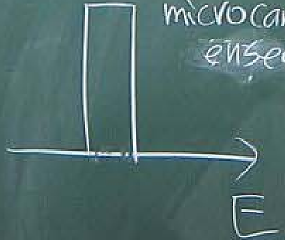
Ch. eq. stateのミクロな表現 その1
— ensemble形式

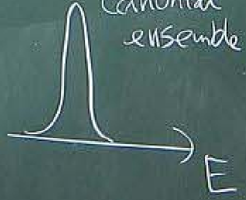
typicalityより、E, V, N が given のとき、
$|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$ これらは互いに直交させる
の almost all が eq. state!
(biasをかけずにもってこれ!)

→ そのための一番かんたんなやり方
→ 等重率 (ensemble形式)

microcanonical ensemble



canonical ensemble



どちらも、同じ eq. stateの表現!

→「ensembleの等価性」

TDLで、
・等価な基本関係式を与える。
・一次相転移領域以外では、マクロに等価な状態を与える。

§ ensemble 形式の定式化

$\mathrm{ens}(E,V,N) \equiv$ E,V,N がマクロに等しいような microstate の集合

"micro-canonical ensemble"

noneq. state も含む!

その割合 $\xrightarrow[\text{TDL}]{} 0$

(typicality)

正確には：体積Vの系の粒子数Nのenergy固有状態のうち、固有値がEにマクロに等しいものを基底とする空間

$\mathrm{ens}(E,V,N)$ は、$\mathcal{H}$ の部分空間.

$\uparrow$ ヒルベルト空間

「量子系の状態数」

≡ 互いに直交する state vectors を最大何個とれるか

$\mathrm{ens}(E,V,N)$ に含まれる状態数 $W(E,V,N)$

$= \dim[\mathrm{ens}(E,V,N)]$

$\mathrm{ens}(E,V,N)$ の $\forall$ orthonormal basis $\{|\varphi_\nu\rangle\}$ をもってきて、

$$\hat{\rho}_{\mathrm{ens}}(E,V,N) = \frac{1}{W}\sum_{\nu=1}^{W} |\varphi_\nu\rangle\langle\varphi_\nu|$$

…… $\mathrm{eq}(E,V,N)$ を表す microstate ($\because$ typicality)

$\uparrow$ E,V,Nで指定される eq. state

(注) これは、$\{|\varphi_\nu\rangle\}$ の choice に依らない。

((証)「量のキソ」の問3.4と同様)

$$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{\mathrm{ens}}\hat{A})$$

$$= \frac{1}{W}\sum_{\nu=1}^{W}\langle\varphi_\nu|\hat{A}|\varphi_\nu\rangle$$

$$\xrightarrow[\text{TDL}]{\text{typicality}} \langle A\rangle_{\mathrm{eq}}$$

$\simeq \langle A\rangle_{\mathrm{eq}}$ almost all φ_ν

※ $W = \mathrm{Tr}\left(\sum_{\nu=1}^{W}|\varphi_\nu\rangle\langle\varphi_\nu|\right)$

$S \sim k_B \ln W$ の右辺を $\hat{\rho}_{\mathrm{ens}}$ で表す.

一般に、$\forall\hat{\rho}$ について、von Neumann entropy を

$$S_{vN}(\hat{\rho}) \equiv -\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\ln\hat{\rho})$$

で def. する.

$$S_{vN}(\hat{\rho}_{\mathrm{ens}}) = -\sum_{\nu=1}^{W}\frac{1}{W}\ln\left(\frac{1}{W}\right) = \ln W$$

$$\therefore S(E,V,N) \sim k_B S_{vN}(\hat{\rho}_{\mathrm{ens}}(E,V,N))$$

熱 entropy　　von Neumann entropy

まとめると:

・eq.(E,V,N)を表す microstate として

$$\hat{\rho}_{ens}(E,V,N) = \frac{1}{W}\sum_{\nu=1}^{W} |\varphi_\nu\rangle\langle\varphi_\nu|$$

・基本関係式は,

$$S \sim k_B S_{vN}(\hat{\rho}_{ens})$$

§利点

・どの pure state を選ぶか悩まなくてすむ.

・$\hat{\rho}_{ens}$ は時間発展しない.

(∵ $\{|\varphi_\nu\rangle\}$ は energy eigenstate $\{|n\rangle\}$ に選べ

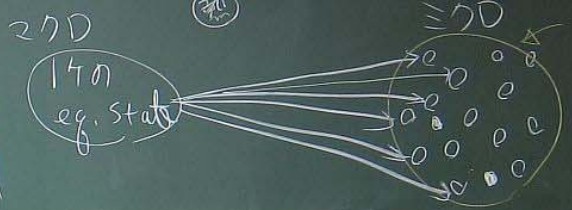
$$e^{-i\hat{H}t}\sum_\nu \frac{1}{W}|n\rangle\langle n| e^{+i\hat{H}t} = \sum_\nu \frac{1}{W}|n\rangle\langle n|$$)

⇒ eq. state が(マクロには)時間発展しない

(注) Wの大きさ

$S \sim \ln W$ $(k_B = 1)$

$$W \sim e^S \underset{\substack{\uparrow \\ 熱}}{=} e^{\Theta(N)} \ggg 1$$



$e^{\Theta(N)}$個の microstate のほとんどが eq. state.

§漸近形

$$\underset{S_{TD}}{S} \sim \ln W \sim \underbrace{S_{vN}(\hat{\rho}_{ens})}_{S_{SM}}$$

$S_{TD} = V s(u,n)$, $u = E/V$, $n = N/V$

$S_{SM} = V s(u,n) + o(V)$

$$\Rightarrow s(u,n) = \lim_{V\to\infty} \frac{S_{SM}(\underset{=E}{Vu}, V, \underset{=N}{Vn})}{V}$$

$$\Rightarrow S_{TD} = V s(u,n)$$

§独立変数の変更

TDでは

$E = E(S,V,N)$ $\left(T = \frac{\partial E}{\partial S}\right)$

ルジャンドル ↓↑

$F = F(T,V,N) = [E - TS](T,V,N)$

↓↑

$J = J(T,V,\mu) = [F - \mu N](T,V,\mu)$

$S = S(E,V,N)$ $\left(B = \frac{\partial S}{\partial E} = 1/T\right)$

↓↑

$\mathcal{F} = \mathcal{F}(B,V,N) = [S - BE](B,V,N)$ マシュー関数

↓↑ $\left(\Pi_N = \frac{\partial S}{\partial N} = -\frac{\mu}{T}\right)$

$\mathcal{J} = \mathcal{J}(B,V,\Pi_N) = [\mathcal{F} - \Pi_N N](B,V,\Pi_N)$

どれも基本関係式!

(統)では

microcanonical : $S(E,V,N) \sim \ln W(E,V,N)$

Legendre tr. ↓↑　　Laplace tr. ↓↑

canonical : $F(B,V,N) \sim \ln Z(B,V,N)$

↓↑　　↓↑

grandcanonical : $J(B,V,\pi_N) \sim \ln \Xi(B,V,\pi_N)$

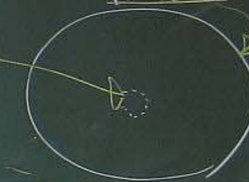
どの ensemble も、独立変数の choice が異なるだけで、等価な info. をもってる!

……「アンサンブルの等価性」

→ 好きなアンサンブルで計算してよい!

どの ensemble でも、以下の量について、同じ予言を与える。

- マクロ量の平均値 + 熱力学量
- 部分系 such that 部分系のサイズ ≪ ensemble を使った系のサイズ の物理量の平均やゆらぎなど



TDLで。
一次相転移点では
ミクロカノニカルにルジャンドル
変換すべし。

これらについては、どのensembleを使ってもいい!

(注) ensembleを使った系全体のゆらぎ

- アンサンブルによって異なるケースがある!
- 本来の(統)の射程外!
- 正解を得るには、○ になるように調整する and/or 状態の準備の仕方など(統)以外の要素を入れて考える。

cf. Typicalityの「証明」

ここまでの議論 : typicality ⇒ ensemble形式 ⇒ 実験と合う!

ここでやること : ensemble形式 ⇒ typicality

von Neumann 1929, 杉田 2006, Popescu et al. 2006, Goldstein et al. 2006,

$\mathcal{H} \supset \mathcal{H}_{[E-\Delta E, E]} \equiv \mathcal{E}$: energy shell

$\mathcal{E}$から、「ランダムに1個の pure state とってくる」

$\equiv |\psi_{rd}\rangle = \sum_n{}' c_n |n\rangle$ ← $\mathcal{E}$のCONS

これの和

$\sum_n{}' |c_n|^2 = 1$ をみたす一様複素乱数

why?

$|\psi_{rd}'\rangle = \sum_i{}' c_i' |i\rangle$ ← $\mathcal{E}$の別のCONS

としたとき、$|\psi_{rd}\rangle$と$|\psi_{rd}'\rangle$は統計的に同じ!

∴ $|\psi_{rd}\rangle$の選び方は、CONSのえらび方に依らない

⇒「何の bias もかけずに長さ1のベクトルを選び出す」の唯一のやり方!

$$|\psi_{shell}\rangle = \sum_n{}' C_n|n\rangle \in \mathcal{E}$$

energy shell: $\sum_n{}' |C_n|^2 = 1$

前回は $|\psi_{rd}\rangle$ と書いた

c.f. |random vector⟩ $\in \mathcal{H}$ は、$T=\infty$ の eq. state.

$W = \dim \mathcal{E}$

$$P(C_1, C_2, \cdots) \propto \delta\left(\sum_n{}' |C_n|^2 - 1\right)$$

より、— を random average として、

$$\overline{|C_n|^2} = \frac{1}{W} \quad \left(\because\ 1 = \sum_n{}' \overline{|C_n|^2} = W\overline{|C_n|^2}\right)$$

$$\overline{C_n^* C_m} = 0 \quad \text{for } n \neq m$$

$$\overline{C_i^* C_j C_k^* C_l} = \frac{1}{W(W+1)}\left(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{il}\delta_{kj}\right)$$

奇数個の $C = 0$

ゆえに、$\forall \hat{A}$ について、($\hat{A}$: C とはムカンケー)

$$\overline{\langle\psi_{shell}|\hat{A}|\psi_{shell}\rangle} = \sum_{n,m}{}' \overline{C_n^* C_m}\langle n|\hat{A}|m\rangle = \frac{1}{W}\sum_n{}' \langle n|\hat{A}|n\rangle$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_{ens}(E,N,V)\hat{A}\right) = \langle A\rangle_{ens}$$

∴ random average すれば、$\langle A\rangle_{ens}$ と一致

→ $|\psi_{shell}\rangle$ が一本だけでは？

Markov-type inequalities

x : random $\in \mathbb{R}$

(1) For $\forall \varepsilon > 0$,

( )内が真なら 1, false : 0

$$\underset{\text{かくりつ}}{P}(|x| \geq \varepsilon) = \overline{\Theta(|x| \geq \varepsilon)} \leq \overline{\frac{|x|}{\varepsilon}\Theta(\ \ )} \leq \frac{\overline{|x|}}{\varepsilon}$$

… Markov's inequality

(2) $\forall y \in \mathbb{R}$

For $\forall \varepsilon > 0$,

$$P(|x-y| \geq \varepsilon) = P\left((x-y)^2 \geq \varepsilon^2\right) \underset{(1)\text{より}}{\leq} \frac{1}{\varepsilon^2}\overline{(x-y)^2}$$

特に、$y = \bar{x}$ にえらぶと、

For $\varepsilon > 0$,

$$P(|x-\bar{x}| \geq \varepsilon) \leq \frac{1}{\varepsilon^2}\overline{(x-\bar{x})^2}$$

分散

… Chevichev's inequality

※ふつうのかくりつ分布については、ゆる〜い不等式。

着目する物理量

$\hat{A}$ = local operator の m 次多項式 $\Theta(N^0)$

ex. $\hat{A}_i$

(統)は、$m=\Theta(1)$ に対象にしている.

such that

$$\langle \hat{A}^{\dagger}\hat{A}\rangle_{ens} \le K\left(\frac{E}{N},\frac{V}{N}\right) N^{2m}$$

> 0, indep't of $\hat{A}$ & N

ex. $\hat{A}, \hat{M}_z, \hat{H}^2, \hat{A}_i^x \hat{A}_j^y, \ldots$

証明の方針

不等式(2)で、($\hat{A}$: hermiteとしておく)

$$\begin{cases} x = \langle \psi_{shell}|\hat{A}|\psi_{shell}\rangle \\ y = \bar{x} = \langle A\rangle_{ens} \end{cases}$$

とえらぶ

$$\overline{(x-\bar{x})^2}$$

$$= \overline{\left(\langle \psi_{shell}|\hat{A}|\psi_{shell}\rangle - \langle|\hat{A}|\rangle\right)^2}$$

$$= \frac{1}{W(W+1)} \sum_{n,m}{}' \underbrace{\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|\hat{A}|n\rangle}_{=|\langle n|\hat{A}|m\rangle|^2} - \underbrace{\frac{1}{W^2(W+1)} \sum_{n,m}{}' \langle n|\hat{A}|n\rangle\langle m|\hat{A}|m\rangle}_{=\langle A\rangle_{ens}^2}$$

$$\le \frac{1}{W(W+1)} \sum_{n}{}' \sum_{m} \langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m|\hat{A}|n\rangle - \frac{1}{W+1}\langle A\rangle_{ens}^2$$

$\mathcal{H}$全体! $=\langle n|\hat{A}^2|n\rangle$

$$= \frac{1}{W+1}\left(\langle \hat{A}^2\rangle_{ens} - \langle \hat{A}\rangle_{ens}^2\right)$$

$$= \frac{1}{W+1}\left\langle \left(\hat{A} - \langle A\rangle_{ens}\right)^2 \right\rangle_{ens}$$

∴ (2)より、

For $\forall \varepsilon > 0$,

$$P\left(\left|\langle \psi_{shell}|\hat{A}|\psi_{shell}\rangle - \langle A\rangle_{ens}\right| \ge \varepsilon\right)$$

$$\le \frac{\left\langle \left(\hat{A} - \langle A\rangle_{ens}\right)^2\right\rangle_{ens}}{\varepsilon^2 (W+1)} \quad (ア)$$

$$\le \frac{K N^{2m}}{\varepsilon^2 e^{N\ell + o(N)}} \quad (イ) \quad \xrightarrow{TDL} 0$$

$S = \ln W + o(N)$ より、$W = e^{N\ell + o(N)}$

S 〃 $N\ell$ ($\ell > 0$ for any $T > 0$)

∴ typicality が成立!

一般に、sequence of random variables
$x_1, x_2, x_3, \cdots\cdots$ について、
For $\forall \varepsilon > 0$, $\lim_{N\to\infty} P(|x_N - y| \geq \varepsilon) = 0$
のとき、「x_N は y に確率収束する」と言い、

$$x_N \xrightarrow{P} y$$

と書く。

上記の結果は、

$$\boxed{\langle \psi_{shell} | \hat{A} | \psi_{shell} \rangle \xrightarrow{P} \langle A \rangle_{ens} \text{ uniformly for } \forall \hat{A} \text{ (mechanical variable)}}$$

$\langle A \rangle_{ens}$ = 仮定により正しい eq. value.

mechanical variable ← ○枚前に書いた条件をみたす $\hat{A}$

※ (ア)ここまでは $\hat{A} \in$ mech. var. でなくても成立する。

なので、(イ)これは、もっと一般の $\hat{A}$ についても成立する。

ex. $\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{A} e^{-i\hat{H}t}$ とかでもOK.

- 久保公式を $|\psi_{shell}\rangle$ で書きなおせる。
- 時間相関関数 ok. noneq. time evolution ok.

※ 時間発展

$|\psi_{shell}\rangle$: $\hat{H}$ の eq. state.

$$e^{-i\hat{H}t}|\psi_{shell}\rangle$$

$\hat{H}$ の eigen vectors

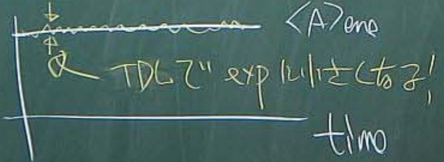
$$= e^{-i\hat{H}t} \sum_n{}' c_n |n\rangle$$

$$= \sum_n{}' \boxed{c_n e^{-i\omega_n t}} |n\rangle$$

$\tilde{c}_n$ とおくと、$\sum_n |\tilde{c}_n|^2 = 1$ をみたす一様乱数

$= |\tilde{\psi}_{shell}\rangle$: $\hat{H}$ の eq. state.

TDL をとらないで、



熱平衡状態はマクロには時間変化しないが、
ミクロには時間変化しうる。

※ noneq. dynamics

$|\psi_{shell}\rangle$: $\hat{H}$ の eq. state.

$t = 0$ で、

$$\hat{H} \longrightarrow \hat{H} - h\hat{M}_z \quad \text{(quench)}$$

$$e^{-i(\hat{H} - h\hat{M}_z)t} |\psi_{shell}\rangle$$

はマクロに時間発展する。

§ It's not purification

purification

$\hat{\rho} = \frac{2}{3}|1\rangle\langle 1| + \frac{1}{3}|2\rangle\langle 2|$; a mixed state in $\mathcal{H}$

auxiliary system をくっつけて、$\mathcal{H}$ を $\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}_{aux}$ に拡大し、

$$|\Psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle\otimes|1'\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|2\rangle\otimes|2'\rangle \in \mathcal{H}\otimes\mathcal{H}_{aux}$$

を考えると、

$$\langle\Psi|(\hat{a}\otimes\hat{1})|\Psi\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{a}) \text{ for } \forall\hat{a} \text{ on } \mathcal{H}$$

$\hat{a} \in \mathcal{H}$, $\hat{1} \in \mathcal{H}_{aux}$ ……「purification」

この例のように、

It is always possible to represent a mixed state $\hat{\rho}$ on $\mathcal{H}$ as a pure state $|\Psi\rangle$ in an enlarged space $\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}_{aux}$.
They are the same state on $\mathcal{H}$.

ex, Thermo Field Dynamics (TFD) は purification を利用して、Gibbs state を大きな Hilbert 空間のベクトルとして表す。

それに対して typicality は、

- $|\psi_{shell}\rangle$ is a pure state in $\mathcal{H}$
- $|\psi_{shell}\rangle\langle\psi_{shell}| \neq \hat{\rho}_{ens}$ on $\mathcal{H}$.
  (ちがいは、entanglement などで見れる!)
- But, $|\psi_{shell}\rangle$ and $\hat{\rho}_{ens}$ are statistical-mechanically identical!

用語と注意

・$S = S(\underbrace{E, V, N, M, \cdots}_{})$
「エントロピーの自然な変数」
⇕
・e.g. $\hat{H}$, $\hat{N}$ or N, $\hat{M}$ を一意的に決める
・全て示量変数

・しばらくの間、これらは全て交換する、としておく。

・「mechanical variable」
- local obs. の低次多項式
- $|\langle A^\dagger A \rangle| \leq K N^{2m}$

・「genuine thermodynamic variable」
— TD変数で、mechanical variable でないもの。
ex. $T, \mu, S, F, \cdots$
— 量子力学の observable でない!