

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 19 日現在

機関番号：12611

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540396

研究課題名(和文)可積分量子多体系の非平衡ダイナミクスと相関関数：再帰性と量子エルゴード定理の検証

研究課題名(英文) Non-equilibrium dynamics of integrable quantum many-body systems and their correlation functions: exact study of recurrence and quantum ergodicity

研究代表者

出口 哲生 (DEGUCHI, Tetsuo)

お茶の水女子大学・大学院人間文化創成科学研究科・教授

研究者番号：70227544

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：冷却原子系の実験の最近の発展の中で一次元孤立量子系の振動的振る舞いが観察され、孤立量子系の非平衡ダイナミクスに関心が集まっている。関数型斥力相互作用の1次元ボース気体と量子 $XXZ$ 鎖の二つの可積分量子系において、孤立量子系の非平衡時間発展を、熱化や平衡化に関して、そして再帰性に関して詳細に調べた。1次元ボース気体では、ホール励起状態の重ね合わせからダークソリトンに良く似た孤立局在状態が導かれた。量子 $XXZ$ 鎖では形状因子公式を改良し、スピノン状態の和の状態で局所磁化の時間発展を求めた。量子 $XXZ$ 鎖の複素束縛(ストリング)解の新しい特徴を示し、量子 $XXZ$ 鎖を拡張する不純物モデルの厳密解を導いた。

研究成果の概要(英文)：Non-equilibrium dynamics of isolated quantum many-body systems has recently attracted much attention. Collective oscillation of bunches of bosons was observed in the one-dimensional (1D) isolated quantum many-body systems of bosons thanks to the development of cold atomic experiments in the last decade. In the present research, we have studied how thermalization or more precisely equilibration occurs and shown recurrence phenomena in the dynamics of the 1D Bose gas with repulsive delta-function interaction. We also studied equilibration in the 1D quantum Heisenberg model, i.e., the  $XXZ$  spin chain. For the 1D Bose gas, we constructed a quantum state with a localized density profile very close to that of a dark soliton of the GP equation, by superposing one-hole excitations. For the  $XXZ$  spin chain, we derived some features of string solutions for the Bethe-ansatz equations. Furthermore, we obtained an exact solution for the  $XXZ$  spin chain with an impurity and evaluated its Wilson ratio.

研究分野：数理物理学

キーワード：可積分量子系 量子多体系 量子統計力学 量子ダイナミクス 非平衡 典型性 量子ハイゼンベルグ鎖 代数的ベータ仮説

## 1. 研究開始当初の背景

最近、冷却原子系の実験研究が発展する中で、孤立した一次元ボース気体の時間発展が観測され、ボース粒子の集団が振動するという興味深い現象 [K] が観察された。この実験を一つの契機として、孤立量子系の時間発展に関心が集まり、非可積分量子系や可積分量子系の純粋状態の時間発展が多くの研究者によって調べられている。

非可積分量子系の場合、孤立系の純粋状態の時間発展でエントロピーは変化しない。しかし、局所的な物理量の状態期待値はミクロカノニカル分布による熱平衡値に漸近することが、シミュレーション等で調べられ、定性的な議論でも示唆された。従来の常識では、散逸のない孤立量子系が平衡状態へ漸近することは期待できない。一方、量子状態の典型性 (typicality) および固有状態熱化の仮説 (eigenstate thermalization hypothesis) の視点に立つと、孤立系であっても時間発展で熱化あるいは平衡化が示唆される。実際、Lebowitz 達によって、von Neumann の量子エルゴード性に関する定理 (1929) が最近再発見された。このため現在では、量子状態の典型性の見方は von Neumann にまで遡ると考えられている。しかし、一般の量子多体系の高精度かつ長時間のシミュレーションの実行は容易でなく、研究状況は研究開始当初はもとより現在でも未だに混沌としている。

さらに、可積分量子系の孤立系の場合、平衡化の過程により、一般化されたギブス分布 (generalized Gibbs ensemble, GGE) に漸近する [R]、という興味深い仮説 (GGE 仮説) が提案された。可積分量子系では特別な初期状態を選べば、時間発展を長時間にわたって追跡することができる。そこで、多くの研究者が GGE 仮説の検証に挑戦している。いくつかの可積分量子系に対して、様々な初期状態で時間発展が調べられた。その結果、現在では GGE 仮説に対する反例も知られている。

[K] T. Kinoshita, T. Wenger and D.S. Weiss,

Nature **440**, 900 (2006).

[R] M. Rigol, V. Dunjko, V. Yurovsky and M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **96**, 050405 (2007).

## 2. 研究の目的

最近再発見された von Neumann (1929) 等による量子エルゴード性に関するいくつかの理論的予想を、可積分量子多体系を用いて検証することが本研究の目的である。特に、様々な物理量の期待値に関する緩和現象が、量子系の時間発展の中でいかなる初期状態からどのように生じるかを明らかにする。このため、本研究では代表的な可積分量子系に関して、いくつかの初期量子状態に対する量子系の時間発展を調べる。

本研究の利点の一つは、可積分量子系の時間発展が数値的に厳密に事実上無限時間追跡可能なことである。初期状態がベータ固有状態の重ね合わせで表される場合、例えば密度演算子の期待値の時間発展を Slavnov 公式を用いて非常に長時間しかも数値的に高い精度で追跡できる。

長時間追跡可能な利点を生かして、再帰時間の評価を試みる。例えば、密度演算子の期待値の時間発展を追跡し、粒子密度に関して再帰的振る舞いがどの程度の時間で出現するか、数値的に評価する。

## 3. 研究の方法

可積分量子多体系の時間発展を、密度演算子などの物理量演算子の期待値の時間発展を計算して調べる。Slavnov の公式を用いて時間発展を導くと、物理量演算子の任意のベータ固有状態の間の行列要素 (形状因子) は  $N \times N$  の行列式で表される。(  $N$  は粒子数あるいは下向きスピンの個数 ) ベータ仮設方程式の根を求めれば、 $N$  の二乗程度に比例する時間で計算できる。もし相関関数を直接計算すれば  $N$  の階乗に比例するような長い時間が必要となるので、この公式は応用上非常に重要である。

(1) 緩和や再帰性など量子ダイナミクスの特徴の解明

可積分量子多体系の時間発展を物理量演算子の期待値を数値的に計算して調べ、緩和現象や再帰的振る舞いの様子を明らかにする。さらに非可積分量子スピン系のシミュレーションと比較して、観察された量子ダイナミクスの特徴的振る舞いが普遍的かどうかを明らかにする。

(2) 再帰時間の数値的評価

可積分量子系の励起エネルギーを求めて再帰時間を数値的に推測し、時間発展の結果と比較する。具体的には、斥力のデルタ関数型ポテンシャルで相互作用する1次元ボース気体の様々な量子状態に関して、時間発展した状態と初期状態の相関(フィデリティー)を数値的に調べて、再帰時間を求める。

(3) 近藤模型や可積分高次スピン $XXZ$ 鎖の量子ダイナミクス

磁性不純物の厳密解である近藤模型の時間相関関数の解析的表示を導き、不純物スピンの量子ダイナミクスの特徴を解明する。さらに、可積分高次スピン $XXZ$ 鎖の絶対零度における時間相関関数の解析的表現を導く。後者は前者の拡張模型に相当し、不純物スピンの大きさが異なる近藤模型の厳密解などが導かれる。磁性不純物スピンのダイナミクスを明らかにする。

(4) 量子 $XXX$ 鎖のベータ仮設方程式の解の探索

1次元量子ハイゼンベルグ模型(量子 $XX$ 鎖)において、任意に与えられた量子状態を初期時刻の量子状態として出発する時間発展を追跡するためには、与えられた初期量子状態をベータ固有状態の重ね合わせとして表すことができれば良い。そのためには、有限鎖上に定義された量子 $XXX$ 鎖のすべてのベータ固有状態を求めることが重要である。技術的に容易ではないが、複素束縛解(ストリング解)も含めて有限サイズ系の

ベータ仮設方程式の全ての解を数値的に求めることは、重要な課題の一つである。

4. 研究成果

(1) 関数型相互作用ボース気体の孤立局在波解の特徴づけ

斥力デルタ関数型相互作用の1次元ボース気体において、1ホール励起状態を重ね合わせると、密度プロファイルは空間的に非一様となり、密度の値が急激に減少する局在領域を持つ量子状態が導かれることが、本研究の前段階の共同研究の中で見出された。密度プロファイルはあたかも Gross-Pitaevskii (GP) 方程式(非線形シュレーディンガー方程式)のダークソリトン解の振幅と同様な形状であった。この発見を定式化し、一般化した。

斥力 関数型相互作用の1次元ボース気体(Lieb-Liniger 模型)において、弱結合領域では、1ホール励起状態の線形和の量子状態の密度プロファイルは、GP方程式で良く記述されることが分かった。実際、形状因子公式を用いて密度プロファイルを求めてみると、1ソリトン解の振幅プロファイルとほぼ完全に一致した。ただし、周期的境界条件のため、1ソリトン解は楕円関数解である。

1ホール励起の線形和の量子状態に関して、 $N$ 粒子の状態と $N-1$ 粒子の状態を求め、この二つの状態に関する量子場の演算子の行列要素を求めた。すると、振幅と位相は1ソリトン解のものと非常に良く一致した。

(2) 可積分量子系の $XXX$ 鎖の初期の量子状態として多数のベータ固有状態の重ね合わせを採用して、時間発展した状態と初期状態の相関(フィデリティー)を求めた。その結果、孤立した可積分量子スピン系の量子ダイナミクスの特徴が明らかとなった。

(3) 量子 $XXX$ 鎖の局所磁化の形状因子公式は Kitanine et al. (1999) で導かれていたが、数値的に安定でなかった。Slavnov の行列式から Cauchy 行列式を分離し、漸近的にフレッドホルム行列式に収束する行列式

の形にこの形状因子公式を改良した。スピノ  
ン状態の和で与えられる量子状態に対して、  
局所磁化の時間発展を求めた。

(4) 近藤問題など不純物を含む可積分量子  
系の解として、不純物サイトを持つ量子 $XXZ$   
鎖の厳密解を求めた。 $XXZ$ 鎖中の不純物  
は1次元ラッティンジャー流体中の不純物  
に対応し、普遍性クラスはラッティンジャー  
流体のパラメーターで表されることが、異方性  
変数  $\Delta = 1/2$  の場合に具体的に示された。

微小磁場下での基底状態におけるベーテ  
仮設方程式の解を、Wiener-Hopf 法を積分範  
囲が非対称な場合に拡張して求め、絶対零度  
での不純物磁化率の解析的表式を導いた。

低温での不純物比熱を熱力学的ベーテ仮  
設方程式の数値解から求めた。普遍性クラス  
を表すウィルソン比の解析的表式が導かれ、  
 $XXZ$ 鎖の dressed charge つまり  $c = 1$  の  
共形場理論のコンパクト化半径で表される。

代数的ベーテ仮設を用いて局所磁化演算  
子の期待値を直接的に計算し、微小磁場下で  
の不純物磁化の解析的表式を導いた。従来の  
近藤問題の厳密解ではベーテ仮設方程式に  
基づく物理的な議論で不純物磁化を導出し  
ていたが、今回の代数的方法の結果は従来の  
方法の結果と一致した。代数的ベーテ仮設法  
を用いて従来の方法の正当性が示された。

(5) 格子点数  $1/2$  の場合に  $XXX$  鎖のベー  
テ仮設方程式の解を全て求めた。特に解に対  
応するベーテ量子数を全て求めた。この数値  
解を代入すると、複素数値束縛解など任意の  
ベーテ固有状態の重ね合わせで表されるど  
のような量子状態に対しても物理量演算子  
の状態期待値の時間発展が導かれる。

格子点数  $1/2$  と小さな有限系であっても、  
ベーテ仮設方程式の解とそれらに対応する  
ベーテ量子数が全て求められたことは画期  
的である。今後、さらに大きなサイズの系に  
対してベーテ仮設方程式の数値解を求める  
上で指針となり、非常に役立つであろう。

5. 主な発表論文等 (研究代表者、研究  
分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計9件)

[1] P. R. Giri and T. Deguchi,  
Heisenberg Model and Rigged  
Configurations, to appear in J. Stat. Mech.  
(2015). 査読有

[2] 出口哲生、佐藤純、上西慧理子、  
可積分量子多体系の非平衡ダイナミクスと  
統計力学の基礎、日本物理学会誌 Vol. 70  
No. 6 (2015) 419-426. 査読有  
<http://www.jps.or.jp/books/gakkaishi.php>

[3] P. R. Giri and T. Deguchi, 査読有  
Singular eigenstates in the even (odd)  
length Heisenberg spin chain, J. Phys. A:  
Math. Theor. Vol. 48, 175207 (2015).  
DOI: 10.1088/1751-8113/48/17/175207

[4] T. Deguchi and P. R. Giri,  
Non Self-conjugate Strings, Singular  
Strings and Rigged Configurations in the  
Heisenberg Model, J. Stat. Mech. (2015)  
P02004. 査読有  
DOI: 10.1088/1742-5468/2015/02/P02004

[5] E. Kaminishi, J. Sato and T. Deguchi,  
Recurrence Time in the Quantum Dynamics of  
the 1D Bose Gas, J. Phys. Soc. Jpn. Vol.  
84, 064002 (2015). 査読有  
DOI: 10.7566/JPSJ.84.064002

[6] R. Yahagi, J. Sato and T. Deguchi,  
Finite-temperature behavior of an  
impurity in the spin-1/2 XXZ chain,  
J. Stat. Mech. (2014) P11020. 査読有  
DOI: 10.1088/1742-5468/2014/11/P11020

[7] E. Kaminishi, J. Sato and T. Deguchi,  
Exact quantum dynamics of yrast states in  
the finite 1D Bose gas,  
J. Phys.: Conference Series Vol. 497  
(2014) 012030 査読有  
DOI: 10.1088/1742-6596/497/1/012030

[8] J. Sato, R. Kanamoto, E. Kaminishi and  
T. Deguchi, 査読有  
Exact Relaxation Dynamics of a Localized  
Many-Body State in the 1D Bose Gas,  
Phys. Rev. Lett. Vol. 108, 110401 (2012).  
DOI:10.1103/PhysRevLett.108.110401

[9] T. Deguchi, Reduction formula of form  
factors for the integrable spin-s XXZ  
chains and application to correlation  
functions, J. Stat. Mech. (2012) P04001  
(45 pages) 査読有  
DOI: 10.1088/1742-5468/2012/04/P04001

[学会発表](計 22件)

[1] T. Deguchi (招待講演),  
Singular solutions and the completeness of the XXX and XXZ spin chains through the loop algebra symmetry,  
Simons Center Workshop: "Integrability vs. Non-integrability in Statistical Mechanics", Simons Center for Geometry and Physics, Stony Brook, New York, March 2-6, 2015 (Talk was given on March 5, 2015)

[2] T. Deguchi,  
Formulas of form factors for the spin-1/2 and integrable spin-s XXZ chains and non-equilibrium dynamics,  
Recent Advances in Quantum Integrable Systems 2014, University of Bourgogne, France, Sep. 1-5, 2014 (Talk was given on Sep. 4, 2014).

[3] T. Deguchi (招待講演),  
Exact time evolution of local spin operators in the Heisenberg spin chain through the Bethe ansatz,  
Mini-workshop on real-time dynamics of quantum many-body systems,  
the University of Tokyo, Hongo, Tokyo, Japan, May 20, 2014.

[4] T. Deguchi (招待講演),  
Non-Equilibrium Dynamics of Integrable Systems and Typicality, in "Quantum Integrability, Conformal Field Theory and Topological Quantum Computation", the International Institute of Physics (IIP-UFRN),  
March 23 to April 06, 2014, in Natal/RN, Brazil. (Talk was given on April 3, 2014)

[5] 出口哲生 (招待講演)  
孤立量子系における非平衡ダイナミクスと可解模型 (Non-Equilibrium Dynamics in Isolated Quantum Systems and Solvable Models), 早稲田大学高等研究所 Top Runners' Lecture Collection of Science 「孤立量子系における統計力学の新展開」 (早稲田大学高等研究所セミナーシリーズ) 2013年11月25日

[6] T. Deguchi (招待講演),  
Non-equilibrium dynamics in isolated quantum integrable systems,  
"East Asia Joint Seminars on Statistical Physics 2013", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Japan, October 21-24, 2013 (Talk was given on Oct. 21, 2013).

[7] T. Deguchi (招待講演),  
Exact relaxation dynamics for the quantum

state of a dark soliton in the 1D Bose gas, in "The beauty of integrability: Low-dimensional Physics, Statistical Models and Solitons", 15-28 July, 2012, International Institute of Physics, 2012, Natal, Brazil (Talk was given on July 19).

以上7件は全て国際会議等での講演発表。

[8] 出口哲生, P. R. Giri, 畠山遼子,  
可積分な孤立量子系に現れるべき緩和: ハイゼンベルグ鎖の場合、(講演発表3月24日)  
日本物理学会第70回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス 2015年3月21日-24日

[9] 矢萩量子、佐藤純、出口哲生,  
不純物のある可解XXZ鎖の有限温度効果 (講演発表3月24日) 日本物理学会第70回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス 2015年3月21日-3月24日

[10] P. R. Giri, 出口哲生,  
Singular eigenstates in the even (odd) length Heisenberg spin chain (講演発表3月21日) 日本物理学会第70回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス 2015年3月21日-24日

[11] 上西慧理子、森高司、佐藤純、出口哲生,  
一次元ボース気体の弱結合および強結合領域における再帰時間、(講演発表9月9日)  
日本物理学2014年秋季大会、中部大学春日井キャンパス 2014年9月7日-9月10日

[12] P. R. Giri, 出口哲生,  
String solutions and rigged configurations of the Heisenberg model (講演発表2014年9月8日) 日本物理学会2014年秋季大会、中部大学春日井キャンパス 2014年9月7日-9月10日

[13] 出口哲生、量子XXZ鎖における形状因子の行列式公式の改良と拡張(講演9月8日) 日本物理学会2014年秋季大会、中部大学春日井キャンパス 2014年9月7日-10日

[14] 畠山遼子、P. R. Giri, 出口哲生,  
1次元ハイゼンベルグ模型の緩和時間

(講演発表 2014年3月30日日本物理学会第69回年次大会、東海大学湘南キャンパス 2014年3月27日-3月30日)

[15] 出口哲生、  
量子 $XXZ$ 鎖と可積分高次スピン $XXZ$ 鎖  
における任意の局所演算子に対する形状因子  
の行列式公式 (講演3月27日) 日本物理  
学会第69回年次大会、東海大学湘南キャン  
パス 2014年3月27日-30日

[16] P. R. Giri, 出口哲生、  
Numerical Solutions of Bethe Ansatz  
Equations and Completeness of the Spectrum  
(講演発表3月27日) 日本物理学会第69  
回年次大会、東海大学湘南キャンパス 2014  
年3月27日-30日

[17] 出口哲生 (招待講演)、  
可解量子系の非平衡ダイナミクスと統計力  
学の基礎 (講演発表9月27日)  
領域11シンポジウム 主題: 孤立量子系の  
時間発展と熱統計力学の基礎  
日本物理学会 2013年秋季大会、徳島大学常  
三島キャンパス 2013年9月25日-28日

[18] 上西慧理子、佐藤純、出口哲生、  
1次元少数ボース気体におけるダークソリ  
トンの再帰時間 II, (ポスター3月27日) 日  
本物理学会第68回年次大会、広島大学東広  
島キャンパス 2013年3月26日-29日

[19] 佐藤純、上西慧理子、出口哲生、  
1次元ボース気体の凝縮率の厳密計算、  
(講演発表 2012年9月18日) 日本物理学  
会 2012年秋季大会、横浜国立大学常盤台キ  
ャンパス 2012年9月18日-21日

[20] 出口哲生、上西慧理子、佐藤純、  
1次元ボース気体の非平衡ダイナミクスと量  
子エルゴード定理 (講演発表9月18日) 日  
本物理学会 2012年秋季大会、横浜国立大学  
常盤台キャンパス 2012年9月18日-21日

[21] 出口哲生、茂木康平、  
可積分高次スピン $XXZ$ 鎖のハミルトンニ  
アンの行列要素を表す公式、(講演発表9月  
21日) 日本物理学会 2012年秋季大会、横浜  
国立大学常盤台キャンパス 2012年9月18日  
-21日

[22] 出口哲生、上西慧理子、佐藤純、  
1次元ボース気体の量子ソリトン状態と古  
典極限のソリトン (講演発表9月21日) 日  
本物理学会 2012年秋季大会、横浜国立大学  
常盤台キャンパス 2012年9月18日-21日

[その他]  
ホームページ等  
<http://www.phys.ocha.ac.jp/deguchilab/home.html>

6. 研究組織  
(1) 研究代表者  
出口 哲生 (DEGUCHI, Tetsuo)  
お茶の水女子大学・大学院人間文化創成科学  
研究科・教授  
研究者番号: 70227544

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者  
工藤 和恵 (KUDO, Kazue)  
お茶の水女子大学・大学院人間文化創成科学  
研究科・准教授  
研究者番号: 30505574

(4) 研究協力者  
佐藤 純 (SATO, Jun)  
東京大学・先端科学技術研究センター・助教  
研究者番号: 10735723

上西 慧理子 (KAMINISHI, Eriko)  
東京大学・大学院理学研究科・PD研究員

矢萩 量子 (YAHAGI, Ryoko)  
お茶の水女子大学・大学院人間文化創成科学  
研究科・博士後期課程

Pulak Ranjan Giri (GIRI, Pulak Ranjan)  
お茶の水女子大学・大学院人間文化創成科学  
研究科・日本学術振興会外国人特別研究員

畠山 遼子 (HATAKEYAMA, Ryoko)  
東京大学・大学院理学系研究科・修士課程