

シリーズ

「物性研究者のための計算手法入門」

経路積分による ^4He のボーズ凝縮*

福井大工 高木 丈夫

(2000年12月11日受理)

1 序

量子力学で多体問題の計算をする必要にせまられたとします。うまい近似計算が可能ならばよいのですが、そうも行かない事が多分にあります。そのときのひとつの選択肢として、経路積分モンテカルロ法があげられます。もちろん技法としては乱数による数値計算法ですから、結果にパラメータを含ませる事はできませんし、収束も決して速くはありません。おまけに定性的な振舞を理解する事も大変です。しかし、基本的に厳密解を指向し、かつ相互作用の詳細に依存しない方法ですから、統一的な扱いが可能になります。経路積分モンテカルロ法は、基本原理は単純なのですが、実際の数値計算を始めると、いろいろな勘所があることが解ります。ここでは、簡単な経路積分モンテカルロの原理の説明と、一体問題として調和振動子を、さらに多体問題としてはポテンシャルの空間変化が大きく、剛体芯をもつ ^4He 原子のボーズ凝縮を扱うことにします。

2 経路積分の基礎

2.1 Trotter 分割

時間依存する N 粒子系の Shrödinger 方程式が以下のように与えられている。

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad H = H_0 + V \quad (1)$$

ここで H_0 と V は全系の運動エネルギーとポテンシャルエネルギーで

$$H_0 = \sum_{i=0}^N \frac{p_i^2}{2m}, \quad V = \sum_{i \neq j} v(r_{ij}) \quad (2)$$

であり、 $v(r_{ij})$ は i, j 粒子間の 2 体相互作用である。

時刻ゼロの状態 $|\psi(0)\rangle$ を用いて、時刻 t での状態 $|\psi(t)\rangle$ は、時間推進演算子を用いて形式的に以下のように書ける。

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp(-i\frac{H}{\hbar}t) |\psi(0)\rangle \\ &= \left[1 + \left(\frac{Ht}{i\hbar}\right) + \frac{1}{2!} \left(\frac{Ht}{i\hbar}\right)^2 + \cdots \right] |\psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (3)$$

ここで二次以上の展開項において演算子 H_0 と V の交換関係が問題となる。逆にいえば、十分小さい ϵ に対しては、一次の範囲で交換関係が無視できて、

$$|\psi(\epsilon)\rangle \simeq \left[1 + \left(\frac{H\epsilon}{i\hbar}\right) \right] |\psi(0)\rangle \quad (4)$$

* 本稿は、編集部から特にお願いして執筆していただいた記事である。

として良い。交換関係が無視できるなら、量子力学の計算で扱いにくい部分が大幅に減る。時間発展演算子も ε の一次の範囲で、二つの演算子部分を分ける、いわゆる Trotter 分解が可能となる。

$$\begin{aligned}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\varepsilon\right) &= 1 - \frac{i}{\hbar}(H_0 + V)\varepsilon \\ &= \left(1 - \frac{i}{\hbar}H_0\varepsilon\right)\left(1 - \frac{i}{\hbar}V\varepsilon\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0\varepsilon\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}V\varepsilon\right)\end{aligned}\quad (5)$$

このように時間を離散化することで、演算子を c-数のように扱えることが重要な部分である。

Trotter 分解を利用して微小時間 ε の時間発展を見てみよう。簡単のために 1 次元の 1 体問題を扱うことにする。時刻 t_j に座標 $r(t_j)$ に存在して粒子が時刻 $t_{j+1} = t_j + \varepsilon$ に $r(t_{j+1})$ へ伝播する行列要素を考える。

$$\begin{aligned}&\langle r(t_{j+1}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\varepsilon\right) | r(t_j) \rangle \\ &= \langle r(t_{j+1}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0\varepsilon\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}V\varepsilon\right) | r(t_j) \rangle \\ &= \langle r(t_{j+1}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0\varepsilon\right) | r(t_j) \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(t_j)\varepsilon\right)\end{aligned}\quad (6)$$

最後のところで、座標表示においては演算子 V は対角的であることを用いた。残るは自由粒子の伝播関数部分である。運動量表記を中間に用いると

$$\langle r(t_{j+1}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0\varepsilon\right) | r(t_j) \rangle \quad (7)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle r(t_{j+1}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0\varepsilon\right) | p \rangle \langle p | r(t_j) \rangle \quad (8)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(-\frac{i\varepsilon p^2}{2m\hbar}\right) \langle r(t_{j+1}) | p \rangle \langle p | r(t_j) \rangle \quad (9)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{p^2}{2m\varepsilon} + \{r(t_{j+1}) - r(t_j)\}p\right)\right] \quad (10)$$

式 (8) から、式 (9) に移る際に H_0 が p 表現に対して対角的であること、式 (9) に対して

$$\langle r(t_{j+1}) | p \rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}r(t_{j+1})p\right), \quad \langle p | r(t_j) \rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}r(t_j)p\right) \quad (11)$$

を用いた。さらに p に関して平方完成を行い、積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp(-iap^2) = \left(\frac{2\pi}{ia}\right)^{1/2} \quad (12)$$

を利用することで、最終的に自由粒子伝播関数として以下の表式を得る。ただし、ここでは空間次元 d を 3 次元としている。規格化因子の指数は、一般の次元 d に対しては $d/2$ となる。

$$\langle r(t_{j+1}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H_0\varepsilon\right) | r(t_j) \rangle = \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\varepsilon}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{m}{i2\hbar\varepsilon}(r_{j+1} - r_j)^2\right) \quad (13)$$

結局、行列要素から量子力学的演算子を無くした表記として

$$\begin{aligned}
 & \langle \mathbf{r}(t_{j+1}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \varepsilon\right) | \mathbf{r}(t_j) \rangle \\
 &= \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\varepsilon}\right)^{3/2} \exp\left(i \frac{m}{2\hbar\varepsilon} (\mathbf{r}(t_{j+1}) - \mathbf{r}(t_j))^2\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(\mathbf{r}(t_j))\varepsilon\right) \\
 &= \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\varepsilon}\right)^{3/2} \exp\left[i \frac{\varepsilon}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\varepsilon^2} (\mathbf{r}(t_{j+1}) - \mathbf{r}(t_j))^2 - V(\mathbf{r}(t_j)) \right\}\right] \quad (14)
 \end{aligned}$$

が得られる。上式の指数関数の引数にある $\{\}$ 内の式は、離散化時間での Lagrangean の形をしている。また空間座標は、振幅ではなく位相因子にのみ影響を与えることに注意。

さて、2 単位の離散化時間 2ε が経過したときに、初期位置 $\mathbf{r}(t_j)$ にいた粒子が $\mathbf{r}(t_{j+2})$ に伝播する行列要素を計算しよう。この場合は、単位時間が経過したときの粒子位置 (中間状態) $\mathbf{r}(t_{j+1})$ について和を取ればよい。中間状態について可能なすべての場合を考えて、終点にたどり着く状況を考える。

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{r}(t_{j+2}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \cdot 2\varepsilon\right) | \mathbf{r}(t_j) \rangle &= \int d\mathbf{r}(t_{j+1}) \times \\
 &\langle \mathbf{r}(t_{j+2}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \cdot \varepsilon\right) | \mathbf{r}(t_{j+1}) \rangle \langle \mathbf{r}(t_{j+1}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \cdot \varepsilon\right) | \mathbf{r}(t_j) \rangle \quad (15)
 \end{aligned}$$

この考え方は、ホイヘンスの点波源から生成する波の干渉の考え方と同じである。中間状態を経由することによって、複素ベクトルの干渉効果を取り入れることができる。同様に時間 t を M 個に Trotter 分解すると

$$\begin{aligned}
 & \langle \mathbf{r}(t) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) | \mathbf{r}(t_0) \rangle \\
 &= \int d\mathbf{r}(t_1) \int d\mathbf{r}(t_2) \cdots \int d\mathbf{r}(t_{M-1}) \langle \mathbf{r}(t_M) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \varepsilon\right) | \mathbf{r}(t_{M-1}) \rangle \times \\
 &\quad \langle \mathbf{r}(t_{M-1}) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \varepsilon\right) | \mathbf{r}(t_{M-2}) \rangle \cdots \langle \mathbf{r}(t_1) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \varepsilon\right) | \mathbf{r}(t_0) \rangle \\
 &= \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\varepsilon}\right)^{3M/2} \int d\mathbf{r}(t_1) \int d\mathbf{r}(t_2) \cdots \int d\mathbf{r}(t_{M-1}) \times \\
 &\quad \exp\left[i \frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^{M-1} \left\{ \frac{m}{2\varepsilon^2} (\mathbf{r}(t_{j+1}) - \mathbf{r}(t_j))^2 - V(\mathbf{r}(t_j)) \right\}\right] \quad (16)
 \end{aligned}$$

ここで、 $t_M = t$ で時分割スレッド (thread) の幅を $\varepsilon = (t - t_0)/M$ としている。それぞれの伝播行列要素は演算子を含まない (14) で与えられ古典的になっていて、多重積分により可能なすべての粒子経路に付随する位相因子の干渉を計算していることになる。粒子の (時間軸方向の) ひと継りの経路は "世界線" あるいは "ビーズ" などと呼ばれる。 $M \rightarrow \infty$ で式 (16) 最後の部分、exp 指数の部分は作用積分を含み、

$$\frac{i}{\hbar} \int_{\mathbf{r}(t_0)}^{\mathbf{r}(t)} dt' \mathcal{L}[\mathbf{r}(t'), \dot{\mathbf{r}}(t')] = \frac{i}{\hbar} \int_{\mathbf{r}(t_0)}^{\mathbf{r}(t)} dt' \left[\frac{m}{2} \dot{\mathbf{r}}^2(t') - V(\mathbf{r}(t')) \right] \quad (17)$$

となる。被積分関数 (Lagrangean) が経路の変分に対して停留するときに位相の変化も停留し、結果として建設的な干渉が発生する。この停留条件

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}} = 0 \quad (18)$$

が Lagrange の運動方程式になるのはよく知られている。

2.2 虚時間経路積分

ここまで述べたのは量子状態の時間発展を記述した実時間経路積分の方法である。ところで物性論において、系の統計力学的性質を記述するには虚時間経路積分が用いられる。実時間経路積分を虚時間経路積分に変形する手順を以下に述べる。

時間に依存した Schrödinger 方程式と、統計力学分布関数の類似性に着目して、時間 t を虚数時間 $t = -i\hbar\beta$ に置き換える。ここで β は温度 T と $\beta = (k_B T)^{-1}$ の関係にある。また、積分経路は始点と終点を一致させた閉じた経路とする。虚時間方向の Trotter 分割幅 τ は、 $\tau = \beta/M$ としている。これにより式 (16) は以下ようになる。

$$\begin{aligned}
 & \langle \mathbf{r} | \exp(-\beta H) | \mathbf{r} \rangle \\
 &= \int d\mathbf{r}(1) \int d\mathbf{r}(2) \cdots \int d\mathbf{r}(M-1) \langle \mathbf{r}(M) | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}(M-1) \rangle \times \\
 & \quad \langle \mathbf{r}(M-1) | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}(M-2) \rangle \cdots \langle \mathbf{r}(1) | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}(0) \rangle \\
 &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau} \right)^{3M/2} \int d\mathbf{r}(1) \int d\mathbf{r}(2) \cdots \int d\mathbf{r}(M-1) \times \\
 & \quad \exp \left[-\tau \sum_{j=0}^{M-1} \left\{ \frac{m}{2\tau^2} (\mathbf{r}(j+1) - \mathbf{r}(j))^2 + V(\mathbf{r}(j)) \right\} \right] \quad (19)
 \end{aligned}$$

ここで表記を簡略化するために j 番目の離散化虚時間の粒子の実空間座標は、 $\mathbf{r}(\tau_j)$ とすべきところを $\mathbf{r}(j)$ とした。また虚時間軸方向の経路の終点 $\mathbf{r}(M)$ と始点 $\mathbf{r}(0)$ を一致させ、 $\mathbf{r}(M) = \mathbf{r}(0) = \mathbf{r}$ とした。これにより、図 1 に示すように、粒子の世界線は虚時間軸方向に周期的になる。

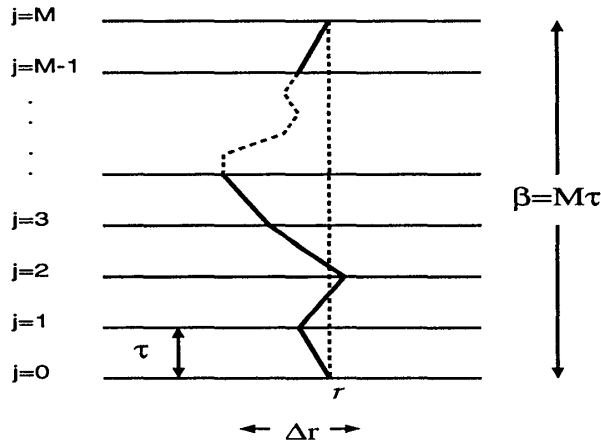


図 1: 世界線は虚時間方向に周期構造をもつ。自由粒子の場合、粒子の世界線の振れ幅は $\Delta r = (\beta/m)^{1/2}$ となる。

式 (19) における一個の行列要素を見てみよう。

$$\begin{aligned}
 & \langle \mathbf{r}(j+1) | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}(j) \rangle \\
 &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau} \right)^{3/2} \exp \left[-\tau \left\{ \frac{m}{2\tau^2} (\mathbf{r}(j+1) - \mathbf{r}(j))^2 + V(\mathbf{r}(j)) \right\} \right] \quad (20)
 \end{aligned}$$

上式右辺を見ると、 $\{\}$ 内が離散化虚時間における Hamiltonian の形をしていることが解る。虚時間に置き換えたことで Lagrangean の運動エネルギー項が符号を変えたためである。さらに Hamiltonian に虚時間スレッド幅の τ が掛かって、指数関数の引数である作用 (action) に負符号が付いたものとなる。上式の $\{\}$ が Hamiltonian の形をしているため、ときとしてこの部分が“エネルギー”と呼ばれることがある。しかし熱力学量としてのエネルギーと紛らわしいため、この部分を τ を含めて「作用」と呼ぶ。後にも出てくるが、経路の振幅が大きい程「作用」は大きく、粒子の「運動エネルギー」は小さくなる。

この行列要素の意味は、指数関数部分が Bortzmann 因子になっていて、温度の逆数 τ のもとでの、粒子の実座標 $\mathbf{r}(j+1)$ および $\mathbf{r}(j)$ の相関と理解される。位相の情報を持つ実時間経路積分の行列要素とは異なり、この行列要素は常に正の実数であり、単純に統計力学的重率を表すことに注意しよう。ポテンシャル項を無視した自由粒子の場合、この行列要素は Gauss 関数型で単位スレッドでの移動距離 $|\mathbf{r}(j+1) - \mathbf{r}(j)|$ に対する標準偏差は $\sqrt{\tau/m}$ である。この量は自由粒子である限り一般の虚時間長に対して成り立ち、粒子のコヒーレンス長 (熱的ドブロイ波長) と呼ばれるものである。このことは、“時間” β ランダムウォークした後の初期位置からのズレが $\sqrt{\beta}$ に比例することから類推可能であろう。また、 τ を実時間とみなした“運動エネルギー”期待値は

$$\left\langle \frac{m(\mathbf{r}(j+1) - \mathbf{r}(j))^2}{2\tau^2} \right\rangle = \frac{3}{2}\tau^{-1} = \frac{3M}{2}k_B T \quad (21)$$

となり、古典的エネルギー分配則に従う。実際に経路積分による計算を行うときは Trotter 公式が成立することが前提であるため、虚時間分割幅 τ は十分に小さく取られている。つまり温度は十分に高く、単位スレッドの移動においては、古典エネルギー分配則が成立することになる。

今度は、(19) 式に戻ってみよう。この式は、温度 T のもとで実空間座標 $\mathbf{r}$ に粒子を発見する相対確率をあらわしている。ただし多重積分で表記されているために、解析的な手法で扱える問題は極めて限られる。そこで、Monte Carlo 法による計算の出番となる。

3 経路積分の Monte Carlo 計算

具体的な問題を扱った方が概念を把握しやすいと思われる。そのためには、まず簡単な一体問題を扱うのがよいであろう。熱力学量の計算方法を解説した後に、1次元調和振動子の Hamiltonian に対して計算をしよう。

3.1 熱力学量の計算

熱力学量の計算は分配関数 Z は、境界条件 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(0) = \mathbf{r}(M)$ のもとで

$$\begin{aligned} Z &= \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | \exp(-\beta H) | \mathbf{r} \rangle \\ &= \int d\mathbf{r}(0) \int d\mathbf{r}(1) \cdots \int d\mathbf{r}(M-1) \langle \mathbf{r}(0) | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}(1) \rangle \cdots \\ &\quad \cdots \langle \mathbf{r}(M-1) | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}(0) \rangle \\ &= \int d\mathbf{r}(0) \int d\mathbf{r}(1) \cdots \int d\mathbf{r}(M-1) \mathcal{W}[\{\mathbf{r}(j)\}] \end{aligned} \quad (22)$$

と与えられる。被積分関数の $\mathcal{W}[\{\mathbf{r}(j)\}]$ は経路に対するボルツマン重率で

$$\mathcal{W}[\{\mathbf{r}(j)\}] = \exp \left[-\tau \sum_{j=0}^{M-1} \left\{ \frac{m}{2\tau^2} (\mathbf{r}(j+1) - \mathbf{r}(j))^2 + V(\mathbf{r}(j)) \right\} \right] \quad (23)$$

と定義される。エネルギー期待値 E は

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \\ &= -\frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial \tau} \ln \left[\left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau} \right)^{3M/2} \int d\mathbf{r}(1) \int d\mathbf{r}(2) \cdots \int d\mathbf{r}(M-1) \mathcal{W}[\{\mathbf{r}(j)\}] \right] \end{aligned} \quad (24)$$

である。

さて、虚時間経路積分の閉ループの行列要素 (19) を見てみると、それぞれのスレッドでの作用を指数関数の肩に乗せたものを統計重率としていることが解る。これより実際の数値計算の際には、統計重率に沿った確率でもって状態を発生させ、それを標本として統計処理をする方法 (重みつきサンプリング法) が用いられる。このことは、世界線の発生の節で詳しく述べる。

式 (24) の計算を行うと、系の実空間次元を d と表記し、 U_1 、 U_2 をそれぞれ運動エネルギー、ポテンシャルエネルギーとして

$$U_1 = \frac{d}{2\tau} - \frac{m}{2M\tau^2\hbar^2} \sum_{j=0}^{M-1} \{\mathbf{r}_i(j+1) - \mathbf{r}_i(j)\}^2 \quad (25)$$

$$U_2 = \frac{1}{M} \sum_{j=0}^{M-1} V(\mathbf{r}_i(j)) \quad (26)$$

となる。系の全エネルギー値 E は、

$$E = \langle U_1 \rangle + \langle U_2 \rangle \quad (27)$$

と与えられる。ここで、 $\langle A \rangle$ は物理量 A のモンテカルロ平均であり、

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int d\mathbf{r}(0) \int d\mathbf{r}(1) \cdots \int d\mathbf{r}(M-1) A \mathcal{W}[\{\mathbf{r}(j)\}] \quad (28)$$

である。式 (25) から、粒子の世界線がまっすぐな場合に最大の運動エネルギー $d/2\tau = (d/2)k_B T$ を与えることが解る。これは古典的エネルギー等分配則であり、世界線の揺らぎは量子論的な波動関数の広がり意味する。この効果により運動エネルギーの低下が起こる。

比熱を求めるには、式 (24) を温度 T で微分して得られる式

$$C = -\beta^2 \frac{\partial E}{\partial \beta} = \beta^2 \left[\langle (U_1 + U_2)^2 \rangle - \frac{\partial U_1}{\partial \beta} \rangle - \langle U_1 + U_2 \rangle^2 \right] \quad (29)$$

を用いる。ここで、 $\partial U_1 / \partial \beta$ の具体的な形は、

$$-\frac{\partial U_1}{\partial \beta} = \frac{2U_1}{\beta} - \frac{dM}{2\beta^2} \quad (30)$$

である。この式は、正準集合におけるエネルギー期待値を微分して得られる、エネルギーに関する揺らぎの公式

$$\frac{C}{k_B} = \frac{d}{dT} \frac{\langle E \rangle}{k_B} = \frac{1}{k_B} \frac{d}{dT} \frac{\sum_i \epsilon_i e^{-\beta \epsilon_i}}{\sum_i e^{-\beta \epsilon_i}} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{(k_B T)^2} \quad (31)$$

の経路積分版である。

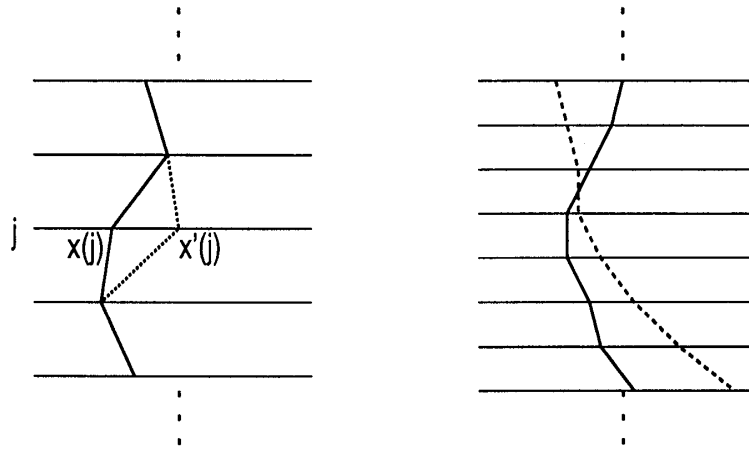


図 2: 実線経路の 1 スレッドを破線に変更を試みる。(左) 局所的経路変更、(右) 大局的経路変更。

3.2 世界線の発生

経路積分の本来の精神は、「可能な全ての状態を発生させてボルツマン因子の重率を計算する。」ということであり、分配関数の定義に他ならない。しかし、当然のことながらこのままでは自由度が大きすぎて計算できるはずもなく、効率的な方法を考えなければならない。たとえ状態密度としては大きくても、ボルツマン因子の小さな状態は熱力学量に寄与するはずがない。このような状態まで数え上げるフラットサンプリング法は、いかにも非効率的である。そこで、実際に実現する状態に着目し、状態密度とボルツマン重率に比例した確率で世界線を発生することを考える。これは、いわゆる重みつきサンプリング法であり、サンプルした経路の統計処理に際しては重みをつけない。こうすることで熱力学量の計算が可能になる。現在の経路を実線として、虚時間座標 j 番目の粒子位置を $r(j)$ から $r'(j)$ に変更を試みる。新しい経路の発生は、 $[-1, 1]$ の範囲に一様に分布する乱数 η を用いて

$$r'(j) = r(j) + \alpha \eta \quad (32)$$

とする。ここで α は経路生成の際の経路の振り幅であり、新経路の受容率が 50%前後になる様に決定する。経路発生率を正準分布に合わせるためには、経路変更の受容を Metropolis アルゴリズムによって決めればよい。つまり、

- 1) 変更部分の経路の作用を、変更前と変更後に対して計算する。
- 2) 変更後の作用が、変更前のそれより小さいなら確率 1 で変更を受け入れる。変更後の作用の方が大きいときは、確率 $e^{-\Delta S}$ で変更を受け入れる。ここに ΔS は、経路変更による作用の変化分で正の量である。

数式で書くなら変更前と後の経路をそれぞれ R, R' とし、おなじく作用を $S_R, S_{R'}$ とする。 R から R' への遷移確率 $P(R \rightarrow R')$ は、

$$P(R \rightarrow R') = \begin{cases} 1 & (S_{R'} < S_R) \\ \exp[-(S_{R'} - S_R)] & (S_{R'} \geq S_R) \end{cases} \quad (33)$$

と与えられる。正準分布を与える経路生成法は Metropolis 法の他に、熱浴法等が上げられるが、実質的に Metropolis 法を知っておくと十分である。以上述べたのは局所的経路変更 (local path change) であり、このような操作をスレッド番号 $j = 0, 1, 2, \dots, M-1$ に対して行う。

局所的な経路変更だけでは、位相空間上の極めて限られた部分の状態のみが発生する事になる。特に虚時間方向に長く伸びた経路 (低温状態) では、重心位置の移動や長波長の揺らぎが抑制されてしまう。そのために、経路全体を一気に変更する大局的経路変更 (global path change) を行う必要がある。大局的な新しい経路の生成方法は、変更前後の経路全体の作用を計算して Metropolis アルゴリズムを用いる限り、基本的にはどのような方法を用いてもよい。しかし、ヤミクモに行っても効率的でないためここでは以下のように行う。

$$\mathbf{r}'(j) = \mathbf{r}(j) + a\eta \cos \left[2\pi k \left(\frac{j}{M} + \phi_0 \right) \right] \quad (34)$$

ここで k は経路全体を振るときの波数で $k = 0, 1, 2, 3$ を乱数により決定する。このとき、あまり大きな波数まで考慮する必要はない。短波長の経路変更は、局所的経路変更にて任せておけばそれでよい。また、 ϕ_0 は初期位相で $[0, 1]$ の間の乱数である。これにより、経路全体は並行移動 ($k = 0$) を含めた長波長の変更を受ける。大局的経路変更で注意すべき点を挙げておく。剛体芯を持つような多粒子系や剛体壁が存在する系を低温で扱うとき、全経路を変更すると (経路が長くなっているため) 変更後の経路のどこかが、剛体芯や剛体壁に触れることが起こる。そうすると、ポテンシャルエネルギーが発散的になり新経路の受容率が低下してしまう。このような状況では、経路を分割して大局的変更を行うか、剛体壁に触れないように経路の折り返しを行うなどの工夫が必要になる。

もう一つだけポテンシャルの与え方について注意を述べておこう。一般的にモンテカルロ計算では、 10^4 から 10^5 程度のモンテカルロステップの集計を行う。このことは、統計的に 10^{-4} から 10^{-5} 程度の、定性的に考える際には無視してしまうような、出現率を持つエネルギー状態も発生しうることを意味する。一般にポテンシャルは、関数の形で与えられるとは限らない。後に述べるように、有効ポテンシャルを用いる場合や、関数形が複雑な場合は数値的に与えられる事も多い。このとき、わずかでも出現が予想される範囲よりも遥かに広い範囲に渡って数表を用意しておくか、統計的に重要な範囲に粒子の運動領域を制限しておく配慮が必要である。計算途中でおかしな結果が出てきたりする場合は、このような単純なミスによる事も多いものである。

3.3 粒子の確率密度

式 (19) により、座標 $\mathbf{r}$ に粒子を発見する相対的確率密度を得る事ができる。ここで、 $\mathbf{r}$ はスレッド番号 0 の粒子の座標を表しているが、世界線は虚時間方向に周期構造を持っているため、ループ状の世界線において座標 $\mathbf{r}$ のみを特別あつかいする理由はない。世界線の各点は粒子の確率密度に対して全て同等の寄与をしている。これより、温度 T のもとでメトロポリスアルゴリズムで経路を発生して、経路の座標点を全て集計することで、その温度での粒子の確率密度分布を得る事ができる。この手法で、系の基底エネルギー E_0 と第一励起エネルギー E_1 に対して、温度 T が $E_1 - E_0 \gg k_B T$ を満たす場合、基底状態の粒子確率密度を計算する事ができる。

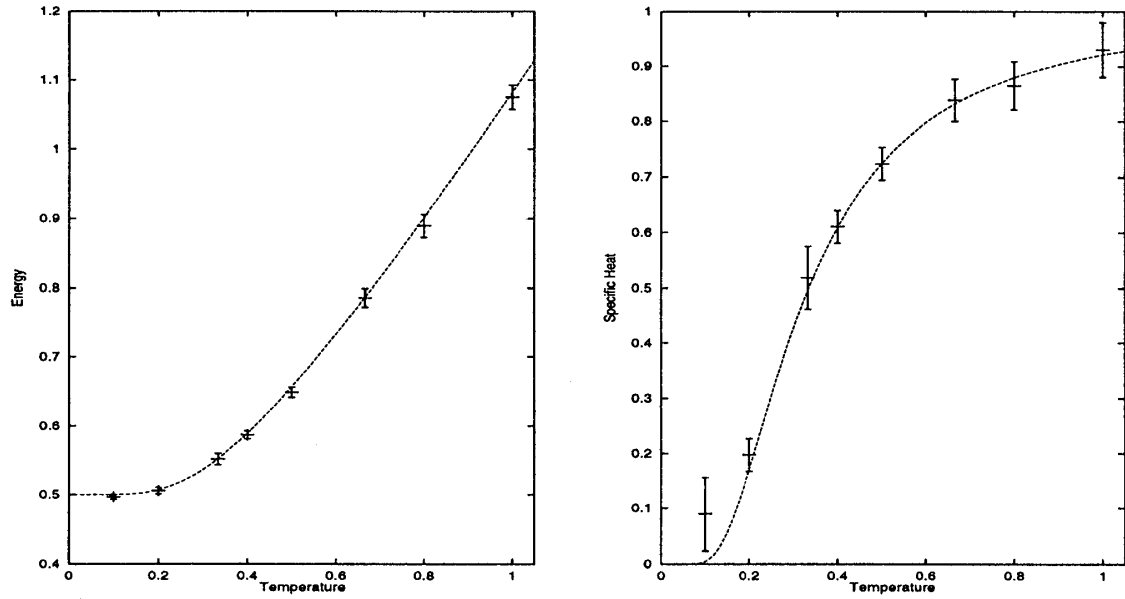


図 3: 経路積分モンテカルロで計算した調和振動子のエネルギーと比熱。
エラーバーは標準偏差を示す。破線は理論値。

3.4 調和振動子のエネルギーと比熱および存在確率密度の計算結果

$\hbar = k_B = m = 1$ とした単位系での調和振動子ハミルトニアン

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} + \frac{1}{2} x^2 \quad (35)$$

に対して、各温度での熱力学量を経路積分モンテカルロで計算した結果を、図 3 に示す。計算の際、熱化ステップを 5000MCS 行ったのち統計処理を 1×10^5 行い熱力学量であるエネルギーと比熱を計算した。この計測を 8 回くり返して平均値と標準偏差を計算している。この系の厳密なエネルギーと比熱の値は、分配関数 $Z = \sum_n \exp[-(n + \frac{1}{2})\beta] = \{2 \sinh(\beta/2)\}^{-1}$ より、

$$E = \frac{1}{2} \coth\left(\frac{\beta}{2}\right) \quad (36)$$

$$C = \frac{\beta^2}{4} \frac{1}{\sinh^2(\beta/2)} \quad (37)$$

と与えられる。虚時間軸の分割幅 τ は、調和振動子のエネルギーレベル間隔をエネルギー単位として $\tau = 1/4$ としている。別な言い方をするなら、単位温度の虚時間長を 4 分割している。ポテンシャルの空間変化が比較的緩やかなので、このぐらいの分割幅でも十分な結果が得られている。ポテンシャルの空間変化が大きいときは、もっと分割を細かくする必要がある。また、比熱の収束がエネルギーの収束に比べて悪いことが解る。比熱はエネルギーの揺らぎから計算されるため、エネルギーの場合に期待できる揺らぎの相殺効果がない。じっさいに発生する揺らぎのパターンが全モンテカルロステップで一通り発生しないことには、正しい値に収束しない。特にこの状況は低温において顕著になり、数値計算の結果、比熱が負の値になる状況も発

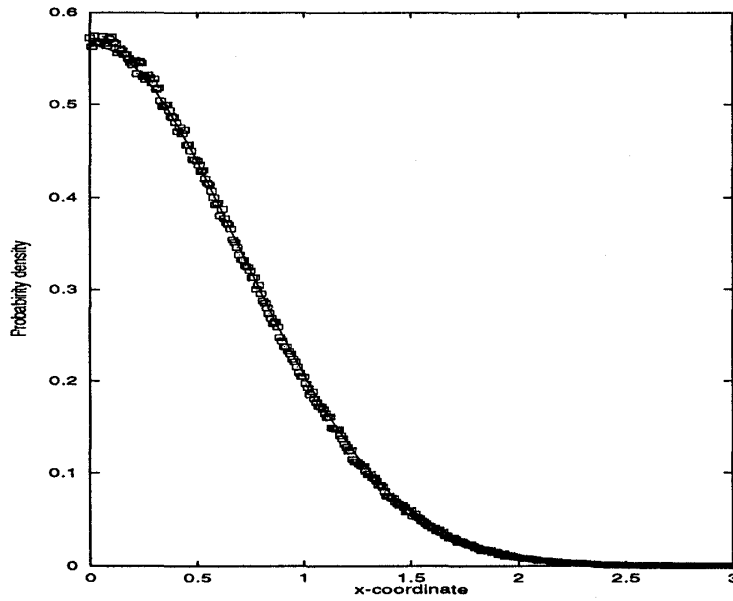


図 4: 経路積分モンテカルロで計算した基底状態の確率密度分布。破線は理論値。

生する。単純な、1 体調和振動子でさえ低温での比熱の計算の困難さが見られるが、多体系で粒子間ポテンシャルや基盤ポテンシャルが存在する場合は、低温での計算はほとんど困難となる。このような場合は、エネルギーの値から数値微分によって比熱を得る方が適当であろう。

温度を $T = 0.1$ と設定して、発生させた経路の各点を集計し粒子の確率密度分布を計算する。 5×10^4 MCS の熱化後に、 1×10^5 MCS の統計処理を行った。単位長さにつき 100 個の区間を用意し、それぞれの区間にヒットした経路点を計数して最後に規格化した。それを厳密な基底状態の確率密度分布

$$|\psi_0(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (38)$$

と比較したものを図 4 に示す。

この温度 ($T = 0.1$) では、第一励起状態の混合率は $e^{-10} \sim 5 \times 10^{-5}$ 程度であり、事実上の基底状態が得られる。図 4 を見る限り理論値との一致は満足すべきものである。これもモンテカルロサンプル数を 100 倍程度にしたら、理論値と全く見分けの付かないグラフが得られたが、かえって面白くないのでこのままとしている。また、世界線の座標点は $x = 3.5$ の付近までヒットしている。以前にも述べたが、ポテンシャルを数値で与えるときは要注意である。

余談

調和振動子程度の一体問題ならば計算量はたいしたことはない。事実、調和振動子のモンテカルロ計算は、Free Unix をインストールして5年来文房具として愛用し続けている Pentium 100MHz CPU/メモリ 32MByte のノートパソコンで、この原稿を書きながら background process で行った。すでにスペック的には時代遅れとなったこのパソコンも、この程度には役にたつ。(ただし、Windows はまともに動かないが。) 世にあふれている Intel 系 CPU のパソコンは浮動小数点の計算速度に難点はあるものの整数計算が速いため、乱数発生能力が高く、実はモンテカルロ計算には向いている。

4 超流動ヘリウムへの応用

多粒子 N 体系を扱う場合は、 N 個の世界線を用意して虚時間上の同一スレッド上での世界線間の距離に対応した粒子間相互作用を取り入れる。経路の発生方法や熱力学量の統計手法は、1 体系のそれを踏襲できる。

さて多粒子系に対する応用例として、超流動ヘリウムを扱う。経路積分を超流動ヘリウムに適用する際に、新たに問題になる点が2点ある。ひとつは非常に強い空間変化をする Lennard-Johnes 型の粒子間ポテンシャルであり、もうひとつはボーズ統計性の導入である。

4.1 モデル

周期的境界条件を与えた容器内に、 N 個の ^4He 粒子を入れる。Hamiltonian は以下のように与える。

$$H = H_0 + V, \quad H_0 = \sum_{i=0}^N \frac{p_i^2}{2m}, \quad V = \sum_{i<j} v(r_{ij}) \quad (39)$$

粒子の座標は $\mathbf{r}_i(j)$ と表記する。ここで i は粒子番号 ($1 \leq i \leq N$) であり、 j は離散化虚時間の番号 ($0 \leq j \leq M$) である。

ここで粒子間相互作用として Aziz ポテンシャルを採用する。一般には、単原子分子間の相互作用関数として関数形の単純な Lennard-Johnes のポテンシャルが良く知られているが、最近の数値計算ではより正確な Aziz ポテンシャルが用いられる。Aziz ポテンシャルは以下の式で与えられる。

$$v(x) = \varepsilon \left[A \exp(-\alpha x) - \left(\frac{c_6}{x^6} + \frac{c_8}{x^8} + \frac{c_{10}}{x^{10}} \right) f(x) \right]$$

$$f(x) = \begin{cases} \exp \left[- \left(\frac{D}{x} - 1 \right)^2 \right] & (x \leq D) \\ 1 & (D < x) \end{cases} \quad (40)$$

ここで、 $x \equiv r/r_m$ であり、式中のパラメータは以下の通りである。

$$\begin{aligned} A &= 0.5448504 \times 10^6 & \varepsilon/k_B &= 10.8\text{K} \\ \alpha &= 13.353384 & D &= 1.241314 \\ c_6 &= 1.3732412 & c_8 &= 0.4253785 \\ c_{10} &= 0.178100 & r_m &= 2.9673\text{\AA} \end{aligned} \quad (41)$$

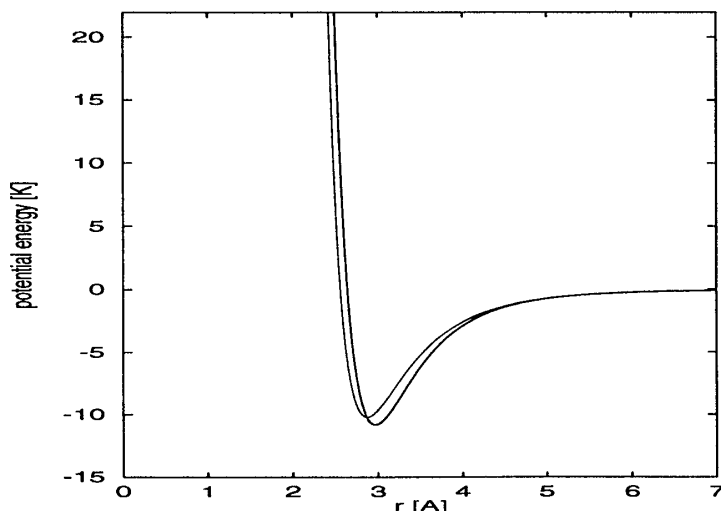


図 5: Aziz ポテンシャル (太線) と Lennard-Jones ポテンシャル (細線)

さらにこのポテンシャルの特徴的な距離 r_m で諸量をスケールすると、特徴的なエネルギー $\tau_0^{-1} = \hbar^2/mr_m^2 = 1.366\text{K}$ を得る。参考までに Lennard-Jones ポテンシャルは以下のように与えられる。

$$v(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

$$\sigma = 2.556\text{\AA}, \quad \epsilon = 10.22\text{K} \quad (42)$$

このポテンシャルは、負の中級数で表記され関数形が簡単なために、解析的な計算の際には良く用いられる。

ここであげた両ポテンシャルを図 5 に示しておく。

5 有効相互作用

Lennard-Jones 型のような、空間変化の大きなポテンシャルを扱う際には、経路積分に置いて、虚時間軸の分割幅 (τ) を小さく取らなければならない。つまり、虚時間 τ の時間間隔で自由粒子が動ける距離 Δr は式 (19) より、

$$\Delta r \sim \sqrt{\frac{\tau}{m}} \quad (43)$$

である。この距離の間でのポテンシャルの変化 ΔV が、運動エネルギー $m(\Delta r/\tau)^2$ よりも小さい必要がある。この条件を満たす場合は、粒子は離散虚時間でポテンシャル関数の形状を舐める様に移動し、正確な計算が可能になる。ところが、 τ を小さく採ると分割数が増えるために計算時間が掛かる事になる。このジレンマを解決するために、有効相互作用ポテンシャルを導入する。

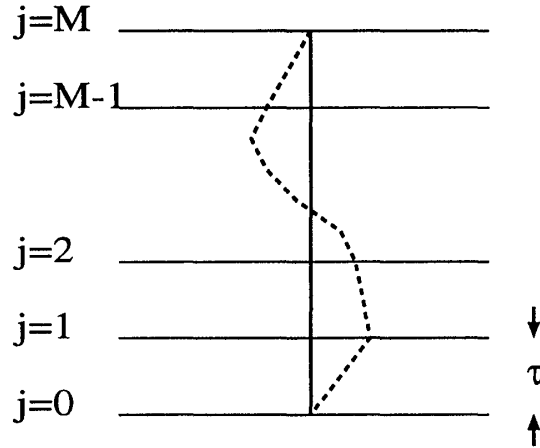


図 6: 一つのスレッドを M 分割する。まっすぐな世界線は M スレッド分の有効ポテンシャルの情報をもつ。スレッドを M 分割すると、実際には粒子はたとえば点線のような世界線を持っている。このように新たに分割した M スレッドで世界線を経路積分して、有効ポテンシャルが得られる。

虚時間経路積分の行列要素の対角項は、作用に対する運動エネルギーの寄与がなくなるため、ポテンシャルの情報を取り出す事ができる。つまり単位スレッドに対して、

$$\langle \mathbf{r} | \exp(-\tau H) | \mathbf{r} \rangle = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar\tau} \right)^{3/2} \exp(-\tau v(\mathbf{r})) \quad (44)$$

このことから、 M 個のスレッドをひとまとめにしたときに、粒子からポテンシャルの熱平均がどのように見えるかを考え、それを有効ポテンシャルとする。つまり、有効ポテンシャルを $v_{\text{eff}}(\mathbf{r}; M\tau)$ と記して、以下のように与えられる。

$$\langle \mathbf{r} | \exp(-M\tau H) | \mathbf{r} \rangle = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar M\tau} \right)^{3/2} \exp(-M\tau v_{\text{eff}}(\mathbf{r}; M\tau)) \quad (45)$$

これは、スレッド幅 $M\tau$ を直線的に伝播する粒子の世界線で、粒子の位置座標 $\mathbf{r}$ のポテンシャルを感じる事を表している。ところで、この式は M 個のスレッド幅 τ で、 $\mathbf{r}$ を通るループ状の世界線を持つ通常の経路積分と考えることができる。つまり、 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(0) = \mathbf{r}(M)$ の拘束条件のもとで、

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{r} | \exp(-M\tau H) | \mathbf{r} \rangle \\ &= \int d\mathbf{r}(1) \int d\mathbf{r}(2) \cdots \int d\mathbf{r}(M-1) \langle \mathbf{r} | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}(M-1) \rangle \times \\ & \quad \langle \mathbf{r}(M-1) | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}(M-2) \rangle \cdots \langle \mathbf{r}(1) | \exp(-\tau H) | \mathbf{r} \rangle \end{aligned} \quad (46)$$

この式の粒子の世界線を図 6 に書く。

この図から解るように、粗視化した虚時間 $M\tau$ の間の粒子の世界線は、スレッド幅 τ で見たときには曲がりくねっていて、熱的ドブロイ波長の幅で広がっている。この範囲で、粒子の感

じる平均的なポテンシャルが有効相互作用 $v_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ であることが解る。この事は、式 (45) を τ で微分する事で得られる式からも理解される。

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}; M\tau) = \frac{\langle \mathbf{r} | H \exp(-M\tau H) | \mathbf{r} \rangle}{\langle \mathbf{r} | \exp(-M\tau H) | \mathbf{r} \rangle} - \frac{3}{2M\tau} \quad (47)$$

右辺の第一項は位置 $\mathbf{r}$ の周りに熱的ドブロイ波長で広がっている粒子のエネルギー期待値の形であり、第二項により虚時間幅 $M\tau$ に相当する古典的運動エネルギーを差し引くことで有効ポテンシャルを得ている。

5.1 有効相互作用の計算方法

有効相互作用の計算方法にはいろいろあるが、本質的に $M\tau$ のスレッド幅での熱力学的エネルギー期待値を求めたのち、運動エネルギーを差し引いている。ここでは、おもな3種類の方法を説明する。

一つ目は、式 (47) を直接利用した Monte Carlo の手法である。有効相互作用を求める際に、すでに乱数計算を用いるため精度的に問題を生じる。しかしながら、対象となるポテンシャルの次元性や対称性に依存せずに扱える利点がある。二つ目は、密度行列の二乗法 (Matrix Squaring Method) と呼ばれる方法で、もっとも一般的なものであり、計算時間も比較的少ない。ただし、ポテンシャルが本質的に1自由度で記述されない限り、多重積分が必要となり非現実的である。三つ目は、波動関数の固有値と固有関数を求め、それを基にエネルギーの期待値を求める方法である。前の二つの方法が経路積分の概念を利用しているのに対して、この方法は $M\tau$ のスレッド幅で数値的に問題を解き、エネルギー期待値を計算している。この方法は、計算量も多くあまり現実的ではない。

Monte Carlo 法

具体的な手順としては以下のようになる。

- 1) 点 $\mathbf{r}_0$ を通るループ状の経路を用意する。虚時間軸の長さは $M\tau$ で、スレッド幅は τ とする。
- 2) Metropolis アルゴリズムで粒子の世界線を発生させる。このとき $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}(M) = \mathbf{r}_0$ の点は固定したままにする。
- 3) 熱化をしたのち、各 MCS の世界線に対してエネルギーの値を計算して統計処理をする。
- 4) エネルギー期待値を計算し、そこから古典運動エネルギー ($3/2M\tau$) を引いて、有効相互作用 $v_{\text{eff}}(\mathbf{r}_0; M\tau)$ を得る。

このようにして $\mathbf{r}_0$ における有効ポテンシャルを計算した後、別の空間点での計算を行う。当然のことながら、有効相互作用を決定する際に Monte Carlo 法に固有の誤差が生じてしまうために、実用上使用できない。あくまで他の計算方法と併せた確認手段と考えるべきであろう。

密度行列二乗法

スレッド幅 τ の密度行列を二乗する。

$$\langle \mathbf{r}' | \exp(-2\tau H) | \mathbf{r} \rangle = \int d\mathbf{r}'' \langle \mathbf{r}' | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | \exp(-\tau H) | \mathbf{r} \rangle \quad (48)$$

もっともこれは言い回しを変えただけで式 (15) の虚時間版であり、式 (19) で $M = 2$ とした場合に過ぎない。さらに、 $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ とした対角成分を考えるなら、式 (48) の左辺は以下のように $v_{\text{eff}}(\mathbf{r}; 2\tau)$ を含む。

$$\langle \mathbf{r} | \exp(-2\tau H) | \mathbf{r} \rangle = \left(\frac{\mu}{4\pi\hbar\tau} \right)^{3/2} \exp(-2\tau v_{\text{eff}}(\mathbf{r}; 2\tau)) \quad (49)$$

また式 (48) 右辺の行列要素は以下のように書ける。

$$\langle \mathbf{r}'' | \exp(-\tau H) | \mathbf{r} \rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\tau} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m}{2\tau} (\mathbf{r}'' - \mathbf{r})^2 + \frac{\tau}{2} \{V(\mathbf{r}'') + V(\mathbf{r})\} \right] \quad (50)$$

ここでポテンシャル項を与える際に、始点と終点の値の平均値を用いた。これは精度をあげるためと行列要素の対称化のためである。ループ状の世界線を持つ、通常の経路積分では経路の端点がないため、この様な対称化は意味を持たない。以上の結果からスレッド幅 τ の密度行列を二乗する事で、スレッド幅 2τ の有効ポテンシャルが計算できる事が解った。この操作を K 回続けることにより、スレッド幅 τ の行列要素から、スレッド幅 $2^K\tau$ の有効ポテンシャルを計算することができる。現実の系に対して式 (48) を利用する際には、行列要素の寄与がある、熱的コヒーレンス長の範囲にわたって積分を行う必要がある。この範囲は、平方操作を繰り返すに従い広がっていくため、ある程度の計算量となり、また $\mathbf{r}$ の添字の空間も広く取っておく必要がある。積分空間が多次元の場合は事実上困難で、ポテンシャル $v(\mathbf{r})$ が、ただ 1 個のパラメータに依存する場合にのみに利用可能な方法となる。

固有関数展開法

最後の方法は経路積分の考え方を使わず、系の固有関数展開を用いる方法である。特に経路積分の考え方を使わないため、虚時間軸の分割数を用いず、式 (47) において、 $M\tau = \tilde{\tau}$ と置く。 $\tilde{\tau}$ は有効ポテンシャルを用いた際の、虚時間軸のスレッド幅である。これにより、有効ポテンシャルを求める式は以下ようになる。

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}; \tilde{\tau}) = \frac{\langle \mathbf{r} | H \exp(-\tilde{\tau} H) | \mathbf{r} \rangle}{\langle \mathbf{r} | \exp(-\tilde{\tau} H) | \mathbf{r} \rangle} - \frac{3}{2\tilde{\tau}} \quad (51)$$

右辺の第 1 項分母は、温度の逆数 $\tilde{\tau}$ における座標表示での分配関数である。分子と合わせて第 1 項目は、座標 $\mathbf{r}$ におけるエネルギー期待値である。この事から、系のエネルギー固有値 E_i とそれに属する規格化された波動関数 $\psi_i(\mathbf{r})$ を用いて、

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}; \tilde{\tau}) = \frac{\sum_i E_i \exp(-\tilde{\tau} E_i) |\psi_i(\mathbf{r})|^2}{\sum_i \exp(-\tilde{\tau} E_i) |\psi_i(\mathbf{r})|^2} - \frac{3}{2\tilde{\tau}} \quad (52)$$

とできる。粒子間ポテンシャルを考える場合 $\mathbf{r}$ は粒子間の相対座標であり、厳密には $\psi(\mathbf{r})$ の偶奇性を考慮する必要がある。しかし、経路積分自体が τ が小さい高温状態での分配関数を考えているため、量子統計性は無視して構わない。このことは粒子間隔 l に対して、粒子のドブロイ波長 $\sqrt{\tau}m$ が十分小さくなければ粒子の挙動を記述する虚時間座標の分解能が足りずに粒子間のポテンシャルによる散乱が記述できない。このような状態では、経路積分による表記自体ができなくなることからも理解される。

実際に計算を行ってみると、経路積分の精度を保証するには τ をあまり大きく取ることができない。このことは、式 (52) の Boltzmann 因子の減衰が弱く、多数の波動関数を求めた上での計算が必要になる。その際、 τ が高温であるため、束縛状態のみならず自由粒子の状態に至るまでの寄与を計算しないと有効ポテンシャルが収束しない。 ^4He の粒子間ポテンシャルの有効ポテンシャルを計算したときには、1 万個を超える固有値と固有関数を求める必要に迫られた。特別な場合以外は、密度行列二乗法を使うべきであろう。もちろん、容易に波動関数が求められない系での利用は不可能である。

5.2 ^4He の粒子間ポテンシャルの有効ポテンシャル

密度行列二乗法を ^4He の Aziz ポテンシャルに適用して有効相互作用を計算する。2 体の He 原子間の相対位置を $\mathbf{r}$ として部分波展開を行う。

$$\langle \mathbf{r}' | \exp(-\tau H) | \mathbf{r} \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi r r'} \langle \mathbf{r}' | \exp(-\tau H_l) | \mathbf{r} \rangle \quad (53)$$

ここで H_l は角運動量 l 成分に対する Hamiltonian であり、行列要素は 2 体粒子の換算質量を $\mu = m/2$ として以下のように与えられる。

$$\begin{aligned} M_{r'r}^{(l)} &\equiv \langle \mathbf{r}' | \exp(-\tau H_l) | \mathbf{r} \rangle \\ &\simeq \frac{\mu}{\sqrt{2\pi\hbar\tau}} \exp \left[-\frac{(r' - r)^2}{2\mu\tau} - \frac{\tau}{2} l(l+1) \left\{ \frac{1}{r'^2} + \frac{1}{r^2} \right\} - \frac{\tau}{2} \{V(r') + V(r)\} \right] \end{aligned} \quad (54)$$

適当に離散化した r に対して $M_{r'r}^{(l)}$ を求めて、二乗計算を K 回行なうと、

$$\langle \mathbf{r}' | \exp(-2^K \tau H) | \mathbf{r} \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi r r'} \left(M_{r'r}^{(l)} \right)^{2^K} \quad (55)$$

さらに対角成分を考えることで

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \exp(-2^K \tau H) | \mathbf{r} \rangle &= \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar 2^K \tau} \right)^{3/2} \exp \left(-2^K \tau v_{\text{eff}}(\mathbf{r}; 2^K \tau) \right) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi r^2} \left(M_{rr}^{(l)} \right)^{2^K} \end{aligned} \quad (56)$$

以上より有効ポテンシャルの表式は、

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}; 2^K \tau) = -\frac{1}{2^K \tau} \ln \left[\left(\frac{\mu}{2\pi\hbar 2^K \tau} \right)^{-3/2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi r^2} \left(M_{rr}^{(l)} \right)^{2^K} \right] \quad (57)$$

となる。

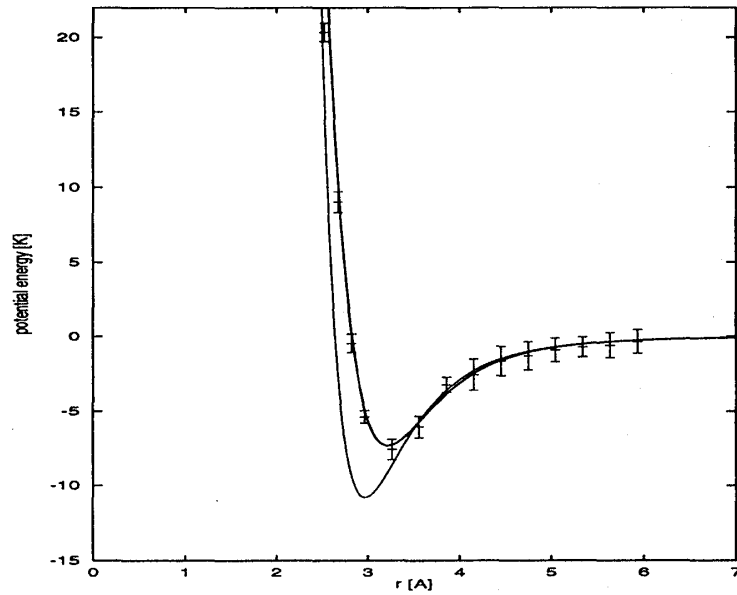


図 7: 実ポテンシャルの Aziz ポテンシャル (細い実線) と $\tau = 43.7\text{K}$ での有効ポテンシャル (太い実線) および、経路積分により得られた有効ポテンシャル (エラーバー)。

密度行列二乗法を用いて ^4He の粒子間の有効ポテンシャルを計算しよう。初期の虚時間スレッド幅 τ を $\tau = 2^{-10}\tau_0$ ($\tau^{-1} = 1399\text{K}$) として、行列要素の二乗を 5 回行う。これにより得られるのは、スレッド幅 $\tilde{\tau} = 2^{-5}\tau_0$ ($\tilde{\tau}^{-1} = 43.7\text{K}$) の有効ポテンシャルである。部分波展開は、 $l \leq 128$ の範囲で行った。この結果を図 7 に示す。また、Monte Carlo 法によって求めた有効ポテンシャルも併せて示す。Monte Carlo 法においても密度行列二乗法と同様に、虚時間スレッド幅は $\tau = 2^{-10}\tau_0$ であり、 $\tilde{\tau}$ を 32 分割している。シミュレーションにおける初期熱化は 10^4step であり、熱力学量の統計はその後の 10^6step である。この処理を 8 回行い、平均値とエラーバー (± 標準偏差) を計算している。計算結果は密度行列二乗法とよく一致しているが、ポテンシャルの空間変化が大きい剛体芯の部分では誤差が大きくなっている。

6 粒子交換による Bose 統計の導入

多粒子系において粒子の Bose 統計性を取り入れるには、 N 個の粒子の第 j スレッドから第 $j+1$ スレッドへの伝播関数を

$$\sum_{i=1}^N \langle \mathbf{r}_i(j+1) | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}_i(j) \rangle \quad (58)$$

ではなく、粒子の置換を考慮して

$$\sum_{i=1}^N \langle \mathbf{r}_{Pi}(j+1) | \exp(-\tau H) | \mathbf{r}_i(j) \rangle \quad (59)$$

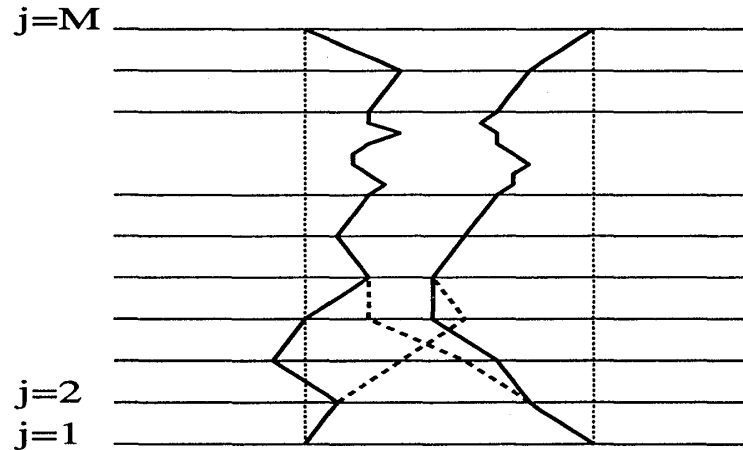


図 8: 適当なスレッド数 (交換長) で粒子の交換を試みる。交換前の経路 (実線) と交換後の経路 (点線) の作用の差に対して Metropolis アルゴリズムで交換を受け入れるかどうかを決める。交換が発生したときは、世界線の虚時間方向の周期性が変化することに注意。細い点線は周期的境界条件を意味する。

としなければならない。ここで P は N 個の粒子における $N!$ 通りの置換を表す。粒子の置換を経路積分で表記するなら、図 8 に示すように、2 個の粒子の世界線を 1 スレッドまたは複数のスレッドに渡って交差させて、粒子を交換することを意味する。このことを Monte Carlo 法に載せるには、粒子の交換前の作用と交換後の作用を計算して、これらの作用に対して Metropolis アルゴリズムを用いればよい。実際には全てのスレッドで粒子交換する必要は無く、粒子交換の可能性を保証していればよい。ただし粒子交換の試行頻度が小さいとボーズ凝縮温度以下の温度領域での熱力学量の収束が著しく悪くなる。このあたりは、試行頻度増大による計算時間の増加と収束性との兼ね合いの問題である。

粒子交換により虚時間方向の周期構造は一般に変化する。ボーズ凝縮温度 (T_c) 以上では、粒子交換はほとんど起こらず、粒子の大部分が虚時間方向に β の周期性を持っている。温度が T_c 近くなると粒子の交換が起こり始める。虚時間方向に β の周期の、単純なループ状世界線を持つ粒子が交換を行うことを考える。交換後の世界線は、虚時間に 2β の周期を持ち、この世界線に 2 個の粒子が不可弁別の状態に属することになる。さらに低温では粒子交換により世界線は虚時間方向に多重ループ構造を持つようになる。そして、 $T < T_c$ において、一つのループに含まれる粒子数が巨視的な N のオーダーになり、ボーズ凝縮が実現する。

波動関数の広がり、世界線の実座標での広がりとして理解される。ボーズ凝縮が起こる前は、事実上全ての粒子リンクは自分自身に対しての 1 重、と思ってよく、世界線の長さを β と考えてよい。そのときの各粒子の波動関数の実空間座標での広がり $\Delta x \sim \hbar\sqrt{\beta/m}$ 程度であり、その長さはたかだか粒子間隔程度である。ボーズ凝縮が起こったときは、巨視的な数の N' 重ループが出現し、波動関数の広がり $\Delta x \sim \hbar\sqrt{N'\beta/m}$ となる。これは事実上容器のサイズであり、ゼロ運動量波動関数 (運動量空間での凝縮) を表現する。

6.1 交換経路の設定

粒子の交換の可能性は、 NC_2 通りあるが、粒子間距離が大きい場合の交換は交換経路の作用が大きく粒子交換の確率は事実上無視できるため、近接粒子のみとの交換を考慮すればよい。また実際にシミュレーションを行ってみると、有効相互作用を用いても虚時間スレッド幅 τ は、 $\tau = \tau_0/32$ 程度に採る必要がある。一方で交換対象となる粒子は、ポテンシャルの剛体芯のために原子の直径程度の距離よりも接近することは無い。このような狭い虚時間幅で粒子交換を試みると、交換経路の作用が大きくなり過ぎて粒子交換の受容率が小さくなってしまう。このための解決策として、複数のスレッドに渡る交換経路の設定を行う。今回の計算では、粒子の交換経路の虚時間方向の長さは、 3τ とした。この交換経路の長さは重要で、 2τ とした場合は粒子交換の受容率が大きく下がりながらも 3τ と同様の熱力学量を得ることができた。しかしながら、 4τ とした場合は交換経路が粒子の世界線の揺らぎの量に近付いてくるため、粒子交換が容易に発生し不適當な熱力学量が得られる。

複数のスレッドに渡る交換経路では、交換経路の上にある他粒子の剛体芯ポテンシャルの影響もあるため、経路をヤミクモに設定しても交換受容率が低い。そのため、適当な交換経路を設定したのちに、交換経路の部分に対して熱化処理を数回を行い、交換経路の作用の値を下げてから交換を試みた。

6.2 世界線の管理

Monte Carlo 計算時における各粒子の世界線の管理は、交換を行うため複雑になる。交換を行わないときは、世界線はそれぞれの粒子で閉じたループを形成しているが、交換を行うために粒子番号が異なる粒子を含む、長周期のループ構造が現われる。これに対応するための処方は、

- 0) i 番目の粒子の虚時間スレッド番号 j の座標を $\mathbf{r}_i(j)$ とする。この粒子に直接付随する量として、 $j = 0, 1, 2, \dots, M-1$ における座標 $\mathbf{r}_i(j)$ と、 $\mathbf{r}_i(M-1)$ の次に接続する粒子番号を記録しておかないといけない。ここでは i 粒子の接続する粒子番号を q とし、 $i_{\text{link}} = q$ と表記する。
- 1) 初期経路として $\mathbf{r}_i(0) = \mathbf{r}_i(1) = \dots = \mathbf{r}_i(M-1)$ を用意し、自分自身で閉じたループ $i_{\text{link}} = i$ としておく。
- 2) 粒子交換が何度か行われた後の、第 i 粒子と第 i' 粒子の交換を考える。交換を l 個のスレッドに渡って行うとする。交換経路のスレッド番号は j から $j+l$ とし、二つの粒子のリンク状態は $i_{\text{link}} = q$, $i'_{\text{link}} = q'$ とする。
- 3) 粒子の交換に成功した場合スレッド番号 $j+l+1$ から $M-1$ までの粒子番号を i と i' で交換する。同時に粒子のリンク先も $i_{\text{link}} = q'$, $i'_{\text{link}} = q$ と変更する。

交換経路がスレッド番号 0 を含むときは、経路管理が大変複雑になる。そのため、今回はこのような経路交換は試行しなかった。

7 Monte Carlo 計算

実際に計算をするにあたり、経路の初期設定として調和振動子と同様に、各粒子とも虚時間に依存しない“まっすぐ”な経路を用意し、各粒子のリンク先に自分自身の粒子番号を入れて

おく。計算を開始したら、熱化ステップを経た後に、経路の統計処理を始める。統計処理は粒子数が N になったことと、経路のリンク先を考慮することに注意を要する。

熱力学量の計算も、多体系になったからといって特に大きな変更はない。運動エネルギー項 U_1 は以下の通りである。

$$U_1 = \frac{dN}{2\tau} - \frac{m}{2M\tau^2\hbar^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{M-1} \{\mathbf{r}_{i'}(j+1) - \mathbf{r}_i(j)\}^2. \quad (60)$$

とくに、 $j = M - 1$ では次のスレッドへの接続は自分自身とは限らないために、リンク状態を記述する必要がある。そこで、運動エネルギー項部分に出てくる i' を以下のように定める。

$$i' = \begin{cases} i & (j \neq M - 1) \\ i_{\text{link}} & (j = M - 1) \end{cases} \quad (61)$$

上記の注意は、経路変更をする際の作用の計算でも常に気をつけていなければならない。ポテンシャルエネルギーの項 U_2 は、有効ポテンシャルを使って

$$U_2 = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \sum_{i < k} v_{\text{eff}}(r_{ik}(j)) \quad (62)$$

となる。この有効ポテンシャルは、経路変更を決定する作用の計算の際にも用いられる。全エネルギーの計算は、調和振動子のときと同じように全モンテカルロステップに対する平均をとって

$$E = \langle U_1 \rangle + \langle U_2 \rangle \quad (63)$$

となる。揺らぎの公式を利用した比熱の計算は、やはり調和振動子と同じく式 (29) となるが、エネルギーからの数値微分と一致せずほとんど実用にならない。

計算により得られたエネルギーの値と、一つの経路に含まれる平均粒子数 (リンクの平均的な多重度) を、図 9 に示す。実際の計算は粒子数 $N = 64$ で飽和蒸気圧の粒子密度で温度 $T = 1\text{K}$ から $T = 4\text{K}$ の範囲で行った。熱化ステップは 10000MCS でその後に 50000MCS の統計処理をしている。計測はそれぞれ 4 回行い、標準偏差を計算してエラーバーとしている。基本的には有効ポテンシャル自体がスレッド幅 τ に依存するため、スレッド幅 τ を固定して有効ポテンシャルを一度算出すると、温度を任意には設定できなくなる。その点も考慮して転移点付近での計測をなるべく増やした。

結果を見ると、 $T = 2.4\text{K}$ 付近までは、エネルギーが温度低下とともにほぼ直線的に下がる。この領域では、近似的に各粒子は隣接粒子の作る剛体壁のなかで振動していると考えられ、その運動エネルギーが温度とともに低下している。温度が $T = 2.4\text{K}$ から下がると、エネルギーの急激な低下が起こり始める。この頃から多重リンクが発生して運動エネルギーが低下することが判る。転移温度は図から、 $T = 2.3\text{K}$ と $T = 2.4\text{K}$ のあいだ、と読みとれ実際のバルクな超流動転移温度 $T = 2.17$ よりも幾分高めに出ている。実験値との照合は、現在手元に孫引きした実験データのグラフしかないので、あまり正確なことは言えないが、それによると $T = 1.0\text{K}$ で -7.2K 、 $T = 4.0\text{K}$ で -3.2K と転移点から離れた点ではかなり良く一致している。転移点 $T = 2.17\text{K}$ では実験値は -5.6K だが、転移点が高目に出ているため転移点付近で計算結果が高温側にシフトした形になっている。この辺りは、サイズ効果によるものかどうかの検証が必要である。

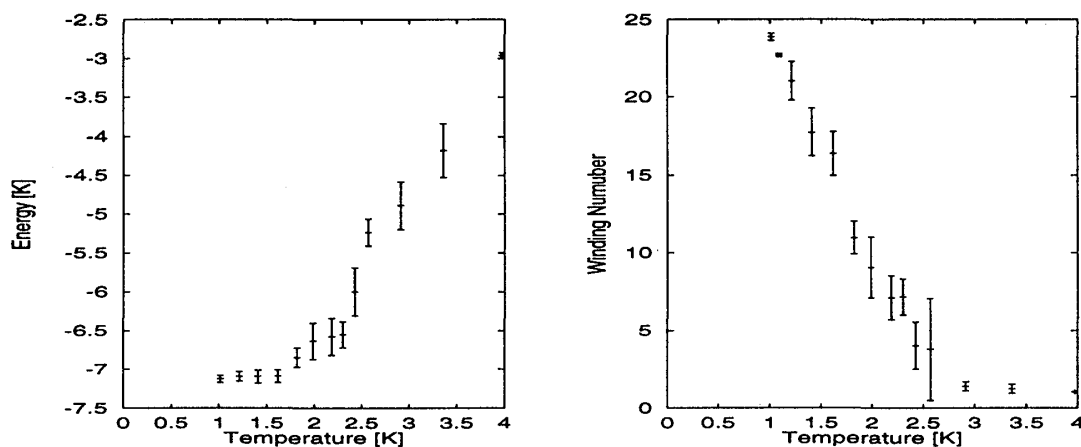


図 9: 各温度に対する内部エネルギーと、1 経路に含まれる粒子数。(平均の多重リンク数)

さて、 ^4He 粒子での計算を行ってきたが、理想粒子は粒子間ポテンシャルをゼロに置くことにより手続き的には簡単にできる。しかし、実は理想粒子の方が Lennard-Jones 型ポテンシャルを持つ粒子よりもモンテカルロ計算の収束性は悪い。理想粒子は粒子間の相互作用が無いために、粒子間の干渉がない。つまり理想粒子の波動関数は隣接粒子に制限されることなく広がっている。この状態を Monte Carlo で再現することは、ランダムウォークで容器内をくまなく歩き回らなければならない事を意味する。このことから容易に想像がつくように、容器サイズが大きくなるにつれて熱力学的な収束は極めて悪くなる。一方で剛体芯をもつ粒子の場合は、粒子ポテンシャルが粒子の運動を妨げるため、粒子の運動範囲はほぼ粒子間隔に限られる。それゆえ剛体芯型の粒子間ポテンシャルがある場合の方が、物理量の収束が速い。同様な事は、理想可弁別粒子と理想ボーズ粒子についても起こる。理想可弁別粒子は、粒子間の交換が無いため、やはり個々の粒子が容器の中をランダムウォークで歩き回る必要がある。一方で理想ボーズ系においては、ボーズ凝縮が始まると粒子交換による虚時間方向の多重リンクにより粒子世界線は容易に容器の中に拮がっていく。この事情により理想粒子の場合、低温領域では可弁別粒子よりもボーズ粒子の方が収束性が良くなる。経路積分モンテカルロを扱い始めたとき、当然最初に理想粒子を扱ったが、思った以上にいい結果が出ず、 He 粒子を扱ったところ意外にも収束が速く、面食らったことを思い出す。

8 おわりに

経路積分の本質的な部分よりも、最初に学んだ際に、いろいろつまづいた事ばかりを書き連ねてしまったように思います。読者の皆さんにどれだけ参考になるか解りませんが、読んでくださった方々に感謝します。最後に、経路積分を始めたころに、一緒に試行錯誤をした福井大学の院生だった西岡洋之、山本照雄両氏に感謝します。

参考文献

Aziz ポテンシャルの出典は

R.A. Aziz, V.P.S. Nai, J.S. Carley, W.L. Taylor and G.T. McConville:
J. Chem. Phys. **70** (1979) 4330.

常流動温度領域での ^4He に関しては

E.L. Pollock and D.M. Ceperley: Phys. Rev. B **30**, 2555 (1984).

M. Takahashi and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 3871.

有効ポテンシャルに関しては

A.D. Klemm and R.G. Storer: Aust. J. Phys. **26** (1973) 43.

D.M. Ceperley and E.L. Pollock: Phys. Rev. Lett. **56**, 351 (1986).

^4He の超流動転移に関する計算は

M. Takahashi: J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 1952.

D.M. Ceperley and G. Jacucci: Phys. Rev. Lett. **58**, 1648 (1987)

経路積分に関する一般的な和書として

『量子力学と経路積分』、R.P. ファインマン、A.R. ヒップズ著、北原和男訳、みすず書房

『岩波講座 現代の物理学 経路積分の方法』、大貫義郎、鈴木増雄、柏太郎著、岩波書店

『ファインマン経路積分』、L.S. シュルマン著、高塚和夫、講談社