

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 1 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26287085

研究課題名(和文)量子純粋状態による統計力学

研究課題名(英文)Statistical mechanics based on pure quantum states

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) 10,000,000円

研究成果の概要(和文)：量子純粋状態を用いた量子統計力学の定式化であるTPQ形式を、ヒルベルト空間の次元が無限大であるときにまで拡張した。また、グランドカノニカルアンサンブルに対応するようなTPQ状態を構成し、ハバードモデルの有限温度の性質を解析することに成功した。また、TPQ状態の量子もつれを解析し、Gibbs状態との大きな違いを明らかにした。さらに、平衡状態のまわりにゆらぐTPQ状態を構成し、その非平衡統計力学との関係を調べ、揺動散逸定理が量子系では破綻する場合があることを示した。また、従来はGibbs状態が用いられていた線形応答理論を、TPQ状態を用いて再定式化することに成功した。

研究成果の概要(英文)：We generalized the TPQ formulation, which is a new formulation of statistical mechanics based on a pure quantum state, to systems with an infinite-dimensional Hilbert space. We also generalized it to the case corresponding to the grand-canonical ensemble, and applied it to the Hubbard model at finite temperature. Furthermore, we studied entanglement of the TPQ states, and clarified great differences from that of the Gibbs states. Moreover, we constructed TPQ states that fluctuate as a function of time, and found that the fluctuation-dissipation theorem is partially violated in macroscopic quantum systems. We also reformulated the linear response theory using the TPQ formulation.

研究分野：物性基礎論・量子物理学・統計力学

キーワード：equilibrium state macroscopic system statistical mechanics pure quantum state

1. 研究開始当初の背景

統計力学で物理量を具体的に求める(予言する)のに必要な原理に絞ると、従来の統計力学の定式化では、本質的には次の2つが基本原理であった:

(1) 平衡状態を表すミクロ状態: 等重率を仮定し、ミクロカノニカル分布で表す。すなわち、Gibbs 状態と呼ばれる混合状態の密度演算子で平衡状態を表す。

(2) エントロピーを与える原理: ボルツマンの関係式 $S = k \log W$ で与える。つまり、Gibbs 状態に混合されている状態の数 W が S を与える。

このように、従来の統計力学は、混合状態で定式化されていた。ところが最近、純粋状態を用いた定式化が発展している。たとえば、(i)を次のものに置き換えることができる:

(1*) 平衡状態を表すミクロ状態: energy shell 内の(Haar 測度の)ランダムベクトルは、ほとんど必ず平衡状態である。つまり、平衡状態はたった1個の純粋状態で表せる。

ただ、これだけでは、温度やエントロピーのような純熱力学量は求まらないので、帯磁率の温度依存性や比熱のような、最も重要な物理量が求まらない。また、上記のベクトルを実際に求めることは、Gibbs 状態を求めるのと同じくらい困難なので、実用上のメリットもなかった。

そこで研究代表者らは、thermal pure quantum (TPQ) 状態と名付けた別の純粋状態を提案し、次のことを証明した:

(1) 平衡状態を表すミクロ状態: 1 個の純粋状態 $|\text{TPQ}\rangle$ で表せる。

(2) エントロピーを与える原理: $|\text{TPQ}\rangle$ の長さがエントロピーを与える。

これにより、たった1個の純粋状態 $|\text{TPQ}\rangle$ から、統計力学の対象になる全ての物理量が求まるようになった。しかも、 $|\text{TPQ}\rangle$ を求めるのは、Gibbs 状態を求めるよりもずっと易しい。空間次元やフラストレーションによる制限もない。このため、新しい強力な計算手法にもなっている。そのことは、1次元スピン系や2次元カゴメ格子上のスピン系などへの応用で次々に実証されつつあった。これらの事から、TPQ 状態を定式化した論文は、2本とも Phys. Rev. Lett. の Editors' suggestion に選ばれたり、種々のワークショップに招待されるなど、注目されていた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、この新しい統計力学の定式化を、次の3つの方向に発展させることにある:

(i) 従来の手法では解析が困難だった系に適用し、その有用さを実証する

これまで、量子スピン系に適用して、他の手法では符号問題などで解析が困難だった2次元(カゴメ格子)フラストレーション系の、比熱やエントロピーを、 $0.1\text{J} < T < +$ という広い温度範囲で1%未満の誤差で求め、いわ

ゆる「ダブルピーク問題」に決着を付けるなど、成功を収めた。そこで本研究では、さらに多彩な物性を示す系である、多体相互作用するフェルミオン系などに適用し、従来は解析が困難だった問題に挑む。

(ii) 非平衡統計力学へ拡張する

線形応答理論にしてもゆらぎの定理にしても、現在の非平衡統計力学の主要な結果は、従来の定式化(1)から導かれるカノニカル密度演算子の性質を、いたる所で利用して導かれている。本研究では、これの代わりに $|\text{TPQ}\rangle$ を用いて、非平衡統計力学の主要な結果を導出することを試みる。そして、従来は見過ごされていた本質をえくり出す。

(iii) 局在した TPQ 状態を作る

実験では、マクロ物理量も時間的にゆらぐ。ところが従来の定式化では、Gibbs 状態は時間変化しないので、その状態での物理量 $A(t)$ の期待値 $\langle A(t) \rangle$ も時間変化しない。そこで、時間相関関数 $\langle A(t)A(0) \rangle$ を計算して、Wiener-Khinchin の定理を通じて時間ゆらぎを知る、というのが従来の手段だった。この事情は、 $|\text{TPQ}\rangle$ でもほとんど変わらない。そこで本研究では、 $|\text{TPQ}\rangle$ を相空間上でもっと局在させて、実験で見えているような、時間ゆらぎがある平衡状態を作る。

3. 研究の方法

解析的な計算と数値計算を併用する。解析的な計算においては、いままでに培ってきた、平衡統計力学と非平衡統計力学の知見を生かして計算を遂行する。数値計算においては、各年度毎にその時点での最新のワークステーションを購入することで対応しながら計算を進めていく。それにより、研究が進むにつれて増大してゆく計算機への負荷に対応していくことができる。

4. 研究成果

たった1個の量子純粋状態を用いた量子統計力学の定式化である Thermal Pure Quantum (TPQ)形式を、ヒルベルト空間の次元が無限大であるときにまで拡張することに成功した。さらに、グランドカノニカルアンサンブルに対応するような TPQ 状態 (grand canonical TPQ state) を構成することもできた。この TPQ 状態を用いて、ハバードモデルで与えられる相関電子系の有限温度の性質を解析することにも成功した。

また、TPQ 状態のエンタングルメント(量子もつれ)を解析し、アンサンブル形式で用いられる Gibbs 状態との大きな違いを明らかにした。たとえば、高温においては、Gibbs 状態のエンタングルメントはほとんどゼロなのに対して、TPQ 状態のエンタングルメントはほとんど最大になる、また、いわゆる熱ゆらぎが、TPQ 状態では量子ゆらぎに取り込まれていることも明らかにした。

さらに、非平衡統計力学への拡張も進展した。まず、従来は Gibbs 状態が用いられてい

た線形応答理論を、TPQ 状態を用いて再定式化することに成功した。また、平衡状態のまわりにゆらぐような TPQ 状態を構成し、その非平衡統計力学との関係を調べた。その結果、ゆらぎを理想的に測定した場合に測定される時間相関関数は、canonical 時間相関では無く、対称化積時間相関になることが分かった。その結果、Onsager の平均崩壊仮説や、揺動散逸関係が、量子系では破綻する可能性があることが分かった。

また、並進対称性を持たない複雑な構造を有する系を、Thermal Pure Quantum (TPQ)形式を用いて解析し、その物理的性質を調べた。いままで解析してきたような並進対称性を持つ系は、せいぜい相転移ぐらいしか興味深い性質を示さないのに対し、そのような系は、「機能」と呼べるものを持つ可能性がある。そこで、系の構造を積極的に設計し、望みの機能を持った系を、TPQ 形式で設計して解析した。その結果、微小なディスプレイや微小な量子非破壊計算機のプロトタイプを設計することができた。

また、混合状態である Gibbs 状態を測定したら純粋状態に近づくことが予想されるが、どのくらい純粋度が増すかを調べ、測定後の状態がどんな物理的性質を持っているかを明らかにした。とくに、測定後の状態が、マクロに異なる状態の重ね合わせを含むことを一般的に証明した、

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9件)

A. Shimizu and K. Fujikura, Quantum Violation of Fluctuation-Dissipation Theorem, J. Stat. Mech. Vol.2017, 024004-1--31 (2017).
<https://doi.org/10.1088/1742-5468/aa5a67>

査読有り(招待論文)

K. Fujikura and A. Shimizu, Universal Property of Quantum Measurements of Equilibrium Fluctuations and Violation of Fluctuation-Dissipation Theorem, Phys. Rev. Lett. Vol.117, 010402-1--6 (2016)

<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.010402>

査読有り

Naoki H asegawa, Tatsuro Yuge and Akira Shimizu, Liquid is more rigid than solid in a high-frequency region, J. Phys. Soc. Jpn. Vol.85, 013001-1-4 (2016).

<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.85.013001>

1

査読有り

杉浦祥, 清水明, 熱的な量子純粋状態を用いた統計力学の定式化, 日本物理学会誌, Vol.70, 368-373 (2015). DOI なし
査読有り(招待論文)

M. Hyuga, S. Sugiura, K. Sakai and A. Shimizu, Thermal Pure Quantum States of Many-Particle Systems, Phys. Rev. B (Rapid Communication), Vol. 90, 121110-1-5(R) (2014).

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.121110>

査読有り

S. Sugiura and A. Shimizu, New Formulation of Statistical Mechanics using Thermal Pure Quantum States, Kinki University Series on Quantum Computing, Vol. 9, 245-248 (2014).

DOI なし

査読有り

[学会発表](計24件)

清水明, 揺動散逸定理の量子破綻, 統計物理学懇談会(第5回)(招待講演) 2017年3月6日, 慶應大学(神奈川県横浜市)

箱嶋秀昭, 清水明, 非平衡定常状態におけるエントロピーの示量性の破れ, 第35回量子情報技術研究会(QIT35) 2016年11月24日, 高エネルギー加速器研究機構(つくば、茨城県)

清水明, 龍田真美子, アンサンブルの等価性の量子破綻にともなう異常な量子状態, 第35回量子情報技術研究会(QIT35)(招待講演) 2016年11月25日, 高エネルギー加速器研究機構(つくば、茨城県)

Akira Shimizu and Kyota Fujikura, Quantum Violation of Fluctuation-Dissipation Theorem, 26th IUPAP International Conference on Statistical Physics (STATPHYS26)(招待講演)(国際学会) 2016年07月17日, Lyon, France

清水明, 藤倉恭太, マクロ量子系のゆらぎ測定と揺動散逸定理の量子破綻,

量子論の諸問題と今後の発展 (QMKEK6),
2016年02月18日, 高エネルギー加速器研究
機構 (つくば市、茨城県)

Akira Shimizu and Kyota Fujikura,
What is measured when fluctuation of
macrovariables is measured in quantum
systems?,
New Frontiers in Non-equilibrium Physics
2015 (国際学会) 2015年08月04日, 京都大
学基礎物理学研究所 (京都府京都市)

Akira Shimizu, Naoki Hasegawa and
Tatsuro Yuge,
Liquid is more rigid than solid in a
high-frequency region,
Nonequilibrium Phenomena in Novel Quantum
States (招待講演)(国際学会), 2014年12
月04日, Kyoto University, Kyoto, Japan

Masahiko Hyuga, Sho Sugiura, and Akira
Shimizu,
Excitonic Thermal Pure Quantum States,
The 7th International Conference on
Spontaneous Coherence in Excitonic
Systems (国際学会) 2014年04月22日,
Hakone, Kanagawa, Japan

[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 (Akira SHIMIZU)

東京大学・大学院総合文化研究科・教授

研究者番号: 10242033