

令和 5 年 6 月 15 日現在

機関番号：32644

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2022

課題番号：19K14609

研究課題名（和文）孤立量子多体系の熱平衡化の数値的研究

研究課題名（英文）Numerical study on thermalization in isolated quantum many-body systems

研究代表者

伊與田 英輝（Iyoda, Eiki）

東海大学・理学部・講師

研究者番号：50725851

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：量子力学から緩和や熱力学について理解するために、主に孤立量子多体系における熱力学第二法則の拡張であるゆらぎの定理や緩和時間に関する研究などを行なった。前者については、以前の研究で熱浴の初期状態がエネルギー固有状態かつ時間発展がシュレーディンガー方程式に従う場合、短時間領域において示していた。本研究では長時間領域において理論的に示し、その理論を数値的に検証した。さらに物理量の長時間平均への緩和時間についての研究も行った。熱浴の初期状態がエネルギー固有状態の場合、ある種の時間に依存する非局所物理量のETHが成り立つならば、緩和時間が熱浴がミクロカノニカル分布の緩和時間に一致することを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

量子技術の発達により人工量子多体系を用いた量子シミュレータを用いた統計力学の基礎的な研究が実験的・理論的・数値的に行われるようになってきている。本研究はミクロで可逆な量子力学のレベルから、マクロで不可逆な熱力学・統計力学の法則の理解を深めるための研究である。本研究で得られた知見が、今後の量子シミュレータの研究に寄与することを期待したい。

研究成果の概要（英文）：In order to understand relaxation and thermodynamics from quantum mechanics, we mainly studied the fluctuation theorem, which is an extension of the second law of thermodynamics in isolated quantum many-body systems, and relaxation time. The former was shown in our previous study in the short-time regime when the initial state of the heat bath is an energy eigenstate and the time evolution obeys the Schrodinger equation. In the present study, we theoretically and numerically showed that the fluctuation theorem holds also in the long-time regime. We also studied the relaxation time of physical quantities to the long-time average. We have shown that if the initial state of the heat bath is an energy eigenstate, and if the ETH of a certain time-dependent nonlocal physical quantities holds, then the relaxation time is same as that with the micro canonical heat bath.

研究分野：統計力学

キーワード：固有状態熱化仮説 ゆらぎの定理

1. 研究開始当初の背景

(1) 冷却原子系や超伝導量子ビットなどの人工量子多体系が量子シミュレータとして使えるようになっており、理論的にミクロな量子力学の立場から、熱化や熱力学第二法則などのマクロな現象を理解するための研究が行われるようになっていた。特に量子力学におけるシュレーディンガー方程式は時間反転対称であるが、そこから不可逆な熱平衡化現象を理解するのは大きな研究テーマだった。

(2) 理論的には固有状態熱化仮説(ETH; Eigenstate Thermalization Hypothesis)が熱平衡化を理解するための有力な仮説の一つとして受け入れられていた。ETHは量子カオスの文脈において1990年代に提案されていたが、2000年以降、計算機の能力の向上とともに、ETHの数値的な検証がさまざまな角度から行われていたことがその理由である。また、ETHを応用する例として熱力学第二法則を短時間領域で示す研究も行われていた。

2. 研究の目的

量子力学の可逆な時間発展に従う孤立量子多体系における熱平衡化の研究を通して、ETHについて理解を深め、緩和時間についての知見を得ることが目的である。

3. 研究の方法

数値計算及び理論的な証明の二つの観点から研究を行なった。

数値的には主に数値的厳密対角化を用いた。

理論的な証明においては、ETHや長時間平均への緩和の文脈で用いられている不等式などを用いた。

4. 研究成果

冷却原子系や超伝導量子ビットなどの人工量子多体系を想定し、主に以下の研究結果を得た。

(1) 熱浴がエネルギー固有状態の場合の長時間領域のゆらぎの定理

以前の研究において、システムと(格子上の)熱浴からなる量子多体系を考え、短時間領域において熱力学第二法則とその拡張であるゆらぎの定理を理論的・数値的に示していた。また、長時間領域においても熱力学第二法則も示していた。

本研究では、長時間領域におけるゆらぎの定理を示した。ゆらぎの定理の誤差の長時間平均を、システムと熱浴の間の相互作用に注目して分割し、そのそれぞれについて理論的・数値的に評価をすることでゆらぎの定理を示した。この結果は以前示した短時間領域のゆらぎの定理と独立かつ相補的なものになっており、これらを合わせることで熱浴の初期状態がエネルギー固有状態の場合のゆらぎの定理が全時間領域において成り立つ。

証明に関して簡単に説明をする。誤差は分割することで、システムの演算子に関する項と、システムと熱浴の間の相互作用に関する項に分かれる。前者については全系のハミルトニアン H のエネルギー固有状態及びシステムの物理量 O に対するETHを用いることで評価でき、後者については相互作用に関する回転波近似を導入することや、摂動的な計算を行うことで評価できた。さらに、ゆらぎの定理の誤差の、長時間平均周りの時間ゆらぎについても評価した。評価に当たって、通常の(対角)ETHに加え、非対角ETHを用いた。

(2) 熱浴の初期状態がエネルギー固有状態の場合の緩和時間

これまでの研究では、長時間平均の期待値がミクロカノニカル平均に等しいというETHと、期待値が長時間平均へと緩和する緩和の理論を組み合わせることで熱平衡化が理解されている。しかし、この理解と、緩和時間がどれくらいの値であるかというのは別の問題である。先行研究において、ハミルトニアン・初期状態・物理量の組み合わせが特定の性質を持つ場合、局所的な物理量の緩和時間が熱浴のサイズによらないことを示されていた。この参考文献では、熱浴の初期状態として主にミクロカノニカル分布やランダムな純粋状態が扱われていた。

本研究では熱浴の初期状態がエネルギー固有状態の場合について研究した。この場合、局所的な物理量から作られるある種の非局所的な物理量についてのETHが成り立つ場合、物理量の緩和時間(の上限)が、熱浴の初期状態がミクロカノニカル分布の場合の緩和時間と等しいことが示される。そのため、この非局所な物理量についてのETHが成り立つかどうかを数値的に調べた。いくつかの物理量・ハミルトニアンについての系統的な数値計算で調べ、ETH

が(strong ETH のレベルで)成り立つ傾向が得られた。

この研究では、熱平衡化がサイズに依存しない緩和時間を示すと期待される非可積分系を用いたが、ETH を満たさないハミルトニアン(可積分系・多体局在系・量子多体傷跡状態など)や、より一般的な物理量に対して研究を行うことも、非平衡ダイナミクスの観点からマイクロ・マクロの境界を議論するために重要だと思われるため、さらなる研究が必要である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Iyoda Eiki	4. 巻 19
2. 論文標題 Quantum Violation of the Fluctuation-Dissipation Theorem in Macroscopic Two-dimensional Electronic Systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JPSJ News and Comments	6. 最初と最後の頁 5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJNC.19.05	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Iyoda Eiki, Kaneko Kazuya, Sagawa Takahiro	4. 巻 105
2. 論文標題 Eigenstate fluctuation theorem in the short- and long-time regimes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 44106
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.105.044106	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Eiki Iyoda, Kazuya Kaneko, Takahiro Sagawa	4. 巻 2102.12083
2. 論文標題 Eigenstate Fluctuation Theorem in the Short and Long Time Regimes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 arXiv	6. 最初と最後の頁 12083
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Nakamura Shunsuke, Iyoda Eiki, Deguchi Tetsuo, Sagawa Takahiro	4. 巻 99
2. 論文標題 Universal scrambling in gapless quantum spin chains	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 224305
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.99.224305	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Noh Jae Dong, Iyoda Eiki, Sagawa Takahiro	4. 巻 100
2. 論文標題 Heating and cooling of quantum gas by eigenstate Joule expansion	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 10106
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.100.010106	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kazuya Kaneko, Eiki Iyoda, Takahiro Sagawa	4. 巻 1911
2. 論文標題 Characterizing complexity of many-body quantum dynamics by higher-order eigenstate thermalization	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 arXiv	6. 最初と最後の頁 10755
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計6件(うち招待講演 1件/うち国際学会 2件)

1. 発表者名 伊與田英輝, 金子和哉, 沙川貴大
2. 発表標題 長時間領域におけるエネルギー固有状態のゆらぎの定理
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Eiki Iyoda, Kazuya Kaneko, Takahiro Sagawa
2. 発表標題 Eigenstate Fluctuation Theorem in the Short and Long Time Regimes
3. 学会等名 QTD2021(国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 馬場翔太郎, 金子和哉, 伊與田英輝, 沙川貴大
2. 発表標題 量子多体scarの近似的なSU(2)代数構造の数値的検証
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 伊與田英輝
2. 発表標題 量子純粋状態の熱力学第二法則
3. 学会等名 量子多体系の熱力学 --数理の発展と展望
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 金子和哉, 伊與田英輝, 沙川貴大
2. 発表標題 対称性クラスを反映した高次の固有状態熱化仮説
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会(物性)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Eiki Iyoda
2. 発表標題 Scrambling in quantum spin chains and Sachdev-Ye-Kitaev-like models
3. 学会等名 International Workshop on Quantum Thermodynamics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 協力 者	沙川 貴大 (Sagawa Takahiro)	東京大学・工学部・教授 (12601)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
韓国	University of Seoul		