Physics Lab. 2024 統計物理班 中柴柊馬

経路積分と統計力学

1 解析力学ミニマム

作用とラグランジアン

多くの物理理論は「作用が最小になる運動を実現せよ」という指導原理 (**最小作用の原理**) に基づいて定式化されます。作用とは対称性等の系の本質的な情報を取り入れたスカラー量です。系の作用が、座標変数 $q(t)$ とその時間微分の関数を用いて

$$S = \int L(q, \dot{q}; t)\, dt$$

という積分で書かれるとき、この被積分関数を**ラグランジアン**と呼びます。

ハミルトニアンと正準形式

ラグランジアンから $p := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ によって変数 p を導入し、ここから**ハミルトニアン**という量を

$$H(q, p) = p\dot{q} - L$$

と定義します。これは系の力学的エネルギーを表す量です。変数の組 (q, p) を**正準変数**、また正準変数の住む空間を**相空間**と言います。
正準変数の時間発展は

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p},\ \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (i = 1, \cdots, N)$$

と書けます。より一般の量 $F(q, p)$ に対しては **Poisson 括弧**という二項演算

$$\{A, B\}_P \equiv \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$$

を用いて以下のように書けます。

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} \tag{1}$$

2 量子論ミニマム

正準量子化と量子状態

(1) 式の Poisson 括弧を演算子同士の**交換関係**: $[A, B] = AB - BA$ の $1/i\hbar$ 倍に置き換えると、古典力学は量子論に移行します。
量子論では物理量を「状態」に作用する演算子として表します。ハミルトニアンは系のエネルギーの演算子です。
ある時刻での位置演算子の固有状態 $|x\rangle$ は、時間 t 経過後に $|x, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|x\rangle$ へと時間発展します。

遷移振幅と経路積分

初期時刻 t_i における位置の固有状態 $|x_i, t_f\rangle$ が時間発展で $|x_f, t_f\rangle$ へと遷移する確率 (**遷移振幅**)$\langle x_f, t_f | x_i, t_i\rangle$ は

$$\int \prod_{j=1}^{N} dx_j \langle x_{j+1}, t_{j+1} | x_j, t_j\rangle \langle x_1, t_1 | x_i, t_i\rangle \tag{2}$$

と書け ($t_{j+1} = t_j + \Delta t, f = N+1$)、これはある経路に沿った微小な遷移

$$\langle x_{j+1}, t_{j+1} | x_j, t_j\rangle = \langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} | x_j\rangle \tag{3}$$

の積み重ねを、始点と終点を固定した全ての途中経路に関して足し合わせたもの (**経路積分**) です。(2) 式の積は

$$((2)\text{ 式}) \propto \int \prod_{j=1}^{N} dx_j \exp\left(i \sum_{j=1}^{n} L(x_j, \dot{x}_j)\Delta t \right)$$

と書け、指数関数の中身は $N \to \infty$ で ($i \times$ 作用) になります。和に最も寄与する経路は、exp の中身すなわち作用が停留値を取るものです。

3 統計力学ミニマム

平衡状態

1 つの**マクロ状態** (熱力学量で指定される状態) に対して、異なった**ミクロ状態** (全ての粒子の力学変数で指定される状態) が無数に対応します。**平衡状態**とは「対応するミクロ状態の数が突出して多いマクロ状態」であり、孤立した系が長時間経過すると必ず行き着く状態です。

カノニカル分布

エネルギー E_i の平衡状態を与えるミクロ状態の実現確率は**カノニカル分布**

$$p_i = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) = \frac{1}{Z}e^{-\beta E_i}$$

に従います ($\beta = \frac{1}{k_B T}$ は**逆温度**)。規格化因子 Z は**分配関数**と呼ばれ、実現可能なあらゆるミクロ状態に関する重みを足し合わせた量です。
量子論ではこの Z は演算子 $\hat{H}$ の対角和で書けます ($|x\rangle$ は位置の固有状態):

$$Z = \mathrm{tr}[e^{-\beta\hat{H}}] = \sum_x \langle x | e^{-\beta\hat{H}} | x\rangle\ . \tag{4}$$

4 経路積分と統計力学

虚時間形式

(3) 式と分配関数の表式 (4) を見比べると、$\frac{it}{\hbar}$ を β に置き換えれば両者はよく似た形になります。よって、温度を虚数の時間パラメータと見做し、分配関数の和を「虚時間」β だけ発展させた時の遷移振幅として書くことができます。これを**虚時間形式**といいます。

分配関数の経路積分表示

「虚時間発展」に β の周期性を持たせる事で始状態と終状態を同じに取れれば、分配関数の対角和は経路積分表式

$$Z = \sum_Q \int_{q(0)=q(\beta)=Q} \mathcal{D}q \exp\left(-\int_0^\beta H d\tau \right)$$

で書かれます[*1]。H は虚時間 τ でパラメータ付けられた正準変数を引数に持ちます。ハミルトニアンの対角和が厳密に計算できない系に対して近似的に (摂動的に) 分配関数を求める時にこの表示が有効になります。

[*1] 記号 $\mathcal{D}q$ は「虚時間 $\tau = 0$ と $\tau = \beta$ における座標変数の値が一致するような全ての経路に関する和」を表します。