

Thermo Quantum Dynamics in the Thermodynamic Limit ($N \rightarrow \infty$)

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

量子系を解析的に扱う一般的な方法である (S T変換¹⁻³⁾ に基づく) 量子転送行列法 (Q TM法)⁴⁻⁷⁾ を説明する。それをもとにして、「熱量子ダイナミクス」を定式化する。これは、従来の熱場のダイナミクス²⁰⁻²²⁾ と比較して極めて便利な定式化である。すなわち、これは二重ヒルバート空間を必要とせず、もとのヒルバート空間のみで記述できる。

2. 量子転送行列法

量子系を扱うのに便利な戦略は、S T-変換¹⁻³⁾ により一たん古典系にマップして、その変換された古典系にモンテカルロ法を適用すると量子モンテカルロ法が定式化される^{3, 8, 9)}。転送行列を適用すると量子転送行列法 (Q TM法) が定式化される^{5-7, 11-18)}。これらは、言わば、「手順の分離」という思想¹⁹⁾ に基づく戦略である。すなわち、指数積公式¹⁻³⁾ に基づいて、 d 次元量子系を $(d + 1)$ 次元古典系に変換する。³⁾ (どちらも短距離相互作用で表現される。) この変換は、通常 Suzuki-Trotter 変換 (S T変換) などと呼ばれている。例えば、1次元量子ハイゼンベルグ模型をS T変換すると2次元古典模型となる^{1-18, 48-60)}。トロッター軸の空間で転送行列⁴³⁻⁴⁷⁾ を定義すると、量子転送行列 \mathcal{T}_m が定義される^{1-7, 11-18)}。すなわち、ハミルトニアンが \mathcal{H} で記述される系の状態和 $Z(\beta)$ は

$$Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} = \lim_{m \rightarrow \infty} Z_m(\beta); Z_m(\beta) = \text{Tr} \mathcal{T}_m^N. \quad (2.1)$$

と表される。ここで、 m と N の極限の交換定理^{5, 6)} を用いると、1格子点当たりの自由エネルギーは次式に比例する：

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z(\beta) = \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_m(\beta) \quad (2.2)$$

ここで、量子転送行列の τ_m 最大固有値を $\lambda^{(m)}$ 、第2最大固有値を $\lambda^{(m)}$ とし、それ以下の固有値を順次、とすると、状態和は

$$Z_m(\beta) = [\lambda_{\max}^{(m)}]^N \left[1 + \sum_{i=2} \left(\frac{\lambda_i^{(m)}}{\lambda_{\max}^{(m)}} \right)^N \right]. \quad (2.3)$$

と表される。したがって、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_m(\beta) = \log \lambda_{\max}^{(m)}. \quad (2.4)$$

となる。また、相転移の問題²⁴⁻²⁷⁾ で基本的な相関距離 ξ は

$$\xi^{-1} = \lim_{m \rightarrow \infty} \log(\lambda_{\max}^{(m)} / \lambda_2^{(m)}), \quad (2.5)$$

と表される。これらの公式は非常に有効に利用されている。^{6, 7, 11-18, 48-60)}

3. 熱量子ダイナミクス

この量子転送行列を用いると、熱力学的極限 ($N \rightarrow \infty$) では、‘局所的’な演算子 Q の熱平均 $\langle Q \rangle$ は、 \mathcal{T}_m の最大固有値に対応する固有状態 $|\Psi_m(\beta)\rangle$ を用いて

$$\langle Q \rangle = \lim_{m \rightarrow \infty} \langle \Psi_m(\beta) | Q | \Psi_m(\beta) \rangle \quad (3.1)$$

と表される。これは、次のようにして導かれる。今、 \mathcal{T}_m の固有状態を一般に $|\Psi_i\rangle$ ($i = \max, 2, \dots$) とおくと、

$$\begin{aligned} \text{Tr } Q \mathcal{T}_m^N &= \sum_i \langle \Psi_i | Q \mathcal{T}_m^N | \Psi_i \rangle \\ &= \sum_i [\lambda_i^{(m)}]^N \langle \Psi_i | Q | \Psi_i \rangle \\ &= [\lambda_{\max}^{(m)}]^N [\langle \Psi_1 | Q | \Psi_1 \rangle + \sum_{i=2} (\lambda_i^{(m)} / \lambda_{\max}^{(m)}) \langle \Psi_i | Q | \Psi_i \rangle]. \end{aligned} \quad (3.2)$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle &= \lim_{m \rightarrow \infty} (\text{Tr } Q \mathcal{T}_m^N / \text{Tr } \mathcal{T}_m^N) \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \langle \Psi_1 | Q | \Psi_1 \rangle = \lim_{m \rightarrow \infty} \langle \Psi_m(\beta) | Q | \Psi_m(\beta) \rangle. \end{aligned} \quad (3.3)$$

となり、(3.1) が導かれる。この定式化を“熱量子ダイナミクス”と呼ぶことにする⁴²⁾。この定式化の利点は、もとのヒルバート空間のみで議論できることである。この点が熱場ダイナミクスと大きく異なるところである。

この他にも、量子電送行列の定義にはいろいろな方法がある。(M. S., J. Stat. Phys. (2000) special issue to celebrate the 70th birthday of Professor M. E. Fisher.)

4. S T変換と高次指数積公式

指数積公式を用いて量子系を古典系に変換する (S T変換する) 場合、その目的が解析的な議論のためではなく、数値計算にあるときは、同じ Trotter 数 m に対して出来る限り精度の高い分解公式を用いると都合がよい。著者²⁸⁻⁴¹⁾によって任意の次数の指数積公式が漸化式の方法で導かれている。

5. まとめ

ここで説明した方法は、1次元トランスバース・イジング模型、XY模型⁶¹⁻⁶⁵⁾およびハイゼンベルグ模型⁴⁸⁻⁵⁹⁾等に有効に応用されている。また、転送行列の収束性の問題は、Arakiの方法⁶⁶⁾を用いて議論することが可能である。

参考文献

1. M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn., **21** (1966) 2274. See also
H. F. Trotter, Proc. Am. Math. Soc., **10** (1959) 545.
2. M. Suzuki, Commun. Math. Phys., **51** (1976) 183.
3. M. Suzuki, Prog. Theor. Phys., **56** (1976) 1454.
4. M. Suzuki, suggested in the symposium on computer experiments held on the 11th
day of October, 1983, at Okayama University.
5. M. Suzuki, Phys. Rev., **B 31** (1985) 2957.
6. M. Suzuki and M. Inoue, Prog.Theor.Phys., **78** (1987) 787.
7. M. Inoue and M. Suzuki, Prog.Theor.Phys., **79** (1988) 645.
8. M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, Prog.Theor.Phys., **58** (1977) 1377.
9. M. Suzuki, J. Stat. Phys., **43** (1986) 883.
10. M. Suzuki (ed.), *Quantum Monte Carlo Methods in Condensed Matter Physics*,
World Scientific (Singapore, 1993).
11. H. Betsuyaku, Prog.Theor.Phys., **73** (1985) 319; **75** (1986) 774, 808.
12. T. Tsuzuki, Prog. Theor. Phys., **73** (1985) 1352.
13. H. Betsuyaku and T. Yokota, Prog. Theor. Phys., **75** (1986) 808.
14. K. Kubo and Takada, J. Phys. Soc. Jpn., **55** (1986) 438.
15. T. Koma, Prog. Theor. Phys., **71** (1993) 269.
16. K. Kubo, Phys. Rev., **B46** (1992) 866.
17. T. Delica, K. Kopinga, H. Leschke and K. K. Mon, Europhys. Lett., **15** (1991) 55.
18. N. Hatano and M. Suzuki, Prog. Theor. Phys., **85** (1991) 481.
19. M. Suzuki, J. Stat. Phys., **49** (1987) 977.
20. H. Umezawa, H. Matsumoto and M. Tachiki, *Thermo Field Dynamics and
condensed States* (North-Holland, Amsterdam, 1982) and references cited therein.
21. M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn., **54** (1985) 4483.
22. M. Suzuki, Phys. Lett., **111A** (1985) 440.
23. O. Bratteli and D. W. Robinson, *Operator algebra and quantum statistical
mechanics* (Springer, 1979).
24. M. E. Fisher, Rept. Prog. Phys., **30** (1968) 615.
25. C. Domb and M. S. Green (eds.), *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vols.

- 1-6 (Academic Press, 1972-76) ; C. Domb and J. L. Lebowitz (eds.), Vols.7-
(1983-).
26. D. I. Uzunov, *Introduction to the Theory of Critical Phenomena --- Mean-field, Fluctuations and Renormalization* (World Scientific, 1993).
27. M. Suzuki, X. Hu, M. Katori, A. Lipowski, N. Hatano, K. Minami and Y. Nonomura, *Coherent Anomaly Method Mean Field, Fluctuations and Systematics* (World Scientific, 1995).
28. M. Suzuki, Phys. Lett., A **146** (1990) 319; **165** (1992) 387.
29. M. Suzuki, J. Math. Phys., **32** (1991) 400.
30. M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn., **61** (1992) 3015.
31. M. Suzuki, Physica, A **191** (1992) 501.
32. M. Suzuki, T. Yamauchi, J. Math. Phys., **34** (1993) 4892.
33. M. Suzuki, Proc. Jpn. Acad., **69**, Ser. B (1993) 161.
34. M. Suzuki, Commun. Math. Phys., **163** (1994) 491.
35. M. Suzuki, Physica, A **205** (1994) 65; and references therein.
36. H. Yoshida, Phys. Lett., A **150** (1990) 262.
37. H. deRaedt, K. Michielsen, Comput. Phys., **8** (1994) 600;
Ann. Physik, **4** (1995) 679.
38. M. Suzuki, Commun. Math. Phys., **183** (1997) 339.
39. M. Suzuki, J. Math. Phys., **38** (1997) 1183.
40. M. Suzuki, Phys. Lett., A **224** (1997) 337.
41. There are about two hundred references on the applications,
which will be listed elsewhere.
42. More details of thermo quantum dynamics will be reported in J. Stat. Phys.
(2002).
43. H. A. Kramers and G. H. Wannier, Phys. Rev., **60** (1941) 252.
44. R. Kubo, Busseiron Kenkyu, **1** (1943) 1.
45. E. W. Montroll, J. Chem. Phys., **9** (1941) 706; **10** (1942) 61.
46. E. N. Lassetre and J. P. Howe, J. Chem. Phys., **9** (1941) 747.
47. L. Onsager, Phys. Rev., **65** (1944) 117.
48. J. Suzuki, Y. Akutsu and M. Wadati, J. Phys. Soc. Jpn., **59** (1990) 2667.

49. J. Suzuki, T. Nagao and M. Wadati, *Int. J. Mod. Phys.*, **B 6** (1992) 1119-1180.
50. 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.
51. M. Takahashi, *Phys. Rev.*, **B 43** (1991) 5788.
52. H. Mizuta, T. Nagao and M. Wadati, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **63** (1994) 3951.
53. A. Klümper, *Z. Phys.*, **B 91** (1993) 507.
54. A. Klümper, *Eur. Phys. J.*, **B 5** (1998) 677.
55. G. Jüttner and A. Klümper, *Euro. Phys. Lett.*, **37** (1997) 335.
56. G. Jüttner, A. Klümper and J. Suzuki, *Nucl. Phys.*, **B 487** (1997) 650.
57. G. Jüttner, A. Klümper and J. Suzuki, *J. Phys.*, **A 30** (1997) 1881.
58. Kuniba, T. Nakanishi and J. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys.*, **A 9** (1994) 5215.
59. A. Kuniba, K. Sakai and J. Suzuki, *Nucl. Phys.*, **B525** [FS] (1998) 597.
60. Y. Umeno, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **70** (2001) 531 and references cited therein.
61. R. Blinc, *J. Phys. Chem. Solids*, **13** (1960) 204.
62. P. G. de Gennes, *Solid State Comm.*, **1** (1963) 1963.
63. S. Katsura, *Phys. Rev.*, **127** (1962) 1508.
64. P. Pfeuty, *Ann. Phys.*, **57** (1970) 79.
65. B. K. Chakrabarti, A. Dutta and P. Sen, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models*, and references cited therein.
66. H. Araki, *Commun. math. Phys.*, **14** (1969) 120.