

論文審査の結果の要旨

氏名 杉浦 祥

本論文は、論文提出者による、量子純粋状態に基づいた新しい統計力学の定式化とその展開について述べたものであり、8章92頁からなる。1章はイントロダクションであり、研究の背景として、現在の統計力学の定式化とその問題点について概観している。それを受けて、第2章では具体的に、現在の定式化と新しい試みについてさらに詳しくレビューを行っている。統計力学は、等重率の原理とボルツマンの原理に基づいて定式化されているが、等重率の原理を正当化する理論であるエルゴード理論は未完成であり、他の定式化が必要であることを述べている。また、他の定式化の可能性として、典型性にも触れているが、従来の研究では、エントロピーや自由エネルギーなどの純熱力学的な変数を求めるには、ボルツマンの原理を必要とし、そのためには全ての実現しうる状態の数を数え上げる必要があるため、純熱力学量は、典型性の議論だけからは求めることができないことを指摘し、従来の研究の問題点を明らかにしている。

第3章では、物理量に対して熱平衡状態と同じ平均統計量を与える量子状態として量子純粋状態を定義したのち、カノニカル量子純粋状態を導入している。具体的には、任意の直交基底とハミルトニアン、複素ランダム変数からカノニカル量子純粋状態を構成し、そのノルムを求めると、系の大きさに対して指数関数的に減少する誤差の範囲で、ノルムから自由エネルギーが得られることを証明している。この結果は、従来の統計力学の定式化のように、可能な全ての状態を足し上げる必要はなく、一つの量子純粋状態について物理量の期待値を求めるだけで、熱平衡状態でのアンサンブル平均が得られることを意味している。また、このことは、力学的な物理量だけでなく、自由エネルギーやエントロピーと言った純熱力学的な変数についても成り立ち、従来の典型性による議論を凌駕する結果となっている。さらに後半では、グランドカノニカル量子純粋状態の導入も行っている。

第4章では、エネルギーによって指定される量子純粋状態のひとつである、マイクロカノニカル量子純粋状態を導入し、その性質について議論している。この状態は、ランダム複素ベクトルにハミルトニアンの多項式を乗算することで得られ、一つの純粋状態について力学変数の期待値を計算することでマイクロカノニカルアンサンブル平均と非常に近い値を得ることができ、さらにはノルムからエントロピーを求めることができることを示している。

第5章では、量子純粋状態とアンサンブル形式による従来の平衡状態の比較を行っている。量子純粋状態は、時間発展においてもマクロに不変な状態であり、線形応答理論の予測も正しく行うことができることを示している。一方、力学変数のゆらぎを見ると、量子純粋状態は量子ゆらぎのみで、熱ゆらぎを持たず、通常の熱平衡状態のゆらぎと大きく異なることを明らかにしている。このことは、量子エンタングルメントを計算することで明確となり、量

子純粋状態では、エンタングルメントがほぼ最大の値を取るのに対して、通常の熱平衡状態は、大きく古典混合した状態で、エンタングルメントが小さいことと対照的であることを明らかにしている。

第6章では、著者がこれまで導入した、マイクロカノニカル、カノニカル、グランドカノニカルの3つの量子純粋状態間の関係式を導いている。これによれば、カノニカル量子純粋状態は、マイクロカノニカル状態の重ね合わせで、グランドカノニカル量子純粋状態は、カノニカル状態の重ね合わせで表せることを導いている。また、実用上の便宜のため、重ね合わせの係数の集束性を調べ、無限個の係数の重ね合わせを行うことなく、目的のカノニカル量子純粋状態と同程度のエネルギーを持つ少数個のマイクロカノニカル量子純粋状態の重ね合わせで平衡状態に十分近い値が得られることを示し、実際に応用する上で有用な結果を得ている。

第7章では、量子純粋状態を用いて統計力学の数値計算を行っている。具体的には、カゴメ格子上的スピン $1/2$ 反磁性ハイゼンベルグ模型の有限温度での解析を行い、従来よりも大きな格子サイズまで数値計算を拡張することに成功している。従来は比熱が2つのピークを持つと考えられていた領域において、本方法によれば2つのピークのうち低温側のピークは、系のサイズを大きくすると消失することが明らかとなった。これは、全ての状態を平均する必要がある従来の統計力学アンサンブルの方法に比べ、1つの状態を用意するのみで良い本論文の方法のメリットを示した結果である。第8章は結論である。

なお、本論文の内容は、指導教官である清水明氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって証明と解析、および数値計算を行ったものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断する。したがって、本論文は、量子統計力学の基礎的概念に関する理解を深める上で学術的な価値が高いと評価でき、博士(理学)の学位を授与するに値すると認める。