

Real-time Feynman path integral with Picard–Lefschetz theory and its applications to quantum tunneling

小池 貴之

東京大学

July 17, 2014

ArXiv/1406.2386,
collaborator: 谷崎佑弥 (Tokyo, Nishina Center, RIKEN)

目次

- 1 Motivation
- 2 Lefschetz-thimble path integral
 - Zero-dimensional analogue of real-time path integral
 - Lefschetz-thimble path integral
 - Some examples
- 3 Quantum tunneling by Lefschetz-thimble path integral
- 4 Summary

1. Motivation

Motivation

- (real-time) path integral

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

を考えたい.

Motivation

- (real-time) path integral

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

を考えたい.

- しかしこれは振動積分となり, 収束に関して問題がある.

Motivation

- (real-time) path integral

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

を考えたい.

- しかしこれは振動積分となり, 収束に関して問題がある.
- そのため, 定式化や quantum Monte Carlo simulation には問題がつきまとう.

問題 1

(real-time) path integral

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

は, 測度論的に定式化できるか?

問題 1

(real-time) path integral

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

は, 測度論的に定式化できるか?

- Wick rotation による変数変換なども有効だが, ここでは直接 real-time のままでの定式化を考えたい.

問題 1

(real-time) path integral

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

は, 測度論的に定式化できるか?

- Wick rotation による変数変換なども有効だが, ここでは直接 real-time のままでの定式化を考えたい.
- E. Witten (ArXiv/1001.2933) のアイデアに基づき, Lefschetz-thimble path integral を考える.

Lefschetz-thimble path integral を用いて double-well potential を考察することで, 次を考えたい.

Lefschetz-thimble path integral を用いて double-well potential を考察することで, 次を考えたい.

問題 2

Quantum tunneling を, *Lefschetz-thimble path integral* を介して *semi-classical* に記述せよ.

2. Lefschetz-thimble path integral

Lefschetz-thimble path integral とは?

- Picard–Lefschetz theory (=複素版の Morse theory) を応用することで, 適切な積分サイクル $\sum_{\sigma} n_{\sigma} \mathcal{J}_{\sigma}$ の選択を行い,

$$\int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar := \sum_{\sigma} n_{\sigma} \int_{\mathcal{J}_{\sigma}} \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

と定義する.

Lefschetz-thimble path integral とは?

- Picard–Lefschetz theory (=複素版の Morse theory) を応用することで, 適切な積分サイクル $\sum_{\sigma} n_{\sigma} \mathcal{J}_{\sigma}$ の選択を行い,

$$\int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar := \sum_{\sigma} n_{\sigma} \int_{\mathcal{J}_{\sigma}} \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

と定義する.

- 各 \mathcal{J}_{σ} 上での積分は, 収束するように選ぶ.

Lefschetz-thimble path integral とは?

- Picard–Lefschetz theory (=複素版の Morse theory) を応用することで, 適切な積分サイクル $\sum_{\sigma} n_{\sigma} \mathcal{J}_{\sigma}$ の選択を行い,

$$\int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar := \sum_{\sigma} n_{\sigma} \int_{\mathcal{J}_{\sigma}} \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

と定義する.

- 各 \mathcal{J}_{σ} 上での積分は, 収束するように選ぶ.
- 適切な $\sum_{\sigma} n_{\sigma} \mathcal{J}_{\sigma}$ を選ぶために, 空間を複素化して考える必要がある.

Zero-dimensional analogue of real-time path integral

- まずは簡単な例で, どのように積分サイクルの選択を行うのかについて述べる.

Zero-dimensional analogue of real-time path integral

- まずは簡単な例で, どのように積分サイクルの選択を行うのかについて述べる.
- 例として, 次を考える.

Zero-dimensional analogue of real-time path integral

- まずは簡単な例で, どのように積分サイクルの選択を行うのかについて述べる.
- 例として, 次を考える.

問題 3 (Airy function)

$$Ai(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp i \left(\frac{x^3}{3} + \lambda x \right)$$

を定式化せよ.

Airy function の性質 (1)

- Lebesgue の意味では, この積分は意味をなさない.

Airy function の性質 (1)

- Lebesgue の意味では, この積分は意味をなさない.
- 一方で, Airy integral

$$Ai(\lambda) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dx \exp(i - \varepsilon \operatorname{sign}(x)) \left(\frac{x^3}{3} + \lambda x \right)$$

としては意味を持つ.

Airy function の性質 (1)

- Lebesgue の意味では, この積分は意味をなさない.
- 一方で, Airy integral

$$Ai(\lambda) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} dx \exp(i - \varepsilon \operatorname{sign}(x)) \left(\frac{x^3}{3} + \lambda x \right)$$

としては意味を持つ.

- しかしここでは, 積分サイクルを取り替えるという観点から, Airy function の定式化を行いたい.

Airy function の性質 (2)

- 被積分関数を複素平面上で考えると, 上図灰色の場所では “収束が良い”.
- 実際, 青線に沿って被積分関数 $\exp i(x^3/3 + \lambda x)$ は 0 へ収束.
- 積分サイクルは \mathcal{J}_1 又は $\mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_3$ が適切に見える.

厳密には積分サイクルをどう選ぶか

前スライドの \mathcal{J}_1 又は $\mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_3$ のような “良い積分サイクル” の選び方を考えたい. 正確には, 以下のような \mathbb{C} のサイクル $\sum n_\sigma \mathcal{J}_\sigma$ をどう選ぶかを考えたい.

厳密には積分サイクルをどう選ぶか

前スライドの \mathcal{J}_1 又は $\mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_3$ のような “良い積分サイクル” の選び方を考えたい. 正確には, 以下のような \mathbb{C} のサイクル $\sum n_\sigma \mathcal{J}_\sigma$ をどう選ぶかを考えたい.

- サイクルとして (=相対ホモロジーの元として) 元のサイクル $\mathbb{R} \subset \mathbb{C}$ と等しい.

厳密には積分サイクルをどう選ぶか

前スライドの \mathcal{J}_1 又は $\mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_3$ のような “良い積分サイクル” の選び方を考えたい. 正確には, 以下のような \mathbb{C} のサイクル $\sum n_\sigma \mathcal{J}_\sigma$ をどう選ぶかを考えたい.

- サイクルとして (=相対ホモロジーの元として) 元のサイクル $\mathbb{R} \subset \mathbb{C}$ と等しい.
- 各 \mathcal{J}_σ 上 $\exp i(x^3/3 + \lambda x)$ は可積分.

厳密には積分サイクルをどう選ぶか

前スライドの \mathcal{J}_1 又は $\mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_3$ のような “良い積分サイクル” の選び方を考えたい. 正確には, 以下のような \mathbb{C} のサイクル $\sum n_\sigma \mathcal{J}_\sigma$ をどう選ぶかを考えたい.

- サイクルとして (=相対ホモロジーの元として) 元のサイクル $\mathbb{R} \subset \mathbb{C}$ と等しい.
- 各 \mathcal{J}_σ 上 $\exp i(x^3/3 + \lambda x)$ は可積分.

Picard–Lefschetz theory を用いることで, このようなサイクルを選ぶことが出来る (E. Witten ArXiv/1001.2933).

Picard–Lefschetz theory

- ここで言う Picard–Lefschetz theory は複素版の Morse theory, つまり多様体から \mathbb{R} への “高さ関数” の臨界点の情報から, もとの多様体の性質を調べる技術を指す.

Picard–Lefschetz theory

- ここで言う Picard–Lefschetz theory は複素版の Morse theory, つまり多様体から \mathbb{R} への “高さ関数” の臨界点の情報から, もとの多様体の性質を調べる技術を指す.
- Airy function の例では, 多様体として \mathbb{C} , 高さ関数として $\mathcal{I}(x) := i(x^3/3 + \lambda x)$ の実部 $\text{Re}(\mathcal{I}): \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{R}$ を考える.

Picard–Lefschetz theory

- ここで言う Picard–Lefschetz theory は複素版の Morse theory, つまり多様体から \mathbb{R} への “高さ関数” の臨界点の情報から, もとの多様体の性質を調べる技術を指す.
- Airy function の例では, 多様体として \mathbb{C} , 高さ関数として $\mathcal{I}(x) := i(x^3/3 + \lambda x)$ の実部 $\text{Re}(\mathcal{I}): \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{R}$ を考える.
- このように, 正則関数の実部であるような高さ関数は, 次スライドで述べるように, 特別な性質を持つ.

Lemma 1 (Complex Morse Lemma の系)

f を n 次元複素多様体上の正則関数として, *morse* である (i.e. 各臨界点が非退化である) ものとする. このとき, 各臨界点 p 周りでうまく局所座標 $(x_1, x_2, \dots, x_n, y_1, y_2, \dots, y_n)$ を選ぶことで,

$$p = (0, 0, \dots, 0), \quad p \text{ まわりで } \operatorname{Re}(f) = \sum_{j=1}^n (x_j^2 - y_j^2)$$

と書ける.

Lemma 1 (Complex Morse Lemma の系)

f を n 次元複素多様体上の正則関数として, *morse* である (i.e. 各臨界点が非退化である) ものとする. このとき, 各臨界点 p 周りでうまく局所座標 $(x_1, x_2, \dots, x_n, y_1, y_2, \dots, y_n)$ を選ぶことで,

$$p = (0, 0, \dots, 0), \quad p \text{ まわりで } \operatorname{Re}(f) = \sum_{j=1}^n (x_j^2 - y_j^2)$$

と書ける.

特に, 高さ関数 $\operatorname{Re}(I)$ についての \mathbb{C} の臨界点は, 全て鞍点となっていることが分かる.

upward/downward flow

- \mathcal{I} の各臨界点 x_σ に対し, x_σ での $\text{Re}(\mathcal{I})$ の upward flow, つまり始点を x_σ とする曲線 $c = (c_j)_j$ であって

$$\frac{dc_j(t)}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \text{Re}(\mathcal{I})$$

を満たすようなものを考える.

upward/downward flow

- \mathcal{I} の各臨界点 x_σ に対し, x_σ での $\text{Re}(\mathcal{I})$ の upward flow, つまり始点を x_σ とする曲線 $c = (c_j)_j$ であって

$$\frac{dc_j(t)}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \text{Re}(\mathcal{I})$$

を満たすようなものを考える.

- 集合 \mathcal{K}_σ で, upward flow の終点となり得る点全体の集合を表す.

upward/downward flow

- \mathcal{I} の各臨界点 x_σ に対し, x_σ での $\text{Re}(\mathcal{I})$ の upward flow, つまり始点を x_σ とする曲線 $c = (c_j)_j$ であって

$$\frac{dc_j(t)}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \text{Re}(\mathcal{I})$$

を満たすようなものを考える.

- 集合 \mathcal{K}_σ で, upward flow の終点となり得る点全体の集合を表す.
- 集合 \mathcal{J}_σ で, downward flow の終点となり得る点全体の集合を表す.

upward/downward flow の例

Figure 1: $\lambda = i$ での, 高さ関数 $\text{Re}(\mathcal{I})$ の等高線

Figure 2: $\lambda = i$ での, 各臨界点での upward/downward flow

Airy function の定式化

- 二つ前のスライドの補題から, n 次元複素多様体上の正則 morse 関数 f に対し, morse 関数 $\operatorname{Re}(f)$ の各臨界点 x_σ に対して定義される集合 $\mathcal{K}_\sigma, \mathcal{J}_\sigma$ は, ともに実 n 次元のサイクルであることが分かる (従って $\lambda = i$ で $\mathcal{K}_\sigma, \mathcal{J}_\sigma$ が常に曲線となっていたのは偶然ではない).

Airy function の定式化

- 二つ前のスライドの補題から, n 次元複素多様体上の正則 morse 関数 f に対し, morse 関数 $\operatorname{Re}(f)$ の各臨界点 x_σ に対して定義される集合 $\mathcal{K}_\sigma, \mathcal{J}_\sigma$ は, ともに実 n 次元のサイクルであることが分かる (従って $\lambda = i$ で $\mathcal{K}_\sigma, \mathcal{J}_\sigma$ が常に曲線となっていたのは偶然ではない).
- $n_\sigma := \langle \mathcal{K}_\sigma, \mathbb{R} \rangle$ とすると, $\sum_\sigma n_\sigma \mathcal{J}_\sigma$ は (相対ホモロジーの元として) \mathbb{R} と同じ積分サイクルと見なせる.

Airy function の定式化

- 二つ前のスライドの補題から, n 次元複素多様体上の正則 morse 関数 f に対し, morse 関数 $\operatorname{Re}(f)$ の各臨界点 x_σ に対して定義される集合 $\mathcal{K}_\sigma, \mathcal{J}_\sigma$ は, ともに実 n 次元のサイクルであることが分かる (従って $\lambda = i$ で $\mathcal{K}_\sigma, \mathcal{J}_\sigma$ が常に曲線となっていたのは偶然ではない).
- $n_\sigma := \langle \mathcal{K}_\sigma, \mathbb{R} \rangle$ とすると, $\sum_\sigma n_\sigma \mathcal{J}_\sigma$ は (相対ホモロジーの元として) \mathbb{R} と同じ積分サイクルと見なせる.
- \mathcal{J}_σ 上 $\operatorname{Im}(\mathcal{I})$ の値が一定であることに注意すると, 明らかに \mathcal{J}_σ 上 $\exp \mathcal{I}$ は可積分である.

以上から Airy function は,

$$\begin{aligned} Ai(\lambda) &:= \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma} n_{\sigma} \int_{\mathcal{J}_{\sigma}} dx \exp i \left(\frac{x^3}{3} + \lambda x \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma} \langle \mathcal{K}_{\sigma}, \mathbb{R} \rangle e^{\text{Im} \mathcal{I}(x_{\sigma})} \int_{\mathcal{J}_{\sigma}} dx \exp \text{Re} \mathcal{I}(x) \end{aligned}$$

と定式化できる.

以上から Airy function は,

$$\begin{aligned} Ai(\lambda) &:= \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma} n_{\sigma} \int_{\mathcal{J}_{\sigma}} dx \exp i \left(\frac{x^3}{3} + \lambda x \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma} \langle \mathcal{K}_{\sigma}, \mathbb{R} \rangle e^{\mathrm{Im} \mathcal{I}(x_{\sigma})} \int_{\mathcal{J}_{\sigma}} dx \exp \mathrm{Re} \mathcal{I}(x) \end{aligned}$$

と定式化できる.

この定式化は, 殆どすべての λ について意味を成すが, ある \mathcal{J}_{σ} によって二つ以上の臨界点が結ばれる場合 (Stokes phenomenon, 次スライド参照) などには意味を持たない.

Stokes phenomenon

Figure 3: Stokes phenomenon, 図は ArXiv/1001.2933 p. 28 より引用.

Lefschetz-thimble path integral

- 以上と同様に考えることで, Lefschetz-thimble path integral による

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

の定式化は, 以下のようになされる.

Lefschetz-thimble path integral

- 以上と同様に考えることで, Lefschetz-thimble path integral による

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar$$

の定式化は, 以下のようになされる.

- 以下では空間を X として, potential を $V: X \rightarrow \mathbb{R}$ と記す:

$$S[x(t)] = \int dt \left(\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right).$$

path integral では, 積分は path の空間

$\mathcal{X} := \{x: [t_i, t_f] \rightarrow X : \text{path} \mid x(t_i) = x_i, x(t_f) = x_f\}$ 上でなされる.

path integral では, 積分は path の空間

$\mathcal{X} := \{x: [t_i, t_f] \rightarrow X : \text{path} \mid x(t_i) = x_i, x(t_f) = x_f\}$ 上でなされる.

X の適切な意味での “複素化” \tilde{X} に対して, path の空間 $\tilde{\mathcal{X}} := \{z: [t_i, t_f] \rightarrow \tilde{X} : \text{path} \mid z(t_i) = x_i, z(t_f) = x_f\}$ を無限次元の複素多様体と見なし, その上の関数

$$\mathcal{I}[z] := i \int dt \left(\frac{1}{2} \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 - V(z(t)) \right)$$

に対し, 関数 $\text{Re}(\mathcal{I})$ を高さ関数として用いる.

path integral では, 積分は path の空間

$\mathcal{X} := \{x: [t_i, t_f] \rightarrow X : \text{path} \mid x(t_i) = x_i, x(t_f) = x_f\}$ 上でなされる.

X の適切な意味での “複素化” \tilde{X} に対して, path の空間 $\tilde{\mathcal{X}} := \{z: [t_i, t_f] \rightarrow \tilde{X} : \text{path} \mid z(t_i) = x_i, z(t_f) = x_f\}$ を無限次元の複素多様体と見なし, その上の関数

$$\mathcal{I}[z] := i \int dt \left(\frac{1}{2} \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 - V(z(t)) \right)$$

に対し, 関数 $\text{Re}(\mathcal{I})$ を高さ関数として用いる.

尚, 以下では V が \tilde{X} 上に正則に拡張することを仮定する.

臨界点全体の集合を $\{z_\sigma\}_{\sigma \in \Sigma}$ と書くことにする. これは, (複素化された) 運動方程式の解全体の空間である.

臨界点全体の集合を $\{z_\sigma\}_{\sigma \in \Sigma}$ と書くことにする. これは, (複素化された) 運動方程式の解全体の空間である.

$\sigma \in \Sigma$ に対し, 集合 \mathcal{J}_σ を

$$\mathcal{J}_\sigma := \left\{ z(t; 0) \left| \begin{array}{l} \frac{\partial z(t; u)}{\partial u} = -\frac{\overline{\delta \mathcal{I}[z(t; u)]}}{\delta z(t; u)}, \\ z(t, -\infty) = z_\sigma(t) \end{array} \right. \right\}$$

で定義する.

臨界点全体の集合を $\{z_\sigma\}_{\sigma \in \Sigma}$ と書くことにする. これは, (複素化された) 運動方程式の解全体の空間である.

$\sigma \in \Sigma$ に対し, 集合 \mathcal{J}_σ を

$$\mathcal{J}_\sigma := \left\{ z(t; 0) \left| \begin{array}{l} \frac{\partial z(t; u)}{\partial u} = -\frac{\overline{\delta \mathcal{I}[z(t; u)]}}{\delta z(t; u)}, \\ z(t, -\infty) = z_\sigma(t) \end{array} \right. \right\}$$

で定義する. \mathcal{K}_σ についても同様である.

臨界点全体の集合を $\{z_\sigma\}_{\sigma \in \Sigma}$ と書くことにする. これは, (複素化された) 運動方程式の解全体の空間である.

$\sigma \in \Sigma$ に対し, 集合 \mathcal{J}_σ を

$$\mathcal{J}_\sigma := \left\{ z(t; 0) \left| \begin{array}{l} \frac{\partial z(t; u)}{\partial u} = -\frac{\overline{\delta \mathcal{I}[z(t; u)]}}{\delta z(t; u)}, \\ z(t, -\infty) = z_\sigma(t) \end{array} \right. \right\}$$

で定義する. \mathcal{K}_σ についても同様である.

$n_\sigma := \langle \mathcal{K}_\sigma, \mathcal{X} \rangle$ として, Lefschetz-thimble path integral を以下で定める:

$$\int \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar := \sum_\sigma n_\sigma \int_{\mathcal{J}_\sigma} \mathcal{D}x \exp iS[x(t)]/\hbar.$$

Some examples ([Y. Tanizaki, T. K, §3])

- $X = \mathbb{R}$, $V \equiv 0$ のとき (つまり, 直線状の自由粒子のとき) には, $\tilde{X} = \mathbb{C}$ とすることで, $\{z_\sigma\}_\sigma$ 及び \mathcal{J}_σ を完全に求めることができる. 結果, 各 \mathcal{J}_σ 上での積分は Wiener 積分となり, Lefschetz-thimble path integral を完全に計算できる.

Some examples ([Y. Tanizaki, T. K, §3])

- $X = \mathbb{R}, V \equiv 0$ のとき (つまり, 直線状の自由粒子のとき) には, $\tilde{X} = \mathbb{C}$ とすることで, $\{z_\sigma\}_\sigma$ 及び \mathcal{J}_σ を完全に求めることができる. 結果, 各 \mathcal{J}_σ 上での積分は Wiener 積分となり, Lefschetz-thimble path integral を完全に計算できる.
- $X = \mathbb{R}/\mathbb{Z}, V \equiv 0$ のとき (円周上の自由粒子のとき) にも, $\tilde{X} = \mathbb{C}/\mathbb{Z}$ として, やはり直線上の場合と同じように上手くゆく.

Some examples ([Y. Tanizaki, T. K, §3])

- $X = \mathbb{R}$, $V \equiv 0$ のとき (つまり, 直線状の自由粒子のとき) には, $\tilde{X} = \mathbb{C}$ とすることで, $\{z_\sigma\}_\sigma$ 及び \mathcal{J}_σ を完全に求めることができる. 結果, 各 \mathcal{J}_σ 上での積分は Wiener 積分となり, Lefschetz-thimble path integral を完全に計算できる.
- $X = \mathbb{R}/\mathbb{Z}$, $V \equiv 0$ のとき (円周上の自由粒子のとき) にも, $\tilde{X} = \mathbb{C}/\mathbb{Z}$ として, やはり直線上の場合と同じように上手くゆく.
- $X = \mathbb{R}$, $V(z) = z^2/2$ のとき (Harmonic oscillator のとき) にも, やはり $\tilde{X} = \mathbb{C}$ とすることで上手くゆく.

- Lefschetz-thimble path integral を具体的に計算する上では, 一般には, 無限次元のサイクルと無限次元のサイクルとの交点数である n_σ の計算が大きな問題となる.

- Lefschetz-thimble path integral を具体的に計算する上では, 一般には, 無限次元のサイクルと無限次元のサイクルとの交点数である n_σ の計算が大きな問題となる.
- しかし, 前スライドの例では, いずれも運動方程式の解 $\{z_\sigma\}_\sigma$ が, (複素化して考えているにもかかわらず) 全て実関数として求まる.

- Lefschetz-thimble path integral を具体的に計算する上では, 一般には, 無限次元のサイクルと無限次元のサイクルとの交点数である n_σ の計算が大きな問題となる.
- しかし, 前スライドの例では, いずれも運動方程式の解 $\{z_\sigma\}_\sigma$ が, (複素化して考えているにもかかわらず) 全て実関数として求まる. この場合には元のサイクルと K_σ とが z_σ 一点のみで交わっており (元のサイクル上で $\text{Re}(\mathcal{I}) \equiv 0$ であることに注意), したがって $n_\sigma = 1$ と分かる.

3. Quantum tunneling by Lefschetz-thimble path integral

- $X = \mathbb{R}$ 上で double-well potential を考える:

$$\mathcal{I}[z] = i \int dt \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2} (z^2 - 1)^2 \right].$$

- $X = \mathbb{R}$ 上で double-well potential を考える:

$$\mathcal{I}[z] = i \int dt \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2} (z^2 - 1)^2 \right].$$

- その複素化を $\tilde{X} = \mathbb{C}$ として運動方程式を解き, $\{x_\sigma\}_{\sigma \in \Sigma}$ を決定する.

- $X = \mathbb{R}$ 上で double-well potential を考える:

$$\mathcal{I}[z] = i \int dt \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2} (z^2 - 1)^2 \right].$$

- その複素化を $\tilde{X} = \mathbb{C}$ として運動方程式を解き, $\{x_\sigma\}_{\sigma \in \Sigma}$ を決定する.
- その内, どの解が Quantum tunneling に相当するのかについて考察を行う.

Complex classical solutions (1)

解くべきは

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = -2z(z^2 - 1), \quad z(t_i) = x_i, \quad z(t_f) = x_f$$

である.

Complex classical solutions (1)

解くべきは

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = -2z(z^2 - 1), \quad z(t_i) = x_i, \quad z(t_f) = x_f$$

である. この解は

$$z(t) = \sqrt{\frac{p^2 - 1}{2p}} \operatorname{sd} \left(\sqrt{2p} t + \operatorname{sd}^{-1} \left(\sqrt{\frac{2p}{p^2 - 1}} x_i, \sqrt{\frac{1+p}{2p}} \right), \sqrt{\frac{1+p}{2p}} \right)$$

と計算できる. ここで p は $z(t_f) = x_f$ なる複素定数であり, このとき

$$\left(\frac{dz}{dt} \right)^2 + (z^2 - 1)^2 = p$$

となっている.

Complex classical solutions (2)

では, このような解 $\{z_\sigma\}_{\sigma \in \Sigma}$ は, どれくらいあるのか?

Complex classical solutions (2)

では, このような解 $\{z_\sigma\}_{\sigma \in \Sigma}$ は, どれくらいあるのか?
添え字集合 Σ を決定するには, 運動方程式を
 $X = -z^2 + 2/3$ と変数変換することが有効.

Complex classical solutions (2)

では, このような解 $\{z_\sigma\}_{\sigma \in \Sigma}$ は, どれくらいあるのか?
添え字集合 Σ を決定するには, 運動方程式を
 $X = -z^2 + 2/3$ と変数変換することが有効.

以下, この変換を用いて, $t_i < t_f, x_i = x_f = 0$ のときに
添え字集合 Σ を決定する.

Complex classical solutions (2)

では, このような解 $\{z_\sigma\}_{\sigma \in \Sigma}$ は, どれくらいあるのか?
添え字集合 Σ を決定するには, 運動方程式を
 $X = -z^2 + 2/3$ と変数変換することが有効.

以下, この変換を用いて, $t_i < t_f, x_i = x_f = 0$ のときに
添え字集合 Σ を決定する.

$\sigma \in \Sigma$ として,

$$p_\sigma := \left(\frac{dz_\sigma}{dt} \right)^2 + (z_\sigma^2 - 1)^2$$

とする.

Complex classical solutions (3)

このとき, 微分方程式 $\frac{d^2 z}{dt^2} = -2z(z^2 - 1)$ に変数変換 $X = -z^2 + 2/3$ を適応することで, $X_\sigma := -z_\sigma^2 + 2/3$ は微分方程式

$$\left(\frac{dX}{dt}\right)^2 = 4 \left(X - \frac{2}{3}\right) \left(X - \left(p - \frac{1}{3}\right)\right) \left(X + \left(p + \frac{1}{3}\right)\right)$$

の解であることが分かる. したがって X_σ は Weierstrass のペー関数, つまり \mathbb{C} 上の二重周期関数の区間 $[t_i, t_f]$ への制限であったことが分かる.

Complex classical solutions (3)

このとき, 微分方程式 $\frac{d^2 z}{dt^2} = -2z(z^2 - 1)$ に変数変換 $X = -z^2 + 2/3$ を適応することで, $X_\sigma := -z_\sigma^2 + 2/3$ は微分方程式

$$\left(\frac{dX}{dt}\right)^2 = 4 \left(X - \frac{2}{3}\right) \left(X - \left(p - \frac{1}{3}\right)\right) \left(X + \left(p + \frac{1}{3}\right)\right)$$

の解であることが分かる. したがって X_σ は Weierstrass のペー関数, つまり \mathbb{C} 上の二重周期関数の区間 $[t_i, t_f]$ への制限であったことが分かる.

この二重周期に対応する格子を $\Lambda_\sigma \subset \mathbb{C}$ と書くことにする.

Complex classical solutions (4)

トーラス $\mathbb{C}/\Lambda_\sigma$ 上の有理型関数として X_σ を考察することで, t_f と t_i はトーラス上に同じ点を定めなければならないことが分かる. したがって $t_f - t_i \in \Lambda_\sigma$ である.

Complex classical solutions (4)

トーラス $\mathbb{C}/\Lambda_\sigma$ 上の有理型関数として X_σ を考察することで, t_f と t_i はトーラス上に同じ点を定めなければならないことが分かる. したがって $t_f - t_i \in \Lambda_\sigma$ である.

一方で Λ_σ は次の二元で生成されることが知られている:

$$2\sqrt{\frac{2k_\sigma^2 - 1}{2}}K(\sqrt{k_\sigma}), \quad 2i\sqrt{\frac{2k_\sigma^2 - 1}{2}}K(\sqrt{1 - k_\sigma^2}).$$

ここで K は第一種完全楕円積分である.

Complex classical solutions (4)

トーラス $\mathbb{C}/\Lambda_\sigma$ 上の有理型関数として X_σ を考察することで, t_f と t_i はトーラス上に同じ点を定めなければならないことが分かる. したがって $t_f - t_i \in \Lambda_\sigma$ である.

一方で Λ_σ は次の二元で生成されることが知られている:

$$2\sqrt{\frac{2k_\sigma^2 - 1}{2}}K(\sqrt{k_\sigma}), \quad 2i\sqrt{\frac{2k_\sigma^2 - 1}{2}}K(\sqrt{1 - k_\sigma^2}).$$

ここで K は第一種完全楕円積分である.

この二元を基底として $t_f - t_i = (n_\sigma, m_\sigma) \in \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z} = \Lambda_\sigma$ なる n_σ, m_σ をとる.

Complex classical solutions (5)

以上の対応 $\sigma \mapsto (n_\sigma, m_\sigma)$ は, Σ と集合

$$\left\{ (n, m) \in \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z} \mid \frac{n}{\gcd(n, m)} \cdot \frac{m}{\gcd(n, m)} \equiv 0 \pmod{2} \right\}$$

との全単射を (正確には符号分の不確定性を除いて) 誘導していることが分かる ([Y. Tanizaki, T. K, §4]).

p の分布

ひょー

数表といくつかの解の様子

ひょー

Quantum tunneling に相当するのはどの古典解か?

- 今回は明らかに実で無い解 z_o が無数に存在している. このうちのいずれかが Quantum tunneling に相当するものと考えられる.

Quantum tunneling に相当するのはどの古典解か?

- 今回は明らかに実で無い解 z_σ が無数に存在している. このうちのいずれかが Quantum tunneling に相当するものと考えられる.
- 解 z_σ が path integral に影響するためには, $n_\sigma \neq 0$ である必要がある.

Quantum tunneling に相当するのはどの古典解か?

- 今回は明らかに実で無い解 z_σ が無数に存在している. このうちのいずれかが Quantum tunneling に相当するものと考えられる.
- 解 z_σ が path integral に影響するためには, $n_\sigma \neq 0$ である必要がある.
- そのためには特に $\text{Re}I[z_\sigma] < 0$ である必要がある.

Quantum tunneling に相当するのはどの古典解か?

- 今回は明らかに実で無い解 z_σ が無数に存在している. このうちのいずれかが Quantum tunneling に相当するものと考えられる.
- 解 z_σ が path integral に影響するためには, $n_\sigma \neq 0$ である必要がある.
- そのためには特に $\text{Re}I[z_\sigma] < 0$ である必要がある.
- $\text{Re}I[z_\sigma] < 0$ なる解が無数にあることも分かったが, それらの n_σ は計算方法は分かっておらず, したがって「path integral に確実に影響している」と分かっている非実数解は無い (今のところその存在すら証明は出来ていない).

$\operatorname{Re}\mathcal{I}[z_\sigma] < 0$ なる解の例

ひょー

Summary

- Lefschetz-thimble path integral を用いることで, 振動積分の可積分性の問題を回避して経路積分の定式化/簡単なものなら計算ができる.

Summary

- Lefschetz-thimble path integral を用いることで, 振動積分の可積分性の問題を回避して経路積分の定式化/簡単なものなら計算ができる.
- double-well potential を例にとり, Quantum tunneling の semi-classical な記述を考察した.

Summary

- Lefschetz-thimble path integral を用いることで, 振動積分の可積分性の問題を回避して経路積分の定式化/簡単なものなら計算ができる.
- double-well potential を例にとり, Quantum tunneling の semi-classical な記述を考察した.
- 古典解をすべて記述することには成功している.

Summary

- Lefschetz-thimble path integral を用いることで, 振動積分の可積分性の問題を回避して経路積分の定式化/簡単なものなら計算ができる.
- double-well potential を例にとり, Quantum tunneling の semi-classical な記述を考察した.
- 古典解をすべて記述することには成功している.
- しかし, その内どの古典解が Quantum tunneling に対応しているかは未だ分かっていない.

Summary

- Lefschetz-thimble path integral を用いることで, 振動積分の可積分性の問題を回避して経路積分の定式化/簡単なものなら計算ができる.
- double-well potential を例にとり, Quantum tunneling の semi-classical な記述を考察した.
- 古典解をすべて記述することには成功している.
- しかし, その内どの古典解が Quantum tunneling に対応しているかは未だ分かっていない.
- その難点は, 無限次元のサイクル同士の交点数である n_σ の計算の難しさにある.