

量子力学から熱力学第二法則へ



金子 和哉

東京大学大学院工学系研究科
kaneko@noneq.c.u-tokyo.ac.jp

伊與田英輝

東京大学大学院工学系研究科
iyoda@ap.t.u-tokyo.ac.jp

沙川 貴大

東京大学大学院工学系研究科
sagawa@ap.t.u-tokyo.ac.jp

ミクロな運動を記述するニュートンの運動方程式やシュレーディンガー方程式は、時間反転に関して対称である。一方、マクロな現象を記述する熱力学は、熱平衡状態への緩和や熱力学第二法則に代表される不可逆性をもつ。一見すると、可逆なミクロの力学と不可逆な熱力学は矛盾している。このミクロとマクロの整合性の問題は、19世紀にはボルツマンが議論し、20世紀初頭にはフォン・ノイマンが量子力学に基づき研究をしたが、解決には至らなかった難問である。

近年、冷却原子などの実験系で理想的な孤立量子系が実現されるようになり、不可逆性の起源をめぐる問題が再び注目を集めている。理論と実験の両面から、シュレーディンガー方程式に従った時間発展で、量子純粋状態でさえも、熱平衡状態へ緩和（熱平衡化）することが明らかになってきた。理論的にも、従来の統計力学を使わず、量子力学だけから熱平衡化を理解する試みがなされている。とくに、「量子多体系において、全てのエネルギー固有状態が熱平衡状態を表す」という固有状態熱化仮説（Eigenstate Thermalization Hypothesis, ETH）が、熱平衡化を説明する機構として有力視されている。ETHは、数値計算で多くの非可積分系において確認されているが、数学的な証明はない。一方で我々は、一般の並進対称な局所相互作用する量子多体系において、「(全てとは限らない)ほとんどのエネルギー固有状態が熱平衡状態を表す」という弱い形のETHを証明した。

また、以上とは異なる研究の流れの中で、

第二法則の基礎についても大きな進展があった。とくに重要なのは、「ゆらぎの定理」の発見である。ゆらぎの定理は、エントロピー生成のゆらぎを考慮することで、第二法則を不等式ではなく等式の形で表現したものだ。第二法則は、ゆらぎの定理から自然に導かれる。しかし、孤立量子系の熱平衡化の研究とは異なり、ゆらぎの定理は統計力学を基にしている。とくに熱浴の初期状態として、通常のカノニカル分布を仮定しているため、冷却原子などの緩和過程には適用できない。というのも、熱浴の初期状態は一般にカノニカル分布とは限らないからだ。

では、これら二つの研究の流れを統合し、熱浴の初期状態が量子純粋状態のときにも、第二法則とゆらぎの定理を示すことができるだろうか。我々はこの問題に取り組み、熱浴の初期状態がエネルギー固有状態の場合にも、第二法則とゆらぎの定理が短い時間の間では成り立つことを数学的に証明した。証明の鍵となるのは、ETHに加えて、量子多体系の相互作用の局所性である。相互作用が局所的な量子多体系では、情報の伝搬速度に上限が存在することが、リーブ・ロビンソン限界 (Lieb-Robinson bound) として厳密に示されている。これを利用して、我々は熱浴がカノニカル分布ではないことの影響を厳密に評価した。

我々の結果は量子力学と熱力学第二法則を直接的に結び付けるシナリオを明らかにしたと言え、量子多体系の非平衡ダイナミクスより深い理解につながる事が期待される。

—Keywords—

固有状態熱化仮説：

Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH). 「量子多体系のエネルギー固有状態の全てについて、その状態での物理量の期待値が熱平衡値（ミクロカノニカル平均）と一致する」という仮説である。「強いETH」とも呼ばれ、孤立量子系の熱平衡化の機構として注目されている。数学的な証明はないが、数値計算により多くの非可積分系で成立することが確認されている。なお、上記の「全て」を「ほとんど全て」に変えたものは「弱いETH」と呼ばれ、数学的に証明されている。

ゆらぎの定理：

エントロピー生成が正になる確率と、負になる小さな確率の間に成り立つ普遍的な関係式。ここから熱力学第二法則や揺動散逸定理を導くことができる。古典確率過程、ハミルトン力学系、量子系などにおいて成立する。熱浴の初期状態がカノニカル分布であることが、ゆらぎの定理の証明では重要である。

リーブ・ロビンソン限界：

格子上の量子多体系で一般的に成立する、情報の伝搬速度の上限を表す不等式。相互作用の局所性を反映して、特殊相対論の光円錐に似た構造が現れる。ただしここでの情報の伝搬速度は、光速ではなく音速に相当している。エネルギーギャップのある量子多体系の基底状態の性質の研究など、広範な応用がある。我々はこの熱力学第二法則の証明に応用した。