

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 22 日現在

機関番号：14101

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540448

研究課題名(和文)量子熱力学に対するオペレーショナルな方法の展開

研究課題名(英文)Development of an Operational Approach to Quantum Thermodynamics

研究代表者

阿部 純義(Abe, Sumiyoshi)

三重大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：70184215

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,900,000円、(間接経費) 570,000円

研究成果の概要(和文)：本研究の成果は二つに大別される。一つは、量子力学と熱力学の構造的類似性・相違性に基づき、Carnotサイクルの量子力学的類似物を構築し、その種々の物理的性質を明らかにしたことである。もう一つは、非ユニタリー完全正值演算を用いて熱力学的プロセスを記述し、Clausiusの不等式が破れ得る可能性に対して新しい視点を見出したことである。

研究成果の概要(英文)：The results obtained in this research project are classified into two categories. One was to clarify the physical properties of the quantum-mechanical analog of the Carnot cycle constructed based on the structural similarity/dissimilarity between quantum mechanics and thermodynamics. The other was to find a new case in which the Clausius inequality may be challenged, by describing thermodynamic processes in terms of non-unitary completely-positive quantum operations.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学、数理物理・物性基礎

キーワード：量子熱力学 正值演算子値測度

1. 研究開始当初の背景

当初、報告者は、混合状態の分離可能性に関連して、量子ビットの Werner 状態について研究を完成した段階にあった。その際、Werner 状態が射影 Hamilton 演算子に付随する有限温度状態であること、更にこの状態はゼロ温度から unital な正值演算子値測度をなす非ユニタリーな量子演算によって生成出来ることを見出した。この演算を繰り返し作用させると、ゼロ温度での純粋基底状態が無限温度の完全ランダム状態に不可逆に変換される。すなわち、「加熱演算」という意味をもつ。ただし、途中の状態は一般に非平衡状態である。

当初はまた、量子力学と熱力学との間の構造的類似性と相違性についての研究も進んでいた。これは、Hamilton 演算子の期待値を内部エネルギーに対応させた場合、形式的に熱力学第一法則に類似の関係式が得られる事実に基づく。このことから、熱量と仕事の類似物が同定される。当時までに明らかになっていたことの一つは、熱量の量子力学的類似物と純粋量子状態のエネルギー基底に関する Shannon の情報エントロピーとの間に、敢えて Clausius 等式の類似物を課すことによって、あたかも真の熱統計力学が構成されるように見えることであった。この発展によって、例えば Carnot エンジンの量子力学的類似物の構成法やその物理的性質の解明に必要な概念なども明らかになりつつあった。

これら二つの状況が、量子熱力学に対する新しいアプローチを展開し発展させる動機となった。

2. 研究の目的

当初の目的は、二つに大別された。

(1) 量子力学と熱力学との間の構造的類似性と相違性についての研究を一層進め、Carnot サイクルの量子力学的類似物の物理的性質を高いレベルで明らかにすること(例えば、ポテンシャル依存性や効率に対する一般的表式を導出することなど)であった。

(2) 系の密度行列に正值演算子値測度を成す種々の非ユニタリーな完全正值量子演算を作用させることによって種々の熱力学的プロセスをオペレーショナルに表現することであった。ここでは、これまで文献上で度々指摘されてきた「量子熱力学における第二法則の破れ」の可能性を吟味することが重要な目的であった。

3. 研究の方法

上述の二つの目的に対して採用した方法は互いに異なる。

(1) 量子力学と熱力学との間の構造的類似性と相違性については、物理的 Carnot サイクルの等温過程及び断熱過程を、系の Hamilton 演算子の期待値を保ちつつポテンシャルのパラメータ(幅など)を変化させつつ基底状態と励起状態との間の連続的推移を実現すること及び量子状態を変化させずにパラメータを変化させることにそれぞれ対応させて、サイクルを実現させた。このサイクルから実際に仕事を取り出せることが分かる。なお、すべてのプロセスは典型的な動力学的時間スケールに較べてゆっくりでなければならないが、この要請は、仕事を取り出せるとしても、実際に興味ある「出力」は一般に極めて小さくなる。この点を改善するために、いわゆる有限時間熱力学の方法を吟味する必要があった。

(2) 非ユニタリーな完全正值量子演算によって熱力学的プロセスを表現する研究に関しては、量子ビットの Werner 状態に関連して構成された unital な正值演算子値測度を成す量子演算を任意の量子系の場合に対して拡張する必要があった。また、ゼロ温度での純粋基底状態を有限温度のカノニカル密度行列に写像する演算は一般に一意的ではない。この任意性はそれぞれの演算の物理的性質の相違によって解消される。この目的のため、演算の繰り返し作用の下での von Neumann エントロピーの振る舞いに注目した。このことは、unital 性をもつ演算ともたない演算を明白に区別する。

4. 研究成果

(1) 「量子力学と熱力学との間の構造的類似性と相違性」についての研究成果：

量子力学と熱力学との間の構造的類似性と相違性についての研究を進めるために、有限時間熱力学に関連する新しい方法を提出した。この方法に基づき、最大出力という条件の下での Carnot サイクルの量子力学的類似物の効率を求めた。単純な一次元無限井戸ポテンシャルを用いた場合、効率の値が $1 - 1/[4 \cos^2(2p/9)] = 0.57397\dots$ という(系に含まれるいかなるパラメータにも依存しないという意味で)普遍的な値になることを見出した。

Carnot サイクルの量子力学的類似物は純粋状態にありコヒーレンスをもつため、重ね合わせの原理を適用することが出来る。そこで、単純な二状態モデルにおいて、等温過程と断熱過程の類似物の境界の状態が二状態の重ね合わせで与えられる場合を研究した。

その結果、重ね合わせの効果によって、サイクルの効率を上げることが出来ることが分かった。

Carnot サイクルの量子力学的類似物についての研究は、これまで主に単純な次元無限井戸ポテンシャルを用いて行われて来た。これらの研究を究極的に一般化すべく、任意の閉じ込めポテンシャルを考察し、効率に対する一般的な表式を導いた。この表式は、効率がエネルギースペクトルの構造に如何に依存するかを示している。古典的 Carnot サイクルの重要な性質の一つは、最大値である効率が作業物質によらない点であるが、このスペクトル依存性は作業物質の類似物である閉じ込めポテンシャルに対する依存性意味する。すなわち、Carnot サイクルの量子力学的類似物は不変性をもたない。これは、純粋状態量子力学では von Neumann エントロピーが恒等的ゼロであるため熱力学第二法則が存在しないことによる。

(2)「非ユニタリーな完全正值量子演算による熱力学的プロセスのオペレーショナルな表現」についての研究成果：

ゼロ温度での純粋基底状態を有限温度の混合したカノニカル密度行列に写像する非ユニタリーで unital 性をもつ量子演算を、一般的な離散系に対して構成した。この演算を熱平衡状態のカノニカル密度行列に作用させて、von Neumann エントロピーと熱量がどのように変化するかを調べた。その結果、Clausius の不等式が破れ得る状況が存在することが分かった。破れの大きさがエネルギー準位の幅に従って増大することを見いだした。この一般的な結果を、簡単なスピン-1/2 の二粒子系の場合について具体的に調べ、確認した。

量子熱力学においては、仕事は系の Hamilton 演算子の変化（ポテンシャルの変形や外場の変化など）の密度行列に関する期待値で与えられる。この変化は物理量の全微分という形をしていないため、一般に有限の変化量はプロセスに依存することは周知のとおりである。このことは、仕事をゲージ場として取り扱える可能性を示している。このような視点から、「仕事ゲージ場」というものを導入し、それをオペレーショナル且つ幾何学的にコントロールすることによって、如何に有効に仕事を取り出せるかを議論した。

ゼロ温度での純粋基底状態を有限温度の混合したカノニカル密度行列に写像する非ユニタリー量子演算は、一意的ではない。ごく最近、本研究で主要な役割をする unital な正值演算子値測度をなす演算と、

Takahashi-Umezawa の Thermofield Dynamics で導入されたユニタリーな Bogoliubov 変換の部分トレースで与えられる非ユニタリー非 unital 完全正值量子演算の比較研究を行った。その結果、unital 性をもつ前者とは対照的に、後者の繰り返し作用により von Neumann エントロピーが減少し得ることが分かった。

上述 の Thermofield Dynamics で導入されたユニタリーな Bogoliubov 変換は、二モード光子のスクイズ状態の生成に関連する変換と等価である。やはりごく最近、報告者はこのユニタリー変換の部分トレースで生成される非ユニタリー完全正值量子演算の Sudarshan-Glauber 型相空間表示を研究した。その結果、演算が積分変換で与えられ、更に積分核が並進対称性をもつことが分かった。すなわち、積分変換は合成積型であり、従って逆変換可能であることが結論された。（e-print arXiv:1403.0863 参照。）

(3) その他の研究成果：本研究期間内に、課題とは必ずしも直結はしない研究も展開する機会もあった。それらは以下のとおりである。

一般化された統計力学では、「エスコート分布」という確率分布がしばしば用いられる。これを用いた期待値の定義の拡張が安定性に関する困難をもつことを、以前の研究で示した。この問題を完全に拡張して、そのような一般化された期待値が安定であるための必要十分条件を見出した。

与えられた Hamilton 演算子について、それを対角化し、固有値と固有状態ベクトルを決定することは、実際には非自明な問題である。Wegner によって開発されたフロー方程式の方法は、この問題に対して強力な手段を与える。報告者達は、フロー方程式で生成される状態ベクトルの軌道が、緩い条件の下で、射影 Hilbert 空間の部分多様体中の測地線になることを証明した。調和振動子とスピンの場合はそれぞれ Lobachevsky 空間と球上の測地線となる。一方、原子と光の相互作用を記述する Jaynes-Cummings モデルに関連する空間は既知のものではない新しい空間と思われる。

非整数運動学における一般化された Fokker-Planck 方程式の解を求めることは、自明な例を除いて、極めて困難である。この問題に関して、近似的な解析解を求めるべく、補助場形式の方法を用いて変分原理を定式化した。分布関数に対する Lévy Ansatz という概念を提出した。周期的なドリフト項の場合に対して解析解を求め、異常拡散の問題を議論した。

複雑系の多くは、複数の時間スケールをもつ複数のダイナミクスの階層によって支配される。この最も単純な場合として、ゆっくり揺らぐ温度をもつ媒質中の Brown 粒子の問題を研究した。Wiener 過程に対応する Fokker-Planck 方程式の定常解が局所平衡条件を満たすための条件を明らかにした。その際、Born-Oppenheimer の断熱近似と類推的に、遅い自由度のダイナミクスが速い自由度の変数に依存しない、ということを要請したが、これによって階層的ダイナミクスをあらわに表現された。また、所謂 superstatistics と呼ばれる理論の概念的困難についても考察した。

過去 10 年にわたって取り組んで来た「複雑系科学からみた地震活動」に関連において、二つの成果を得た。一つは、報告者が共同研究者と提出した地震の複雑ネットワークという概念が、地震活動を支配する未知のダイナミクスの複雑さを表現する方法として最も成功している根拠が、事象時間という内部時間の待ち時間に関して地域に依存しない普遍的な法則性をもつという新しい事実由来することが明らかになったことである。これによって、本報告者の研究以降に提出された他の方法が何故普遍的な性質を示せないのが解明された。もう一つの成果は、やはり地震の複雑ネットワークに関連し、そのコミュニティ構造の時間発展についてのものである。地震ネットワークのモジュラリティ指数の変化を時間的に追跡することによって、大規模地震によってネットワークのコミュニティ構造が消されることを見出した。

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 13 件:すべて査読あり)

Y. Matsuo and S. Abe, “Completely-positive quantum operations generating thermostistical states: Comparative study”, *Physica A* (2014), 掲載決定.

S. Abe, “Fokker-Planck theory of nonequilibrium systems governed by hierarchical dynamics”, *Foundations of Physics* Vol. 44, pp. 175-182 (2014).

S. Abe, “Variational principle for fractional kinetics and Lévy Ansatz”, *Physical Review E* Vol. 88, 022142 (2013).

S. Abe, “General formula for the efficiency of quantum-mechanical analog of the Carnot engine”, *Entropy* Vol. 15, pp.

1408-1415 (2013).

S. Abe and N. Suzuki, “Dynamical evolution of the community structure of complex earthquake network”, *EPL* Vol. 99, 39001 (2012).

S. Abe and Y. Aoyaghi, “Thermodynamic processes generated by a class of completely positive quantum operations”, *International Journal of Modern Physics B* Vol. 26, 1241001 (2012).

S. Abe and N. Suzuki, “Aftershocks in Modern Perspectives: Complex Earthquake Network, Aging, and Non-Markovianity”, *Acta Geophysica* Vol. 60, pp. 547-561 (2012).

S. Abe and N. Suzuki, “Universal law for waiting internal time in seismicity and its implication to earthquake network”, *EPL* Vol. 97, 49002 (2012).

Y. Itto and S. Abe, “On the Geodesic Nature of Wegner’s Flow”, *Foundations of Physics* Vol. 42, pp. 377-387 (2012).

S. Abe and S. Okuyama, “Role of the superposition principle for enhancing the efficiency of the quantum-mechanical Carnot engine”, *Physical Review E* Vol. 85, 011104 (2012).

A. El Kaabouchi and S. Abe, “Necessary and Sufficient Condition for Stability of Generalized Expectation Value”, *Journal of Applied Mathematics*, 804836 (2011).

S. Abe, “Gauge fields and geometric control of quantum-thermodynamic engine”, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P09011 (2011).

S. Abe, “Maximum-power quantum-mechanical Carnot engine”, *Physical Review E* Vol. 83, 041117 (2011).

[学会発表](計 3 件)

S. Abe, “Quantum-Mechanical Analog of the Carnot Cycle: General Formula for Efficiency and Maximum-Power Output”, at The 12th Joint European Thermodynamics Conference (July 1-5, 2013, Brescia, Italy), 招待講演.

S. Abe, “Kinetic Theory of Superstatistics”, at The 3rd International Workshop on Statistical Physics and Mathematics for Complex Systems (August 25-30, 2012, Kazan, Russia), 招待講演.

S. Abe, "Gauge-Theoretic Structure in Quantum Thermodynamics", at International Conference on Statistical Physics-SigmaPhi2011 (July 11-15,2011, Larnaca, Cyprus), 招待講演.

〔図書〕(計1件)

D. Tayurskii, S. Abe, and Q. A. Wang 編著, Proceedings of "The 3rd International Workshop on Statistical Physics and Mathematics for Complex Systems", Journal of Physics: Conference Series Vol. 394 (2012). 論文番号: 012003.

〔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

6. 研究組織

(1) 研究代表者

阿部 純義 (Sumiyoshi Abe)
三重大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号: 70184215

(2) 研究分担者

()

研究者番号:

(3) 連携研究者

()

研究者番号: