DEPARTMENT OF PHYSICS
OSAKA IMPERIAL UNIVERSITY.

DATE June 13 1955
NO. 1

統計力学に~~於ける非~~可逆性について.

~~Entropy in ⓒ~~

Irreversibly Property of Quantum Mechanical Ensemble.

§1. Introduction

~~In statistical mechanics~~ The dynamical system treated in statistical mechanics has so ~~many~~ large degrees of freedom as we can not usually determine in which ~~state~~ microscopic state it is.

Quantum Mechanicsに於ては systemの stateは wave function Ψ によつてあらはされる. 而して それは一般に discrete 又は continuous な. 式は無限を含む. ~~eigen~~ 互ひに orthogonal normalized eigenfunctions の complete system によつて expand 出来る. 簡単の為め、かゝる orthogonal, normalized eigenfunctionsは discrete でしかも有限個しかないとする.

そこで Ψ を任意の normalized wave function. $\Psi_1, \Psi_2 \cdots \Psi_l$ を eigenfs とすると,

$$\Psi = \sum_{n=1}^{l} c_n \Psi_n$$

~~Systemがどんな stateにあるかわからない時には、一つの Ψ をとるわけにいかない. それは可能な~~

この場合 wave functionは一般に timeを含む. eigenfの方は timeをふくまぬとして. C_n の~~…~~みが time に depend するとしておく.

すると systemの任意の quantity x の平均値は

物理的に意味のない

2 wave function ψ は arbitrary phase をふくんでゐるが ρ_{mn} をつくると それは compensateしてなくなる. 即ち constant phase 丈異なる wave function から作った density matrix ρ は常に同じになる.

さて systemが どんな state にあるか わからぬ場合には, ~~一つの system~~ 可能な色んな state について平均せねばならぬ. そのかはりに仮定上 我々は 同種の多数の system の ensemble を考へ, それらが夫々, 例へば $\psi^{(1)}\,\psi^{(2)}\cdots\cdots\psi^{(N)}$ なる state にあるとする. i 番目の system についての x の平均値は

$$\overline{x^{(i)}} = \int \tilde{\psi}^{(i)} x\, \psi^{(i)} d\tau$$

今, $\psi^{(i)} = \sum_{n=1}^{l} c_n^{(i)} \psi_n$ とすると.

$$\overline{x^{(i)}} = \sum_{mn} \tilde{c}_m^{(i)} x_{mn} c_n^{(i)}$$

$$\cancel{= \rho^{i}_{nm} = D}$$

従って ensembleについての x の平均値は

$$\overline{x} = \frac{1}{N}\sum_i \overline{x^{(i)}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{mn} \tilde{c}_m^{(i)} x_{mn} c_n^{(i)}$$

$$= D(x\rho)$$

となる. 但し, $\rho_{nm} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \tilde{c}_m^{(i)} c_n^{(i)}$

DEPARTMENT OF PHYSICS
OSAKA IMPERIAL UNIVERSITY.

$$\bar{x} = \int \tilde{\psi}\, x\, \psi\, d\tau$$
$$= \sum_{m,n=1}^{l} \tilde{c}_m x_{mn} c_n$$

で与へられる。但し、

$$x_{mn} = \int \tilde{\psi}_m x\, \psi_n\, d\tau$$

~~system がどういふ状態にあるかわからない場合には、同様な system の ensemble~~

$\tilde{c}_m, c_n$ からして、

$$\rho_{nm} = \tilde{c}_m c_n$$

を matrix ~~とする~~ element とする ~~matrix~~ density matrix ρ をつくると上式は、

$$\bar{x} = \sum_m (x\rho)_{mm}$$
$$\text{or} = \sum_n (\rho x)_{nn}$$

とかける。即ち、

$$\bar{x} = D(x\rho) = D(\rho x)$$
$$= \mathrm{Spur}(x\rho) = \mathrm{Spur}(\rho x).$$

故に任意の量の平均値を知るには、~~expansion~~ ψ なる wave function 又は $c_1, c_2 \dots c_l$ なる expansion の coeffi. を知る必要はなく、$\rho_{nm} = \tilde{c}_m c_n$ なる ~~積~~ l^2 個の量を知ればよい。

$$i\hbar\,\rho(dt) = \left(1 \pm \frac{i}{\hbar}H\,dt\right)\rho(0)\left(1 + \frac{i}{\hbar}H\,dt\right)$$

$$i\hbar\,\rho(dt) = i\hbar\rho(0) + H_{dt}\rho(0) - \rho(0)H\,dt$$

で ρ は ρ_{nm} を element とする ensemble の density matrix である。

この density matrix の各 element の time rate of change は Dirac の証明した様に

$$i\hbar\frac{\partial\rho_{nm}}{\partial t} = -(\rho H - H\rho)_{nm}$$

or $$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = -(\rho H - H\rho)$$

で与へられる。

但し、H は system の Hamiltonian である。従って H が time を explicit にふくんでゐないなら ~~これから~~

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\cdot\rho(0)\cdot e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$$

となる。

これからして先 ρ の任意函数の diagonal sum は time と共に変化しないことを証しうる。

~~何故~~ 何故: ρ の任意函数 $F(\rho)$ の time t における値、

$$F(\rho(t)) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}F(\rho(0))e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$$

である。

$$\therefore\quad D\{F(\rho(t))\} = D\{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}F(\rho(0))e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\}$$
$$= D\{e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\cdot F(\rho(0))\} = D\{F(\rho(0))\}$$

†

Q. E. D.

D(ρ)は~~来が~~ time 的には変らず従って

ならぬ 然らば、又

$$W = D(\rho \log \rho)$$

で define される量を考へて見よう。之は system が外部と interaction をやらず、~~H ... Hamiltonian~~ ない限りは time と共に増減しない。

しからば、~~外部~~ 第二の system と interact した時にはどうなるか。もし第一の system ~~外部~~との ~~interaction により~~ 関係からして、第二の system の state を知ることによって、第一の system の state も又限定されるといふ様な場合、即ち第二の system が第一の system の量を測る ~~measuring~~ apparatus であった場合には、第二の system の state を知るといふことは、ensemble の性質を ~~急激に~~ 即ち：その第一の system の density matrix の急激な、uncontrolable な変化を引きおこす。即ち、今迄第一の system の state がはっきりわからなかったのが、今わかったのであるから ~~density matrix も すっかり かはって~~、ensemble の各 ~~element~~ element は ~~総~~ 同じ phase 迄わかった state になる。従って適当な ~~eigenfun~~ orthogonal normalized function の system をとれば ρ は

$$\begin{pmatrix} 0 & & & 0 \\ & 0 & & \\ & & 0 \; 1 & \\ 0 & & & 0 \; 0 \end{pmatrix}$$

なる形になつてあらう。

所で、例へば $U(\cancel{\rho\log\rho})$ なる函数は

$$\rho = \frac{1}{N}\begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}$$

即ち、unit matrix の $\frac{1}{N}$ なる時、即ち system が何の state にあるか全くわからぬ時に

$$U(\cancel{\rho\log\rho}) = \lim_{\rho_{nn}\to 1}\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\rho_{nn}\log\rho_{nn} = 0$$

~~なる~~
~~なる故~~,

$$= \cancel{\tfrac{1}{N}\textstyle\sum} N\cdot\left(\tfrac{1}{N}\log\tfrac{1}{N}\right) = 0$$

で其の他の場合常に |~~negative value~~ 之より大きな値| をとる故、この時が ~~maximum~~ minimum である。

又、$\rho = \begin{pmatrix} 0 & & 0 \\ & 0 & \\ 0 & 1 & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix}$ なる形の時には、

$$\cancel{U(\rho\log} \quad U = \lim_{\substack{\varepsilon_n\to 0 \\ \delta_n\to 1}}\left(\sum_{n\neq m}\varepsilon_n\log\varepsilon_n + \delta_m\log\delta_m\right)$$

$$= 0.$$

で其の他の時は常に negative であるから、この時が maximum.

故に measurement をやつて system の state をきめると U は常に増大することになる。

反対に measurement をやつて system をある state にして

systemを放置しておいても時間的には如何なる種類のperturbationが加はらうともUはその為めに減少しないから(但し測定の時には変化する)
Uの変化は一方に限る。
但し measurementによつてsystemのstateを知つてしまつた様な場合は除く。かかる際には上述の如くUは減少するが systemを放置しておいたときはいけない。

即ちが始とした stateになつたか、即ち measurementの結果を知らないければ一般にUは減少する。少くとも増加しないことを証しする！[†]

証明 . . . .

之は classical theory に於ける irreversibility をあらはしてゐる！

この場合 Uの性質としては ~~それは~~ $F(x)=x\log x$ なる函数が $0\leq x\leq 1$ の範囲で $F''(x)>0$ なる ~~性質を~~ ことのみが重要であるから、Uのかはりに

$$D(F(\rho))$$

をとつても同様のことがいはれる。但し、$F(x)$ は $0\leq x\leq 1$ の範囲で $F''(x)>0$ なる条件を満足するものとする。

~~之れ~~ 以上のことは別に新しいことではないが、我々は更に一般的にある system の統計的 ensemble に対するUなる量はそれが他の systemと ~~相互~~ 統計の方法で互に影響しあふ時に time と共にどうかはるかを考察して見る。interactionが大きい時には問題は複雑になり之亦とりつかぬ故、ここでは、interactionを無限小とする limiting case のみを考へることにする。

~~註~~ [†] Neumann の証明をわかりよくした丈。

DEPARTMENT OF PHYSICS
OSAKA IMPERIAL UNIVERSITY.

DATE..........
NO..........

§2. Statement of the Problem

Neumann 等に考察されてゐるのは 完全な測定の場合であるが、もっと一般に perturbation によって system の Zustand がもっと弱い程度に aufstellen される場合を考へる。例へば弱い magnetic field によって atom の moment の方向を field の方向又は反対の方向にする如き場合である。原子の中の $j=\frac{1}{2}$ $l=0$ の状態を考へる：z-方向に field を apply すると system は $S_z=\frac{1}{2}$ 又は $S_z=-\frac{1}{2}$ のどちらかにある。それに ensemble の density matrix は図の如き reduced な形になる

$$\rho = \left(\begin{array}{c|c} A & 0 \\ \hline 0 & B \end{array}\right)$$

これは、

$$= \rho_{\frac{1}{2}} \cdot \rho_{-\frac{1}{2}}$$

なる積の形にかける。但し、

$$\rho_{\frac{1}{2}} = \left(\begin{array}{c|c} A & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \qquad \rho_{-\frac{1}{2}} = \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & B \end{array}\right)$$

又 $= \rho'_{\frac{1}{2}} + \rho'_{-\frac{1}{2}}$ なる和の形にもかける。

DEPARTMENT OF PHYSICS
OSAKA IMPERIAL UNIVERSITY.

DATE

NO.

但し、 $\rho'_{\frac{1}{2}} = \left(\begin{array}{c|c} A & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right)$ $\rho'_{-\frac{1}{2}} = \left(\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & B \end{array}\right)$

or $\rho_{\frac{1}{2}} = \rho_{\frac{1}{2}} + \rho_{-\frac{1}{2}} - 1$,

$$\therefore \; D(\rho \log \rho) = D\left(\rho_{\frac{1}{2}} \log \rho_{\frac{1}{2}} + \rho \log \rho_{-\frac{1}{2}}\right)$$

$$= D(\rho \log \rho_{\frac{1}{2}}) + D(\rho \log \rho_{-\frac{1}{2}})$$

$$= D(A \log A) + D(B \log B)$$