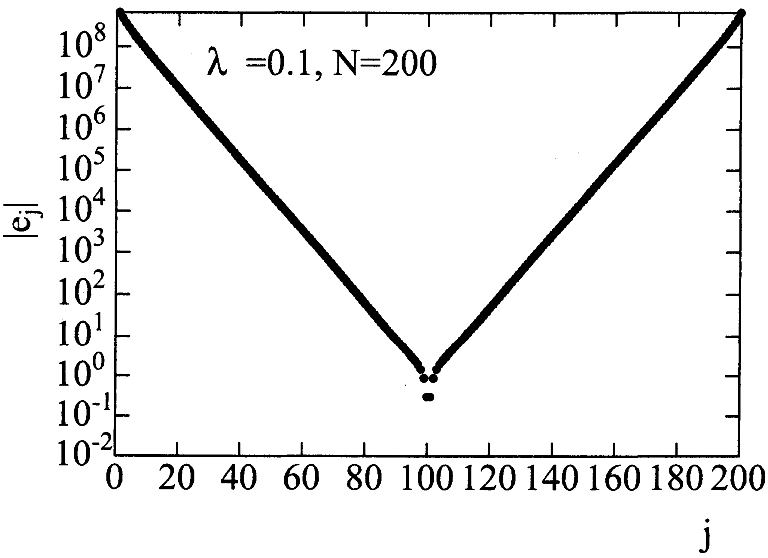

図 1: $N = 200$, $\lambda = 0.1$ の固有値スペクトル。横軸は固有値の番号、縦軸は log スケールでエネルギーの絶対値を表す。$j = 100$ と 101 の間がフェルミ面に相当する

固有値だけなら Wilson 自身も数値計算により求めていて、log スケールで直線に乗ることは認識しているが、より重要なのはその波動関数である。図2は固有値のラベルが $j = 120, 160$ に相当する波動関数で、ハーフフィリングの少し上側の固有値に対応している。重要なことは、一様な場合の波動関数が平面波で系全体に広がっているのと対照的に、指数因子 λ が入ると波動関数のほうも局在した波束に変形されていることである。波束に局在化することは遷移振幅が $e^{\lambda n}$ で変調されていることを見れば定性的には素直に理解できる。あるエネルギーを持つ粒子が存在したとして、その粒子がより結合定数の大きなボンドへ伝播しようとして

も、エネルギーが不足するため侵入していけない。逆に、指数的に結合の小さくなる領域では粒子の運んでくる大きなエネルギーを小さな結合定数のボンドの励起ではまかないきれないために跳ね返ってしまう。結果的にちょうど良いエネルギースケールを持つボンドあたりに波動関数が局在してしまうのである。

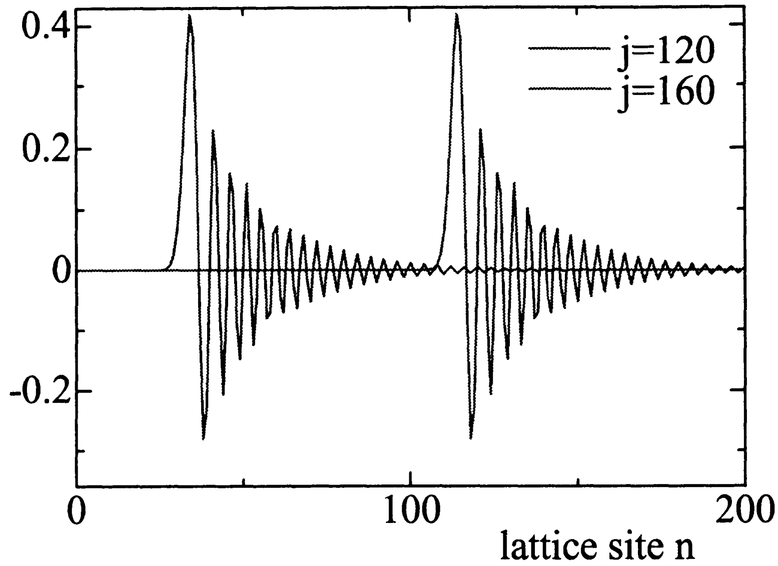

図 2: $N = 200$, $\lambda = 0.1$ の $j = 120$, 160 番目の固有値に対応する波動関数。波束を形成しており、それぞれ平行移動させると重なることが分かる。

さて、図 2 をみると分かるように、この波束についてもう一つ重要なことは、異なる固有値に属する波動関数のがほとんど同じ形であることである。つまり、波動関数の併進がそのまま固有エネルギーのシフトに対応するように見える。これはハミルトニアン (4) のもつ重要な性質で、Wilson NRG の鍵となるところである。そこで (4) の 1 粒子問題の性質を詳しくみることにする。1 粒子のシュレーディンガー方程式は

$$e^{-\lambda}\psi(n-1) + \psi(n+1) = E\psi(n) \tag{5}$$

である。このままでは指数因子が係数に含まれているので扱いづらいが、$\psi(n) = e^{-\lambda n/2}\phi(n)$ と変数変換すると、

$$\phi(n-1) + \phi(n+1) = \bar{E}e^{-\lambda n}\phi(n) \tag{6}$$

と簡単化できる。ただし、$\bar{E} = Ee^{\lambda/2}$ である。

この方程式の重要な性質を見るために $n = n' + m$ と m だけ格子をずらすことを考えると、

$$\phi(n' - 1) + \phi(n' + 1) = \bar{E}' e^{-\lambda n'} \phi(n') \tag{7}$$

となることがわかる。ここで、

$$\bar{E}' \equiv \bar{E} e^{-\lambda m} \tag{8}$$

である。これは、格子をずらすとともに、エネルギースケールを $\bar{E}e^{-\lambda m}$ と取り直すことにより元と同じ方程式を満たすことを示している。並進操作がエネルギースケールのシフトに対応しており、数値計算の示す結果は偶然ではない。すなわち、一旦ある固有値、固有ベクトルの組が求まれば、その他の固有値、固有ベクトルの組は全て併進操作により求めることができるのである[2]。この意味で、Wilson NRG は実はスケールフリーな理論になっており、かつエネルギースケールと格子の併進の一対一対応の性質を通じてギャップレス励起まで含めて任意のスケールを選択的に扱うことが可能になっているのである。

§ 高エネルギーの切断の正当性

Wilson NRG のスケールフリー性は log 離散化における赤外発散のカットオフに起因していることがわかった。もう一つの重要なカットオフは高エネルギー状態の切断である。高エネルギー状態が低エネルギーの物理に影響を及ぼさないであろうというのは物理的には自然な期待であろうが、前節の結果からこれがどのように正当化されるのかを見る。(4) は自由フェルミオンである。不純物問題はハミルトニアン (4) の最もエネルギースケールの大きな端（図 2 では右端）の部分に不純物を置き、その影響がどの程度低エネルギー、図 2 の格子のどの程度左側にまで影響を及ぼすかで決まる。NRG でやっていることは、基本的には平面波ではなく (4) の対角化で求めた波束で状態を展開しなおしなさいということである。異なるエネルギーを持つ波動関数がそれぞれ空間的に局在し、中心のずれた波束になっているため、ある程度離れれば重なりがゼロになっていることが分かる。エネルギースケールが下がって、波束の中心が左に移動し、波動関数の裾が不純物にかからなくなれば、電子は不純物の影響を受けないということになる。これが局所フェルミ液体に相当する。

[2]波動関数の裾が格子の端にかからないという条件付であるが、波動関数の局在性は良いため端の存在はとりあえず無視することにする。

どの程度状態を残せば良いかの基準は、波動関数の裾の振る舞い、すなわち $\psi(n) = e^{\lambda n/2}\phi(n)$ に起因して $\xi \equiv 2/\lambda$ で決まる長さスケールが基準となる[3]。それよりも離れた波束同士は波動関数の振幅の重なりを持たないため、事実上分離して考えることが出来るという仕掛けである。これが Wilson NRG のエネルギースケール選択性のからくりである。実際の NRG の計算は不純物を含む小さな格子から始め、電子を付けながら高エネルギー状態を落とすという手順で進められるが、ある程度のサイト数になり端の支配下から逃れて自由電子部分の固有値がスケールフリー性を示す領域に入れば、切断は正当化される。これまで Wilson NRG で保つ基底の数は経験に頼って判断していたが、実は明確な指標があったのである。

§まとめ

Wilson NRG を勉強した人がみれば、どうしてこれで正しい結果が出るのかという点におそらく誰もが一度はひっかかりを感じたであろう。(2) の指数関数的に増大する因子を含む無限和の扱いなど数学的に厳密な議論は難しいものかもしれないが、物理学への数値計算の応用上の立場からは、波束の局在性が良くエネルギースケールの分離が扱いやすいために、大変うまく出来た理論になっている。要点は、log 離散化による赤外発散のカットオフがスケールフリー性を保つ相互作用の変調を生み出し、これに伴い波動関数が平面波から波束になる。このときスケールフリー性から格子の並進とエネルギースケールの変化に一対一対応が付くことが重要であり、さらに、波束の局在性と高エネルギーの切断を巧みに組み合わせることにより低エネルギー有効理論を導き出しているのである。

Wilson NRG の解析で分かったもう一つ重要な点は、Wilson NRG 自体は粗視化と座標のスケール変換の組み合わせによるくりこみ変換により低エネルギー有効理論を導くものではないということであろう。(含まれていないからダメだというつもりではない)。このため、私自身、Wilson NRG では安定固定点がどの程度意味のある概念かいまのところ判断が付いていない。例えば、Wilson NRG はギャップレス系ではうまく働くのだが、(自由電子部分に) 質量のあるモデルでは正しく働かない。有質量だとモデル固有の長さスケールがあるため、Λ 変調による正則化と競合が

[3] $\lambda \ll 1$ では ϕ が修正ベッセル関数で記述でき、高エネルギー側 $(n > 0)$ は振動的な振る舞いに、低エネルギー側 $(n < 0)$ は $\exp(-\mathrm{const}e^{-\lambda n/2})$ で非常に急激に減衰することがわかる

起きてしまい、波束の意味合いをどう解釈していいのか分からないためである。これから解決しないといけないことがらである。また、ここでは述べなかったが Wilson NRG における連続極限の回復 ($\Lambda \to 1$) など興味深い問題はまだまだ残されているし、対照的にギャップ系で精度のよい密度行列くりこみ群などにとっても示唆的な内容もあるだろう。これからの研究の展開が望まれる。

参考文献

[1] K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).

[2] S.R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Phys. Rev. **B 48**, 10345 (1993). ; U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005)

[3] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **99**, 220405 (2007); **101**, 110501 (2008).; M. Rizzi, S. Montangero, and G. Vidal, Phys. Rev. A 77, 052328 (2008). エンタングルメント自体には言及していないが、境界の効果など White 自身も DMRG 以前に同様の考察をしている。

[4] K. Okunishi, J. Phys. Soc. Jpn. **76** 063001 (2007)