

量子力学から熱力学第二法則を導出することに成功 ～「時間の矢」の起源の解明へ大きな一歩～

1. 発表者

伊與田英輝（東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻 助教）

金子 和哉（東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻 博士課程1年生）

沙川 貴大（東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻 准教授）

2. 発表のポイント

- ◆マクロな世界の基本法則である熱力学第二法則を、カノニカル分布（注1）など統計力学（注2）の概念を使うことなくミクロな世界の基本法則である量子力学から、理論的に導出することに成功しました。
- ◆極微の世界を支配する「量子力学」と、私達の日常を支配する「熱力学」という、二つの大きく隔たった体系を直接に結びつけることができました。
- ◆冷却原子気体（注3）など高度に制御された量子多体系の非平衡ダイナミクスの理解にもつながると期待されます。

3. 発表概要

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻の伊與田英輝助教、金子和哉大学院生、沙川貴大准教授は、マクロ（巨視的）な世界の基本法則で、不可逆な変化に関する熱力学第二法則を、ミクロな世界の基本法則である量子力学から、理論的に導出することに成功しました。これは、極微の世界を支配する「量子力学」と、私達の日常を支配する「熱力学」という、二つの大きく隔たった体系を直接に結び付けるものです。

本研究では、量子多体系の理論に基づき、単一の波動関数（注4）で表される量子力学系において、熱力学第二法則を理論的に導きました。従来の研究とは異なり、カノニカル分布などの統計力学の概念を使うことなく、多体系の量子力学に基づいて第二法則を導出したことが、本研究の大きな特徴です。さらに、ゆらぎの定理と呼ばれる熱力学第二法則の一般化を、同様の設定で証明することにも成功しました。

本研究の成果は、量子力学だけに基づいて不可逆性の起源を理解する大きな一歩となるのみならず、冷却原子気体など高度に制御された量子多体系の非平衡ダイナミクスの理解にもつながると期待されます。

4. 発表内容

研究の背景

熱力学は物理学の基礎理論の一つであり、その応用は熱機関や化学反応など多岐にわたっています。熱力学においてとりわけ重要なのは、第二法則です。熱力学第二法則とはエントロピー増大則に他ならず、「断熱された系のエントロピーが減ることはない」と表されます。

熱力学第二法則は不可逆な変化に関する法則です。ある変化が不可逆であるとは、その逆向きの変化が自発的には起きないことを意味しています。たとえばある現象をビデオに撮って逆再生したとき、それが物理的にあり得ない場合に、その現象は不可逆であると言います。室温の空気中に熱いコーヒーを放っておいたら冷めてしまいますが、その逆、つまり冷めたコーヒーがひとりでに熱くなることはありません。つまり、コーヒーが冷めるのは不可逆な変化です。このような不可逆性は、しばしば比喩的に「時間の矢」と呼ばれます。

熱力学の特徴の一つに、それがマクロな現象に関する理論であることが挙げられます。マクロな物質には、原子や分子などの小さな構成要素が大量に含まれています。それらのミクロな構成要素の運動は、近似的にはニュートン力学、正確には量子力学によって記述されます。

このようなミクロな世界の基本法則（ニュートン力学の運動方程式や、量子力学のシュレーディンガー方程式）には、時間反転に関して対称的であるという性質があります。つまり、ある運動が運動方程式の解であれば、その時間の向きを反転させた運動も解になるという性質です。たとえば、摩擦が無視できるほど小さい振り子の運動をビデオに撮って逆回ししても、運動方程式を満たしています。これは、不可逆性を表す熱力学第二法則とは著しく異なった性質です。ニュートン力学や量子力学に基づく、コーヒーが冷める時間変化が可能なら、冷めたコーヒーがひとりでに熱くなるような時間変化も可能ということになります。すなわち不可逆な熱力学は、可逆なニュートン力学や量子力学と、一見すると矛盾しているように見えてしまいます。そのため、ミクロで可逆な法則とマクロで不可逆な世界との整合性をどう理解するかは、19世紀以来の物理学の大きな難問でした。

この古い難問に対して、近年新しい光が当たっています。とくにこの二十年で、量子力学と統計力学を用いて、熱力学第二法則を理論的に導くことが可能になってきました。そこで重要な役割を果たしているのは「ゆらぎの定理」と呼ばれる統計力学の定理です。これは、エントロピーのゆらぎまで考慮に入れることで、熱力学第二法則を（不等式ではなく）等式で表現する定理です。さらに近年、熱力学第二法則やゆらぎの定理は情報熱力学（注5）として情報量を含んだ形に一般化されており、情報と熱力学の関係が実証されています。これらの研究において、熱力学第二法則などを導出する際の重要な仮定は、熱浴（注6）の初期状態が統計力学におけるカノニカル分布であることです。しかし、実際の熱浴の状態がカノニカル分布であるという保証はありません。とくに、後述するように、量子力学的な純粋状態（注7）も熱平衡状態を表すことが知られています。そのため、カノニカル分布を基礎とした従来の研究は、時間の矢の起源の理解のためには不十分なもの

でした。

また、近年の実験技術の進歩により、孤立した量子多体系の熱平衡化が盛んに研究されています。たとえば冷却原子気体と呼ばれる技術を用いて、孤立した純粋状態も熱平衡状態へと緩和することが実験的に示されるようになってきました。とくに、「量子多体系の単一のエネルギー固有状態（注8）が熱平衡を表す」という固有状態熱化仮説（ETH：Eigenstate Thermalization Hypothesis）の重要性が認識されるようになってきました。しかし、これらの研究においてエントロピーは議論されておらず、孤立した量子多体系における熱力学第二法則の理解はほとんどなされていませんでした。

研究内容

本研究では、マクロな世界の基本法則である熱力学第二法則を、まず第二法則が成り立つ精度を任意に決めて、その精度に対して熱浴のサイズを十分大きくとれば第二法則が成り立つ、という形で、数学的に厳密（注9）に定式化し、ミクロな世界の基本法則である量子力学から、理論的に導出することに成功しました。従来の研究とは異なり、カノニカル分布などの統計力学の概念を使うことなく、多体系の量子力学に基づいて、量子力学的な純粋状態についても第二法則が成り立つことを理論的に証明しました。さらに、ゆらぎの定理を同様の設定で証明することにも成功しました。また、第二法則は情報エントロピー（注10）を用いた定式化になっているため、純粋状態においても情報と熱力学の関係が示されました。

本研究グループは、小さな量子系（システム）と大きな量子多体系（熱浴）が接触している格子系（図1）を考え、シュレーディンガー方程式に従って時間発展した際の全系のエントロピー生成（注11）を議論しました。その際、熱浴の初期状態は単一のエネルギー固有状態、すなわち純粋状態とすることにより、ほぼ全ての固有状態に対して、ある時間内においてはエントロピー生成がほとんど非負になる、つまり熱力学第二法則が成り立つことを証明しました。

今回の理論の鍵は、量子多体系の相互作用の局所性と、ETHの二つです。

一つ目の鍵は相互作用の局所性です。相互作用が局所的であるとは、多体系の構成要素が近くの要素としか相互作用しないということです。相互作用が局所的だと、量子多体系内の情報の伝搬速度（群速度）には上限が存在することが、リーブ・ロビンソン限界と呼ばれる定理によって厳密に示されています。これを本研究の設定に適用すると、熱浴のうちシステムから遠く離れた部分の影響は、短い時間の間はシステムには届かないことが分かります。

もう一つの鍵はETHです。「ほとんどすべてのエネルギー固有状態は熱平衡状態を表す」という、弱い形のETH（weak ETH）を、物理的に妥当な仮定のもとで数学的に厳密に証明しました。これとリーブ・ロビンソン限界を合わせることで、熱浴の遠方の影響がシステムに届く時間に比べて十分短い時間領域においては、システムにとって熱浴はカノニカル分布であるかのように見えることが示されます。このことを利用して、短い時間の間は熱力学第二法則やゆらぎの定理が成立すること

を、数学的に厳密に証明しました。

以上の議論は、数学的には熱浴が「十分大きい」ときに成り立ちますが、具体的にどれだけの大きさの熱浴に対して成り立つのかは場合によって異なります。そこで本研究グループは、ハミルトニアンの厳密対角化を用いた数値実験によって、理論の検証を行いました。数値実験では、図2に示すような格子上の、ハードコアボソン（注1 2）を用いました。熱浴は16個の格子点からなる小さな熱浴（注1 3）であるにもかかわらず、理論と整合する結果が得られています（図2, 3）。

今後の展開

本研究の成果は、量子力学だけに基づいて不可逆性の起源を理解する大きな一歩となるのみならず、冷却原子気体など高度に制御された量子多体系の非平衡ダイナミクスの理解にもつながると期待されます。また、この理論は多くの量子多体系に適用可能なものであり、ブラックホールの情報パラドックス（注1 4）などへの応用も期待されます。

謝辞

本研究は文部科学省の科学研究費補助金(JP16H02211, 15K20944, JP25103003)の助成を受け行われました。

5. 発表雑誌

雑誌名:Physical Review Letters

論文タイトル:Fluctuation Theorem for Many-Body Pure Quantum States

著者:Eiki Iyoda, Kazuya Kaneko, Takahiro Sagawa

6. 問い合わせ先

東京大学大学院工学系研究科

助教 伊與田 英輝 (いよだ えいき)

東京大学大学院工学系研究科

准教授 沙川 貴大 (さがわ たかひろ)

7. 用語解説

(注1) カノニカル分布：エネルギーの平均が一定という条件の元でエントロピーが最大値を取る状態を、カノニカル分布と呼びます。

(注2) 統計力学：確率モデルを用いて熱力学量を計算するための理論的な枠組み。後述するカノ

ニカル分布もそのような確率モデルの一種です。

(注3) 冷却原子気体：レーザー冷却の技術を用いて、原子集団を極低温まで冷やしたもの。格子状のポテンシャルに原子を並べたり、原子間の相互作用を自在に制御することができ、様々な量子多体系が作られています。

(注4) 波動関数：量子力学において系の状態を表す関数です。シュレーディンガー方程式に従って時間変化をします。

(注5) 情報熱力学：情報と熱や仕事を対等に扱う形に一般化された熱力学。そこから情報処理に必要なエネルギーコストの限界を定めることが出来ます。近年、コロイド粒子や単一電子を用いた実験によって、情報を仕事に変換する「マクスウェルのデーモン」が実現されています。

(注6) 熱浴：熱力学において、等温の巨大な環境のことを「熱浴」と呼びます。たとえば、室内のコーヒーの例の場合は、周囲の空気が熱浴です。

(注7) 純粋状態：単一の波動関数で記述される量子状態を、純粋状態と呼びます。一方で、カノニカル分布は複数の波動関数を使って記述されるため、混合状態と呼ばれます。

(注8) エネルギー固有状態：量子力学のシュレーディンガー方程式によって時間変化しない状態を、エネルギー固有状態と呼びます。

(注9) 数学的に厳密：「第二法則が成り立つ精度を任意に決め、その精度に対して熱浴のサイズを十分大きくとれば第二法則が成り立つ」という方法により数学的に厳密に定式化しています。

(注10) 情報エントロピー：情報理論において定義されているエントロピー（情報量）。古典論ではシャノン・エントロピー、量子論ではフォンノイマン・エントロピーが代表的なものです。

(注11) エントロピー生成：システムの情報エントロピーの変化と、システムから熱浴に放出した熱量（を温度で割ったもの）の和が、エントロピー生成と呼ばれます。この量は熱力学第二法則やゆらぎの定理の定式化において重要な役割を果たしてきました。

(注12) ハードコアボソン：量子力学によると、粒子にはボソンとフェルミオンの二種類があります。ハードコアボソンとは、強い粒子間斥力のために1か所に2つ以上存在できないボソンのこ

とです。

(注13) 小さな熱浴：たとえば結晶などの固体でも原子が格子状に並びますが、身の回りの物質では格子の点の数はアボガドロ定数（一億の一億倍の一億倍程度の大きな数）ほどになります。

(注14) ブラックホールの情報パラドックス：ブラックホールは熱輻射によって蒸発していくと考えられています。この不可逆な熱輻射と、可逆なシュレーディンガー方程式がどう整合するのか、という情報パラドックスは理論物理学の難問の一つです。

8. 添付資料

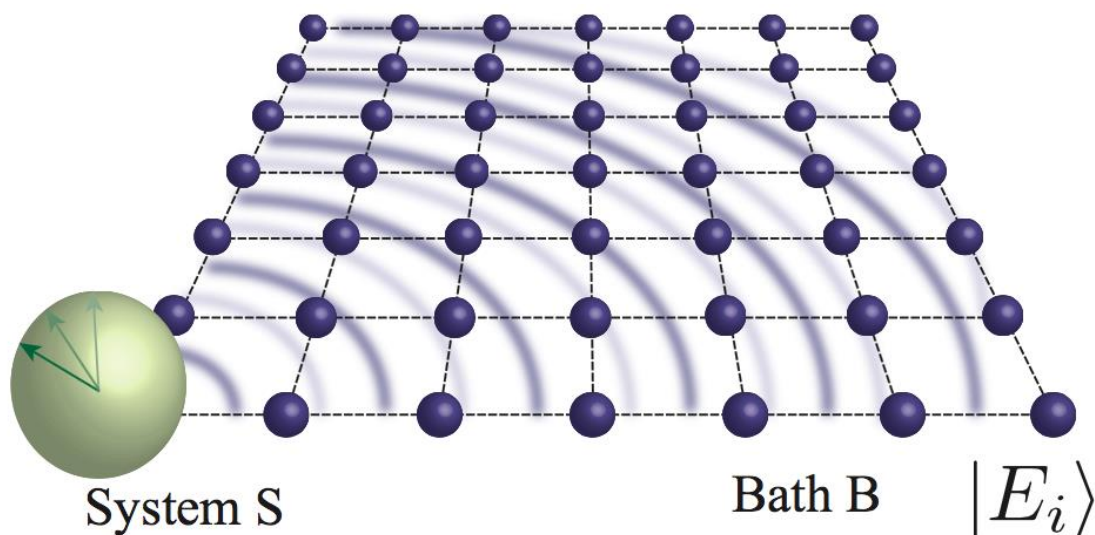


図 1：本研究の設定の模式図。全系はシステム S と熱浴 B からなる。熱浴の初期状態はエネルギー固有状態である。熱浴は格子上の量子多体系で、相互作用は局所的である。また、システム S は熱浴の一部とのみ相互作用している。

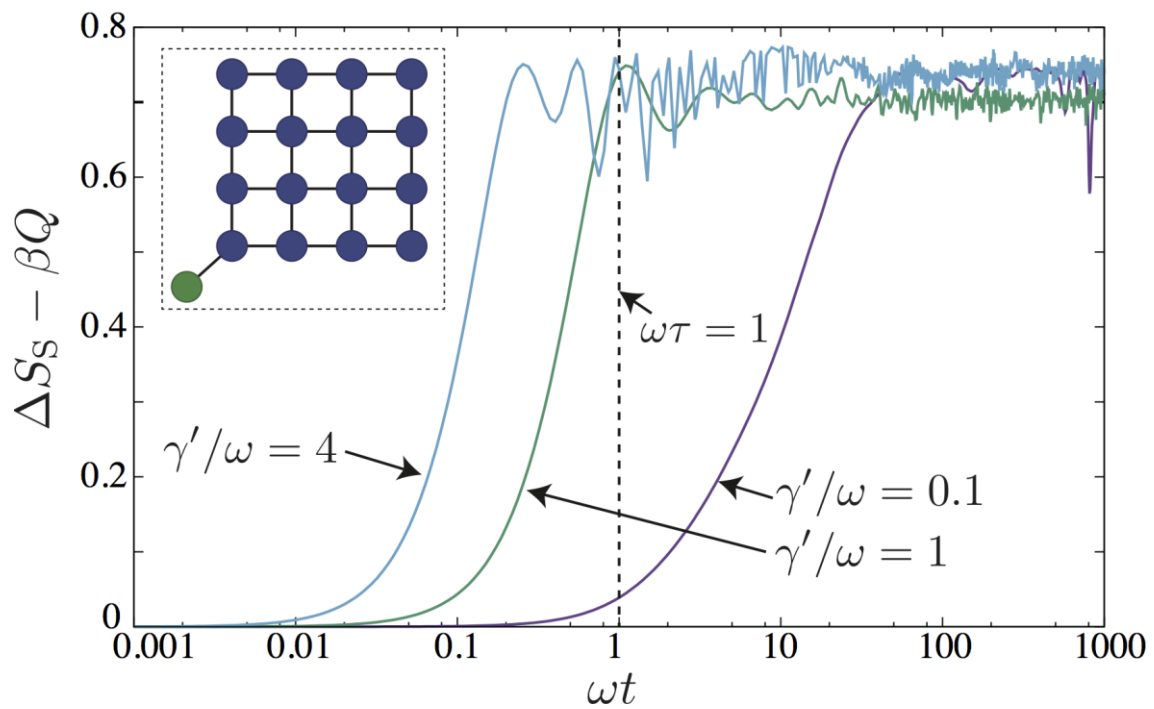


図 2: エントロピー生成の時間依存性の数値計算結果。システムと熱浴の結合強度を変えてプロットしている。中央の点線はリーブ・ロビンソン限界によって決まるリーブ・ロビンソン時間であり、これよりも短時間領域で第二法則が成り立つことが理論的に示されている。エントロピー生成は全時間領域で非負であり、熱力学第二法則が成り立っていることがわかる。[インセット] 数値計算に用いた格子構造。緑の点がシステムを表し、青の格子が熱浴を表している。

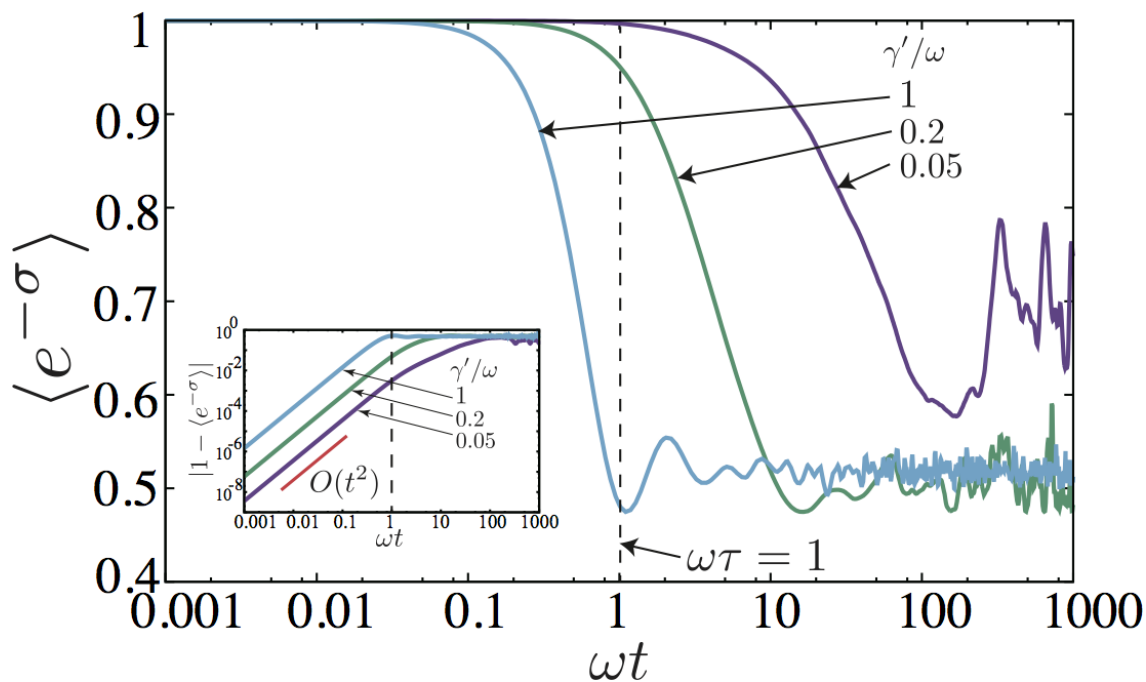


図 3: ゆらぎの定理の数値検証結果。縦軸が 1 に等しいときにゆらぎの定理が成り立っている。リーブ・ロビンソン時間よりも短時間では成り立っているゆらぎの定理が、長時間領域では破れている様子が見える。これは、長時間領域ではシステムが熱浴の量子ゆらぎを感じるようになったからと理解できる。[インセット] ゆらぎの定理の破れの時間依存性。リーブ・ロビンソン限界を用いた理論の予測と整合した結果が得られた。