

論文の内容の要旨

論文題目

**Formulation of statistical mechanics
based on thermal pure quantum states**
(熱的量子純粋状態に基づいた統計力学の
定式化)

氏名 杉浦 祥

本論文において私は、量子純粋状態に基づいた統計力学の定式化を行い、この定式化様々な角度から検討する。従来の量子統計力学では、100 年以上に渡り、2つの原理、等重率の原理とボルツマンの公式を要請することでマクロな系の予言を与えてきた。等重率の原理とは、この実現し得る全ての状態が同じ確率で実現するという仮定であり、ボルツマンの公式とは、実現し得るマイクロ状態の数の対数がエントロピーを与える、という公式である。このように従来の量子統計力学では、実現し得る全ての状態を用意する事が鍵となっている。

しかし、長年の基礎付けの試みにも関わらず、この統計力学の2つの原理の正当化は未だに成功していない。特に、物理量の無限時間平均がアンサンブル平均と一致するという性質はエルゴード性と呼ばれるが、エルゴード性を示すことで統計力学を基礎付ける試みは、殆ど成功していない。現在では、エルゴード性は統計力学の基礎付けとはあまり関係がなく、むしろ、状態のもつ典型性こそが統計力学が成功した理由であると多くの統計物理学者によって信じられている。状態の典型性とは、ある状況下でマイクロに実現しうる多体系の状態は、その殆どが平衡状態とみなせる状態たちであり、非平衡状態も含まれる状

態の割合は無視できるほど小さい、という性質である。特に量子系においては、一粒子の位置や、物理量のゆらぎまで含めた、非常に多くの物理量に対して同時に状態の典型性が成り立つことが知られている。ただし、ほとんど全ての状態が平衡状態であったとしても、エントロピーや自由エネルギーといった純熱力学変数を求めるには、ボルツマンの公式を用いる必要がある。ボルツマンの公式は、全ての実現し得る状態の数を数え上げる必要があるため、純熱力学量は典型性の議論からは外れていた。

本論文では、この状態の典型性というアイデアを押し進め、Thermal pure quantum (TPQ) state と呼ばれるたった一つの量子純粋状態を用意するだけで、統計力学で興味ある全ての物理量の平衡値が得られる事を示す。この、一つの量子純粋状態のみでよいという事実は、従来の定式化では実現し得る全ての状態を用意する事が鍵となっていた事とは大きく異なる。そして、エネルギーを指定したTPQ state のみならず、温度や化学ポテンシャルといった示強変数を指定したTPQ state も構成可能である事を示す。TPQ state は完全に平衡状態と見なせるにも関わらず、従来の平衡状態とは量子力学的に全く違う状態である。本論文ではさらに、異なったTPQ state 同士の変換ができる事を示し、この変換を用いる事で、効率的な数値計算への応用も行う。

まず私は、本論文の第3章において、平衡状態であるとみなせる量子純粋状態を一般に、Thermal pure quantum (TPQ) state と名付け、TPQ state に基づいた統計力学の定式化を行う。特に本論文では、温度を指定したcanonical TPQ (cTPQ) state を中心に、統計力学の定式化を行う。cTPQ state を用いると、磁化や相関関数といった力学的変数のみならず、純熱力学変数すらも一つの量子純粋状態から求められる。具体的には、cTPQ state を一つ構成し、そのノルムを計算する。すると、系の大きさに対して指数関数的に小さくなるような誤差の範囲で、ノルムから自由エネルギーが得られる事が分かる。力学変数の平衡値は、同様に指数関数的に小さくなるような誤差の範囲で、一つのcTPQ state による期待値によって得る事ができる。そして、これらの誤差は、自由エネルギーや、物理量の揺らぎの値を用いて評価される。自由エネルギーとアンサンブル平均が得られるという事実は、統計力学で興味のある全ての物理量が、一つのcTPQ state より求められるという事であり、TPQ state が完全な統計力学の定式化を与え得ると言える。また、グランドカノニカルアンサンブルに対応した、grandcanonical TPQ (gTPQ) state も同様に構成する事ができる。

第4章では、エネルギーによって指定されるTPQ state の一つである、microcanonical TPQ (mTPQ) state を導入し、その性質を見る。mTPQ state はcTPQ state に比べ、より応用を念頭に置いたTPQ state であり、ランダムベクトルにハミルトニアンを乗算するだけで構成することができる状態である。mTPQ state もcTPQ state と似て、そのノルムからエントロピーを求めることができ、力学変数の期待値を計算することで、ミクロカノニカルアンサンブル平均と非常に近い結果を得る事が出来ることを示す。

第5章では、これらTPQ state と、アンサンブル形式における従来の平衡状態の比較を

行う。TPQ state は時間発展においてもマクロに不変な状態であり、また、線形応答理論における予言も正しく行うことができる。これらの点においても、TPQ state と従来の平衡状態は全く同じ状態であるように思える。しかし、力学変数のゆらぎを見ると、これらの状態の違いの一端が明らかになる。まず、量子力学において状態は量子ゆらぎを持つ。そこで、系を有限温度にすると、これに熱ゆらぎが加わり、量子統計力学におけるゆらぎとは量子ゆらぎと熱ゆらぎが合わさったものである、と説明される事がある。しかし、TPQ state は量子純粋状態であるため、量子ゆらぎのみしか持たない。つまり、TPQ state とはゆらぎの範囲内に含まれる状態達を量子力学的に重ね合わせた状態であり、アンサンブル平均で予言されるゆらぎが、TPQ state では全て量子ゆらぎに押し込められている。さらに、量子エンタングルメントを計算することで、我々はTPQ state と従来の平衡状態の違いを明確に区別する事ができる。まず、アンサンブル形式における従来の平衡状態は、大きく古典混合した状態であるため、エンタングルメントは小さく、特に、高温においてエンタングルメントはゼロへと近づいていく。これとは対照的に、TPQ state は常に大きな量子エンタングルメントを持ち、特に高温では許されるほぼ最大限にエンタングルメントを持つ。このような違いが現れたのは、系の粒子数 N に対し、量子エンタングルメントが一般に N 体相関となり、ミクロな詳細の違いを検出する物理量である事による。また、TPQ state の安定性を、エンタングルメントの変化により定量化すると、TPQ state は弱い古典ノイズに対しデコヒーレンスが起りづらい事が示せる。つまり、TPQ state は大きな量子エンタングルメントを持つにも関わらず、ノイズに対して安定な状態である。

第6章では、ここまでに導入したTPQ state 達の間関係式を導く。まず、mTPQ state とcTPQ state の変換公式、cTPQ state とgTPQ state の変換公式を与える。cTPQ state はmTPQ state の重ねあわせ状態として、gTPQ state はcTPQ state の重ね合わせ状態として、それぞれ表現することができる。ただし、このうち前者の変換公式ではcTPQ state が無限個のmTPQ state の重ね合わせとして表現されており、実用上、不便である。そこで、どのようなmTPQ state が大きな寄与を持つか、重ね合わせ係数の収束性を解析する。その結果、cTPQ state を生成するには、目的のcTPQ state のエネルギーと同程度のエネルギーを持つ、少数個のmTPQ state を生成するのみで十分である事が分かる。これにより、mTPQ state からcTPQ state、さらにはgTPQ state を効率的に生成する事ができるようになった。第5章では応用を見据え、さらなる実用的な公式も導く。実用面において、cTPQ state とgTPQ stateを、mTPQ state と比較すると、前者2つは低温での解析の際にメリットがあるなど、多くの場面において、より有用である。それらの場面において、第6章における結果は、効率的な計算の実行を大いに助けるだろう。

そこで第7章では、TPQ state を用いた統計力学の数値計算を行う。TPQ state はたった一つの状態を用意するのみで良いため、実現しうる全ての状態を平均する必要があるアンサンブル平均に比べ、大きなメリットがある。特に、有力な計算法である量子モンテカ

ルロ法や密度行列繰り込み群などの適用が困難になる、2次元フラストレーション系・フェルミオン系において、TPQ state は相対的に大きなアドバンテージを持つ。そこで私は、cTPQ state をカゴメ格子上のスピン1/2 反強磁性ハイゼンベルグ模型の有限温度での解析へと応用した。この模型は、有限温度においては、ハミルトニアンの数値対角化の結果から、比熱が2つのピーク構造を持つのではないかと提案されているが、結論は分かっていない。そこで私は、この模型において比熱及び自由エネルギー、エントロピーを計算した。その結果、従来言われていた2つのピークのうち低温側のピークは、系のサイト数を30まで大きくすると、無くなる事が発見された。