

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 3 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2010～2013

課題番号：22540407

研究課題名(和文)量子物理学と非平衡熱統計力学との相互適用

研究課題名(英文)Mutual application of quantum physics and nonequilibrium statistical mechanics

研究代表者

清水 明 (Shimizu, Akira)

東京大学・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) 3,400,000円、(間接経費) 1,020,000円

研究成果の概要(和文)：従来は解析が困難だった量子系の解析を可能にするような、新しい量子統計力学の定式化を行い、実用的な計算手法を作り出した。それにより、量子物理学の興味の対象になりながら解析が困難だった系の性質を、予言したり解析したりすることを可能にした。

また、ポンプ・プローブ型の実験で得られる、プローブに対する応答関数の普遍的性質について、プローブに対する非線形の応答関数の普遍的性質にまで拡張した。その結果、高次の総和則など、これまでによもや厳密に成り立つとは思われていなかったことが、普遍的に、かつ厳密に成り立つことを明らかにした。

研究成果の概要(英文)：A new formulation of quantum statistical mechanics has been constructed. In this formulation, all quantities of statistical-mechanical interest are obtained from a single pure quantum state. This enables one to analyze quantum systems that are hard to analyze by the conventional methods.

Universal properties of nonlinear response functions of pump-driven non-equilibrium systems have been found. In particular, sum rules for the nonlinear response functions are shown to hold rigorously. This enables one to analyze pump-probe experiments without resort to approximations.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・原子・分子・量子エレクトロニクス

キーワード：量子統計力学 応答関数 非平衡

1. 研究開始当初の背景

(1) かつては少数自由度系を対象にすることが多かった、いわゆる量子物理学(量子光学、原子物理学、量子情報など)の分野でも、近年は、多自由度系を対象にすることが多くなってきた。多自由度系を解析するときの最大の困難は、シュレディンガー方程式の解を正確に求めることが、単純な系を除くと、不可能な点にある。従って、シュレディンガー方程式を解くだけでなく、熱・統計力学的な手法を活用することが重要になってくる。

(2) ところが、熱・統計力学の手法をもってしても、一般の量子系を解析することは困難であり、さらに、非平衡状態の理論も不十分であった。

2. 研究の目的

量子物理学の問題を解くことの困難を解消することと、熱・統計力学の拡張を、一体化して進める。具体的には、

(1) 従来は解析が困難だった量子系の解析を可能にするような、新しい量子統計力学の定式化を行い、実用的な計算手法を作り出す。それにより、量子物理学の興味の対象になりながら解析が困難だった系の性質を、予言したり解析したりすることを可能にする。

(2) 熱・統計力学を(線形応答領域を超えた)非平衡状態に拡張しながら、それを量子物理学の問題に適用する。と同時に、量子物理学の問題に適用した結果を検証することで、熱・統計力学の拡張がうまくいっているかどうかを確認し、(必要であれば)正しく修正することも行う。

3. 研究の方法

解析的な計算と、数値計算とを、適材適所に併用する。具体的には、

(1) 従来は解析が困難だった量子系の解析を可能にするような、新しい量子統計力学の定式化を、解析計算により行う。その実用的な計算手法も、解析計算により作り出す。その有効性を実証するために、量子物理学の興味の対象になりながら解析が困難だった系の性質を、数値計算により、実際に予言したり解析する。

(2) 熱・統計力学を(線形応答領域を超えた)非平衡状態に、解析計算により拡張する。特に、非平衡状態の応答関数の普遍的な性質を明らかにする。さらに、それらの結果が正しいことを、非平衡系を計算機の中に実現するような数値計算で実証する。

4. 研究成果

(1) 非平衡状態を実験的に調べる標準的手法であるポンプ・プローブ型の実験で得られ

る、プローブに対する応答関数の普遍的性質について、プローブに対する非線形の応答関数の普遍的性質にまで拡張した。この結果は厳密である。このような、熱・統計力学を(線形応答領域を超えた)非平衡状態に拡張しながら、非線形応答関数の厳密な普遍的性質を見いだしたのは、この研究が初めてである。その結果、高次の総和則など、これまでにもや厳密に成り立つとは思われていなかったことが、普遍的に、かつ厳密に成り立つことが明らかになった。さらに、プローブだけでなくポンプも時間変動するケースの、線形応答に拡張した。これにより、時間変化する非平衡状態にまで理論が拡張できたことになる。このような、熱・統計力学を(線形応答領域を超えた)時間変動する非平衡状態に拡張しながら、線形応答関数の厳密な普遍的性質を見いだしたのは、この研究が初めてである。

(2) 報告者による、非平衡量子統計力学分野の一般論を、光科学で問題にする、動的なポンプ場で駆動される非平衡状態の応答に拡張した。具体的には、単一バンドの電子系の場合の定式化を完成し、論文として発表した。この理論は、電子間相互作用も、電子格子相互作用も、不純物や欠陥もあっても適用できる、非常に強力な理論である。単一バンドモデルという制限はあるが、そのモデルの範囲内で厳密である。特に、相転移が起こっても成り立つので、相変化の前後の物性の変化について、制限を与えている。これを用いて、固相・液相転位をまたいで、物質の堅さがどのように変化するか、という基本的問題への、ひとつの解答も得られつつある。その結果は、固相に転位して堅くなるのは、低い周波数でみているときだけで、高い周波数で見ると、むしろ固相は液相よりも柔らかくなる、という驚くべき結果が得られた。この結果は、特定の物質に依らない普遍的な結果である。

(3) 量子多体系の非平衡状態を、古典多体系の分子動力学シミュレーションで解析する、新しい手法を作り上げた。量子多体系の非平衡状態を、そのまま解析しようとする、ヒルベルト空間の次元が巨大すぎてお手上げである。そこで、量子系と同様な結果が出るような古典系を構築して、それを分子動力学シミュレーションで解析する、新しい手法を作り上げた。具体的には、フォノンと不純物による散乱を受けながら電流が流れるような電子系の非平衡状態の解析に成功した。従来は、量子系を古典系で代用する場合に、量子力学的なポテンシャルを、同じ関数形のまま、古典力学的なポテンシャルとして採用していた。しかし、それでは散乱の強さが、量子系と古典系で大きく異なってしまう。そのことに着目して、散乱面積が両者で同じになるようにすればよいことを指摘し、それで量子系の性質がよく再現できることを実証し

た。

(4) アンサンブルが不要な、まったく新しい量子統計力学の定式化に成功した。従来の定式化は、統計力学的アンサンブルを必要としていたが、この定式化ではアンサンブルは不要で、平衡状態をたった1個の量子純粋状態で表す。その特別な状態を、我々は熱的量子純粋状態と名付けた。そして、驚くべき事に、そのたった1個の状態から、圧力や磁化のような力学量のみならず、温度やエントロピーなどの純熱力学量まで求められてしまうのだ。つまり、アンサンブル形式のフォン・ノイマン・エントロピーも置き換えることができたのである。さらに、この定式化を用いると、平衡状態にある多体量子系の性質が今までよりもずっと簡単に計算できるようになる、という実用性も備えている。なぜならば、ランダムベクトルにハミルトニアン H の1次式を掛け算してゆくだけで求まってしまうので、空間次元や温度にも制限はないし、フラストレーションがある系にも問題なく適用できるからである。この成果は多くの興味を集め、論文は、Phys. Rev. Lett. に掲載されて、Editor's suggestion に選ばれた。

(5) 上記の新しい量子統計力学の定式化を、カノニカル形式にまで発展させた。上記の論文では、アンサンブル形式のミクロカノニカル形式に対応する熱的量子純粋状態を作り上げたが、これは、アンサンブル形式ののカノニカル形式に対応する熱的量子純粋状態を作り上げたものである。従来の統計力学では、ひとつの平衡状態を求めるのに、指数関数的に多い量子状態を求めなければならなかったが、この定式化では、たった1個の量子純粋状態で平衡状態を表し、その状態から、磁化のような力学変数のみならず、エントロピーや自由エネルギーのような純熱力学量まで、統計力学の対象になるようなあらゆる物理量を求めることができる。そのため、この定式化は、計算手法としても優れており、従来は計算できなかったような系の統計力学的性質を計算できるようになった。その実例として、カゴメ格子上の量子反強磁性ハイゼンベルグ模型の比熱を求め、いわゆる比熱のダブルピークの問題を解決した。この論文も、Phys. Rev. Lett. に掲載されて、Editor's suggestion に選ばれた。

(6) 量子計算機を、量子統計力学の対象になるような量子多体系として扱い、その量子状態の異常性を調べる理論を定式化した。量子統計力学では、通常は、並進対称な物理系を扱う。それに対して量子計算機では、あらゆる量子状態は、プログラム次第で変わるし、同じプログラムを走らせても入力次第で変わる。さらに、同じプログラムで同じ入力でも、量子計算機の実装方法が多様なために、どんな実装をしているかで大きく変わ

ってしまう。そこでまず、これらの差異を吸収して、通常の量子統計力学の土俵に載せるための理論を作った。次に、それを用いて、量子計算機が古典計算機に比べて真のスピードアップを達成するようであれば、必ず異常な量子状態が現れる、という応募者らの予想(Ukena and A. Shimizu, Phys. Rev. A69 (2004) 022301)を厳密に定式化し直した。これにより、応募者らの安定性に関する一般的な理論(Shimizu and T. Miyadera, Phys. Rev. Lett. 89 (2002) 270403)が、すべての量子計算機に適用できるようになり、量子計算機内の量子状態の安定性が調べられるようになった。その具体例として、量子計算機の代表的なアルゴリズムである、ショアの素因数分解と、グローバーの探索アルゴリズムについて、本理論を適用した。その結果、いずれの場合も、異常な量子状態が計算の途中で現れることがわかり、上記の予想が裏付けられた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計6件)

S. Sugiura and A. Shimizu, Canonical Thermal Pure Quantum State. Phys. Rev. Lett. 111 (2013) 010401-1--010401-5. (selected as Editors' suggestion) 査読有 DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.010401>

A. Shimizu, Y. Matsuzaki and A. Ukena, Necessity of Superposition of Macroscopically Distinct States for Quantum Computational Speedup, J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 054801-1--054801-16. 査読有 DOI: <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.054801>

S. Sugiura and A. Shimizu, Thermal Pure Quantum States at Finite Temperature. Phys. Rev. Lett. 108 (2012) 240401-1--240401-4. (selected as Editors' suggestion) 査読有 DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.240401>

A. Shimizu and T. Yuge, Sum Rules and Asymptotic Behaviors for Optical Conductivity of Nonequilibrium Many-Electron Systems, J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 093706-1--093706-4. 査読有 DOI: <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.80.093706>

A. Shimizu, Universal Properties of

Nonlinear Response Functions of Nonequilibrium Steady States, J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010) 113001-1--113001-4.
査 読 有 DOI:
http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.79.113001

〔学会発表〕(計 32 件)

(招待講演)清水 明, 杉浦祥、日向理彦、
堺和光「量子純粋状態による統計力学の定式
化」ワークショップ「統計力学の最近の展開」
2014 年 03 月 03 日 小柴ホール(東大理)

Akira Shimizu, Tatsuro Yuge, Universal
Properties of Optical Response Functions,
DYCE International Workshop, 2012 年 08 月
07 日, 屈斜路プリンスホテル(北海道、川上
郡)

(招待講演)清水明, 「有限温度の熱的純
粋量子状態: 統計力学の新しい定式化」第 1
7 回ナノ量子情報エレクトロニクスセミナ
ー 2012 年 12 月 26 日 東京大学ナノ量子情報
エレクトロニクス研究機構(東京都、目黒区)

(招待講演)清水明, 「統計力学の最近の
発展と課題 --- 私的考察」統計物理学懇談
会 2013 年 03 月 05 日 学習院大学(東京都、
豊島区).

(招待講演)清水明、弓削達郎「非平衡統
計力学と光学過程」日本物理学会 2012 年秋
季大会シンポジウム: 超高速分光・散乱と非
平衡統計力学・情報統計力学のクロスオー
バー 2012 年 09 月 20 日 横浜国立大学(神奈
川県、横浜市)

清水明, 杉浦祥「アンサンブルを使わな
い統計力学」KEK 理論センター研究会「量子
論の諸問題と今後の発展」(QMKEK4)
2012/3/16 高エネルギー加速器研究機構

(招待講演)清水明, 「交換関係のマクロ
な現れ - 非平衡マクロ系のマクロな応答関
数の普遍的性質」小澤正直先生ダブル受賞記
念講演会 2010 年 9 月 17 日 国立情報
学研究所

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年月日:
国内外の別:

取得状況(計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年月日:
国内外の別:

〔その他〕
ホームページ等
<http://as2.c.u-tokyo.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者
清水 明 (SHIMIZU, Akira)
東京大学・総合文化研究科・教授
研究者番号: 10242033

(2) 研究分担者
()

研究者番号:

(3) 連携研究者
()

研究者番号: