

# 熱場ダイナミクスにおける拡張された量子距離 について

中川 弘一

星薬科大学 物理学研究室

## 概要

熱場ダイナミクス (TFD) を用いて, 任意の2つの熱力学的量子状態間の差分が如何にして記述可能であるかということについての研究がおこなわれた [1]. TFD は, 熱力学的量子状態自体に焦点を合わせることにより, 統計系を議論するための定式化をおこなう役割をする. この体系において, 熱力学的量子状態は熱力学的量子状態ベクトルによって表される. したがって, 2つの熱力学的量子状態の差分は, 関連する熱力学的量子状態ベクトルの内積を用いて明確に定義される. 文献 [1] では, 関連する2つの熱力学的量子状態の差を定量的に測定するための熱力学的量子距離  $D_{\text{tq}}$  が導入され, 典型的な応用例が示された. その結果, 熱力学的量子距離の概念には統計システムに関する多くの情報が含まれていることを明らかされ, 臨界指数や量子-古典クロスオーバーポイントなどのいくつかの特性パラメーターを取得することに役立つことが知られている [1]. 本稿では,  $D_{\text{tq}}$  の性質を再考し, 文献 [1] における量子-古典クロスオーバーに関する結果を再検討する.

# 1 序論

熱力学 (TFD) 形式 [2-6] では, 熱力学的量子状態は状態ベクトル  $|\Psi\rangle$  によって記述される. この熱力学的量子状態ベクトル  $|\Psi\rangle$  は, 元の Hilbert 空間とその同型空間 (チルダ空間) の直積によって定義される二重 Hilbert 空間に導入される. 特に, 元の Hilbert 空間がハミルトニアン  $\mathcal{H}$  の固有状態の完全系  $\{|n\rangle\}$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) によって定義される場合, チルダ空間は, その空間が元の空間と同型である基底  $\{|\tilde{n}\rangle\}$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) によっても定義される. したがって, 二重 Hilbert 空間の基底は  $\{|n\rangle \otimes |\tilde{n}\rangle\} \equiv \{|n, \tilde{n}\rangle\} = \{|\hat{n}\rangle\}$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) と示される. 上記の二重 Hilbert 空間では, 熱力学状態ベクトルは

$$|\Psi\rangle = \rho^{1/2}|I\rangle \quad (1)$$

と定義され, ここで,  $\rho$  は密度行列を表し,

$$|I\rangle := \sum_n |n, \tilde{n}\rangle \quad (2)$$

である.

例えば, 密度行列  $\rho$  が Gibbs 因子の場合,  $Z$  を分配関数として, 平衡系において,  $\rho = e^{-\beta\mathcal{H}}/Z$  となる. ここから後, パラメータ  $\beta$  は, 温度  $T$ , Boltzmann 定数  $k_B$  を用いた, 逆温度  $\beta = 1/(k_B T)$  とする. 一方, 非平衡状態を考えると, 密度行列は von Neumann 方程式 [16]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [\mathcal{H}, \rho(t)], \quad (3)$$

または, 散逸的 von Neumann 方程式 [17-20]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [\mathcal{H}, \rho(t)] - \epsilon(\rho(t) - \rho_{\text{eq}}) \quad (4)$$

によって得られる. ここで,  $\epsilon$  は散逸パラメータを表し,  $\rho_{\text{eq}}$  は平衡系の密度行列を表している. 上記の非平衡密度行列  $\rho(t)$  に基づき, TFD により非平衡系を取り扱うことが可能である [21-27]. (元のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  と同様に) 密度行列  $\rho$  は元の Hilbert 空間上のベクトル要素に作用することに注すべきである.

(1) と (2) 式において, ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  の固有状態  $\{|n\rangle\}$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) の完全系を用いたが, 一般表現定理 [28-30] により, 元の Hilbert 空間の完全系としては任意の完

全系を選ぶことができるため、熱力学的量子状態ベクトル  $|\Psi\rangle$  自体は基底の取り方によらない。したがって、熱力学的量子状態ベクトル  $|\Psi\rangle$  は、元の Hilbert 空間の任意の完全系  $\{|\alpha\rangle\}$  を使用して、

$$|\Psi\rangle = \rho^{1/2} \sum_{\alpha} |\alpha, \tilde{\alpha}\rangle \quad (5)$$

と定義される [28].

物理量  $Q$  の熱力学的期待値（熱平均）  $\langle Q \rangle = \text{Tr}(\rho Q)$  は

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi | Q | \Psi \rangle \quad (6)$$

で得られる。関係式 (6) の証明は次の通りである。(6) 式の右辺は

$$\begin{aligned} \langle \Psi | Q | \Psi \rangle &= \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \tilde{\alpha} | \langle \alpha | \rho^{1/2} Q \rho^{1/2} | \alpha' \rangle | \tilde{\alpha}' \rangle = \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha | \rho^{1/2} Q \rho^{1/2} | \alpha' \rangle \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha}' \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha | \rho^{1/2} Q \rho^{1/2} | \alpha' \rangle \delta_{\alpha, \alpha'} = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \rho^{1/2} Q \rho^{1/2} | \alpha \rangle \\ &= \text{Tr}(\rho^{1/2} Q \rho^{1/2}) = \text{Tr}(\rho Q) \end{aligned} \quad (7)$$

となり、関係式 (6) が証明された。自明なことではあるが、 $Q = 1$  の場合には、 $\langle \Psi | \Psi \rangle = \text{Tr} \rho$  となる。上記の導出でも使われたように、元の Hilbert 空間上で定義された作用素はチルダ Hilbert 空間上の要素には作用しない。このような状況は、チルダ空間上の単位作用素を  $\tilde{\mathbf{1}}$  として、作用素  $Q$  と  $\mathcal{H}$  を数学的な記述  $Q \otimes \tilde{\mathbf{1}}$  と  $\mathcal{H} \otimes \tilde{\mathbf{1}}$  で表すとより明確に見て取ることができる。

実際、これらの TFD の機能は、密度行列繰り込み群法（density matrix renormalization group method, DMRG）[7-9] やマルチスケールエンタングルメントくりこみ群法（multiscale entanglement renormalization ansatz, MERA）[10] などの基底状態の探索アルゴリズムを有限温度に拡張する際に役立つことが知られている。別の例として、TFD を用いて量子エンタングルメントの熱力学的特性が明らかにされた [11, 12]。特に、1986 年に M. Suzuki が示したように [13]、TFD の上記の利点（熱力学的量子状態自体に直接焦点を当てる）が、共鳴原子価結合（resonating valence bond, RVB）状態の研究に利用され、実験結果 [14, 15] を説明する際にも役立ったことが報告されている。

上記の説明で示したように、TFD は有限温度での熱力学的量子状態を記述するのに適している。一方、TFD の概念では、状態遷移の議論はまだ十分に研究されていない。し

かし、最近、非平衡統計物理学を明らかにするために、状態遷移を理解することが益々重要になっている。したがって、次節以降では、2つの任意の熱力学的量子状態ベクトル間の差を測定するために、より単純な指標として、熱力学的量子距離を導入する。このとき、ゼロ温度で2つの量子状態を比較するためのよく知られた尺度である量子距離と忠実度を参考にする。ここでは、TFDを使用して有限温度システムへ量子距離を拡張し、それを「熱力学的量子距離」と呼ぶ。さらに、典型的な現象の例に熱力学的量子距離を適用する。

次の節では、この研究の基本概念になる、ゼロ温度における量子距離の概念について説明する。第3節では、TFDの一般的な形式での熱力学的量子距離を紹介する。第4節では、準平衡熱力学的プロセスに沿った状態遷移に関する多くの情報が熱力学的量子距離に含まれることを示すために、熱力学的量子距離を量子-古典クロスオーバー現象に適用し、その結果について考察する。第5節はまとめと議論に当てる。

## 2 量子距離

ここでは、任意の2つの熱力学的量子状態の違いを説明するための有用なパラメーター、つまり「量子距離」をTFDの定式化の中に導入する。

ゼロ温度での2つの量子状態の違いを明らかにするために量子距離が導入された [31]。量子力学の体系において、量子状態は状態ベクトル  $|\psi\rangle$  で記述される。この状態ベクトルは系のサイズ、ポテンシャル・スケール、外場などのような力学パラメータ  $x$  の関数になっている。その力学パラメータを  $x \rightarrow x+dx$  と変化させると、状態ベクトル  $|\psi(x)\rangle$  は  $|\psi(x+dx)\rangle$  に変化する。2つの量子状態  $|\psi(x)\rangle$  と  $|\psi(x+dx)\rangle$  との差分は内積  $F \equiv |\langle\psi(x)|\psi(x+dx)\rangle|$  により特徴づけられ、このパラメータ  $F$  は「忠実度」とよばれている [32,33]。多くの場合、量子距離  $D_q$  は、この忠実度  $F$  を用いて、

$$D_q = 1 - F^2 \quad (8)$$

と定義される。この定義からわかるように、状態が変化しなければ ( $F = 1$ )、量子距離  $D_q$  は最小値0をとる。一方、 $F = 0$ を満たす位に2つの状態が異なる場合には、量子距離  $D_q$  は最大値1をとる。この量子距離は2つの量子状態を比較するとき、便利なツールとなる。この研究において、この量子距離の定義を2つの熱力学的量子状態の間の距離

に拡張する。この拡張された距離は、第3節で説明されるように、2つの熱力学的量子状態を比較することを可能にする。

同様の距離が Bures, Helstrom および Wootters によって与えられた（それは、量子情報幾何学の分野で「Bures 距離」または「Helstrom 距離」と呼ばれる）[34–36]。それは、量子密度行列  $\rho$  を用いて、

$$D_{\text{Bures}} = 2 \left( 1 - \sqrt{\text{Tr} [\rho^{1/2}(x)\rho(x+dx)\rho^{1/2}(x)]} \right) \quad (9)$$

と定義された。後の節で示される方法と同様の方法で、Bures 距離を有限温度系に拡張することも可能であるが、その定義から典型的な統計系を扱うと非常に複雑になるため、ここでは、量子距離として  $D_q$  の定義式 (8) を主に考える。

### 3 一般化された2つの熱力学的量子状態間の差分

前節で示したように、熱力学的量子状態ベクトル  $|\Psi\rangle$  は、有限温度状態でも熱力学的量子状態を直接記述する。この機能に基づき、TFD のスキーム内で有限温度での状態の差分を説明しようとする。この目的のために、拡張された量子距離に対応する「熱力学的量子距離」

$$D_{\text{tq}} = 1 - |\langle \Psi(x) | \Psi(x+dx) \rangle|^2 \quad (10)$$

を導入する。ここで、パラメータ  $x$  は、ハミルトニアンに含まれている（外場のような）力学的パラメータだけではなく、温度のような熱力学的パラメータも表している。熱力学的量子距離  $D_{\text{tq}}$  をゼロ温度の場合に適用すると、それは量子距離  $D_q$  と等しくなり、つまり、 $D_{\text{tq}}(T=0) = D_q$  である。

熱力学的量子状態ベクトル  $|\Psi(x)\rangle$  は、(5) 式を用いて、

$$|\Psi(x)\rangle = \sum_{\alpha} \rho^{1/2}(x) |\alpha, \tilde{\alpha}\rangle \quad (11)$$

と得られる。パラメータ  $x$  は密度行列  $\rho(x)$  に含まれているが、基底  $\{|\alpha, \tilde{\alpha}\rangle\}$  には含まれていない。パラメータ  $x$  が  $x+dx$  に変化すると、熱力学的量子状態ベクトルは  $|\Psi(x)\rangle \rightarrow |\Psi(x+dx)\rangle$  と変化する。したがって、 $|\Psi(x+dx)\rangle$  は  $dx$  の2次のオーダーまでで

$$|\Psi(x+dx)\rangle = |\Psi(x)\rangle + \frac{\partial |\Psi(x)\rangle}{\partial x} dx + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 |\Psi(x)\rangle}{\partial x^2} dx^2 \quad (12)$$

と展開できる。したがって、(5)式を用いを用いると、熱力学的量子距離は

$$D_{\text{tq}} = -2\text{Re}[\langle\Psi(x)|\Psi'(x)\rangle]dx - (|\langle\Psi(x)|\Psi'(x)\rangle|^2 + \text{Re}[\langle\Psi(x)|\Psi''(x)\rangle]) dx^2 \quad (13)$$

と得られ、このとき、 $|\Psi'(x)\rangle = \frac{\partial|\Psi(x)\rangle}{\partial x}$  および  $|\Psi''(x)\rangle = \frac{\partial^2|\Psi(x)\rangle}{\partial x^2}$  である。またここで、 $\text{Re}[\dots]$  は  $(\dots)$  の実部を表している。この一般的な熱力学的量子距離は熱力学的量子状態  $|\Psi(x)\rangle$  と  $|\Psi(x+dx)\rangle$  の間の差分を表している。

準平衡過程を扱う場合、密度行列は規格化条件  $\langle\Psi(x)|\Psi(x)\rangle = \text{Tr}\rho(x) = 1$  を満たす。そのとき、この規格化条件の微分から条件

$$\text{Re}[\langle\Psi(x)|\Psi'(x)\rangle] = 0 \quad (14)$$

が導かれる。一方、 $\langle\Psi(x)|\Psi'(x)\rangle$  がエントロピーの微分の期待値で表されることより、 $\langle\Psi(x)|\Psi'(x)\rangle$  の項は準平衡条件の下である実数であることが分かる。したがって、(14)式とこの事実により、 $\langle\Psi(x)|\Psi'(x)\rangle = 0$  であることが断定され、つまり、熱力学的量子距離は

$$D_{\text{tq}}^{(\text{eq})} = \langle\Psi'(x)|\Psi'(x)\rangle dx^2 \quad (15)$$

として得られる。このとき、(14)式の2階微分から

$$\text{Re}[\langle\Psi(x)|\Psi''(x)\rangle] = -\langle\Psi'(x)|\Psi'(x)\rangle \quad (16)$$

となることを用いた。

(15)式におけるこれらの熱力学的量子距離の表現はいくつかの典型的な系に適用可能であり、状態遷移  $|\Psi(x)\rangle \rightarrow |\Psi(x+dx)\rangle$  に関する多くの情報を包摂している。次の節に、上記の定式化の応用例を示した。

## 4 量子-古典クロスオーバーの例

この節では、熱力学的量子距離  $D_{\text{tq}}$  の量子-古典クロスオーバーへの典型的な応用例を示す。1986年、有限サイズのフラストレートした系における RVB 状態が M. Suzuki によって研究された [13]。そのハミルトニアンは、スピン 1/2 の Heisenberg スピン  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  および  $\sigma_3$  を用いて、

$$\mathcal{H} = -J(\sigma_1 \cdot \sigma_2 + \sigma_2 \cdot \sigma_3 + \sigma_3 \cdot \sigma_1) \quad (17)$$

と仮定される. ここでは,  $\sigma_j$  のスピン状態 (アップ/ダウン) は  $|\sigma_j\rangle = \{|+\rangle_j$  または  $|-\rangle_j\}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) で表す. 相互作用  $J$  は反強磁性体模型に対して負であるとする. 先行研究 [13] から, 温度  $T$  における熱力学的量子状態ベクトルは TFD により,

$$|\Psi(T)\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}(3\cosh 3K - \sinh 3K - 2)} \left[ e^{-3|K|/2}|I\rangle + 4\sinh\left(\frac{3|K|}{2}\right)|\text{RVB}\rangle \right] \quad (18)$$

と考えられ<sup>1</sup>, ここで,  $K$ ,  $|I\rangle$  および  $|\text{RVB}\rangle$  はそれぞれ,  $K = -\beta|J|$ ,

$$\begin{aligned} |I\rangle &= |+, \tilde{+}\rangle_1 |+, \tilde{+}\rangle_2 |+, \tilde{+}\rangle_3 + |-, \tilde{-}\rangle_1 |+, \tilde{+}\rangle_2 |+, \tilde{+}\rangle_3 + \dots \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \sum_{\sigma_3=\pm 1} |\sigma_1, \tilde{\sigma}_1\rangle |\sigma_2, \tilde{\sigma}_2\rangle |\sigma_3, \tilde{\sigma}_3\rangle \end{aligned} \quad (19)$$

および

$$|\text{RVB}\rangle = \frac{1}{3} (|\hat{s}\rangle_{12}|I\rangle_3 + |\hat{s}\rangle_{23}|I\rangle_1 + |\hat{s}\rangle_{31}|I\rangle_2) \quad (20)$$

と定義されている. (20) において,  $|\hat{s}\rangle_{ij}$  は,

$$|\hat{s}\rangle_{ij} \equiv |s\rangle_{ij} |\tilde{s}\rangle_{ij} \quad \text{および} \quad |s\rangle_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, -\rangle_{ij} - |-, +\rangle_{ij}) \quad (21)$$

のような二重 Hilbert 空間における  $\sigma_i$  と  $\sigma_j$  の間の一重項対を示し, 一方  $|I\rangle_k$  ( $k \neq i, j$ ) は,

$$|I\rangle_k = |+, \tilde{+}\rangle_k + |-, \tilde{-}\rangle_k \quad (22)$$

のようなエンタングルしていないスピン状態を示す. これ等の定義から, 明らかに  $\langle\Psi(T)|\Psi(T)\rangle = 1$  であることが確認できる.

状態  $|\text{RVB}\rangle$  は, 一重項対が基底状態において共鳴していることを示していて, つまり低温極限で状態ベクトルが

$$|\Psi(T)\rangle \xrightarrow{T \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2}} |\text{RVB}\rangle \quad (23)$$

となることである. この  $|\text{RVB}\rangle$  はエンタングルした状態から構成されているので, 本質的に量子状態である. 一方, 高温極限において状態ベクトルは

$$|\Psi(T)\rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\sqrt{2}} |I\rangle \quad (24)$$

<sup>1</sup> [1] において採用している熱力学的量子状態ベクトル

$$|\Psi(T)\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}\cosh 3K} \left[ e^{-3|K|/2}|I\rangle + 4\sinh\left(\frac{3|K|}{2}\right)|\text{RVB}\rangle \right]$$

は規格化されてないため, 以下の議論を進めるためには不適當である. また, [1] で結果として得られた量子-古典クロスオーバー・ポイントの値  $T \equiv T_{q/c} \simeq 1.5|J|/k_B$  も正確ではない.

となり、スピンはランダムな状態をとる。この高温の状態は古典的状态と分類することができる。そのため、有限温度の点として量子-古典クロスオーバー・ポイントが存在することが確認できる。上の議論から容易に予想できる通り、高温領域では古典的状态  $|I\rangle$  が支配的になる一方、低温領域では  $|RVB\rangle$  の性質が支配的になるため、状態の振舞はクロスオーバー・ポイントの周りで激烈に変化する。したがって、 $|\Psi(T)\rangle$  と  $|\Psi(T + \Delta T)\rangle$  の差分は微小定数  $\Delta T$  に対しクロスオーバー・ポイント近傍で最大値をとる。これらの動機をもって、状態ベクトル (18) に対し (15) によって記述される熱力学的量子距離について考察し、それを用いてクロスオーバー・ポイントを導出する。結果として、熱力学的量子距離

$$D_{\text{tq}}(T, \Delta T) = \langle \Psi'(T) | \Psi'(T) \rangle \Delta T^2 = \frac{9k_{\text{B}}^2}{J^2} \frac{K^4}{(2 - 3 \cosh 3K + \sinh 3K)^2} \Delta T^2 \quad (25)$$

が得られる。したがって、微小定数  $\Delta T$  に対し対する熱力学的量子状態の差分  $D_{\text{tq}}(T, \Delta T)$  は量子-古典クロスオーバー・ポイントとなるべき点  $T \equiv T_{\text{q/c}} \simeq 2.1|J|/k_{\text{B}}$  において最大値をとる (図 1 参照)。この見積もられた量子-古典クロスオーバー・ポイント  $T \equiv T_{\text{q/c}}$  は以前の研究 [1, 13-15] と関係があることが知られている。

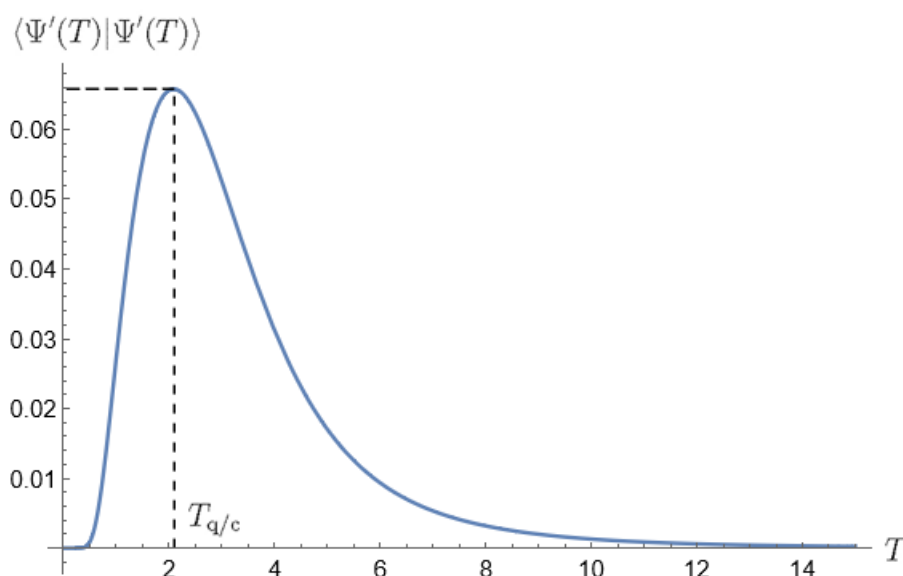


図 1:  $|J| = k_{\text{B}}$  の場合の量子-古典クロスオーバー・ポイント  $T \equiv T_{\text{q/c}}$  近傍における、微小定数  $\Delta T$  に対し対する熱力学的量子状態の差分  $D_{\text{tq}}(T, \Delta T)$  の係数  $\langle \Psi'(T) | \Psi'(T) \rangle$  の振舞.

上記の例から分かるように、熱力学的量子距離は熱力学的量子状態に関する多くの情報



をもたらす、有限温度の場合においてもパラメータに沿った状態の比較をする上で便利な量である。さらに、その性質から、臨界指数やクロスオーバー・ポイントのような平衡系の特徴的な条件やパラメータを検出することができる。

## 5 まとめと議論

本研究では、熱場ダイナミクスに基づいて有限温度状態に適用するために、量子距離を拡張した「熱力学的量子距離」と呼ばれる拡張量子距離は、いくつかの典型的な系に適用されている。このように、有限温度でのそのような系の特性パラメータは、熱力学的量子距離を使用して取得できることが明らかになった。特に、熱力学的量子距離が臨界指数や平衡系の量子-古典クロスオーバー・ポイントの典型的な特性を与えることを再確認した。

熱力学的量子距離  $D_{\text{tq}}$  を使用して状態の違いを研究する現在の方法は、多くの種類の非平衡システムに適用できると推察される。もちろん、内部エネルギー、エントロピーなどのパラメータ  $Q$  の熱力学的観測量  $\langle Q \rangle$  によって、2つの異なる状態を比較することもできるであろう。しかし、そのような観測可能量を状態の測定に適用すると、観測可能量  $Q$  の必然的な特徴に依存するであろう。例えば、平衡近傍ではエントロピーが大きくなると、自由エネルギーが小さくなる。TFD 状態ベクトル自体に焦点を当てた現在の方法では、熱力学的量子距離を体系的に扱うことができるので、この観点からは、非平衡システムまたはより複雑な平衡システムを研究するためのさらなる議論に役立つ可能性があることが [1] において示唆された。

また、ここで紹介した手法と熱力学的情報幾何学との関係についても論じられている [39–43]。それによると、ここで紹介した熱力学的量子距離は、より高次元のパラメータ空間に拡張できる可能性がある。高次元のパラメータ空間では、関連するパラメータを  $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3, \dots)$  として設定し、対応する熱力学的量子状態を  $|\Psi(\mathbf{x})\rangle$  ように設定することができる。拡張された熱力学的量子状態を  $x^1, x^2, x^3, \dots$  に関して2次まで拡張し、熱力学的量子距離を  $D_{\text{tq}} = 1 - |\langle \Psi(\mathbf{x}) | \Psi(\mathbf{x} + d\mathbf{x}) \rangle|^2$  と定義すると、条件  $\langle \Psi(\mathbf{x}) | \partial_\mu \Psi(\mathbf{x} + d\mathbf{x}) \rangle = 0$ , ( $\mu = 1, 2, 3, \dots$ ) によって記述される準平衡過程に対し、Einstein の和規則を用いて、

$$D_{\text{tq}} = \langle \partial_\mu \Psi(\mathbf{x}) | \partial_\nu \Psi(\mathbf{x}) \rangle dx^\mu dx^\nu \quad (26)$$

と表される. Zubarev のエン트로ピー演算子を  $\gamma(\mathbf{x}) := -k_B \log \rho(\mathbf{x})$  と定義すると,

$$|\partial_\nu \Psi(\mathbf{x})\rangle = -\frac{1}{2k_B} \sum_\alpha \int_0^1 d\lambda e^{(\lambda-1)\gamma(\mathbf{x})/(2k_B)} \frac{\partial \gamma(\mathbf{x})}{\partial x^\nu} e^{-\lambda\gamma(\mathbf{x})/(2k_B)} |\alpha, \tilde{\alpha}\rangle \quad (27)$$

により, 熱力学的量子距離は

$$D_{\text{tq}} = \frac{1}{4k_B} \text{Tr} \left[ \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \rho(\mathbf{x}) e^{\lambda\mathcal{H}} \frac{\partial \gamma(\mathbf{x})}{\partial x^\mu} e^{-\lambda\mathcal{H}} \frac{\partial \gamma(\mathbf{x})}{\partial x^\nu} \right] dx^\mu dx^\nu \equiv \frac{1}{4k_B} \langle \partial_\mu \gamma(\mathbf{x}); \partial_\nu \gamma(\mathbf{x}) \rangle dx^\mu dx^\nu \quad (28)$$

と表される. このとき,  $\frac{1}{k_B} \langle \partial_\mu \gamma(\mathbf{x}); \partial_\nu \gamma(\mathbf{x}) \rangle$  は量子統計力学においてカノニカル相関とよばれる量であり, 明らかに,  $\langle \partial_\mu \gamma(\mathbf{x}); \partial_\nu \gamma(\mathbf{x}) \rangle = \langle \partial_\nu \gamma(\mathbf{x}); \partial_\mu \gamma(\mathbf{x}) \rangle$  が成り立つ. 一方, この量は, 甘利らによって導入された情報幾何学 [39] における, Bogolivbov-Kudo-Mori(BKM) 計量テンソル  $g_{\mu\nu} = \frac{1}{k_B} \langle \partial_\nu \partial_\mu \gamma(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{k_B} \langle \partial_\mu \gamma(\mathbf{x}); \partial_\nu \gamma(\mathbf{x}) \rangle$  としても知られている. したがって, この研究は, TFD の概念が平衡熱力学に適用される情報幾何学を導き出すことも示唆している. さらに, TFD 法は第 1 節で説明したように非平衡系にも適用できるため, 熱力学的量子状態に基づく熱力学的量子距離を非平衡系に対してもより広く使用できることが示唆されているが, 詳しい理解は今後の課題となるであろう.

## 参考文献

- [1] Y. Hashizume, M. Suzuki, T. Nakajima, and S. Okamura, *Physica A*. 522 (2019) 1.
- [2] U. Fano, *Rev. Mod. Phys A* 42 (1957), 74.
- [3] I. Prigogine, C. George, F. Henin and L. Rosenfeld, *Chem. Scripta* 4 (1973), 5.
- [4] Y. Takahashi and H. Umezawa, *Collect. Phenom.* 2 (1975), 55; H. Umezawa, H. Matsumoto and M. Tachiki, “Thermo Field Dynamics and Condensed States” (North-Holland, Amsterdam, 1982).
- [5] M. Suzuki, in: H. Ezawa, S. Kamefuchi (Eds.), “Progress in Quantum Field Theory”, Chapter 10 (Elsevier, 1986).
- [6] H. Umezawa, “Advanced Field Theory — Micro, Macro, and Thermal Physics”, (AIP publishing, 1993).

- [7] A. E. Feiguin, and S. R. White, Phys. Rev. B 72 (2005) 220401.
- [8] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 220405, ibid 101 (2008) 110501.
- [9] G. Evenbly, and G. Vidal, Phys. Rev. B 79 (2009) 144108 .
- [10] H. Matsueda, M. Ishihara and Y. Hashizume, Phys. Rev. D 87 (2013) 066002.
- [11] Y. Hashizume, and M. Suzuki, Physica A 392 (2013) 3518.
- [12] K. Nakagawa, Prog. Theor. Exp. Phys. 2015 (2015) 021A01.
- [13] M. Suzuki, J. Stat. Phys. 42 (1986) 1047.
- [14] K. Hirakawa, H. Ikeda, H. Kadowaki, and K. Ubukoshi, J. Phys. Soc. Jpn. 52 (1983) 2882.
- [15] K. Hirakawa, H. Kadowaki, and K. Ubukoshi, J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 3526.
- [16] H. P. Breuer, and F. Petruccione “The Theory of Open Quantum Systems” (Oxford University Press, 2002).
- [17] G. Lindblad, Commun. Math. Phys. 40 (1975) 147.
- [18] V. Gorini, A. Kossakowski and E. C. G. Sudarshan, J.Math.Phys.17 (1976) 821.
- [19] S. G. Schirmer and A. I. Solomon, Phys. Rev. A, 70 (2004) 022107.
- [20] M. Suzuki, Physica A. 390 (2011) 1904.
- [21] Y. Kuwahara, Y. Nakamura, and Y. Yamanaka, Phys. Lett. A 377 (2013) 3102.
- [22] Y. Hashizume, M. Suzuki, and S. Okamura, Physica A 419 (2015) 506.
- [23] T. Tominaga, M. Ban, T. Arimitsu, J. Pradko and H. Umezawa, Physica 149A (1988) 26.
- [24] Y. Nakamura and Y. Yamanaka, Ann. Phys. 331 (2013) 51.

- [25] Y. Nakamura, Y. Kuwahara, and Y. Yamanaka, JPS Conference Proceedings 1 (2014) 012098.
- [26] M. Schmutz, Z. Phys. B 30 (1978) 97.
- [27] T. Arimitsu and H. Umezawa, Prog. Theor. Phys. 74 (1985) 429.
- [28] M. Suzuki, J. Phys. Soc. Japan, 54 (1985) 4483.
- [29] M. Suzuki, Int. J. Mod. Phys. B, 5 (1991) 1821.
- [30] M. Suzuki, in: L. Accardi, W. Freundberg, M. Ohya (Eds.), PQ-QP, QBIC, (World Scientific, 2008, Singapore).
- [31] A. Gilchrist, N. K. Langford, and M. A. Nielsen, Phys. Rev. A, 71 (2005) 062310.
- [32] C. A. Fuchs, C. M. Caves, Phys. Rev. Lett., 73 (1994) 3047.
- [33] R. Jozsa, Journal of Modern Optics., 41 (1994) 2315.
- [34] D. Bures, Trans. Am. Math. Soc. 135 (1969) 199.
- [35] C. W. Helstrom, Phys. Lett. A 25 (1967) 101.
- [36] W. K. Wootters, Phys. Rev. D, 23 (1981) 357.
- [37] F. Schütz, P. Kopietz, and M. Kollar, Eur. Phys. J. B, 41 (2004) 557.
- [38] Qing-feng Sun, and X. C. Xie, Phys. Rev. B, 72 (2005) 245305.
- [39] S. Amari, Ann. Stat. 10 (1982) 357.
- [40] C. R. Rao, Bull. Calcutta Math. Soc. 37 (1945) 81.
- [41] F. Weinhold, J. Chem. Phys. 63 (1975) 2479, *ibid* 2484, 2488, 2496, and 65 (1976) 559.
- [42] G. Ruppeiner, Phys. Rev. A, 20 (1979) 1608.
- [43] H. Dimov, S. Mladenov, R. C. Rashkov, and T. Vetsov, Phys. Rev. D 96 (2017) 126004.