

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 28 日現在

機関番号：32629

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2023

課題番号：18K03467

研究課題名（和文）孤立量子系における操作的な非平衡統計力学の構築

研究課題名（英文）Operational nonequilibrium statistical mechanics for isolated quantum systems

研究代表者

門内 隆明（Monnai, Takaaki）

成蹊大学・理工学部・講師

研究者番号：30514476

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、非平衡統計力学の構築について操作的な観点から取り組んだ。まず孤立量子系における定常状態への緩和について、弱収束の観点から調べた。具体的には、可解系における一般化ギブスアンサンブルへの緩和を、ハミルトニアンが一般の2次形式で与えられる場合に、局所物理量の mixing として示した。固有状態熱化仮説について、エネルギーと時間の不確定性関係に基づく基礎付けを行った。重ね合わせ状態の特徴である entanglement を間接的に測定可能にする不等式を示した。一方、多くの非平衡系で成立する熱力学的不確定性関係を可解モデルについて量子系に拡張し、また揺らぎの定理の観点から必要十分条件を導出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義  
平衡状態および平衡近傍については、統計力学による理解が進んでいる。一方、孤立量子系における熱平衡化やミクロ系における輸送現象をはじめとする非平衡現象については、急速に理解が深まりつつある。しかし、孤立量子系における熱平衡化のダイナミクスについては局所保存量の役割や緩和時間の決定要因等不明な点が多い。また、熱平衡化を受け入れることで、ミクロ系の動作原理を扱う理論として、確率的熱力学が発展しつつある。本研究では、熱平衡化のメカニズムについて理解が進んだこと、確率的熱力学を更に発展させたことが意義深いと考えられる。

研究成果の概要（英文）：We explored the construction of non-equilibrium statistical mechanics from an operational perspective. First, we investigated the relaxation to steady states in isolated quantum systems in terms of weak convergence. Specifically, we showed that the relaxation to generalized Gibbs ensembles in quadratic integrable systems as mixing of local operators. We also investigated a foundation for the eigenstate thermalization hypothesis based on the uncertainty relation between energy and time. Also, we showed an inequality that provides lower bound of the entanglement entropy. Furthermore, we derived necessary and sufficient conditions from the perspective of fluctuation theorems by extending thermodynamic uncertainty relations valid in many non-equilibrium systems to quantum systems in integrable models.

研究分野：非平衡統計力学

キーワード：孤立量子系

## 様式 C-19、F-19-1 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

統計力学の理論において重要な平衡アンサンブルが比較的少数個の自由度からなる系でも成立することが、孤立量子系における典型的な純粋状態の性質や固有状態熱化仮説の観点から理解されつつあった。

また、多数の局所保存量を持つ可解系においては、定常状態が一般化ギブスアンサンブルで与えられることが具体例を通じて示されていた。定常状態への緩和ダイナミクスは盛んに調べられてはいたが、物理量の空間局所性の役割や緩和のメカニズムについて不明であった。

一方、初期状態として平衡アンサンブルを用いることで成立する、メゾ系における熱力学的な構造が注目されていた。

### 2. 研究の目的

まず、孤立量子系における定常状態への緩和について、可解系における一般化ギブスアンサンブルへの緩和のメカニズムの解明を目標とした。

また、ハミルトニアンと物理量の関係性が重要な固有状態熱化仮説について理論的基礎付けを行い、熱平衡化の条件を調べることや、これに関連し、重ね合わせ状態を特徴付ける **entanglement** をはじめとする概念を扱う量子情報理論と統計力学の関連についての理解を深めることも目的とした。

また、メゾ系の熱力学的な構造について調べることで、非平衡統計力学を構築していくことも目標である。

### 3. 研究の方法

一般化ギブスアンサンブルへの緩和を調べるため、2次形式でハミルトニアンが与えられる系について解析的なアプローチを行った。また、一般化ギブスアンサンブルの量子開放系への拡張を一般的に調べるため、マルコフ近似に基づくマスター方程式を用いた。

entanglement entropy を不等式評価した。

熱力学的不確定性の量子系への拡張を行うため、調和振動子が環境系と線形に相互作用するモデルを扱うことで厳密対角化を行った。大偏差原理に基づくエントロピー関数を用いて、charge transfer に対する熱力学的不確定性関係の必要十分条件を幾何学的に示した。

### 4. 研究成果

近年、冷却原子気体の熱平衡化やナノスケールの系の動作原理をはじめとする非平衡現象が注目されている。そこで、本研究では、非平衡統計力学の構築を通じて次に述べる結果を得た。

孤立量子系では、比較的少数個の自由度からなる系であっても、熱平衡状態が実現すると考えられているが、緩和ダイナミクスについては緩和時間の決定要因をはじめ不明なことが多い。

#### (1) 一般化ギブスアンサンブルへの緩和のメカニズム

まず、孤立量子系における定常状態への緩和に関して、可解系における一般化ギブスアンサンブルへの緩和のメカニズムについて調べた。ハミルトニアンが2次形式で与えられるボース粒子系の熱力学極限について調べた結果、場の相関関数が空間局所的である場合、ほぼすべての初期条件について局所物理量の期待値の一般化ギブスアンサンブルへの緩和が mixing によって起こることを示した。これは、相互作用のある系の平均場近似や調和振動子と線形に相互作用する環境系の熱力学極限に対する結果でもある。同時期に lattice 系においてハミルトニアンが2次形式で与えられる系の一般化ギブスアンサンブルへの緩和が幾つかのグループによって独立に示されたが、これに対して我々は熱力学極限を扱うことで mixing による簡潔なメカニズムを示した。

#### (2) 一般化ギブスアンサンブルへの緩和の量子開放系への拡張

可解系において部分系が熱浴と接触した結果どのように一般化ギブスアンサンブルへの緩和が起こるか、孤立系の結果をマルコフマスター方程式で記述される量子開放系に拡張した。熱浴の初期状態として一般化ギブスアンサンブルやこれに局所的な squeezing 等が加わった場合を扱った。

一方、多くの非可積分系で熱平衡状態への弱収束が起こることが数値的に調べられており、熱平衡化の条件として固有状態熱化仮説が盛んに調べられている。

#### (3) 固有状態熱化仮説の重ね合わせ状態による基礎付け

そこで、固有状態熱化仮説が成立するメカニズムとして、エネルギー固有状態を互いに良く似ていてかつ熱的であり近似的に直交する多数の状態の重ね合わせ状態として表せることを、エネルギーと時間の不確定性原理に基づいて示した。

これは、物理量の期待値を計算する際に、中心極限定理によってミクロカノニカル期待値と一致する可能性を示唆する。

また、空間並進対称性が大きく破れている非可積分系では、entanglement entropy が小さい多体局在状態になることがある。

#### (4) Entanglement entropy の間接測定

entanglement entropy は、直接測定可能な量ではないが、測定可能な下限を不等式評価によって求めた。これは、対象系と同じ状態にある多数の系を用意し、任意の正規直交基底を固定しこれを用いた射影測定を各系に行った実現確率の分布に対するエントロピーが下限になるため、変分計算的であり、基底の選択が重要である。

また、微小系の動作原理を与える理論として、確率的熱力学が発展しつつある。

実際、初期熱平衡状態を仮定すると、揺動散逸定理を非平衡系に拡張した熱力学的不確定性関係が古典系を中心として多くの系で成立することが示されてきた。一方で、量子系への拡張は開放系を中心に行われている。

#### (5) 熱力学的不確定性関係の量子系への拡張

そこで、本研究では、熱力学的不確定性関係の量子系への拡張について、調和振動子を外場で掃引しつつ複数の理想ボース気体と線形に相互作用する可解モデルを用いて行った。この結果は、具体的なモデルに対する結果ではあるものの掃引の仕方によらずに成立し、熱力学的不確定性関係より量子補正の分だけ強い不等式が成立することを示している。このモデルは、マルコフ近似により量子ランジュバン方程式を再現出来るため、古典確率過程の直接的な拡張になっている。また、量子系における実験スキームを示した。

一方、慣性の影響が大きい場合等、熱力学的不確定性関係には例外がある。これは、初期局所平衡状態を仮定すれば例外なく成立する揺らぎの定理と異なる特徴である。また、熱力学的不確定性関係が 2 次のキュムラントまでで決まるのに対して、揺らぎの定理はすべてのキュムラントを扱っている点是对照的である。これまでに揺らぎの定理と熱力学的不確定性関係の関係について、熱力学的不確定性関係のエントロピー生成で決まる上限を緩めることで一般的な不等式を導出が行われてきた。

#### (6) 熱力学的不確定性関係の幾何学的な必要十分条件

そこで、熱力学的不確定性関係が成立する一般的な必要十分条件を、揺らぎの定理の観点から大偏差関数を用いて幾何学的に示した。その特殊な場合として、短時間領域で charge transfer の平均と分散の時間や affinity の関数としての振る舞いに一般的な関係があることを示した。揺らぎの定理を用いることで、対象系が確率過程・散逸系・ハミルトニアン系のいずれであっても成立する結果になっている。また、多変数への拡張も行った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

|   |                     |
|---|---------------------|
| 1. 著者名<br>Takaaki Monnai  | 4. 巻<br>108         |
| 2. 論文標題<br>Arbitrary-time thermodynamic uncertainty relation from fluctuation theorem | 5. 発行年<br>2023年     |
| 3. 雑誌名<br>Phys. Rev. E  | 6. 最初と最後の頁<br>24119 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevE.108.024119                               | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|  |                     |
|--|---------------------|
| 1. 著者名<br>Takaaki Monnai   | 4. 巻<br>105         |
| 2. 論文標題<br>Thermodynamic uncertainty relation for quantum work distribution: Exact case study for a perturbed oscillator | 5. 発行年<br>2022年     |
| 3. 雑誌名<br>Phys. Rev. E   | 6. 最初と最後の頁<br>34115 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevE.105.034115  | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|  |                      |
|--|----------------------|
| 1. 著者名<br>Takaaki Monnai   | 4. 巻<br>89           |
| 2. 論文標題<br>Relaxation to Generalized Gibbs Ensembles in Quadratic Quantum Open Systems | 5. 発行年<br>2020年      |
| 3. 雑誌名<br>J. Phys. Soc. Jpn.   | 6. 最初と最後の頁<br>124005 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.7566/JPSJ.89.124005                                     | 査読の有無<br>有           |
| オープンアクセス<br>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<br>-            |

|   |                     |
|---|---------------------|
| 1. 著者名<br>Takaaki Monnai, Shohei Morodome, and Kazuya Yuasa   | 4. 巻<br>100         |
| 2. 論文標題<br>Relaxation to Gaussian generalized Gibbs ensembles in quadratic bosonic systems in the thermodynamic limit | 5. 発行年<br>2019年     |
| 3. 雑誌名<br>Phys. Rev. E  | 6. 最初と最後の頁<br>22105 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevE.100.022105   | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|   |                      |
|---|----------------------|
| 1. 著者名<br>Takaaki Monnai  | 4. 巻<br>2019         |
| 2. 論文標題<br>Variational estimation of entanglement entropy for bipartite many-body systems | 5. 発行年<br>2019年      |
| 3. 雑誌名<br>J. Stat. Mech.  | 6. 最初と最後の頁<br>113105 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1088/1742-5468/ab4bc0                                      | 査読の有無<br>有           |
| オープンアクセス<br>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<br>-            |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Takaaki Monnai   | 4. 巻<br>2                |
| 2. 論文標題<br>Eigenstate thermalization hypothesis, time operator, and extremely quick relaxation of fidelity | 5. 発行年<br>2018年          |
| 3. 雑誌名<br>Journal of Physic Communications   | 6. 最初と最後の頁<br>075008 1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1088/2399-6528/aad223   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

[学会発表] 計8件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 4件)

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Takaaki Monnai   |
| 2. 発表標題<br>Arbitrary time thermodynamic uncertainty relation from fluctuation theorem |
| 3. 学会等名<br>StatPhys 28 (国際学会)   |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Takaaki Monnai  |
| 2. 発表標題<br>Arbitrary time thermodynamic uncertainty relation from exchange fluctuation theorem |
| 3. 学会等名<br>Sitges Conference on Statistical Mechanics (国際学会)                                   |
| 4. 発表年<br>2023年  |

|                                      |
|--------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>大淵倫太郎, 加納慶一, 門内隆明         |
| 2. 発表標題<br>量子スピン鎖におけるクエンチ後の熱平衡化と緩和時間 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会2022年秋季大会           |
| 4. 発表年<br>2022年                      |

|                                      |
|--------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>加納慶一, 大淵倫太郎, 門内隆明         |
| 2. 発表標題<br>量子スピン鎖における多体局在とクエンチ後の緩和時間 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会2022年秋季大会           |
| 4. 発表年<br>2022年                      |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>今井智博・内野瞬・門内隆明・湯浅一哉                |
| 2. 発表標題<br>量子ドットを介して超伝導体間に流れるカレントに対する量子ゆらぎ定理 |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会2020年秋季大会                   |
| 4. 発表年<br>2020年                              |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Takaaki Monnai   |
| 2. 発表標題<br>Relaxation to Generalized Gibbs Ensembles in the thermodynamic limit |
| 3. 学会等名<br>StatPhys 27 (国際学会)   |
| 4. 発表年<br>2019年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Takaaki Monnai  |
| 2. 発表標題<br>Title: Relaxation to Gaussian generalized Gibbs ensembles in quadratic bosonic systems in the thermodynamic limit |
| 3. 学会等名<br>Workshop on Ordering and Dynamics of Correlated Quantum Systems (国際学会)  |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>門内 隆明                         |
| 2. 発表標題<br>固有状態熱平衡化仮説の「時間を表す演算子」に基づく基礎付け |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会第74回年次大会                |
| 4. 発表年<br>2019年                          |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| 氏名<br>(ローマ字氏名)<br>(研究者番号) | 所属研究機関・部局・職<br>(機関番号) | 備考 |
|---------------------------|-----------------------|----|
|---------------------------|-----------------------|----|

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 |
|---------|---------|
|---------|---------|