

第 13 章

経路積分法

本章では、経路積分法とその Monte Carlo (モンテカルロ) シミュレーションについて議論する。虚数時間の経路積分法から導入し、次いで実時間の経路積分に拡張する。その理由は、第 12 章の議論から円滑につながるからである。また、虚数時間経路積分は、実時間の場合とは異なり、量子干渉に起因する符号問題が生じず、Monte Carlo 法と相性が良い。

13.1 経路積分表示

Bloch 方程式 (12.9) において、変数を β から時間の次元を持つ $u = \beta\hbar$ に変換する。

$$\frac{\partial}{\partial u} \hat{\rho}(u) = -\frac{1}{\hbar} \hat{H} \hat{\rho}(u) \quad (13.1)$$

これは丁度、Schrödinger 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (13.2)$$

において、 $u = it$ と置いて時間を虚数化したものになっている。(このような虚時間表示を、**Euclid** (ユークリッド) 表示と呼ぶ。) 式 (13.1) の形式解は(あるいは、元の式 (12.8) によれば)

$$\hat{\rho}(u) = e^{-\hat{H}u/\hbar} \quad (13.3)$$

である。時間 u を $u = N\epsilon$ により N 個の微小時間 ϵ に分割すると、

$$\hat{\rho}(u) = e^{-\hat{H}\epsilon/\hbar} e^{-\hat{H}\epsilon/\hbar} \dots e^{-\hat{H}\epsilon/\hbar} = \hat{\rho}(\epsilon) \hat{\rho}(\epsilon) \dots \hat{\rho}(\epsilon) \quad (13.4)$$

と書ける. これを座標表示すると,

$$\begin{aligned}\rho(x, x'; u) &= \langle x | \hat{\rho}(u) | x' \rangle \\ &= \int \cdots \int \langle x | \hat{\rho}(\epsilon) | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | \hat{\rho}(\epsilon) | x_{N-2} \rangle \cdots \langle x_1 | \hat{\rho}(\epsilon) | x' \rangle dx_1 \cdots dx_{N-1} \\ &= \int \cdots \int \rho(x, x_{N-1}; \epsilon) \cdots \rho(x_1, x'; \epsilon) dx_1 \cdots dx_{N-1}\end{aligned}\tag{13.5}$$

となる. 左辺 $\rho(x, x'; u)$ を, 時間 u の間に x' から x へ発展する関数を表すものと解釈すると, 右辺は N 分割された時間に $x' \rightarrow x_1 \rightarrow \cdots \rightarrow x_{N-1} \rightarrow x$ の経路を取るものと見なせる. 中間座標 $x_1 \cdots x_{N-1}$ について積分するので, あらゆる離散的な経路についての総和を取っていることになる. $N \rightarrow \infty$ の極限を取れば, あらゆる滑らかな経路に関する総和あるいは積分になる. これを経路積分と呼び, 次式のように表記されることが多い.

$$\rho(x, x'; u) = \int_{x'(0)}^{x(u)} \mathcal{D}x \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S[x(u)]\right)\tag{13.6}$$

$S[x(u)]$ の内容については, これから以下で調べる.

まず, 式 (13.5) の因子の 1 つ, 例えば

$$\rho(x_2, x_1; \epsilon) = \langle x_2 | \hat{\rho}(\epsilon) | x_1 \rangle = \langle x_2 | e^{-\hat{H}\epsilon/\hbar} | x_1 \rangle\tag{13.7}$$

を考える. ハミルトニアン \hat{H} は

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\tag{13.8}$$

のように, 運動エネルギー部分 \hat{T} とポテンシャルエネルギー部分 \hat{V} に分けられるとする. 鈴木・Trotter (トロッター) 分解

$$e^{-\hat{H}\epsilon/\hbar} \simeq e^{-\hat{V}\epsilon/2\hbar} e^{-\hat{T}\epsilon/\hbar} e^{-\hat{V}\epsilon/2\hbar}\tag{13.9}$$

を用いると

$$\begin{aligned}\rho(x_2, x_1; \epsilon) &\simeq \langle x_2 | e^{-\hat{V}\epsilon/2\hbar} e^{-\hat{T}\epsilon/\hbar} e^{-\hat{V}\epsilon/2\hbar} | x_1 \rangle \\ &= e^{-V(x_2)\epsilon/2\hbar} \langle x_2 | e^{-\hat{T}\epsilon/\hbar} | x_1 \rangle e^{-V(x_1)\epsilon/2\hbar}\end{aligned}\tag{13.10}$$

と近似される. ここで, 中心部分 $\langle x_2 | e^{-\hat{T}\epsilon/\hbar} | x_1 \rangle$ は, 自由粒子の密度演算子の座標表示に他ならない. よって, β と u, ϵ の次元の違いに注意して, 式 (12.7) を用いれば,

$$\rho(x_2, x_1; \epsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m|x_2 - x_1|^2}{2\hbar\epsilon} - \frac{V(x_2) + V(x_1)}{2\hbar}\epsilon\right)\tag{13.11}$$

となる。

今、 $N \rightarrow \infty$ の極限では、 $\epsilon = u/N$ は十分小さく、 x は滑らかな経路を取るとするならば、

$$\frac{|x_2 - x_1|^2}{\epsilon} = \left| \frac{x_2 - x_1}{\epsilon} \right|^2 \epsilon \rightarrow |\dot{x}_1|^2 \epsilon \quad (13.12)$$

と書き換えて良いだろう。また、 x_1 と x_2 の中点を \bar{x}_1 として、

$$\frac{V(x_2) + V(x_1)}{2} \rightarrow V(\bar{x}_1) \quad (13.13)$$

と書くことにする。(これを中点処方と呼ぶ。) これらにより、

$$\rho(x_2, x_1; \epsilon) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \left(\frac{m}{2} |\dot{x}_1|^2 + V(\bar{x}_1) \right) \epsilon \right] \quad (13.14)$$

を得る。

式 (13.5) は、これと同様な微小時間の因子を経路に沿って掛け合わせたものだから、指数関数部分は

$$\exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^u \left(\frac{m}{2} |\dot{x}(\tau)|^2 + V(x(\tau)) \right) d\tau \right] \quad (13.15)$$

のように、経路に沿った時間積分に纏めることができる。この時間積分が、経路積分表示 (13.6) の $S[x(u)]$ 部分に相当する。前因子 $(m/2\pi\hbar\epsilon)^{3/2}$ は $\mathcal{D}x$ に含めるものとし、さらに $u = \beta\hbar$ により β を含む式に戻すと、

$$\rho(x, x') = \int_{x'(0)}^{x(\beta\hbar)} \mathcal{D}x \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left(\frac{m}{2} |\dot{x}(\tau)|^2 + V(x(\tau)) \right) d\tau \right] \quad (13.16)$$

が得られる。これが、熱平衡密度演算子の経路積分表示である。

13.2 実時間の経路積分

前節で $S[x(u)]$ に相当したのは、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和を経路に沿って時間積分したものであった。ところで、前節の冒頭で見たように、Bloch 方程式 (13.1) は、いわゆる虚時間 Schrödinger 方程式の形をしている。そこで、前節の議論で $u = it$ とすれば、実時間 Schrödinger 方程式の経路積分表示が得られそうである。実際には、

$$\psi(x, t) = \int dx' K(x, t; x', 0) \psi(x', 0) \quad (13.17)$$

あるいは、

$$\langle x | \psi(t) \rangle = \langle x | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi(0) \rangle = \int dx' \langle x | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | x' \rangle \langle x' | \psi(0) \rangle \quad (13.18)$$

すなわち

$$K(x, t; x', 0) = \langle x | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | x' \rangle \quad (13.19)$$

で定義される時間発展演算子 $K(x, t; x', 0)$ が $\rho(x, x')$ に対応し,

$$K(x, t; x', 0) = \int_{x'(0)}^{x(t)} \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right) \quad (13.20)$$

$$S[x(t)] = \int_0^t \left(\frac{m}{2} |\dot{x}(\tau)|^2 - V(x(\tau)) \right) d\tau \quad (13.21)$$

となる。これが、実時間の経路積分形式である。 $u = it$ の虚数対応関係により、ここでの $S[x(t)]$ は、Lagrange 関数の時間積分、すなわち式 (10.35) で見た作用積分になっている。

式 (13.20) は、振動する指数関数の積分であり、異なる経路は互いに干渉し得る。これが量子力学的な干渉効果を表す。(例えば、二重スリットを通過する電子線の干渉の記述が、典型的な応用例である*。) 式 (13.20) から分かるように、 \hbar が小さいとすると振動が激しくなり、経路間の打ち消し合いが顕著になる。すなわち、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限では、作用積分 $S[x(t)]$ が停留値となる経路、すなわち Euler-Lagrange 方程式 (10.37) を満たす古典軌道が最大の寄与をすることになる。このようにして、経路積分表示によれば、 $\hbar \rightarrow 0$ における古典力学との対応が直接見てとれる。

13.3 経路積分 Monte Carlo 法

統計力学で最も基本的な量である分配関数は、 $\rho(x, x')$ の対角要素から計算される。

$$Q = \text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}] = \int \rho(x, x) dx \quad (13.22)$$

これを経路積分表示すると、時間 $\beta\hbar$ で元の x に戻って来るような、閉じたループ状の経路になる。このとき、式 (13.5), (13.10), (13.11) の離散表示に立ち戻ると、 $e^{-V(x_n)\epsilon/2\hbar}$ の因子が隣同士で出るのみならず、両端からも同じ因子が 1 つずつ出て、結局全ての x_n ($n = 0, \dots, N-1$) について $e^{-V(x_n)\epsilon/\hbar}$ の因子が現れる[†]。(ここで、 $x_0 = x_N = x$ とする。)

よって、離散表示を残して書くならば、

$$Q = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{i=0}^{N-1} \int \frac{dx_i}{\Delta} \exp \left[-\beta \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{mN}{2\beta^2\hbar^2} |x_{i+1} - x_i|^2 + \frac{V(x_i)}{N} \right) \right] \right] \quad (13.23)$$

* R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill)

[†] よって、式 (13.13) の中点処方が必要でなくなる。

となる。ただし、 $\Delta = (2\pi\beta\hbar^2/mN)^{3/2}$ と置いた。

上の式 (13.23) は、バネ定数 $mN/\beta^2\hbar^2$ でリング状に繋がり、各粒子がポテンシャル $V(x)/N$ の下にあるような N 粒子系（リング状ビーズポリマー）の、温度 T における古典的分配関数の形をしている。このような系の古典的分配関数の計算は、Monte Carlo シミュレーションの得意とする所である。すなわち、1 粒子の量子力学的な分配関数の計算が、仮想的な N 粒子リングポリマーの古典的分配関数の計算に帰着される。このような手法を、経路積分 **Monte Carlo** 法という。

上のバネ定数は、古典極限 $\hbar \rightarrow 0$ または高温極限 $\beta \rightarrow 0$ で無限大となり、リングポリマーは 1 点に収縮してしまう。このとき、 Q は古典的な $Q = \int dx e^{-\beta V(x)}$ に帰着する。