

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 2 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19H01810

研究課題名(和文) 拡張アンサンブルによる一次相転移の理論解析

研究課題名(英文) Theoretical analyses of first-order phase transitions using generalized ensembles

研究代表者

清水 明 (Shimizu, Akira)

東京大学・大学院総合文化研究科・教授

研究者番号：10242033

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 10,200,000円

研究成果の概要(和文)：一次相転移は広く見られる重要な現象であり、物理、化学、生物学、工学の広い分野にわたって重要である。ところが、その理論的な研究は、従来のアンサンブルが定義不能だったり不安定になったりするために、相共存状態を与えられないなど多くの問題があり、十分には進んでいなかった。本研究では、(i) これらの問題点を解消した新しい統計アンサンブル構築し、(ii) このアンサンブルに特有の様々な公式を導き、従来の問題点を解決し、(iii) こうして得られた定式化に基づく具体的な計算手法を構築し様々な系の一次相転移を調べることができるようにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

一次相転移と、それに伴う相共存現象は、物理学にとどまらず、化学、生物学、工学の広い分野にわたって極めて重要になっている。その重要な現象について、従来の物理学は十分に答えることができなかったのに対して、本研究によって、根本的な問題が解決することができた。今後は、この成果を様々な具体例に応用することによって、上記のような広い科学・技術分野において、新しい知見が得られる可能性を開拓することができた。

研究成果の概要(英文)：The first-order phase transition is a widely-observed phenomena that are important in many fields of science and technology including physics, chemistry, biology and engineering. Despite such importance, theoretical studies were not made sufficiently because the conventional statistical ensembles have many problems. For example, at a phase transition point some of them become ill-defined whereas others become unstable. We have resolved these problems in this work by (i) proposing a novel class of statistical ensembles, (ii) deriving useful formulas specific to these ensembles, and (iii) developing concrete methods of calculations.

研究分野：物性基礎論

キーワード：相転移 相共存 統計力学 統計集団

1. 研究開始当初の背景

一次相転移は、その物理的な重要性にもかかわらず、連続相転移に比べると、十分に研究されているとはいいがたい。その理由は、その強い特異性ゆえに、理論的な取り扱いが困難なことにある。すなわち、一次相転移点では、異なる相が共存するのに伴い、温度では平衡状態が一意に指定できなくなる(同じ温度でも、相の共存比が異なる無数の平衡状態が可能になる)[1]。そのため、カノニカルやグランドカノニカルのような、温度で平衡状態を指定するタイプのアンサンブルが不安定になり、例えば、強力な計算手法である、交換モンテカルロ法 [2] が使えなくなる。従って、温度ではなくエネルギーで状態を区別できるアンサンブルを使う必要がある。相の共存比が異なる平衡状態は、温度は同じでもエネルギーは異なるから、エネルギーなら平衡状態を一意的に指定できるからだ [1]。そのようなアンサンブルとして既知のものは、ミクロカノニカルアンサンブルであるので、それを用いた様々な計算手法(ミクロカノニカルモンテカルロ法 [3] など)が開発された。しかし、それらの手法には、

(ア) 温度を正確に求めるのが大変である。

(イ) 有限サイズ効果による無限系とのずれが、一次相転移点以外では、(グランド)カノニカルアンサンブルよりも大きい。

(ウ) 量子系では(エネルギーを指定するために)対角化が必要になり、小さなサイズの系しか計算できない。

などの問題点がある。そこで、ミクロカノニカルでは矩形関数であったエネルギーのカットオフ関数を、ガウス関数に変える提案 [4] などが行われたが、指数関数の肩にハミルトニアン的一次関数がかかるために、量子系にはますます使いづらくなるなどの欠点があった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、上記の諸問題を、以下のようにして解決し、一次相転移の研究を大きく前進させることにある。従来は、既知のミクロカノニカルアンサンブルを、如何に効率的に計算するか、に主要な努力が払われていた [3]。たとえアンサンブルを変更するにしても、上記のように矩形関数をガウス関数に置き換えて丸みを持たせる程度の微修正 [4] にとどまっていた。申請者らは、上記の問題点が発生した原因はまさにそこにあることに気づいた。すなわち、エネルギーで状態を指定しようとするあまり、矩形関数やガウスのように、指定したいエネルギー値の周りでのみノンゼロの、バンドパスフィルターのようなカットオフ関数を使わないといけない、という思い込みがあったことが問題解決を阻んでいたと気づいたのである。統計力学の原点に戻って考え直してみると、エネルギーで状態を区別できるアンサンブルを作るのに、そういう強いカットオフ関数を用いる必要性は全くなく、もっと一般化できる。その一例はずでに、申請者らが、いわゆる「純粋状態統計力学」の完全な定式化を初めて行った論文 [5] に現れていた。本研究では、まず、これを拡張して、

(1) カットオフ関数がバンドパスフィルター型ではないのに、エネルギーで状態を区別できる(従って一次相転移点でも問題が生じない)という、新しいアンサンブルを一般的に構築する。続いて、

(2) この新しいアンサンブルに特有の様々な公式を導き、従来の問題点を解決してゆく。

これらの公式も、従来にはない独自の公式になる。さらに、

(3) 本研究で得られる定式化を、モンテカルロ法などで計算する具体的な計算手法を構築し、実際にいくつかのモデルについて、一次相転移の性質を明らかにする。

これは、従来の困難を解消した手法になるので、未解明のモデルの一次相転移点を調べることができるようになる。

3. 研究の方法

まず、目標 (1) である、新しいアンサンブルを構築する。次に、このアンサンブルが、従来の統計力学アンサンブルと同様に、熱力学極限で厳密な結果を与えることを示す。つまり、エネルギーがその期待値に等しいような平衡状態を表す密度演算子であることを示す。さらに、パラメーターの値を変えればエネルギーの値が変わるように関数を設定することができて、その結果、様々なエネルギーの値における平衡状態の密度演算子が求まることを示す。これならば、一次相転移点でカノニカルアンサンブルのような(状態が一意に決まらず不安定になる、交換法が使えない、などの)問題が生じることがない。

次に、目標 (2)、すなわち、この新しいアンサンブルに特有の様々な公式を導き、ミクロカノニカルアンサンブルに基づく計算法の前述の問題点(ア)~(ウ)を、解決する。これにより、

一次相転移する系について具体的な予言を行う手法を確立する。

最後に、目標 (3)、すなわち、本研究で得られる定式化を、モンテカルロ法などで計算する具体的な計算手法を構築し、実際にいくつかのモデルについて、一次相転移の性質を調べる。

4. 研究成果

エネルギーで状態を区別でき、そのために一次相転移点でも問題が生じないという、新しいアンサンブルを構築することに成功した。このアンサンブルを「スクイーズド・アンサンブル」と名付け、従来の統計力学アンサンブルと同様に、熱力学極限で厳密な結果を与えることを、つまり、あるエネルギーの平衡状態を表す密度演算子であることを証明した。また、従来のミクロカノニカル・アンサンブルでは、いったんエントロピー関数を求めてからエネルギーで微分して初めて温度が求まるのに対して、直接に、温度が、エネルギー期待値から簡単に精度よく得られる公式を確立した。以上の成果を、論文として Physical Review B に発表した[6]。

続いて、エントロピーの自然な変数に互いに非可換な物理量を含むような量子系にも適用可能で、そういう系でも一次相転移にともなう相共存状態の構造を解析できるように拡張した「スクイーズド・アンサンブル」の理論を、論文としてまとめて投稿した（現在査読中）。

さらに、様々なアンサンブル間の関係をいろいろな角度から分析し、次のような成果も挙げることができた。まず、孤立量子系において実験的に磁気感受率を測定したときに、その測定値が、温度一定のアンサンブルにおける磁気感受率やエントロピー一定のアンサンブルにおける磁気感受率と、どのような関係にあるかを明らかにし、論文として Physical Review Letters に発表した[7]。この成果はプレスリリースも行い、UTokyo twitter の前後1ヶ月のプレスリリースの中で、新型コロナウイルス感染症関係のものに次いで2番目に多い295いいねと130リツイートを獲得し、日経新聞などでも取り上げられた。また、いずれかの統計力学アンサンブルにある量子系をうまく測定するとマクロに異なる状態の重ね合わせが生成できることを利用して、その状態を磁気センサーとして使ったときに、その感度が最良の仕方ですケールすることを示し、論文として Physical Review A に発表した[8]。さらに、応用面での活用を目指して、エントロピーと量子効果の両方を利用した微小機械の設計指針を作り、実際にプロトタイプを設計して論文化することができた[9]。

さらに、統計力学や熱力学について、関連する成果も挙げることができた。まず、強磁場下の2次元電子系の平衡状態における非対角電流ゆらぎが揺動散逸定理を大きく破り、その背後には、非対角電流ゆらぎには、局在電子状態も非局在状態とおなじくらい寄与するという、非対角伝導度とは対照的な物理があることを明らかにし、論文発表した[10]。その論文は、Editors' Choice に選ばれ、日本物理学会のJPS Hot Topicsにも掲載された。また、熱的量子純粋状態と matrix product state を組み合わせ、新しい定式化を行い、論文として発表した[11]。

さらに、これらの研究で得られた相転移の知見を広く伝えるために、熱力学の教科書の改訂にもとりかかり、一次相転移の熱力学について最も詳しく正確に記述した現代的な教科書として刊行した[12,13]。また、孤立量子系の線形応答が熱力学と整合するための必要十分条件について、著しい結果が得られ、投稿準備中である。

以上のことから、総じて、予定通りの成果を挙げることができたと判断している。

<引用文献>

- [1] 清水明、熱力学の基礎（東京大学出版会、2007）
- [2] K. Hukushima and K. Nemoto, J. Phys. Soc. Jan. 65 (1996) 1604.
- [3] J. R. Ray, Phys. Rev. A 44 (1991) 4061.
- [4] T. Neuhaus, M. P. Magiera, and U. H. E. Hansmann, Phys. Rev. E 76 (2007) 045701(R).
- [5] S. Sugiura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. 108, 240401 (2012), S. Sugiura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. 111, 010401 (2013), M. Hyuga, S. Sugiura, K. Sakai and A. Shimizu, Phys. Rev. B 90, 121110(R) (2014).
- [6] Yasushi Yoneta, Akira Shimizu, Phys. Rev. B 99, 144105-1-13 (2019)
- [7] Yuuya Chiba, Kenichi Asano, Akira Shimizu, Phys. Rev. Lett. 124, 110609-1-7 (2020)
- [8] Mamiko Tatsuta, Yuichiro Matsuzaki, Akira Shimizu, Phys. Rev. A 100, 032318-1-10 (2019)
- [9] Ryoko Hatakeyama and Akira Shimizu, Phys. Rev. B 101, 195427-1--195427-8 (2020).
- [10] Kentaro Kubo, Kenichi Asano and Akira Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn. 91, 024004-1-8 (2022)
- [11] Atsushi Iwaki, Akira Shimizu, Chisa Hotta, Phys. Rev. Res. 3, L022015-1-6 (2021)
- [12] 清水明、熱力学の基礎 第2版 I（東京大学出版会、2021年3月）1-352
- [13] 清水明、熱力学の基礎 第2版 II（東京大学出版会、2021年8月）1-248

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Kubo Kentaro, Asano Kenichi, Shimizu Akira	4. 巻 91
2. 論文標題 Robustness of Equilibrium Off-Diagonal Current Fluctuation against Localization of Electron States in Macroscopic Two-Dimensional Systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 024004-1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.91.024004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Iwaki Atsushi, Shimizu Akira, Hotta Chisa	4. 巻 3
2. 論文標題 Thermal pure quantum matrix product states recovering a volume law entanglement	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 L022015-1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.3.L022015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Ryoko Hatakeyama and Akira Shimizu	4. 巻 101
2. 論文標題 Entropic Quantum Machine	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 195427-1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.101.195427	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoneta Yasushi, Shimizu Akira	4. 巻 99
2. 論文標題 Squeezed ensemble for systems with first-order phase transitions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 144105-1-13
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.99.144105	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yuuya Chiba, Kenichi Asano, Akira Shimizu	4. 巻 124
2. 論文標題 Anomalous Behavior of Magnetic Susceptibility Obtained by Quench Experiments in Isolated Quantum Systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 110609-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.124.110609	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mamiko Tatsuta, Yuichiro Matsuzaki, Akira Shimizu	4. 巻 100
2. 論文標題 Quantum metrology with generalized cat states	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 032318-1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.100.032318	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計17件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 米田靖史, 清水明
2. 発表標題 スクイズドアンサンブルの拡張とその応用
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水明
2. 発表標題 熱機関のパワーと効率の関係の熱力学的導出
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 千葉侑哉, 清水明
2. 発表標題 クエンチ磁気感受率と複数のマクロ物理量固定の熱力学的磁気感受率の関係
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 久保賢太郎, 浅野建一, 清水明
2. 発表標題 巨視系における電流ゆらぎの位置依存性
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 川口廣伊智, 清水明
2. 発表標題 固体電子系の電磁応答による電子の永久電気双極子能率探索
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 米田靖史, 清水明
2. 発表標題 一般化されたスクイズドアンサンブルの応用
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会 (2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 清水明
2. 発表標題 一般化された相律による多成分系の相分離の解析
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会 (2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 千葉侑哉, 清水明
2. 発表標題 一般化された平衡状態の線形感受率と熱平衡化
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会 (2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 久保賢太郎、浅野建一、清水明
2. 発表標題 巨視的二次元電子系における電流ゆらぎへの局在状態の寄与
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会 (2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 清水明
2. 発表標題 量子多体系を測定したら何が測定されるか
3. 学会等名 量子論の諸問題と今後の発展(QMKEK7)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuuya Chiba, Kenichi Asano, Akira Shimizu
2. 発表標題 What is obtained when the susceptibility is measured by quench experiment?
3. 学会等名 Thermalization, Many-Body-Localization and Generalized Hydrodynamics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 龍田真美子, 松崎雄一郎, 清水明
2. 発表標題 Proposal of creation of a generalized cat state in spin ensembles through repetitive measurements by a flux qubit
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 千葉侑哉, 浅野建一, 清水明
2. 発表標題 孤立量子系の磁気感受率の実測値に現れる特異な振舞
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 米田靖史, 清水明
2. 発表標題 スクイズドアンサンブルの拡張
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 千葉侑哉, 浅野建一, 清水明
2. 発表標題 量子クエンチで得られる感受率の振舞と系の非可積分性の関係
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 川口廣伊智, 清水明
2. 発表標題 電子の永久電気双極子能率による固体電子系の巨視的電磁応答
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 岩木惇司, 清水明, 堀田知佐
2. 発表標題 MPSを用いた熱的量子純粋状態の記述
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 清水 明	4. 発行年 2021年
2. 出版社 東京大学出版会	5. 総ページ数 352
3. 書名 熱力学の基礎 第2版	

1. 著者名 清水 明	4. 発行年 2021年
2. 出版社 東京大学出版会	5. 総ページ数 248
3. 書名 熱力学の基礎 第2版	

〔産業財産権〕

〔その他〕

清水研究室ホームページ http://as2.c.u-tokyo.ac.jp/
--

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関