

# 量子力学と熱

機能材料工学科 山田弘明

## 概要

「日常生活でなじみ深い熱と、ミクロな物理法則を支配すると信じられている量子物理の間が、いかに繋がっているか」を理論的また計算機実験により探求している。

一見アカデミックな問題が科学技術等の進歩に伴い、将来の物質の機能制御や設計にも関わりクローズアップされる可能性もある。これにつき、主に概念的なことを説明する。

Keywords: 熱、不可逆性、量子物理、量子複雑系、非局在化、摩擦、散逸、カオス

1

## 熱力学第一法則 (エネルギー保存側)

任意の断熱操作の間に熱力学的な系が、外界に行う仕事ははじめの平衡状態と最終的な平衡状態のみで決まり、操作の方法や途中経過に依らない

→ 第1種の永久機関の否定

## 熱力学第二法則 (エントロピー増大側、ケルビンの原理)

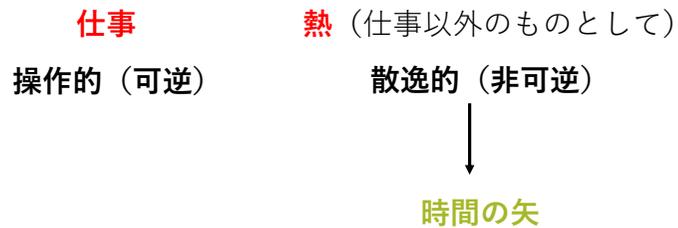
任意の温度における任意の等温サイクルについて熱力学的な系が、外界に行う仕事は $W \leq 0$ である。等温準静サイクルなら $W=0$

→ 第2種の永久機関の否定

2

## 熱力学の構成からわかること

### エネルギーの移動形態



3

## ミクロ → メゾ → マクロ (日常)



熱は古典的にも量子的にも  
ミクロには直接定義されていない

4

## 応用

- 量子計算機に必要な「絡み合い状態」を容易に生成できる。
- ガラスにおける緩和と内部摩擦
- 強外場下における化学反応の制御
- 分子における光吸収能率の制御

5

## その他の研究と興味

- 非周期系における局在、非局在状態と伝導特性
  - 古典多粒子系の不安定化転移の解明
  - 量子系の非断熱遷移
  - カオスによる分子の光吸収制御
  - 複雑な純粋状態（エントロピーは零）を表す状態やオブザーバブルを見つけ出す操作の複雑性を特徴づけていくこと
- 複雑系（生命の起源、脳、...）  
•非平衡開放系と熱効率  
•計算と熱

6

## 問題点・疑問

- いかにミクロからマクロにつながるのか
- 量子と古典はどう対応するのか
- マクロな場合の熱、摩擦はどこからくるのか
- 熱伝導のメカニズム
- 電気伝導における抵抗とは何か

これらに深く関わる不可逆現象（エネルギー流）を簡単な閉じた量子力学的系で調べてみる。

7