数理解析研究所講究録
957巻 1996年 122-133

アンサンブルの同値性
― 量子系の基底状態の場合 ―

東京都立大学　松井 卓
(Taku Matsui)

§1　アンサンブルの同値性 (equivalence of ensemble) とは，統計力学で使われる用語で micro-canonical, canonical, grand canonical ensemble のような熱平衡状態をあらわす統計的平均どうしの関係を表わす単語である。ここでは格子上を動くフェルミ粒子系の量子力学的な基底状態について考える。

最初に格子上のフェルミ粒子系のフォック空間 $\mathcal{F}$ を考える。考える格子は $\mathbb{Z}^d$ とする。(以下で述べる結果は適当な周期性を持つ格子でも成立する。)

一粒子状態は $\ell^2(\mathbb{Z}^d) = \{ (c_j)_{j\in\mathbb{Z}^d} \mid \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} |c_j|^2 < \infty \}$ であらわされるとする。(スピン等の自由度は考えない。)

$$\mathcal{F} = \Lambda^*(\ell^2(\mathbb{Z}^d))$$

フォック空間 $\mathcal{F}$ は $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ の外積代数を
ヒルベルト空間になるように完備化したものと見れる。
$\mathbb{Z}^d$ の部分集合 $\Lambda\ (\subset \mathbb{Z}^d)$ から自然に $\ell^2(\Lambda) \subset \ell^2(\mathbb{Z}^d)$
$\mathcal{F}_\Lambda = \Lambda^*(\ell^2(\Lambda)) \subset \mathcal{F}$ が定まる。

以下 Λ は $\mathbb{Z}^d$ 内の適当サイズの立方体，$|\Lambda|$ は Λ の
体積を表わすとする。a_j^*，a_j で格子点 j での
フェルミ粒子の生成・消滅演算子を表わす。n_j は
$n_j = a_j^* a_j$ (number operator) で定める。有限体積
Λ 内での数演算子 N_Λ は，

$$N_\Lambda = \sum_{j\in\Lambda} n_j$$

で定義される。

有限体積でのハミルトニアンとして，よく物理で考えられるのは次の形のものである。

$$H_\Lambda = \sum_{i,j\in\Lambda} t_{ij}\, a_i^* a_j + \sum_{A\subset\Lambda} J_A \prod_{A\ni k} n_k$$

ここで t_{ij}，J_A は実数で $t_{ij} = t_{ji}\ (i,j \in \mathbb{Z}^d)$

A は $\mathbb{Z}^d$ の有限集合である。

$[N_\Lambda, H_\Lambda]=0$ なので H_Λ と N_Λ は同時対角化可能である。H_Λ の基底状態として次の2つのタイプを考える。

(A) μ 実数として $H_\Lambda(\mu)=H_\Lambda+\mu N_\Lambda$ とおく。$H_\Lambda(\mu)$ の $\mathfrak{F}_\Lambda$ 内での最低固有値 $E_\Lambda(\mu)$ に対応する単位ベクトル $\Omega_\Lambda(\mu)$ を $H_\Lambda(\mu)$ の基底状態と呼ぶ。

(B) ρ_Λ で $0\leqq\rho_\Lambda\leqq 1$ $|\Lambda|\rho_\Lambda\in\mathbb{Z}$ となるものを固定する。フォック空間 $\mathfrak{F}_\Lambda$ の中で粒子の密度 ρ_Λ をもつ空間 $\mathfrak{F}_\Lambda(\rho_\Lambda)$ を

$$\mathfrak{F}_\Lambda(\rho_\Lambda)=\{\xi\in\mathfrak{F}_\Lambda \mid N_\Lambda\xi=|\Lambda|\rho_\Lambda\xi\}$$

で定める。ハミルトニアン H_Λ の $\mathfrak{F}_\Lambda(\rho_\Lambda)$ への制限し，$\mathfrak{F}_\Lambda(\rho_\Lambda)$ での最低固有値 $\hat{E}_\Lambda(\rho_\Lambda)$ を考える。$\hat{E}_\Lambda(\rho_\Lambda)$ に対応する固有ベクトル $\hat{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda)$：

$$H_\Lambda\hat{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda)=\hat{E}_\Lambda(\rho_\Lambda)\hat{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda)$$

$$N_\Lambda\hat{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda)=|\Lambda|\rho_\Lambda\hat{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda)$$

を考える。$\hat{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda)$ を粒子密度 ρ_Λ の基底状態と呼ぶことにする。

実際には，基底状態 $\Omega_\Lambda(\mu)$, $\tilde{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda)$ が $|\Lambda|$ が非常に大きい時の性質が統計力学で重要になることが多い。一方，$\Lambda \to \mathbb{Z}^d$ の極限で $\Omega_\Lambda(\mu)$, $\tilde{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda)$ が，フォック空間のベクトルとして収束しない場合は多い。(相互作用のない時 $J_A=0$ ($^\forall A\subset\mathbb{Z}^d$) にすでに例をつくる事は容易である。) ベクトルの収束でなく，量子力学的な意味での期待値の極限を考える方が自然である。

$\mathfrak{A}$ を a_j^*, a_j $j\in\mathbb{Z}^d$ で生成される C^*-代数

$\mathfrak{A}_\Lambda$ を a_j^* a_j $j\in\Lambda$ で生成される $\mathfrak{A}$ の部分 C^*代数

$$\mathfrak{A}_{loc} = \bigcup_{|\Lambda|<\infty} \mathfrak{A}_\Lambda$$

と定める。 $Q\in\mathfrak{A}_{loc}$ に対し次の極限を考える。

$$\omega_\mu(Q) = \lim_{\Lambda\to\mathbb{Z}^d} (\Omega_\Lambda(\mu), Q\,\Omega_\Lambda(\mu))$$

$$\tilde{\omega}_\rho(Q) = \lim_{\substack{\rho_\Lambda\to\rho \\ \Lambda\to\mathbb{Z}^d}} (\tilde{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda), Q\,\tilde{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda))$$

一般に，これらの極限が存在するかどうかは不明である。有限体積での基底状態の次元も不明なので

上の極限がどのような $\Omega_\Lambda(\mu)$ 等の取り方で存在するか不明である。しかしながらもし $\Lambda \to \mathbb{Z}^d$ の極限が存在したとして $\omega_\mu(\ )$ $\hat{\omega}_\rho(\ )$ はともに同じタイプの不等式をみたすことが簡単にしめせる。

$$\mathfrak{A}^{U(1)} = \left\{ Q \;\middle|\; \beta_\theta(Q) = Q \;,\; \underset{\forall\theta\in\mathbb{R}}{Q \in \mathfrak{A}} \right\}$$

$$\beta_\theta(Q) = \lim_{\Lambda\to\mathbb{Z}^d} e^{i\theta N_\Lambda}\, Q\, e^{-i\theta N_\Lambda}$$

とすると $Q \in \mathfrak{A}^{U(1)} \cap \mathfrak{A}_{loc}$ に対し

$$\lim_{\Lambda\to\mathbb{Z}^d} \omega_\mu(Q^*[H_\Lambda \;, Q]) \geq 0$$

$$\lim_{\Lambda\to\mathbb{Z}^d} \tilde{\omega}_\rho(Q^*[H_\Lambda \; Q]) \geq 0$$

基底状態について"アンサンブルの同値性"とは、任意の ω_μ に対し適当な ρ と $\hat{\omega}_\rho$ が存在し

$\omega_\mu = \hat{\omega}_\rho$ となることを意味する。

物理学者の中には、この同値性がいつも成立する、又は逆に成立しない事もあると考えている人があるようだが

多くの場合 ある特定のモデル又は $\Omega_\Lambda(\mu)$ $\hat{\Omega}_\Lambda(\rho_\Lambda)$ のとり方に関しての結果を拡大解釈しているようである。厳密には、並進不変性が破れた状態では $\omega_\mu = \tilde{\omega}_\rho$ となる $\tilde{\omega}_\rho$ が存在しない例を作ることができる。

§2で アンサンブルの同値性が純粋基底状態で特に並進不変性をもつ場合に成立することを述べる。

§2 状況を数学的に整理するために少し問題を一般化する。以下 並進不変な系のみを考える。
τ_j $(j \in \mathbb{Z}^d)$ を格子 $\mathbb{Z}^d$ 上の並進をあらわす $\mathfrak{A}$ の (C^*-代数の) 自己同型とする。

$$\tau_j(a_k) = a_{k+j} \qquad \tau_j(a_k^*) = a_{k+j}^*$$

体積無限大でのハミルトニアンを形式的に次の形で与える。

$$H = \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} \tau_j(h)$$

以下で述べる仮定を h がみたすと交換子

$$[H, Q] = \delta(Q) \qquad (Q \in \mathfrak{A}_{loc})$$

は，well-defined

<u>仮定</u> (i) $h = h^*$

(ii) $h \in \mathfrak{A}_{loc} \cap \mathfrak{A}^{(1)}$

$i\delta$ は，この仮定のもとで $\mathfrak{A}$ の 1 係数自己同型群 $\alpha_t(\cdot)$ の生成作用素に拡張できる。

$$\alpha_t(Q) = e^{i t \delta}(Q)$$

形式的には $\alpha_t(Q) = e^{itH} Q e^{-itH}$ と見れる。

仮定(ii) より $\alpha_t \circ \beta_\theta = \beta_\theta \circ \alpha_t$ である。

α_t は，自由度無限大の系の時間発展を表わす。

数理物理（特に作用素環的方法で量子スピン系を扱う場合）では，無限系での基底状態を次で定義する。

φ が H（又は α_t）の基底状態であるとは

(i) φ は $\mathfrak{A}$ の正線形汎関数で規格化されている。

$$\varphi(Q^* Q) \geqq 0 \quad , \varphi(\mathbb{I}) = 1$$

(ii) 任意の $Q \in \mathfrak{A}_{loc}$ について

$$\varphi(Q^* \delta(Q)) \geqq 0$$

が成立する。

α_t を $\mathfrak{A}^{U(1)}$ の時間発展と見た時 $(\alpha_t , \mathfrak{A}^{U(1)})$ の基底状態は、$\mathfrak{A}^{U(1)}$ の状態 ψ で 任意の $Q \in \mathfrak{A}_{loc} \cap \mathfrak{A}^{U(1)}$ について $\psi(Q^* \delta(Q)) \geqq 0$ が成立することとする。

μ：実数 に対し $\alpha_t^{(\mu)}$ を $Q \in \mathfrak{A}$ に対し

$$\alpha_t^{(\mu)}(Q) = \beta_{\mu t} \circ \alpha_t(Q)$$

で定める。$Q \in \mathfrak{A}^{U(1)}$ に対して

$$\alpha_t^{(\mu)}(Q) = \alpha_t(Q)$$

であるので $(\mathfrak{A}, \alpha_t^{(\mu)})$ の基底状態 φ を $\mathfrak{A}^{U(1)}$ に

制限すると $\varphi|_{\mathfrak{A}^{U(1)}}$ は $(\mathfrak{A}^{U(1)}, \alpha_t)$ の基底状態になる。§1で述べた問題を定式化しなおすと次のようになる。$\mathfrak{A}$ から $\mathfrak{A}^{U(1)}$ への射影 $E(\cdot)$ を

$$E(Q) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \beta_\theta(Q)\, d\theta$$

で定める。ψ を $(\mathfrak{A}^{U(1)}, \alpha_t)$ の基底状態とする。この時 $\psi\circ E$ はある適当な μ に対し $(\mathfrak{A}, \alpha_t^{(\mu)})$ の基底状態となるか？

少し考えれば分るように有限自由度で同様の問題を考えると答は否定的である。しかし無限自由度で状態が並進不変性をもつ時は以下のような結果が得られる。

<u>定理</u>　ψ は $(\mathfrak{A}^{U(1)}, \alpha_t)$ の基底状態とする。さらに，ψ は純粋な並進不変状態とする。
$(\psi\circ\tau_j = \psi \quad \forall j\in\mathbb{Z}^d)$　$\mathfrak{A}$ の状態 φ を

$\varphi = \psi\circ E$ で定める。この時ある $\mu\in\mathbb{R}$ が存在し φ は $(\mathfrak{A}, \alpha_t^{(\mu)})$ の基底状態となる。

<u>注意</u> (i) この定理で μ は一意に定まらない例がある。

(iii) 非並進不変状態では この定理が成立しない例がある。

§3 ここでは §2で述べた定理の証明のスケッチをする。

Bratteli Kishimoto Robinson の結果により $(\mathfrak{A}, \alpha_t)$ の基底状態は次の変分原理で特長づけられる。

<u>定理</u> (Bratteli Kishimoto Robinson)

次の条件は同値.

(1) φ は $(\mathfrak{A}, \alpha_t)$ の基底状態

(2) 全ての d-次元立方体 Λ に対し

$$\varphi(\tilde{H}_\Lambda) = \inf\{\psi(\tilde{H}_\Lambda) \mid \psi \in C^\varphi_\Lambda\}$$

ただし
$$\tilde{H}_\Lambda = \sum_j{}^{*} \tau_j(h)$$

$$C^\varphi_\Lambda = \{\psi \ \mathfrak{A}\text{の状態} \mid \psi|_{\mathfrak{A}_{\Lambda^c}} = \varphi|_{\mathfrak{A}_{\Lambda^c}}\}$$

$\sum_j^{*}$ は 全ての $Q \in \mathfrak{A}_\Lambda$ に対し

$$\sum_{j \in \mathbb{Z}^d} [\tau_j(h), Q] = \sum_{j \in \mathbb{Z}^d}^{*} [\tau_j(h), Q]$$

となる j の集合 で和をとる。

§2で述べた定理を考えるために，上の定理と同様の結果を $\mathfrak{A}^{V(1)}$ について準備する必要がある。$\mathfrak{A}^{V(1)}$ の基底状態の1つ構成方法として §1の粒子密度数 ρ を固定した条件で最小固有値の固有ベクトルの熱力学的極限をとるのがある。そこで粒子密度数 ρ をもつ状態を定義する。

<u>定義</u>　$\mathfrak{A}$ 又は $\mathfrak{A}^{V(1)}$ の状態 φ が 粒子密度 ρ をもつとは

(1)　φ は 並進不変である。

(2)　全ての自然数 k について

$$\lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} \varphi\left(\left(\frac{N_\Lambda}{|\Lambda|}\right)^k\right) = \rho^k$$

の2条件が成立することと定義する。

<u>注意</u>　φ が並進不変純粋状態である時 $\varphi(c_0^* c_0) = \rho$ と置けば，φ は上の意味で粒子密度 ρ をもつ。

この定義をつかうと次が成立する。

<u>定理</u>　ψ は $\mathfrak{A}^{U(1)}$ の並進不変純粋状態とする

$\psi(c_0^* c_0) = \rho$ と置く。この時，次は同値。

(1)　ψ は $(\mathfrak{A}^{U(1)}, \alpha_t)$ の基底状態

(2)　$\psi(h) = \inf \{ \hat{\psi}(h) \mid \tilde{\psi}$ 粒子密度 ρ をもつ状態 $\}$

§2の結果はこの定理の応用としてえられる。

<u>参考文献</u>

Bratteli, O.　Robinson, D.: Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics II (Springer)

Matsui, T.: Ground States of Fermions on Lattices (preprint)