

平成29年度 修士論文

統計力学の量子力学的な起源

2018年2月1日

三重大学大学院工学研究科  
博士前期課程 物理工学専攻

横井 佑歩

## 目次

1	序論	2
2	位相演算子と隠れたゲージ構造	5
2.1	離散的位相演算子 . . . . .	5
2.2	ゲージ構造と相互作用ハミルトニアン . . . . .	8
3	Schrödinger 方程式からミクロカノニカルアンサンブルへ : Bose-Einstein 統計	10
3.1	Schrödinger 方程式 . . . . .	10
3.2	$g \rightarrow 0$ 極限 . . . . .	12
3.3	ミクロカノニカルアンサンブルの密度行列と完全なデコヒーレンス . . . .	13
4	Fermi-Dirac 統計の導出	15
5	カノニカルアンサンブルへの移行	18
5.1	部分系と環境系への分割 . . . . .	18
5.2	カノニカルアンサンブルの密度行列 . . . . .	19
6	結論	22
	謝辞	23
A	補足計算	24
B	位相演算子の一般的問題	27
	参考文献	30

# 1 序論

統計力学は、マクロな変数を扱う熱力学をミクロな立場から再現する学問である。これは、非平衡系や多体系の解析、相転移現象などの特異的な物理現象の理論構成など様々な応用に役立っている。そのような 1 世紀以上にも渡る長い成功の歴史にも関わらず、統計力学の基礎付けは依然として未解決の問題として残っている。エルゴード性については、数学的な分野としても発展しているものの、今日に至っても未だ「仮説」であり一般的な証明は成功していない。Gibbs 因子の物理的な起源についても、その総意は明らかでない。また、なぜ古典統計力学の定式化における位相空間  $\Gamma$  の粗視化の単位が量子力学特有の Planck 定数なのかについてや、統計力学における量子古典対応は Planck 定数に関する極限ではなく温度の高低に関する概念なのはどうしてなのか、などといった素朴な疑問も存在する。更に、古典統計力学における確率的概念は系の要素についての動力的な自由度についての情報の欠如に起源を持つが、一方、量子力学の確率解釈は自然法則の一部を成す。これらは、古典統計力学がその基本的なレベルに置いて理論体系として完全ではなく、量子力学と独立に議論することが本来は不可能であることを示唆しているようにも思われる。

このようなことから、近年、統計力学を量子論から構成する取り組みが行われている。早くから行われていた研究を挙げると、[1, 2, 3] である。[4] はシステムと熱浴のエンタングルメントによって、厳密な等確率の原理を要求せずにカノニカルアンサンブルの議論を展開している。[5] もエンタングルメントハミルトニアンを用いたカノニカルアンサンブルの議論である。量子論の期待値と、カノニカルアンサンブルの期待値の関連性については [6, 7] に述べられている。また、注目されている概念として、固有状態熱化 (Eigenstate Thermalization Hypothesis) がある。孤立系の状態がいかに熱化して平衡状態に移行するかが議論されており、基本的文献としては [8, 9] などが挙げられる。

本研究の目的は、量子力学から (量子) 統計力学を導くひとつの新しい議論を展開することである (掲載決定した [10] の内容を含む)。ここでは、系の長時間の性質を記述する基礎原理として、定常状態の Schrödinger 方程式から出発する。重要な目的は、孤立系に対して完全なデコヒーレンスと先験的等確率の原理が同時に実現することである。これらの要請が達成されれば、孤立系のミクロカノニカルアンサンブル理論の構成が可能になるだろう。

一方、このことは、定常状態のもつエンタングルメントに対して特殊な条件を要求する。そのようなエンタングルメントを生成するためには、要素としての粒子間に相互作用

を導入する必要がある。実際、相互作用は統計力学における自由粒子のモデルに対しても必要不可欠である。よく知られるように、古典的な理想気体には粒子間に弱い相互作用が必要である。なぜならば、それが存在しなければ平衡状態は永遠に実現されないからである。しかし、ひとたび統計力学的な叙述に移れば、その段階では相互作用を無視してしまっても構わない。この概念が、本研究にも取り込まれている。

本研究では、相互作用の決定の問題に関して位相演算子とそれに付随するゲージ理論的構造に着目し、上述の要請を満たす相互作用ハミルトニアンをあらわに構成する。ここでは、エルゴード性という概念は、量子確率とエンタングルメントによって置き換えられる。本アプローチでは、ボソン及びフェルミオンの統一的な取り扱いを如何に可能にするかが示される。相互作用ハミルトニアンの結合定数がゼロになる極限で乱雑位相と類似の状況が現れること、それによって孤立系の完全デコヒーレンスと先験的等確率の実現出来ることが分かる。これらの結果に基づいて、Bose-Einstein 及び Fermi-Dirac 統計のミクロカノニカルアンサンブル理論が実際に導かれることを証明する。更に、こうして得られたミクロカノニカルアンサンブル理論から、カノニカルアンサンブル理論も構成する。

以上より、量子力学を出発点として統計力学を構成することを目指す。我々は系のダイナミクスを記述する基礎方程式として定常状態の Schrödinger 方程式を採用する。 $N$  粒子の多体系を考え、相互作用を含めない自由粒子のハミルトニアンを、 $N$  個の同種の振動子として

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i, \quad \hat{h}_i = \varepsilon \hat{n}_i \quad (1.1)$$

と書く。ここで、 $\hat{n}_i$  は数演算子であり、通常通り  $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  で与えられる。 $\hat{a}_i^\dagger$  と  $\hat{a}_i$  はそれぞれ生成・消滅演算子である。ボソンの場合は以下の関係、 $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ ,  $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0$  を満たす。フェルミオンの場合は交換関係を反交換関係に置き換えた、 $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij}$ ,  $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0$  を満たす。 $\varepsilon$  は共通の振動子を表すボソンもしくはフェルミオンのエネルギーである。また、零点は簡単のため省略している。更に、 $\sum_{i=1}^N \hat{A}_i$  は、 $\sum_{i=1}^N \hat{A}_i = \hat{A}_1 \otimes \hat{I}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{I}_N + \hat{I}_1 \otimes \hat{A}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{I}_N + \cdots + \hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{A}_N$  の簡略表示である。 $\hat{I}_i$  は  $i$  番目の振動子の空間で定義される恒等演算子である。これ以降、同様の表示は全て同じ定義による。

上述のように、自由粒子の統計力学には相互作用がなくてはならない。ただし、統計力学的な表現の段階でそれを取り扱う。我々はゲージ理論を道標として相互作用を決定する。そのためにはゲージ場を導入する必要がある。これ以降、2 章ではあるタイプの位相演算子の導入と、それに関連するゲージ構造について説明する。3 章ではゲージ理論を原

理とし決定したハミルトニアンから Schrödinger 方程式を立て、またミクロカノニカルアンサンブルがいかにして構成されるかを示す。そのミクロカノニカルアンサンブルからカノニカルアンサンブルへの移行を 4 章で述べる。最後に、5 章でまとめとする。

## 2 位相演算子と隠れたゲージ構造

この章では、ゲージ場の自由度として位相演算子を導入する。前章で指摘した通り、この位相演算子のゲージ構造によって相互作用が導入される [11]。位相演算子については、Dirac [12] を初めとして、様々な方法 [13, 14] で議論されている。詳細は付録で述べる。

### 2.1 離散的位相演算子

正準共役な位置と運動量は量子化によって演算子となる。しかし、同様にして位相と粒子数を演算子として扱うことは容易ではない。位相の量子化については Dirac が初めに考察し、その後いくつかの定義によって位相演算子が議論されている。この研究では離散的位相演算子 [14] を使って相互作用ハミルトニアンを構成する。この位相演算子は、

$$\exp(i\hat{\phi}_i) = \sum_{m_i=0}^s \exp(i\theta_{m_i}) |\theta_{m_i}\rangle_i \langle\theta_{m_i}| \quad (2.1)$$

によって定義される。ここで  $|\theta_{m_i}\rangle_i$  は位相状態で、

$$|\theta_{m_i}\rangle_i = \frac{1}{\sqrt{s+1}} \sum_{n_i=0}^s \exp(in_i\theta_{m_i}) |n_i\rangle_i \quad (2.2)$$

で与えられる。ボソンの場合、 $s$  は大きく有限な正の整数である。つまり、それぞれのボソンは  $s+1$  次元の部分空間で定義されており、 $s \rightarrow \infty$  の極限は全ての量子力学的計算の後にとられる。フェルミオンの場合は  $s$  は常に 1 であり、極限操作は必要ない。 $\theta_{m_i}$  は  $c$  数の位相で、

$$\theta_{m_i} = \frac{2\pi m_i}{s+1} \quad (m_i = 0, \dots, s) \quad (2.3)$$

である。 $|n_i\rangle_i$  は  $i$  番目の数状態であり、 $\hat{n}_i |n_i\rangle_i = n_i |n_i\rangle_i$  を満たす。また、集合  $\{|n_i\rangle\}_{n_i=0,1,\dots,s}$  は  $(s+1)$  次元空間内で正規直交完全系を成す。まず、内積は、

$$\begin{aligned} {}_i\langle\theta_{m_i} | \theta_{m'_i}\rangle_i &= \frac{1}{s+1} \sum_{n_i, n'_i=0}^s \exp(-in_i\theta_{m_i}) \exp(in'_i\theta_{m'_i}) {}_i\langle n_i | n'_i\rangle_i \\ &= \frac{1}{s+1} \sum_{n_i, n'_i=0}^s \exp(in'_i\theta_{m'_i} - in_i\theta_{m_i}) \delta_{n_i, n'_i} \\ &= \frac{1}{s+1} \sum_{n_i=0}^s \exp[in_i(\theta_{m'_i} - \theta_{m_i})] \end{aligned}$$

$$= \delta_{m_i, m'_i} \quad (2.4)$$

となる。また、

$$\begin{aligned} \sum_{m_i=0}^s |\theta_{m_i}\rangle_i {}_i\langle\theta_{m_i}| &= \sum_{m_i=0}^s \frac{1}{s+1} \sum_{n_i, n'_i=0}^s \exp[i(n_i - n'_i)\theta_{m_i}] |n_i\rangle_i {}_i\langle n'_i| \\ &= \sum_{n_i, n'_i=0}^s \delta_{n_i, n'_i} |n_i\rangle_i {}_i\langle n'_i| \\ &= \sum_{n_i=0}^s |n_i\rangle_i {}_i\langle n_i| \\ &= \hat{I} \end{aligned} \quad (2.5)$$

も成立する。故に、集合  $\{|\theta_{m_i}\rangle\}_{n_i=0,1,\dots,s}$  は同空間内で正規直交完全系を成すことがわかる。したがって、明らかに式 (2.2) の状態は式 (2.1) の位相演算子の固有状態であり、固有値は  $\exp(i\theta_{m_i})$  である。全数状態は  $|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \cdots (\hat{a}_N^\dagger)^{n_N} |0\rangle / \sqrt{n_1! n_2! \cdots n_N!}$  で与えられる。ただし、 $|0\rangle$  は全てのボソンもしくはフェルミオンの基底状態である。つまり、 $|0\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |0\rangle_i$  で、 $|0\rangle_i$  は  $i$  番目のボソンもしくはフェルミオンの基底状態を表し、それぞれ  $\hat{a}_i$  を作用させると 0 となる状態である。

次に、位相演算子のゲージ構造を見る。そのために式 (2.1) の位相演算子の表式を変更する。式 (2.2) を代入すると、

$$\begin{aligned} \exp(i\hat{\phi}_i) &= \exp(i\theta_0) |\theta_0\rangle_i {}_i\langle\theta_0| + \exp(i\theta_1) |\theta_1\rangle_i {}_i\langle\theta_1| + \cdots + \exp(i\theta_s) |\theta_s\rangle_i {}_i\langle\theta_s| \\ &= \frac{1}{s+1} [(|0\rangle_i + |1\rangle_i + \cdots + |s\rangle_i) ({}_i\langle 0| + {}_i\langle 1| + \cdots + {}_i\langle s|) \\ &\quad + \exp(i\theta_1) (|0\rangle_i + \exp(i\theta_1) |1\rangle_i + \cdots + \exp(i\theta_s) |s\rangle_i) \\ &\quad \times ({}_i\langle 0| + \exp(-i\theta_1) {}_i\langle 1| + \cdots + \exp(-i\theta_s) {}_i\langle s|) \\ &\quad + \cdots \\ &\quad + \exp(i\theta_s) (|0\rangle_i + \exp(i\theta_s) |1\rangle_i + \cdots + \exp(i\theta_s) |s\rangle_i) \\ &\quad \times ({}_i\langle 0| + \exp(-i\theta_s) {}_i\langle 1| + \cdots + \exp(-i\theta_s) {}_i\langle s|)] \end{aligned}$$

となる。最右辺を展開して残る項は、

$$\begin{aligned} \frac{1}{s+1} [(s+1) |0\rangle_i {}_i\langle 1| + (s+1) |1\rangle_i {}_i\langle 2| + \cdots + (s+1) |s-1\rangle_i {}_i\langle s| \\ + \{1 + \exp[(s+1)i\theta_1] + \cdots + \exp[(s+1)i\theta_s]\} |s\rangle_i {}_i\langle 0|] \end{aligned}$$

だけである。その他の項は、全てキャンセルする。例えば、 $|2\rangle_i \langle 0|$  の項は、 $\frac{1}{s+1} [1 + \exp(3i\theta_1) + \cdots + \exp(3i\theta_s)] |2\rangle_i \langle 0|$  となり、大括弧内が 0 となり消える。他の項も同様である。以上より、

$$\exp(i\hat{\phi}_i) = \sum_{n_i=0}^{s-1} |n_i\rangle_i \langle n_i+1| + |s\rangle_i \langle 0| \quad (2.6)$$

という表式が得られる。これより、数状態への作用は明らかに、

$$\exp(i\hat{\phi}_i) |n_i\rangle_i = |n_i - 1\rangle_i \quad (n_i \neq 0), \quad \exp(i\hat{\phi}_i) |0\rangle_i = |s\rangle_i \quad (2.7)$$

である。式 (2.7) の第一式は、消滅演算子と似ているが、係数だけ異なる。第二式は基底状態を最大励起状態へ遷移させるもので、消滅演算子と異なる特異な性質である。



## 2.2 ゲージ構造と相互作用ハミルトニアン

この節では、ゲージ理論に基づいて相互作用ハミルトニアンを決定する。ここではまずボソンについて議論する。フェルミオンの議論にはボソンの場合には存在しない問題が現れることを強調するために、4章で別に論じる。

前節の式 (2.6) は、ゲージ構造を持っている。位相演算子は可換なゲージ場の役割を果たす。実際、式 (2.6) がゲージ変換

$$|n_i\rangle_i \rightarrow |n_i\rangle_i \exp(i\Lambda_{n_i,\mu_i}) \quad (2.8)$$

$$\hat{\phi}_i \rightarrow \hat{\phi}_i - \partial\Lambda_{n_i,\mu_i} \quad (2.9)$$

の下で不変であることがわかる。式 (2.8) は位相の変換、式 (2.9) はゲージ場の変換であり、それぞれ第一種ゲージ変換と第二種ゲージ変換に対応する。ここで、 $\Lambda_{n_i,\mu_i}$  は

$$\Lambda_{n_i,\mu_i} = n_i\theta_{\mu_i} = \frac{2\pi\mu_i n_i}{s+1} \quad (\mu_i = 0, \dots, s) \quad (2.10)$$

で定義される定数である。また、 $\partial\Lambda_{n_i,\mu_i}$  は  $\partial\Lambda_{n_i,\mu_i} \equiv \Lambda_{n_i+1,\mu_i} - \Lambda_{n_i,\mu_i} (= \theta_{\mu_i})$  である。

以上のゲージ構造を利用して、相互作用ハミルトニアンを決定する。ゲージ理論によれば、第一種ゲージ変換を施した方程式がゲージ不変になるように第二種ゲージ変換をうけるゲージ場によって相互作用が導入される。Maxwell の電磁気学は線形性、相対論的不変性、ゲージ不変性の3つのよって一意的に決定される、と言われるほどゲージ理論は高い普遍性を持つ。まず、以下のような演算子、

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^N \hat{v}_i \quad (2.11)$$

を考える。式 (2.11) の和は式 (1.1) と同じ定義である。 $\hat{v}_i$  は、

$$\hat{v}_i = \left[ \exp(i\hat{\phi}_i) - |s\rangle_i \langle 0| \right] \exp(-i\theta_{m_i}) \quad (2.12)$$

で定義される演算子である。式 (2.12) の引き算の項は、式 (2.7) の第二項をキャンセルするために加えてある。この演算子を用いて、相互作用ハミルトニアンを

$$\hat{H}_I = g \left( \hat{V}^\dagger \hat{V} + N \sum_{i=1}^N |0\rangle_i \langle 0| \right) \quad (2.13)$$

のように構成する。 $g$  は相互作用の強さを決定する結合定数である。式 (2.13) 第二項は、式 (2.12) の引き算の項に関係している。この相互作用ハミルトニアン<sup>1)</sup>の妥当性は、次章であらわに示されるように、Schrödinger 方程式が実際に式 (2.8)、(2.9) の下で不変であることによって支持される。また、この相互作用ハミルトニアンにより粒子間に特殊な形のエンタングルメントが導入される。

### 3 Schrödinger 方程式からミクロカノニカルアンサンブルへ： Bose-Einstein 統計

この章では、先に論じた Schrödinger 方程式の厳密解を示す。その解は、相互作用を 0 にする極限の下では、エネルギー固有値について相互作用の無い系でのよく知られた結果に帰着される。また、そこから定義される純粋状態の密度行列がいかにしてミクロカノニカルアンサンブルの密度行列になり得るかについて議論する。それにも、1 章で議論した相互作用を取り去るという概念が関係する。結合定数  $g$  を 0 に近付ける極限によって位相の自由度が観測可能量として現れなくなることから、位相についての和を先にとるべきであることがわかる。このことは、位相のシフトに関するゲージ理論的構造に起因する。また、これはランダム位相と同様の状況が現れている。フェルミオンについては次章で言及する。

#### 3.1 Schrödinger 方程式

系の状態を記述する方程式として、定常状態の Schrödinger 方程式

$$\hat{H} |u_E\rangle = E |u_E\rangle \quad (3.1)$$

を採用する。全ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I \quad (3.2)$$

であり、 $(s+1)^N$  次元空間内で定義される。この方程式の固有状態とそれに付する厳密な解は、それぞれ

$$\begin{aligned} |u_E\rangle &\equiv |M; N, [\theta_m]\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{W(M, N)}} \sum_{P\{n\}} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \exp\left(i \sum_{i=1}^N n_i \theta_{m_i}\right) \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$E_{M, N} = M\varepsilon + gN^2 \quad (3.4)$$

で与えられる。式 (3.3) の Kronecker のデルタは励起状態の合計数を  $M$  に固定する条件を表している。 $i$  番目のボソンの最大励起状態は  $s$  なので、 $M$  の最大値は  $Ns$  となる。また、同式の  $P\{n\}$  についての和は、 $(n_1, n_2, \dots, n_N)$  の取り得る全ての順列について足しあげる。 $W(M, N)$  は規格化定数で規格化条件から決まるが、詳細

は 3.3 節で述べる。固有状態の表現についての簡単な例を  $M = 2, N = 3$  について書き下すと、 $|M = 2; N = 3, [\theta_m]\rangle = (1/\sqrt{6}) [|2, 0, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_1}) + |0, 2, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_2}) + |0, 0, 2\rangle \exp(2i\theta_{m_3}) + |1, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_2}) + |1, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_3}) + |0, 1, 1\rangle \times \exp(i\theta_{m_2} + i\theta_{m_3})]$  となる。このように、方程式 (3.1) の解は特殊なパターンを持つエンタングルメントを実現している。

Schrödinger 方程式のゲージ不変性についてコメントする。式 (2.8) と (2.10) のゲージ変換によって、式 (2.12) の  $\hat{v}_i$  は  $\hat{v}_i \rightarrow \hat{v}_i \exp(-i\theta_{\mu_i})$  と変換を受ける。したがって、式 (3.2) の相互作用ハミルトニアンは、 $\hat{H}_0$  と異なりゲージ変換の下で不変ではない。しかし、式 (3.3) の状態は式 (2.9) の変換により  $|M; N, [\theta_m]\rangle \rightarrow |M; N, [\theta_m + \theta_\mu]\rangle$  と変わる。その結果、式 (3.1) は変換されたハミルトニアンと状態により同様の形式になり、ゲージ不変を示す。また、エネルギーはゲージ変換により変化しない。

### 3.2 $g \rightarrow 0$ 極限

1 章で述べたように、一度統計力学的な表現に移行すれば、最早相互作用は無視してしまっても構わない。つまり、微視的状态は問わず励起状态の合計数  $M$  のみに注目してエネルギーを求める段階で、相互作用を消去すべく

$$g \rightarrow 0 \tag{3.5}$$

の極限をとると、式 (3.4) は

$$E_{M,N} = M\varepsilon \tag{3.6}$$

となり、相互作用の無い系のよく知られた結論に達する。この極限を実行した後では、相互作用ハミルトニアン項に出てくる位相演算子の情報は全く出てこない。すなわち、物理量にも位相の情報は含まれないことになる。このことは、次節で議論する密度行列の定義にも影響を与える。

### 3.3 ミクロカノニカルアンサンブルの密度行列と完全なデコヒーレンス

まず始めに、3.1 節で定義した状態の規格化について述べる。式 (3.3) の状態の規格化条件は

$$\frac{1}{(s+1)^N} \sum_{m_1, m_2, \dots, m_N=0}^s \langle M; N, [\theta_m] | M; N, [\theta_m] \rangle = 1 \quad (3.7)$$

で与えられる。これにより、規格化定数  $W(M, N)$  は

$$\begin{aligned} W(M, N) &= \frac{1}{(s+1)^N} \sum_{m_1, m_2, \dots, m_N=0}^s \sum_{P\{n\}} \sum_{P\{n'\}} \langle n_1, n_2, \dots, n_N | n'_1, n'_2, \dots, n'_N \rangle \\ &\quad \times \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \delta_{n'_1+n'_2+\dots+n'_N, M} \exp \left( -i \sum_{i=1}^N n_i \theta_{m_i} \right) \exp \left( i \sum_{i=1}^N n'_i \theta_{m_i} \right) \\ &= \frac{1}{(s+1)^N} \sum_{m_1, m_2, \dots, m_N=0}^s \sum_{P\{n\}} \sum_{P\{n'\}} \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \cdots \delta_{n_N, n'_N} \\ &\quad \times \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \delta_{n'_1+n'_2+\dots+n'_N, M} \exp \left[ i \sum_{i=1}^N (n'_i - n_i) \theta_{m_i} \right] \\ &= \frac{1}{(s+1)^N} \sum_{P\{n\}} \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \sum_{m_1, m_2, \dots, m_N=0}^s \\ &= \sum_{P\{n\}} \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \end{aligned} \quad (3.8)$$

と計算できる。最右辺は  $N$  個の箱に  $M$  個の玉を入れる組み合わせに等しい。したがって、ボソンに対して、

$$W(M, N) = \frac{(M+N+1)!}{(N-1)!M!} \quad (3.9)$$

である。これでボソンに特徴的な縮退度が導出された。さらに、式 (3.3) の状態は、 $\frac{1}{\sqrt{W(M, N)}}$  の確率で等しく寄与している。よって、先験的等確率の原理が導かれた。

式 (3.7) の規格化条件には位相についての和がついている。しかし、実はこの和は無くても  $W(M, N)$  は同じ結果となる。式 (3.8) の計算の中で  $\frac{1}{(s+1)^N}$  と  $\sum_{m_1, m_2, \dots, m_N=0}^s$  は打ち消しあっているので、 $\frac{1}{(s+1)^N} \sum_{m_1, m_2, \dots, m_N=0}^s$  を外しても同様の結果が出ることは明らかである。しかし、この因子が必要なのは密度行列の定義に必要なからである。ミクロカノニカルアンサンブルの密度行列は混合状態なので、何らかのトレースアウトをする、もしくは和をとる必要がある。前節で議論したように、位相（演算子）の情報は観測可能量には含まれない。よって、位相についての和をとることで混合状態の密度行列を定義す

る。つまり、

$$\hat{\rho} = \frac{1}{(s+1)^N} \sum_{m_1, m_2, \dots, m_N=0}^s |M; N, [\theta_m]\rangle \langle M; N, [\theta_m]| \quad (3.10)$$

と定義し、和を先に計算すると

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \frac{1}{(s+1)^N} \sum_{m_1, m_2, \dots, m_N=0}^s \frac{1}{W(M, N)} \sum_{P\{n\}} \sum_{P\{n'\}} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \langle n'_1, n'_2, \dots, n'_N| \\ &\quad \times \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \delta_{n'_1+n'_2+\dots+n'_N, M} \exp \left[ i \sum_{i=1}^N (n_i - n'_i) \theta_{m_i} \right] \\ &= \frac{1}{W(M, N)} \sum_{P\{n\}} \sum_{P\{n'\}} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \langle n'_1, n'_2, \dots, n'_N| \\ &\quad \times \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \delta_{n'_1+n'_2+\dots+n'_N, M} \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \cdots \delta_{n_N, n'_N} \\ &= \frac{1}{W(M, N)} \sum_{P\{n\}} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_N| \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \end{aligned} \quad (3.11)$$

となる。これによって、 $\hat{H}_0$  のエネルギー固有状態の基底に関して、非対角成分がすべて消失し、完全なデコヒーレンスを実現されたことがわかる。

以上より、完全なデコヒーレンスと先験的等確率が同時に実現された。密度行列が定義できたのでエントロピーや温度についても議論できるが、フェルミオンと並行して議論を進めるために次章で取り扱う。

## 4 Fermi-Dirac 統計の導出

前章までの議論はボソンに限ってきたが、これらは全てフェルミオンの場合にも拡張可能である。生成・消滅演算子をフェルミオンの反交換関係で置き換え、式 (3.3) の固有状態の和の取り方に Pauli の排他律を取り込めばよい。ただし、相互作用ハミルトニアンは同様の定義でうまくいかないことがわかる。それは、 $i$  番目のフェルミオンの生成・消滅演算子が  $j$  ( $i \neq j$ ) 番目のそれと反交換することに関連する。例えば、式 (2.13) の相互作用ハミルトニアンに現れる  $|0\rangle_{ii}\langle 0|$  は他の演算子と交換するが、 $|0\rangle_{ii}\langle 1| = |0\rangle_{ii}\langle 0| \hat{a}_i$  なので  $\hat{a}_j^\dagger$  ( $i \neq j$ ) と反交換する。これによって、固有状態が元に戻らず Schrödinger 方程式が成立しない。これを回避するために、相互作用ハミルトニアンを改めて

$$\hat{v}_i = \left[ \exp(i\hat{\phi}_i) - |s\rangle_{ii}\langle 0| \right] \exp(-i\theta_{m_i})(-1)^{\hat{F}_i} \quad (4.1)$$

$$\hat{F}_i = \sum_{j < i} \hat{n}_j \quad (\hat{F}_1 \equiv 0) \quad (4.2)$$

と定義し直す。式 (4.2) の  $\hat{n}_j$  はもちろんフェルミオンの数演算子である。これにより、 $\hat{v}_i$  はフェルミオンの数状態の符号を変えないことなく、生成・消滅演算子と入れ替わることができる。例えば、 $\hat{v}_i |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{a}_{i-1}^\dagger)^{n_{i-1}} \hat{v}_i (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} (\hat{a}_{i+1}^\dagger)^{n_{i+1}} \dots \times (\hat{a}_N^\dagger)^{n_N} |0\rangle / \sqrt{n_1! n_2! \dots n_N!}$  のように書ける。

式 (3.3) のフェルミオンに対する固有状態の定義については、Pauli の排他律に従って和の取り方  $P\{n\}$  を変える。ボソンと同じ例を使うと、 $M = 2, N = 3$  で  $|M = 2; N = 3, [\theta_m]\rangle = (1/\sqrt{3}) [|1, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_2}) + |1, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_3}) + |0, 1, 1\rangle \exp(i\theta_{m_2} + i\theta_{m_3})]$  と書ける。(3.4) のエネルギーは、

$$E_{M,N} = M\varepsilon + gf(N) \quad (f(N): \text{正整数}, 0 < f(N) \leq N^2) \quad (4.3)$$

と変更される。 $f(N)$  はボソンと同じ状況のとき、つまり  $M = 1$  のとき最大値  $N^2$  をとる。 $N$  を固定して見れば  $M$  が大きくなるにつれて  $f(N)$  は小さくなる。また、式 (3.8) と同様の計算により、 $W(M, N)$  は

$$W(M, N) = \frac{N!}{(N-M)!M!} \quad (4.4)$$

と与えられる。ボソンと同様、フェルミオンの縮退度が導出された。



したがって、この方法ではフェルミオンをボソンと同様の形式で統一的に議論することが可能であることがわかる。フェルミオンに特徴的なのは、 $(-1)^{\hat{F}_i}$  の因子が現れることである。

最後に、エントロピーと温度について触れる。フェルミオンの密度行列はボソンと和の取り方  $P\{n\}$  が（上述の、式 (3.3) のフェルミオンに対する状態の定義と同様に）異なるだけで、式 (3.11) と同じ形で与えられる。同様の式になることはボソンの計算過程よりわかる。したがって、ボソンとフェルミオンに対する密度行列が定義できたので、それらのエントロピーや温度は普通の平衡統計力学の方法で計算される。Boltzmann 定数を 1 とすれば、von Neumann エントロピーは  $S = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$  である。ボソンとフェルミオンの違いは和の取り方のみなので、以降の計算は共通の表示となる。固有状態を代入すると、

$$\begin{aligned} S &= -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \\ &= -\sum_{P\{n''\}} \langle n''_1, n''_2, \dots, n''_N | \left[ \frac{1}{W(M, N)} \sum_{P\{n\}} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_N| \right. \\ &\quad \times \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \ln \left( \frac{1}{W(M, N)} \sum_{P\{n'\}} |n'_1, n'_2, \dots, n'_N\rangle \langle n'_1, n'_2, \dots, n'_N| \right. \\ &\quad \left. \left. \times \delta_{n'_1+n'_2+\dots+n'_N, M} \right) \right] |n''_1, n''_2, \dots, n''_N\rangle \end{aligned}$$

となる。ここで、 $\ln \left( \sum_{P\{n\}} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_N| \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \right) = \sum_{P\{n\}} \ln (\delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_N|)$  の関係を使うと、

$$\begin{aligned} S &= -\sum_{P\{n''\}} \delta_{n_1, n''_1} \delta_{n_2, n''_2} \cdots \delta_{n_N, n''_N} \frac{1}{W(M, N)} \left[ \sum_{P\{n\}} \sum_{P\{n'\}} \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \cdots \delta_{n_N, n'_N} \right. \\ &\quad \times \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \ln \left( \frac{1}{W(M, N)} \delta_{n'_1+n'_2+\dots+n'_N, M} \right) \left. \delta_{n'_1, n''_1} \delta_{n'_2, n''_2} \cdots \delta_{n'_N, n''_N} \right] \\ &= -\frac{1}{W(M, N)} \left[ \sum_{P\{n\}} \sum_{P\{n'\}} \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \cdots \delta_{n_N, n'_N} \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \right. \\ &\quad \left. \times \ln \left( \frac{1}{W(M, N)} \delta_{n'_1+n'_2+\dots+n'_N, M} \right) \right] \\ &= -\frac{1}{W(M, N)} \sum_{P\{n\}} \delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M} \left[ \ln \left( \frac{1}{W(M, N)} \right) + \ln (\delta_{n_1+n_2+\dots+n_N, M}) \right] \end{aligned}$$

$$= \ln W(M, N) \quad (4.5)$$

と計算できる。ただし、最後の等号は  $\lim_{x \rightarrow 0} x \ln x = 0$  より大括弧内の第二項を落としている。温度については逆温度  $\beta$  を熱力学的関係式  $\beta = \partial S / \partial E_{M,N}$  から決める。 $M = E_{M,N} / \varepsilon$  なので、ボソンの場合は式 (3.9) より、大きな  $N$  に対して、

$$\begin{aligned} \beta &\simeq \frac{1}{\varepsilon} \ln \left( \frac{E_{M,N}}{\varepsilon} + N \right) + \frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon} \ln \frac{E_{M,N}}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon} \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \ln \left( \frac{N\varepsilon}{E_{M,N}} + 1 \right) \end{aligned} \quad (4.6)$$

であり、また式 (4.4) のフェルミオンに対しても

$$\begin{aligned} \beta &\simeq \frac{1}{\varepsilon} \ln \left( N - \frac{E_{M,N}}{\varepsilon} \right) + \frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon} \ln \frac{E_{M,N}}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon} \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \ln \left( \frac{N\varepsilon}{E_{M,N}} - 1 \right) \end{aligned} \quad (4.7)$$

と通常の結果を与える。

以上により、ボソンとフェルミオンに対して、統一的な扱いの下ミクロカノニカルアンサンブルを構成することができた。式 (3.11) により、量子的ミクロカノニカルアンサンブルが実現された。故に、通常の手続きに従って、古典的ミクロカノニカルアンサンブルが高温の極限で導かれる。これらの結果から、統計力学がいかにして量子力学から導出され得るかがわかる。特に、エルゴード性を要請していないことを強調したい。

## 5 カノニカルアンサンブルへの移行

最後にこの章では、カノニカルアンサンブルを構成する。前章でマイクロカノニカルアンサンブルの構成ができているため、この移行はすぐに行うことができる。

### 5.1 部分系と環境系への分割

カノニカルアンサンブルの構成は複雑ではない。前章で考えた孤立系全体を対象系  $S$  と熱浴  $B$  に分ける。これらはそれぞれ、 $N_S$  個と  $N_B$  個の振動子で構成され、 $N_S \ll N_B$  の条件に拘束される。系全体は  $N = N_S + N_B$  で表され、 $N_S$  と  $N_B$  は固定する。エネルギーも同様に  $E_{M,N} = E_{S,M_S,N_S} + E_{B,M_B,N_B} = M_S \varepsilon + M_B \varepsilon = M \varepsilon$  で与えられる。ここでも  $M_S \ll M_B$  で孤立系全体の  $M$  は固定するが、 $M_S$ 、 $M_B$  は固定しない。この設定から、式 (3.3) を書き直せば

$$|M; N, [\theta_m]\rangle = \sum_{M_S, M_B} \sqrt{\frac{W_S(M_S, N_S) W_B(M_B, N_B)}{\sqrt{W(M, N)}}} |M_S; N_S, [\theta_{m_S}]\rangle_S \otimes |M_B; N_B, [\theta_{m_B}]\rangle_B \delta_{M_S + M_B, M} \quad (5.1)$$

となる。ここで、

$$|M_A; N_A, [\theta_{m_A}]\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{W_A(M_A, N_A)}} \sum_{P\{n_A\}} |n_{A,1}, n_{A,2}, \dots, n_{A,N_A}\rangle \times \delta_{n_{A,1} + n_{A,2} + \dots + n_{A,N_A}, M_A} \exp\left(i \sum_{i=1}^{N_A} n_{A,i} \theta_{m_{A,i}}\right) \quad (A = S, B) \quad (5.2)$$

である。式 (5.1) の  $\sum_{M_A}$  ( $A = S, B$ ) は取り得る全ての励起数  $M_A$  についての和である。また、式 (5.1), (5.2) は両方とも規格化されるように新しく規格化定数を決めるが、詳細は次節で述べる。

## 5.2 カノニカルアンサンブルの密度行列

式 (3.10) も書き換えられる。代入すると、

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho} &= \frac{1}{(s+1)^N} \sum_{m_{S,1}, m_{S,2}, \dots, m_{S,N_S}=0}^s \sum_{m_{B,1}, m_{B,2}, \dots, m_{B,N_B}=0}^s \frac{1}{W(M, N)} \frac{W_S(M_S, N_S) W_B(M_B, N_B)}{W(M, N)} \\
 &\quad \times \sum_{M_S, M_B} \sum_{M'_S, M'_B} |M_S; N_S, [\theta_{m_S}]\rangle_S \langle M'_S; N_S, [\theta_{m_S}]| \otimes |M_B; N_B, [\theta_{m_B}]\rangle_B \langle M'_B; N_B, [\theta_{m_B}]| \\
 &\quad \times \delta_{M_S+M_B, M} \delta_{M'_S+M'_B, M} \\
 &= \frac{1}{(s+1)^{N_S+N_B}} \sum_{m_{S,1}, m_{S,2}, \dots, m_{S,N_S}=0}^s \sum_{m_{B,1}, m_{B,2}, \dots, m_{B,N_B}=0}^s \frac{1}{W(M, N)} \sum_{M_S, M_B} \sum_{M'_S, M'_B} \\
 &\quad \times \sum_{P\{n_S\}} \sum_{P\{n'_S\}} |n_{S,1}, n_{S,2}, \dots, n_{S,N_S}\rangle_S \langle n'_{S,1}, n'_{S,2}, \dots, n'_{S,N_S}| \\
 &\quad \times \delta_{n_{S,1}+n_{S,2}+\dots+n_{S,N_S}, M_S} \delta_{n'_{S,1}+n'_{S,2}+\dots+n'_{S,N_S}, M'_S} \exp \left[ i \sum_{i=1}^{N_S} (n_{S,i} - n'_{S,i}) \theta_{m_{S,i}} \right] \\
 &\quad \otimes \sum_{P\{n_B\}} \sum_{P\{n'_B\}} |n_{B,1}, n_{B,2}, \dots, n_{B,N_B}\rangle_B \langle n'_{B,1}, n'_{B,2}, \dots, n'_{B,N_B}| \\
 &\quad \times \delta_{n_{B,1}+n_{B,2}+\dots+n_{B,N_B}, M_B} \delta_{n'_{B,1}+n'_{B,2}+\dots+n'_{B,N_B}, M'_B} \exp \left[ i \sum_{i=1}^{N_B} (n_{B,i} - n'_{B,i}) \theta_{m_{B,i}} \right] \\
 &\quad \times \delta_{M_S+M_B, M} \delta_{M'_S+M'_B, M}
 \end{aligned}$$

と書ける。後は前と同様位相の和を先にとり、それによって現れる Kronecker のデルタについて次々と和をとれば

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho} &= \frac{1}{W(M, N)} \sum_{M_S, M_B} \sum_{M'_S, M'_B} \sum_{P\{n_S\}} \sum_{P\{n'_S\}} |n_{S,1}, n_{S,2}, \dots, n_{S,N_S}\rangle_S \langle n'_{S,1}, n'_{S,2}, \dots, n'_{S,N_S}| \\
 &\quad \times \delta_{n_{S,1}+n_{S,2}+\dots+n_{S,N_S}, M_S} \delta_{n'_{S,1}+n'_{S,2}+\dots+n'_{S,N_S}, M'_S} \delta_{n_{S,1}, n'_{S,1}} \delta_{n_{S,2}, n'_{S,2}} \dots \delta_{n_{S,N_S}, n'_{S,N_S}} \\
 &\quad \otimes \sum_{P\{n_B\}} \sum_{P\{n'_B\}} |n_{B,1}, n_{B,2}, \dots, n_{B,N_B}\rangle_B \langle n'_{B,1}, n'_{B,2}, \dots, n'_{B,N_B}| \\
 &\quad \times \delta_{n_{B,1}+n_{B,2}+\dots+n_{B,N_B}, M_B} \delta_{n'_{B,1}+n'_{B,2}+\dots+n'_{B,N_B}, M'_B} \\
 &\quad \times \delta_{n_{B,1}, n'_{B,1}} \delta_{n_{B,2}, n'_{B,2}} \dots \delta_{n_{B,N_B}, n'_{B,N_B}} \delta_{M_S+M_B, M} \delta_{M'_S+M'_B, M} \\
 &= \frac{1}{W(M, N)} \sum_{M_S, M_B} \sum_{M'_S, M'_B} \sum_{P\{n_S\}} |n_{S,1}, n_{S,2}, \dots, n_{S,N_S}\rangle_S \langle n_{S,1}, n_{S,2}, \dots, n_{S,N_S}| \\
 &\quad \times \delta_{n_{S,1}+n_{S,2}+\dots+n_{S,N_S}, M_S} \delta_{n_{S,1}+n_{S,2}+\dots+n_{S,N_S}, M'_S} \\
 &\quad \otimes \sum_{P\{n_B\}} |n_{B,1}, n_{B,2}, \dots, n_{B,N_B}\rangle_B \langle n_{B,1}, n_{B,2}, \dots, n_{B,N_B}|
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \delta_{n_{B,1}+n_{B,2}+\dots+n_{B,N_B},M_B} \delta_{n_{B,1}+n_{B,2}+\dots+n_{B,N_B},M'_B} \\
& \times \delta_{M_S+M_B,M} \delta_{M'_S+M'_B,M} \\
= & \frac{1}{W(M,N)} \sum_{M_S,M_B} \sum_{P\{n_S\}} \sum_{P\{n_B\}} |n_{S,1},n_{S,2},\dots,n_{S,N_S}\rangle_S \langle n_{S,1},n_{S,2},\dots,n_{S,N_S}| \\
& \otimes |n_{B,1},n_{B,2},\dots,n_{B,N_B}\rangle_B \langle n_{B,1},n_{B,2},\dots,n_{B,N_B}| \\
& \times \delta_{n_{S,1}+n_{S,2}+\dots+n_{S,N_S},M_S} \delta_{n_{B,1}+n_{B,2}+\dots+n_{B,N_B},M_B} \delta_{M_S+M_B,M} \quad (5.3)
\end{aligned}$$

と計算される。ただし、これは系全体の密度行列である。システム  $S$  の密度行列は、熱浴  $B$  についてパーシャルトレースをとることで定義される。つまり、

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_S &= \text{Tr}_B \hat{\rho} \\
&= \frac{1}{W(M,N)} \sum_{M_S,M_B} \sum_{P\{n_S\}} \sum_{P\{n_B\}} |n_{S,1},n_{S,2},\dots,n_{S,N_S}\rangle_S \langle n_{S,1},n_{S,2},\dots,n_{S,N_S}| \\
&\quad \times \delta_{n_{S,1}+n_{S,2}+\dots+n_{S,N_S},M_S} \delta_{n_{B,1}+n_{B,2}+\dots+n_{B,N_B},M_B} \delta_{M_S+M_B,M} \\
&= \frac{1}{W(M,N)} \sum_{M_S,M_B} W_B(M_B, N_B) \sum_{P\{n_S\}} |n_{S,1},n_{S,2},\dots,n_{S,N_S}\rangle_S \langle n_{S,1},n_{S,2},\dots,n_{S,N_S}| \\
&\quad \times \delta_{n_{S,1}+n_{S,2}+\dots+n_{S,N_S},M_S} \delta_{M_S+M_B,M} \\
&= \frac{1}{W(M,N)} \sum_{M_S} W_B(M - M_S, N_B) \sum_{P\{n_S\}} |n_{S,1},n_{S,2},\dots,n_{S,N_S}\rangle_S \langle n_{S,1},n_{S,2},\dots,n_{S,N_S}| \\
&\quad \times \delta_{n_{S,1}+n_{S,2}+\dots+n_{S,N_S},M_S} \quad (5.4)
\end{aligned}$$

で与えられる。規格化条件  $\text{Tr}_S \hat{\rho}_S = 1$  から、規格化定数は  $W(M,N) = \sum_{M_S} W_S(M_S, N_S) W_B(M - M_S, N_B)$  と求まる。ところで、 $M_S \ll M_B \sim M$  なので

$$\begin{aligned}
W_B(M - M_S, N_B) &= \exp [\ln W_B(M - M_S, N_B)] \\
&\simeq \exp \left[ \ln W_B(M, N_B) - M_S \frac{\partial}{\partial M} \ln W_B(M, N_B) \right] \\
&\simeq \exp \left[ \ln W_B(M, N_B) - M_S \frac{\partial}{\partial M_B} \ln W_B(M_B, N_B) \right] \\
&= \exp \left[ \ln W_B(M, N_B) - E_{S,M_S,N_S} \frac{\partial}{\partial E_{B,M_B,N_B}} \ln W_B(M_B, N_B) \right]
\end{aligned}$$

と展開できる。ここで、 $E_{B,M_B,N_B} = M_B \varepsilon$  の関係を使った。熱浴のエントロピー  $S_B = \ln W_B(M_B, N_B)$  と逆温度  $\beta = \frac{\partial S_B}{\partial E_{B,M_B,N_B}}$  を定義し、これを使えば、 $W_B(M - M_S, N_B) \simeq \exp(-\beta E_{S,M_S,N_S}) W_B(M, N_B)$  と書ける。通常通り、系の温度は熱浴の変

数のみによって決定される。よって、改めて式 (5.4) を書き直せば

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_S = & \frac{1}{\sum_{M'_S} W_S(M'_S, N_S) \exp(-\beta E_{S, M'_S, N_S})} \sum_{M_S} \exp(-\beta E_{S, M_S, N_S}) \\ & \times \sum_{P\{n_S\}} |n_{S,1}, n_{S,2}, \dots, n_{S,N_S}\rangle_S {}_S\langle n_{S,1}, n_{S,2}, \dots, n_{S,N_S}| \delta_{n_{S,1}+n_{S,2}+\dots+n_{S,N_S}, M_S} \end{aligned} \quad (5.5)$$

が得られる。

以上により、カノニカルアンサンブルの密度行列を構成することができた。

## 6 結論

本研究では、位相演算子のゲージ構造に着目して相互作用ハミルトニアンを決定し、ボソンとフェルミオンを統一的に取り扱った。また、そこで相互作用によって特別なタイプのエンタングルメントが導入されることを見た。エルゴード性という概念が量子確率とエンタングルメントによって置き換えられた。これらによって、相互作用を無視する極限の下で、Bose-Einstein 分布と Fermi-Dirac 分布を定常状態の Schrödinger 方程式から導出した。孤立系において完全なデコヒーレンスの実現され等確率の原理が導かれたことで、ミクロカノニカルアンサンブルが構成された。更に、ミクロカノニカルアンサンブルの密度演算子の定義にはランダム位相の概念と同様の状況が現れた。最後に、こうして得られたミクロカノニカルアンサンブル理論からカノニカルアンサンブル理論を構成した。以上の議論は高温極限によって古典論に帰着する。この研究は統計力学と量子力学がその根底で結び付いているという可能性を支持する裏付けの一つになると考えられる。

なお、本研究では相互作用の無い系についてのみ取り扱ったが、一般的に統計力学は相互作用を含む系も取り扱うことができるので、それについてコメントする。一度ミクロカノニカルアンサンブルが構成されれば、相互作用が強すぎない限り、その導入は理論に大きな変更を要しない。ハミルトニアンやエネルギー、つまり  $M$  と  $\varepsilon$  が変更を受ける。また、カノニカルアンサンブルの段階では相互作用ハミルトニアンを熱浴のハミルトニアンに含めることができる。ただし、本論での相互作用ハミルトニアン  $\hat{H}_I$  と混同すべきではない。それらは通常、自由粒子からの摂動の外挿として取り扱われる。

本論で展開した方法は、議論をボソンとフェルミオンの中間に位置するようなパラ統計を取り扱えるように拡張することができる可能性を持つ。そのためには交換関係を変形された交換関係に拡張することなどが考えられる。そのような交換関係の下でのゲージ理論的構造を研究することは興味深い。鍵となるのはパラ統計のような縮退度を先験的等確率として導出出来るか否かであり、これは今後の課題となる。

## 謝辞

本研究を進めるにあたって、数々の有意義な議論と助言をいただいた阿部純義先生に深く感謝致します。また、種々のアドバイスを頂いた小竹茂夫先生と鳥飼正志先生にも感謝申し上げます。更に、日ごろから様々な議論に付き合っていたいただいた岡田大輝氏、今井敏也氏、佐藤諒太氏にも感謝します。



## 付録A 補足計算

本論では、ミクロカノニカルのエネルギーについて、その具体的な計算を載せていない。ここで、その計算について触れておく。また、von Neumann エントロピーの計算の際にエルミート演算子の対数関数についての関係式を用いた。それについても簡単に説明する。

ここでは、ボソンの  $M = 2, N = 3$  に限ってエネルギーを計算する。その他の場合やフェルミオンについては、この計算から予想がつく。

$$\begin{aligned}
 \hat{H} |M = 2, N = 3, [\theta_m]\rangle &= \left[ \varepsilon \sum_{i=1}^3 \hat{n}_i + g \left( \hat{V}^\dagger \hat{V} + 3 \sum_{i=1}^3 |0\rangle_i {}_i\langle 0| \right) \right] \\
 &\times \frac{1}{\sqrt{6}} [ |2, 0, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_1}) + |0, 2, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_2}) + |0, 0, 2\rangle \exp(2i\theta_{m_3}) \\
 &+ |1, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_2}) + |1, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_3}) + |0, 1, 1\rangle \exp(i\theta_{m_2} + i\theta_{m_3}) ] \\
 &\quad (A.1)
 \end{aligned}$$

右辺第一項の自由ハミルトニアンは全ての固有状態の項に対して

$$\begin{aligned}
 &\frac{2\varepsilon}{\sqrt{6}} [ |2, 0, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_1}) + |0, 2, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_2}) + |0, 0, 2\rangle \exp(2i\theta_{m_3}) \\
 &+ |1, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_2}) + |1, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_3}) + |0, 1, 1\rangle \exp(i\theta_{m_2} + i\theta_{m_3}) ] \\
 &= 2\varepsilon |M = 2, N = 3, [\theta_m]\rangle \quad (A.2)
 \end{aligned}$$

となることがわかる。次に、相互作用の項を計算していく。 $N = 3$  では、 $\hat{V}$  は  $\hat{V} = \sum_{i=1}^3 \left[ \exp(i\hat{\phi}_i) - |s\rangle_i {}_i\langle 0| \right] \exp(-i\theta_{m_i}) = (|0\rangle_{11} \langle 1| + |1\rangle_{11} \langle 2| + |2\rangle_{11} \langle 3|) \exp(i\theta_{m_1}) + (|0\rangle_{22} \langle 2| + |1\rangle_{22} \langle 2| + |2\rangle_{22} \langle 3|) \exp(i\theta_{m_2}) + (|0\rangle_{33} \langle 1| + |1\rangle_{33} \langle 2| + |2\rangle_{33} \langle 3|) \exp(i\theta_{m_3})$  と展開できる。これを用いて式 (A.1) の右辺の相互作用ハミルトニアンの項を順に計算する。まず、固有状態に  $\hat{V}$  を作用させると

$$\begin{aligned}
 \hat{V} |M = 2, N = 3, [\theta_m]\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} [ |1, 0, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1}) + |0, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_2}) + |0, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_3}) \\
 &+ |0, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_2}) + |1, 0, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1}) + |0, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_3}) \\
 &+ |1, 0, 0\rangle \exp(i\theta_{m_3}) + |0, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_3}) + |0, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_2}) ] \\
 &= \frac{3}{\sqrt{6}} [ |1, 0, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1}) + |0, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_2}) + |0, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_3}) ] \quad (A.3)
 \end{aligned}$$

と求まる。よって、 $\hat{V}^\dagger \hat{V}$  の作用は

$$\begin{aligned}
& \hat{V}^\dagger \hat{V} |M=2, N=3, [\theta_m]\rangle \\
&= \frac{3}{\sqrt{6}} [\{|2, 0, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_1}) + |1, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_2}) + |1, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_3})\} + \\
&\quad \{|1, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_2}) + |0, 2, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_2}) + |0, 1, 1\rangle \exp(i\theta_{m_2} + i\theta_{m_3})\} + \\
&\quad \{|1, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_3}) + |0, 1, 1\rangle \exp(i\theta_{m_2} + i\theta_{m_3}) + |0, 0, 2\rangle \exp(2i\theta_{m_3})\}] \\
&= \frac{3}{\sqrt{6}} [|2, 0, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_1}) + |0, 2, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_2}) + |0, 0, 2\rangle \exp(2i\theta_{m_3})] \\
&\quad + \frac{6}{\sqrt{6}} [|1, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_2}) + |1, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_3}) + |0, 1, 1\rangle \exp(i\theta_{m_2} + i\theta_{m_3})]
\end{aligned} \tag{A.4}$$

の結果を与える。相互作用の第二項についても計算すると

$$\begin{aligned}
& \left( 3 \sum_{i=1}^3 |0\rangle_i \langle 0| \right) |M=2, N=3, [\theta_m]\rangle \\
&= \frac{3}{\sqrt{6}} [2 |2, 0, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_1}) + 2 |0, 2, 0\rangle \exp(2i\theta_{m_2}) + 2 |0, 0, 2\rangle \exp(2i\theta_{m_3})] \\
&\quad + \frac{3}{\sqrt{6}} [|1, 1, 0\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_2}) + |1, 0, 1\rangle \exp(i\theta_{m_1} + i\theta_{m_3}) + |0, 1, 1\rangle \exp(i\theta_{m_2} + i\theta_{m_3})]
\end{aligned} \tag{A.5}$$

なので、式 (A.2), (A.4), (A.5) を加えれば、式 (A.1) は

$$\hat{H} |M=2, N=3, [\theta_m]\rangle = (2\varepsilon + 9g) |M=2, N=3, [\theta_m]\rangle \tag{A.6}$$

となることがわかる。以上より、ボソンのエネルギー固有値が求まった。

次に、混合状態の密度行列の von Neumann エントロピーの計算についてコメントする。一般に、エルミート演算子の対数関数は次のように Taylor 展開で

$$\ln \hat{A} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} (\hat{A} - \hat{I})^n \tag{A.7}$$

と定義される。ここで、エルミート演算子を射影演算子  $\hat{P}_k$  とその固有値  $p_k$  に分解し、射影演算子の性質を使えば

$$\begin{aligned}
\hat{A}^n &= \left( \sum_k p_k \hat{P}_k \right)^n \\
&= \sum_k p_k^n \hat{P}_k
\end{aligned} \tag{A.8}$$

であるから、

$$\begin{aligned}
 \ln \hat{A} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \left( \sum_k p_k \hat{P}_k - \sum_k \hat{P}_k \right)^n \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \sum_k (p_k - 1)^n \hat{P}_k \\
 &= \sum_k \hat{P}_k \ln p_k
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

と書き直せる。式 (4.5) はこの関係を用いて求められた。

## 付録B 位相演算子の一般的問題

正準位置と正準運動量はポアソン括弧を交換関係 (を虚数とプランク定数で割ったもの) に置き換えることにより量子化される。Dirac[12] は正準共役なペアに対して行われるこの手続きを正準変換によって結ばれている位相と粒子数に対しても行い、それを用いて非相対論的な量子論の下で電磁場を扱う仕事に取り組んだ。そこで初めて位相演算子の議論が展開された。つまり、位相演算子  $\hat{\phi}$ 、数演算子  $\hat{N}$  に対して

$$[\hat{\phi}, \hat{N}] = -i\hbar \quad (\text{B.1})$$

の関係式を考えた。Louisell[15] はその交換関係がある困難を抱えていることを指摘した。式 (B.1) の両辺を数状態  $|n\rangle$  と  $|m\rangle$  で挟み、その行列要素を考えると

$$\begin{aligned} \langle n | (\hat{\phi}m - n\hat{\phi}) | m \rangle &= -i\hbar\delta_{mn} \\ \therefore (m - n) \langle n | \hat{\phi} | m \rangle &= -i\hbar\delta_{mn} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

であり、 $n = m$  で明らかに不成立である。因みに、正準位置と正準運動量に対しては

$$(x' - x) \langle x | \hat{p} | x' \rangle = -i\hbar\delta(x - x')$$

となる。左辺は  $\langle x | \hat{p} = -i\hbar(\partial/\partial x) \langle x |$  を使えば

$$\begin{aligned} (\text{LHS}) &= -(x' - x) i\hbar \frac{\partial \delta(x - x')}{\partial x} \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [(x' - x) \delta(x - x')] - i\hbar\delta(x - x') \\ &= -i\hbar\delta(x - x') \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

と計算でき、右辺に一致する。Kronecker のデルタと Dirac のデルタ関数の性質の違いからこの結論に達していると考えれば、離散固有値 (数演算子) に対応する正準共役な演算子は存在しないと言える。また、Judge[16] は式 (B.1) のような関係から考慮される位相についての不確定性関係は、位相が周期的で上限値があるために共役な変数の不確定性が 0 になってしまい、その不確定性関係が矛盾することを指摘した。

その後の位相演算子の定義については、Susskind-Glogower[13] や Pegg-Barnett[14] 等が定式化した演算子がある。Susskind-Glogower の演算子の議論は生成・消滅演算子を極分解するところから始まる：

$$\hat{a} = \exp(i\hat{\phi})\sqrt{\hat{n}}, \quad \exp(i\hat{\phi}) = \frac{1}{\sqrt{\hat{n} + 1}}\hat{a}. \quad (\text{B.4})$$

位相演算子を  $\hat{\phi}$  とするのではなく、むしろ  $\exp(\hat{i}\phi)$  が演算子であると見なす。また、 $[\exp(\hat{i}\phi)]^\dagger \equiv \exp(\hat{-i}\phi)$  と定義すると、数状態に対して

$$\exp(\hat{-i}\phi) |n\rangle = |n+1\rangle, \quad (\text{B.5})$$

$$\exp(\hat{i}\phi) |n\rangle = |n-1\rangle \quad (n \neq 0), \quad (\text{B.6})$$

$$\exp(\hat{i}\phi) |0\rangle = 0 \quad (\text{B.7})$$

の作用をする。ただし、 $\exp(\hat{i}\phi)$  はユニタリ演算子ではない。なぜならば、

$$\begin{aligned} \exp(\hat{i}\phi)\exp(\hat{-i}\phi) &= \frac{1}{\sqrt{\hat{n}+1}} \hat{a} \hat{a}^\dagger \frac{1}{\sqrt{\hat{n}+1}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\hat{n}+1}} (\hat{n}-1) \frac{1}{\sqrt{\hat{n}+1}} \\ &= \hat{I} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

であるが、一方

$$\begin{aligned} \exp(\hat{-i}\phi)\exp(\hat{i}\phi) &= \hat{a}^\dagger \frac{1}{\sqrt{\hat{n}+1}} \frac{1}{\sqrt{\hat{n}+1}} \hat{a} \\ &= \hat{a}^\dagger \frac{1}{\sqrt{\hat{n}+1}} \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| \frac{1}{\sqrt{\hat{n}+1}} \hat{a} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \hat{a}^\dagger \frac{1}{\sqrt{n+1}} |n\rangle \langle n| \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n+1} \sqrt{n+1} |n+1\rangle \langle n+1| \sqrt{n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle \langle n+1| \\ &= \hat{I} - |0\rangle \langle 0| \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

となるからである。ただし、二つ目の等号では数状態が完全系を成すことを用いた。よって、これから定義される  $\cos, \sin$  関数

$$\hat{\cos}\phi = \frac{1}{2} [\exp(\hat{i}\phi) + \exp(\hat{-i}\phi)] \quad (\text{B.10})$$

$$\hat{\sin}\phi = \frac{1}{2i} [\exp(\hat{i}\phi) - \exp(\hat{-i}\phi)] \quad (\text{B.11})$$

にも特異性が出る。実際、

$$\begin{aligned}
[\hat{\cos}\phi, \hat{\sin}\phi] &= \frac{1}{4i} [\exp(\hat{i}\phi) + \exp(\hat{-i}\phi), \exp(\hat{i}\phi) - \exp(\hat{-i}\phi)] \\
&= \frac{1}{4i} \left( - [\exp(\hat{i}\phi), -\exp(\hat{-i}\phi)] + [\exp(\hat{-i}\phi), -\exp(\hat{i}\phi)] \right) \\
&= \frac{1}{2i} |0\rangle \langle 0|
\end{aligned} \tag{B.12}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\cos}^2\phi + \hat{\sin}^2\phi &= \frac{1}{4} (\exp(\hat{i}\phi) + \exp(\hat{-i}\phi))^2 - \frac{1}{4} (\exp(\hat{i}\phi) - \exp(\hat{-i}\phi))^2 \\
&= \frac{1}{2} (\exp(\hat{i}\phi)\exp(\hat{-i}\phi) + \exp(\hat{-i}\phi)\exp(\hat{i}\phi)) \\
&= \hat{I} - \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0|
\end{aligned} \tag{B.13}$$

となる。これらは位相演算子がユニタリー性を持っていないことに起因する。しかしながら、これらの不自然さは Pegg-Barnett の演算子では解決されている。これは、Fock 空間を  $s+1$  次元空間に切り取り、基底状態  $|0\rangle$  と  $|s\rangle$  を繋げてしまうことで解決されたと考えることができる。つまり、式 (B.7) 式を (2.7) の第二式に置き換えたことで、位相の周期性を取り込み、位相演算子にユニタリー性を持たせるからである。ただし、Pegg-Barnett の位相演算子では、 $s \rightarrow \infty$  は計算の最後にとらなければならない。

## 参考文献

- [1] T. Kobayashi, *Phys. Lett. A*, **207**, 320 (1995)
- [2] T. Kobayashi, *Nuovo. Cimento. B*, **113**, 633 (1998)
- [3] H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 1373 (1998)
- [4] S. Popescu, Short A J and Winter A 2006 *Nat. Phys.* **2** 754
- [5] J. Schliemann, *Stat. Mech.*, P09011 (2014)
- [6] S. Goldstein, J. L. Lebowitz, R. Tumulka and N. Zanghi, *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 050403 (2006)
- [7] P. Reimann, *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 160404 (2007)
- [8] C. Gogolin and J. Eisert, *Rep. Prog. Phys.*, **79**, 056001 (2016)
- [9] L. D'Alessio, Y. Kafri and A. Polkovnikov, *Adv. Phys.*, **65**, 239 (2016)
- [10] Y. Yokoi and S. Abe, *J. Stat. Mech.* (2018), in press.
- [11] S. Abe and T. Kobayashi, *Phys. Rev.E*, **67**, 036119 (2003)
- [12] P. A. M. Dirac, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, **114**, 243 (1927)
- [13] L. Susskind and J. Glogower, *Physics*, **1**, 49 (1964)
- [14] D. T. Pegg and S. M. Barnett, *Europhys. Lett.*, **6**, 483 (1988)
- [15] W. H. Louisell, *Phys. Lett.*, **7**, 60 (1963)
- [16] D. Judge, *Phys. Lett.*, **5**, 189 (1963)
- [17] 高橋 康、統計力学入門、(講談社、1984)