講義ノート

量子系における複雑さと統計力学の基礎付け

京大理学部物理　戸田幹人

これまで統計力学の基礎付けは、自由度と観測時間をともに無限大にした極限で考えられてきた。これに対して、近年、従来の統計力学の考え方が適用できない系が興味を持たれ始めている。例えば、原子分子・原子核・微粒子は、数個から数十個の粒子からなる量子系であり、少数多体系と言う見方で特徴付けられる。これらの少数多体系は、統計力学が成り立つ従来の多体問題と厳密解が求められる完全可積分系の中間にあり、対応する古典系は一般に非可積分である。そのためにエネルギー散逸や緩和などの統計的な現象が見られるが、それらは有限系における有限時間スケールで見られる散逸であるから、見るスケールによって散逸の速度が違う、部分的な回帰が見られる等、無限系を前提にした議論では扱えない性質を持つ。あるいは、メソスコピック系における散逸の起源もその一例である。これらの系が問題となってきた理由として、実験技術の向上があげられる。固体物理においては半導体の微細加工技術、化学反応論においてはレーザーや分子線の技術の進歩によって、極めて小さな空間スケール・時間スケールにおける現象を調べることが可能になってきたからである。

これらのメソスコピック系や少数多体系で見られる統計現象に対して、従来の統計力学の基礎をめぐる議論は適用できない。従ってこれらの統計現象を理解するには、改めてその力学的起源にたちもどり、かつ有限自由度系・有限時間ということを意識した方法論で研究する必要がある。まず、少数多体系のような有限系において散逸を考えるためには、散逸の定義そのものを検討し直すことが必要である。無限系における散逸の定義は、ユニタリ変換では決して移り変わらない２つの状態、純粋状態と混合状態の差に基付いているからである。この定義からすれば、有限系においては散逸は有り得ない。従って、少数多体系における反応過程やエネルギー散逸を議論できるように、有限系に適した形で散逸の定義を拡張しよう。しかもこの拡張は、自由度の大きさを無限に大きくする漸近的な極限において、従来の定義に一致しなければならない。そのために以下で、複雑さの理論と逆問題を用いた方法論を提案しよう。

近年、複雑さの定量化の試みが様々な方法で行なわれてきている。例えば計算の複雑さは、それに要する手順、時間、記憶容量の大きさで定義される。このアナロジーで例えば不可逆性を、系を時間反転させるのに要する手間の大きさで定義できないだろうか。有限系ではこの複雑さは有限であるが（即ち系の時間反転は原理的には可能であり、従来の意味での散逸はない）、粒子数を大きくした時の複雑さの漸近的な振舞いは、可積分系に対応する量子系とカオスに対応する量子系では異なるのではなかろうか。もしそうであったとすると、有限系における散逸の起源を、カオスに対応する量子系における時間反転の手順の複雑さから理解できることになろう。

以上に述べたアイデアは極めて萌芽的であり、物理にするために必要な問題は数多い。例えば、時間反転に際して我々は系に関する情報をどれだけ得られるのか、時間反転の手順をどう定義するのか、などである。これらの問題と関連するのが、近年、工学における必要性から研究が盛んとなっている逆問題である。その基

本は、不完全な観測データから対象に関する必要な情報を復元するというものである。統計力学は、マクロな観測で得られる不完全なデータからミクロな対象について知ろうというものであるから、本来、逆問題の発想を内包している。しかし従来は、観測精度の制約が大き過ぎて、逆問題の具体的な内容を意識する必要がなかったのであろう。しかし、近年の実験技術の進歩は、この問題を原理的な問題として考察する必要性を示しているのではないだろうか。

(1) 位相回復問題

逆問題の一種としての位相回復問題は、ここでは、従来の統計力学の立場と少数多体系におけるそれとをつなぐ、中間的な役割を果たすといってよい。従来の統計力学において、量子系における散逸は位相に関する情報が失われることから来る。この情報の損失は、系がその外部にある観測装置あるいは熱浴と接触することによってひきおこされると考えられてきた。(この点では、メソスコピック系における Landauer 公式の理解のされ方も同じ立場に立つといって良い。) この考えの難点は次の点にある。それは、系と観測装置の全体をあらためてひとつの系と考えた時、そこには散逸が存在していないという点である。すなわち散逸が、系にとって内在的な性質として特徴付けられていないという点である。従って、ここでは次のような問いを出してみよう。観測による位相の情報の損失は、どのような形で系の内在的な性質を反映しているのだろうか。

この問いに答えるためには、次の疑問に回答を与える作業を行なう必要がある。それは、失われている位相情報の中身は何か、それらを何らかの形で復元できないのか等の疑問である。これが位相回復問題に他ならない。なぜなら、量子系における散逸というのは、位相情報の回復の可能性を問うた後で始めて確たる意味を持つと思えるからである。すなわち、位相回復が不可能であるか、または極めて困難である時に始めて散逸と呼び得るのである。その意味で、位相回復問題は散逸とは何かと問う時避けて通れないはずである。

また位相回復問題によって、観測で失われる情報の中身を理解することができる。例えば、運動量の固有関数に対して位置の測定を行なうことを考えてみよう。この時に失われる位相の情報は、運動量の測定を行なえば復元できる。位置も運動量も共にマクロな装置による観測が可能であるから、位置の測定で失われる位相の情報は、統計力学の基礎付けとは無縁のものであるといえよう。それでは、統計力学の基礎付けにとって本質的な位相情報は何か。それは、コヒーレント表示における位相のトポロジーに関する情報、即ち零点の位置に関する情報である。これは、コヒーレント表示が粗視化に対応すること、観測によって確率分布を得た時に最も推定しにくいのが分布の零点の位置であること、などから直観的に理解できるであろう。以上の経路を経て、コヒーレント表示における零点と散逸の起源が関連するのである。

１自由度離散写像におけるコヒーレント表示の零点は、可積分系に対応する量子系では１次元的に分布するのに対して、カオスに対応する量子系では２次元的に散らばって分布する。この零点の分布の違いは、可積分系に対応する量子系とカオスに対応する量子系の間で位相回復の困難さに違いがあることを意味する。その理由は、１複素変数の整関数に関する Hadamard の定理から零点の位置が分かれば波動関数は復元できるので、零点の位置の推定が容易であれば位相の情報を回復できるからである。

以上のように位相回復問題を検討することによって、観測によってひきおこされた位相の情報の損失は、位相回復が容易であるか困難かという形で、系の内在的な性質を反映しているといえる。

(2) 複雑さとしての不可逆性と位相特異点の絡み目

位相回復問題では、位相の情報の損失そのものは観測によって引き起こされると考えてきた。そこでは、系の内在的な性質は位相回復の困難さの度合という形で反映していたが、より直接に、散逸を系の内在的な性質として考えられないか。それがここでの問題である。そのために不可逆性を、系を時間反転させるのに要する手間の大きさで定義することを試みよう。

コヒーレント表示における位相特異点は、局所的に生成消滅することのないトポロジカルな特異点である。また、位相空間の次元を $2n$ とするとき位相特異点の次元は $2n-2$ であり、一般に絡み目を構成する。この絡み目は、位相特異点の補集合のホモトピー群によって特徴付けられるが、これは偏角の定理を多次元に拡張したものに相当する。従って、位相特異点の絡み目が、量子系のダイナミックスに対して新たな特徴付けの手段を提供してくれる可能性がある。

たとえば、位相特異点は、時間発展の過程において絡み合うが、この絡み合いは、系の時間発展に対するトポロジカルな意味での複雑さを特徴付けている。なぜなら、系の時間発展を逆にたどるためにはこの絡み合いをほどいていかなければならないから、絡み合いの複雑さの多少は、系の可逆性の容易さの大小を表していると考えられるからである。従ってこれは、トポロジカルな意味で時間発展の複雑さを特徴付けるといってよい。力学的な意味における不可逆性とは、自由度を大きくした時あるいは時間を無限に長くした場合に漸近的に、このトポロジカルな複雑さがどのように増加するかを意味するのではなかろうか。

位相特異点のトポロジカルな特性に基付くという点で、位相回復問題と複雑さとしての不可逆性という二つの方法は関連している。以上の二つをまとめて標語的には次に様にいえるかも知れない。内在的には位相のトポロジカルな複雑さとして特徴付けられる散逸は、系の外にいる観測者にとって位相回復の困難さとして現れる。

(3) 観測の問題とダイナミカルな超選択則

ここまでの議論では、量子系における観測の問題は慎重に回避されてきた。しかし、複雑さとしての不可逆性という考えは、観測の問題に対しても示唆的なものを持っている。最近、超選択則を位相特異点の絡み（たとえば、Berry の位相）として理解しようとする研究がある。ここに述べてきた、ダイナミックスにおける位相特異点の絡みは、Berry の位相を拡張したものと見ることができる。その意味で、位相特異点の絡みとしてのトポロジカルな複雑さを、ダイナミカルな意味で超選択則を引き起こすと考えられないだろうか。