

力を抜いて、統計力学

Vaster than Empires and More Slow

野村 清英

Dept. of Phys., Kyushu Univ.

2018年10月2日
October the First Is Too Late

序論

「統計力学」の出発点はどこか？

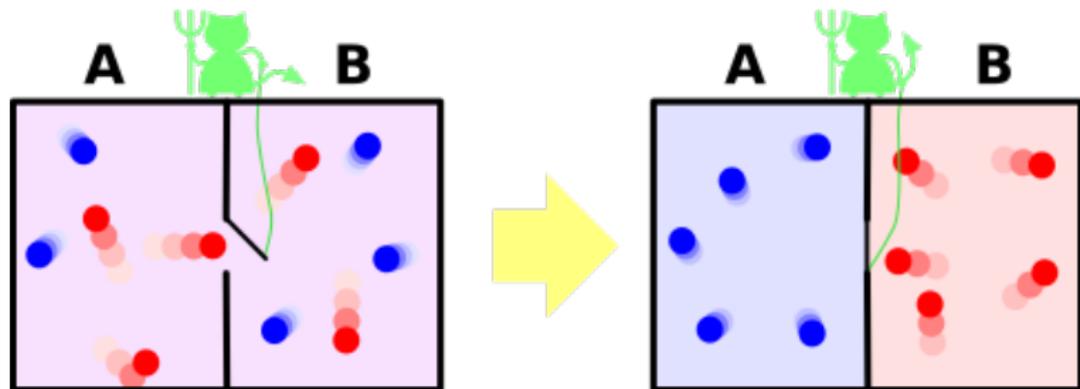
「統計力学」の出発点はどこか？

- ▶ 「統計力学」 久保 亮五、共立全書
 - ▶ 「狭義の統計力学」
(平衡統計力学、 Boltzmann, Gibbs)
 - ▶ 「運動論的方法」
(非平衡統計力学, 未完成)
実は結構古くから着手されている、(Maxwell, Loschmidt) 粘性, 熱伝導, 拡散
- ▶ 少数多体系の統計力学？

序論: 情報論のエントロピー

- ▶ S. L. Szilard (1929)
"Über die Entropieverminderung in einem Thermodynamischen System bei Eingriffen Intelligenter Wesen", Zeitschrift für Physik 53:840 = 856
- ▶ C. W. Shannon (1948)
- ▶ Landauer's Principle (1961)
"Irreversibility and heat generation in the computing process", IBM J. Res. Dev. 5:183 = 191; in Maxwell's Demon 2, pp. 148 = 156.
「忘却とは忘れ去る事なり」

序論：Maxwell の悪魔 (1867,1872)



序論: 確率分布

ハミルトニアンは不明だが、確率分布や密度行列が求められているシステム

- ▶ コヒーレント状態の密度行列
- ▶ ASEP (Asymmetric simple exclusion process)
1次元格子上、非平衡定常系で厳密解あり (2000)
確率分布に対するマスター方程式は与えられている。
スケーリング指数
ランダム行列理論の Tracy-Widom 分布関数
量子群
Bethe 仮説
- ▶ KPZ (Kardar, Parisi, Zhang) 方程式
界面成長
1次元非平衡系 ((1+1) d) で厳密解あり (2010)
ASEP と関係

ASEP では自由エネルギーの示量性 (Extensive property) が破れている?

示量性と加法性 (相加性) は別概念?

密度演算子

量子統計の密度演算子 (von Neumann(1927), Landau) から出発する理由

密度演算子

量子統計の密度演算子 (von Neumann(1927), Landau) から出発する理由

- ▶ 古典統計力学では、エントロピーが負になることがあるため古典理想気体のエントロピー：

密度演算子

量子統計の密度演算子 (von Neumann(1927), Landau) から出発する理由

- ▶ 古典統計力学では、エントロピーが負になることがあるため古典理想気体のエントロピー：

$$S = Nk_B \left[\ln \left(\frac{V}{N} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right) + \frac{5}{2} \right] \quad (1)$$

つまり

$$k_B T < \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \exp(-5/3) \quad (2)$$

でエントロピーが負！

- ▶ 密度演算子は，古典統計力学での位相空間の確率密度に対応（でも Liouville の定理の説明やや面倒）

密度演算子

密度演算子

$$\hat{\rho} \equiv \sum_j w_j |v_j\rangle\langle v_j|, \quad (w_j \geq 0, \sum_j w_j = 1, \langle v_j | v_j \rangle = 1) \quad (3)$$

物理量の期待値

$$[\hat{A}] = \text{tr}(\hat{\rho}\hat{A}) \quad (4)$$

密度演算子

密度演算子

$$\hat{\rho} \equiv \sum_j w_j |v_j\rangle\langle v_j|, \quad (w_j \geq 0, \sum_j w_j = 1, \langle v_j | v_j \rangle = 1) \quad (3)$$

物理量の期待値

$$[\hat{A}] = \text{tr}(\hat{\rho}\hat{A}) \quad (4)$$

実際、

$$\text{tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \sum_j w_j \text{tr}(|v_j\rangle\langle v_j|\hat{A})$$

である。ここでトレースの性質を使って

$$\text{tr}(|v_j\rangle\langle v_j|\hat{A}) = \langle v_j|\hat{A}|v_j\rangle$$

したがって

$$\text{tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \sum_j w_j \langle v_j|\hat{A}|v_j\rangle \quad (5)$$

となる。

密度演算子の性質

密度演算子の持つ性質を列挙する。

1. 自己エルミート性

$$(\hat{\rho})^\dagger = \hat{\rho} \quad (6)$$

2. 非負性

任意の状態ベクトル $|\phi\rangle$ にたいし

$$\langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle \geq 0 \quad (7)$$

3. 総和性

$$\text{tr}(\hat{\rho}) = 1 \quad (8)$$

逆に以上の性質を持つ演算子は、何らかのアンサンブルを表す密度演算子と考えられる。

密度演算子の直積

$$\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \quad (9)$$

は直積ベクトル空間 $V^{(1)} \otimes V^{(2)}$ での密度演算子である。実際、

$$(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)})^\dagger = \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \quad (10a)$$

$$\text{tr}(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}) = \text{tr}(\hat{\rho}^{(1)})\text{tr}(\hat{\rho}^{(2)}) = 1 \quad (10b)$$

$$\langle \chi | \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} | \chi \rangle = \langle \chi^{(1)} | \hat{\rho}^{(1)} | \chi^{(1)} \rangle \langle \chi^{(2)} | \hat{\rho}^{(2)} | \chi^{(2)} \rangle \geq 0 \quad (10c)$$

さらに多数の密度演算子の直積 $\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \otimes \hat{\rho}^{(3)} \dots$ も同様に定義できる。

エントロピー

von Neumann エントロピー (1932)

$$\sigma(\hat{\rho}) = -[\ln \hat{\rho}] = -\text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \quad (11)$$

エントロピーの性質

1. 非負

$$\sigma(\hat{\rho}) \geq 0 \quad (12)$$

等号 $\sigma(\hat{\rho}) = 0$ が成り立つのは純粋状態 ($\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$) に対して、かつその時のみである。

2. エントロピーには、独立な系に対する加法性が成立。

逆に、以上の性質を満たす密度演算子の関数は、エントロピーの定数倍となる。

合成系エントロピーの加法性

2つの独立な系の密度演算子をそれぞれ $\hat{\rho}^{(1)}, \hat{\rho}^{(2)}$ とすると,

$$\ln(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}) = \ln \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)} + \hat{I}^{(1)} \otimes \ln \hat{\rho}^{(2)} \quad (13)$$

であるので、

$$\begin{aligned} \sigma(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}) &= -\text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \\ &= -\text{tr}((\hat{\rho}^{(1)} \ln \hat{\rho}^{(1)}) \otimes \hat{\rho}^{(2)} + \hat{\rho}^{(1)} \otimes (\hat{\rho}^{(2)} \ln \hat{\rho}^{(2)})) \\ &= -(\text{tr}(\hat{\rho}^{(1)} \ln \hat{\rho}^{(1)}) + \text{tr}(\hat{\rho}^{(2)} \ln \hat{\rho}^{(2)})) \\ &= \sigma(\hat{\rho}^{(1)}) + \sigma(\hat{\rho}^{(2)}) \end{aligned} \quad (14)$$

ここで、 $\text{tr}(\hat{\rho}^{(1)}) = \text{tr}(\hat{\rho}^{(2)}) = 1$ を使った。

合成系エントロピーの加法性 2

逆に、2つの独立な系の合成系について、

$$\sigma(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}) = \sigma(\hat{\rho}^{(1)}) + \sigma(\hat{\rho}^{(2)}) \quad (15)$$

を満たす、密度演算子の関数は、

$$\sigma = -[\ln \hat{\rho}] = -\text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \quad (16)$$

の定数倍しかない

$\therefore x, y > 0$ の実数に対して

$$f(xy) = f(x) + f(y) \quad (17)$$

を満たす連続関数は、対数関数の定数倍

エントロピーのその他の性質

- ▶ エントロピーは，ユニタリー変換で不変
- ▶ エントロピーは concave ，つまり $\lambda_i > 0, \sum_i \lambda_i = 1$ と密度演算子 $\hat{\rho}_i$ の組に対して，

$$\sigma \left(\sum_{i=1}^k \lambda_i \hat{\rho}_i \right) \geq \sum_{i=1}^k \lambda_i \sigma(\hat{\rho}_i) \quad (18)$$

- ▶ 劣加法性 (subadditive) (Araki and Lieb(1970))

$$\sigma(\hat{\rho}_{AB}) \leq \sigma(\hat{\rho}_A) + \sigma(\hat{\rho}_B) \quad (19)$$

(等号は，系 A と B に相関が無い (uncorrelated) とき)

- ▶ 強劣加法性 (Lieb and Ruskai (1973))

$$\sigma(\hat{\rho}_{ABC}) + \sigma(\hat{\rho}_B) \leq \sigma(\hat{\rho}_{AB}) + \sigma(\hat{\rho}_{BC}) \quad (20)$$

平衡状態とエントロピー

ある拘束条件で、エントロピー最大=統計力学の平衡状態
(ラグランジュの未定係数法)

1. 有限個 M の状態以外に制約が無い場合
等確率

$$\rho = 1/M \quad (21)$$

2. 平均エネルギーが一定の条件 (外部の熱浴と接触)

$$[\hat{H}] \equiv \text{tr}(\hat{\rho}\hat{H}) = U \quad (22)$$

→ カノニカルアンサンブル

$$\hat{\rho} = Z^{-1} \exp(-\beta\hat{H}), \quad Z \equiv \text{tr}(\exp(-\beta\hat{H})) \quad (23)$$

3. 平均エネルギーと平均個数が一定の条件
グランドカノニカルアンサンブル

反省点

1. ここでのエントロピーの定義は対角化すると、Gibbs エントロピー (1878) や Shannon エントロピー (1948) と同じ
2. Boltzmann エントロピー (1872)

$$S = k_B \ln W \quad (24)$$

より、Gibbs エントロピーの方が基本的なのでは？

3. アンサンブル (統計集団) の導入も、Gibbs が元 (1878,1902)
4. エントロピーの定義には、密度演算子または確率分布で十分、運動方程式もハミルトニアンも不要 → 物理以外でも使える。
5. Gibbs エントロピーの定義には、平衡 (エントロピー最大) は前提としてないし、加法性の証明でも使っていない。
6. 定常状態で、ハミルトニアンと密度演算子は交換
7. 余談、Gibbs は古典統計力学 (エネルギー等分配則) の限界に気づいていたらしい。固体や気体の比熱の問題。

反省点2

1. 非平衡統計力学の場合を含む、一般の統計分布でもエントロピーは形式的には定義可能
ただし、「エントロピー最大」は要求しない。(平均エネルギー以外の) 何らかの拘束条件で「エントロピー最大」?
統計学ではエントロピー最大原理で、様々な分布が出せる (Gauss (正規) 分布、Cauchy-Lorentz 分布、Student's t-distribution, Pareto 分布、対数正規分布などなど)
2. エントロピーの加法性 \neq 示量性 (extensive)?

反省点3

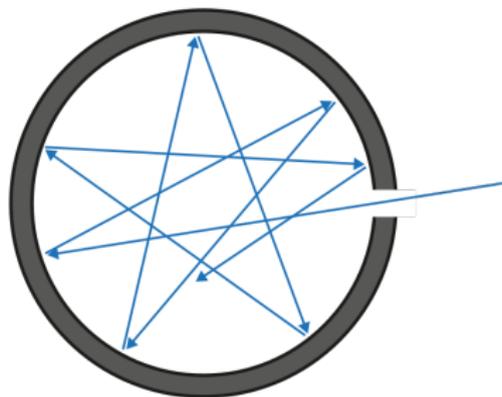
非平衡のエントロピーの例

1. レーザー (非平衡定常状態) のエントロピーは0
レーザーがコヒーレント状態で表されるなら自明
実験事実とも合う。
2. ASEP など厳密解がある場合、統計分布が計算できるので、
自由エネルギーが計算できる。

黒体放射（空洞放射）とプランクの法則

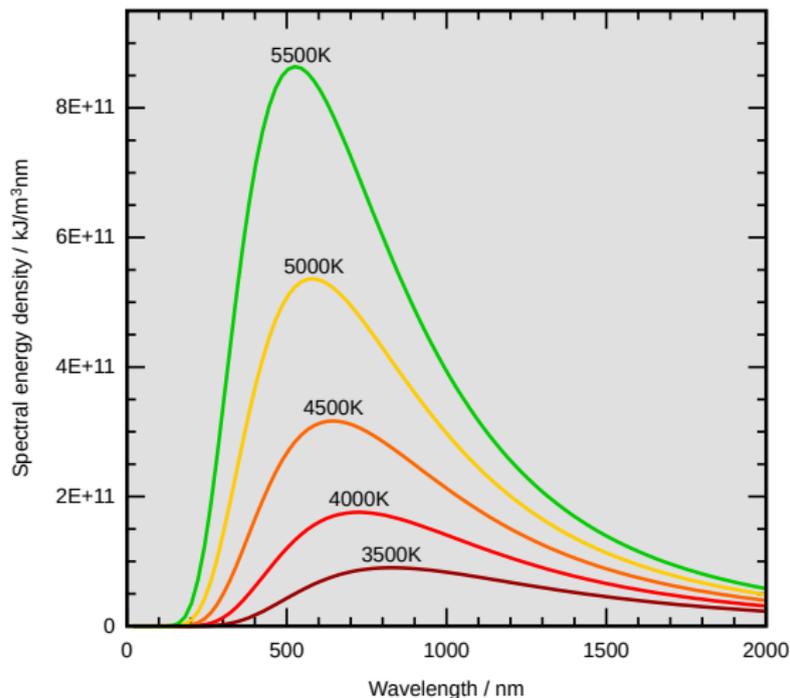
黒体：外部から入射する電磁波を、あらゆる波長にわたって完全に吸収し、また熱放射できる物体

空洞放射：理想的な黒体放射にもっとも近い，工業的にも重要
(Kirchhoff(1859-60) 理論; Lummer and Kurlbaum(1898) 実験)



黒体放射（空洞放射）とプランクの法則

空洞放射のスペクトルは温度のみに依存



黒体放射（空洞放射）とプランクの法則

- ▶ レーリー・ジーンズの公式 (1900,1905)
長波長側では実験と合うが，短波長側でダメ（発散）．
（古典電磁気学 + 統計力学（エネルギー等分配則））
- ▶ ウィーンの法則 (1896)
短波長側では実験と合うが，長波長側でダメ
（電磁気学を無視，光を純粹に粒子として扱っている．）
- ▶ プランクの公式 (1900)
当初は両方をつなげた補間公式，実験結果を極めて良く再現する．

黒体放射（空洞放射）とプランクの公式

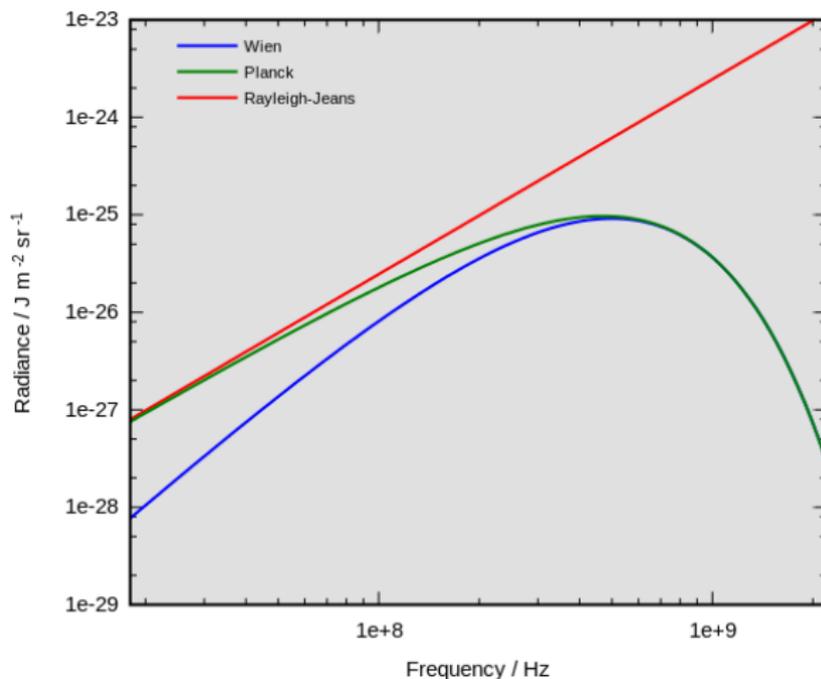


Figure: 各スペクトルの両対数グラフ

<http://en.wikipedia.org/wiki/Planck>

黒体放射（空洞放射）とプランクの公式

- ▶ Rayleigh-Jeans の公式

$$U(\nu)d\nu = \frac{8\pi k_B T}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (25)$$

- ▶ Wien の近似式

$$U(\nu)d\nu = \frac{8\pi k_B \beta}{c^3} \exp(-\beta\nu/T) \nu^3 d\nu \quad (26)$$

- ▶ Planck の公式

$$U(\nu)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{1}{\exp(h\nu/k_B T) - 1} \nu^3 d\nu \quad (27)$$

- ▶ ν : 電磁波の振動数 ,
- ▶ h : プランク定数 ($6.62606957(29) \times 10^{-34} \text{m}^2 \text{kg/s}$)
- ▶ k_B : ボルツマン定数 ($1.3806488(13) \times 10^{-23} \text{m}^2 \text{kg s}^{-2} \text{K}^{-1}$)
- ▶ c : 光速

黒体放射（空洞放射）とプランクの法則

Planck は公式の発見後，その意味を考え（不眠不休の数週間），
光（電磁波）のエネルギーが

$$E = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (28)$$

と量子化されることに気づいた
(Cf. 1 個の調和振動子)

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta nh\nu) = \frac{1}{1 - \exp(-\beta h\nu)} \quad (29)$$

$$\therefore \langle e(\nu) \rangle = \frac{h\nu \exp(-\beta h\nu)}{1 - \exp(-\beta h\nu)} = \frac{h\nu}{\exp(\beta h\nu) - 1} \quad (30)$$

と、状態密度)

黒体放射（空洞放射）とプランクの法則

Planck は公式の発見後，その意味を考え（不眠不休の数週間），光（電磁波）のエネルギーが

$$E = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (28)$$

と量子化されることに気づいた
(Cf. 1 個の調和振動子)

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta nh\nu) = \frac{1}{1 - \exp(-\beta h\nu)} \quad (29)$$

$$\therefore \langle e(\nu) \rangle = \frac{h\nu \exp(-\beta h\nu)}{1 - \exp(-\beta h\nu)} = \frac{h\nu}{\exp(\beta h\nu) - 1} \quad (30)$$

と、状態密度)

量子力学の誕生！

黒体放射（空洞放射）とプランクの法則

Planck は公式の発見後，その意味を考え（不眠不休の数週間），光（電磁波）のエネルギーが

$$E = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (28)$$

と量子化されることに気づいた
(Cf. 1 個の調和振動子)

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta nh\nu) = \frac{1}{1 - \exp(-\beta h\nu)} \quad (29)$$

$$\therefore \langle e(\nu) \rangle = \frac{h\nu \exp(-\beta h\nu)}{1 - \exp(-\beta h\nu)} = \frac{h\nu}{\exp(\beta h\nu) - 1} \quad (30)$$

と、状態密度)

量子力学の誕生！

数年間はその重要性が，物理学者の間でもわからなかった．

黒体放射（空洞放射）とプランクの法則

Planck は公式の発見後，その意味を考え（不眠不休の数週間），光（電磁波）のエネルギーが

$$E = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (28)$$

と量子化されることに気づいた
(Cf. 1 個の調和振動子)

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta nh\nu) = \frac{1}{1 - \exp(-\beta h\nu)} \quad (29)$$

$$\therefore \langle e(\nu) \rangle = \frac{h\nu \exp(-\beta h\nu)}{1 - \exp(-\beta h\nu)} = \frac{h\nu}{\exp(\beta h\nu) - 1} \quad (30)$$

と、状態密度)

量子力学の誕生！

数年間はその重要性が，物理学者の間でもわからなかった．

Einstein の光電効果の論文 (1905)

プランクの公式の背景

- ▶ Planck は Rayleigh-Jeans とは独立かつ先行して、低エネルギー極限の公式を導いていた。
違いは、Planck はエネルギー等分配則を重要視しなかったか、失念していたこと。
- ▶ Planck も試行錯誤 (Wien-Planck の式), 理論と実験の比較
- ▶ Planck 自身は、ヘルツ振動子 (原子に相当?) と光の相互作用でエネルギー量子化が起きると考えていた。
- ▶ 光の量子化 (光子) と解釈し直したのは、Einstein, 光電効果などの他の現象が説明できると指摘
- ▶ 光子の理想ボーズ気体として解釈したのが、Bose

プランクの公式の背景 2

熱力学から統計力学へ

- ▶ Stefan(1879)-Boltzmann(1884) の法則:理論的には電磁気と熱力学から導いた .
- ▶ Wien は電磁気と熱力学的考察からウィーンの変位則 Wien's displacement law(1888-1890) を導いていた .
- ▶ Stefan-Boltzmann の法則と Wien's displacement law の両者から , 空洞放射のスペクトルの関数形に制限がつく . ただし空洞放射のスペクトルは一意的には決まらない .
- ▶ Planck は当初 (1900 年 10 月) , (Boltzmann の) 統計力学に (哲学的にも物理的にも) 不信感を持っていたよう .
11,12 月には統計力学に基づいての議論 (改宗? 転向?) .
- ▶ Planck の公式は統計力学が、熱力学とは独自の意味を持つことを明瞭に示した。
cf. ボルツマン 対 マッハ
また , 量子力学の出発点でもある .

プランクの公式の意義

- ▶ プランクの公式は、光の統計力学と量子力学と相対論の橋渡しをするもの

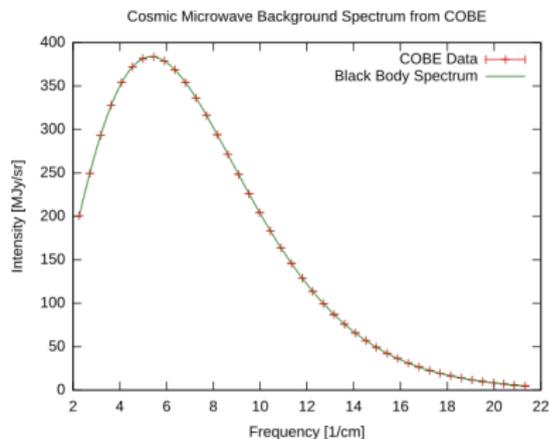


Figure: 宇宙マイクロ波背景放射、COBE のデータとプランクの公式

- ▶ 黒体放射の分光放射輝度は実験的にも精度良く求まる。
cf. 気体の Maxwell 分布を実験的に示すのは大変 (1920-40)。

Bose は光子の統計性を考察し、プランク分布を説明 (1924)。
光子気体

=質量 0 のボース粒子の系, 全粒子数が不定

=化学ポテンシャル $\mu = 0$

余談、

- ▶ Bose は Boltzmann 統計にあまり馴染んでなかった (本人が Einstein に言った)。なので、古典統計力学とは別のやり方で計算していたことに気づいてなかった。
- ▶ Bose は英語でも論文書いている、アインシュタインに送る前に、イギリスの雑誌 Philosophical Magazine に投稿したが、投稿拒否された (理由は不明)。
投稿拒否されても、登校拒否するな！

Bose-Einstein

さらに Einstein は、有限質量の単原子理想気体の系に Bose の統計性を拡張 (1925)

$$\Xi = \prod_i \frac{1}{1 - \exp(-\beta(\epsilon_i - \mu))}, \quad (\mu \leq 0) \quad (31)$$

これからボーズ-アインシュタイン凝縮 (BEC) が予言された。

Bose-Einstein

さらに Einstein は、有限質量の単原子理想気体の系に Bose の統計性を拡張 (1925)

$$\Xi = \prod_i \frac{1}{1 - \exp(-\beta(\epsilon_i - \mu))}, \quad (\mu \leq 0) \quad (31)$$

これからボーズ-アインシュタイン凝縮 (BEC) が予言された。

余談,

ある種の非平衡現象, (インターネットや生物進化や社会などの) ネットワーク理論に BEC

自然放射，誘導放射

アインシュタイン (1916,7) 「放射の量子論」 “Zur Quantentheorie der Strahlung”

原子が不連続なスペクトル (エネルギー準位)

基底状態 (最低エネルギー) と励起状態

- ▶ 光を吸収，基底状態 \rightarrow 励起状態
- ▶ 逆に 励起状態 \rightarrow 基底状態
 - ▶ 自然放射
 - ▶ 誘導放射

入射した光子の刺激で励起状態 \rightarrow 基底状態 .

初め 1 個あった光子が 2 個 (同じエネルギー，運動量)

自然放射，誘導放射

アインシュタイン (1916,7) 「放射の量子論」 “Zur Quantentheorie der Strahlung”

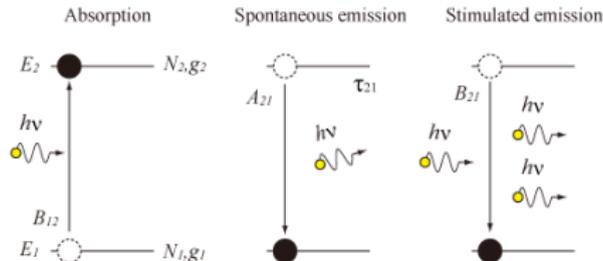
原子が不連続なスペクトル (エネルギー準位)

基底状態 (最低エネルギー) と励起状態

- ▶ 光を吸収，基底状態 \rightarrow 励起状態
- ▶ 逆に 励起状態 \rightarrow 基底状態
 - ▶ 自然放射
 - ▶ 誘導放射

入射した光子の刺激で励起状態 \rightarrow 基底状態 .

初め 1 個あった光子が 2 個 (同じエネルギー，運動量)



自然放射，誘導放射

プランクの公式と辻褃を合わせるには，吸収と自然放射だけでなく誘導放射が必要（アインシュタインの B 係数、1917 年）。

自然放射，誘導放射

プランクの公式と辻褃を合わせるには，吸収と自然放射だけでなく誘導放射が必要（アインシュタインの B 係数、1917 年）．
簡単のため、2 準位の原子を考える。

- ▶ E_0 : 原子の基底状態エネルギー
- ▶ E_1 : 原子の励起状態エネルギー
- ▶ N_0 : 基底状態の原子の個数
- ▶ N_1 : 励起状態の原子の個数
- ▶ 2 準位の遷移に伴い，吸収・放出される電磁場のエネルギー

$$h\nu = E_1 - E_0 \quad (\nu: \text{電磁場の振動数}) \quad (32)$$

自然放射，誘導放射 2

- ▶ 単位時間に原子が電磁場を吸収して励起状態に遷移する数:

$$P_{0 \rightarrow 1} = N_0 B_{01} U(\nu) \quad (33)$$

(B_{01} : 吸収遷移の係数)

- ▶ 単位時間に励起状態の原子が基底状態に遷移する数:

$$P_{1 \rightarrow 0} = N_1 A_{10} + N_1 B_{10} U(\nu). \quad (34)$$

(A_{10} : 自発遷移の係数, B_{10} : 誘導遷移の係数)



$$\frac{dN_0}{dt} = -N_0 B_{01} U(\nu) + N_1 A_{10} + N_1 B_{10} U(\nu). \quad (35)$$

- ▶ 定常状態では、

$$-N_0 B_{01} U(\nu) + N_1 A_{10} + N_1 B_{10} U(\nu) = 0 \quad (36)$$

したがって

$$U(\nu) = \frac{N_1 A_{10}}{N_0 B_{01} - N_1 B_{10}} = \frac{A_{10}}{(N_0/N_1) B_{01} - B_{10}} \quad (37)$$

自然放射，誘導放射 3

さらに熱平衡では

$$\frac{N_1}{N_0} = \exp(-(E_1 - E_0)/k_B T) \quad (38)$$

したがって

$$\begin{aligned} U(\nu) &= \frac{A_{10}}{B_{01} \exp(h\nu/(k_B T)) - B_{10}} \\ &= \frac{A_{10}/B_{01}}{\exp(h\nu/(k_B T)) - B_{10}/B_{01}} \end{aligned} \quad (39)$$

係数を

$$\frac{A_{10}}{B_{01}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}, \quad \frac{B_{10}}{B_{01}} = 1 \quad (40)$$

とすると，Planck の式に帰着

自然放射，誘導放射

- ▶ 1917 年
誘導放射（アインシュタインの B 係数）。

自然放射，誘導放射

- ▶ 1917 年
誘導放射（アインシュタインの B 係数）。
- ▶ 量子力学で誘導放射説明可能
- ▶ 1928 年
Rudolf W. Ladenburg は誘導放出および負の吸収という現象が存在することを確認した。

自然放射，誘導放射

- ▶ 1917 年
誘導放射（アインシュタインの B 係数）。
- ▶ 量子力学で誘導放射説明可能
- ▶ 1928 年
Rudolf W. Ladenburg は誘導放出および負の吸収という現象が存在することを確認した。
- ▶ 1939 年
Valentin A. Fabrikant は誘導放出を使って、波動を増幅できる可能性を予言した

自然放射，誘導放射

- ▶ 1917 年
誘導放射（アインシュタインの B 係数）。
- ▶ 量子力学で誘導放射説明可能
- ▶ 1928 年
Rudolf W. Ladenburg は誘導放出および負の吸収という現象が存在することを確認した。
- ▶ 1939 年
Valentin A. Fabrikant は誘導放出を使って、波動を増幅できる可能性を予言した
- ▶ 1947 年
ウィリス・ラムと R. C. Retherford は水素スペクトルに明らかな誘導放出を発見し、誘導放出について世界初のデモンストラレーション

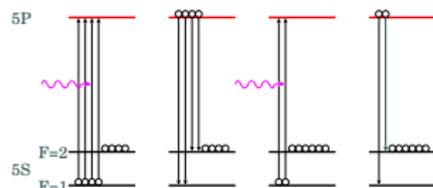
自然放射，誘導放射

- ▶ 1917 年
誘導放射（アインシュタインの B 係数）。
- ▶ 量子力学で誘導放射説明可能
- ▶ 1928 年
Rudolf W. Ladenburg は誘導放出および負の吸収という現象が存在することを確認した。
- ▶ 1939 年
Valentin A. Fabrikant は誘導放出を使って、波動を増幅できる可能性を予言した
- ▶ 1947 年
ウィリス・ラムと R. C. Retherford は水素スペクトルに明らかな誘導放出を発見し、誘導放出について世界初のデモンストラーション
- ▶ 1950 年
アルフレッド・カストレル（1966 年ノーベル物理学賞受賞）は光ポンピング法を提案し、数年後に Brossel、Winter と共に実験で確認

誘導放射とレーザー

反転分布 (励起状態の方が数が多い) → 誘導放射の連鎖反応, 増幅 → レーザー

▶ 光ポンピング



ルビーレーザー, YAG レーザー

▶ 半導体レーザー

半導体の pn 接合領域の両端から電子と正孔を加え、再結合で光子放出

▶ 放電による励起

炭酸ガスレーザー, ヘリウムネオンレーザー

可積分系

可積分系：保存量が無限個

1. 古典可積分系 (ソリトンと逆散乱法)
 - ▶ 連続空間
KdV 方程式, サイン・ゴールドン方程式,
 - ▶ 格子上、(相互作用が短距離) 戸田格子
2. 量子可積分系 (Bethe 仮説、Yang Baxter)
 - ▶ 格子上、(相互作用が短距離)
 $S=1/2$ XXZ スピン鎖、電子のハバードモデル,
 - ▶ 連続空間
Lieb-Liniger Model(斥力ボソン)
 - ▶ (格子上、相互作用が長距離)
Calogero-Sutherland model
3. 平衡統計力学
2次元イジングモデル、6-vertex モデル, 8-vertex モデル
SOS モデル
4. 非平衡統計力学
 - ▶ 格子 ASEP(1次元非対称単純排他過程)
 - ▶ 連続空間 KPZ

可積分系と統計力学

- ▶ 古典可積分系 (ソリトン解、戸田格子など) や、量子可積分系 (ハイゼンベルクモデル、ハバードモデルなど)
温度0 から始まっているが、有限温度の統計力学への発展も。
カノニカルアンサンブルとボルツマン重率
- ▶ 平衡統計力学
カノニカルアンサンブルとボルツマン重率から出発
 - ▶ 2D イジング、6-vertex, SOS, etc.
 - ▶ 量子可積分系 (ベータ仮説) でも、有限温度の状態を計算可能
- ▶ 非平衡統計力学
ASEP など

可積分系と統計力学 2

2次元イジングモデルで磁場 0 の厳密解

$$H = -J \sum_i (\sigma_{i,j}^z \sigma_{i+1,j}^z + \sigma_{i,j}^z \sigma_{i,j+1}^z) \quad (41)$$

2次元イジングモデル (カノニカルアンサンブル) の転送行列

→

非等方極限で 1次元量子スピン系 ($T = 0$) Transverse Ising

$$H = -J \sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h \sum_i \sigma_i^x \quad (42)$$

→

Jordan-Wigner 変換 (非局所変換) で 1次元 Fermion 系に

→

Bogoliubov 変換 (粒子数非保存) で Fermion 対角化

可積分系と統計力学 3

可積分系の統計力学は、孤立系 (エネルギーや粒子数が厳密に保存) では定義可能か?

ミクロカノニカルアンサンブルと、可積分系は相性が悪い?

可積分系 = 無限個の保存量

孤立系のダイナミクスは意味あるが、統計力学には乗らない。

実験 : (レーザー冷却した) 冷却原子系

非可積分系と統計力学

- ▶ 可積分系と非可積分系を区別する簡便な手順は?
- ▶ 見掛け上は非可積分系だが、実は可積分という例はいくつもある
キタエフ模型などなど
- ▶ 非可積分系でも、保存量の個数が十分多い(系のサイズ程度)と、熱平衡状態に緩和しないらしい。

孤立系 (ミクロカノニカルアンサンブル)

1. 可積分系で、孤立状態のダイナミクスは意味がある。
しかし統計力学はそもそも意味があるのか？
2. 孤立系と、(定常) 非平衡統計力学は両立するか？
3. 等確率の原理 (principle of equal a priori probabilities) や、エルゴード理論 (ergodic theory) は、実は作業仮説ではないか？
4. (平衡系の) 統計力学で、実験と理論がもっとも良く一致しているのは、空洞放射についてのプランクの公式
But ミクロカノニカルアンサンブルでの定式化は不自然
5. ミクロカノニカルアンサンブルが統計力学の原点とする立場からは、可積分系は統計力学の対象にすべきでないという主張 → 自由粒子系、特に空洞放射まで統計力学から排除！？

平衡系の統計力学は、カノニカルアンサンブルやグランドカノニカルアンサンブルから出発したほうが、自然なのでは？

孤立系:実験と理論

- ▶ 孤立系 (ミクロカノニカルアンサンブル) は実験的には困難
→ 外部とのエネルギーのやりとりなしに測定をどうする？
- ▶ レーザー冷却した原子系:孤立量子系に非常に近い(だろう).
- ▶ 実験に刺激されて、理論も進展
- ▶ 孤立可積分系では、カノニカル分布に緩和しない.

孤立系:実験と理論 2

そもそも、ミクロカノニカルアンサンブルに充分近いとは?
外部とのエネルギーのやりとりが十分小さい OR 遅ければ良い?
エネルギー輸送率の見積りは?

示量性

示量性 (Extensive)

- ▶ 系全体の量が部分系の量の和に等しくなること
- ▶ 系の大きさ、体積、質量に比例すること

示量性

示量性 (Extensive)

- ▶ 系全体の量が部分系の量の和に等しくなること
- ▶ 系の大きさ、体積、質量に比例すること
- ▶ 示量変数の例
 1. 体積 - 圧力と共役
 2. エントロピー - 温度と共役
 3. 物質量 - 化学ポテンシャルと共役
 4. 質量
 5. 内部エネルギー
- ▶ 示強変数の例
 1. 圧力 - 体積と共役
 2. 温度 - エントロピーと共役
 3. 化学ポテンシャル - 物質量と共役

示量性と局所性

統計力学では示量性は重要な概念といわれるが、本当だろうか？

示量性と局所性

統計力学では示量性は重要な概念といわれるが、本当だろうか？

1. 相互作用が長距離 (重力など) では示量性は成り立たない。
2. 相互作用が短距離でも、相関距離が発散する場合の示量性とは？
(平衡統計力学の) 臨界現象、非平衡系でのいくつかの現象
3. 量子絡み合い (quantum entanglement) での示量性とは？
(非局所)
EPR(Einstein-Podlasky-Rosen) 相関

示量性、示強性, アンサンブル

示量性や示強性

ミクロカノニカルアンサンブルの分布

≈ カノニカルアンサンブルの分布

≈ グランドカノニカルアンサンブルの分布

示量性、示強性, アンサンブル

示量性や示強性

ミクロカノニカルアンサンブルの分布

≈ カノニカルアンサンブルの分布

≈ グランドカノニカルアンサンブルの分布

少数多体系では、以上のことは成り立たない。

正規分布、その他の分布

示量性、示強性

≈ 局所性

≈ ガウス分布 (← 大数の法則)

これ以外の可能性は、原理的には否定できないのでは?

- ▶ コーシー分布 = ローレンツ分布 = プライトウイグナー分布
コーシー・ローレンツ分布では分散が発散する等、奇妙な点があるけど、エントロピーは計算可能
- ▶ レヴィ分布

まとめ

1. ここで私が言っていることは、多分新しいことではない。
 - 1.1 Jaynes
 - 1.2 田崎 晴明
2. 示量性や、ミクロカノニカルアンサンブルなどに、問題？
3. 教育上は、Gibbs エントロピー、(グランド) カノニカルアンサンブルや量子統計から始めることがよいかも？
4. Planck の公式の重要性 (理論的にも実験的にも)
 - ▶ 量子力学と統計力学と電磁気学 (相対論) の結節点
 - ▶ エネルギー密度の波長分布 (熱力学を越え、統計力学へ)
 - ▶ Bose-Einstein 統計の出発点
 - ▶ 誘導放射と Master 方程式
5. 統計力学と、統計学の関係
6. 非平衡定常系では、エントロピーは non-extensive (が示せる)?

まとめ2

- ▶ エントロピー最大原理と、等確率の原理
 - ▶ エントロピー最大原理 \rightarrow 等確率の原理
 - ▶ エントロピー最大原理 \leftarrow 等確率の原理?
後者は相対エントロピー (Kullback = Leibler divergence) を使
うと関連付けられるらしい。
- ▶ 「熱力学第2法則」と、「量子力学の観測の理論」の関連
- ▶ ▶ 定常系でエントロピーの示量性 \rightarrow カノニカルアンサンブル
- ▶ ▶ 定常系でエントロピーの示量性 \leftarrow カノニカルアンサンブル??

まとめ3

どんでん返し

- ▶ Boltzmann 自身は、Boltzmann エントロピーの論文 (1872) の後、Gibbs エントロピーと同等な表現にたどり着いた (1896,1902) し、また Gibbs エントロピーの形式の方がより一般的であることに気づいた。
- ▶ Microcanonical ensemble では温度は定義できない。「温度もどき」(analogy with temperature) は一応定義できるが曖昧さがある。少数系では Canonical ensemble と食い違うなど、いくつか問題がある

Gibbs はこれらに関する問題点 (Nontrivial result of combining two systems, Strange behaviour for few-particle systems) を指摘していた。

Chapter XIV, Discussion of the thermodynamic analogies in "Elementary principles in statistical mechanics" by J. W. Gibbs (1902)

- ▶ Gibbs は Non-extensive な系にも当てはまるよう理論を構築。

まとめ 4

- ▶ Boltzmann は、(理想) 気体の分子運動論から出発して抽象化、Gibbs は解析力学と確率論
- ▶ Gibbs の統計力学の定式化は、量子力学でも相互作用が強い場合でもほとんどそのまま通用するものだったが、あまりに先進的すぎたのか、Ehrenfest のレビュー (1912) で叩かれた。具体的にはエントロピー増大 (H 定理) を Gibbs の方法では十分説明できない (しかし H 定理も十分な証明ではない)
- ▶ Ehrenfest の批判は、その後の統計力学の教育を歪めたい。Boltzmann と Gibbs の継ぎ接ぎ。
- ▶ Planck が、当初は統計力学に懐疑的だったとは驚き。(彼は Boltzmann のエントロピーの公式を現在の形に書き下した)

釈迦に説法

釈迦に説法

知ある無知 (docta ignorantia)

釈迦に説法

知ある無知 (docta ignorantia)

The whole is simpler than its parts.