

量子統計と双対性：圧力・エネルギー不等式を中心にして — 変換・拡張による純正則化 —

東理大理 鈴木増雄

今回、参加者の専門分野が数学、情報、物理、教育と大変広領域になっており、また、話したいことも多々あるので、表題を拡張して、次の3つのトピックスについてキーポイントを講演することにした。

§ 1. はじめに

昨年12月9日(土)に、岡山の林原フォーラム2006、一般講演会で、筆者は次のタイトルの講演を行った：

「準結晶、ペンローズ格子と広中の特異点解消定理」

一口でこの話の要点を述べると、それは次のキャッチコピーで表される：

「変換・拡張による純正則化 (just regularization)」

現実の対象や現象が特異なものであってもそれを生み出すものになる対象や現象は対称性の良い規則的なものであることが多い。そのからくりがわかると、この本質がわかることになる。そのような元になるものを探る一般的戦略をここでは、

「理論科学の正則化原理 (Regularization Principle of Constructing Theoretical Sciences)」

と呼ぶことにする。その具体的な方法は、個々の対象や現象に応じて工夫しなければならない。しかし、それらに共通した戦略は、上にキャッチコピーとして述べた「変換・拡張」という概念である。これらの関係を体系的に論じるのは別の機会に譲ることにして、ここでは、典型的な例を挙げて、上の原理の要点を説明したい。

a) 準結晶 (特にペンローズ格子) の正則化

周期性のない、一見不規則に見える (しかし、回転対称性や反転対称性を持っている) 準結晶は、ペンローズによると、より高次元の結晶 (規則格子) を射影して出来る格子である。もっとも簡単な1次元フィボナッチ格子 (格子間隔がフィボナッチ数を用いて表される格子) は2次元正方格子を適当に斜めに射影して生成される。

b) 広中の特異点解消定理

数学的証明を直に学ばずに、広中先生の講演などを通して通俗的に理解した範囲でも、その証明の一般性と奥深さに魅了される。広中先生の譬え話によると、3次元のジェットコースターは交叉することがない滑らかな曲線であるが、それを水平面に射影すると特異点のある曲線になる。逆に、特異点は次元を拡張することによって解消される。これを一般の場合に数学的に具体化するには多大の困難があったと聞いているが、その方法論の哲学的な戦略は他の分野でも利用可能である。また、すでに、いろいろな分野で互に独立に今までそれはしばしば使われてきた。こういう人間の思考形式・考え方は一般的であり、普遍的である。そこに文化としての数学の力強さと魅力があるのではなかろうか。

c) フェルマーの定理の証明と谷山・ヴェーユの予想

数学の分野で250年来の難問であった「フェルマーの定理」が最近ワイルズによって解決されたが、その糸口になったのは、数十年も前の日本の若き数学者谷山の予想

(整数論の難問と解析学の難問との関係・等価性の発見)である。

d) 量子モンテカルロ法とST変換

筆者自身の研究の大半もこの線上にあると言ってもよい。すなわち、筆者の博士論文(1966年3月)の中で提唱した“ペア積近似”(pair product approximation)は、筆者のその後の指数積公式の一連の研究の始まりである(トロッターの公式は当時知らなかった)。数学ではトロッター公式は演算子関数の収束性の証明などに使われていたが、筆者が物理、特に統計力学の分野で利用した方法は、より実用的なものであった。 d 次元の量子系を、拡張されたトロッター公式を用いて、完全直交系を途中に挿入することにより、 $(d+1)$ 次元古典系に変換(ST変換)し、その変換された古典系を研究するというアイデアである¹⁾。「有限温度の量子モンテカルロ法」の一般論は、このアイデアに基づいて、1976年筆者によって提案された。難しい問題を変換しても、やさしい問題になるわけではないが、見方が変わり、扱いが可能になることが多い(逆に、 d 次元古典系を $d-1$ 次元量子系に変換する(転送行列法を用いる)ことにより厳密解が求まることもある¹⁾。オンサーガーの解いた2次元イジング模型はその良い例である¹⁾。

この他にも、臨界現象のくり込み群の理論における「次元正則化」(ト・フート等)、素粒子の超弦理論における高次元化、可逆な力学系のマクロな変数空間への射影として不可逆過程を捉えること、カオス生成の元になる解析的マップの考案なども上の一般的な戦略の例としてみなすことが出来る。

その他、例をあげるときりがないので、この変換・拡張というアイデアの重要性を強調してこの節を終わることにする。

§ 2. 理想気体に対する圧力・エネルギー不等式について

これが講演表題のトピックスである。理想気体でも、量子効果(フェルミ統計、ボース統計)により、いろいろと面白い性質(例えば、ボース-アインシュタイン凝縮, BEC)が現れる。長い間、ビリアル展開の2次までの計算結果から、同一温度で同一粒子数密度の理想フェルミ系、ボース系、古典系の圧力、エネルギーをそれぞれ p_F , p_B , p_{cl} および E_F , E_B , E_{cl} とすると、これらの間には、

$$p_F > p_{cl} > p_B \quad , \quad E_F > E_{cl} > E_B \quad (2.1)$$

という不等式の成立することが知られていた(BECが起こる低温では、益々、 p_B や E_B は小さくなる)。筆者は、十数年前、東大で統計力学を講義しているときに、これらの不等式が、任意の粒子数密度に対しても(すなわち、無限次までのビリアル展開に対して)(2.1)中の圧力不等式が一般的な条件で(エネルギーが離散的な場合も含めた条件で)証明できることに気づいた^{1,2)}。その証明のキーポイントは、各系の粒子数密度が同じであるという条件を用いて、異なる統計にしたがう系の状態和を一つの系のパラメータ(化学ポテンシャル、フガシティ)で表現し変換することである¹⁾。また、(2.1)のエネルギー不等式は、条件を強くして理想気体のエネルギースペクトルが $\epsilon_p = ap^k$ ($a > 0$, $k > 0$)という条件の下に導かれるベルヌーイの式 $pV = (k/d)E$ から示される³⁾。ただし、 p , V , E , d は圧力、体積、エネルギー、系の次元を表す。すなわち、 $p \propto E$ より、上の強い条件の下では2つの不等式は等価である。

さて、この講演では、上の強い条件をはずして全く一般的なエネルギー分布 $\{\epsilon_j\}$ で、しかも有限個の粒子系に対しても、同様のエネルギー不等式が、カノニカル集団

の方法を用いて導かれることを論じた。理想系の粒子数 N を指定したカノニカル集団の状態和は、フェルミ統計、ボース統計、古典統計に対して

$$\begin{aligned} Z_F(N) &= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{1}{\lambda^{N+1}} \prod_j (1 + \lambda e_j) d\lambda, \\ Z_B(N) &= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{1}{\lambda^{N+1}} \prod_j (1 - \lambda e_j)^{-1} d\lambda, \\ Z_{cl}(N) &= \left(\sum_j e_j \right)^N ; \quad e_j = \exp(-\beta \varepsilon_j) \end{aligned} \quad (2.2)$$

と表される。これらの式から、頭々に、

$$\begin{aligned} Z_F(N) &= \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_N} e_{i_1} e_{i_2} \dots e_{i_N}, \\ Z_B(N) &= \sum_{i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_N} e_{i_1} e_{i_2} \dots e_{i_N}, \\ Z_{cl}(N) &= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} e_{i_1} e_{i_2} \dots e_{i_N}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

と求められる。これらの表式より、

$$Z_{cl}(N) = Z_F(N) + Z_B(N) + Z_{FB}(N) \quad (2.4)$$

のように書けることがわかる。ただし、 $Z_{FB}(N)$ は、 $Z_F(N)$ と $Z_B(N)$ の中間の性質を持った“部分状態和”であり、

$$Z_{FB}(2) = 0, \quad Z_{FB}(N) > 0 \quad (N \geq 3) \quad (2.5)$$

を充たす。さらに、

$$Z_B(N) = Z_F(N) + Z_D(N), \quad Z_{BF}(N) = (N! - 2)Z_F(N) + Z_{BF,D}(N) \quad (2.6)$$

とも書ける。ただし、 $Z_D(N)$, $Z_{BF,D}(N)$ は縮退効果を表す正の量である ($Z_D(N) > 0$, $Z_{BF,D}(N) > 0$)。しかも、低温になる程、また N が大きくなる程、 $Z_D(N)$ の寄与が急激に大きくなり、BEC が起こる。 $Z'_{F,B,FB} = -\partial Z_{F,B,FB} / \partial \beta$ とおくと、

$$E_{cl} = \frac{Z'_F(N) + Z'_B(N) + Z'_{FB}(N)}{Z_F(N) + Z_B(N) + Z_{FB}(N)} \quad (2.7)$$

となる。ここで、次の定理が適用できる： $a_i > 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$) とし、 $\frac{b_1}{a_1}, \frac{b_2}{a_2}, \dots, \frac{b_n}{a_n}$ の最小を R_{\min} 、最大を R_{\max} とすると、次の不等式

$$R_{\min} \leq \frac{b_1 + b_2 + \dots + b_n}{a_1 + a_2 + \dots + a_n} \leq R_{\max} \quad (2.8)$$

が成立する。これらの式をいろいろと組み合わせて、 $E_F > E_{cl} > E_B$ が示される。

さらに、上ですでにふれた通り、 $N=2$ のときは、 $Z_{cl}(2) = Z_F(2) + Z_B(2)$ という相対関係が導かれる。 $N \geq 3$ では、(2.4) という拡張された相対関係が成り立つ。

以上の議論では、圧力、全系のエネルギーなどの巨視的な性質に着目して、フェルミ統計とボース統計の間の相対性を問題にした。ここで最後に、そもそもフェルミ統計およびボース統計に従う素粒子の本質的な物理的屬性は何かという問題を簡潔に論じてみたい。勿論、教科書にあるように、スピンと統計、波動関数の対称性(対称・反対称)などは、これら2つの統計の特性を規定する基本であることは言うまでもない。ここで強調したいのは、もっと直感的な属性のことである。量子論的にフェルミ統計に従う素粒子は、もともと古典的な描像としては「粒子」と考えられる。陽子、中性子、電子などはその良い例である。一方、量子論的にボース統計に従う素粒子は、古典的な描像としては「エネルギー」すなわち「力」を表すものと考えられる。光子(電磁波)、重力子、中間子(核力)などはその良い例であろう^{4,5)}(複合粒子としての原子の統計性については、これらの議論の対象外である)。

§ 3. Schrödinger Equation of Composite Particles Interacting with Electromagnetic Fields⁶⁾

2つの粒子系に対しては、相対座標と重心座標に分けると便利であることはよく知られている。これを任意の ν 個の粒子に拡張する場合には、非可換な演算子に対する次の2種類の公式に気づくとよい⁶⁾。

$$\sum_{j=1}^{\nu} (\mathbf{p}_j - e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{\nu} (\mathbf{P} - \nu e\mathbf{A})^2 + \sum_{j=1}^{\nu} \left(\frac{1}{\nu} \mathbf{P} - \mathbf{p}_j \right)^2 \quad (3.1)$$

および、

$$\sum_{j=1}^{\nu} (\mathbf{p}_j - e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{\nu} (\mathbf{P} - \nu e\mathbf{A})^2 + \frac{1}{\nu} \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j)^2 \quad (3.2)$$

ただし、 \mathbf{p}_j は粒子 j の運動量演算子、 \mathbf{A} は電磁場を表すベクトル演算子、および

$$\mathbf{P} = \sum_{j=1}^{\nu} \mathbf{p}_j \quad (\text{全運動量演算子}). \quad (3.3)$$

さらに、相互作用 $V = \sum_{\langle ij \rangle} U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ のある系のハミルトニアン \mathcal{H}

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^{\nu} \mathbf{p}_j^2 + \sum_{\langle ij \rangle} U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (3.4)$$

を考えると、これは、上の(3.1)式または(3.2)式を用いることにより、全運動量および相対座標と相対運動量で表すことが出来る。これから、多体系の複合粒子的な取り扱いに対する、いろいろな見方が出来る。たとえば、豊田氏⁷⁾のBCS秩序パラメータ

に関する時間に依存したGL方程式は、上の立場では、形式的に簡単に代数的関係式として導かれるものであり、質量などをくり込まないとそのままではクーパー対に対応する式にはなっていない。詳しくは文献6)を参照して欲しい。

参考文献

- 1) 鈴木増雄, 現代物理学叢書「統計力学」(岩波書店, 2000年, 初版本は1994年)
- 2) M. Suzuki, in "Statistical Mechanics, Quantum" (Encyclopedia of Appl. Phys. Vol.19 (1997) 517-540).
- 3) M. Suzuki, Int. J. Mod. Phys. B **16** (2002) 1749.
- 4) C. Kittel, Quantum theory of solids (New York, Wiley, 1963).
- 4) 西島和彦, 「仁科芳雄と日本における素粒子物理学の原点」2005年12月6日(日大理工)仁科記念講演会.
- 6) M. Suzuki, in preparation for publication.
- 7) T. Toyoda, Prog. Theor. Phys. **114** (2005) 1153.