統計力学II

量子モンテカルロ法

量子系で ϕ_k は $\mathcal{H}|\phi_k|\rangle = \epsilon_k|\phi_k|\rangle$ を満たすとする。

$$w_{j\to i}P_{eq}(j) = w_{i\to j}P_{eq}(i) \quad \text{(詳細釣り合いの式)}$$

ここで

$$\begin{aligned}P_{eq}(i) &= \langle i|e^{-\beta\mathcal{H}}|i\rangle/Z \\ &= \sum_k |\langle i|\phi_k|\rangle|^2 e^{-\beta\epsilon_k}\end{aligned}$$

しかし状態数 i は多いため、P_{eq} はすべての状態に対しては計算不能である。
例として横磁場 Ising model をとる

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i^z\sigma_j^z - \Gamma\sum\sigma^x$$

ここで $A = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i^z\sigma_j^z, B = -\Gamma\sum\sigma^x$ とすると

$$\begin{aligned}\langle i|e^{-\beta\mathcal{H}}|i\rangle &= \langle i|e^{-\beta(A+B)}|i\rangle \\ &= \lim_{n\to\infty}\langle i|(e^{-\beta A/n}e^{-\beta B/n})^n|i\rangle \\ &= \lim_{n\to\infty}\langle i|e^{-\beta A/n}e^{-\beta B/n}e^{-\beta A/n}\dots e^{-\beta A/n}e^{-\beta B/n}|i\rangle\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}&\langle i|e^{-\beta A/n}e^{-\beta B/n}e^{-\beta A/n}\dots e^{-\beta A/n}e^{-\beta B/n}|i\rangle \\ =&\sum_{j_1,\dots,j_{2n-1}=\pm1}\langle i|e^{-\beta A/n}|j_1\rangle\langle j_1|e^{-\beta B/n}|j_2\rangle\dots\langle j_{2n-1}|e^{-\beta B/n}|i\rangle \\ =&\sum_{j_{2k}=\pm1}\langle i|e^{-\beta A/n}|i\rangle\langle i|e^{-\beta B/n}|j_2\rangle\dots\langle j_{2n-2}|e^{-\beta B/n}|i\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle i|e^{\frac{\beta\gamma}{n}\sum_l\sigma_l^x}|j\rangle &= \prod_l\langle\sigma_i^l|e^{\frac{\beta\gamma}{n}\sigma_l^x}|\sigma_j^l\rangle \\ &= \prod_l\langle\sigma_i^l|\cosh(\frac{\beta\gamma}{n}) + \sigma_l^x\sinh(\frac{\beta\gamma}{n})|\sigma_j^l\rangle \\ &= \prod_l Ae^{K_\perp\sigma_i^l\sigma_j^l}\end{aligned}$$

ここで $A = \sqrt{\cosh\frac{\beta\Gamma}{n}\sinh\frac{\beta\Gamma}{n}}, K_\perp = -\frac{1}{2}\ln[\tanh\frac{\beta\Gamma}{n}] > 0$
よって横磁場 Ising は

$$\langle i|e^{-\beta\mathcal{H}}|i\rangle \propto e^{\sum_{xy}K_\parallel\sigma_{xy}\sigma_{x+1y}+K_\perp\sigma_{xy}\sigma_{xy+1}}$$

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{xy}K_\parallel\sigma_{xy}\sigma_{x+1y} + K_\perp\sigma_{xy}\sigma_{xy+1}$$

となる Ising の古典モンテカルロ法に対応する。
一般に D 次元量子系は (D+1) 次元の古典系と対応する