東京大学 大学院総合文化研究科広域科学専攻相関基礎科学系・教養学部統合自然科学科 合併講義（2020年夏学期）

量子物理学（相関基礎科学系）・量子力学特論（統合自然科学科） by 清水明

講義題目：量子統計力学　(Quantum Statistical Mechanics)

量子統計力学の研究は、20世紀後半には、応用面に重点が置かれていたように思う。それが、21世紀に入ってから、その基礎的な面まで大きく研究が進むようになった。本講義では、純粋状態統計力学や孤立量子系の量子統計力学などの、量子統計力学の最近の発展について講義する。また、生物学との関係で著しく重要性が増している一次相転移の熱力学と統計力学についても講義する予定である。

授業のキーワード：量子統計力学、典型性、熱的量子純粋状態、一次相転移、孤立量子系
quantum statistical mechanics, typicality, thermal pure quantum state, first-order phase transition, isolated quantum systems

---

レポートについて

単位が欲しい人は、講義の内容で、計算を略したところとか、「自分で」と指示したところからいくつかを選んで、自分で計算した内容をレポートにしてください。講義に触発されて自分で考えたネタも歓迎です！講義の感想も書いておいてくださると助かります。

提出先：追って指示します。

〆切：追って指示します。

純粋状態統計力学

ensemble 形式 ⟺ TPQ 形式 (thermal Pure Quantum)

↑ $\exp(\Theta(N))$ の数の microstates の古典確率混合

↑ 1個の microstate

2016年の講ギとのちがい.

2016
- 量子統計力学全ぱん
  ensemble 形式 + TPQ

2018
- TPQ 形式 + ensemble 形式
- これの実用的な計算法、もやる。
- Basic ideas
  thermalization, etc.

equilibrium

eq. state $\xleftrightarrow{\text{対応}}$ microstate $\hat{\rho}$

ミクロな力学りろんの observable

熱力学　　量子力学

mechanical variable

$E, N, M_z, \dots$　　$\hat{H}, \hat{N}, \hat{M}_z, \dots$

量子力学的 observable.

$T, S, F, \dots$

genuine thermodynamic variable

- typicality

info.

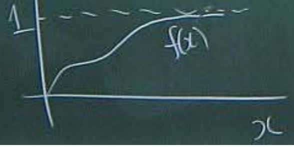
- 清水研 けんさく
  → こうざの板書
- 単位が欲しい人
  → レポート

Ch.1 統計力学とは?

最近: 小さな系の統が流行

このこうぎ: 基本になる、マクロ系の統をやる。

↑ 漸近理論



$$\lim_{x\to\infty} f(x) = 1$$

このイミは

$\forall \varepsilon > 0,\ \exists X_\varepsilon$

$|f(x) - 1| < \varepsilon$ for $x > X_\varepsilon$

「いくらでも近づける」

ex, $\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} = 0$　　$\lim_{n\to 0} n = 0$

統 ボルツマンの公式

$$\lim_{V\to\infty} \left| \frac{k_B \ln W}{V} - \frac{S}{V} \right| = 0$$

Ch.2 熱力学の復習

（くわしくは、清水「熱力学の基礎」）

マクロな物理量

- ・示量変数：$E, V, N, S, \cdots$
- ・示強変数：$T, P, \mu, \cdots$

注 $\frac{E}{V}, \frac{S}{N}$ などは「示量変数みつど」と呼ぶ！

対象系 $\Longrightarrow$ 「単純系」の集まり

ピストン

熱力学的性質は「基本関係式」で決まる。

ex) $S = S(E, V, N)$

平均値とゆらぎ

$\langle N \rangle \propto V$

$\delta N \propto o(V)$ （ex) $\sqrt{V}$）

$\therefore \frac{\delta N}{\langle N \rangle} \propto \frac{o(V)}{V} \xrightarrow[V\to\infty]{} 0$

示強変数は、

$\langle P \rangle \propto V^0 = 1$

$\delta P \propto o(V^0) = o(1)$

$\therefore \frac{\delta P}{\langle P \rangle} \propto \frac{o(1)}{1} \xrightarrow[V\to\infty]{} 0$

$\therefore$ Vを十分大きくすれば、

$N = \langle N \rangle$

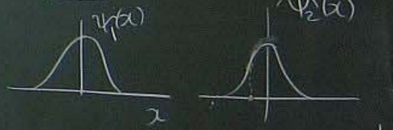
$P = \langle P \rangle$

と（より精度）みなせる。（漸近りろん！）

マクロに見て同じ状態

マクロ系の２つの状態について、どんなマクロ変数の値の差も相対的に無視できるとき。

ex)



量子状態としては $\psi_1 \neq \psi_2$！

$\therefore \int |\psi_1(x) - \psi_2(x)|^2 dx \neq 0$

基本関係式

ex. $S = S(\underbrace{E,V,N}_{\text{独立変数}})$

↑ 熱力学特有　　ミクロ物理にも登場

これにより、全ての熱力学的予言できる!

$S = S(E,V,N)$: C^1級, 上に凸, $\frac{\partial S}{\partial E} > 0$

↕ Eについて逆にとく (独立変数のとりかえ)

$E = E(S,V,N)$: C^1級, 下に凸

↕ ルジャンドル変換

$F = F(T,V,N)$: $\begin{cases} T\text{について上に凸} \\ V,N \text{〃 下に凸} \end{cases}$

これらは、どれも基本関係式

(注) $\left.\begin{array}{l} S = S(T,V,N) \\ U = U(T,V,N) \end{array}\right\}$ はちがう!

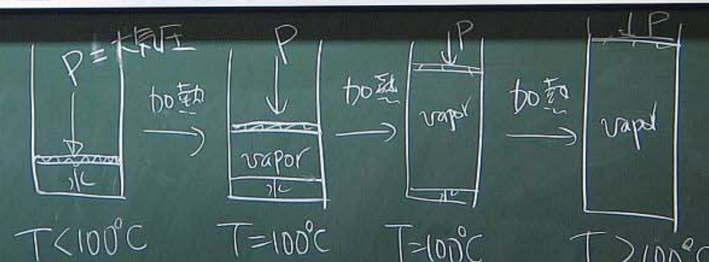
eg. State $\Longleftrightarrow$ E,V,N : 全て示量変数

(注) $\underbrace{T,P}_{\text{示強変数}},N$ では、ダメ!

$E,V,N \Longrightarrow T,P,N$

$E,V,N \; \cancel{\Longleftarrow} \; T,P,N$

相転移



E:小　　E:中小　　E:中大　　E:高

(統)でやること #1

ミクロ物理学から、

$S = S(E,V,N)$

を求める処方を与える!

示強変数

エントロピー表示の示強変数

$B = \frac{\partial S(E,V,N)}{\partial E}$: 逆温度

$\Pi_V = \frac{\partial S(\;)}{\partial V}$: Vに共役な示強変数

$\Pi_N = \frac{\partial S(\;)}{\partial N}$: Nに 〃

エネルギー表示の示強変数

$T = \frac{\partial E(S,V,N)}{\partial S}$: 温度

$P = -\frac{\partial E(\;)}{\partial V}$: 圧力

$\mu = \frac{\partial E(\;)}{\partial N}$: 化学ポテンシャル

値としては、

$T = 1/B$

など。

$S(E,V,N)$, $E(S,V,N)$は、一次同次関数

$\Longrightarrow$ 示強変数は、示量変数密度の関数

ex) $B, T, P, \mu, \cdots$ は、$\frac{E}{V}, \frac{N}{V}$ の関数

TDL (Thermodynamic limit)

全ての示量変数を同じ割合だけ ↗

ex. $E \propto V \propto N \nearrow \infty$.

$\lim_{E \propto V \propto N \to \infty}$ を $\lim_{V\to\infty}$ とか $\lim_{N\to\infty}$ と略記

§ eq. state の定ぎ

ダメな例

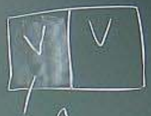
$\frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$ を定ぎにする.

$(\beta = 1/k_B T \xrightarrow{k_B=1} \beta)$

⇒ たくさんのムジュン.

・熱の定理が使えなくなる.

ex.



かべ 外す ⟶

$\frac{1}{Z_V} e^{-\beta \hat{H}_V}$ $\frac{1}{Z_{2V}} e^{-\beta \hat{H}_{2V}}$

これは、QMの unitarity time evolution とムジュン.

ex.

古典気体

$\frac{1}{Z} e^{-\beta H}$

全ての粒子の位置を測る.

⇓

$\cancel{\frac{1}{Z} e^{-\beta H}}$

熱で定ぎ

⇒ 熱の定理が全て使える!

こりつ系

時間が経つ (有限) ⟶

マクロには変化しない状態

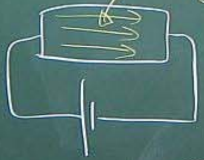
↑

「eq. state」

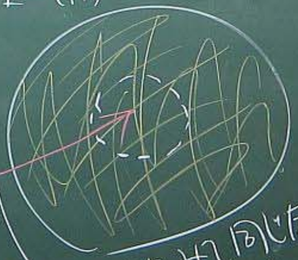
I-(i)

c.f.

noneq. state



I-(ii)



マクロにみて同じなら、これも eq. state.

※ another definition

∞系の有限温度の場のりろん.

Kubo-Martin-Schwinger (KMS) condition で def. する.

Ch. Basic idea

※定式化は後で

出発点として考える系

(量子)力学の都合 → こりつ系

(熱) の 〃 → 単純系

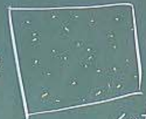
→ を出発点にする。

思考実験

気体の eq. state

(古典)

写真をとる →



等重率での eq. state

→ 粒子位置は一様分布

これも eq. state

「どっちも eq. state である」

という theory にすべし！

つまり、

ひとつの eq. state

⇒ ∃ミクロ状態へ

・これが ∃ mixed state とすると、

「見る」 ⇒

異なる microstates でも 同じ eq. state

・これが pure state とすると、

eq. state

「見る」 → 同左 〃 時間経過 →

〃

これらを全てムジュンなく説明する仮定

典型性 (typicality)

microstatesの圧倒的多数は、marcostate としては、eq. state である。(必要なら、E, V, N を指定せよ)

例 気体

E, V, N の値を与える。

→ ひとつの eq. state

$$\frac{\square \text{のうち、マクロには eq. state である states の数}}{\text{E, V, N の値が、マクロにはムシできる範囲内で与えられた値になる microstates の総数}} \xrightarrow{\text{TDL}} 1$$

言いかえると、

$$\frac{\square \text{のうちの noneq. states の数}}{\square \text{の総数}} \xrightarrow{\text{TDL}} 0$$

c.f.

$$\frac{\text{○○大学の好学生数 } \sqrt{N}}{\text{〃 の学生数 } N} \xrightarrow{N \to \infty} 0$$

※後述の定式化と整合する。

統計力学が目指す事

(まとめ)

#1. $S = S(E,V,N)$ をミクロ物理から求める.

#2. eq. state のミクロな表現.

#3. thermalization.

#4. 熱の全ての公理をミクロ物理から導出する.

Ch. 基本関係式を求めるアイデア

[$V/2$ | $V/2$] と [V] を考える.

(c)で許されるmicrostatesの中には(a)のmicrostateも含まれる.

しかし、それは、(c)のときはnoneq. state.

typicalityより

# of microstates

$$W(\ ) \gg W(\ |\ )$$

$\equiv W(E,V,N)$ 　 $\equiv W(E,V/2,N)$

noneq. states も含む

一方、熱では、

$$S(c) > S(a)$$

相加性

[S_1 | S_2] 　 $S = S_1 + S_2$

ミクロでは、

[W_1 | W_2]

$$W \sim W_1 \times W_2$$

$x \sim y \Leftrightarrow \frac{y}{x} \to 1$ (TDL)

ゆえに、

$$S \propto \ln W$$

つまり、

$$S = k_B \ln W$$

正確にかくと、

$$\underbrace{S(E,V,N)}_{O(V)} = \underbrace{k_B \ln W(E,V,N)}_{O(N)} + o(V)$$

つまり、

$$\lim_{V\to\infty} \frac{S(E,V,N)}{V} = \lim_{V\to\infty} \frac{k_B \ln W(E,V,N)}{V}$$

…ボルツマンの公式