

熱的な量子純粋状態を用いた統計力学の定式化

杉浦 祥 (東京大学物性研究所 sugiura@ASone.c.u-tokyo.ac.jp)

清水 明 (東京大学総合文化研究科 shmz@ASone.c.u-tokyo.ac.jp)

マクスウェルやボルツマンにより創始された統計力学は、ギブズにより「アンサンブル形式」の統計力学として完成し、物理学の礎の一つとなった。しかし、その基本原理については、未解明な部分も残され、教科書の記述も様々である。

アンサンブル形式では、等重率の原理に基づき、「(統計) アンサンブル」と呼ばれる確率集団を導入する。そして磁化や相関関数といった力学のみで定義できる物理量(力学変数)の平衡値は、この確率集団での平均値(アンサンブル平均)として求めることができる。しかし、熱力学で登場する、温度やエントロピーといった量(純熱力学変数)は、力学変数として表すことができない。そこで、純熱力学変数は、von Neumann エントロピー(古典系の場合 Shannon entropy)や分配関数から求める。

しかし、統計力学の基本原則である等重率の原理の本質は、アンサンブル平均ではなく、「ほとんどのミクロ状態がマクロには同じだ」ということである。即ち、温度や体積といったパラメーターを指定した時にあり得るミクロ状態の個数は組み合わせ論的に増大し、すぐに天文学的な数になる。このミクロ状態達のうち、圧倒的多数が平衡状態とみなせる状態であり、マクロ物理量を測った時に同じ測定値を返す。それとは異なる測定値を取るような非平衡状態はずっと少ない。その結果、平衡状態も非平衡状態もひっくりめたアンサンブルを作ってアンサンブル平均を求めれば、その値はほぼ100%を占める平衡状態での値になる。この「典型性」こそが、等重率の本質なのである。それならば、天文学的な数のミク

ロ状態についてアンサンブル平均を計算する必要は必ずしもない。

我々は最近、マクロな量子系における典型性に着目し、熱力学的平衡状態を代表する、熱的な量子純粋状態(Thermal Pure Quantum state, 略して TPQ state)をたった一つ用意するだけで統計力学の全ての結果が得られることを示した。つまり、磁化や相関関数といった力学変数が TPQ state の期待値により計算されるだけでなく、熱力学関数のような純熱力学変数すらも適切な TPQ state の規格化定数から得られる。

TPQ state は、アンサンブルの持つエネルギーの確率分布と非常に近いエネルギー分布を持つ量子純粋状態の中から、一つをランダムに選び出した状態であり、物理量のゆらぎまでも再現する状態となっている。アンサンブル形式では、熱ゆらぎの効果はアンサンブルを導入した結果生じる古典混合によって取り込まれると見なすことができた。しかし、TPQ state を用いた定式化では、量子純粋状態の内部に量子エンタングルメントを作ることによって、熱ゆらぎも量子ゆらぎの一部として取り込んでいる。その結果、たった一つの TPQ state が統計力学で興味ある全ての物理量を正確に与えるのである。

たった一つの量子純粋状態で熱力学的平衡状態が記述できるという事実は、理論的な興味のみならず、応用上もメリットをもたらしている。その例として、本記事では代表的なフラストレーション系である、カゴメ格子系上のハイゼンベルグ模型の数値計算結果を示す。

—Keywords—

等重率の原理:

熱力学において平衡状態は、エネルギーや磁化といった少数個のマクロな物理量の組を指定すれば一つに定まる。他方、マクロな物理量の組が指定された値を持つようなミクロ状態は無数に存在する。等重率の原理とは、平衡状態においてこれらの全てのミクロ状態が等しい確率で実現しているとする仮定であり、アンサンブル形式の統計力学の基本原則の一つである。

量子純粋状態:

量子力学において、原理上許される最大限に定まった状態のこと。通常は、量子純粋状態は、状態ベクトルで表すことができる。

量子混合状態:

量子純粋状態ではない量子状態のこと。量子混合状態は、量子純粋状態を古典的な確率で混合した状態であり、通常は、密度演算子と呼ばれる演算子を用いて表される。

1. はじめに

量子統計力学では従来、平衡状態を量子混合状態で表すアンサンブル形式が用いられてきた。それとは対照的に、以下の事実が最近明らかにされた。¹⁻⁵⁾ エネルギー殻 $(U - \Delta U, U]$ (U : エネルギー, ΔU : $O(N)$ のエネルギー幅) に含まれるエネルギー固有状態を重ね合わせた、量子純粋状態を考える。すると、これらのうち (偏りのない自然な尺度で見たときに) 殆ど全ての状態は、磁化や相関関数といった全ての (次節の意味の) 「力学変数」に対し、ミクロカノニカル平均と指数関数的に小さな誤差で一致する期待値を与える。この結果は、指定したエネルギーを持つ全ての量子純粋状態のうち、ほとんど全てが熱力学的平衡状態を表せることを示している。我々はこれを一般化して、統計力学を、量子純粋状態で定式化し直すことを行った。⁶⁻⁸⁾

まず、上記の状態に限らず、全ての「力学変数」に対して正しい平衡値を与える純粋状態のことを、一般に、熱的量子純粋状態 (Thermal Pure Quantum (TPQ) state) と名付けた。しかし、統計力学の対象は、力学変数だけではない。むしろ、温度やエントロピーといった純熱力学変数の方が、熱力学と結び付いてマクロな予言を可能にする、本質的な統計力学量である。

アンサンブル形式では、純熱力学変数は、von Neumann エントロピーや分配関数で与えられていた。つまり、純熱力学変数は量子力学的な可観測量の期待値として計算することができない。上記のミクロ状態の典型性は、量子力学的可観測量である力学変数のみについての議論なので、一つの TPQ state から純熱力学変数を得ることは一見困難に思える。ところが我々は、適切な TPQ state を用いれば、その長さから純熱力学変数が求まることを見いだした。つまり、たった一つの TPQ state から、統計力学で興味ある全ての量が求まることを明らかにした。^{6,7)}

本記事では特に、canonical TPQ (cTPQ) state⁷⁾ を詳しく紹介する。上述したエネルギー殻上のランダムベクトルは、エネルギーを指定した TPQ state であったが、cTPQ state とは温度を指定した TPQ state であり、比熱などの計算に便利な TPQ state である。また、cTPQ state はランダムな初期状態にハミルトニアンを掛け算をした状態達から作ることができる。そのため、TPQ state による定式化は、理論的な興味のみならず、応用上にも大きなメリットがある。その一例として、代表的なフラストレーション系である、カゴメ格子系上のハイゼンベルグ模型の数値計算結果を示す。

2. canonical TPQ state

対象系は N サイト (あるいは N 粒子) からなる量子系とし、そのヒルベルト空間を \mathcal{H}_N とする。文献7では、 $\dim \mathcal{H}_N$ や力学変数 \hat{A} のノルム $\|\hat{A}\|$ が有限であると仮定していたが、ここでは $\dim \mathcal{H}_N = \infty$ や $\|\hat{A}\| = \infty$ でも成り立つ形式を紹介する。⁹⁾ 統計力学の対象になる力学変数は、量子力学的な可観測量のうち、磁化や相関関数といったマクロな力学量

のみである。つまり、統計力学における「力学変数」とは、局所演算子の高々 $O(1)$ 次の多項式として表される物理量だけである。我々は、アンサンブル形式が熱力学^{10,11)} と整合する結果を与えるような通常の系を考えるので、どんな (上記の意味の) 力学変数 \hat{A} の自乗のアンサンブル平均 $\langle \hat{A}^2 \rangle_{\beta, N}^{\text{ens}}$ も、せいぜい N の低次多項式でしか増大しない^{*1}:

$$\langle \hat{A}^2 \rangle_{\beta, N}^{\text{ens}} \leq KN^{2m}. \quad (1)$$

ここで、 $K = O(1)$ と $m = O(1)$ は、 \hat{A} とは無関係な定数である。これらの仮定の下で、以下の結果が得られる。

系のハミルトニアンを \hat{H} とすると、アンサンブルを用いた従来の統計力学では、 N と逆温度 β を指定した熱平衡状態はギブズ状態 $\exp[-\beta\hat{H}]/Z$ で表されていた。これに対して、同じ熱平衡状態を表す TPQ state である cTPQ state は、次式で定義される。^{*2}

$$|\beta, N\rangle \equiv \sum_i c_i \exp[-\beta\hat{H}/2] |i\rangle \quad (2)$$

ここで、 $|i\rangle_i$ は \mathcal{H}_N 上の任意の正規直交基底、^{*3} 各 $c_i = (x_i + iy_i)/\sqrt{2}$ は x_i と y_i を共に標準正規分布でサンプルした複素数である。 $|i\rangle_i$ の任意のユニタリー変換に対して確率変数 $\{c_i\}_i$ は不変な測度を持つので、 $|i\rangle_i$ として product state など自明な基底を用いることができる。アンサンブルを用いる場合、等重率の原理を仮定するが、後に見るように、TPQ state ではこの一様測度の複素確率変数 $\{c_i\}_i$ が等重率に代わる役割を果たす。そして、この cTPQ state $|\beta, N\rangle$ を用いれば、エントロピーや自由エネルギーといった純熱力学変数は $|\beta, N\rangle$ の長さから、そして、磁化や相関関数といった力学変数の平衡値は $|\beta, N\rangle$ での期待値を計算するだけで、求めることができる。これらを順番に見ていこう。

まず、熱力学関数の一つである自由エネルギーについては、 $\{c_i\}_i$ のランダムネスに由来した、 N の指数関数で小さくなる誤差の範囲で

$$f(\beta; N) = -\frac{1}{N\beta} \ln \langle \beta, N | \beta, N \rangle, \quad (3)$$

が成り立つ。^{*4} ここで $f(\beta; N) \equiv -(1/N\beta) \ln Z(\beta, N)$ は、サイト (または一粒子) あたりの自由エネルギー密度、 $Z(\beta, N)$ は分配関数である。^{*5}

上で述べた「誤差」とは、 $|\beta, N\rangle$ が乱数 $\{c_i\}_i$ を持つ結果、 $|\beta, N\rangle$ の長さがばらつき、式(3)からずれる誤差である。この誤差が N の指数関数で小さいことは、具体的には、次の不等式のように評価することができる: 任意の正数 ϵ に

*1 この条件は、 $\|\hat{A}\| = \infty$ であっても通常は満たされる。

*2 $\exp[-\beta\hat{H}/2]$ は高エネルギー状態のカットオフとして働いており、 $\dim \mathcal{H}_N = \infty$ の場合、 $\sum_i c_i$ と $\exp[-\beta\hat{H}/2]$ の順序は交換できない。

*3 一般に、物理量を規約表現する \mathcal{H}_N は可分、すなわち、その基底は離散的にラベル付けできることが知られている。

*4 文献7では $\ln \lambda$ という項がこれに加わるが、これは c_i の定義が本記事とは異なることによる定数の差である。式(11)も同様。

*5 自由エネルギー密度の引数が、 (β, N) ではなく $(\beta; N)$ となっているのは、 $N \rightarrow \infty$ で $f(\beta; N)$ が N に依存しない関数 $f(\beta)$ へと収束することを強調するためである。

ついて

$$P\left(\left|\frac{\langle \hat{A}, N | \beta, N \rangle}{Z(\beta, N)} - 1\right| \geq \epsilon\right) \leq \frac{1}{\epsilon^2 \exp[2N\beta\{f(1/2\beta; N) - f(1/\beta; N)\}]} \quad (4)$$

が成り立つ。ここで、 $P(\dots)$ は \dots が満たされる確率である。右辺の分母の項のうち、 β は $O(1)$ で、熱力学より $f(1/2\beta; N) - f(1/\beta; N)$ も正の $O(1)$ の量である。よって、式(4)の右辺は N を増やすにつれて指数関数的に小さくなる。

力学変数 \hat{A} の平衡値は、cTPQ stateの期待値 $\langle \hat{A} \rangle_{\beta, N}^{\text{TPQ}} \equiv \langle \beta, N | \hat{A} | \beta, N \rangle / \langle \beta, N | \beta, N \rangle$ から指数関数的に小さな誤差で得ることもできる。^{*6} この期待値 $\langle \hat{A} \rangle_{\beta, N}^{\text{TPQ}}$ と、カノニカルアンサンブル平均 $\langle \hat{A} \rangle_{\beta, N}^{\text{ens}} \equiv \text{Tr}[e^{-N\beta\hat{A}}] / Z$ がずれる確率の上限を見積もると、任意の正数 ϵ について、

$$P\left(\left|\langle \hat{A} \rangle_{\beta, N}^{\text{TPQ}} - \langle \hat{A} \rangle_{\beta, N}^{\text{ens}}\right| \geq \epsilon\right) \leq \frac{1}{\epsilon^2} \frac{\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle_{\beta, N}^{\text{ens}} + (\langle \hat{A} \rangle_{\beta, N}^{\text{ens}} - \langle \hat{A} \rangle_{\beta, N}^{\text{TPQ}})^2}{\exp[2N\beta\{f(1/2\beta; N) - f(1/\beta; N)\}]} \quad (5)$$

ここで、 $\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle_{\beta, N}^{\text{ens}} \equiv \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\beta, N}^{\text{ens}})^2 \rangle_{\beta, N}^{\text{ens}}$ である。式(5)の右辺の分子はマクロな力学量 \hat{A} や、そのゆらぎのアンサンブル平均である。これらの項は、式(1)より、系の大きさ N を増やすにつれて高々 N の多項式程度の速さでしか増えない。一方、分母は式(4)と同様に $O(\exp[N])$ で増大する。よって、式(5)の右辺は N を増やすにつれて指数関数的に小さくなるのが分かる。つまり、一つの状態 $|\beta, N\rangle$ によるマクロな力学変数 \hat{A} の期待値は、指数関数的に小さな誤差で正しい平衡値を与えることが示された。

以上により、統計力学で興味ある物理量は全て、たった一つのcTPQ stateから得られることが分かった。この、TPQ stateに基づいた統計力学の定式化を、アンサンブル形式と対比して、TPQ形式と呼ぶことにする。

なお、TPQ stateはヒルベルト空間 \mathcal{H}_N 上のベクトルであり、ギブズ状態に余分な自由度を付けて(いわゆる“purification”¹²⁾により)純粋状態にしたもの(例えば、Thermo Field Dynamicsにおける熱平衡状態^{13, 14)})とは全く異なる。

3. 数値計算への応用

熱平衡状態を一つの量子純粋状態で表せる、という事実は、理論的な興味のみならず実用上もメリットとなる。従来のアンサンブル形式では、通常、エネルギー固有状態の情報がないと計算できないため、ハミルトニアンを対角化する必要がある。一方、TPQ stateはエネルギー固有状態ではないので対角化は不要であり、5, 6節で述べるように、初期ランダムベクトルにハミルトニアン行列を掛け算

*6 ひとたび自由エネルギーを得れば、ルジャンドル変換により他の熱力学関数を、微分により純熱力学変数や力学変数の平衡値を得ることができる。しかし、アンサンブル形式で力学変数についてアンサンブル平均が実用上よく用いられることに似て、TPQ stateを用いる場合でも自由エネルギーを経由するよりも期待値で直接求める方が便利である。

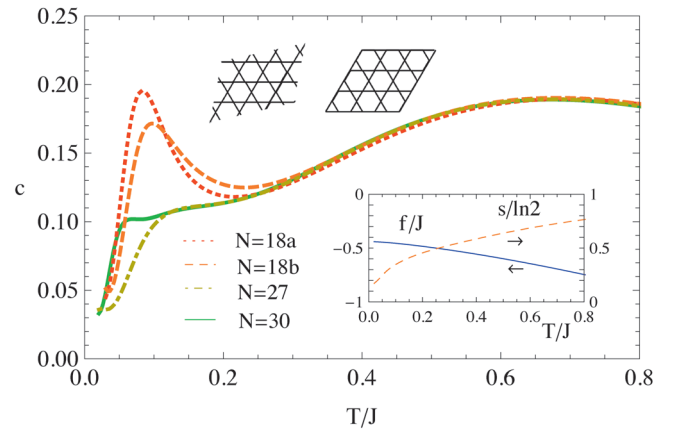


図1 カゴメ格子系での c vs. T の結果。 $N=30, 27$ and $18a, 18b$ に対応するクラスターの形は、それぞれ、図中左、右、そして文献16に示してある(挿入図)。 $N=30$ での f vs. T と s vs. T の結果。

するだけで得ることができる。計算機的にも、行列の掛け算は並列化効率が高く、近年発達が著しいスパコンの得意とする計算である。さらに、cTPQ stateを用いた計算法は、一回だけ低温まで計算を行うと、それより上の全ての温度での結果が求まる方法となっている。

実例として、我々はTPQ形式を用いてカゴメ格子上の反強磁性ハイゼンベルグ模型の数値計算を行った。この模型では、サイト数 N が12から18程度の数値対角化の結果から、低温において比熱が2つのピークを持つのではないかと言われていた。¹⁵⁻¹⁸⁾ しかし、カゴメ格子系は代表的なフラストレーション系であり、量子モンテカルロ法では負符号問題が生じるなど、有限温度の計算が困難なため、本当に2つのピークがあるのか未だに決着はついていない。図1にcTPQ stateを用いて得られた比熱(メインの図)と、自由エネルギー密度とエントロピー密度(挿入図)の数値計算結果を示す。cTPQ stateによる計算でも、 $N=18$ では従来の結果を再現し、確かに比熱が2つのピークを持つ。¹⁶⁾ しかし、数値対角化では計算困難な $N=27$ と30について、cTPQ stateでの計算を行って得た結果を見ると、低温側($0.1J$ 付近)のピークがほとんど消えてしまうことが分かった。これらの結果は $N \rightarrow \infty$ において比熱の低温側のピークが存在しないことを示唆する。

また、式(4)-(5)の右辺の ϵ 以外の全ての項はcTPQ stateによって計算できる量から成っている。この意味で、TPQ形式での数値計算は、計算結果自身から精度を見積もることができる。実際に、比熱の計算結果の初期乱数に依存した誤差を見積もると、 N を30まで増やすと、 $T=0.1J$ という低温に至っても誤差は依然1%以下であることが保証される。

これほど低温でも誤差が小さいのは、計算した系がフラストレーション系であることと密接に関わっている。フラストレーション系では低温でのエントロピーが非常に大きく、図1の挿入図にも示したように、カゴメ格子では $T=0.1J$ で全エントロピーの30%ものエントロピーがある。こ

れはフラストレーションの効果で様々な低励起状態が存在する結果であり、1次元系の低励起状態が非常に少ないこととは対照的である。¹⁷⁾そして、この大きなエントロピーは式(4)、(5)の右辺の分母が大きく、計算の誤差が非常に小さいことを意味する。つまり、従来の複雑すぎて解けない、と言われてきたフラストレーション系やフェルミオン系では、むしろTPQ stateの持つ誤差が小さくなるということであり、TPQ形式はこういった系に対して特に大きなメリットがあると期待される。実際我々のグループは最近、強相関電子系の性質を、TPQ stateの一種であるgrand-canonical TPQ stateを使って、広い温度範囲で精度良く求めることにも成功している。⁹⁾

4. メカニズム

ここまで結果のみを列挙してきたので、まだ違和感を感じている方もおられるだろう。そこで、これ以降の節はTPQ stateの物理的描像や具体的な計算法について説明していく。実は、ランダムな初期値 $\{c_i\}_i$ が基底変換に対して不変な測度を持つことが重要な役割を果たしているのである。このことを見るため、エネルギー密度 $\hat{h} \equiv \hat{H}/N$ の固有状態 $\hat{h}|n\rangle = u_n|n\rangle$ による基底 $\{|n\rangle\}$ を用いて $|\beta, N\rangle$ を展開する。

$$|\beta, N\rangle = \sum_n c_n \exp[-N\beta u_n/2]|n\rangle. \quad (6)$$

ここで $\{c_n\}_n$ は $\{|n\rangle\}_n$ に対応した係数であるが、ユニタリー変換に対して不変な測度を持つ。つまり、 $\{c_n\}_n$ は依然として同じガウス分布に従って生成された乱数の組であるとみなせる。この状態が持つエネルギー分布 $h(u, N)$ を見てみよう。

$$h(u, N) \equiv \frac{1}{\delta u} \sum_n' |c_n|^2 e^{-N\beta u_n} \approx \tilde{g}(u, N) e^{-N\beta u} \quad (7)$$

ここで、 \sum_n' は $u_n \in (u - \delta u, u]$ なる n についての和、 δu は $O(1)$ の小さなエネルギー幅、 $\tilde{g}(u, N) \equiv \delta u^{-1} \sum_n |c_n|^2$ である。 δu を固定し、 u を変化させることで、 $h(u, N)$ は $|\beta, N\rangle$ のエネルギー分布関数とみなせる。この時、一つ一つの $|c_n|^2$ は当然ランダムにゆらいでしまうが、どの有限温度領域においても、 $(u - \delta u, u]$ に含まれる状態数は指数関数的に大きい。その結果、大数の法則が働き、たくさんの和から成る $\tilde{g}(u, N)$ は平均値、すなわち状態密度 $g(u, N)$ に非常に近い分布を持つのである。その結果、cTPQ state $|\beta, N\rangle$ のエネルギー分布は

$$h(u, N) = g(u, N) e^{-N\beta u} \quad (8)$$

という、ギブズ状態のエネルギー分布とも一致した分布であることが分かる。つまり、cTPQ stateとは、式(8)のようなエネルギー分布を持つ量子純粋状態達の中からランダムに一つが取り出されてきた状態なのである。

5. microcanonical TPQ state

1節で熱平衡状態を表す状態としてTPQ stateを大雑把に特徴づけたが、ここでTPQ stateを厳密に定義しよう。ある状態 $|\psi\rangle$ が何らかの確率測度に従って生成される時、 $N \rightarrow \infty$ につれて、全ての(2節の意味の)「力学変数」 \hat{A} に対して一様に

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle \xrightarrow{P} \langle \hat{A} \rangle_N^{\text{ens}} \quad (9)$$

と確率収束していく時、 $|\psi\rangle$ をTPQ stateと定義する。ここで、 \xrightarrow{P} は $N \rightarrow \infty$ につれて確率収束することを意味し、 $\langle \hat{A} \rangle_N^{\text{ens}}$ は対応するアンサンブル平均である。

この定義は、十分大きな N についてTPQ stateをたった一つ用意すれば、全ての力学変数に対して平衡値が得られることを要求している。先行研究¹⁻⁵⁾で導入されたエネルギー殻内のランダムベクトルも、cTPQ stateもこの定義を満たしている。後者はそれに加え、ベクトルの長さが純熱力学量を与えるという特別な性質を持っていた。そこで、前節のアイデアに倣って、ベクトルの長さから純熱力学量が計算可能なもう一つのTPQ state、microcanonical TPQ (mTPQ) stateを導入する。⁶⁾ただし、このmTPQ stateは、実用上の構成のしやすさを重視する。

数値計算などの実際の計算では、 \mathcal{H}_N は有限次元のものを用いる。そのような有限次元空間は、通常のように、スピン系やハバード模型のような有効モデルを用いるか、エネルギーにカットオフを入れれば得られる。⁷⁾そうしておいてから、ランダムベクトル $|\psi_0\rangle \equiv \sum_i c_i |i\rangle$ を用意する。^{*7}4節で見たように、 $|\psi_0\rangle$ は状態密度 $g(u)$ と非常に近いエネルギー分布を持った量子純粋状態である。そこで、これに \hat{h} の関数を掛け、望みのエネルギー殻内にエネルギー分布が集まった状態を作る。 \hat{h} の関数としては様々な可能性があるが、その中で、次式で定義される状態 $|k\rangle$ はとても効率的に生成することができて便利である⁶⁾:

$$|k\rangle \equiv (l - \hat{h})^k |\psi_0\rangle \quad (k=0, 1, 2, \dots), \quad (10)$$

ここで、 l は $l \geq [\hat{h}$ の最大固有値]なる任意の定数である。この状態 $|k\rangle$ がmTPQ stateである。

このmTPQ stateに関する結果を以下列挙すると、まずエネルギー密度の平衡値 u_k は、 $u_k = \langle k | \hat{h} | k \rangle / \langle k | k \rangle$ で得られる。より一般に、任意の力学変数 \hat{A} の平衡値も $\langle k | \hat{A} | k \rangle / \langle k | k \rangle$ で得られる。そして、この値がエネルギー Nu_k のミクロカノニカルアンサンブル平均へと、 N を増やすにつれて収束していくことが示せる⁶⁾ので、 $|k\rangle$ はTPQ stateの定義式を満たしているのである。また、純熱力学量についても、 $|k\rangle$ の長さがエントロピー密度 $s(u)$ を与える。⁷⁾つまり、

$$\frac{1}{N} \ln \langle k | k \rangle - \frac{2k}{N} \ln(l - u_k) \xrightarrow{P} s(u_k) \quad (11)$$

が成り立つ。

^{*7} $\dim \mathcal{H}_n$ を有限化した結果、式(2)の $\sum_i c_i$ と $\exp[-\beta H/2]$ は交換できるようになる。

以上の結果は、cTPQ stateと同様の結果であるが、mTPQ stateのメリットはランダムベクトルにハミルトニアン密度 \hat{h} を $O(N)$ 回掛け算するだけで容易に生成できる点にある。この性質を利用し、次の節ではcTPQ stateを、mTPQ state達を重ね合わせることで構成する。

6. canonical TPQ stateの分解

cTPQ stateは温度を指定しているの、系の低温の性質を見る時にメリットがある。そのcTPQ stateを効率的に構成するため、次のように $\exp[N\beta(l-\hat{h})/2]$ をテイラー展開し、mTPQ state達の重ね合わせ状態に分解する：

$$|\beta, N\rangle = e^{-N\beta/2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(N\beta)^k}{2^k k!} |k\rangle = e^{-N\beta/2} \sum_{k=0}^{\infty} R_k |\psi_k\rangle. \quad (12)$$

ここで、 $|\psi_k\rangle \equiv |k\rangle / \sqrt{\langle k|k\rangle}$ は規格化されたmTPQ stateであり、 $R_k \equiv \sqrt{\langle k|k\rangle} (N\beta/2)^k / k!$ は重ね合わせの係数である。これは無限和であるが、実はこの和に主要な寄与をする k の数はあまり多くなく、 $R_k (>0)$ が最大値を取るのは、 u_k の値が $\langle \beta, N | \hat{h} | \beta, N \rangle$ に最も近いような k の時であることが示せる。⁷⁾ そして、他の k の寄与は、対応する u_k が $\langle \beta, N | \hat{h} | \beta, N \rangle$ から遠ざかるにつれ、指数関数的に減衰していく。つまり、cTPQ stateは寄与の大きな少数個のmTPQ state達のみを使って効率的に構成することができるのである。3節で示した数値計算結果も、この分解に基づいて計算を行った。

7. エンタングルメント

TPQ形式では平衡状態を量子純粋状態を表すのに対し、アンサンブル形式では平衡状態をギブズ状態 $\exp[-\beta\hat{H}]/Z$ などの混合状態で表す。このように全く異なった状態が同一の熱平衡状態を記述できるのは、統計力学の対象がマクロな物理量であり、系の自由度に比べて圧倒的に少ない数のマクロ物理量を測るだけでは、平衡状態が純粋状態か混合状態なのか区別するには情報が全く足りないということに由来している。^{1,2)} しかし、状態の量子エンタングルメントを見ると、マクロな力学量ではない N 体相関を見ることになるので、これらは区別できる。⁸⁾

その実例を、図2に示す。これは、 $N=16$ の1次元ハイ

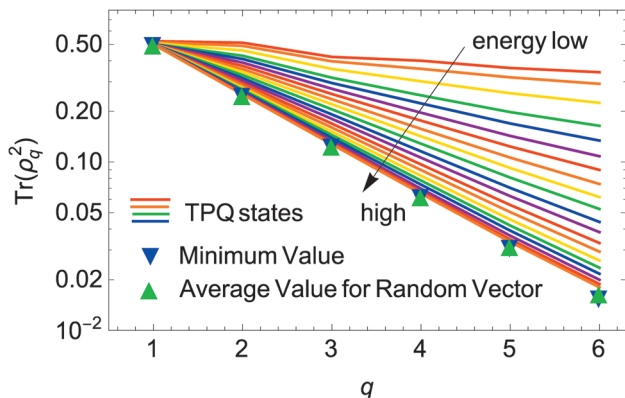


図2 $N=16$ でのハイゼンベルグ鎖のPurity vs. q の結果。

ゼンベルグ鎖のmTPQ stateを求め、16サイトのうち連続する q サイトを残し、ほかのサイトをトレースアウトして得られた縮約密度行列 $\hat{\rho}_q$ の、purity $\text{Tr}[\hat{\rho}_q^2]$ を計算した結果である。⁸⁾ TPQ stateは量子純粋状態なので、このpurityがエンタングルメントの大きさを測る物差しになる。即ち、purityが小さいほどmTPQ stateは大きな量子エンタングルメントを持つ。

まず、図2の中で下向き三角形はpurityの理論的な最小値である。一方、上向き三角形は、ランダムベクトル $|\psi_0\rangle$ の持つpurityの解析的に導出された平均値である。¹⁹⁾ この2つの結果はほぼ重なっており、 $|\psi_0\rangle$ がほぼ最大限にエンタングルした状態であることが分かる。次に、図2の各線は、それぞれがエネルギーの異なったTPQ stateでのpurityの数値計算結果である。⁸⁾ TPQ stateでは縮約密度行列のpurityが非常に小さく、指数関数的に大きな量子エンタングルメントを持ち、特に高温領域ではほとんど最大限にエンタングルしていることが分かる。これとは対照的に、ギブズ状態は高温領域でエンタングルメントがほとんど無くなる。例えば、温度無限大ではギブズ状態は恒等演算子 $\hat{1}$ になり、エンタングルメントを一切持たない。アンサンブル形式では、指数関数的な個数のエネルギー固有状態を古典混合するので、量子エンタングルメントは小さくなるのだ。それに対してTPQ stateでは、莫大な個数のエネルギー固有状態を重ね合わせて巨大な量子エンタングルメントを作ることで、平衡状態のマクロな性質を全て再現しているのである。

例えば、物理量のゆらぎは、アンサンブル形式では、量子ゆらぎと確率混合によるゆらぎ(いわゆる「熱ゆらぎ」)の和であったが、TPQ stateには後者のゆらぎはない。しかし実は、量子ゆらぎと「熱ゆらぎ」は、そもそも個別に実測できる量ではなく、その和だけが実測できる。その実測されるゆらぎの大きさについては、TPQ stateもアンサンブル形式と同じ値を与える。TPQ stateでは、巨大な量子エンタングルメントを作ることで、「熱ゆらぎ」も量子ゆらぎの中に取り込んでいるのである。⁸⁾

このように、平衡状態を表すマイクロ状態は一意的ではない。TPQ stateは純粋状態の側、アンサンブルは混合状態の側の極限的な例であり、例えば同じ平衡状態を表す数個のTPQ stateをほどほどに混合させることで、同じ平衡状態を表す中間の状態をいくらかでも作ることができる。実験でどれが実現するかは実際に平衡状態を用意するやり方に強く依存する。むしろ統計力学を使う立場である人類にとって重要なのは、マイクロには気の遠くなるほどの数が存在する全く異なる状態達が、全て同じ熱力学的な平衡状態を表しており、TPQ形式でもアンサンブル形式でも、都合のよい定式化を使って計算をすれば、どれでも系の熱力学的性質を得ることができる、という事実だろう。

参考文献

- 1) 杉田 歩: RIMS 講究録 **1507** (2006) 147.
- 2) A. Sugita: Nonlinear Phenom. Complex Syst. **10** (2007) 192.
- 3) S. Popescu, A. J. Short and A. Winter: Nat. Phys. **2** (2006) 754.
- 4) S. Goldstein, *et al.*: Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 050403.
- 5) P. Reimann: Phys. Rev. Lett. **99** (2007) 160404.
- 6) S. Sugiura and A. Shimizu: Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 240401.
- 7) S. Sugiura and A. Shimizu: Phys. Rev. Lett. **111** (2013) 010401.
- 8) S. Sugiura and A. Shimizu: in *Physics, Mathematics, and All That Quantum Jazz*, Kinki University Series on Quantum Computing, Vol. 9, ed. by S. Tanaka, M. Bando and U. Güngördü (World Scientific, Singapore, 2014), p. 245. (arXiv: 1312.5145)
- 9) M. Hyuga, S. Sugiura, K. Sakai and A. Shimizu: Phys. Rev. B **90** (2014) 121110(R).
- 10) H. B. Callen: *Thermodynamics* (John Wiley and Sons, New York, 1960).
- 11) 清水 明: 『熱力学の基礎』(東京大学出版会, 2007).
- 12) M. A. Nielsen and I. L. Chuang: *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000).
- 13) Y. Takahashi and H. Umezawa: Collective Phenom. **2** (1975) 55.
- 14) H. Umezawa, H. Matsumoto and M. Tachiki: *Thermo Field Dynamics and Condensed States* (North-Holland, Amsterdam, 1982); M. A. Nielsen and I. L. Chuang: *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000).
- 15) V. Elser: Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 2405.
- 16) N. Elstner and A. P. Young: Phys. Rev. B **50** (1994) 6871.
- 17) P. Sindzingre, G. Misguich, C. Lhuillier, B. Bernu, L. Pierre, Ch. Waldtmann and H.-U. Everts: Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 2953.
- 18) M. Isoda, H. Nakano and T. Sakai: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 084704.
- 19) A. Sugita and A. Shimizu: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 1883.

(2014年1月15日原稿受付)

Formulation of Statistical Mechanics Using Thermal Pure Quantum State

Sho Sugiura and Akira Shimizu

abstract: We have established a new formulation of statistical mechanics based on a pure quantum state, which we call a thermal pure quantum (TPQ) state. A single TPQ state gives all quantities of statistical-mechanical interest. Namely, it gives equilibrium values of mechanical variables, such as the magnetization and correlation function, and those of genuine thermodynamic variables and thermodynamic functions, such as the entropy and free energy. In the TPQ formulation, all thermal fluctuations are included in quantum-mechanical fluctuations. As a consequence, TPQ states have much larger quantum entanglement than the equilibrium density operators of the ensemble formulation. In addition to the fundamental interest of statistical mechanics, we show that the TPQ formulation is very useful in practical computations. This is evidenced by applying the formulation to a frustrated two-dimensional quantum spin system.