量子系のフラクタル経路積分法と量子コヒーレンス

東大・理　　鈴 木 増 雄

§1．はじめに

量子多体系の研究の新しい方法として，「フラクタル経路積分法」を提唱したい．[1,2]
これは，非可換な任意の演算子 A，B に対して，その指数演算子 $\exp[x(A+B)]$ が

$$\exp[x(A+B)] = f_m(A,\ B) + O(x^{m+1}), \tag{1.1}$$

但し

$$f_m(A,\ B) = e^{t_1A}e^{t_2B}e^{t_3A}e^{t_4B}\cdots e^{t_MA} \tag{1.2}$$

の形に，任意の正の整数 m に対して分解できるという一般分解定理の発見[1,2]に基づく．但し，t_j は x に比例した実数であり，M は，m と共に大きくなる正の整数である．この分割は，t_j として負の値も含むフラクタルな構造をしている．負の時間や負の温度を含む点で，概念的にも極めて興味深く，量子モンテカルロ法などの物性分野だけでなく，素粒子や原子核の分野にも使えるものと期待される．

上の分解公式(1.1)と(1.2)は，次の一般化されたトロッター公式[3-6]

$$\exp[x(A+B)] = \left[f_m\left(\frac{A}{n},\ \frac{B}{n}\right)\right]^n + O\left(\frac{x^{m+1}}{n^m}\right) \tag{1.3}$$

として利用すると，量子多体系を研究するのに極めて便利である．

§2．漸化式を用いた分解理論と対称性

(1.1)の左辺を x に関して展開して，両辺を比較して $\{t_j\}$ を決めるのは，m が少し大きくなるとたちまち困難になってしまう．ここでは，次のような極めて便利な漸化法を提唱する．

定理1（構成定理）：指数演算子

$\exp[x(A_1+A_2+\cdots+A_q)]$ に対して，$(m-1)$ 次近似 $Q_{m-1}(x)$ を考える：

$$\exp(x\sum_{j=1}^{q}A_j) = Q_{m-1}(x) + O(x^m). \tag{2.1}$$

このとき，m 次近似（の一つ）を次のように作ることができる：任意の $r(\geqq 2)$ に対して，

$$Q_m(x) = \prod_{j=1}^{r} Q_{m-1}(p_{m,j}x), \tag{2.2}$$

という積を作り，パラメータ $\{p_{m,j}\}$ を次の方程式の解として決める：

$$\sum_{j=1}^{r} p_{m,j}{}^{m} = 0 \qquad \text{with} \quad \sum_{j=1}^{r} p_{m,j} = 1 \tag{2.3}$$

証明については，文献1)，2)を参照して頂きたい．証明の要点を一つだけ述べるならば，それは次の恒等式に着目することである．

$$\exp(x\sum_{k=1}^{q} A_k) = \prod_{j=1}^{r} \exp(p_{m,j}x\sum_{k=1}^{q} A_k). \tag{2.4}$$

次に，奇数次の分解 $Q_{2m-1}(x)$ が求まったとき，偶数次の分解 $Q_{2m}(x)$ を求める定理[1,2]をあげる．

定理 2 （対称性の定理）：今，演算子 $F(x)$ が次の意味で

$$F(x)F(-x) = 1 \quad ; \quad F(0) = 1 \tag{2.5}$$

対称的であるとき，この演算子 $F(x)$ の $(2m-1)$ 次近似（の一つ）$G_{2m-1}(x)$ が対称的，すなわち，

$$G_{2m-1}(x)G_{2m-1}(-x) = 1 \tag{2.6}$$

ならば，実は，$G_{2m-1}(x)$ は，$2m$ 次まで正しい．すなわち，

$$G_{2m-1}(x) = G_{2m}(x) \tag{2.7}$$

と書ける．

この証明も，文献1)～3)を参照して頂きたい．

§3．漸化式の方法による実分解

指数演算子 $\exp[x(A+B)]$ のもっとも簡単な分解は，よく知られているように，

$$f_1(A,\ B) = e^{xA}e^{xB} \tag{3.1}$$

で与えられる．その次に便利な分解として知られているのは，次の対称な分解である：

$$S(x) = e^{\frac{x}{2}A}e^{xB}e^{\frac{x}{2}A}, \tag{3.2}$$

すなわち，

$$e^{x(A+B)} = S(x) + O(x^3). \tag{3.3}$$

さて，これから，定理 1 を応用して高次の分解を顕わに求めてみよう．後でわかるように，$r=2$ では，実数係数 $\{t_j\}$ の分解は作れないので，$r=3$ の場合について実数分解の作り方を説明する．次の恒等式

$$e^{x(A+B)} = e^{sx(A+B)}e^{(1-2s)x(A+B)}e^{sx(A+B)} \tag{3.4}$$

から出発する．これに対応して，3 次の分解

$$S_3(x) = S(sx)S((1-2s)x)S(sx), \tag{3.5}$$

を考える．パラメータ s は，定理1の条件(2.3)より，

$$2s^3+(1-2s)^3=0, \tag{3.6}$$

で与えられる．すなわち，この実数解は，

$$s=\frac{1}{2-\sqrt[3]{2}}=1.3512\cdots. \tag{3.7}$$

となる．こうして，もっとも簡単な3次の実分解

$$S_3(x)=\mathrm{e}^{\frac{s}{2}xA}\mathrm{e}^{sxB}\mathrm{e}^{\frac{1-s}{2}xA}\mathrm{e}^{(1-2s)xB}\mathrm{e}^{\frac{1-s}{2}xA}\mathrm{e}^{sxB}\mathrm{e}^{\frac{s}{2}xA} \tag{3.8}$$

が求まる．これは明らかに，次の対称性をもっている：

$$S_3(x)S_3(-x)=1. \tag{3.9}$$

したがって定理2より，$S_3(x)$ は4次まで正しいことがわかり，

$$S_4(x)=S_3(x) \tag{3.10}$$

となる．同様にして，$(2m-3)$ 次の対称な分解 $S_{2m-3}(x)$ がわかったとすると，これは $(2m-2)$ 次まで正しいから，定理1と2により，$(2m-1)$ 次と $2m$ 次の分解が同時に，

$$\begin{aligned}S_{2m-1}(x)&=S_{2m}(x)\\&=S_{2m-3}(k_m x)S_{2m-3}((1-2k_m)x)S_{2m-3}(k_m x),\end{aligned} \tag{3.11}$$

によって与えられる[1),2)]．但し，

$$k_m=(2-2^{1/(2m-1)})^{-1}. \tag{3.12}$$

しかし，上記の展開は，$m\to\infty$ で収束しない．何故なら，$k_m>1$ であるからである．そこで，次に，もっと実用的な収束する実分解 $(|t_m|<1)$ を求めてみよう．

指数演算子も，一般的に $\exp[x(A_1+A_2+\cdots+A_q)]$ を考えてみよう．さて，次のような $2m$ 次の対称分解 $S_{2m}{}^*$ を考える[1,2)]：

$$\begin{aligned}F(x)&\equiv\exp[x(A_1+A_2+\cdots+A_q)]\\&=S_{2m}{}^*(x)+O(x^{2m+1}).\end{aligned} \tag{3.13}$$

すなわち，

$$S_{2m}{}^*(x)=S_{2m-1}{}^*(x)=[S_{2m-3}{}^*(p_m x)]^2S_{2m-3}{}^*((1-4p_m)x)[S_{2m-3}{}^*(p_m x)]^2. \tag{3.14}$$

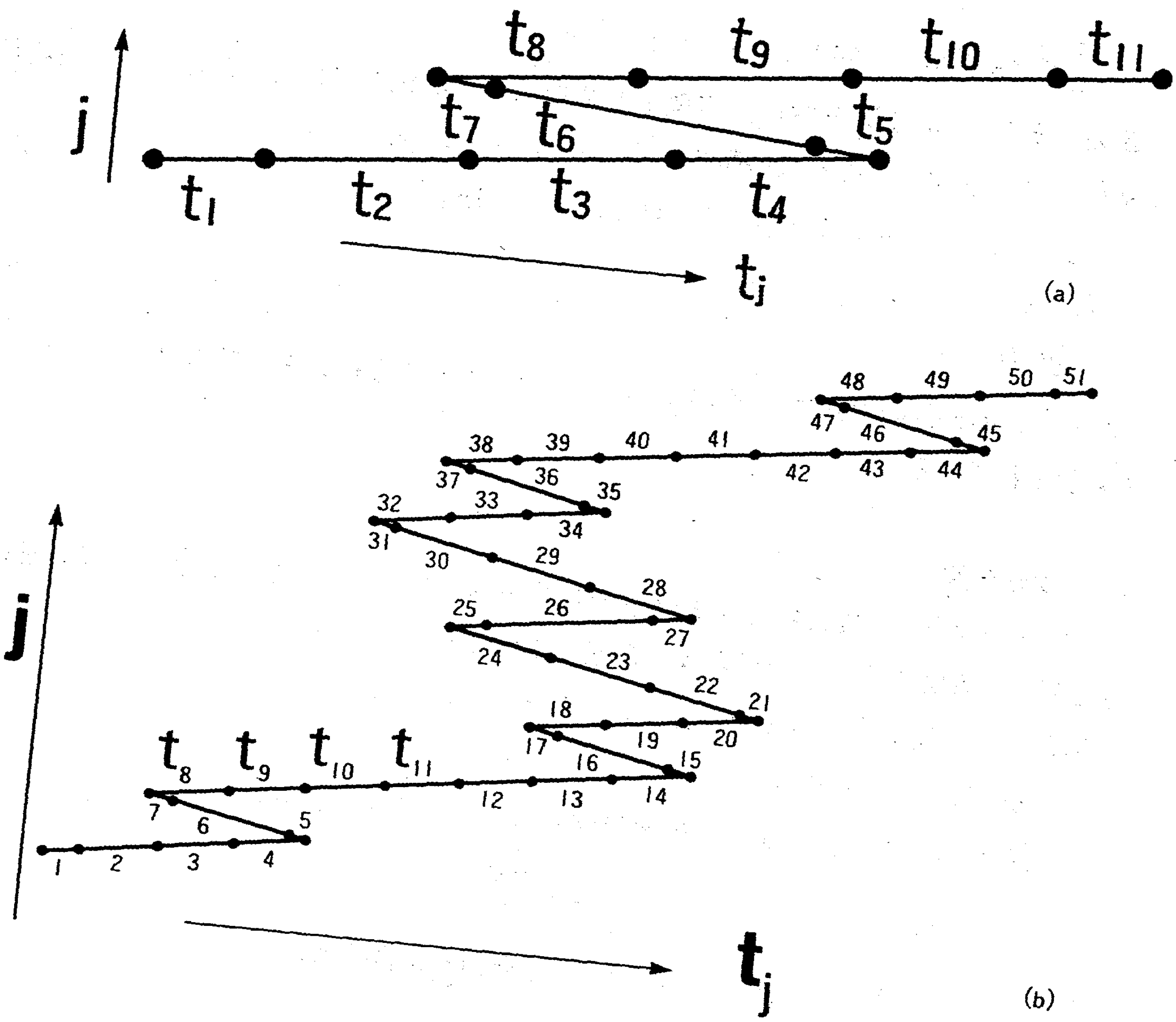
1次の分解 $S_1{}^*(x)$ は次式 $S(x)$ で与えられる：

$$S_1{}^*(x)=S(x)\equiv\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_1}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_2}\cdots\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_{q-1}}\mathrm{e}^{xA_q}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_{q-1}}\cdots\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_2}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_1}. \tag{3.15}$$

これは，対称的な分解であるから，同時に2次まで正しい．したがって $S_2{}^*(x)=S_1{}^*(x)$ である．さて，(3.14)式の p_m は，

$$4p_m{}^{2m-1}+(1-4p_m)^{2m-1}=0, \qquad \text{i.e.,}\ \ p_m=(4-4^{\frac{1}{2m-1}})^{-1} \tag{3.16}$$

で与えられる．$m\geqq2$ では，p_m は



第1図．フラクタル分解：

(a) $S_3{}^*(x)=S_4{}^*(x)$; $t_1=t_{11}=\dfrac{1}{2}p_2$,　$t_5=t_7=\dfrac{1}{2}(1-3p_2)$,　$t_6=1-4p_2$，他は p_2.

(b) $S_5{}^*(x)=S_6{}^*(x)$;

$$t_1=t_{51}=\frac{1}{2}p_2p_3,\quad t_5=t_7=t_{15}=t_{17}=t_{35}=t_{37}=t_{45}=t_{47}=\frac{1}{2}(1-3p_2)p_3$$

$$t_6=t_{16}=t_{36}=t_{46}=(1-4p_2)p_3,\quad t_{21}=t_{31}=\frac{1}{2}p_2(1-3p_3),$$

$$t_{22}=t_{23}=t_{24}=t_{28}=t_{29}=t_{30}=p_2(1-4p_3),$$

$$t_{25}=t_{27}=\frac{1}{2}(1-3p_2)(1-4p_3),\quad t_{26}=(1-4p_2)(1-4p_3),$$

他は p_2p_3，但し，$p_2=0.4144907717943757\cdots$，および $p_3=0.3730658277332728\cdots$，である．図の t_j はすべて x を単位にしたものである．$m\to\infty$ でのフラクタル次元 D は $D=\log5/\log3=1.46\cdots$ となる。

$$\frac{1}{3} < p_m < \frac{1}{2} \quad \text{and} \quad |1-4p_m| < \frac{2}{3} \tag{3.17}$$

の範囲にある．$2m$ 次の分解は，定理1と2を用いて漸化的に与えられるから，最終的に，分解(1,2)の $\{t_j\}$ は，次の変数の積で与えられることになる：

$$p_2,\ p_3,\ \cdots,\ p_m,\ 1-4p_2,\ 1-4p_3,\ \cdots,\ 1-4p_m. \tag{3.18}$$

したがって

$$\lim_{m\to\infty} t_j = 0 \tag{3.19}$$

となる．この分割の間隔は，第1図のようにフラクタルな構造をしており，しかも，負の値も含まれている．

§4．複素分解

パラメータ $\{t_j\}$ が複素数となる分解を複素分解と呼ぶ[1,2]．ここでは，複素分解の求め方を簡単に説明する．この場合は，定理1だけで充分である。

例えば，定理1で $r=2$ の場合を考えると，3次の分解は，

$$Q_3^{(2)}(x) = S(ax)S(\bar{a}x) \tag{4.1}$$

で与えられる．但し，$\bar{a}$ は a の複素共役である．パラメータ a は

$$3a^2-3a+1=0, \qquad \text{i.e.,}\ a=\frac{3\pm\sqrt{3}\,i}{6} \tag{4.2}$$

によって与えられる．したがって，$Q_3^{(2)}(x)$ を顕わに書くと，

$$Q_3^{(2)}(x) = e^{\frac{a}{2}xA}e^{axB}e^{\frac{1}{2}xA}e^{\bar{a}xB}e^{\frac{1}{2}\bar{a}xA} \tag{4.3}$$

となる[1,2,7]．

一般に，m 次分解は，定理1により，次の漸化式によって与えられる：

$$Q_m^{(2)}(x) = Q_{m-1}^{(2)}(p_m x)Q_{m-1}^{(2)}((1-p_m)x). \tag{4.4}$$

但し，p_m は，次式によって与えられる：

$$p_m{}^m+(1-p_m)^m=0, \qquad \text{i.e.,}\ p_m=\left(1+\exp\left(\frac{i\pi}{m}\right)\right)^{-1}. \tag{4.5}$$

明らかに，$m \geqq 2$ に対して

$$\frac{1}{2} < |p_m| < 1 \tag{4.6}$$

となり，また

$$\lim_{m\to\infty} p_m = \frac{1}{2} \tag{4.7}$$

である．

このようにして，複素分解は，実分解に比べてもっと容易に求められる．他の形の分解

がいくらでも求められる.

§5．正の実分解の非存在定理

今までは，発見法的に，うまい漸化法の考えを用いて，実分解や複素分解を求めてきたが，もっとうまく工夫すれば，すべて正のパラメータ $\{t_j\}$ だけで，３次以上の分解も可能になるのではないかという疑問がわいてくる．これに対する解答が次の定理である[2].

定理３（正実分解非存在定理）：すべて正のパラメータ $\{t_j\}$ だけを用いて，$m \geqq 3$ に対して

$$e^{x(A+B)} = e^{t_1A}e^{t_2B}e^{t_3A}e^{t_4B}\cdots e^{t_MA} + O(x^{m+1}) \tag{5.1}$$

と分解することは，一般の非可換な演算子 A, B に対しては，どのような正の整数（有限）M を用いても不可能である.

この定理から，ただちに，一般に，

$$\exp(x\sum_{j=1}^{q}A_j) = e^{t_{11}A_1}e^{t_{12}A_2}\cdots e^{t_{1q}A_q}\cdots + O(x^{m+1}), \tag{5.2}$$

と分解すると，$m \geqq 3$ に対しては，必ず，負の t_{ij} が現れることになる.

§6．フラクタル温度量子モンテカルロ法[2]

状態和

$$Z = \mathrm{Tr}\exp(-\beta\mathscr{H}) \quad ; \quad \mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + V. \tag{6.1}$$

は，今回のフラクタル分解を用いると

$$Z = \lim_{n\to\infty}[S_m{}^*(-\frac{\beta}{n})]^n, \tag{6.2}$$

と表わせる．これを適当な基底を用いて表わすと，d 次元量子系は $(d+1)$ 次元古典系に変換（ST 変換）される．[8]したがって，古典的なモンテカルロ法が，量子系にも使えるようになる．[6,9]

次に，この新しいフラクタル分解と，今までの等間隔の分解との優劣を議論しよう.

通常の分割

$$Z_2 = \mathrm{Tr}[e^{-\frac{\beta}{2n_0}\mathscr{H}_0}e^{-\frac{\beta}{n_0}V}e^{-\frac{\beta}{2n_0}\mathscr{H}_0}]^{n_0} \tag{6.3}$$

のトロッター方向[6,9,10,11]の，ボルツマン因子 e^{t_iA} および e^{t_jB} の積の数 $(2n_0+1)$ と，新しいフラクタル分解の対応する数 $(2\times5^{m-1}+1)n$ とを一致させておいて，どちらが精度がよいかを比較すると，

$$\left(\frac{5\beta}{n}\right)^{2m-2} \ll 1 \quad ; \quad \beta = \frac{1}{k_BT} \tag{6.4}$$

の条件の下では新しいフラクタル分割の方が，従来の方法（6.3）より，精度がよくな

る.[2]

もっと詳しく具体的な研究については，近く発表される文献[12]を参照して頂きたい.

§7．フラクタル時間モンテカルロ法

(3.14) 式の $S_m^*(x)$ を用いて，次の行列要素

$$\langle a|e^{it\mathscr{H}/\hbar}|b\rangle = \lim_{n\to\infty}\langle a|\left[S_m^*\left(\frac{it}{n\hbar}\right)\right]^n|b\rangle \tag{7.1}$$

を求めることが出来る．これは，フラクタル時間を用いて経路積分法になる．化学反応や核反応の問題を扱うときに有効であると期待される．通常のファインマン経路積分法[13]と比較して，どのように効率が良いかは，今後の検討に待ちたい．

§8．フラクタル分解法とソレラの方法との組み合わせ

最近，フェルミ系の量子モンテカルロ法の「負符号問題」を緩和する一つの試みとして，ソレラの方法がよく使われている．[14)-18)] 彼の方法は，従来のST変換 (6.3) を用いて，負符号のため行列要素が大きくなり過ぎる前に基底をとり直して直交化し，行列要素の“爆発”を防ぐ方法である．したがって，新しいフラクタル分解でST変換してソレラの直交化を行えば，もっと低温まで有効な方法となるものと期待される．この方向の研究もすでに始っている．

§9．結び

指数演算子の新しい分解公式を中心に，その応用の仕方について簡単に説明した．分解パラメータ（時間や温度）が負になることの物理的解釈・その意味等については別に詳しく議論したい．いずれにしても，ここに紹介した新しいフラクタル経路積分法が，いろいろな量子系の研究に今後大いに役立つことを期待している．例えば，高温超伝導のメカニズムの研究では，何らかの量子コヒーレンスがそのカギを握っているものと思われるが，こうした研究では，二つの演算子の非可換性が極めて重要であり，したがって上に説明したフラクタル分解は有用な働きをするであろう．

参 考 文 献

1) M. Suzuki, Phys. Lett. A. (1990) in press.
2) M. Suzuki, J. Math. Phys. (submitted).
3) M. Suzuki, J. Math. Phys. **26** (1985) 601.
4) M. Suzuki, Phys. Lett. **113A** (1985) 299.
5) M. Suzuki, J. Stat. Phys. **43** (1986) 883 and references cited therein.
6) M. Suzuki, in *Quantum Monte Carlo in Equilibrium and Nonequilibrium Systems,* ed. by M. Suzuki, Springer-Verlag (1987), and references cited therein.

7) A. D. Bandrauk, 私信.
8) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1454.
9) M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, Prog. Theor. Phys. **58** (1977) 1377.
10) H. F. Trotter, Proc. Am. Math. Phys. **10** (1959) 545.
11) M. Suzuki, Commun. Math. Phys. **51** (1976) 183.
12) N. Hatano and M. Suzuki, 準備中.
13) R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill Book Co. New York, 1965).
14) S. Sorella, E. Tosatti, S. Baroni, R. Car, and M. Parrinello, Inter. J. of Modern Phys. **B2** (1988) 993.
15) S. Sorella, S. Baroni, R. Car and M. Parrinello, Europhys. Lett. **8** (1989) 663.
16) S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis and R. T. Scaletter, Phys. Rev. **B40** (1989) 506.
17) M. Imada and Y. Hatsugai, Phys. Rev. **B40** (1989) 506.
18) K. Kuroki, Master Thesis, 1990.