

熱的な量子純粋状態を用いた統計力学の定式化

杉浦 祥 (東京大学物性研究所)

清水 明 (東京大学総合文化研究科)

マクスウェルやボルツマンにより創始された統計力学は、ギブズにより「アンサンブル形式」の統計力学として完成し、物理学の礎の一つとなった。しかし、その基本原理については、未解明な部分も残され、教科書の記述も様々である。

アンサンブル形式では、等重率の原理に基づき、「(統計) アンサンブル」と呼ばれる確率集団を導入する。そして磁化や相関関数といった力学のみで定義できる物理量(力学変数)の平衡値は、この確率集団での平均値(アンサンブル平均)として求めることができる。しかし、熱力学で登場する、温度やエントロピーといった量(純熱力学変数)は、力学変数として表すことができない。そこで、純熱力学変数は、von Neumann エントロピー(古典系の場合 Shannon entropy) や分配関数から求める。

しかし、統計力学の基本原則である等重率の原理の本質は、アンサンブル平均ではなく、「ほとんどのミクロ状態がマクロには同じだ」ということである。即ち、温度や体積といったパラメーターを指定した時にあり得るミクロ状態の個数は組み合わせ論的に増大し、すぐに天文学的な数になる。このミクロ状態達のうち、圧倒的多数が平衡状態とみなせる状態であり、マクロ物理量を測った時に同じ測定値を返す。それとは異なる測定値を取るような非平衡状態はずっと少ない。その結果、平衡状態も非平衡状態もひっくりめたアンサンブルを作ってアンサンブル平均を求めれば、その値はほぼ 100% を占める平衡状態での値になる。この「典型性」こそが、等重率の本質なのである。それならば、天文学的な数のミク

ロ状態についてアンサンブル平均を計算する必要は必ずしもない。

我々は最近、マクロな量子系における典型性に着目し、熱力学的平衡状態を代表する、熱的な量子純粋状態(Thermal Pure Quantum state, 略して TPQ state) をたった一つ用意するだけで統計力学の全ての結果が得られることを示した。つまり、磁化や相関関数といった力学変数が TPQ state の期待値により計算されるだけでなく、熱力学関数のような純熱力学変数すらも適切な TPQ state の規格化定数から得られる。

TPQ state は、アンサンブルの持つエネルギーの確率分布と非常に近いエネルギー分布を持つ量子純粋状態の中から、一つをランダムに選び出した状態であり、物理量のゆらぎまでも再現する状態となっている。アンサンブル形式では、熱ゆらぎの効果はアンサンブルを導入した結果生じる古典混合によって取り込まれると見なすことができた。しかし、TPQ state を用いた定式化では、量子純粋状態の内部に量子エンタングルメントを作ることによって、熱ゆらぎも量子ゆらぎの一部として取り込んでいる。その結果、たった一つの TPQ state が統計力学で興味ある全ての物理量を正確に与えるのである。

たった一つの量子純粋状態で熱力学的平衡状態が記述できるという事実は、理論的な興味のみならず、応用上もメリットをもたらしている。その例として、本記事では代表的なフラストレーション系である、カゴメ格子系上のハイゼンベルグ模型の数値計算結果を示す。

—Keywords—

等重率の原理:

熱力学において平衡状態は、エネルギーや磁化といった少数個のマクロな物理量の組を指定すれば一つに定まる。他方、マクロな物理量の組が指定された値を持つようなミクロ状態は無数に存在する。等重率の原理とは、平衡状態においてこれらの全てのミクロ状態が等しい確率で実現しているとする仮定であり、アンサンブル形式の統計力学の基本原則の一つである。

量子純粋状態:

量子力学において、原理上許される最大限に定まった状態のこと。通常は、量子純粋状態は、状態ベクトルで表すことができる。

量子混合状態:

量子純粋状態ではない量子状態のこと。量子混合状態は、量子純粋状態を古典的な確率で混合した状態であり、通常は、密度演算子と呼ばれる演算子を用いて表される。