

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 30 日現在

機関番号：32629

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26800206

研究課題名(和文)非平衡系における操作的統計力学の構築

研究課題名(英文)nonequilibrium statistical mechanics and operation of quantum many-body systems

研究代表者

門内 隆明(Takaaki, Monnai)

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) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：孤立量子多体系における非平衡状態について、統計力学の基礎付けの観点から一連の研究を行った。

まず、初期状態が熱平衡であり、時間依存する外場によって駆動される非平衡過程について、仕事の分布関数を一つの典型的純粋状態から計算することで熱平衡アンサンブルに基づく計算を再現できることを数値的・理論的に示した。続いて、メゾ系の輸送現象に関し、局所平衡にある複数の熱浴を接合する場合の非平衡定常状態について、これを表す典型的な純粋状態を散乱理論に基づいて構成した。また、初期に熱平衡にある系を外場で駆動した場合に、どれ位平衡状態からずれるか散逸仕事と外場を用いて表せる独立に計算可能な熱力学的な下限を導出した。

研究成果の概要(英文)：We explored the nonequilibrium processes of isolated quantum many-body systems in the context of the statistical mechanics. First, we have shown that the probability distribution of work done can be calculated from only a single typical pure state for externally perturbed systems, which are initially prepared in equilibrium. Then, we constructed a class of pure states expressing the nonequilibrium steady state of mesoscopic systems which consist of a finite system interacting with multiple reservoirs on the basis of the scattering approach. Also, we have shown a thermodynamic lower-bound of the deviation from equilibrium in terms of the dissipation and the strength of external perturbation.

研究分野：統計力学

キーワード：非平衡 メゾ系 孤立量子系 純粋状態 熱平衡化 冷却原子気体

1. 研究開始当初の背景

平衡系の統計力学は多体系に関し正確な計算が可能であり、ミクロとマクロを結ぶ強力な理論である。

(1) 一方、あらゆるダイナミックな対象は非平衡状態にあり、特に冷却原子気体における熱平衡への緩和過程やメゾ系における輸送現象について、盛んに研究が行われている。近年、メゾ非平衡系において厳密に成立する幾つかの熱力学的関係式が初期状態がカノニカル分布であるという仮定の下で導かれた。これらは、熱平衡から遠く離れた非平衡状態において成立し、熱力学第二法則の拡張でもあり重要であると考えられる。

(2) しかし、初期カノニカル状態の仮定はミクロな立場からは強すぎる。この点について、孤立量子系における純粋状態が内包する熱的性質や物理量のクラスを限定することで平衡及び非平衡状態への緩和を特徴付ける弱収束の理論が発展してきた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、非平衡系における操作的な統計力学的理論の構築である。ここでいう操作とは、あらゆる熱力学的操作や量子測定、我々がアクセスできる物理量の集合への限定等を含む。具体的には、初期状態用意を考慮した非平衡系における厳密な熱力学的関係式の解明、孤立量子多体系における緩和ダイナミクスの解析、及び一つの量子純粋状態による分布の計算や大偏差解析の理論を確立することを目指した。

3. 研究の方法

研究計画は i) 非平衡状態における厳密な熱力学的関係式の解明、ii) 孤立量子多体系における緩和ダイナミクスの解析、iii) 量子純粋状態による大偏差の量子情報論的解析の3つのテーマからなる。

i)では、混合性の条件下でカレントが流れ続ける非平衡定常状態への緩和と特性関数を用いた非平衡状態の特徴付けを解析的アプローチに基づいて行った。ii)では、孤立量子系の代表的な幾つかのモデルについて、熱平衡化のダイナミクスを保存量の有無や典型的状態が内包している熱的な性質に留意した。iii)においては、一個の典型的純粋状態を用いて稀な現象に対応する大偏差領域の理論的及び数値的解析を行った。

4. 研究成果

(1)初期状態が熱平衡である孤立量子多体系に時間に依存する外場を印加し、非平衡過程を考える。このような系で重要な量の一つとして、初・終期時刻における2時点エネルギー測定に基づく仕事の分布関数が挙げられる。初期状態は、エネルギー一定のヒルベルト空間からランダムサンプリングした典型的な純粋状態で表せる。そこで、時間依存する外場を印加した量子スピン鎖において

仕事分布関数を一個の純粋状態で数値的に計算し、初期状態として熱平衡アンサンブルを用いた場合と定量的に比較した。その結果、純粋状態と熱平衡アンサンブルにおける分布関数の値は、システムサイズに指数関数的に依存する理論的な誤差の範囲で一致し、マクロ系では両者は等しいことが分かった(図1,2)。

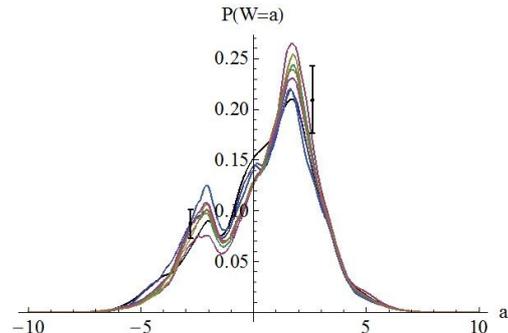


図 1 10 個の純粋状態における分布関数の計算 黒線はピーク値における理論誤差 振動磁場を印加した一次元量子スピン鎖の場合

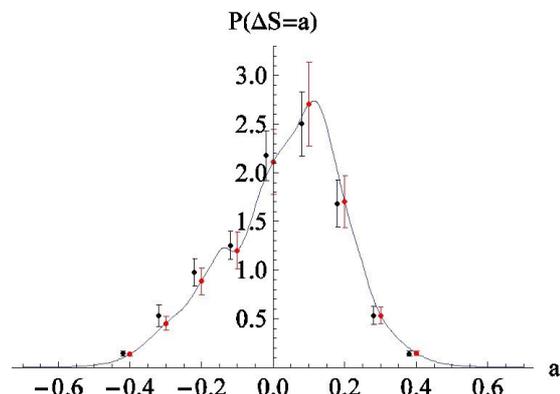


図 2 純粋状態における分布関数の計算における数値誤差と理論誤差 振動磁場を印加した一次元量子スピン鎖の場合

これは、次の2点を示唆しており重要と考えられる。まず、仕事分布のような非平衡過程で定義され、状態の詳細な情報を含むと考えられる量についても、典型的純粋状態における期待値は、ミクロカノニカル平均と一致する。また、一つの純粋状態だけから分布関数全体を大偏差領域まで含めて正確に再現できる。

(2) 温度や化学ポテンシャルの異なる複数の熱浴を有限系を介して接合すると、カレントが流れ続ける非平衡定常状態に緩和すると考えられる。

従来このような系は、無限に大きな熱浴を仮定し、非平衡開放系と捉えて初期局所平衡アンサンブルにより記述されてきた。実際、メゾ系の輸送現象の観点から非平衡定常状態におけるカレントの期待値について、局所平衡アンサンブルを用いた計算が良く知られている。また、非平衡定常状態への緩和特性も混合性の条件下で調べられてきた。一方、

全系はハミルトニアンに従う時間発展をするため、マクロな孤立量子系と考えることもできる。

そこで、非平衡定常状態を表す純粋状態を散乱理論に基づいて構成した。熱平衡の場合と異なり、初期純粋状態をどのヒルベルト空間から選ぶのかは非自明である。この点について、混合性の条件下では、熱力学極限を取ってから長時間極限を考えることで、各熱浴のエネルギー面と有限系の全ヒルベルト空間の直積を考えれば良いことを示した。

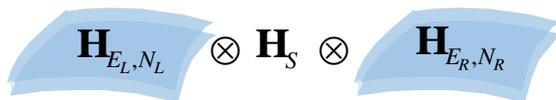


図3 初期ヒルベルト空間の概念図 2つの熱浴のエネルギー面と有限系の全ヒルベルト空間の直積

ここで、初期状態は直積状態に限る必要はなく全系にわたるエンタングルメントを持った一般的な状態であり、十分に広いクラスの非平衡定常純粋状態を扱うことができた。また、混合性を持つ可解模型の特性関数から、非平衡定常状態の構成は熱浴間に有限系がある場合とない場合で異なり、それぞれ非摂動的解析と摂動論に基づくことも示した。

(3) 孤立量子系における典型的純粋状態の理論では、エネルギー面上からランダムに選んだ状態の期待値について熱平衡からのずれの上限が与えられた。一方で、非平衡状態を特徴付けるには、外場による熱平衡からのずれの下限も重要である。この問題に取り組む第一歩として、孤立量子系に外場を印加した際の部分系のカノニカル分布からのずれの熱力学的な下限を解析的に導出した。

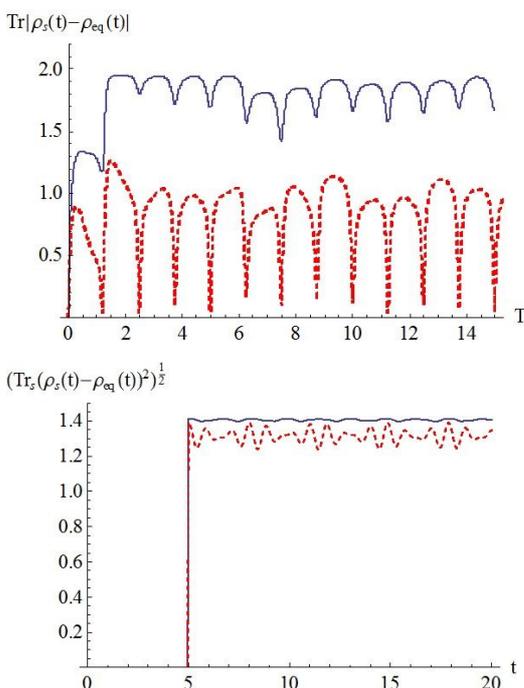


図4 熱平衡からのずれの時間依存性 (実線) と下限 (破線)

(a) 振動磁場で駆動した量子スピン鎖の場合 (b) 階段関数的クエンチにより駆動した場合

ここで、図4は数値計算による、振動磁場と局所的な階段関数的クエンチを印加した場合の熱平衡からのずれと下限の比較である。状態間距離として Hilbert-Schmidt ノルム及びその拡張のいずれを用いるかにより、下限は異なる。いずれの下限も、散逸仕事と外場を用いて非摂動的に表現でき、状態間の距離とは独立に測定できると考えられる。

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 5 件)

査読付

Takaaki Monnai, and Kazuya Yuasa, Typical pure nonequilibrium steady states and irreversibility for nonequilibrium transport, Phys. Rev. E 94 012146 (2016)

Takaaki Monnai, and Ayumu Sugita, Typical pure states and analysis of nonequilibrium processes of mesoscopic systems, J. Stat. Mech. 2016 054004 (2016)

doi.org/10.1088/1742-5468/2016/05/054004

Takaaki Monnai, Thermodynamic lower bounds of deviation from instantaneous canonical states, J. Phys. Soc. Jpn. 85 044003 (2016) doi/10.7566/JPSJ.85.044003

T. Monnai, and K. Yuasa, Typical pure nonequilibrium steady states, Europhysics Letters 107 40006 (2014) doi: 10.1209/0295-5075/107/40006

Takaaki Monnai, and Ayumu Sugita, Typical pure states and nonequilibrium processes in quantum many-body systems, J. Phys. Soc. Jpn. 83 094001 (2014) doi/abs/10.7566/JPSJ.83.094001

[学会発表](計 8 件)

諸留昇平・門内隆明・湯浅一哉
"非平衡定常状態における量子ゆらぎ定

理：可解モデルによる解析"
日本物理学会 2016 年秋季大会（金沢大
学）2016.9.15

Takaaki Monnai, Typical pure states and
nonequilibrium processes for quantum
many-body systems, STATPHYS 26, Lyon
(France), PALAIS DES CONGRES, July
18-19,21 2016

門内隆明・湯浅一哉
"ミクロカノニカル状態における KMS 条
件と熱力学極限"
日本物理学会 2015 年秋季大会（関西大
学）2015.9.17

Takaaki Monnai, Typicality, nonequilibrium,
and beyond,
New Frontiers in Non-equilibrium Physics,
Kyoto University
August 5 2015

Takaaki Monnai, Typical pure states and rare
events for quantum many-body systems,
7th International Conference on Unsolved
Problems on Noise, Barcelona (Spain), Casa
Convalescencia, July 16 2015

門内隆明・湯浅一哉、
"孤立量子系における典型的な非平衡定
常状態"
日本物理学会第 70 回年次大会（早稲田
大学）2015.3.24

Takaaki Monnai, Typical pure states and
nonequilibrium processes for a class of
quantum many-body systems,
Workshop on recent Developments In
Non-Equilibrium Physics "Luxembourg out
of Equilibrium", 13 January, 2015,
University of Luxembourg

門内隆明・Mauro Iazzi・湯浅一哉
"典型的純粋状態と量子測定による対称
性の破れ"
日本物理学会 2014 年秋季大会（中部大
学）2014.9.9

〔図書〕(計 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：

出願年月日：
国内外の別：

取得状況(計 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織
(1) 研究代表者
門内 隆明 (MONNAI Takaaki)

成蹊大学・理工学部・専任講師

研究者番号：30514476

(2) 研究分担者
()

研究者番号：

(3) 連携研究者
()

研究者番号：

(4) 研究協力者
()