— 計算物理 — 1998 夏　初貝　(平成 18 年 2 月 28 日版)

第 II 部
計算機による量子統計力学

— フェルミ粒子系の経路積分の数値計算へ向けて —

1　自由電子と相互作用

1.1　遍歴性と局在性

物性論、特に凝縮系でいたるところにでてくる大問題として遍歴性と局在性の競合がある。これは、量子力学の基礎である粒子の波動性と粒子性の 2 面性に起因をもつとも言える。遍歴性とはある原子上にある電子が近くにある原子上の電子との波動関数との重なりのため電子波として拡がる性質である。この遍歴性の最も顕著な例が次のような自由電子系である。

$$H_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i$$

ここで i は原子の場所を指定し、c_i は原子 i 上の電子の消滅演算子である ($\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{jj'}$)。$-t$ が飛び移り積分で、これにより電子は系全体に拡がる傾向を持つ。特に原子が規則的にならんでいる場合電子はブロッホ状態として完全に拡がる。

では具体的に N 個の原子が鎖状にならんでいる場合を周期的境界条件で考えよう。この場合ハミルトニアンは次のように書ける。

$$H_0 = \boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{H}_0 \boldsymbol{c}, \quad \boldsymbol{c}^\dagger = (c_1^\dagger, c_2^\dagger, \cdots c_N^\dagger), \quad \boldsymbol{H}_0 = -t \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & & 1 \\ 1 & 0 & 1 & & & \\ & 1 & 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & 0 & 1 \\ 1 & & & & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix},$$

この系でグランドカノニカル集団による統計力学の議論をしよう。まず、分配関数 Ξ を求めることを考える。[1]

$$\Xi = \mathrm{Tr}_{2^L}\ e^{-\beta(H_0 - \mu N_t)} = e^{-\beta J}$$

[1] サイト表示の基底を構成せよ。更に、3 サイトの場合に分配関数をこの表示で実際に計算せよ。

ここで $N_t = \boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{c} = \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j$ である。[2] このトレースを具体的に計算するためにここでいわゆる波数表示に移ろう。つまり $N \times N$ のユニタリ行列 $\boldsymbol{U}$ を使って[3]

$$\begin{aligned} \boldsymbol{d} &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{c}, \quad \{\boldsymbol{U}\}_{mn} = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp(i\frac{2\pi}{N}mn) \\ d_k &= \{d\}_m, \quad k = 2\pi\frac{m}{N} \end{aligned}$$

とすると、この d_k もフェルミ演算子の反交換関係をみたし[4]

$$H_0 = \sum_k \epsilon_k n_k, \quad N_t = \sum_k n_k, \quad n_k = d_k^\dagger d_k,$$

となる。$d_k^\dagger$ は定義からわかるように空間すべての原子上に有限の振幅を持つ電子を生成し、この系の電子の遍歴性を示している。[5] また n_k は遍歴状態 k の占有数演算子となる。この表示ではハミルトニアンも粒子数も対角的なので容易にトレースが計算できて

$$\Xi = \prod_{j=1}^N (1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}) = \det{}_N \ (\boldsymbol{I}_N + e^{-\beta(\boldsymbol{H_0} - \mu \boldsymbol{I}_N)}) \tag{1}$$

となる。[6] ここでトレースをとる空間の次元が 2^N から N へ著しく減少したことに注意しよう。[7] この系の固有状態と固有値 E は各一粒子状態 k の占有数 n_k を指定することで次のように書ける。

$$|\{n_k\}\rangle = \prod_k (d_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle, \quad E = E(\{n_k\}) = \sum_k \epsilon_k n_k$$

特に基底状態は ϵ_k の小さい方から粒子数だけ詰めた状態となり、系が周期的な場合には Fermi Sea という。[8]

　一方、電子系は粒子として考えたとき負に帯電した粒子であるため静電エネルギーによる粒子間の相互作用としてのクーロン反発力をもつ。この効果は最も簡単には隣り合った原子上の電子間の反発力としてモデル化できハミルトニアンとしては

$$H_{int} = V \sum_{<i,j>} n_i n_j$$

と書ける。ここで $n_i = c_i^\dagger c_i$ は i 番目の原子上にいる電子の個数演算子である。この項により、電子系は隣り合った原子上にくるとエネルギーを損することとなり可能ならば一つ

---

[2] このトレースをとる空間の次元が 2^N である理由を述べよ。

[3] U のユニタリ性を示せ

[4] $\{d_{k=2\pi\frac{m}{N}}, d^\dagger_{k'=2\pi\frac{m}{\prime}N}\} = \delta_{kk'} = \delta_{mm'}$ これを示せ

[5] １次元鎖でなく、一般の D 次元正方格子の場合一粒子エネルギーはどうなるか？バンド幅は次元とともにどう変化するか？

[6] この式を導け

[7] 3 サイトの場合に分配関数をこの方法で実際に計算せよ。

[8] ここまでの議論はハミルトニアンがフェルミ演算子について２次形式であれば最近接かつ周期的な飛び移り積分を持つ場合に限らずに成立する。これが今後の議論において重要となる。

おき以上の間隔をあけて原子上に局在した状態がその基底状態となる。電子の局在性はこのクーロン相互作用により最も典型的に表現されるのである。

この遍歴性をもたらす H_0 と局在性をもたらす H_{int} はお互いに競合し興味深い効果をもたらす。ここで H_0 を対角的にする n_k は波数表示の粒子数演算子であり、H_{int} を対角的にする n_i は実空間のある原子上の電子数の粒子数演算子であり両立しないところに困難と逆に興味があるわけである。

1.2　格子上のモデル

- 以上の遍歴性と局在性の２面性をともに持つ実際の系を考察するには、H_0 と H_{int} をともに含む次のようなハミルトニアンを考えることが自然であろう（最も単純なものとして)。

$$H_{sf}=-t\sum_{\langle i,j\rangle}c_i^\dagger c_j+c_j^\dagger c_i+V\sum_{\langle i,j\rangle}n_in_j$$

  これを スピンレスフェルミオン系 とよぶ。[9]

- 文字どおり上の系はスピンを持たないがスピンに関する物理を議論する際には次の ハバードモデル を考えるのが自然であろう。

$$H_{hub}=-t\sum_{\langle i,j\rangle,\sigma=\uparrow,\downarrow}c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}+c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}+U\sum_i n_{i,\uparrow}n_{i\downarrow}$$

  なお、この最後の項は $n_i^2=(n_{i,\uparrow}+n_{i\downarrow})^2=2n_{i,\uparrow}n_{i\downarrow}+n$ であり、特定の原子上での静電エネルギーとしてのポテンシャルエネルギーを表すと考えられる。[10]

- 更に相互作用の距離を拡げた

$$H_{ex}=-t\sum_{\langle i,j\rangle,\sigma=\uparrow,\downarrow}c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}+c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}+U\sum_i n_i^2+V\sum_{\langle i,j\rangle}n_in_j$$

  を 拡張ハバードモデル とよぶ。[11]

---

[9] スピンレスフェルミオンの強結合の場合

– 斥力 $0<V$, $t<<V$、 $2\times$ 電子数 = サイト数の時、基底状態はどのようなものか？想像せよ。

– 引力 $0>V$, $t<<|V|$ の時、基底状態はどのようなものか？想像せよ。

[10] ハバードモデルの強結合の場合

– 斥力 $0<U$, $t<<U$、全電子数 = サイト数の時 (1/2 filled)、基底状態はどのようなものか？想像せよ。

– 引力 $0>U$, $t<<|U|$ の時、基底状態はどのようなものか？

[11] 拡張ハバードモデルの強結合の場合

– 斥力 $0<U,V$, $t<<U,V$、 $2\times$ 全電子数 = サイト数の時 (1/4 filled)、基底状態はどのようなものか？

2　フェルミ粒子系の量子統計力学とフェルミオン行列

スピンレスフェルミオン、ハバードモデル等の量子統計力学的性質を調べる際、その分配関数を計算することが必要となるが一般にはその遍歴性と局在性の二つの性質が共存しているため厳密に計算することは極めて困難である。[12]　そこで系の大きさを有限として数値的にその値をもとめることを考えよう。ここでは話を簡単にするために例として一次元のスピンレスフェルミオン系を例とする（他のモデルへ拡張するのは自明）。これらの系のハミルトニアンはフェルミ演算子について４次の項をふくみ (1) のように分配関数を L 次の行列式としてあらわすことはできず、数値計算としては、基本にかえって直接には 2^L 次（例えばスピンレスフェルミオンの場合）のトレースを計算せざるを得ない。しかしこれは非常に多くの項の和であり、各項の計算にも手間がかかりそのまま実行するのは現実的でない。

このトレースを効率的に計算することを目標に以下の幾つかの工夫をそれぞれ詳しく説明する。

2.1　トロッター・鈴木公式

A と B を演算子とし $\Delta\tau$ を小さな数としたとき展開すればすぐわかるように次の式が成り立つ。

$$e^{-\Delta\tau(A+B)} = e^{-\Delta\tau A}e^{-\Delta\tau B} + \mathcal{O}(\Delta\tau^2)$$

ここで重要なことは $\Delta\tau$ の１次の項がないことである。そこで $e^{-\beta H}$ を次のように展開する。

$$\begin{aligned} e^{-\beta H} &= e^{-\beta(H_0+H_{int})} = (e^{-\Delta\tau(H_0+H_{int})})^L, \quad (\beta = L\Delta\tau) \\ &= (e^{-\Delta\tau H_0}e^{-\Delta\tau H_{int}} + \mathcal{O}(\Delta\tau^2))^L = \prod_{\ell=1}^{L}(e^{-\Delta\tau H_0}e^{-\Delta\tau H_{int}}) + \mathcal{O}(\Delta\tau^1) \end{aligned} \tag{2}$$

これをトロッター・鈴木公式という。これを使うと例えば分配関数は L を大きくとって

$$\Xi \approx \mathrm{Tr}\ \overbrace{e^{-\Delta\tau H_0}e^{-\Delta\tau H_{int}}\cdots e^{-\Delta\tau H_0}e^{-\Delta\tau H_{int}}}^{L}$$

となる。[13]

想像せよ。

– 引力 $0 > U, V,\ t << |U|, |V|$ の時、基底状態はどのようなものか？想像せよ。

[12] 例外はありスピンレスフェルミオン、ハバードモデルについては１次元に限ると熱力学量が厳密に計算可能であることが知られている。ただしモデルをそれ以上複雑にするとほとんど厳密解は知られていない。
[13] この展開自体の誤差は実はもう一次高く $\mathcal{O}(\Delta\tau^2)$ である。

2.2　ハバード・ストラトノビッチ変換

n_i と n_j をフェルミ粒子の粒子数演算子としたときハバード・ストラトノビッチ変換とよばれるつぎの関係式が成り立つ。[14]

$$\begin{aligned} e^{-V\Delta\tau n_i n_j} &= \frac{1}{2}\sum_{\sigma=+,-} e^{(\alpha\sigma+\frac{1}{2}V\Delta\tau)n_i+(-\alpha\sigma+\frac{1}{2}V\Delta\tau)n_j} \\ \alpha &= \frac{1}{2}\tanh^{-1}\sqrt{\tanh\frac{V\Delta\tau}{4}} \sim \mathcal{O}(\Delta\tau^{1/2}) \end{aligned}$$

左辺にはフェルミ演算子４個の積が相互作用項として含まれるのに対し、右辺はポテシャルとしての２次形式の形しか含まれないことに注意しよう、つまり変数 σ を導入することにより、相互作用が消去できたことになる。

これを相互作用項それぞれに用いると $e^{-\beta H}$ は次のようにかける。

$$\begin{aligned} e^{-\beta H} &= \prod_{\ell=1}^{L}(\frac{1}{2}\sum_{\sigma_{\langle i,j\rangle}} e^{\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{K}\boldsymbol{c}} e^{\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{V}_\ell \boldsymbol{c}}) \\ &= \frac{1}{2^{NdL}}\left(\prod_{\ell,\langle i,j\rangle_\ell}\sum_{\sigma_{\langle i,j\rangle_\ell}}\right)\overbrace{e^{\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{K}\boldsymbol{c}} e^{\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{V}_L \boldsymbol{c}}\cdots e^{\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{K}\boldsymbol{c}} e^{\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{V}_1 \boldsymbol{c}}}^{L} \quad (L\to\infty) \\ &\equiv \int D\{\sigma(\tau)\} T e^{-\int_0^\beta d\tau \boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{H}(\tau)\boldsymbol{c}} \end{aligned}$$

となる。ここで行列 $\boldsymbol{K}$、$\boldsymbol{V}_\ell$ は次の式で定義される。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{K}\boldsymbol{c} &= -\Delta\tau H_0 \\ \boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{V}_\ell \boldsymbol{c} &= \sum_{\langle i,j\rangle}[(\alpha\sigma_{\langle i,j\rangle_\ell}+\frac{1}{2}V\Delta\tau)n_i+(-\alpha\sigma_{\langle i,j\rangle_\ell}+\frac{1}{2}V\Delta\tau)n_j] \end{aligned}$$

または、変換として

$$e^{\frac{1}{2}\hat{A}^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} d\sigma e^{-\frac{1}{2}\sigma^2} e^{\sigma\hat{A}}$$

をハバード・ストラトノビッチ変換と言う場合もあるが、[15] ここで $\hat{A}=\sqrt{V\Delta\tau}(n_i-n_j)$ とすれば同様に扱える。ただしこの場合、σ については任意の実数についての和（積分）をとることになる。

2.3　多粒子状態と２次形式の演算子

フェルミ粒子の M 粒子状態を次のように $N\times M$ 行列 $\mathbf{\Phi}$ として指定しよう（スレーター行列式に対応する）

$$|\mathbf{\Phi}\rangle = \prod_{p=1}^{M}\left(\sum_{i=1}^{N} c_i^\dagger \phi_{ip}\right)|0\rangle$$

[14] 成立することを確認せよ。
[15] 右辺を平方完成せよ。

$$\mathbf{\Phi} \;=\; (\vec{\phi}_1, \cdots, \vec{\phi}_M), \quad \{\vec{\phi}_p\}_i = \phi_{ip}$$

$\vec{\phi}_p,\ p = 1, \cdots, M$ は N 次元の M 個の列ベクトルである。

このときこの状態に $\boldsymbol{A}$ をエルミート行列として $e^{\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{A}\boldsymbol{c}}$ を作用させたとき直接の計算で次の式が成立する。[16]

$$e^{\boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{A}\boldsymbol{c}}|\mathbf{\Phi}_M\rangle = |e^{\boldsymbol{A}}\mathbf{\Phi}_M\rangle$$

更に状態間の内積については

$$\langle \mathbf{\Psi}|\mathbf{\Phi}\rangle = \det{}_M \mathbf{\Psi}^\dagger \mathbf{\Phi}$$

となる。[17]

よって分配関数は、

$$\begin{aligned}
\Xi &= \mathrm{Tr} \int D\{\sigma(\tau)\} T e^{-\int_0^\beta d\tau \boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{H}(\tau) \boldsymbol{c}} \\
&= \int D\{\sigma(\tau)\} \sum_{\mathbf{\Phi}} \langle \mathbf{\Phi}| T e^{-\int_0^\beta d\tau \boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{H}(\tau)\boldsymbol{c}} |\mathbf{\Phi}\rangle \\
&= \int D\{\sigma(\tau)\} \sum_{\mathbf{\Phi}} \det\ \mathbf{\Phi}^\dagger \boldsymbol{U}_L \mathbf{\Phi} \qquad (L \to \infty) \\
\boldsymbol{U}_L &= e^{\boldsymbol{K}} e^{\boldsymbol{V}_L} \cdots e^{\boldsymbol{K}} e^{\boldsymbol{V}_1}
\end{aligned}$$

となる。ここで $\mathbf{\Phi}$ の和は、多粒子系の完全系についてとる。

特に完全系として、$\Phi_M^{j_M},\ M = 0, \cdots, N\ j_M = 1, \cdots, \begin{pmatrix} N \\ M \end{pmatrix}$ を各列がただ一つの 1 と 0

---

[16] A を対角化する行列 U として $A = U^\dagger \mathrm{diag}\ (a_1, \cdots, a_N) U$ のとき、$d = Uc$ とおくと $c^\dagger = d^\dagger U$ で

$$\begin{aligned}
e^{c^\dagger A c}|\mathbf{\Phi}_M\rangle &= e^{\sum_k a_k d_k^\dagger d_k} \prod_{p=1}^M \left(\sum_{i,k} d_k^\dagger U_{ki} \phi_{ip} \right) |0\rangle = \prod_{p=1}^M \left(\sum_{i,k} e^{a_k} d_k^\dagger U_{ki} \phi_{ip} \right) |0\rangle \\
&= \prod_{p=1}^M \left(\sum_{j,k,i} c_j^\dagger U_{jk}^\dagger e^{a_k} U_{ki} \phi_{ip} \right) |0\rangle = \prod_{p=1}^M \left(\sum_{i,j,k} c_i^\dagger \{e^A \phi\}_{ip} \right) |0\rangle = |e^A \mathbf{\Phi}_M\rangle
\end{aligned}$$

[17]

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{\Psi}|\mathbf{\Phi}\rangle &= \sum_{i_1,\cdots,i_M} \sum_{j_1,\cdots,j_M} \psi_{i_1 1}^* \cdots \psi_{i_M M}^* \phi_{j_1 1} \cdots \phi_{j_M M} \langle 0| c_{i_M} \cdots c_{i_1} c_{j_1}^\dagger \cdots c_{j_M}^\dagger |0\rangle \\
&= \sum_{i_1,\cdots,i_M} \sum_P \psi_{i_1 1}^* \cdots \psi_{i_M M}^* \phi_{P(i_1)1} \cdots \phi_{P(i_M)M} (-)^P \\
&= \sum_P (-)^P \sum_{i_1,\cdots,i_M} \psi_{i_1 1}^* \cdots \psi_{i_M M}^* \phi_{i_1 P(1)} \cdots \phi_{i_M P(M)} \\
&= \sum_P (-)^P \{\mathbf{\Psi}^\dagger \mathbf{\Phi}\}_{1P(1)} \cdots \{\mathbf{\Psi}^\dagger \mathbf{\Phi}\}_{MP(M)} = \det{}_M \mathbf{\Psi}^\dagger \mathbf{\Phi}
\end{aligned}$$

からなる独立なベクトルからなる $N \times M$ 行列とするとこれらは完全系となり、

$$\sum_{M,j_M} \det{}_M \boldsymbol{\Phi}^\dagger \boldsymbol{U}_L \boldsymbol{\Phi} = \det{}_N(\boldsymbol{I}_N + \boldsymbol{U}_L)$$

が示せるので[18]

$$\Xi = \int D\{\sigma(\tau)\} \det{}_N \left[\ \boldsymbol{I}_N + Te^{-\int_0^\beta d\tau \boldsymbol{H}(\tau)}\ \right]$$

となる。更に $NL \times NL$ 次元のフェルミオン行列 $\mathcal{O}$ を

$$\mathcal{O}_F = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_N & \boldsymbol{O} & \cdots & & \boldsymbol{O} & e^{-\Delta\tau \boldsymbol{H}(\tau_1)} \\ -e^{-\Delta\tau \boldsymbol{H}(\tau_2)} & \boldsymbol{I}_N & \boldsymbol{O} & \ddots & & \boldsymbol{O} \\ & -e^{-\Delta\tau \boldsymbol{H}(\tau_3)} & \boldsymbol{I}_N & & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & & \boldsymbol{I}_N & \boldsymbol{O} \\ & & & & -e^{-\Delta\tau \boldsymbol{H}(\tau_L)} & \boldsymbol{I}_N \end{pmatrix}$$

として

$$\Xi = \int D\{\sigma(\tau)\} \det{}_{NL} \mathcal{O}_F$$

有限系においてこの行列式を計算すればよい。ここで行列の次元をみると系の空間次元 d として $d+1$ 次元の系であるかのように考えられ量子的 d 次元系がある種の古典的 $d+1$ 次元系に対応したといえる。

2.4　フェルミ粒子とグラスマン数

フェルミ粒子系のトレースを計算する際、前節では行列表現を用いたが、グラスマン数と呼ばれる反可換数を持ち込むことにより別な方法でトレースがとれる。これについてこの節と次の節でまとめる。

グラスマン数 $\eta, \bar{\eta}$ を反可換数

$$\eta^2 = 0,\ \bar{\eta}^2 = 0,\quad \{\eta, \bar{\eta}\} = \eta\bar{\eta} + \bar{\eta}\eta = 0$$

とし、その積分を

$$\int d\eta = 0,\quad \int d\bar{\eta} = 0, \int d\eta\, \eta = \int d\bar{\eta}\, \bar{\eta} = 1$$

[18]

$$\sum_{M,j_M} \det{}_M \boldsymbol{\Phi}^\dagger U_L \boldsymbol{\Phi} = \sum_{M,j_M} \det{}_M \left[\ I_M + \boldsymbol{\Phi}^\dagger (U_L - I_N) \boldsymbol{\Phi}\ \right] = \sum_{M,j_M} \det{}_N \left[\ I_N + \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^\dagger (U_L - I_N)\ \right]$$

$$= \sum_{M,j_M} \det{}_N \left[I_N - \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^\dagger + \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^\dagger U\ \right] = \sum_{k=1}^{2^N} \det{}_N \left[\ I_N - J_k + J_k U_L\ \right]\ = \det{}_N (I_N + U_L)$$

ここで $J_k = \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^\dagger$ は対角要素が 0 または、1 である 2^N 個の N 次元対角行列である。

とすると[19] 多項式 $F(\bar\eta,\eta)=F_{00}+F_{10}\bar\eta+F_{01}\eta+F_{11}\bar\eta\eta$ に対してその積分は $\int d\bar\eta d\eta F(\bar\eta,\eta)=-F_{11}$ となる。これから n 次のエルミート行列 $\boldsymbol{A}$ に対し

$$\int d\bar\eta_1 d\eta_1\cdots d\bar\eta_n d\eta_n\, e^{-\bar{\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{\eta}+\bar{\boldsymbol{\xi}}\boldsymbol{\eta}+\bar{\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{\xi}}=(\det{}_n\boldsymbol{A})\, e^{\bar{\boldsymbol{\xi}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{\xi}},\quad \bar{\boldsymbol{\eta}}=(\bar\eta_1,\cdots,\bar\eta_n),\quad \boldsymbol{\eta}=\begin{pmatrix}\eta_1\\ \eta_2\\ \vdots\\ \eta_n\end{pmatrix}$$

となる。[20] 特に

$$\int d\bar\eta_1 d\eta_1\cdots d\bar\eta_n d\eta_n\, e^{-\bar{\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{\eta}}=\det{}_n\boldsymbol{A}$$

ここでコヒーレント状態を

$$|\eta\rangle=e^{c^\dagger\eta}|0\rangle=|0\rangle+|1\rangle\eta$$

とすると次の等式が成立する。

- 内積[21]
$$\langle\eta|\eta\rangle=e^{\bar\eta\eta}$$
- 完全性[22]
$$\int d\bar\eta d\eta\, e^{-\bar\eta\eta}|\eta\rangle\langle\eta|=1$$
- 行列要素[23]
$$\langle\eta|F(c^\dagger,c)|\xi\rangle=e^{\bar\eta\xi}F(\bar\eta,\xi)$$

---

[19] $d\eta$, $d\bar\eta$, も反可換とする。また微分は反可換であることをのぞいて通常の１次式の微分と同様に定義する。するとグラスマン数についての微分は積分と等しくなることに注意。

[20] $\eta=U^\dagger\zeta$ と変数変換すると、ζ_j も Grassmann 数となり、($\bar\eta=\bar\zeta U$)

$$d\bar\eta_1 d\eta_1\cdots d\bar\eta_n d\eta_n=\sum_{i_1,\cdots,i_n}\sum_{j_1,\cdots,j_n}U_{i_1,1}U^\dagger_{1,j_1}d\bar\zeta_{i_1}d\zeta_{j_1}\cdots U_{i_n,n}U^\dagger_{n,j_n}d\bar\zeta_{i_n}d\zeta_{j_n}$$

$$=\sum_{P,Q}U_{1,P(1)}U^\dagger_{Q(1),1}\cdots U_{n,P(n)}U^\dagger_{Q(n),n}(-1)^P(-1)^Q d\bar\zeta_1 d\zeta_1\cdots d\bar\zeta_n d\zeta_n=\det{}_nU\det{}_nU^\dagger d\bar\zeta_1 d\zeta_1\cdots d\bar\zeta_n d\zeta_n$$

特に U がユニタリなら $\prod_j d\bar\eta_j d\eta_j=\prod_j d\bar\zeta_j d\zeta_j$。ここで $A=U^\dagger\mathrm{diag}\,(d_1,\cdots,d_n)U$, U: ユニタリーとすると、$-\bar\eta A\eta+\bar\eta\xi+\bar\xi\eta=\sum_i -a_i\bar\zeta_i\zeta_i+\bar\zeta_i(U\xi)_i+\overline{(U\xi)}_i\zeta_i=\sum_i -a_i(\bar\zeta_i-\frac{1}{a_i}\overline{(U\xi)}_i)(\zeta_i-\frac{1}{a_i}(U\xi)_i)+\overline{(U\xi)}_i\frac{1}{a_i}(U\xi)_i$ さらに $\int d\bar\eta d\eta e^{-a\overline{(\eta+C\xi)}(\eta+C\xi)}=\int d\overline{(\zeta-C\xi)}d(\zeta-C\xi)e^{-a\bar\zeta\zeta}=\int d\bar\zeta d\zeta(1-a\bar\zeta\zeta)=a$ よって $\int\prod_j d\bar\eta_j d\eta_j e^{-\bar\eta A\eta+\bar\eta\xi+\bar\xi\eta}=e^{\bar\xi A^{-1}\xi}\prod_i a_i$

[21] $|\eta\rangle=|0\rangle+|1\rangle\eta$, $\langle\eta|=\langle 0|+\bar\eta\langle 1|$, より $\langle\eta|\eta\rangle=1+\bar\eta\eta=e^{\bar\eta\eta}$

[22] $e^{-\bar\eta\eta}|\eta\rangle\langle\eta|=(1-\bar\eta\eta)\{|0\rangle\langle 0|+\eta\bar\eta|1\rangle\langle 1|+(\cdots)\eta+(\cdots)\bar\eta\}=\eta\bar\eta\{|0\rangle\langle 0|+|1\rangle\langle 1|\}+\cdots$

[23] 左辺 $=(\langle 0|+\bar\eta\langle 1|)(F_{00}+F_{10}c^\dagger+F_{01}c+F_{11}c^\dagger c)|(|0\rangle+|1\rangle\xi)=F_{00}+\bar\eta F_{00}\xi+\bar\eta F_{10}+F_{01}\xi+\bar\eta F_{11}\xi=F(\bar\eta,\xi)+\bar\eta\xi F_{00}$

2.5 分配関数の経路積分表示

まず空間 1 自由度の場合にフェルミオンのトレースに関して次のようにグラスマン数を用いて積分表示できる。

$$\mathrm{Tr}\ \hat{F} = \langle 0|\hat{F}|0\rangle + \langle 1|\hat{F}|1\rangle = \int d\bar{\eta}_L d\eta_L\, e^{-\bar{\eta}_L\eta_L}\langle \eta_L|\hat{F}|\eta_0\rangle$$

ただし ℓ 方向の周期性 $\eta_L = -\eta_0$ を課した。[24] この式を多変数に拡張し、完全系を多数挿入することにより分配関数は次のように書ける。[25]

$$\begin{aligned}\Xi &= \int D\{\sigma(\tau)\}\mathrm{Tr}\ T\exp\left[-\int_0^\beta d\tau \boldsymbol{c}^\dagger \boldsymbol{H}(\tau)\boldsymbol{c}\right]\\ &= \int D\{\sigma(\tau)\}\int D\{\bar{\eta}(\tau)\eta(\tau)\}\ \exp\left[-\int_0^\beta d\tau \bar{\boldsymbol{\eta}}(\tau)[\boldsymbol{I}_N\frac{\partial}{\partial\tau}+\boldsymbol{H}(\tau)]\boldsymbol{\eta}(\tau)\right]\end{aligned}$$

これをフェルミ粒子系の分配関数の経路積分表示という。[26]

更に離散化された形で前の節と比べて[27]

$$\begin{aligned}\mathcal{O}_F &= \boldsymbol{I}_N\frac{\partial}{\partial\tau}+\boldsymbol{H}(\tau)\\ \Xi &= \int D\{\sigma(\tau)\}\int D\{\bar{\eta}(\tau)\eta(\tau)\}\exp\left[-\bar{\boldsymbol{\eta}}\mathcal{O}_F\boldsymbol{\eta}\right],\quad \boldsymbol{\eta} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{\eta}(\tau_1)\\ \boldsymbol{\eta}(\tau_2)\\ \vdots\\ \boldsymbol{\eta}(\tau_L)\end{pmatrix}\\ &= \int D\{\sigma(\tau)\}\,\mathrm{det}_{NL}\,\mathcal{O}_F\end{aligned}$$

[24] 右辺 $= \int d\bar{\eta}_L d\eta_L\,(1+\eta_L\bar{\eta}_L)(\langle 0| + \bar{\eta}_L\langle 1|)\hat{F}(|0\rangle - |1\rangle\eta_L) =$ 左辺

[25]

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\ Te^{-\int_0^\beta d\tau c^\dagger \boldsymbol{H}(\tau)c} &= \int\prod_{\ell=1,L} d\bar{\eta}_\ell d\eta_\ell\ e^{-\bar{\eta}_L\eta_L}e^{-\bar{\eta}_{L-1}\eta_{L-1}}\cdots e^{-\bar{\eta}_1\eta_1}\\ &\quad\times\langle\eta_L|e^{-\Delta\tau c^\dagger H(\tau_L)c}|\eta_{L-1}\rangle\langle\eta_{L-1}|e^{-\Delta\tau c^\dagger H(\tau_{L-1})c}|\eta_{L-2}\rangle\cdots\langle\eta_1|e^{-\Delta\tau c^\dagger H(\tau_1)c}|\eta_0\rangle\\ &= \int\prod_{\ell=1,L} d\bar{\eta}_\ell d\eta_\ell\ e^{-\sum_{\ell=1}^L\bar{\eta}_\ell\eta_\ell}e^{\sum_{\ell=1}^L\bar{\eta}_\ell\eta_{\ell-1}}\\ &\quad\times e^{-\Delta\tau\bar{\eta}_L H(\tau_L)\eta_{L-1}}e^{-\Delta\tau\bar{\eta}_{L-1}H(\tau_{L-1})\eta_{L-2}}\cdots e^{-\Delta\tau\bar{\eta}_1 H(\tau_1)\eta_0}\\ &= \int\prod_{\ell=1,L} d\bar{\eta}_\ell d\eta_\ell\ e^{-\Delta\tau\sum_{\ell=1}^L\left[\bar{\eta}_\ell\frac{\eta_\ell-\eta_{\ell-1}}{\Delta\tau}+\bar{\eta}_\ell H(\tau_\ell)\eta_{\ell-1}\right]}\end{aligned}$$

[26] 必ずしもハバード・ストラトノビッチ変換をしなくても同様の表示は求められる

[27]

$$\begin{aligned}-\Delta\tau\sum_{\ell=1}^L\left[\bar{\boldsymbol{\eta}}_\ell\frac{\boldsymbol{\eta}_\ell-\boldsymbol{\eta}_{\ell-1}}{\Delta\tau}+\bar{\boldsymbol{\eta}}_\ell\boldsymbol{H}(\tau_\ell)\boldsymbol{\eta}_{\ell-1}\right] &= -\sum_{\ell=1}^L\left[\bar{\boldsymbol{\eta}}_\ell\boldsymbol{\eta}_\ell-\bar{\boldsymbol{\eta}}_\ell\Big(\boldsymbol{I}_N-\Delta\tau\boldsymbol{H}(\tau)\Big)\boldsymbol{\eta}_{\ell-1}\right]\\ \approx -\sum_{\ell=1}^L\left[\bar{\boldsymbol{\eta}}_\ell\boldsymbol{I}_N\boldsymbol{\eta}_\ell-\bar{\boldsymbol{\eta}}_\ell e^{-\Delta\tau\boldsymbol{H}(\tau_\ell)}\boldsymbol{\eta}_{\ell-1}\right] &= -\bar{\boldsymbol{\eta}}\mathcal{O}_F\boldsymbol{\eta}\end{aligned}$$

2.6 相関関数

物理量の計算は相関関数に帰着するから相関関数を議論しよう。ここでは特に基本的量としていわゆるグリーン関数

$$G_{ij}(\tau_1,\tau_2)=\frac{1}{\Xi}\mathrm{Tr}\ e^{-(\beta-\tau_1)H}c_i e^{-(\tau_1-\tau_2)H}c_j^\dagger e^{-\tau_2 H},\ \ (\tau_1\geq\tau_2)$$

について議論する。そのために $\bar{\boldsymbol{\xi}}(\tau)$, $\boldsymbol{\xi}(\tau)$ を独立なグラスマン変数として生成母関数を次の式で定義する。

$$\begin{aligned}
\tilde{\Xi}[\{\bar{\boldsymbol{\xi}}(\tau)\},\{\boldsymbol{\xi}(\tau)\}] &= \int D\{\sigma(\tau)\}\mathrm{Tr}\ T\exp\left[-\int_0^\beta d\tau\boldsymbol{c}^\dagger\boldsymbol{H}(\tau)\boldsymbol{c}+\bar{\boldsymbol{\xi}}(\tau)\boldsymbol{c}+\boldsymbol{c}^\dagger\boldsymbol{\xi}(\tau-0)\right]\\
&= \int D\{\sigma(\tau)\}\int D\{\bar{\eta}(\tau)\eta(\tau)\}\\
&\quad \exp\left[-\int_0^\beta d\tau\bar{\boldsymbol{\eta}}(\tau)[\boldsymbol{I}_N\frac{\partial}{\partial\tau}+\boldsymbol{H}(\tau)]\boldsymbol{\eta}(\tau)+\bar{\boldsymbol{\xi}}(\tau)\boldsymbol{\eta}(\tau)+\bar{\boldsymbol{\eta}}(\tau)\boldsymbol{\xi}(\tau)\right]\\
&= \int D\{\sigma(\tau)\}\mathrm{det}_{LN}\mathcal{O}_F\exp\left[\int_0^\beta d\tau\int_0^\beta d\tau'\bar{\boldsymbol{\xi}}(\tau){\mathcal{O}_F^{-1}}_{\tau,\tau'}\boldsymbol{\xi}(\tau')\right]
\end{aligned}$$

これからグリーン関数は次のように計算できる。[28]

$$\begin{aligned}
G_{ij}(\tau_1,\tau_2) &= -\frac{\partial^2}{\partial\bar{\xi}_i(\tau_1)\partial\xi_j(\tau_2)}\log\tilde{\Xi}[\{\bar{\boldsymbol{\xi}}(\tau)\},\{\boldsymbol{\xi}(\tau)\}]\Big|_{\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{0},\bar{\boldsymbol{\xi}}=\boldsymbol{0}}\\
&= -\frac{1}{\Xi}\frac{\partial^2}{\partial\bar{\xi}_i(\tau_1)\partial\xi_j(\tau_2)}\tilde{\Xi}[\{\bar{\boldsymbol{\xi}}(\tau)\},\{\boldsymbol{\xi}(\tau)\}]\Big|_{\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{0},\bar{\boldsymbol{\xi}}=\boldsymbol{0}}\\
&= \int D\{\sigma(\tau)\}P(\{\sigma(\tau)\})[\mathcal{O}_F^{-1}]_{i,\tau_1;j,\tau_2}\\
P(\{\sigma(\tau)\}) &= \frac{\mathrm{det}_{LN}\mathcal{O}_F}{\int D\{\sigma(\tau)\}\mathrm{det}_{LN}\mathcal{O}_F}\\
(0\leq|P|\leq 1, &\quad \int D\{\sigma(\tau)\}P(\{\sigma(\tau)\})=1)
\end{aligned}$$

[28] $\frac{\partial}{\partial\bar{\xi}_i(\tau_1)}\log\tilde{\Xi}|_{\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{0},\bar{\boldsymbol{\xi}}=\boldsymbol{0}}=0,\ \frac{\partial}{\partial\xi_j(\tau_2)}\log\tilde{\Xi}|_{\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{0},\bar{\boldsymbol{\xi}}=\boldsymbol{0}}=0$ に注意。

3 （量子）モンテカルロ計算

3.1 Importance Sampling

一般には多変数のパラメーター $\sigma \in S$ により配位空間 (S) の点が定まりその点ごとにある物理量の値が $G(\sigma)$ と決まるような状況を考え、重みつきの集団平均 (アンサンブル平均)

$$\langle G\rangle_\sigma = \frac{\sum_\sigma W(\sigma)G(\sigma)}{\sum_\sigma W(\sigma)}$$

を考えよう。

ここでもしすべての配位で $0 \le W(\sigma)$ の場合

$$\begin{aligned}\langle G\rangle_\sigma &= \sum_\sigma P(\sigma)G(\sigma)\\ P(\sigma) &= \frac{W(\sigma)}{\sum_\sigma W(\sigma)}\end{aligned}$$

となり

$$0 \le P(\sigma) \le 1, \quad \sum_\sigma P(\sigma) = 1$$

であるから $P(\sigma)$ を配位 σ の実現確率と解釈できる。

一般に重要となるのは、配位空間 S が非常に大きくかつその分布関数 $P(\sigma)$ が非常に偏った構造をしている場合がおおい。[29] このような時に、ある程度の大きさを持つ有限系において物理量の集団平均を評価することを考えると σ の和をすべてとることは現実的でなく、[30] またランダムに配位空間の点を選んで単純平均しても意味のある結果は得られない。[31]

そこで次のような Importance Sampling と呼ばれる効率的な方法を用いる。ポイントはそこでの時間平均と集団平均が等しくなるような確率過程を作ることにある。

1. 任意の初期状態 σ_i を選ぶ。

2. 状態 σ_i から状態 σ_j に確率 $p(i \to j)$ で状態を遷移する。(つまり遷移確率は一つ前の状態にしかよらない。)

[29] 古典熱力学においては $W(\sigma) = e^{-\beta E(\sigma)}$、$E(\sigma)$ は古典系のエネルギーとなる。よって系がマクロな場合、エネルギーは示量的であるから系の大きさを増やすとともに、その分布は指数関数的にするどいピークを持つものになることが予想される。

[30] 系の大きさとともに配位空間も指数関数的に増大することが多いので

[31] 分布のピークが非常に鋭いのでランダムに選んだ点はほとんど重要な重みを持つ点にあたらず、「はずれて」しまう。

この操作を繰り返すことにより確率過程を構成する。ただし遷移確率 $\{p(i \to j)\}$ は次の 2 つの条件

1. エルゴード性

   任意の 2 状態間を有限のステップで遷移できる。

2. 微細釣り合いの原理

$$P(\sigma_i)p(i \to j) = P(\sigma_j)p(j \to i)$$

を満たすとする。このときこのマルコフ過程を十分なステップ数繰り返すと確率過程において配位 σ_i の現れる確率 $\tilde{P}_\infty(\sigma)$ は一定となり (確率過程は収束し)

$$\begin{aligned} \tilde{P}_\infty(\sigma) &= P_(\sigma) \\ \langle G \rangle_\sigma &= \langle G \rangle_{MC} \, (= \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \sum_{j=n}^{n+T} G(\sigma_j)) \end{aligned}$$

となり、集団平均が仮想的時間ステップにかんする時間平均に等しくなる。

具体的に上記の条件を満たす遷移確率を構成する方法 2 つを紹介する。

1. メトロポリス法

   (a) ランダムに状態 t を選ぶ

   (b) (1) $P(\sigma_t) > P(\sigma_i)$ の場合無条件で $\sigma_j = \sigma_t$ に遷移する。(2) $P(\sigma_t) \leq P(\sigma_i)$ の場合、確率 $r = P(\sigma_t)/P(\sigma_i)$ で $\sigma_j = \sigma_t$ に遷移する。

   (c) 繰り返す。

2. 熱浴法

   (a) ランダムに状態 t を選ぶ

   (b) $r = P(\sigma_t)/P(\sigma_i)$ として確率 $\frac{r}{1+r}$ で $\sigma_j = \sigma_t$ に遷移する。

   (c) 繰り返す。

3.2　負符号の問題

すべての配位で $0 \leq W(\sigma)$ の場合前節の議論がつかえるがフェルミオン系の場合 $W(\sigma) = \det \mathcal{O}_F$ であるから必ずしも正定値の条件が成立しない。そこで集団平均の式を次のように変形する。

$$\langle G \rangle_\sigma = \frac{\sum_\sigma W(\sigma) G(\sigma)}{\sum_\sigma W(\sigma)}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\sum_\sigma \frac{|W(\sigma)|}{\sum_{\sigma'} |W(\sigma')|} \,\mathrm{sgn}W(\sigma)G(\sigma)}{\sum_\sigma \frac{|W(\sigma)|}{\sum_{\sigma'} |W(\sigma')|} \,\mathrm{sgn}W(\sigma)} \\
&= \frac{\sum_\sigma \bar{P}(\sigma)\,\mathrm{sgn}W(\sigma)G(\sigma)}{\sum_\sigma \bar{P}(\sigma)\,\mathrm{sgn}W(\sigma)} \\
&= \frac{\langle \mathrm{sgn}W(\sigma)G(\sigma)\rangle_{\bar{P}}}{\langle \mathrm{sgn}W(\sigma)\rangle_{\bar{P}}} \\
\bar{P}(\sigma) &= \frac{|W(\sigma)|}{\sum_\sigma |W(\sigma)|}
\end{aligned}
$$

この式で分母、分子をそれぞれ importance sampling することを考える。

$$0 \le \bar{P}(\sigma) \le 1, \quad \sum_\sigma \bar{P}(\sigma) = 1$$

であるから $P(\sigma)$ を配位 σ の実現確率と解釈できるのである。つまり

$$\langle G\rangle_\sigma = \frac{\langle \mathrm{sgn}W(\sigma)G(\sigma)\rangle_{MC}}{\langle \mathrm{sgn}W(\sigma)\rangle_{MC}}$$

ただし符号の平均 $\langle \mathrm{sgn}W(\sigma)\rangle_{MC}$ が非常に小さくなる場合小さな数同士の比から有限の値を導くことになり誤差が非常に大きくなる。これがいわゆる負符号の問題である。