

## 有限温度における熱的な量子純粋状態

杉浦 祥

東京大学総合文化研究科

統計力学では通常、エネルギーや磁場といった数個のマクロ物理量で指定されたアンサンブルを用いて、全磁化や相関関数といったその他のマクロ物理量を計算する。ところが近年になって、アンサンブルを用いずとも、エネルギーや磁場といったマクロ物理量で指定された量子純粋状態は、その殆ど全てが熱平衡状態を正しく与える事が明らかとなった。この事実は、「たった一つの典型的な量子純粋状態を用意することができれば、全ての熱平衡値をそれだけで計算できる」事を強く示唆する。我々は、従来の研究が抱えていた問題点を解決し、アンサンブルを用いない、たった一つの純粋状態による統計力学の定式化とその構成法を完成させた。

2006年、杉田により以下の事実が示された [1]。ミクロカノニカルアンサンブルのエネルギー殻  $[E - \Delta/2, E + \Delta/2)$  と対応するヒルベルト部分空間  $\mathcal{E}_{E,N}$  を指定し、そこに含まれる状態から一様な測度で取り出してきた状態

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu} c_{\nu} |\nu\rangle \quad (1)$$

( $\{|\nu\rangle\}_{\nu}$  は  $\mathcal{E}_{E,N}$  内の任意の基底、 $\{c_{\nu}\}_{\nu}$  は  $\dim(\mathcal{E}_{E,N})$ -次元複素球  $\sum_{\nu} |c_{\nu}|^2 = 1$  から一様分布で用意したランダムな複素数の組) を用意する。すると、磁化や相関関数といった全てのマクロな力学量に対して、 $|\psi\rangle$  の期待値が対応するミクロカノニカルアンサンブル平均と殆ど常に非常によく精度で一致する値を与える。

しかし、温度やエントロピーといった純熱力学的量は本質的に状態数を必要とするため、純粋状態の期待値として計算する事はできない。そのため、統計力学で興味ある量全てが一つ純粋状態と与えられると主張するにはまだ不十分である。また、 $|\psi\rangle$  を実際に構成するには、エネルギー殻内の基底を用意する必要があり、それはアンサンブル平均を計算するのと同程度に困難である。そこで我々は、たった一つの状態で全てのマクロな力学量を正しく与えるような純粋状態を、従来より広いクラスに拡張し、一般に Thermal pure quantum states (TPQ) と名付け、定義した。そして、そのうちあるクラスの TPQ を効率的に構成する方法も合わせて開発する事で、これらの問題を解決した [2]。

本アブストラクトではその手法のみを述べる。まず、全ヒルベルト空間のランダムベクトル  $|\psi_0\rangle \equiv \sum_i c_i |i\rangle$  を用意する。ここで、基底  $\{|i\rangle\}_i$  は  $\{|\nu\rangle\}_{\nu}$  と違い、全ヒルベルト空間の任意の基底である。そして以下の計算を  $k = 0, 1, \dots$  に対して反復的に行う。

$$u_k \equiv \langle \psi_k | \hat{h} | \psi_k \rangle, \quad (2)$$

$$|\psi_{k+1}\rangle \equiv (l - \hat{h}) |\psi_k\rangle / \|(l - \hat{h}) |\psi_k\rangle\| \quad (3)$$

( $\hat{h} \equiv \hat{H}/N$ ,  $l$  は任意の定数) すると、各状態  $|\psi_k\rangle$  は、1粒子あたりのエネルギーが  $u_k$  での TPQ となっていることが示される。つまり、任意のマクロな力学量の熱平衡値は、 $|\psi_k\rangle$  の期待値として求められる。

次に、純熱力学量について述べる。一般に、エネルギー  $E$  の状態  $|\psi_k\rangle$  から対応する逆温度  $\beta(u, N)$  を求めることは困難である。しかし、構成の際に用いたパラメーター  $l$  と  $k$  を用いることで、温度は以下の式より求められる。

$$\beta(u_k; N) = \frac{2k}{N(l - u_k)} + O\left(\frac{1}{N}\right). \quad (4)$$

また、構成の際に用いたパラメーター  $l$  と  $k$  を用いずとも、純熱力学量は計算可能である。杉田の提案した状態  $|\psi\rangle$  に戻って考える。独立なランダムに用意した2個の状態  $|\psi^1\rangle, |\psi^2\rangle \in \mathcal{E}_{E,N}$  の内積と、 $\dim(\mathcal{E}_{E,N})$  は以下の関係で結ばれる。

$$\overline{\langle \psi_k^1 | \psi_k^1 \rangle} = 1 / \sqrt{\dim(\mathcal{E}_{E,N})} \quad (5)$$

( $\overline{(\dots)}$  はランダム平均) この関係式を我々の提案した状態  $|\psi_k\rangle$  に応用することで、数個の状態間の内積から、状態数を推定問題として求める事が可能であり、これよりエントロピーを経由して全ての純熱力学量を求めることもできる。

T P Qを用いた計算法の特筆すべき点は、T P Qの期待値によりマクロな力学量を計算すると、期待値はアンサンブル平均の周りに  $O(\exp[-N])$  ( $N$ : 粒子数・サイト数) 程度の非常に小さな分散で分布する事が保証されている事である。また、開発した構成法は、ハミルトニアンが多項式を乗算するだけの単純な手法であるため、解析的にも数値的にも計算可能であるのみならず、離散量子系として記述できる系であれば他に制限は一切なく、どのような系でも適用可能である。例えば数値計算に応用した場合、Quantum Monte Carlo法でボトルネックとなっている negative sign problem は生じず、DMRGのように高次元系で急速に計算精度が落ちるといった問題もないため、2次元フラストレーション系やフェルミオン系に応用可能な手法となっている。また、たった一つの純粋状態を構成するだけで非常に精度のよい計算ができるため、計算量は厳密対角化に比べて二分の一乗から三分の一乗になる。

さらに、開発した手法は純粋状態1つを計算しているだけにも関わらず、実質的にハミルトニアンによって状態のエネルギー分布を直接操作し、その分布を把握する事ができる手法となっている。そのため高次の相関を計算することで、力学量・純熱力学量に関わらず、それらを  $1/N$  展開した高次の項を得る事ができる。つまり、有限の  $N$  であっても、高次項まで取り込んだ計算をすることで非常によい精度で計算が可能である。また、これを応用することである種の  $N$  への外挿すら可能である。つまり、 $N$  サイト系を無限個並べた、ある種の無限系での計算を、 $1/N$  展開の各項から逆算する事で、実質的に行うことができる。実際、温度の計算ではこの無限系への外挿により  $N$  サイト系1個での計算より精度が著しく向上することを確認している。

本講演では、これらの手法とその原理について述べ、数値計算による結果がよい精度で厳密解と一致することを示す。

[1] A. Sugita, RIMS Kokyuroku (Kyoto) 1507, 147 (2006)

[2] S. Sugiura, A. Shimizu, arXiv:1112.0740v1