

非平衡環境と接したマクロ量子系への 固有状態熱化仮説の応用

T. Shirai and T. Mori, arXiv: 1812.09713

東京大学 白井達彦

共同研究者

理研CEMS 森貴司

本発表の流れ

□ 孤立量子系での熱平衡化

- 固有状態熱化仮説 ← レビュー
Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH)

□ 開放量子系

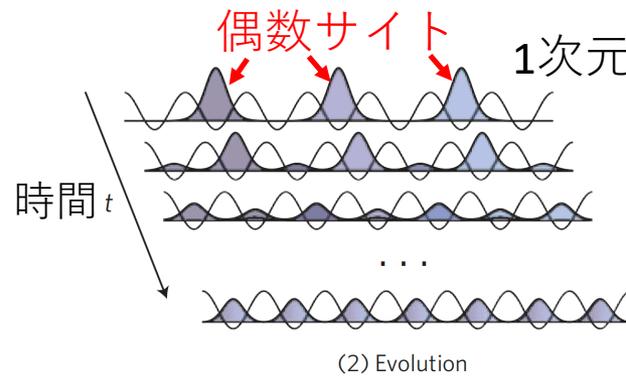
- 摂動論の妥当性 ← 本発表のメイン結果
- 摂動論とETHから導かれる結果について議論する

孤立量子系での熱平衡化

冷却原子系を始めとした実験技術の発展に伴い、孤立量子系の熱平衡化の問題が注目されている

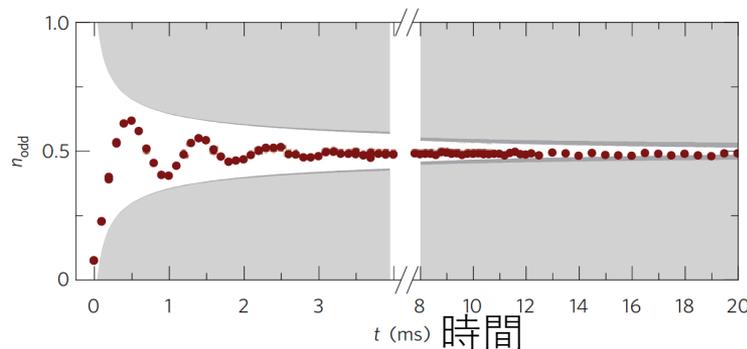
□ 冷却原子系で観測される熱平衡化

S. Trotzky, et al.,
Nature Phys. **8** 325 ('12).



ユニタリ時間発展

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$



← 熱平衡値

観測量: 奇数サイトの粒子数

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

固有状態熱化仮説は
孤立量子系で起こる熱平衡化を基礎付ける

Review: A. Polkovnikov, et al., Rev. Mod. Phys. **83** 863 (2011)
T. Mori, et al., J. Phys. B **51** 112001 (2018)

□ 固有状態熱化仮説 (ETH)

全てのエネルギー固有状態 $|\phi_i\rangle$ は局所的な物理量 \hat{O} を見る限りにおいて熱平衡状態と区別が付かない

$$\langle \phi_i | \hat{O} | \phi_i \rangle = \text{Tr} \hat{O} \rho^{\text{eq}}(\beta_i) \text{ (熱力学的極限)}$$

$$\left(\begin{array}{l} H|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle, \rho^{\text{eq}}(\beta) = \frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)} \text{ Gibbs状態} \\ \beta_i \text{ は } E_i \equiv \text{Tr} H \rho^{\text{eq}}(\beta_i) \text{ から決まる} \end{array} \right)$$

本研究の目的

- 固有状態熱化仮説 (ETH) は非可積分な量子系で一般に成り立つ性質として考えられている

いくつかの量子系で数値的な検証がある

M. Rigol, et al., Nature **452** 854 ('08).

ハードコア Bose-Hubbard模型

H. Kim, et al., PRE **90** 052105 ('14).

縦磁場・横磁場のあるイジング模型

T. Yoshizawa, et al., PRL **120** 200604 ('18).

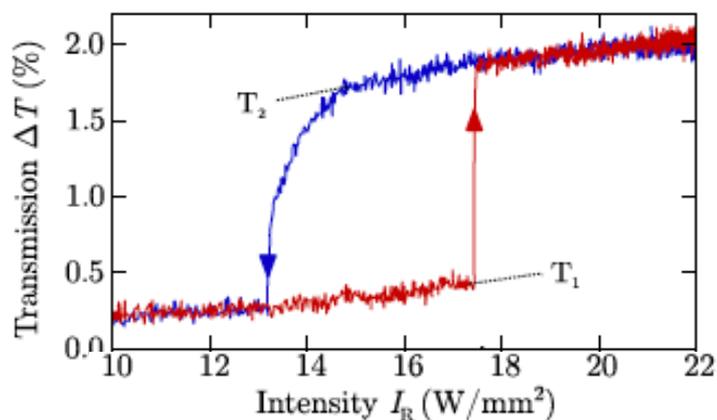
⋮

ETHの性質を開放系の問題に応用する

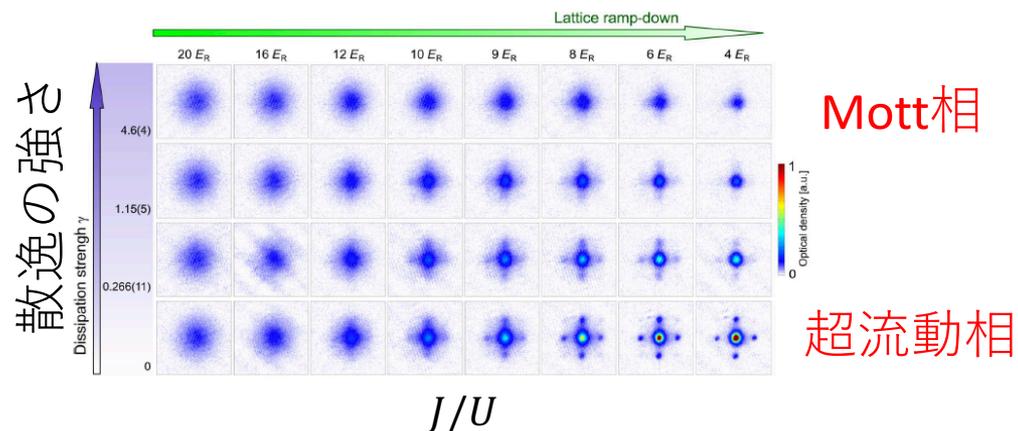
マクロ量子開放系

多体効果と散逸の効果で多彩な非平衡現象が現れる

□ レーザー駆動の相転移現象 □ Dissipation engineering



C. Carr, et al., PRL **111** 113901 ('13).



T. Tomita, et al.,
Science advances **3** e1701513 ('17).

非平衡環境における定常状態の制御・理解は
統計力学の重要な問題となっている

量子開放系の理論的枠組み

□ Lindblad方程式

H. P. Breuer and F. Petruccione,
The theory of open quantum systems (2002).

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + \gamma \sum_{\alpha} \left[L_{\alpha} \rho L_{\alpha}^{\dagger} - \frac{1}{2} \{ L_{\alpha}^{\dagger} L_{\alpha}, \rho \} \right] \equiv \mathcal{L} \rho$$

散逸項

$$\left(\begin{array}{l} H, \rho \text{ 注目系のハミルトニアン・密度行列} \\ L_{\alpha} \text{ Lindblad演算子 (Jump演算子)} \\ \gamma \text{ 散逸の強さ} \\ \mathcal{L} \text{ 時間発展演算子} \end{array} \right)$$

□ 定常状態 $\mathcal{L} \rho_s \equiv 0$

モデル: 散逸の弱いRydberg 原子系

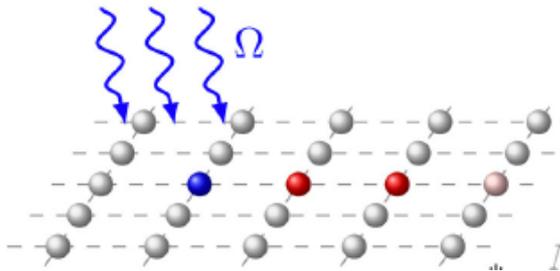
$$H = \sum_{i=1}^V [\Delta S_i^Z + \Omega S_i^x + g S_i^Z S_{i+1}^Z], \vec{S}_{V+i} = \vec{S}_i$$

$$\forall i, L_i = S_i^-, \gamma \ll 1 \left[\mathcal{L}\rho = -i[H, \rho] + \gamma \sum_i [L_i \rho L_i^\dagger - \frac{1}{2} \{L_i^\dagger L_i, \rho\}] \right]$$

□ レーザーの掛かったRydberg原子系で実現している

[実験] C. Carr, et al., PRL **111** 113901 ('13), F. Letscher et al., PRX **7** 021020 ('17).

[理論] T. E. Lee, et al., PRA **84**, 031402(R) ('11)



Figures taken from
F. Letscher et al., PRX **7** 021020 ('17)

$$\left(\begin{array}{l} |+\rangle_i \text{ Rydberg (励起) 状態} \\ |-\rangle_i \text{ 基底状態 } (S_i^z |\pm\rangle = \frac{1}{2} |\pm\rangle) \\ L_i = |-\rangle_i \langle +|_i \text{ 自発放射} \end{array} \right)$$

散逸の強さに関する摂動論

□ 定常状態の摂動展開 $\rho_s = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma^n \rho_s^{(n)}$ (γ 散逸の強さ)

□ $\{\rho_s^{(n)}\}$ に対する階層的な方程式

摂動展開の形を $\mathcal{L}\rho_s = 0$ に代入することで得られる

$$\left(\mathcal{L}\rho = -i[H, \rho] + \gamma \sum_i \left[L_i \rho L_i^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_i^\dagger L_i, \rho \} \right] \right)$$

$$O(\gamma^0) \quad [H, \rho_s^{(0)}] = 0,$$

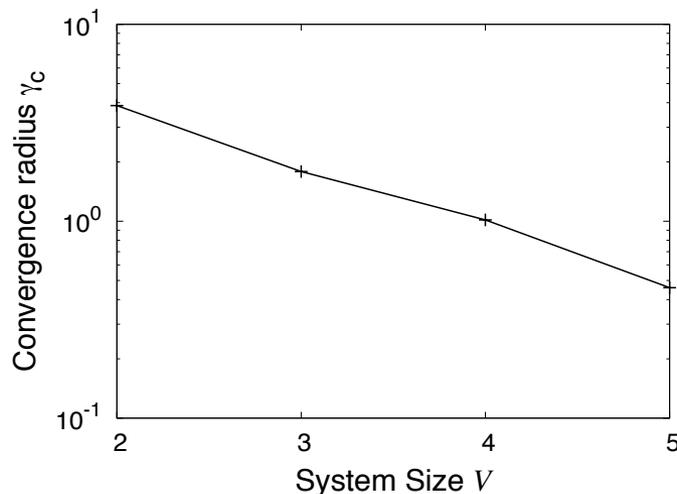
$$O(\gamma^n) \quad -i [H, \rho_s^{(n)}] + \sum_\alpha \left[L_\alpha \rho_s^{(n-1)} L_\alpha^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_\alpha^\dagger L_\alpha, \rho_s^{(n-1)} \} \right] = 0 \quad \text{for } n \geq 1$$

散逸が弱い時には、 $\rho_s^{(0)}$ が定常状態を良く記述すると期待される

摂動論が妥当であるかは非自明

摂動展開の収束半径 γ_c は
システムサイズとともに急速に0に近づく

HCF. Lemos and T. Prosen, PRE **95** 042137 (2017)



二つの極限が交換
するかが非自明

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \text{Tr} \hat{O} \rho_S \stackrel{?}{=} \lim_{V \rightarrow \infty} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \text{Tr} \hat{O} \rho_S = \lim_{V \rightarrow \infty} \text{Tr} \hat{O} \rho_S^{(0)} \left[\hat{O} \text{ 観測量} \right]$$

散逸の弱いマクロ系の定常状態

定常解 ρ_s と摂動解 $\rho_s^{(0)}$ との間の距離

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \text{Tr} \hat{O} \rho_s \stackrel{?}{=} \lim_{V \rightarrow \infty} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \text{Tr} \hat{O} \rho_s = \lim_{V \rightarrow \infty} \text{Tr} \hat{O} \rho_s^{(0)} \quad [\hat{O} \text{ 観測量}]$$

$$\square \text{ トレー스距離 } d_T \equiv \text{Tr} |\rho_s - \rho_s^{(0)}|$$

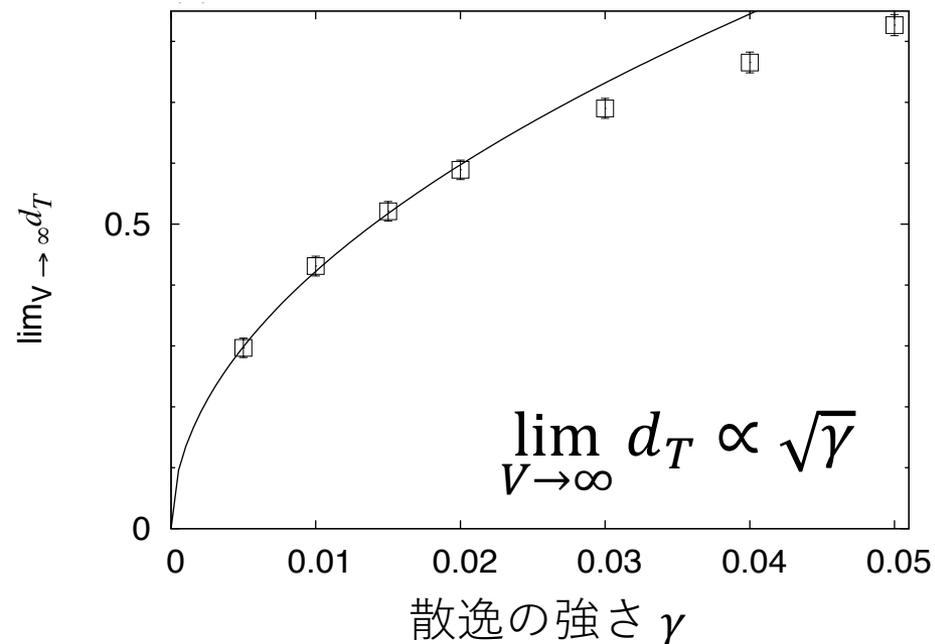
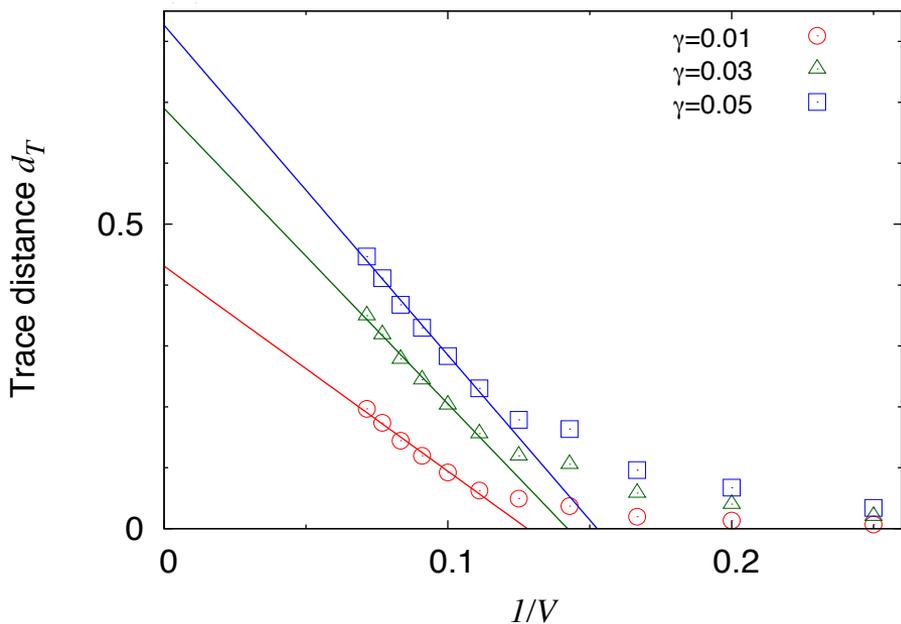
もし $\lim_{\gamma \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} d_T = 0$ ならば

熱力学的極限においても摂動論は正しく定常状態を記述する

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \text{Tr} \hat{O} \rho_s = \lim_{V \rightarrow \infty} \text{Tr} \hat{O} \rho_s^{(0)} \text{ for any } \hat{O}$$

本研究のメイン結果

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} d_T = 0$$



摂動解 $\rho_s^{(0)}$ は熱力学極限においても意味を持つ

摂動論と固有状態熱化仮説 (ETH)

□ 定常状態の摂動展開 $\rho_S = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma^n \rho_S^{(n)}$ (γ 散逸の強さ)

□ $\{\rho_S^{(n)}\}$ に対する階層的な方程式

摂動展開の形を $\mathcal{L}\rho_S = 0$ に代入することで得られる

$$(\mathcal{L}\rho = -i[H, \rho] + \gamma \sum_i [L_i \rho L_i^\dagger - \frac{1}{2}\{L_i^\dagger L_i, \rho\}])$$

$$O(\gamma^0) \quad [H, \rho_S^{(0)}] = 0,$$

$$O(\gamma^1) \quad -i[H, \rho_S^{(1)}] + \sum_\alpha [L_\alpha \rho_S^{(0)} L_\alpha^\dagger - \frac{1}{2}\{L_\alpha^\dagger L_\alpha, \rho_S^{(0)}\}] = 0$$

$\rho_S^{(0)}$ は $O(\gamma^0)$ の式と $O(\gamma^1)$ の式から決まる

摂動論と固有状態熱化仮説 (ETH)

$$\square O(\gamma^0) \quad [H, \rho_s^{(0)}] = 0$$

$\rho_s^{(0)}$ はエネルギー固有状態 $\{|\phi_i\rangle\}$ で対角化される

$$\rho_s^{(0)} = \sum_i P_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \left(\begin{array}{l} \text{確率} \\ P_i = \langle\phi_i|\rho_s^{(0)}|\phi_i\rangle \quad (H|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle) \end{array} \right)$$

$$\square O(\gamma^1) \quad -i[H, \rho_s^{(1)}] + \sum_\alpha [L_\alpha \rho_s^{(0)} L_\alpha^\dagger - \frac{1}{2}\{L_\alpha^\dagger L_\alpha, \rho_s^{(0)}\}] = 0$$

レート方程式 for $\{P_i\}$

$$\sum_j (W_{ij} P_j - W_{ji} P_i) = 0 \quad \left(\begin{array}{l} \text{遷移確率} \\ W_{ij} = \sum_\alpha |\langle\phi_i|L_\alpha|\phi_j\rangle|^2 \end{array} \right)$$

遷移確率 $\{W_{ij}\}$ に関する詳細釣り合いは破れている

摂動論と固有状態熱化仮説 (ETH)

$$\square O(\gamma^0) \quad [H, \rho_s^{(0)}] = 0$$

$\rho_s^{(0)}$ はエネルギー固有状態 $\{|\phi_i\rangle\}$ で対角化される

$$\rho_s^{(0)} = \sum_i P_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \left(\begin{array}{l} \text{確率} \\ P_i = \langle\phi_i|\rho_s^{(0)}|\phi_i\rangle \quad (H|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle) \end{array} \right)$$

$$\square O(\gamma^1) \quad -i[H, \rho_s^{(1)}] + \sum_\alpha [L_\alpha \rho_s^{(0)} L_\alpha^\dagger - \frac{1}{2}\{L_\alpha^\dagger L_\alpha, \rho_s^{(0)}\}] = 0$$

レート方程式 for $\{P_i\}$

$$\sum_j (W_{ij} P_j - W_{ji} P_i) = 0 \quad \left(\begin{array}{l} \text{遷移確率} \\ W_{ij} = \sum_\alpha |\langle\phi_i|L_\alpha|\phi_j\rangle|^2 \end{array} \right)$$

遷移確率 $\{W_{ij}\}$ に関する詳細釣合いは破れている

摂動論と固有状態熱化仮説 (ETH)

詳細釣り合いは破れているにも関わらず、
ETHによって摂動解 $\rho_S^{(0)}$ はGibbs状態と区別できない

□ $\rho_S^{(0)}$ はエネルギー固有状態 $\{|\phi_i\rangle\}$ で対角化される

$$O^{(0)} \equiv \text{Tr} \hat{O} \rho_S^{(0)} = \sum_i P_i \langle \phi_i | \hat{O} | \phi_i \rangle$$

[$|\phi_i\rangle$ エネルギー固有状態]

Gibbs状態による 散逸の弱いマクロ系の定常状態の記述

□ 散逸の弱いマクロ系の定常状態 = Gibbs状態

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \text{Tr} \hat{O} \rho_S = \lim_{V \rightarrow \infty} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \text{Tr} \hat{O} \rho_S = \lim_{V \rightarrow \infty} \text{Tr} \hat{O} \rho_S^{(0)} \approx O^{\text{eq}}(\beta)$$

↑

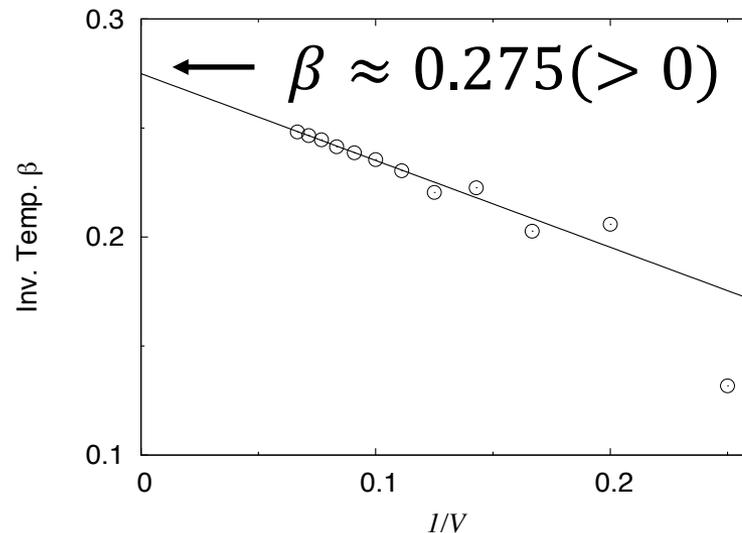
摂動論の妥当性

↑

ETH

□ 有効逆温度 β

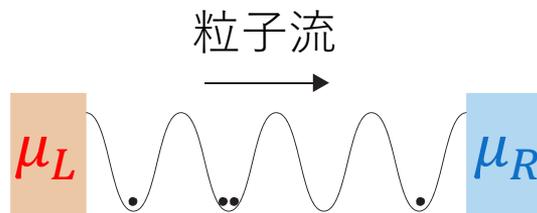
$$\text{Tr} H \rho_S^{(0)} \equiv \text{Tr} H \frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)}$$



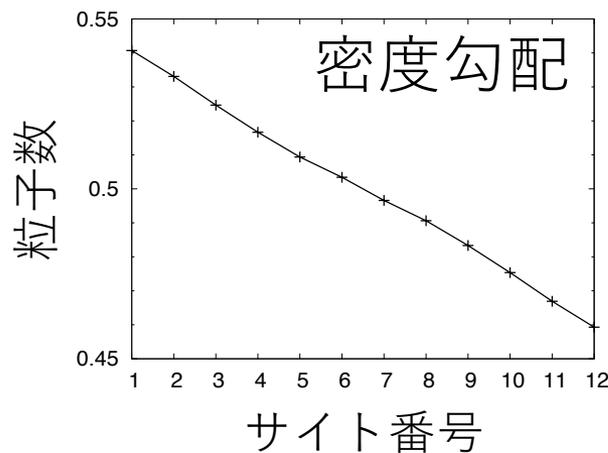
定常状態がギブス状態では記述できない場合

□ 輸送現象（バルクを保存流が流れる場合）

例：化学ポテンシャルの異なる散逸と接した系



μ_L, μ_R : 化学ポテンシャル
($\mu_L > \mu_R$)



勾配のある定常状態
はギブス状態とは相容れない

Bose-Hubbard系での結果

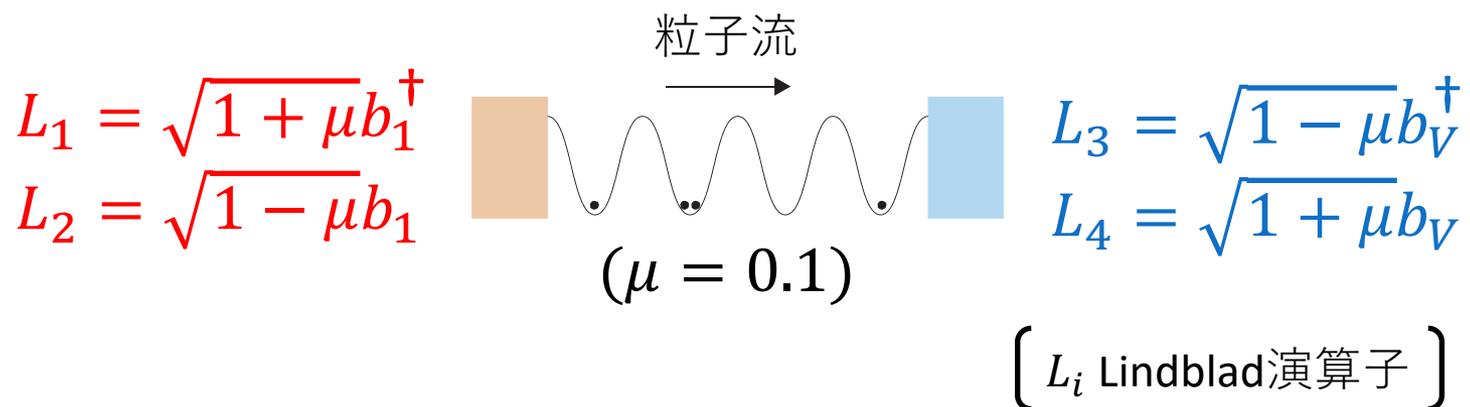
モデル: 境界で駆動されたBose-Hubbard模型

□ ハードコアBose-Hubbard模型

$$H = \sum_{i=1}^{V-1} \left[-t \left(b_i b_{i+1}^\dagger + \text{h.c.} \right) + U n_i n_{i+1} \right] \quad \text{最近接}$$

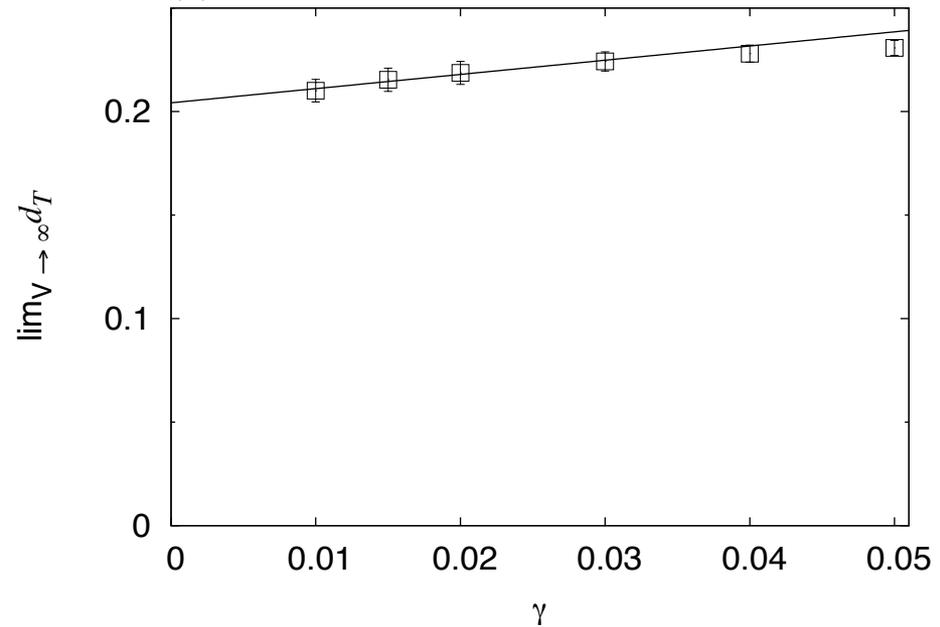
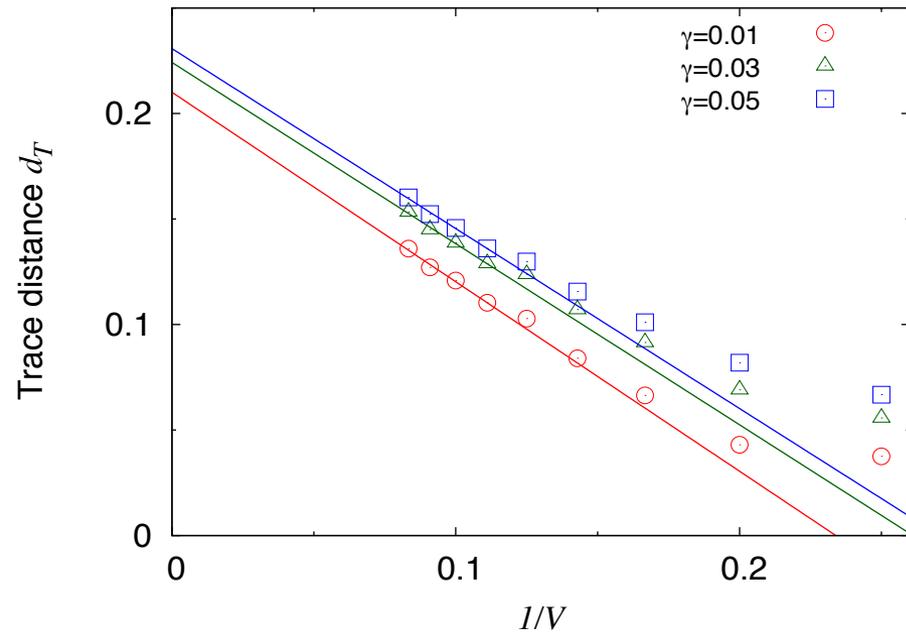
$$+ \sum_{i=1}^{V-2} \left[-t' \left(b_i b_{i+2}^\dagger + \text{h.c.} \right) + U' n_i n_{i+2} \right] \quad \text{次近接}$$

$$\left(\begin{array}{l} n_i = b_i^\dagger b_i \\ (t, U, t', U) = (0.9167, 4, 0.2449, 0.9045) \end{array} \right)$$



摂動論の破綻

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} d_T \neq 0 \quad \left(\text{トレース距離 } d_T \equiv \text{Tr} |\rho_S - \rho_S^{(0)}| \right)$$



摂動論は熱力学極限において破綻し、
摂動解 $\rho_S^{(0)}$ は定常状態 ρ_S とは全く異なる

まとめと今後の課題

- 非平衡環境と弱く接したマクロ量子系の定常状態がギブス状態で記述されることを示した
- 固有状態熱化仮説 (ETH)
- 散逸の強さに対する摂動論の熱力学的極限での妥当性

※ 輸送現象 (保存流がある場合) には適用できない

T. Shirai and T. Mori, arXiv: 1812.09713

□ 今後の課題

- ✓ 可積分系
- ✓ 有限の γ への拡張
- ✓ 摂動展開が漸近展開であることの数学的な証明