

量子転送行列法と熱量子ダイナミクス

東京理科大学理学部 鈴木増雄 (Masuo Suzuki)

Department of Applied Physics,
Tokyo University of Science

1. はじめに

有限温度の平衡統計力学では、問題とする体系の自由エネルギー、ゆらぎおよび応答関数を研究することから始まる。これらを厳密に求める解析的方法は、クラマース、ワニヤおよび久保らによって 1940 年代に発見された。それは転送行列法 (TM) である。この方法を用いて、オンサーガーは、2 次イジング模型 (磁場無し) の厳密解を 1944 年に発表し、その後のこの分野に絶大な影響を与えた。イジング模型のような古典系、特に 2 次元古典形の研究には、この TM は極めて有効に利用されてきた。

2. 量子転送行列法とその生い立ち

熱平衡系の量子系を厳密に扱う場合に、大きく分けて 2 つの困難がある。一つは、問題とする系のハミルトニアンが対角化困難なこと、第二は、たとえ、仮にその固有値 $\{E_j\}$ が全て求まったとしても、その系の状態和 $Z(\beta) = \text{Tr} \exp(-\beta H) = \sum_j \exp(-\beta E_j)$ がコンパクトに求まるとは限らないことである。これらの困難を解消する一つの一般的な方法は、いわゆる Suzuki-Trotter 変換 (ST 変換)¹⁾ を用いて、 d 次元量子系を $(d+1)$ 次元古典系に変換し (すなわち、短距離力の量子系は短距離の古典系にマップされる)、古典系で有効な手段をいろいろと利用することである。こうして、量子モンテカルロ法²⁾ や量子転送行列法^{3, 4)} が量子系の研究に有効に用いられるようになった。

もとの量子系に等価な古典系に転送行列法を適用するには 2 通りの方法がある。実空間を基礎にして、 Trotter 方向に転送する実空間転送行列法と Trotter 方向を基礎にして、実空間の方向に転送する虚空間転送行列法とがある⁴⁾。著者は両方まとめて量子転送行列法と呼んだが、最近は狭い意味で後者をそう呼ぶことが多い。

この狭い意での量子転送行列法 (QTM) の利点は、その最大固有値 (温度の関数) $\lambda_{\max}$ を一つ求めれば、その量子系の自由エネルギー F が量子

数 $N \rightarrow \infty$ の極限で $F = -Nk_B T \log \lambda_{\max}$ と求まること⁵⁾、および系の相関関数 ξ が $\lambda_{\max}$ と次に大きな固有値 λ_2 との比によって、 $\xi^{-1} = \log(\lambda_{\max} / \lambda_2)$ のように与えられることである⁶⁾。

これらの実際的な最近の応用に関しては、文献 7—30 を参照していただきたい。

3. 熱量子ダイナミックス

上に説明した QTM を用いると、熱平衡系における物理量 Q の熱平均 $\langle Q \rangle$ が、熱力学的極限 $N \rightarrow \infty$ では $\langle Q \rangle = \langle \psi(\beta) | Q | \psi(\beta) \rangle$ と書けることが示せる⁷⁾。ここに $\psi(\beta) >$ は QTM の固有関数から求められる。より詳しい定式化およびもう 1 つの定式化に関しては文献 7 および 30 を参照していただきたい。

参考文献：

- 1) M. Suzuki, Commun. Math. Phys. **51** (1976) 183, および J. Phys. Soc. Jpn. **21** (1966) 2274.
- 2) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1454.
- 3) 鈴木増雄, 1983 年 10 月 11 日 日本物理学会 (分科会, 岡山大学) におけるシンポジウム「統計力学・物性基礎論における計算機実験」での講演。(その数ヶ月前から鈴木研の院生に博士論文の研究テーマとして提示。) および 2002 年 3 月 24 日 日本物理学会 (年次大会, 立命館大学) におけるシンポジウム「有限温度の数理論物理学はどこまで発展したか」での筆者の講演「量子転送行列法の生い立ちとその発展」。
- 4) M. Suzuki, Phys. Rev. **B31** (1985) 2957. この論文で量子転送行列法の解析的定式化および、トロッター数 $m \rightarrow \infty$ 極限と熱力学的極限 $N \rightarrow \infty$ との交換可能性の証明を与えた。これはその後の QTM の解析的応用への基礎となった。また、数値的計算に関しては、H. Betsuyaku, Prog. Theor. Phys. **73** (1985) 319, **75** (1986) 774, 808 など参照。
- 5) M. Suzuki and M. Inoue, Prog. Theor. Phys. **78** (1987) 787.
- 6) M. Inoue and M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **79** (1988) 645.
- 7) M. Suzuki, to be published in J. Stat. Phys. (special issue to celebrate the 70th birthday of Professor M. E. Fisher)
- 8) H. Betsuyaku, Prog. Theor. Phys. **73** (1985) 319; **75** (1986) 774, 808.
- 9) T. Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. **73** (1985) 1352.
- 10) H. Betsuyaku and T. Yokota, Prog. Theor. Phys. **75** (1986) 808.

- 11) K. Kubo and Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 438.
- 12) T. Koma, Prog. Theor. Phys. **71** (1993) 269.
- 13) K. Kubo, Phys. Rev. **B46** (1992) 866.
- 14) T. Delica, K. Kopinga, H. Leschke and K. K. Mon, Europhys. Lett. **15** (1991) 55.
- 15) N. Hatano and M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **85** (1991) 481.
- 16) M. Suzuki, J. Stat. Phys. **49** (1987) 977.
- 17) J. Suzuki, Y. Akutsu and M. Wadati, J. Phys. Soc. Jpn. **59** (1990) 2667.
- 18) J. Suzuki, T. Nagao and M. Wadati, Int. J. Mod. Phys. **B6** (1992) 1119-1180.
- 19) C. Destri and H. J. de Vega, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2313, Nuclear Phys. **B504** [PS] (1997) 621. Their argument on the exponential degeneracy of the transfer matrix is confusing.
- 20) M. Takahashi, Phys. Rev. **B43** (1991) 5788.
- 21) H. Mizuta, T. Nagao and M. Wadati, J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 3951.
- 22) A. Klümper, Z. Phys. **B91** (1993) 507.
- 23) A. Klümper, Eur. Phys. J. **B5** (1998) 677.
- 24) G. Jüttner and A. Klümper, Euro. Phys. Lett. **37** (1997) 335.
- 25) G. Jüttner, A. Klümer and J. Suzuki, Nucl. Phys. **B487** (1997) 650.
- 26) G. Jüttner, A. Klümper and J. Suzuki, J. Phys. **A30** (1997) 1881.
- 27) A. Kuniba, T. Nakanishi and J. Suzuki, Int. J. Mod. Phys. **A9** (1994) 5215.
- 28) A. Kuniba, K. Sakai and J. Suzuki, Nucl. Phys. **B525** [FS] (1998) 597.
- 29) Y. Umeno, J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 2531 and references sited therein.