統計物理学の基礎をめぐって

田崎 晴明

1 カノニカル分布の復習

平衡統計物理学の中でも、もっとも一般的に用いられ、実用性も高いカノニカル分布を復習することから始めよう[1]。関心のある物理系は、全部で N 個の状態を取るとする。これらの状態に $i = 1, 2, \ldots, N$ と名前を付け、対応するエネルギーの値を E_i と書く。

この系を絶対温度 T の環境に長時間放置すると、やがては**平衡状態**というマクロな視点からは時間変化のおきない状況が実現する。たとえば実験室にある磁性体のサンプルが「系」で、実験室の空気が「環境」（あるいは「熱浴」）と思えばよい。平衡状態では、系が状態 i に見いだされる確率は、**カノニカル分布**

$$p_i^{(\beta)} = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_{i'=1}^{N} e^{-\beta E_{i'}}} \tag{1}$$

で与えられる。ここで、 $\beta = 1/(kT)$ で、 k は Boltzmann 定数である。

平衡状態において f という物理量を測定することを考える。物理量とは、系の状態が定まれば値が確定するような量を指す。系が状態 i を取るときの f の値を f_i とする。平衡状態にある系で物理量 f を測定したときに得られる値の**期待値**は、(1) の確率で f を平均した

$$\langle f \rangle_\beta = \sum_{i=1}^{N} f_i \, p_i^{(\beta)} = \frac{\sum_{i=1}^{N} f_i \, e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=1}^{N} e^{-\beta E_i}} \tag{2}$$

で与えられる。

カノニカル分布の公式 (1), (2) は平衡統計物理の標準的な出発点である。これらの公式を様々な物理系に応用し、理論的なアイディアを駆使して多彩な物理現象を読みとっていくのが、通常の平衡統計物理の研究である。古くからの統計物理の対象である気体は言うに及ばず、多種多様な固体物性の問題、高分子などの「柔らかい」大自由度系、天体の内部構造、あるいは、（場の量子論の意味での）真空の構造など、様々な物理系にカノニカル分布が適用され意味深い結果が得られ

[1]ぶっきらぼうな書き出しで、申し訳ないと思う。これは、統計物理についての最低限の知識のある読者を想定した地味で真面目な（そして、望むらくは、多少は教育的な）解説である。本稿の意図については、次の節で説明する。

ている。平衡統計物理は、エネルギー保存則が意味を持つほとんど全ての物理系の平衡状態の性質を議論することのできる、驚くほど普遍的な方法論である[2]。

2 本稿の目標 — 平衡統計物理の基礎付けについて

カノニカル分布の公式 (1), (2) は、究極的には、Newton 力学や量子力学のような力学法則から導くことで正当化すべきだというのが、標準的な考えである[3]。しかし、確率を含まない力学法則を出発点にして、確率的な統計物理の法則を導くというのは容易なことではなく、未だに完全な解答はない。

多くの教科書では、

1. 物理系は Newton 力学で記述されるとする。
2. 系の時間発展がエルゴード仮設を満たすと仮定する。
3. 我々の観測には有限の時間がかかるとして確率を持ち込み、ミクロカノニカル分布を導入する。
4. ミクロカノニカル分布からカノニカル分布を導く。

という筋書きが説明されている。しかし、私はこのような統計物理の導入法には問題が多いと考えている。ここで系統だった批判を行うつもりはないが、原理的な面では、エルゴード仮設に基づく長時間平均の仮定があまりにも非現実的であること[4]、実用的な面では、あまり使わないミクロカノニカル分布の議論に時間をとられ過ぎることなどが、主な不満である。

ここでは、私が試みている統計物理の導入法と基礎付けについて、特に、

- 確率的な要素のないはずの物理系の記述になぜ確率を用いることができるのか。（3 節）
- 量子力学の設定で、カノニカル分布を直接導く筋書き。（4 節、 5 節）

[2]私は、物理学というものを（単一の「究極の理論」の帰結ではなく）自然の様々な側面から抽出した「普遍的な（数理的な）構造」が互いに論理的な関係で結ばれた総体ととらえたい [1]。その中で、統計物理は、様々な普遍的な構造を観測可能なマクロなレベルに関係づけるという独自の役割を担っていると思われる。

[3]あまり議論されないことだが、これが唯一の合理的な道ではない可能性は高い。たとえば、熱力学との整合性の要請は、統計物理の可能な定式化についての強い制約を与えるはずである。

[4]（残念ながら未だに多くの教科書に見られる）もっともナイーヴなエルゴード仮設では、我々がもたもたと測定を行っている間に、系の状態は目まぐるしく変化し、許されるほとんど全ての状態を訪れるとする。しかし、系が許されるほとんど全ての状態を訪れるのに必要な時間（エルゴード時間）は、多少複雑な系では、とてつもなく長く、このような議論は全く意味をなさない。当然ながら、エルゴード時間と、はるかに短い緩和時間を混乱してはいけない。この方向で納得のいく説明を作るためには、系が多くの自由度を持つことと、観測する物理量がマクロな量であることを取り入れたより現実的な（一般化された）エルゴード仮設の定式化が必要だと思われる。なお、数学におけるエルゴード定理や、エルゴード性を持つ力学系の研究は、統計物理の基礎とは無縁だが、魅力的で重要な研究テーマである。

という二つの方向から議論する。これらの議論は、普通の統計物理の教科書にはあまり見られないかも知れないが、決して特別なものではない。3 節の話題は数学者には極めてよく知られている事実を物理向けに翻訳したものであり、4 節の話題も標準的な説明をコンパクトにして少し解釈を変えた程度のものである。（5 節は、最近の研究 [2] の簡単な紹介である。）それでも、このような考察を少しずつ積み重ねることで、統計物理学の位置づけをより明確にし、将来の標準的な統計物理の導入の方法を模索していきたいと願っている[5]。

3　一回の観測から期待値が得られるのは何故か

確率で記述されるモデルでは、物理量の値は、場合によってでたらめに変化する。とすると、確率を用いる統計物理では、物理量の値についての確定的な予言はできないのだろうか？現実の物理系の測定では、必ず（誤差の範囲で）確定した値が得られるのだから、それでは好ましくない。

実は、たとえ確率モデルを用いていても、物理量のゆらぎが小さければ、一回の観測だけで確定した値が測定される。この節では、一般的な有限状態の確率論の枠組みで、この事実について説明する。

系の状態は $i = 1, 2, \ldots, N$ の N 通りで、状態 i が出現する確率は $p_i \ge 0$ だとする。確率は $\sum_{i=1}^{N} p_i = 1$ という条件を満たす。物理量 f の期待値は $\langle f \rangle = \sum_{i=1}^{N} f_i p_i$ である。カノニカル分布 (1), (2) は、この特別の場合である。

まず物理量 f の**ゆらぎ** (flucutuation) という大切な量を定義する。期待値 $\langle f \rangle$ は物理量 f の値だと素朴に考えられるかもしれないが、実際には、様々な状態が確率的に出現するのだから、f の値も様々である。実際の f の値が期待値 $\langle f \rangle$ からどの程度ずれているかは、ずれの二乗 $(f - \langle f \rangle)^2$ の期待値で表すことができるだろう。簡単な計算により

$$\langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 \tag{3}$$

となる。そこで、

$$\mathcal{F}[f] = \sqrt{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2} \tag{4}$$

を物理量 f のゆらぎと定義する。

すると、任意の正の数 ε に対して、

$$(|f - \langle f \rangle| \ge \varepsilon \text{ となる確率}) \le \left(\frac{\mathcal{F}[f]}{\varepsilon} \right)^2 \tag{5}$$

[5]私自身は、ここで展開する統計物理の基礎付けには「文化の香り」が欠落しているという不満を持っている。真にマクロな普遍的な構造である熱力学との論理的なつながりが希薄なことが不満の原因の一つである。私の当面の課題は、熱力学と統計物理の関係をより深く理解することであり、そのために、今はもっぱら熱力学の勉強と再構成に取り組んでいる [3]。

という **Chebyshev の不等式**が成立する[6]。

不等式 (5) の持っている物理的な意味を考えよう。定数 ε は任意なので、物理量 f を測る際の測定誤差に等しく取る。すると、 (5) に現れた「$|f-\langle f\rangle| \geq \varepsilon$ となる」という出来事は、「観測された f の値が (測定誤差の範囲で) 期待値 $\langle f\rangle$ とは一致しない」ということを指している。そして、不等式 (5) は「一致しない」確率が $(\mathcal{F}[f]/\varepsilon)^2$ 以下であることを保証している。もし、 f のゆらぎが測定誤差に比べて十分小さく、$(\mathcal{F}[f]/\varepsilon)^2 \ll 1$ が成り立つならば、f **をたった一回測定するだけで、(ほぼ) 確実に期待値 $\langle f\rangle$ と (測定誤差の範囲で) 等しい値が得られる**ことになる。確率的なモデルを使っているにも関わらず、f の測定結果について厳密でかつ確実な予言をすることができるのである。これこそが、統計物理学が実用になる本質的な理由である。

ゆらぎが小さいという条件 $(\mathcal{F}[f]/\varepsilon)^2 \ll 1$ はどの程度一般的に成り立つのだろうか。経験によれば、**大自由度の物理系のマクロな物理量 (つまり普通の装置で測定できる全ての量) の平衡状態でのゆらぎは非常に小さい**ことがわかっている。よって、**通常の物理量については、たった一回の測定を行いさえすれば、実質的には期待値と正確に等しい値が確実に観測される**と言い切ってよい。

なぜマクロな物理量のゆらぎが小さいかを一般的に議論する余裕はないので、簡単な例で、雰囲気だけをつかんでもらおう。全ての目の出る確率が $1/6$ という理想的なサイコロを N 個用意して、これらをいっせいに、かつ、互いに干渉し合わないように投げる。そして、出た目の値を全て合計し、 N で割って平均値を出す。この値を物理量 f とする。明らかに、 f の期待値はサイコロが一つの場合と同様に $\langle f\rangle = (1+2+3+4+5+6)/6 = 7/2$ である。ゆらぎの方は、簡単だがちょっと面倒な計算により、

$$\mathcal{F}[f] = \sqrt{\frac{35}{12N}} \tag{6}$$

となる。サイコロの個数が多くなると、ゆらぎはどんどん小さくなる。たとえばサイコロ 10^{24} 個を振るという大自由度の問題を考え、平均を 8 ケタの電卓で計算することを思って測定精度を $\varepsilon = 10^{-8}$ としよう。Chebyshev の不等式 (5) によれば、測定値が 3.5000000 と一致しない確率は $(35/12)\times 10^{-24}\times(10^8)^2 \sim 10^{-8}$ 以下ということになる[7]。つまり、十億回の実験の内一回程度例外がでるだけで、後は確実に 3.5000000 という測定値が得られるというわけだ。楽観的な物理学者としては、「サイコロを 10^{24} 個投げる実験を一回だけ行えば、確実に 7/2 が測定される」と結論してしまってよいだろう。

サイコロの例はあまりにも単純で人工的なので、統計物理学をある程度学ばれ

---

[6] これは、確率論ではもっとも基本的な関係の一つである。物理の教科書では、中心極限定理のような、ある意味で特殊化された (特殊化され過ぎて一般には実用にはならない) 強い結果を述べている割には、初歩的で、そのかわり汎用性に富む Chebysehv の不等式を議論していないものが多いのは納得できない。

[7] この例では中心極限定理をはじめとした、より強力な結果が証明できるが、我々の目的にはそのような強い結果は必要ない。

た読者のために、より現実的な例を定義抜きで挙げておこう。スピン N 個が互いに任意の相互作用をし合っている Ising 模型を考える。系全体の磁気モーメント M をスピンの個数 N で割った（スピン一つあたりの）磁化 $m = M/N$ は、系がどの程度磁石になっているかを表すとても大切な物理量である。系がカノニカル分布に従うとすると、磁化のゆらぎについて、

$$\mathcal{F}[m] = \sqrt{\frac{\chi}{N}} \tag{7}$$

という関係を示すことができる。ここで χ は磁化率と呼ばれる量で、臨界点以外では $N \to \infty$ でも有限の値を取る[8]。これは、まさに (6) とそっくりの形をしている。この場合にも N が十分大きければ（サイコロの場合と違って、現実の磁性体の中のスピンの個数は本当に大きな数である）、磁化 m をたった一回測定するだけで、期待値 $\langle m \rangle$ が得られることがわかる[9]。

最後に Chebyshev の不等式を証明しておこう。証明は驚くほど簡単である。f と ε を固定する。物理量 θ を

$$\theta_i = \begin{cases} 1, & |f_i - \langle f \rangle| \geq \varepsilon \text{ のとき} \\ 0, & |f_i - \langle f \rangle| < \varepsilon \text{ のとき} \end{cases} \tag{8}$$

により定義する。すると、(5) の左辺に現れる確率は、$\langle \theta \rangle$ と表すことができる。また、

$$\theta_i \leq \left(\frac{f_i - \langle f \rangle}{\varepsilon} \right)^2 \tag{9}$$

という不等式は θ の定義から直ちに示される。(9) の両辺を p_i を重みにして平均したものが、求める Chebyshev の不等式 (5) に他ならない。

4　カノニカル分布の導出 — 初等的な議論

カノニカル分布 (1) を導く作業に移ろう。ここでは量子力学的な系を扱い、ミクロカノニカル分布を明示的には用いずにカノニカル分布を導く初等的な筋書きを紹介する。ただし、量子力学の知識としては、「系の定常状態に番号を付けて指定することができる」程度のごく初歩的な事だけを用いる。私が知る限りでは、これはカノニカル分布を「導く」ためのもっとも能率的な論法の一つである[10]。

関心のある物理系（以下単に「系」と呼ぶ）の他に、それよりもはるかに大きな量子系を用意する。（図 1 参照。）大きな量子系は、系の温度を一定に保つ環境の役割をするので、「熱浴」と呼ぶ。系と熱浴をあわせたものは、外の世界とはエネルギーや物質のやりとりをしないとする。

[8] 臨界点でも通常は $\chi \leq N^{-1/d}$ が成り立ち、やはり N が大きいと $\mathcal{F}[m]$ は小さくなる。

[9] この例には、通常の中心極限定理は適用できない。Chyebyshev の不等式は、確率モデルの詳細によらずいつでも適用できる事に注意しよう。

[10] 私の統計物理の講義では、ここ二、三年はこの導入法を用いている。

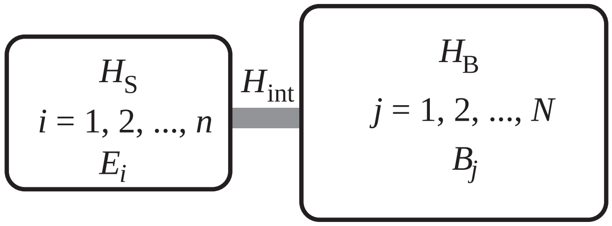

図 1: 注目する「系」とより大きな「熱浴」が弱く相互作用し合っている。平衡状態で「系」のふるまいに着目すると、カノニカル分布が見えてくる。

系の定常状態[11]に $i = 1, 2, \ldots, n$ 名前を付け、対応する固有エネルギーを E_i と呼ぶ。隣り合う固有エネルギー E_i の典型的な間隔を ΔE とする。同様に、熱浴の定常状態に $j = 1, 2, \ldots, N$ と名前を付け、対応する固有エネルギーを B_j と呼ぶ。隣り合う固有エネルギー B_j の典型的な間隔を ΔB とする。量子系の大きさはエネルギー準位の間隔に反映するので、系に比べて熱浴が大きいことから $\Delta E \gg \Delta B$ が成り立つ。

まず、系と熱浴は隣同士に並んではいるものの、両者の間に何の相互作用もないとする。このときには、系と熱浴を合わせた全系の定常状態は、(i, j) のように二つの数字の組で指定できる。系は状態 i を取り、熱浴は状態 j を取るということである。また、この際の全系のエネルギーは $E_i + B_j$ である。

このままでは、何も面白い事はおきないので、系と熱浴を接触させ、両者がわずかにエネルギーをやり取りできるようにする。相互作用のエネルギーの大きさを λ と書き、これが、

$$\Delta E \gg \lambda \gg \Delta B \tag{10}$$

という条件を満たすとする。

はじめ、全系はエネルギーが E_0 の状態にあるとする[12]。系と熱浴が相互作用しながら、全系が時間発展していく。十分に時間がたてば、全系はマクロな視点からは変化のおきない平衡状態に落ちつくだろう。平衡状態とは、長く複雑な時間発展の末に初期条件の影響が完全に失われた状況である。よって、**平衡状態を（ある瞬間に）ミクロな視点から見れば、系に許される典型的な量子状態が実現している**はずだ。しかし、典型的な状態を作り出すのは、（実験的にはたやすいだろうが）理論的には困難なことである。状態を選ぶ特定の手続きを決めてしまうと、往々にして選ばれた状態は少しも典型的ではなくなってしまうからである。この悩みを解決するために、次の仮定をおいて、確率の助けを借りる。

等重率の原理：マクロな量子系の典型的な状態の性質は、系に許されるあらゆる状態が等しい確率で現れるとした確率的なモデルで再現できる。

[11]系のハミルトニアンの固有状態のこと。

[12]全系のエネルギーが確定しているとするよりは、E_0 の近辺でばらついた値を取るとした方が自然である。そういう場合への拡張は自明なので、ここでは話を簡単にするために、全系のエネルギーが確定しているかのように議論する。より正確な意味付けについては、 5 節を参照。

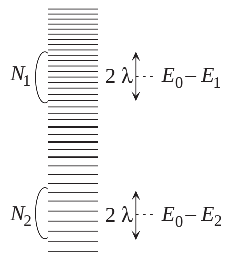

図 2: 条件 (13) を満たす熱浴のエネルギー準位の個数を N_i とする。この量が、カノニカル分布を生む鍵になる。

この段階では、等重率の原理は論理的な裏付けのない仮定である。しかし、典型的な状態を作り出すための処方箋としては、もっとも単純で人為的な要素のないものである事は確かだ。単純なものこそ真理に近いという精神からすれば、これはかなり有望な仮定である。

この単純素朴な仮定を設けさえすれば、カノニカル分布の公式 (1) を導くことができる。全系が外の世界から孤立しているので、エネルギー保存則が成り立ち、全系のエネルギーは常に E_0 である。よって許される状態 (i,j) はエネルギー保存の関係

$$E_0 = E_i + B_j + (\text{相互作用のエネルギー}) \tag{11}$$

を満たす必要がある。相互作用のエネルギーは $-\lambda$ と λ の間の値を取るとすれば、許される状態とは、

$$E_0 - \lambda \le E_i + B_j \le E_0 + \lambda \tag{12}$$

を満たすものといえる。等重率の原理を認めて、 (12) を満たす状態 (i,j) が全て同じ確率で出現するという確率モデルを考えよう[13]。

ここで $i = 1, 2, \ldots, n$ を一つ固定して、 (12) つまり、

$$E_0 - E_i - \lambda \le B_j \le E_0 - E_i + \lambda \tag{13}$$

を満たす熱浴の状態 j の個数を N_i と書くことにする。（図 2 参照。）(10) の条件があるから、 $N_i \gg 1$ である。条件 (12) を満たす (i,j) の総数は、 $N = \sum_{i=1}^{n} N_i$ である。等重率の原理により、許される N 個の状態の全てが $1/N$ の確率で現れる。すると、系が状態 i をとる確率は、

$$p_i = \frac{N_i}{N} = \frac{N_i}{\sum_{i'=1}^{n} N_{i'}} \tag{14}$$

となる。これで、カノニカル分布の導出の本質的なところは終わった。

[13] これは、全系のミクロカノニカル分布を考えるのとよく似ているが、微妙な違いはある。ここでは、全系の定常状態については考えていないこと、そして、（ミクロカノニカル分布には不可欠の）人為的なエネルギー幅を導入していないことが主要な相違点である。量子力学を前面に出した扱いの中で等重率の原理を如何に解釈するかという点については、 5 節を見よ。

N_i の性質をもう少し調べる。一般に、 $B-\delta/2$ と $B+\delta/2$ の間にある熱浴のエネルギー固有値 B_j の総数は $\rho(B)\delta+O(\delta^2)$ と書けるとしよう。関数 $\rho(B)$ は熱浴の**状態密度**と呼ばれる。これを用いれば、 (13) から、

$$N_i \simeq 2\lambda\rho(E_0-E_i) \tag{15}$$

と書ける。一般に大自由度の量子系では状態密度 $\rho(B)$ は B の急激な増加関数である。ここで、 $\log\rho(B)$ が Taylor 展開できると仮定して、

$$\log\rho(E_0-E_i) \simeq \log\rho(E_0)-\beta(E_0)E_i \tag{16}$$

とする。ただし、

$$\beta(E_0)=\left.\frac{d\log\rho(B)}{dB}\right|_{B=E_0} \tag{17}$$

である。(16) を指数の肩に上げると、

$$\rho(E_0-E_i) \simeq \rho(E_0)e^{-\beta(E_0)E_i} \tag{18}$$

のように書ける。これを (15) に代入し、その結果をさらに、 (14) に代入すれば、

$$p_i \simeq \frac{2\lambda\rho(E_0)e^{-\beta(E_0)E_i}}{\sum_{i'=1}^{n}2\lambda\rho(E_0)e^{-\beta(E_0)E_{i'}}}=\frac{e^{-\beta(E_0)E_i}}{\sum_{i'=1}^{n}e^{-\beta(E_0)E_{i'}}}=p_i^{(\beta(E_0))} \tag{19}$$

となり、求めるカノニカル分布 (1) が得られらた。

等重率の原理で確率を導入したのは、典型的な状態を作り出すための処方箋に過ぎなかったことを思いだそう。他方、こうして得られた確率モデルでマクロな物理量を測定すると、確実に期待値と同じ値が得られることが、 3 節の議論から保証される。これによって、確かに等重率の原理が典型的な状態を作るための処方箋として有効であったことがはっきりする。つまり、**前節での確率についての一般的な議論と、この節での等重率の原理についての考察の両方がそろって、はじめて、現実の系の解析にカノニカル分布を適用することが正当化される**のである。

5　カノニカル分布の導出 — 厳密な理論に向けて

量子力学の知識のある読者を想定して、等重率の原理とカノニカル分布の導出を純粋に量子力学の立場から眺め直してみたい [2]。

系を記述するハミルトニアンを H_{S} とし、規格化された固有状態を $|\Phi_i\rangle$ とする。また、熱浴のハミルトニアンを H_{B} とし、規格化された固有状態を $|\Psi_j\rangle$ とする。つまり、

$$H_{\mathrm{S}}|\Phi_i\rangle=E_i|\Phi_i\rangle,\quad H_{\mathrm{B}}|\Psi_j\rangle=B_j|\Psi_j\rangle \tag{20}$$

が成り立つ。相互作用のないときのハミルトニアンは $H_0 = H_\mathrm{S} + H_\mathrm{B}$ であり[14]、その固有状態は $|\Phi_i\rangle|\Psi_j\rangle$ であり、

$$H_0|\Phi_i\rangle|\Psi_j\rangle = (E_i + B_j)|\Phi_i\rangle|\Psi_j\rangle \tag{21}$$

が成り立つ。

実際に考えたい系のハミルトニアンは、

$$H = H_\mathrm{S} + H_\mathrm{B} + H_\mathrm{int} \tag{22}$$

のように、系と熱浴の相互作用 H_int の加わったものである。(図 1 参照。)全系のハミルトニアン H の規格化された固有状態を $|\Xi\rangle$ とする。つまり、 $H|\Xi\rangle = E|\Xi\rangle$ である。固有状態の組 $|\Phi_i\rangle$ $(i = 1, \ldots, n)$ と $|\Psi_j\rangle$ $(j = 1, \ldots, N)$ はそれぞれの状態空間の完全系をなすので、 $|\Xi\rangle$ を

$$|\Xi\rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{N} \xi_{i,j}|\Phi_i\rangle|\Psi_j\rangle \tag{23}$$

のように展開することができる。

係数 $\xi_{i,j}$ がどのように振る舞うかを知りたい。相互作用ハミルトニアン H_int の大きさ(固有値の絶対値の最大値)が λ 程度であることから、エネルギー保存則を考えれば、$|E - (E_i + B_j)| \gg \lambda$ のときには $\xi_{i,j}$ が非常に小さくなることがわかる[15]。

問題は、逆に $|E - (E_i + B_j)| \lesssim \lambda$ が成り立つ領域での $\xi_{i,j}$ の性質である。エネルギー保存則に基づく一般的な考察から、この範囲の (i, j) は (23) の展開に寄与し得ることはわかるが、実際にどのような (i, j) がどの程度寄与するかは具体的な問題に応じて変わってくる。一般的な結論を下すことはできない。しかし、ハミルトニアン H に特殊な対称性がなければ、**エネルギー的に許される状態はみなほぼ均等に展開 (23) に寄与する「民主主義的な」状況が実現される**のではないかと期待される[16]。そこで、次のような仮設を立てよう。

固有状態についての等重率の原理:一般的な相互作用ハミルトニアン H_int と一般的なエネルギー固有値 E について、対応する固有状態 $|\Xi\rangle$ の展開 (23) に現れる係数は、

$$|\xi_{i,j}| \sim \begin{cases} \text{ほぼ同程度の大きさ}, & |E - (E_i + B_j)| \lesssim \lambda \text{ のとき} \\ \text{無視できる}, & |E - (E_i + B_j)| \gtrsim \lambda \text{ のとき} \end{cases} \tag{24}$$

[14] 正しくは、 $H_0 = H_\mathrm{S} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes H_\mathrm{B}$ と書くべきである。

[15] この事実は簡単に証明できる。

[16] 仮に許される状態の内のごく一部だけの線形結合で作られた固有状態があったとする。すると、使われなかった状態の線形結合で作られる固有状態も必ず存在し、そのエネルギーは一つ目の固有状態のエネルギーに非常に近い。このような状況で、ハミルトニアンに一般的な弱い摂動が加えられると、エネルギーの近い二つの固有状態が混ざり合った新しい固有状態に再編成されるのが一般的である。(二準位系の摂動論を思い出そう。)つまり、「非民主主義的な」状況に一般的な摂動が加われば、「民主主義的な」状況に変化すると結論できそうである。

という性質を持つ。

この仮設は、 4 節の「等重率の原理」とは違って、純粋に量子力学の命題であることに注意したい。つまり、特定のモデルを決めれば、この仮設が成立しているかしていないかは、原理的には検証可能なのである[17]。かなり人工的ではあるが、任意の固有状態が上の条件を満たすような量子系の例 [2] も存在する[18]。以下では、固有状態についての等重率の原理が成り立つ場合に、そこから何が示されるかを見よう。

先ず、全系が固有状態 $|\Xi\rangle$ にあるときに、部分系が状態 i をとる確率を調べる。これは、状態 i への射影演算子 $P_i = (|\Phi_i\rangle\langle\Phi_i|) \otimes \mathbf{1}$ の $|\Xi\rangle$ での期待値である。規格化の条件 $\sum_{i',j}|\xi_{i',j}|^2 = 1$ に注意して、(24) を用いて評価すると、

$$\langle\Xi|P_i|\Xi\rangle = \frac{\sum_j |\xi_{i,j}|^2}{\sum_{i',j}|\xi_{i',j}|^2} \simeq \frac{N_i}{\sum_{i'} N_{i'}} \simeq p_i^{(\beta(E))} \tag{25}$$

となる。最後に (14) と (19) を使った。こうして、**全系が定常状態にあるときに、系が状態 i を取る確率はカノニカル分布で与えられる**ことがわかった。しかし、マクロな系がもともと定常状態にあるはずはないので、これだけではカノニカル分布が導かれた事にはならない。

時刻 0 に全系が規格化された状態 $|\Gamma\rangle$ にあったとしよう。この状態は平衡状態からはかけ離れているとしよう。エネルギー E の全系の規格化された定常状態を $|\Xi_E\rangle$ と書き、時刻 0 の状態を

$$|\Gamma\rangle = \sum_E \gamma_E |\Xi_E\rangle \tag{26}$$

のように展開する。ここでの和は全ての固有エネルギーについて取る[19]。全系がハミルトニアン H によって時間発展すると、時刻 t での全系の状態は、

$$|\Gamma(t)\rangle = e^{-iHt}|\Gamma\rangle = \sum_E \gamma_E\, e^{-iEt}|\Xi_E\rangle \tag{27}$$

となる。そこで時刻 t に系が状態 i にいる確率 $p_i(t)$ を評価してやると、

$$\begin{aligned} p_i(t) &= \langle\Gamma(t)|P_i|\Gamma(t)\rangle = \sum_{E,E'} \overline{\gamma_E}\,\gamma_{E'}\, e^{i(E-E')t}\langle\Gamma_E|P_i|\Gamma_{E'}\rangle \\ &= \sum_E |\gamma_E|^2\langle\Gamma_E|P_i|\Gamma_E\rangle + \sum_{E\neq E'} \overline{\gamma_E}\,\gamma_{E'}\, e^{i(E-E')t}\langle\Gamma_E|P_i|\Gamma_{E'}\rangle \end{aligned} \tag{28}$$

[17] この仮設の中で、「一般的な」ということばが極めて曖昧に用いられていることは正直に指摘しておきたい。量子系が、あるいは、その固有値が「一般的」であるということをどのようにして定式化するかは将来の課題である。これは、考えれば考えるほど、わからなくなる難問であり、あるいは、新たな「原理」を天下りに導入しなくては先に進めない点なのかもしれない。

[18] 残念ながら、具体的に「解ける」モデルで「固有状態についての等重率の原理」が検証できるものはほとんどないだろう。「解ける」モデルというのは、九分通り何らかの特殊な対称性を持っていて、そのためにこそ解けるのである。固有状態は、一般に対称性を厳しく反映した特殊な形をしていて、「民主主義的な」状況とはほど遠い様相を呈する。しかし、解けるモデルはあくまでも例外的で人工的な存在なので、この事実は、統計物理の基礎付けという観点からは問題ではない。

[19] エネルギー固有値に縮退はないと仮定している。

となる。最後に、和を $E,\, E'$ が等しい部分とそうでない部分に分けた。ここで、展開係数 γ_E は、あるエネルギー E_0 の近辺の非常に多くのエネルギー E についてほぼ等しい値を持つと仮定しよう[20]。すると、(28) の最右辺の第二項は非常に多くの項の和になる。しかも、これらの項には $e^{i(E-E')t}$ という位相因子がかかっている。時刻 t が十分に大きくなると、典型的な t では、この位相因子はばらばらの値を取るようになり、多くの項の和は干渉し合って打ち消し合うことが期待される。それが正しければ、(28) の右辺では第一項のみが生き残り、

$$p_i(t) \simeq \sum_E |\gamma_E|^2 \langle \Gamma_E | P_i | \Gamma_E \rangle \simeq \sum_E |\gamma_E|^2\, p_i^{(\beta(E))} \simeq p_i^{(\beta(E_0))} \tag{29}$$

となる。(25) の評価を用い、さらに、γ_E が E_0 のごく近傍だけで値を持つという仮定を用いた。こうして、γ_E についての仮定を満たすような任意の初期状態 $|\Gamma\rangle$ から出発すれば、**十分に長い（典型的な）時間の後には、系が状態 i を取る確率はカノニカル分布に従う**ことがわかった。

同様にして、同じ初期状態 $|\Gamma\rangle$ と十分に大きい（典型的な）t について、

$$\langle \Gamma(t) | A | \Gamma(t) \rangle \simeq \langle A \rangle_{\beta(E_0)} \tag{30}$$

という関係を、系のみに作用する任意の演算子 A について示すことができる。つまり、**十分に長い（典型的な）時間の後には、量子力学的な期待値はカノニカル分布による期待値と完全に一致する**のである。

ここでの議論は、かなり直観的で大ざっぱなものだったが、少なくとも一つのかなり人工的な例については、以上の議論が全て厳密に遂行できて、量子力学の時間発展と初期状態についての弱い条件だけからカノニカル分布を完全に導出することができる [2]。より現実的な系で、同様の結果を示すこと（あるいは示そうとしたときに遭遇する困難を分析すること）は、難しいが重要なこれからの課題である。

（たざき・はるあき、学習院大学理学部
hal.tasaki@gakushuin.ac.jp
http://www.gakushuin.ac.jp/~881791/）

参考文献

[1] 大野、田崎、東島「くりこみ理論の地平」、田崎「くりこみ群と普遍性」数理科学 1997 年 4 月号

田崎晴明、「普遍性と科学」（未出版、上記の私の www page にて公開）

[20] 言うまでもないが、初期条件についての何らかの仮定がなければ、カノニカル分布は決して得られない。ここでの仮定はかなり自然なものだと思う。

[2] H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **80**, 1373 (1998)

[3] 熱力学の再構成の試みについては、上記の私の www page を参照