

放射光科学理論

経路積分型光電子分光理論に於けるフェルミオン負符号問題

産総研 RICS、山形大学理^A、KEK 物構研^B、西岡 圭太、富田 憲一^A、那須 奎一郎^B

経路積分法とは、二体力で相互作用している量子多体系を、時空間で変動する古典的場を導入して一体問題に還元し、代わりに、この古典場の可能な時空間の配位についてすべての和をとることである。実際の経路積分では、統計的に重要な重率(ボルツマン因子)のみの有限和で近似することが不可欠であり、この為時空に依存した経路上で、この重率が「非負定値性」を持つことが大前提である。しかし、Half-filled の電子系や、電子・フォノン結合のみの系など、特別な問題を除外すると、ごく一般の多フェルミオン系では、与えられた一本の時空に依存した経路上で、このボルツマン因子が常に非負定値性をみたすことはない。

非負定値性を必ず持つような変分法も考えられる。しかし、光電子分光や光吸収のように、基底状態のみを求めるのではなく、基底状態とそこから数 eV 上にある励起状態も含めてスペクトル形状を正確に決定しなければいけない場合、変分法は不適切である。

そこで、我々は時間軸を二分して時空を二つに分け、相互に対称(共役)で非負定値性が必ず満たされている経路のみを用いて、メトロポリス法により経路を発生させた。二分はしても、実際の物理用の期待値の計算には、当然非対称(非共役)な経路も必要であるから、これはモンテ・カルロ手続きの非マルコフ性として、過去から現在まで完全に計算に取り入れた。

つまり、対称経路によりメトロポリス法で N 個の経路を発生させ、これに平行して、 $N \times (N-1)/2$ 個の経路を非負定値な経路間の量子力学的干渉(非対角)項として計算するのである。非対角(干渉)項の正負を議論することは元来無意味である。

実際の計算は、100 個以下の電子ナノ・クラスターを設定し、数千万個の時空間経路を使い、100 回程度の焼入れと、焼入れと焼入れとの間の量子力学的干渉項も含め、過去の経路の記録を保持しつつ(非マルコフで)行った。試しに、既存の方法でも計算できる場合を例にとって計算し比較してみると両者はよく一致した。