

量子系の熱平衡化について

大阪大学理学部物理学科4年

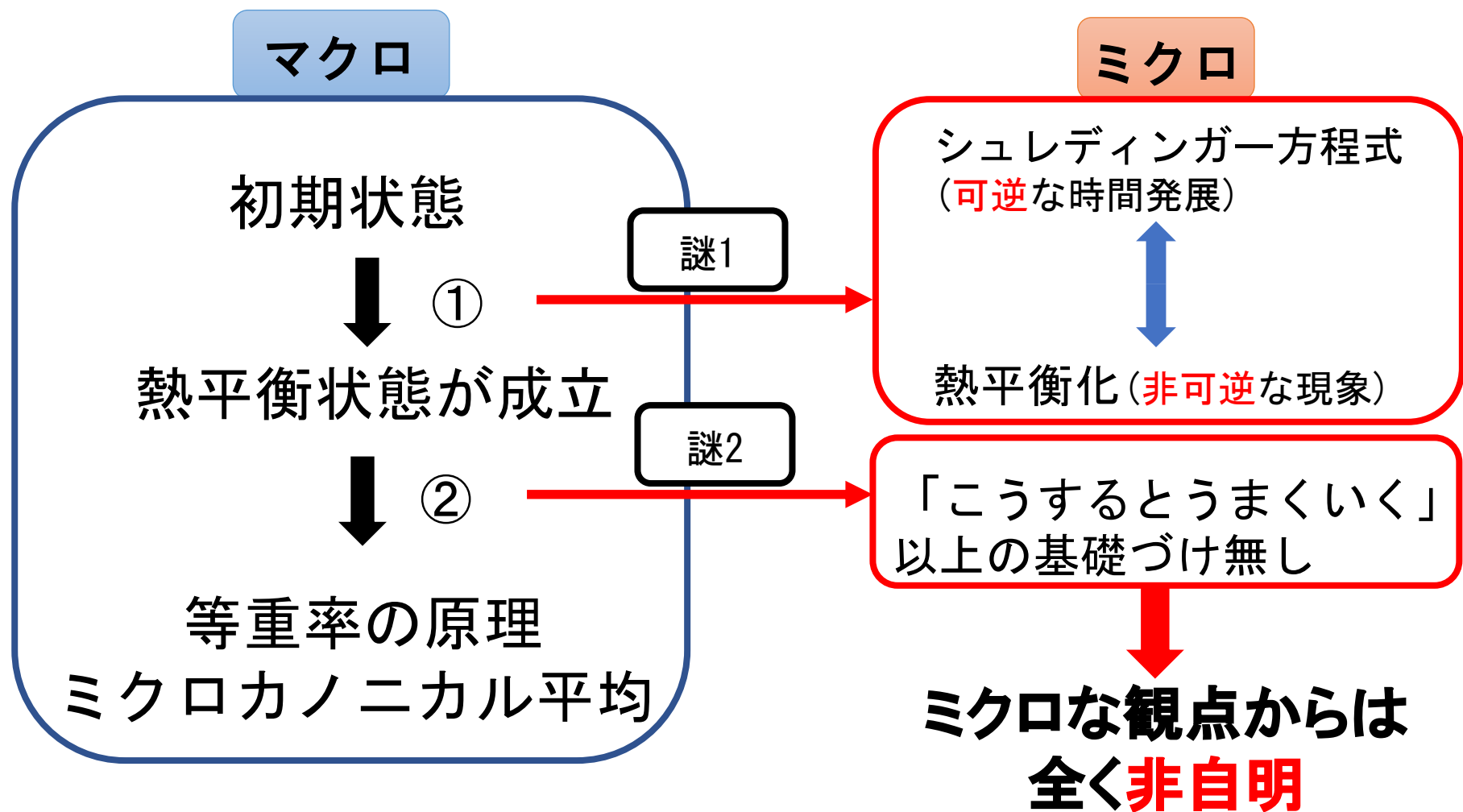
菊池研究室 野口遥佳

アウトライン

- イントロダクション
- レビュー：固有状態熱化仮説と熱平衡化
- 数値計算による検証
 - モデルの説明
 - 検証の手順
 - 結果
- まとめと展望

イントロダクション

「マクロ」 vs 「ミクロ」の問題



これらの仮定を量子力学から理解できるか?

手始めに…

孤立した量子系の熱平衡化

熱浴無し、外界との相互作用は厳密に0

- 実験的に実現可能(冷却原子系)
B. Paredes et al., Nature (2004)
- 理想的な状況で熱平衡化が起こるか?
熱浴や環境の果たす役割とは?

レビュー：固有状態熱化仮説と熱平衡化

固有状態熱化仮説 (Eigenstate Thermalization Hypothesis; ETH)

M. Srednicki, PRE (1994) M. Rigol et al., Nature (2008)

「全てのエネルギー固有状態は
そのエネルギーにおける熱平衡状態である」

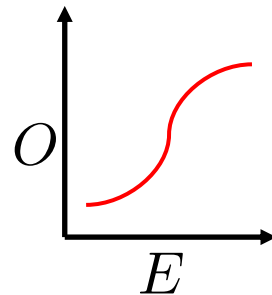
物理量の行列表示 $O_{i,j} := \langle E_i | O | E_j \rangle$ について熱力学極限で

1. (非対角ETH)

全てのペア $|E_i\rangle, |E_j\rangle$ について, $O_{i,j} \rightarrow 0$
($i \neq j$)

2. (対角ETH)

全ての $|E_i\rangle$ について, $O_{i,i} \rightarrow O(\frac{E_i}{V})$ という連続関数に収束



固有状態熱化仮説

(Eigenstate Thermalization hypothesis; ETH)

1 (非対角ETH) によって

物理量の揺らぎの
長時間平均が0に漸近



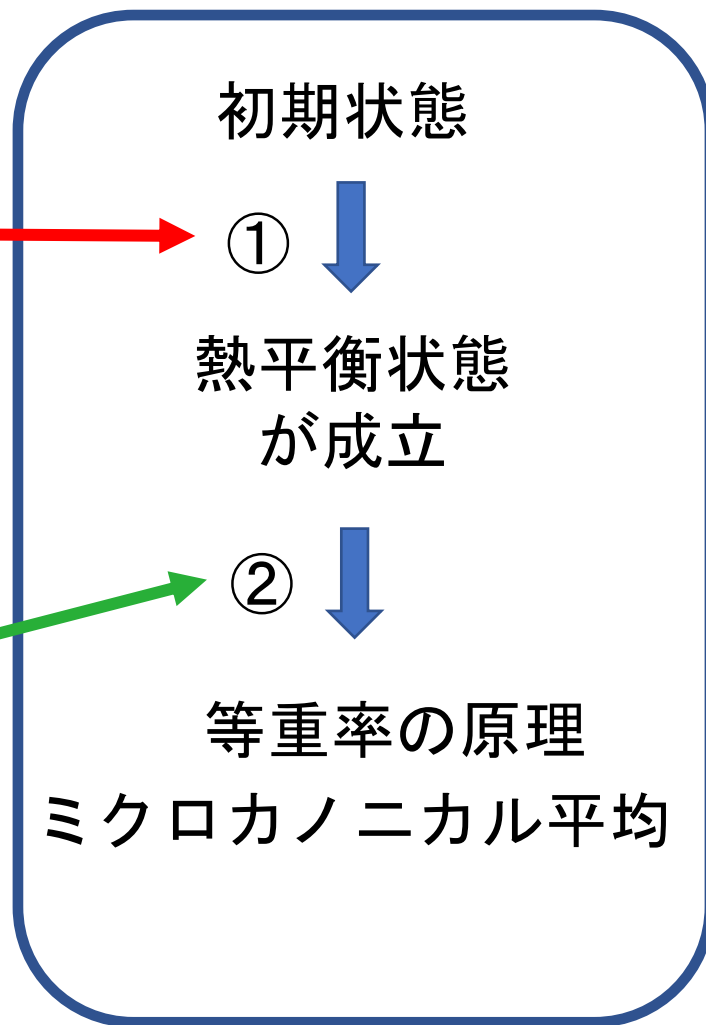
2 (対角ETH) によって

物理量の長時間平均が
ミクロカノニカル分布と一致



$$\overline{\langle \phi | O(t) | \phi \rangle} = \langle O \rangle_{micro}$$

が成立



準備

非縮退条件: $i \neq j$ ならば $E_i \neq E_j$

非共鳴条件: $i \neq k, j \neq l$ ならば $E_i - E_j \neq E_k - E_l$

$$\hbar = 1$$

初期状態 $|\phi(0)\rangle = \sum_i C_i |E_i\rangle \longrightarrow |\phi(t)\rangle = \sum_i C_i e^{-iE_i t} |E_i\rangle$

物理量の期待値

$$\langle O(t) \rangle := \langle \phi(t) | O | \phi(t) \rangle = \sum_{i,j} C_i C_j^* e^{-i(E_i - E_j)t} \langle E_j | O | E_i \rangle$$

長時間平均

$$\overline{\langle O \rangle} := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \langle O(t) \rangle = \sum_i |C_i|^2 \langle E_i | O | E_i \rangle$$

非対角ETH 物理量の平均二乗誤差

$$\sigma_O^2 := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt [\langle O(t) \rangle^2 - (\overline{\langle O \rangle})^2]$$

$$\langle O(t) \rangle = \sum_{i,j} C_i C_j^* e^{-i(E_i - E_j)t} O_{i,j}$$

$$\overline{\langle O \rangle} = \sum_i |C_i|^2 O_{i,i}$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \sum_{m,n,p,q} O_{mn} O_{pq} C_m^* C_n C_p^* C_q e^{-i(E_m - E_n + E_p - E_q)t} - (\overline{\langle O \rangle})^2$$

非対角ETH



$$= \sum_{m,n \neq m} |C_m|^2 |C_n|^2 |O_{mn}|^2 \leq \max |O_{mn}|^2 \sum_{m,n} |C_m|^2 |C_n|^2 = \max |O_{mn}|^2 \rightarrow 0$$

非対角ETH→物理量の時間に対する揺らぎも0になる

対角ETH

長時間平均はミクロカノニカルと一致するか?

$$\langle E \rangle = \langle \phi | H | \phi \rangle = \sum_i |C_i|^2 E_i$$

量子力学

$$\overline{\langle O(t) \rangle} = \sum_i |C_i|^2 O_{i,i} = O\left(\frac{\langle E \rangle}{V}\right) + O'\left(\frac{\langle E \rangle}{V}\right) \sum_i |C_i|^2 \left(\frac{E_i - \langle E \rangle}{V}\right) + \dots \simeq O\left(\frac{\langle E \rangle}{V}\right)$$

対角ETH

統計力学

$$\langle O(\langle E \rangle) \rangle_{mic} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\text{shell}} O_{i,i} = O\left(\frac{\langle E \rangle}{V}\right) + O'\left(\frac{\langle E \rangle}{V}\right) \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\text{shell}} \left(\frac{E_i - \langle E \rangle}{V}\right) + \dots \simeq O\left(\frac{\langle E \rangle}{V}\right)$$

対角ETH

対角ETH→

(長時間平均)=(ミクロカノニカル平均)

Shell...エネルギー幅(任意)

Ex)

$$\text{shell} = \{E_i | |\langle E \rangle - E_i| < \Delta E\}$$

対象となる演算子

M Deutsch 2018 Rep. Prog. Phys.

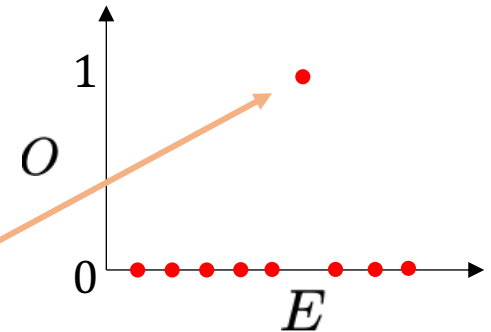
ETHは任意のエルミート演算子に対して成り立つわけではない



Ex) $O = |E_i\rangle\langle E_i|$ に対して

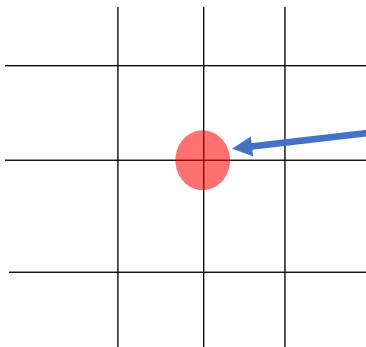
$$O_{i,j} = \delta_{i,j}$$

連続でない



局所的に作用する演算子(とその和)に対して成立?

Ex)



$\sigma_{i,j}^z \cdots$ 格子 (i,j) のみに作用

数値計算による検証

モチベーション

ETHと熱平衡化の関係→熱力学極限におけるもの



有限サイズのモデル



モデルを設定し、仮説を数値計算で検証

M. Rigol et al., Nature (2008)

モデルと物理量

一次元ハードコアボゾンモデル $J = V = J' = V' = 1$

$$H = \sum_{i=1}^L \left\{ \begin{array}{l} \boxed{-J(b_i^\dagger b_{i+1} + H.c.)} + \boxed{V(n_i - \frac{1}{2})(n_{i+1} - \frac{1}{2})} \\ \boxed{-J'(b_i^\dagger b_{i+2} + H.c.)} + \boxed{V'(n_i - \frac{1}{2})(n_{i+2} - \frac{1}{2})} \end{array} \right\}$$

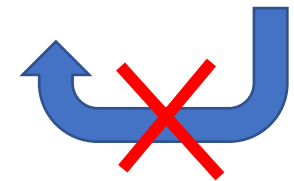
ホッピング

斥力と引力

$b_i, b_i^\dagger \cdots$ 生成消滅演算子 $n_i \cdots$ 数演算子



ハードコア条件 $(b_i)^2 = (b_i^\dagger)^2 = 0$



波数 k を持つ
粒子数 $n(k) = \frac{1}{L} \sum_{n,m} b_n^\dagger b_m e^{-ik(n-m)}$

$$\frac{N}{L} = \frac{1}{2}$$

検証の手順

1. ハミルトニアン の 厳密対角化

$E_i/L, \langle E_i | n | E_j \rangle$ を数値的に取得

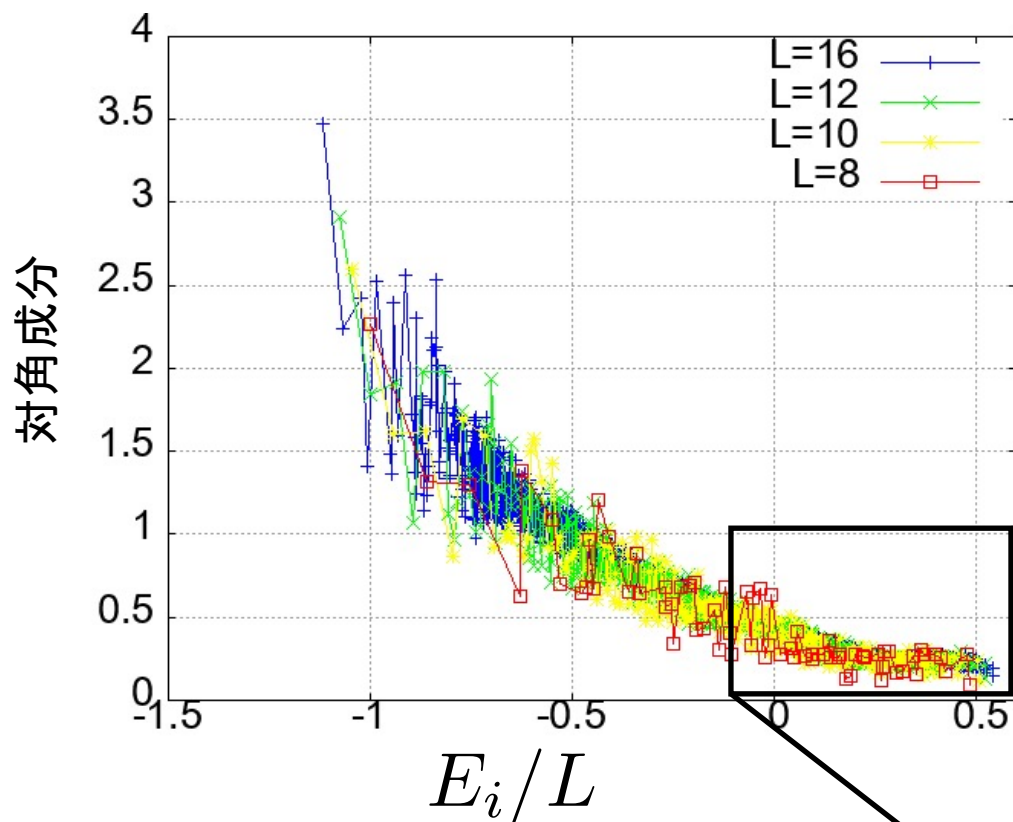
2. シュレディンガー方程式による物理量の数値解

$$\langle n(k=0) \rangle_t = \sum_{i,j} C_i C_j^* e^{-i(E_i - E_j)t} \langle E_i | n(k=0) | E_j \rangle$$

3. ミクロカノニカル平均と長時間平均の比較

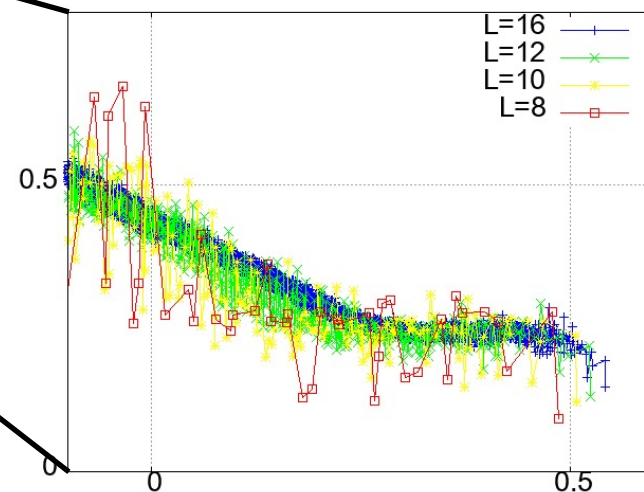
$$\langle n(k=0) \rangle_{mic} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\text{shell}} \langle E_i | n(k=0) | E_i \rangle, \quad \text{shell} = \{E_i \in (E - \Delta E, E + \Delta E)\}$$

結果…対角ETH

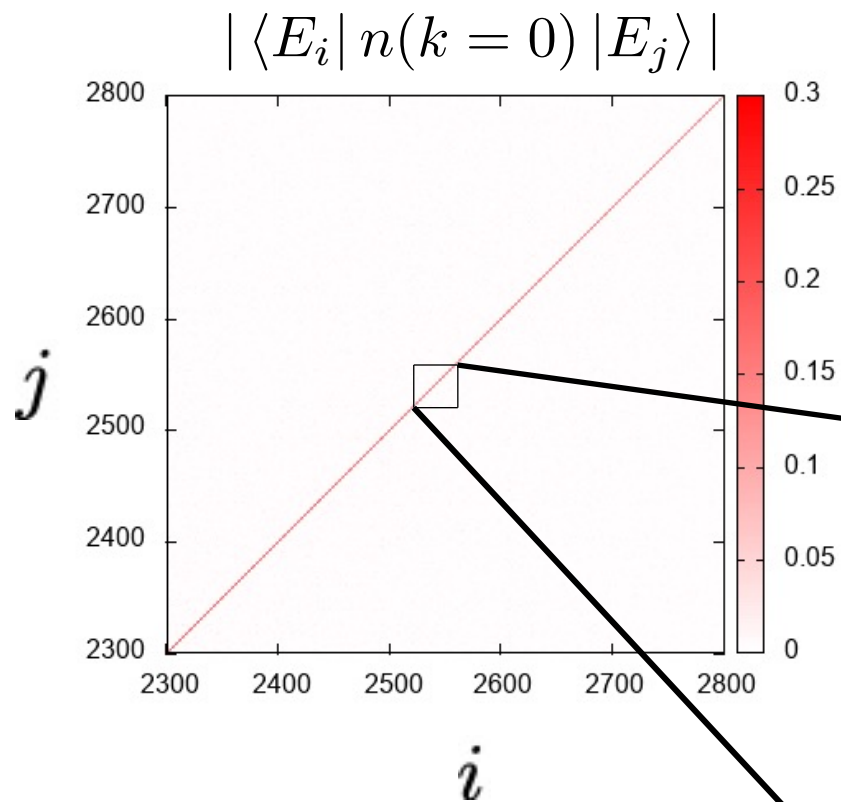


粒子数を増やすに従って
一つの曲線に収斂

→対角ETHが成立

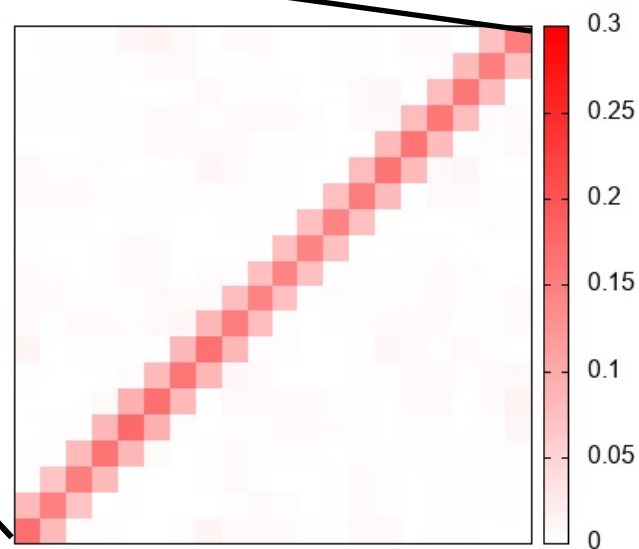


非対角ETH

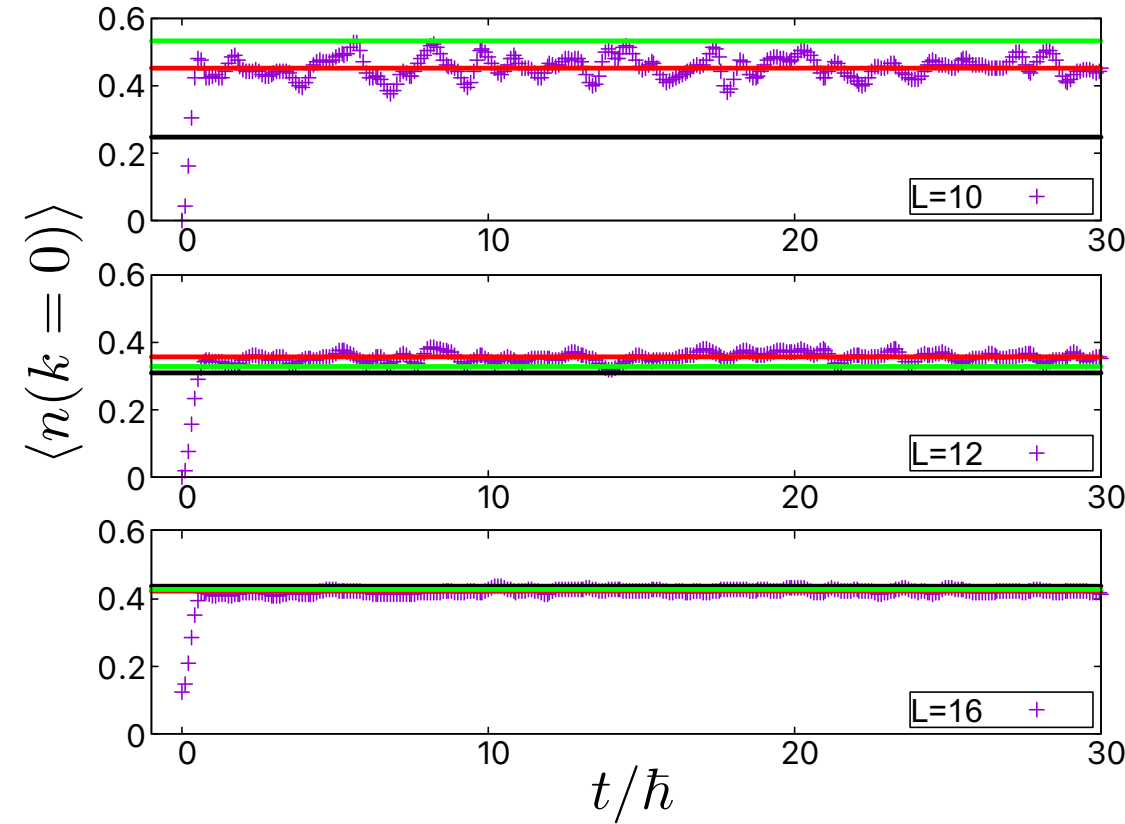


$L = 12$

非対角成分は0に近い
→非対角ETHが成立



長時間平均とミクロカノニカル平均との比較



初期状態

$n(k=0) |n_{k=0}\rangle = 0$
の固有状態

— ミクロカノニカル
平均
 $\Delta E/L = 0.001$
— 長時間平均
— $\langle E_i | n(k=0) | E_i \rangle$

システムサイズが 大きくになると…

- ミクロカノニカル平均=長時間平均 (対角ETH)
- 平均とのズレが減少 (非対角ETH)

観測事実…ほとんどの時間で

$$\langle O(t) \rangle \simeq \overline{\langle O \rangle} \simeq \langle O \rangle_{mic} \simeq \langle E_i | O | E_i \rangle$$

まとめと展望

まとめ

- ハードコアボゾンモデル
→ 対角ETH, 非対角ETH 共に成立
M. Rigol et al., Nature (2008)

システムサイズを大きくすると

- (長時間平均) $\simeq$ (ミクロカノニカル平均)
- 各時刻における平均とのズレ 減少

- 観測事実…ほとんどの時間で

$$\langle O(t) \rangle \simeq \overline{\langle O \rangle} \simeq \langle O \rangle_{mic} \simeq \langle E_i | O | E_i \rangle$$

展望…わかっていないこと

- 成立するモデル・・・可積分系、非可積分系との関係

Naoto Shiraishi and Takashi Mori Phys. Rev. Lett. (2017)

- 熱平衡化までの非平衡ダイナミクス

→タイムスケール…どのくらいで熱平衡化するか？

→機構…内部で何が起きているか？

Back Up

やりたいこと

ETHが成立するモデルとしないモデルでダイナミクスにどのような違いがあるのかを知りたい

…初期状態としてエネルギー固有状態をとり、パラメータを変化させたのちに時間発展をみる(パラメータクエンチ)

パラメータクエンチ

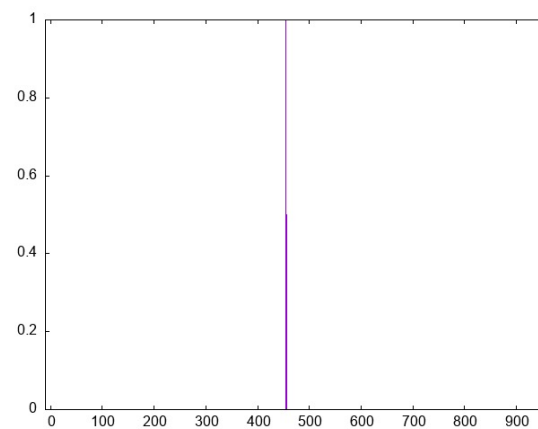
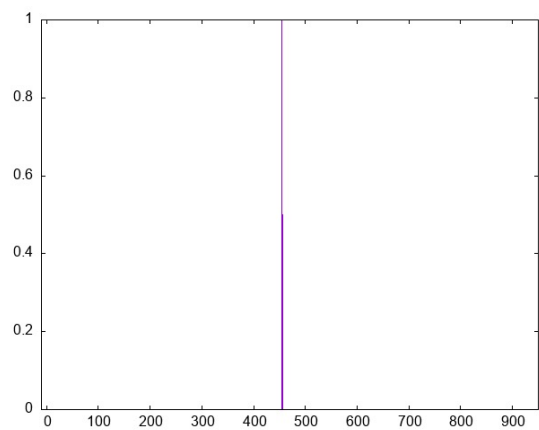
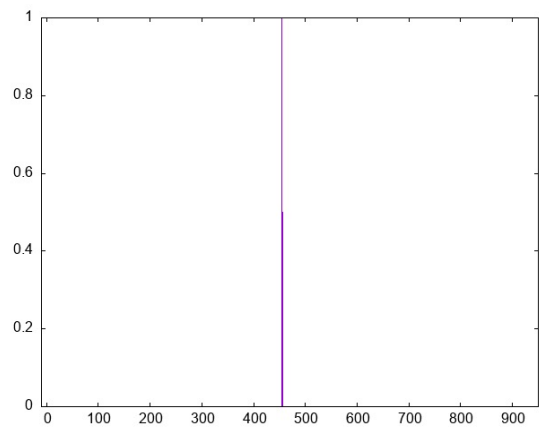
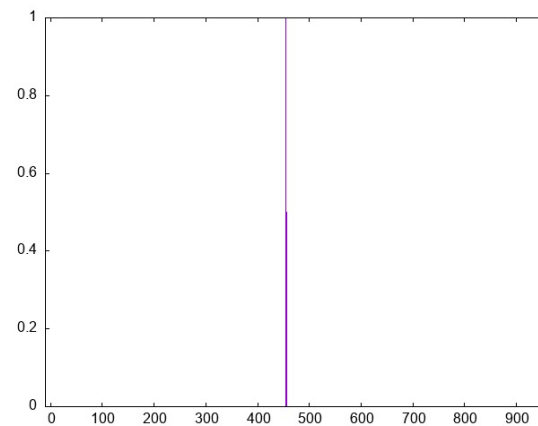
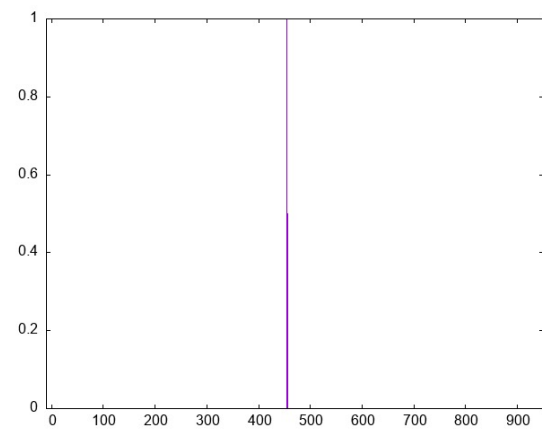
1. 初期状態… $H(V)$ エネルギー固有ベクトル $|E_i\rangle_V$

2. パラメータを $V \rightarrow V^*$ とし、時間発展を追跡

$$|E_i\rangle_V$$

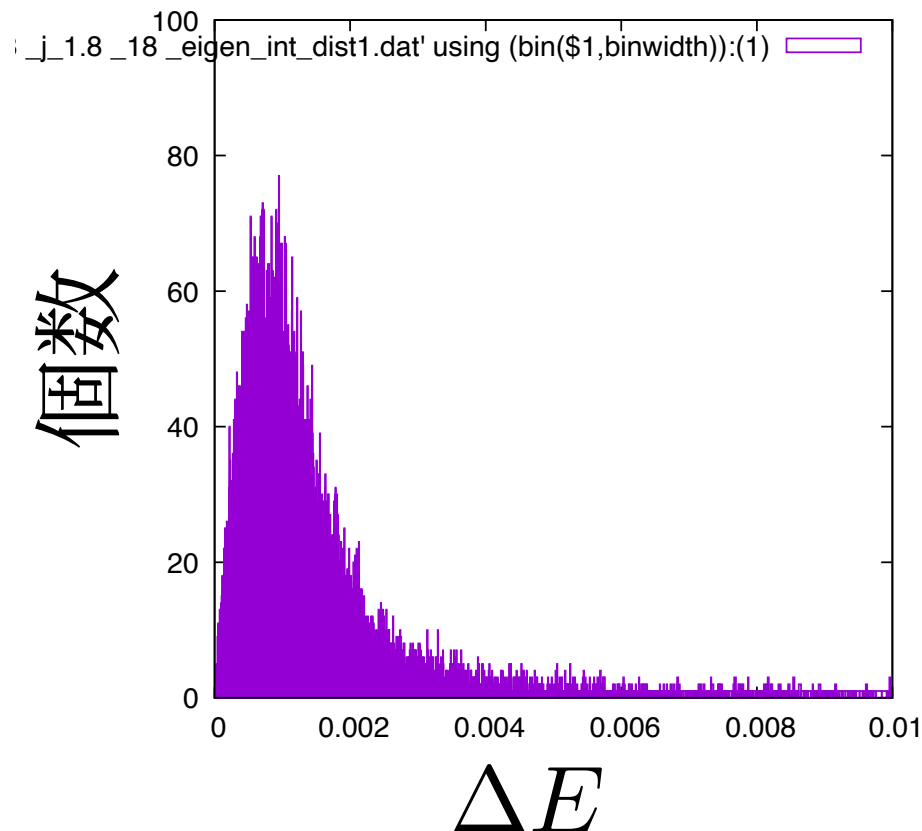
$$\begin{aligned} |\phi(t)\rangle &= \sum_j \langle E_j(V^*) | E_i(V) \rangle e^{-iE_j(V^*)t} |E_j(V^*)\rangle \\ &= \sum_k \underbrace{\left[\sum_j \langle E_k(V) | E_j(V^*) \rangle \langle E_j(V^*) | E_i(V) \rangle e^{-iE_j(V^*)t} \right]}_{t=0 \text{ で } \delta_{j,k} \text{ その後、 } j \neq k \text{ でも値を取る}} |E_k(V)\rangle \end{aligned}$$

結果



エネルギー準位間隔

非可積分系…Wigner-Dyson分布



$$\Delta E := E_{i+1} - E_i$$

消える?

$$\langle O(t) \rangle := \langle \phi(t) | O | \phi(t) \rangle = \sum_{i,j} C_i C_j^* \boxed{e^{-i(E_i - E_j)t}} \langle E_j | O | E_i \rangle$$

エネルギーシェル

エネルギーシェルには $\sum_i (\langle E \rangle - E_i) \rightarrow V^{-x} \quad x > 0$
を要求?

$$\text{shell} = \{E_i \mid |\langle E \rangle - E_i| < \Delta E\}$$

$$\text{shell} = \{E_i \mid \langle E \rangle - \Delta E < E_i < \langle E \rangle\}$$

$$\Delta E = \delta \cdot V \quad \delta = \mathcal{O}(1)$$

対角ETHの二次以降

二次以降まで評価するにはハミルトニアンに制限を加える

$$H = \sum_i h_i$$

$$\delta E := \sqrt{\langle \phi | H^2 | \phi \rangle - (\langle \phi | H | \phi \rangle)^2} = \sqrt{\sum_{i,j} \langle \phi | h_i h_j | \phi \rangle - \langle \phi | h_i | \phi \rangle \langle \phi | h_j | \phi \rangle}$$

h_i, h_j に長距離相関がないとすると $\mathcal{O}(\sqrt{V})$

非共鳴条件

非共鳴条件, 非縮退条件は程度問題?

$$\langle O(t) \rangle := \langle \phi(t) | O | \phi(t) \rangle = \sum_{i,j} C_i C_j^* e^{-i(E_i - E_j)t} \langle E_j | O | E_i \rangle$$

非共鳴条件が強く破れると…例えば数個の波の和になり、振動熱平衡化しない

$$= A e^{-i\Delta_1 t} + B e^{-i\Delta_2 t} + C e^{-i\Delta_3 t}$$

条件を破るペアが高々数個なら問題なし? 非縮退も同様?