

ファインマン・ダイアグラム量子モンテカルロ法による フレーリッヒ・ポーラロンの研究

東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 坂本 陽¹

1 従来の量子モンテカルロ法

量子力学の著しい特徴として『演算子の非可換性』を挙げることができるが、量子系の数値計算を行う場合は『演算子の非可換性』の問題に直面することになる。従来用いられてきた worldline 法は鈴木-Trotter 公式

$$e^{\tau(A+B)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{\tau}{N}A} e^{\frac{\tau}{N}B} \right)^N \quad (1)$$

を用いている。現実の数値計算は Trotter 数 N を有限の値に設定して (すなわち、虚時間軸を離散化して) 行うために系統的誤差が発生してしまう。近年『虚時間軸の離散化』によらない量子モンテカルロ法が開発されるようになった。

2 フレーリッヒ・ポーラロン

フレーリッヒ・ポーラロンは一個の電子が分散を無視した縦光学フォノンと相互作用するという模型で、ハミルトニアンは

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{2} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} - b_{-\mathbf{q}}) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \quad (2)$$

$$V_{\mathbf{q}} = i \left(2\sqrt{2}\alpha\pi \right)^{1/2} \frac{1}{q} \quad (3)$$

($a^{\dagger}, a$ は電子の生成・消滅演算子であり、 $b^{\dagger}, b$ は縦光学フォノンの生成・消滅演算子である。無次元の結合定数 α が系を特徴付ける唯一のパラメーターである。) で与えられる。このフレーリッヒ・ポーラロンは光照射によって生じたイオン性結晶中の伝導電子を記述する模型であるが、スカラー・ボゾンと相互作用するフェルミオンという場の理論の基本的な問題としても興味深い模型である。フレーリッヒ・ポーラロンは長い間研究され様々な理論が提案されてきたが、依然として未解明の部分が残されている。

¹ E-mail: sakamoto@appi.t.u-tokyo.ac.jp

3 ファインマン・ダイアグラム量子モンテカルロ法

我々は絶対零度における温度グリーン関数をモンテカルロ法で評価することによってフレリーッヒ・ポーロンの数値的厳密解を求めることに初めて成功した[1]。

絶対零度における温度グリーン関数は

$$G(\mathbf{k}, \tau) = \langle \text{vac} | a_{\mathbf{k}}(\tau) a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(0) | \text{vac} \rangle, \quad \tau \geq 0 \quad (4)$$

で与えられ、 $G(\mathbf{k}, \tau)$ の摂動展開の各項はファインマン・ダイアグラムで表される。ダイアグラムからの寄与を重みとしてファインマン・ダイアグラムを確率的に変えながら $(\mathbf{k}, \tau)$ の分布を調べると $G(\mathbf{k}, \tau)$ を系統的誤差無しに求めることができる。(図1参照) $G(\mathbf{k}, \tau)$ がわかればその漸近形

$$G(\mathbf{k}, \tau) \rightarrow Z_{\mathbf{k}} \exp[-(E(\mathbf{k}) - \mu)\tau] \quad (\tau \rightarrow \infty) \quad (5)$$

(μ : 系の化学ポテンシャル) から系のエネルギー $E(\mathbf{k})$ と Z 因子 $Z_{\mathbf{k}} = |\langle \text{free particle}_{\mathbf{k}} | \text{polaron}_{\mathbf{k}} \rangle|^2$ を知ることができる。

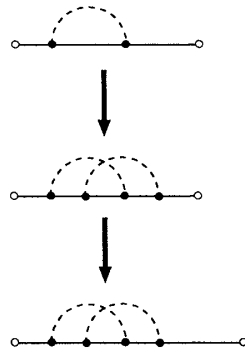


図 1: ファインマン・ダイアグラムを確率的に変える

我々の方法は $G(\mathbf{k}, \tau)$ の摂動展開を次数 ∞ まで数値的に足し上げるというものである。したがって、我々は摂動の次数(フォノンのプロパゲーターの数)に上限は設定していない。しかし、現実のシミュレーションではモンテカルロ・ステップ数が有限であるために摂動の次数(フォノンのプロパゲーターの数)はある一定の数を越えることはない。摂動の次数(フォノンのプロパゲーターの数)がある一定の数を越えないからといって摂動展開を次数 ∞ まで足し上げたことになるのかという批判がある。確かにシミュレーションがファインマン・ダイアグラムの空間において障壁を越えることができず、空間のある領域に閉じ込められてしまう可能性を完全に否定することはできない。(このような問題はどのようなモンテカルロ計算にも存在する普遍的な問題であると筆者は考えている。)

我々はこの量子モンテカルロ法をさらに発展させるために

- (1) N -フォノン・グリーン関数
- (2) 実周波数軸の離散化によらない新しい解析接続の方法

を導入した。

3.1 N -フォノン・グリーン関数

我々は

$$G_N(\mathbf{k}, \tau; \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) = \langle \text{vac} | b_{\mathbf{q}_N}(\tau) \cdots b_{\mathbf{q}_1}(\tau) a_{\mathbf{p}}(\tau) a_{\mathbf{p}}^\dagger(0) b_{\mathbf{q}_1}^\dagger(0) \cdots b_{\mathbf{q}_N}^\dagger(0) | \text{vac} \rangle$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{k} - \sum_{j=1}^N \mathbf{q}_j \quad (6)$$

で与えられる N -フォノン・グリーン関数を導入した。 N -フォノン・グリーン関数を導入することによって

- (1) 系のエネルギーと有効質量を直接計算すること
- (2) フォノンの数/運動量分布を求めること

が可能になった。

3.2 実周波数軸の離散化によらない新しい解析接続の方法

スペクトル密度は

$$g_{\mathbf{k}}(\omega) = \sum_{\nu} \delta(\omega - E_{\nu}(\mathbf{k})) |\langle \nu | a_{\mathbf{k}}^\dagger | \text{vac} \rangle|^2$$

$$H|\nu\rangle = E_{\nu}(\mathbf{k})|\nu\rangle \quad (7)$$

によって定義される。スペクトル密度の特徴としては

- (1) 系の波動関数に関する情報を含んでいる
- (2) 準粒子状態のエネルギーに対応する ω に δ 関数的なピークが現れる
- (3) 系の基底状態のみならず励起状態に関する情報を含む

が挙げられる。スペクトル密度 $g_{\mathbf{k}}(\omega)$ とグリーン関数 $G(\mathbf{k}, \tau)$ の間には

$$G(\mathbf{k}, \tau) = \int_0^\infty d\omega g_{\mathbf{k}}(\omega) e^{-\omega\tau} \quad (8)$$

という関係が存在する。

$G(\mathbf{k}, \tau)$ を知ることができれば

$$\rho(\omega) \geq 0 \quad (9)$$

という拘束条件の付いた積分方程式

$$G(\mathbf{k}, \tau) = \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) e^{-\omega\tau} \quad (10)$$

を解くことによってスペクトル密度 $g_{\mathbf{k}}(\omega)$ を求めることができる。ところが現実には得られる $G(\mathbf{k}, \tau)$ は τ の値は離散的でしかも統計誤差をともなったものである。そのことの結果として (10) 式の近似解 $\tilde{\rho}(\omega)$ は鋸の歯に似た形を持つ雑音 (saw-tooth noise) を含むようになってしまう。また、従

来用いられてきた最大エントロピー法では実周波数軸は離散化されるのでスペクトル密度が鋭いピークを含む場合にはスペクトル密度が正しく再現されないことになってしまう。

我々は近似解 $\tilde{\rho}(\omega)$ を図 2 のような長方形の重ね合わせで表すことを考えた。(ここで $\rho(\omega) \geq 0$ の条件を用いている。) 長方形の位置と幅は連続的に変化させることができるのでどのような鋭いピークにも対応できるということになる。この近似解 $\tilde{\rho}(\omega)$ を誤差

$$\tilde{G}(\tau) = \int_0^{\infty} e^{-\omega\tau} \tilde{\rho}(\omega) d\omega \quad (11)$$

$$D[\tilde{\rho}] = \int_0^{\tau_{\max}} |G(\tau) - \tilde{G}(\tau)| G^{-1}(\tau) d\tau \quad (12)$$

が最小になるように確率的に変えていく。近似解 $\tilde{\rho}$ の関数としての誤差 D は極小が多数存在するような多谷構造を持つ。したがって、本当の最小に到達するためには多数の山を越えなければならない。そのために我々は”local update” と ”global update” の 2 種類の変化を導入した。山を登りやすいように遷移確率を設定した”local update” を一定回数繰り返して山を乗り越えた後で下に移動しやすいように遷移確率を設定した”global update” によって移動するという仕組みである。以上のような方法で近似解を多数求めておいて最後にそれらの平均を計算する。個々の近似解は saw-tooth noise を含んでいるが、確率的に求めた近似解なので saw-tooth noise はランダムに発生している。多数の近似解の平均をとることによって個々の近似解に含まれる saw-tooth noise は互いに打ち消し合って saw-tooth noise を含まない最終的な解が得られるということになる。

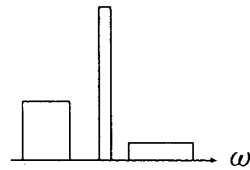


図 2: 近似解 $\tilde{\rho}(\omega)$

4 他の量子モンテカルロ法との比較

我々の方法以外にも『虚時間軸の離散化』によらない量子モンテカルロ法は提案されている。それらの方法の特徴は粒子やスピンの配位の虚時間発展を『粒子の hopping』や『スピンの反転』という出来事が連続時間上で確率的に起こるととらえるところにあり、系の Hilbert 空間の離散性に立脚したものである。ところが、フレーリッヒ・ポーラロンは連続的な実空間上で定義されたモデルで Hilbert 空間は離散的ではない。すなわち、連続的な実空間上の電子の空間座標は hopping する(不連続的に変化する)ことができない。我々の方法では『フォノンの放出・吸収』という出来事が連続時間上で確率的に起こる場合を考えており、連続的な実空間上の電子の運動量は hopping する(不連続的に変化する)ことが可能である。(図 3)

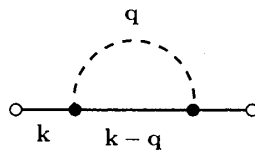


図 3: 運動量の hopping

5 数値計算の結果

我々の数値計算の結果から以下のことが明らかになった。

- (1) Feynman の経路積分の方法 [2] は基底状態のエネルギーに関して最も低い変分エネルギーを与えるので最も優れた理論であると考えられてきた。Feynman の方法は基底状態のエネルギーに関して弱結合領域から強結合領域にかけて正確な答を与えていることが判明した。
- (2) Feynman の方法を含む既成の理論が与える有効質量は特に中間結合領域において厳密解から大きくずれてしまう。
- (3) 電子-フォノン相互作用が長距離型であるためにスペクトル密度に関する摂動論は弱結合領域で破綻してしまう。弱結合領域において 3-フォノンのサイドバンドに対応するピークが存在することが判明した。このピークの存在は摂動論では全く説明することができない。
- (4) Feranchuk *et al.*[3] はフレーリッヒ・ポーラロンにおいて結合定数がある臨界値を越えると系の基底状態が自由状態から自縄自縛状態へ不連続的に変化すること (これを自縄自縛現象と呼ぶ) を主張した。有効質量、平均フォノン数、スペクトル密度の結合定数依存性を調べた結果、フレーリッヒ・ポーラロンでは自縄自縛現象が起こらないことが判明した。
- (5) 強結合領域では緩和励起状態と呼ばれる励起状態が存在してこの励起状態に対応するピークが光吸収スペクトルに現れると Kartheuser *et al.*[4] は主張した。しかしスペクトル密度の結合定数依存性を調べた結果、緩和励起状態は存在しないことが判明した。

図 4 に中間結合・強結合領域のスペクトル密度 $g_{k=0}(\omega)$ を示した。(基底状態のエネルギーを $\omega = 0$ にとり、基底状態に対応する δ 関数的なピークは $\alpha = 8$ の場合のみ示した。)

謝辞

本研究に関して有益な議論をして下さった永長 直人教授に感謝いたします。また、筆者に本研究に参加する機会を与えて下さった三人の共同研究者 A.S. Mishchenko 博士、N.V. Prokof'ev 博士、B.V. Svistunov 博士に感謝いたします。

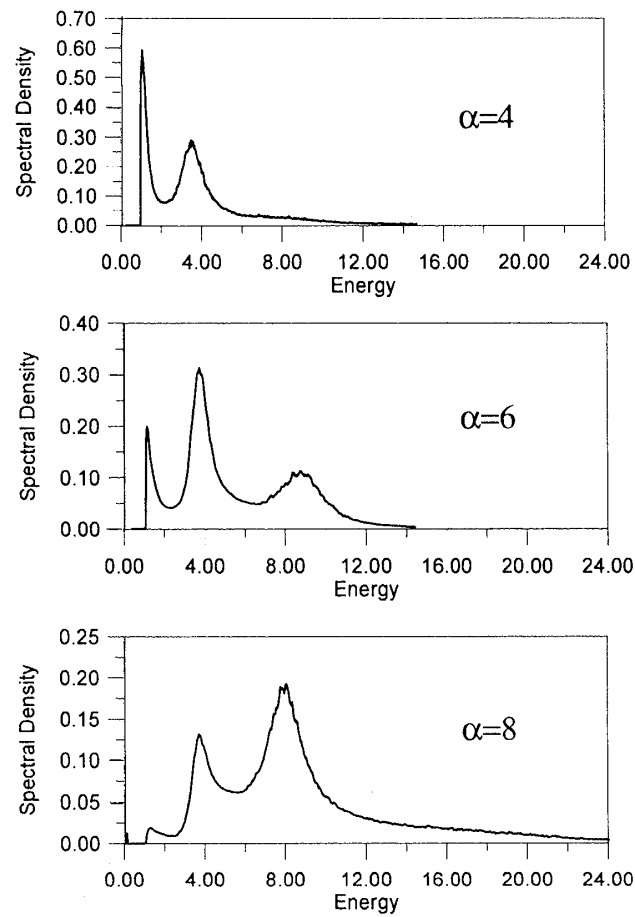


図 4: 中間結合・強結合領域のスペクトル密度

参考文献

- [1] A.S. Mishchenko, N.V. Prokof'ev, A. Sakamoto, and B.V. Svistunov, Phys. Rev. B, **62** (2000), 6317.
- [2] R.P. Feynman, Phys. Rev. **97** (1955), 660.
- [3] I.D. Feranchuk, S.I. Fisher, and L.I. Komarov, J. Phys. C **18** (1985), 5083.
- [4] E. Kartheuser, R. Evrard, and J. Devreese, Phys. Rev. Lett. **22** (1969), 94.